

T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**BİR KEZ İYONLAŞMIŞ MAGNEZYUM (Mg II) İÇİN
İZİNLİ VE YASAKLI GEÇİŞ PARAMETRELERİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Elif Gizem ÇETİN

Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK

Tez Danışmanı : Doç. Dr. Betül USTA

Şubat 2021

T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**BİR KEZ İYONLAŞMIŞ MAGNEZYUM (Mg II) İÇİN
İZİNLİ VE YASAKLI GEÇİŞ PARAMETRELERİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Elif Gizem ÇETİN

Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK

Bu tez 11.02.2021 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından oybirliği / oyçokluğu ile kabul edilmiştir.

**Prof. Dr.
Yusuf ATALAY
Jüri Başkanı**

**Doç. Dr.
Betül USTA
Üye**

**Doç. Dr.
Halil ARSLAN
Üye**

BEYAN

Tez içindeki tüm verilerin akademik kurallar çerçevesinde tarafımdan elde edildiğini, görsel ve yazılı tüm bilgi ve sonuçların akademik ve etik kurallara uygun şekilde sunulduğunu, kullanılan verilerde herhangi bir tahrifat yapılmadığını, başkalarının eserlerinden yararlanılması durumunda bilimsel normlara uygun olarak atıfta bulunulduğunu, tezde yer alan verilerin bu üniversite veya başka bir üniversitede herhangi bir tez çalışmasında kullanılmadığını beyan ederim.

Elif Gizem ÇETİN

23/02/2021

TEŞEKKÜR

Yüksek lisans eğitimim boyunca değerli bilgi ve deneyimlerinden yararlandığım, her konuda bilgi ve desteğini almaktan çekinmediğim, araştırmanın planlanmasından yazılmasına kadar tüm aşamalarında yardımlarını esirgemeyen, teşvik eden, aynı titizlikte beni yönlendiren değerli danışman hocam sayın Doç. Dr. Betül USTA'ya teşekkür ederim.

Ömrüm boyunca maddi ve manevi desteğini eksik etmeyen her anımda yanımda olduğunu her an hissettiren ve hissettiğim canım babam İsmail SAKA'ya, bu süreçte yardımlarını esirgemeyen annelerim Dilek SAKA ve Kunday ÇETİN'e, her zaman beni canlarından öte tutan kardeşlerim Bayram Kaya SAKA ve Esat Kaan SAKA'ya, canım yeğenlerim Beyza SAKA, Kaan Emre ÇETİN ve Demir Alp ÇETİN'e ve mutluluğumun sebebi yaşama sevincim çocuklarım Bahattin Agah ÇETİN ve Ela Defne ÇETİN'e yanımda oldukları için teşekkür ederim.

Tüm iş ve çalışma hayatım boyunca bilgi, birikimini ve desteklerini esirgemeyen her zaman yanımda olan sevgili eşim Ceyhun ÇETİN'e teşekkür ederim.

Ayrıca değerli arkadaşlarım Çiğdem GÜNEŞ ve Pervin SOYAK'a çalışma boyunca desteklerini esirgemedikleri için teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

TEŞEKKÜR	i
İÇİNDEKİLER	ii
SİMGELER VE KISALTMALAR LİSTESİ	iv
ŞEKİLLER LİSTESİ	v
TABLolar LİSTESİ	vi
ÖZET	vii
SUMMARY	viii
BÖLÜM 1.	
GİRİŞ	1
BÖLÜM 2.	
HESAPLAMA YÖNTEMİ	4
2.1. Çok Elektronlu Atomlar İçin Relativistik Olmayan Hamiltonyen....	4
2.2. Merkezi Alan Yaklaşıklığı ve Çarpım Dalga Fonsiyonları	5
2.3. Hartree-Fock Yaklaşıklığı	8
2.4. Çok Elektronlu Atomlarda Karşılıklı Etkileşme Kavramı.....	9
2.5. Çok Konfigürasyonlu Hartree-Fock (MCHF) Yöntemi	10
2.5.1. Relativistik etkiler.....	12
2.5.2. Enerji seviyelerinin Landé g-çarpanları.....	16
2.5.3. Enerji seviyeleri arasındaki geçişler.....	17
2.6. Relativistik Hartree-Fock (HFR) Yöntemi.....	22
2.6.1. Bir-elektron ve toplam bağlanma enerjileri.....	23
2.6.2. Relativistik düzeltmeler.....	26
2.6.3. Işımalı geçişler.....	28
2.6.3.1. Elektrik dipol geçişleri.....	28

2.6.3.2. Manyetik dipol ve elektrik kuadropol geişleri.....	31
--	----

BÖLÜM 3.

SONUÇLAR VE TARTIŞMA	33
----------------------------	----

3.1. Mg II'nin Bazı Seviyelerinin Enerjileri ve Landé g - çarpanları.....	36
---	----

3.2. Mg II'nin Elektrik Dipol Geişleri için Dalga Boyları, Salınıcı Şiddetleri ve Geiş Olasılıkları.....	41
---	----

3.3. Mg II'nin Elektrik Kuadropol Geişleri için Dalga Boyları, Salınıcı Şiddetleri ve Geiş Olasılıkları.....	43
---	----

KAYNAKLAR	86
-----------------	----

ÖZGEÇMİŞ	89
----------------	----

KISALTMALAR LİSTESİ

CI	: Konfigürasyon etkileşimi
CSFs	: Konfigürasyon hal fonksiyonları (Configuration State Functions)
D1	: Bir-cisim Darwin (One-Body Darwin)
D2	: İki-cisim Darwin (Two-Body Darwin)
DHF	: Dirac Hartree-Fock
EHF	: Genişletilmiş Hartree-Fock (Extended Hartree-Fock)
FS	: İnce yapı (Fine Structure)
H	: Hartree
HF	: Hartree-Fock
HFR	: Relativistik Hartree-Fock (Relativistic Hartree-Fock)
MC	: Kütle düzeltmesi (Mass Correction)
MCHF	: Çok konfigürasyonlu Hartree-Fock (Multiconfiguration Hartree-Fock)
MC-SCF	: Çok konfigürasyonlu-Öz-Uyum Alan (Multiconfiguration Self-Consistent Field)
MCHF+BP	: Çok konfigürasyonlu Hartree-Fock + Breit-Pauli
NHF	: Ortogonal olmayan Hartree-Fock (Nonorthogonal Hartree-Fock)
NIST	: National Institute of Standards and Technology's Web Site
NR	: Relativistik olmayan (Non-Relativistic)
OO	: Yörünge-yörünge (Orbit-Orbit)
RS	: Relativistik kayma (Relativistic Shift)
SCF	: Öz-uyum alan (Self-Consistent Field)
SO	: Çekirdek spin-yörünge (Spin-Orbit)
SOO	: Spin-diğer yörünge (Spin-Other Orbit)
SS	: Spin-spin
SSC	: Spin-spin temas (Spin-Spin Contact)

ŞEKİLLER LİSTESİ

Şekil 3.1	Bu çalışmadan elde edilen enerjilerin (MCHF+BP ve HFR hesaplamaları) NIST [7] ile karşılaştırılması.....	41
Şekil 3.2.	Bu çalışmadan elde edilen dalga boylarının (MCHF+BP ve HFR hesaplamaları) Fischer ve ark. [4] ile karşılaştırılması.....	43

TABLÖLAR LİSTESİ

Tablo 3.1.	Mg II'nin bazı uyarılmış seviyelerinin E enerjileri (cm^{-1}) ve Landé g -çarpanları.....	37
Tablo 3.2.	Mg II'nin elektrik dipol (E1) geçişleri için λ dalga boyları ($\text{\AA}$), f salımcı şiddetleri ve A_{ji} geçiş olasılıkları (s^{-1}).....	46
Tablo 3.3.	Mg II'nin elektrik kuadropol (E1) geçişleri için λ dalga boyları ($\text{\AA}$), $\log(gf)$ logaritmik ağırlıklı salımcı şiddetleri ve A_{ji} geçiş olasılıkları (s^{-1}).....	71

ÖZET

Anahtar kelimeler: MCHF yöntemi, HFR yöntemi, enerji seviyeleri, Landé g -çarpanları, izinli geçişler, yasaklı geçişler, dalga boyları, salınıcı şiddetleri, geçiş olasılıkları

Bu çalışmada, bir kez iyonlaşmış magnezyumun (Mg II, $Z = 12$) izinli ve yasaklı geçişleri çok konfigürasyonlu Hartree-Fock (Multiconfiguration Hartree-Fock–MCHF) ve relativistik Hartree-Fock (Relativistic Hartree-Fock–HFR) yöntemleri kullanılarak incelenmiştir. Mg II'nin ns ($n = 3-9$), nd ($n = 3-9$), ng ($n = 5-9$), ni ($n = 7-9$), np ($n = 3-9$), nf ($n = 4-9$) ve nh ($n = 6-9$) konfigürasyonlarının relativistik enerjileri ve Landé g -çarpanları ve bu seviyeler arasındaki elektrik dipol (E1) ve elektrik kuadrupol (E2) geçişleri için dalga boyları, salınıcı şiddetleri, geçiş olasılıkları gibi geçiş parametreleri hesaplanmıştır.

İlk bölümde; Mg II ile ilgili yapılmış mevcut çalışmalar, ikinci bölümde; çok konfigürasyonlu Hartree-Fock ve relativistik Hartree-Fock yöntemleri hakkında özet bilgiler verilmiştir. Mg II'nin izinli ve yasaklı geçişleri için MCHF atomik yapı paketi ve Cowan'ın program paketi kullanılarak elde edilen sonuçlar diğer çalışmalar ile karşılaştırmalı olarak son bölümde sunulmuştur. Elde edilen sonuçların mevcut diğer çalışmalarla karşılaştırıldığında uyumlu olduğu görülmüştür.

ALLOWED AND FORBIDDEN TRANSITION PARAMETERS FOR SINGLY IONIZED MAGNESIUM (Mg II)

SUMMARY

Keywords: MCHF method, HFR method, energy levels, Landé g -factors, allowed transitions, forbidden transitions, wavelengths, oscillator strengths, transition probabilities

In this study, the allowed and forbidden transitions of singly ionized magnesium (Mg II, $Z = 12$) were investigated using the multiconfiguration Hartree-Fock (Multiconfiguration Hartree-Fock–MCHF) and the relativistic Hartree-Fock (Relativistic Hartree-Fock–HFR) methods. The relativistic energies and the Landé g -factors for ns ($n = 4-9$), nd ($n = 3-9$), ng ($n = 5-9$), ni ($n = 7-9$), np ($n = 3-9$), nf ($n = 4-9$) and nh ($n = 6-9$) configurations and the transition parameters, such as wavelengths, oscillator strengths, and transition probabilities (or rates), for the electric dipole (E1) and electric quadrupole (E2) transitions between these levels were calculated for Mg II.

In the first chapter, previous works on Mg II were given. The second chapter deals with the multiconfiguration Hartree-Fock and the relativistic Hartree-Fock methods. The results obtained using the MCHF atomic structure package and the Cowan's program package were compared with other works in the last chapter. Good agreement was found between our results and other available studies.

BÖLÜM 1. GİRİŞ

Magnezyum periyodik cetvelin II A grubunda yer alan toprak alkali metallere bir kimyasal elementtir. Magnezyum yıldızların spektrumlarında ve metal-fakir yıldız atmosferlerinde bile kolay gözlemlenir. Magnezyumun metal-zayıf yıldızlardaki bollukları, Galaksi için kimyasal evrim modellerinin temel parametrelerinden biridir [1].

Magnezyum metal içinde hiçbir yabancı madde bulunmayan, saf haldeyken sert madde yapımında kullanılmayacak kadar yumuşaktır. Ancak alüminyum, çinko ve zirkonyum gibi başka metallerle karıştırılarak alaşım yapıldığında sertleşir. Magnezyum alaşımları havacılık, makine, silah ve hafif araç gereç endüstrilerinde kullanılır. Yüksek tepkime gücü nedeniyle titanyum, zirkonyum, uranyum ve berilyum gibi metallerin üretiminde indirgeyici element olarak yararlanılır. Bir başka önemli kullanım alanı ise demir ya da çelikten yapılmış toprak altı boru hatları tanklarının ve ısıtma kazanlarının korunmasıdır [2, 3].

Atom spektroskopisinde en önemli parametrelerden biri geçiş olasılığıdır. Geçiş olasılıkları için elde edilen değerler, ilgili geçişlerin seçimi, sıcaklık ve atom değişimi hakkında bazı önemli bilgiler içermektedir. Astrofizik, plazma fiziği, termonükleer füzyon ve lazerle izotop ayırma gibi birçok araştırma ve teknolojik alanların esas temeli atomik verilere dayanır ve bu nedenle pek çok araştırma grupları atomik spektroskopiyi kullanarak bu tür yararlı veriler elde etmeye çalışmıştır. Geçiş olasılıkları, salınıcı şiddetleri ve yarı ömürleri gibi atomik veriler astrofiziğin çeşitli alanlarında gereklidir [4].

Yasaklı ışımalı bozunmalar genellikle astronomik nesneler ve sıcak plazmada kontrollü füzyon reaksiyonları üretmek için toroidal bir cihaz olan Tokamak,

plazmalar arasındaki düşük yoğunluklu bölgelerde gözlenir. Bu yasaklı geçişler, plazma hakkında bilgi edinmek için kullanılabilir [5]. Deneysel yöntemlerin verimliliğinin artmasıyla zayıf veya yasak geçiş çizgilerinin gözlemlenmesi mümkün olmuş ve buda astrofizik için önemli bilgiler sağlamıştır [6].

Bir kez iyonlaşmış magnezyumun (Mg II, $Z = 12$) taban hal konfigürasyonu $[\text{Ne}]3s$ 'dir ve uyarılmış seviyeleri $[\text{Ne}]nl$ şeklindedir. Mg II için enerji seviyeleri ve elektrik dipol geçiş verileri ile ilgili yapılan çalışmalar NIST'in internet sitesinde bulunabilir [7]. Lundin ve arkadaşları Mg I – Mg IV'ün ışınlı-folyo (beam-foil) spektrumlarını araştırdılar [8]. Lindgard ve Nielsen, Mg II'in Rydberg serisinde geçiş olasılıklarına sayısal yaklaşım sundular [9]. Liljeby ve diğerleri ışınlı-folyo tekniğini kullanarak yarı ömür ölçümleri yaptılar [10]. Biémont ve Brault, Fourier dönüşüm spektroskopisi tekniğiyle nötr ve bir kez iyonlaşmış magnezyum spektrumunu gözlemladılar [11]. Mg II'nin yarı kararlı öz-uyarılmış dörtlü hallerinin çok konfigürasyonlu Hartree-Fock (multiconfiguration Hartree-Fock-MCHF) hesaplamaları Fischer tarafından sunuldu [12]. Brage ve Gaardsted Mg II'nin öz-uyarılmış konfigürasyonlarını deneysel olarak ışınlı-folyo spektroskopisiyle ve teorik olarak da MCHF yöntemiyle çalıştılar [13]. Safronova ve çalışma grubu relativistik çok cisim teorisini (relativistic many-body theory, MBPT) kullanılarak Mg II için enerji seviyeleri, aşırı ince yapı sabitleri ve geçiş olasılıklarını hesapladılar [14]. Theodosiou ve Federman, Mg II'deki en düşük np konfigürasyonları için rezonans çizgilerinin salıncı şiddetlerini bildirdiler [15]. Zheng ve diğerleri Mg II için geçiş olasılıklarını hesaplamak için en zayıf bağlı elektron potansiyel model teorisini (weakest bound electron potential model (WBEPMT)) kullanmıştır [16]. Dzuba ve Johnson, Mg II'deki relativistik enerji kaymalarının relativistik çiftlenmiş küme (the relativistic coupled cluster (CC)) hesaplamalarını sundular [17]. Fischer ve çalışma arkadaşları, Mg II'nin enerji seviyeleri, yarı ömürleri ve geçiş olasılıklarını hesapladılar [18]. Çelik ve çalışma grubu WBEPMT kullanarak Mg II için geniş bir çalışma sundular [4].

Elektrik kuadrupol (E2) etkileşimler, atomik spektrumlarda aşırı ince yapının birkaç önemli kaynağı arasındadır. Alkali benzeri atomik iyonların geçiş çizgileri,

astronomik gözlemlerde olduğu kadar lazer soğutmada da önemlidir [5]. Literatürde bir kez iyonlaşmış magnezyum için elektrik kuadrupol (E2) geçişleri ile ilgili şimdiye kadar yapılan çalışmalar azdır. Ali, donmuş-çekirdekli (frozen-core) Hartree-Fock yaklaşımını kullanarak içerisinde Mg II'inde olduğu sodyum ve potasyum dizilimindeki bazı geçişler için elektrik kuadrupol (E2) geçiş olasılıklarını hesapladı [19]. Aynı yöntem ile Mg II'nin bazı seviyelerinin elektrik kuadrupol geçişleri için teorik çoklu şiddetleri Tull ve diğerleri tarafından sunuldu [20]. Godefroid ve arkadaşları sodyum- ve magnezyum-benzeri geçişlerdeki yasaklı geçişleri rapor ettiler [21]. Charro ve Martín relativistik kuantum kusur yörünge (relativistic quantum defect orbital (RQDO)) yöntemini Mg II'nin yasaklı geçişlerine uyguladılar [22]. Majumder ve çalışma grubu relativistik çiftlenmiş küme teorisi ile bir kez iyonlaşmış magnezyumun E2 geçişleri için dalga boyları, çizgi şiddetleri ve geçiş olasılıklarını hesapladı [5]. Fischer ve arkadaşları, sodyum- ve argon-benzeri dizilimler için enerji seviyeleri, yarı ömürler ve bu seviyeler arasındaki yasaklı geçişleri çeşitli teorik yöntemlerle hesapladılar [18]. Çelik ve arkadaşları [6] ve Doğan [23] en zayıf bağlı elektron potansiyel model teorisini kullanarak hesapladıkları Mg II'nin elektrik kuadrupol geçiş olasılıklarını sundular. Ayrıca son yıllarda Karaçoban Usta ve çalışma grubu tarafından Mg II için elektrik dipol ve kuadrupol geçişleri için oldukça çeşitli hesaplamalar yapılmıştır [24–26].

Bu çalışmada, bir kez iyonlaşmış magnezyumun (Mg II) izinli ve yasaklı geçişleri konfigürasyon etkileşimi ve relativistik etkileri içeren hesaplama yöntemlerinden çok konfigürasyonlu Hartree-Fock (Multiconfiguration Hartree-Fock–MCHF) [27] ve relativistik Hartree-Fock (Relativistic Hartree-Fock–HFR) [28] yöntemleri kullanılarak incelendi. Mg II'nin ns ($n = 3-9$), nd ($n = 3-9$), ng ($n = 5-9$), ni ($n = 7-9$), np ($n = 3-9$), nf ($n = 4-9$), ve nh ($n = 6-9$) konfigürasyonlarına ait seviyelerinin relativistik enerjileri ve Landé g -çarpanları elde edildikten sonra zıt pariteye sahip seviyeler arasında elektrik dipol (E1) geçişleri ve aynı pariteye sahip seviyeler arasında elektrik kuadrupol (E2) geçişleri için dalga boyları, salınıcı şiddetleri, geçiş olasılıkları gibi geçiş parametreleri hesaplandı [24]. Hesaplamalar da MCHF atomik yapı paketi [29] ve Cowan'ın HFR program paketi [30] kullanıldı.

BÖLÜM 2. HESAPLAMA YÖNTEMLERİ

Bu çalışmada, konfigürasyon etkileşme yöntemini ve çok elektronlu sistemlerin Schrödinger denklemini Hartree-Fock yaklaşıklığı ile çözmeyi temel alan çok konfigürasyonlu Hartree-Fock (MCHF) [27] ve relativistik Hartree-Fock (HFR) [28] yöntemleri kullanıldı. Bu yöntemler farklı derecelerde relativistik katkılar içerirler ve her iki yöntemde literatürde yaygın olarak kullanılmaktadır.

2.1. Çok Elektronlu Atomlar için Relativistik Olmayan Hamiltonyen

N -elektronlu bir atomun kararlı hali $\psi(q_1, \dots, q_N)$ dalga fonksiyonunun uzay değişkenlerine göre sürekli olduğu ve

$$H\psi(q_1, \dots, q_N) = E\psi(q_1, \dots, q_N) \quad (2.1)$$

dalga denkleminin bir çözümü olduğu kabul edilir. Burada H atomik sistemin Hamiltonyen işlemcisidir. H işlemcisi belirli kuantum mekaniksel yapı kadar atomik sisteme de bağlıdır. Relativistik olmayan hesaplamalar için başlama noktası, Hamiltonyeni atomik birimlerde ($\hbar = c = e = 1$),

$$H = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} \right) + \sum_{i>j}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (2.2)$$

şeklinde verilen Schrödinger denklemdir. Burada Z atomun çekirdek yükü, r_i , i elektronunun çekirdekten uzaklığı ve r_{ij} , i ve j elektronları arasındaki uzaklıktır. Bu Hamiltonyen, relativistik etkilerin ihmal edilebilmesi ve atomik çekirdeğin sonsuz kütleli bir nokta yük gibi davranabilmesi kabullenimleri altında geçerlidir.

2.2. Merkezi Alan Yaklaşıklığı ve Çarpım Dalga Fonksiyonları

Schrödinger denklemi yalnızca bir elektronlu sistemler için tam olarak çözülebilir. Çok elektronlu sistemler için özfonksiyonların gerçek şekilleri bilinmemektedir. Bu nedenle çok elektronlu atomların veya iyonların incelenmesi için bazı genel yöntemler ile yaklaşık dalga fonksiyonları elde edilir. Hartree-Fock yaklaşıklığı da bu yöntemlerden biridir. Bu yöntem merkezi alan yaklaşıklığına ve değişim yöntemine dayanır.

Merkezi alan yaklaşıklığında tam Hamiltonyen, H_0 ayrıştırılabilir Hamiltonyenle yer değiştirir:

$$H \approx H_0 = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} + V(r_i) \right) \quad (2.3)$$

Burada, $V(r_i)$ merkezi potansiyeli, elektronlar arası Coulomb itme etkilerini yaklaşık olarak kapsar.

Yaklaşık Hamiltonyen H_0 , tam Hamiltonyen gibi L^2 , L_z , S^2 ve S_z toplam açısal momentum işlemcileri ile sıra değiştirir ve daima H_0 'ın özfonksiyonları, bu işlemcilerin özfonksiyonları olarak seçilebilir.

$$H_0 \psi_0(q_1, \dots, q_N) = E_0 \psi_0(q_1, \dots, q_N) \quad (2.4)$$

olduğundan ve H_0 ayrıştırılabildiği için özdeğer ve özfonksiyonlar sırasıyla

$$E_0 = \sum_{i=1}^N E_i \quad (2.5)$$

ve

$$\psi_0(q_1, \dots, q_N) = \prod_{i=1}^N \phi(\alpha_i; q_i) \quad (2.6)$$

olarak yazılır. Schrödinger denklemi de böylece

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + U(r) \right] \phi(\alpha; q) = E \phi(\alpha; q) \quad (2.7)$$

olur. Burada $U(r)$ potansiyeli

$$U(r) = -\left(\frac{Z}{r} \right) + V(r) \quad (2.8)$$

şeklinde verilir. $\phi(\alpha; q)$ ile gösterilen bireysel spin-yörüngeleri, bir-elektron denklemlerinin çözümleridir. $U(r)$ potansiyeli için E bir-elektron enerjisi, Coulomb halinin tersine n ve l 'ye bağlıdır.

H_0 Hamiltoniyeni elektron koordinatlarının yer değişiminden bağımsız olduğu için (2.6) çarpım fonksiyonundaki koordinatların yer değişimi ile bir özfonksiyon elde edilir. Yer değiştirmiş çarpım fonksiyonları birleştirilerek antisimetrik bir fonksiyon oluşturulur:

$$\Phi(q_1, \dots, q_N) = A \prod_{i=1}^N \phi(\alpha_i; q_i) \quad (2.9)$$

Bu fonksiyon

$$\Phi(q_1, \dots, q_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi(\alpha_1; q_1) & \phi(\alpha_1; q_2) & \dots & \phi(\alpha_1; q_N) \\ \phi(\alpha_2; q_1) & \phi(\alpha_2; q_2) & \dots & \phi(\alpha_2; q_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi(\alpha_N; q_1) & \phi(\alpha_N; q_2) & \dots & \phi(\alpha_N; q_N) \end{vmatrix} \quad (2.10)$$

ile verilen bir Slater determinantıdır. Slater determinantındaki her bir spin-yörüngemsinin paritesi $(-1)^l$, Slater determinantının paritesi ise

$$\pi = (-1)^{l_1} (-1)^{l_2} \dots (-1)^{l_N} = (-1)^{\sum l_i} \quad (2.11)$$

dir. Parite, açısal momentum kuantum sayılarının toplamının tek veya çift oluşuna göre tek veya çifttir.

Merkezi alan yaklaşıklığında, yaklaşık enerji seviyeleri ve tamamen relativistik olmayan Hamiltonyenin yaklaşık özfonksiyonları elde edilir. Genelde, Slater determinantları şeklindeki bu yaklaşık özfonksiyonlar, toplam açısal momentum işlemcilerinin gerçek özfonksiyonları değildirler. Aynı elektron konfigürasyonuna ait determinantların lineer birleşimi ile açısal momentum işlemcilerinin özfonksiyonları oluşturulur. Bu şekilde elde edilen fonksiyonlar, Slater determinantlarından daha iyi bir şekilde relativistik olmayan Hamiltonyenin gerçek özfonksiyonlarına yaklaşır. Bu özfonksiyonlar ‘konfigürasyon hal fonksiyonları (CSFs)’ olarak adlandırılır. Konfigürasyon hal fonksiyonları, $\Phi(\gamma LM_L SM_S)$ veya $|\gamma LM_L SM_S\rangle$ ile gösterilir.

Merkezi alan yaklaşıklığında, belirli bir konfigürasyona ait tüm Slater determinantları ve bu determinantlardan oluşturulan CSF’ler de aynı enerji seviyesine karşılık gelir. Elektron etkileşmesinin merkezi olmayan kısmı

$$- \sum_{i=1}^N V(r_i) + \sum_{i<j}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (2.12)$$

dikkate alındığında, toplam açısal momentum kuantum sayılarına bağlı olan farklı CSF’ler, farklı enerjilere karşılık gelecektir. Bu enerji seviyelerine ‘konfigürasyonun LS terimleri’ denir. Farklı CSF’lerin beklenen değerleri

$$E = \langle \Phi(\gamma LM_L SM_S) | H | \Phi(\gamma LM_L SM_S) \rangle \quad (2.13)$$

şeklinde verilir. Beklenen değer, M_L ve M_S 'den bağımsızdır ve her bir LS terimi $(2L+1)(2S+1)$ kat dejeneredir.

LS terimleri M_L ve M_S kuantum sayılarından bağımsız olduğundan dejenerlik çoğunlukla ihmal edilir. M_L ve M_S kuantum sayılarının önemli olmadığı durumlarda CSF'ler kısaca $\Phi(\gamma LS)$ veya $\Phi(\gamma^{2S+1}L)$ olarak gösterilir. Burada L

$$\begin{array}{ccccccccccc} L = & 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & \dots \\ & S & P & D & F & G & H & I & K & \dots \end{array} \quad (2.14)$$

şeklinde spektroskopik gösterimle verilir ve $2S+1$ terimin çokluğu olarak adlandırılır. Tek parite halleri için, bir 'o' üst indisi ve çift parite halleri için bir 'e' üst indisi, L 'yi gösteren sembolden sonra eklenir.

Çoğu durumlarda, CSF'ler tam Hamiltonyenin gerçek ψ özfonksiyonlarına iyi bir yaklaşıklıkla. Daha iyi yaklaşıklıklar CSF'lerin lineer birleşimi olarak elde edilir:

$$\Psi(\gamma LS) = \sum_{i=1}^M c_i \Phi(\gamma_i LS) \quad (2.15)$$

Gerçek özfonksiyon genellikle açılımdaki baskın CSF ile benzer şekilde kodlanır. Elde edilen yaklaşık özfonksiyonlar için bu çok konfigürasyon yaklaşıklıkındaki zorluk, uygun bir $U(r)$ merkezi alan potansiyelinin seçiminde yatar. Bu problem büyük ölçüde, spin-yörüngemsileri belirlemek yerine değişim (varyasyon) yöntemi uygulandığında ortadan kalkar.

2.3. Hartree-Fock (HF) Yaklaşıklığı

Merkezi alan yaklaşıklığına göre her bir elektron aynı $(-Z/r)+V(r)$ potansiyelinde hareket ettiği için $V(r)$ 'nin seçimi önemlidir. Hartree, her bir elektronun kendi potansiyeline sahip olduğunu ileri sürmüştür. Bir nl elektronu için potansiyel,

sistemdeki diğer elektronların küresel olarak ortalama yük dağılımından (veya elektron bulutundan) belirlenir. Bu kabullenimden Hartree, Hartree denklemleri olarak bilinen denklemleri türetti. Bunlar bir elektronun bir diğerine bağlı yük dağılımı şeklinde katlı radyal denklemlerdir. Hartree bu denklemlerin ‘öz uyumlu alan’ denilen tekrarlamalı bir yöntem ile çözülebileceğini önermiştir. Hartree dalga denkleminin çözümü, radyal fonksiyonların çarpımı olan küresel simetrik bir dalga fonksiyonu verir. Fock, bu denklemlerin Pauli dışarlama ilkesini sağlamadığına dikkat çekmiştir. Basit sistemleri ele alarak, bir tek determinant ve değişim prensibini uygulayarak, ‘değiş tokuş terimleri’ denilen antisimetriklikten ortaya çıkan bazı ek terimler hariç Hartree denklemlerine benzer denklemler türetmiştir.

HF yaklaşıklığı, çok elektronlu sistemler için yaklaşık toplam dalga fonksiyonlarını elde eden bir yöntemdir. Bu yöntem merkezi alan yaklaşıklığını ve değişim prensibini esas alır. Hartree-Fock yöntemi yaklaşık toplam dalga fonksiyonunu elde etmek amacı ile özetle üç kısımdan oluşur. Birinci olarak, dalga fonksiyonu için bir fonksiyon seçilir ve daha sonra, belirlenecek olan baz (temel) fonksiyonları cinsinden tanımlanır. Sonra bu fonksiyonlar cinsinden toplam enerji için bir ifade türetilir. Son olarak, değişim prensibi uygulanır ve türetilen denklemlerin çözümleri toplam enerjiyi kararlı yapan fonksiyonlardır.

2.4. Çok Elektronlu Atomlarda Elektronların Karşılıklı Etkileşmesi

Hartree-Fock yöntemi pek çok atomik özelliğin oldukça iyi tahminlerini verir. Gözlenen veriler relativistik etkiler, sonlu kütle ve çekirdek hacmi gibi diğer etkileri içerir ve hafif (küçük) atomlar için küçüktürler. Böyle sistemler için farklılığın en büyük kaynağı, Hartree-Fock çözümünün Schrödinger denkleminin gerçek çözümüne bir yaklaşıklık olması gerçeğinden ve elektronların hareketindeki karşılıklı etkileşme fikrinin ihmalinden ortaya çıkar. Hartree-Fock yönteminde, her bir elektronun diğer elektronlar tarafından belirlenen bir alanda bağımsız olarak hareket ettiği kabul edilir. Bu nedenle enerjideki hata ‘karşılıklı etkileşme (korelasyon) enerjisi’ olarak tanımlanır.

$$E^{Kor.} = E^{Gerçek} - E^{HF} \quad (2.16)$$

Burada $E^{Gerçek}$, sadece gözlenen enerji değildir. Bu, bir dizi kabullenimleri esas alan Schrödinger denkleminin gerçek çözümüdür ve E^{HF} Hartree-Fock enerjisidir.

2.5. Çok Konfigürasyonlu Hartree-Fock (MCHF) Yöntemi

Fischer tarafından geliştirilen bu yönteme [27] göre, değişim fonksiyonu yerine çok konfigürasyonlu açılım seçilirse, radyal fonksiyonlardaki değişimlere göre kararlılık şartı Hartree-Fock denklemlerine benzer diferansiyel denklemler takımına götürür. Diferansiyel denklemler, karışım (açılım) katsayılarının değişiminden ortaya çıkan matris özdeğer denkleminde eşlenir ve bu iki problem eş zamanlı olarak çözülür. Bu değişim fonksiyonunu temel alan yöntem, ‘çok konfigürasyonlu Hartree-Fock yöntemi (MCHF)’ olarak bilinir. Bu yaklaşıklıkta dalga fonksiyonu,

$$\Psi(\gamma LS) = \sum_{i=1}^M c_i \Phi(\gamma_i LS), \quad \sum_{i=1}^M c_i^2 = 1 \quad (2.17)$$

şeklinde ortonormal konfigürasyon hal fonksiyonlarının lineer birleşimi ile elde edilir. Burada $\Phi(\gamma_i LS)$, γ_i ve c_i sırasıyla LS çiftlenimli konfigürasyon hal fonksiyonu, konfigürasyonları ve konfigürasyonların karışım katsayılarını ifade etmektedir. Relativistik olmayan enerji ifadesi de

$$\mathcal{E}(\gamma LS) = \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M c_i c_j \langle \Phi(\gamma_i LS) | H | \Phi(\gamma_j LS) \rangle \quad (2.18)$$

olur. Burada $H_{ij} = \langle \Phi(\gamma_i LS) | H | \Phi(\gamma_j LS) \rangle$ ’dir. $H_{ij} = H_{ji}$ olduğu için i ve j üzerinden toplam köşegenlere ve etkileşim matrisi denilen $\mathbf{H} = H_{ij}$ matrisinin en alt kısmıyla sınırlandırılabilir. $\mathbf{c} = (c_1, c_2, \dots, c_M)^t$ açılım katsayıları bir sütun vektörü olduğunda sistemin enerjisi

$$E = \mathbf{c}^t \mathbf{H} \mathbf{c} \quad (2.19)$$

olur.

Hamiltonyenin matris elamanları

$$H_{ij} = \sum_{ab} w_{ab}^{ij} I(a, b) + \sum_{abcd; k} v_{abcd; k}^{ij} R^k(ab, cd) \quad (2.20)$$

şeklinde olur.

Değişim radyal denklemlerinin verildiği kabul edilirse sadece köklü problemin çözülmeye ihtiyacı vardır. Bu problem bir ‘konfigürasyon etkileşme (CI) problemi’ olarak isimlendirilir. Herhangi bir radyal fonksiyon iyileştirilirse hesaplama ‘çok konfigürasyonlu Hartree-Fock (MCHF) hesabı’ denir. Çözüm yine tekrarlamalı süreç olan çok konfigürasyonlu-öz-uyum alan (MC-SCF) yöntemidir. Bu yöntemle tahmini radyal fonksiyonlarla gerekli fonksiyonlar hesaplanır. Bu hesaplama sonucunda normalize edilen yeni radyal fonksiyonların tahminlerden daha iyi olması beklenir. Bu süreç, tahmin ile hesap sonucunda elde edilenler arasında ‘öz-uyum’ sağlanana kadar devam edilir. Hartree denklemleri için, Hartree ‘alanlar’ cinsinden süreci tanımladı ve öz-uyum alan (SCF) terimini türetti. Hartree-Fock denklemleri için de, bunun, her bir yörünge için radyal yükün önemli olduğu bilinir. Böylece bu süreç ana adımları ile şöyledir:

- a) Başlangıç radyal fonksiyonları belirtilir.
- b) Her bir radyal fonksiyon için doğrudan ve takas potansiyeli hesaplanır, köşegen enerji parametresi belirlenir ve diferansiyel denklem çözülür.
- c) Son radyal fonksiyonlar elde edilir ve bu elde edilenlerle yakınsama sağlanana kadar aynı işlemler tekrarlanır.

2.5.1. Relativistik etkiler

Relativistik etkileri dikkate almak için, Dirac denklemini çok elektronlu bir sistem için çözmek yerine, bir diğer yol Schrödinger denklemine en düşük mertebeden relativistik katkıları almaktır. Bu düzeltmeler α (ince yapı sabiti)'nın kuvvetlerine göre bir açılımla relativistik çok elektronlu denklemlerden türetilir. α^2 mertebesinde düzeltme için ortaya çıkan Hamiltonyen, 'Breit-Pauli Hamiltonyeni' olarak bilinir. Bu Hamiltonyen relativistik olmayan Hamiltonyene birinci mertebeden düzeltmedir.

Breit-Pauli Hamiltonyeni

$$H_{BP} = H_{NR} + H_{RS} + H_{FS} \quad (2.21)$$

şeklindedir. Burada, H_{NR} relativistik olmayan çok-elektron Hamiltonyeni, H_{RS} relativistik kayma ve H_{FS} ince yapı işlemcileridir. H_{MC} kütle düzeltmesi, H_{D1} ve H_{D2} sırası ile bir- ve iki-cisim Darwin terimleri, H_{OO} yörünge-yörünge terimi ve H_{SSC} spin-spin temas terimi olmak üzere H_{RS} ,

$$H_{RS} = H_{MC} + H_{D1} + H_{D2} + H_{OO} + H_{SSC} \quad (2.22)$$

şeklinde ifade edilir. Burada

$$H_{MC} = -\frac{\alpha^2}{8} \sum_{i=1}^N (\nabla_i^2)^\dagger \nabla_i^2, \quad (2.23)$$

$$H_{D1} = -\frac{\alpha^2 Z}{8} \sum_{i=1}^N (\nabla_i^2) \left(\frac{1}{r_i} \right), \quad (2.24)$$

$$H_{D2} = \frac{\alpha^2}{4} \sum_{i < j}^N (\nabla_i^2) \left(\frac{1}{r_{ij}} \right), \quad (2.25)$$

$$H_{OO} = -\frac{\alpha^2}{2} \sum_{i < j}^N \left[\frac{\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{p}_j}{r_{ij}} + \frac{\mathbf{r}_{ij} (\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{p}_i) \mathbf{p}_j}{r_{ij}^3} \right] \quad (2.26)$$

ve

$$H_{SS} = -\frac{8\pi\alpha^2}{3} \sum_{i < j}^N (\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j) \delta(\mathbf{r}_i \cdot \mathbf{r}_j) \quad (2.27)$$

dir. H_{FS} işlemcisi, spin ve yörünge açısal momentumları arasındaki etkileşimi tanımlar. İnce yapı işlemcisinin açık ifadesi ise

$$H_{FS} = H_{SO} + H_{SOO} + H_{SS} \quad (2.28)$$

dir. H_{SO} çekirdek spin-yörünge, H_{SOO} spin-diğer yörünge ve H_{SS} spin-spin etkileşme terimleridir:

$$H_{SO} = \frac{\alpha^2 Z}{2} \sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{r_i^3} \right) \mathbf{l}_i \cdot \mathbf{s}_i \quad (2.29)$$

$$H_{SOO} = -\frac{\alpha^2}{2} \sum_{i < j}^N \frac{\mathbf{r}_{ij} \times \mathbf{p}_i}{r_{ij}^3} (\mathbf{s}_i + 2\mathbf{s}_j) \quad (2.30)$$

$$H_{SS} = \alpha^2 \sum_{i < j}^N \frac{1}{r_{ij}^3} \left[\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - 3 \frac{(\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{s}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^2} \right] \quad (2.31)$$

Breit-Pauli Hamiltonyeni J toplam açısal momentum işlemcisi ile sıra değiştirir ve karşılık gelen dalga fonksiyonu ise J^2 ve J_z 'nin özfonksiyonları olmalıdır. Çok konfigürasyonlu yaklaşımında, Breit-Pauli dalga fonksiyonları,

$$\Psi(\gamma JM_J) = \sum_{i=1}^M c_i \Phi(\gamma_i L_i S_i JM_J) \quad (2.32)$$

şeklinde lineer birleşimler olarak verilir. Burada $\Phi(\gamma LSJM_J)$ 'ler LSJ çiftlenimli CSF'lerdir:

$$\Phi(\gamma LSJM_J) = \sum_{M_L M_S} \langle LM_L SM_S | LSJM_J \rangle \Phi(\gamma LM_L SM_S) \quad (2.33)$$

L ve S , farklı LS 'li konfigürasyon hal fonksiyonlarının iyi kuantum sayıları olmadığı için, farklı LS terimli CSF'lerin (2.32)'de alınması gereklidir. Bu durumda dalga fonksiyonu 'ara-çiftlenim' denilen çiftlenim modelinde verilir.

CSF'lerden oluşturulan radyal fonksiyonlar bir ön MCHF çalışmasından alınır ve yalnızca açılım katsayıları iyileştirilir. Bu da

$$\mathbf{Hc} = E\mathbf{c} \quad (2.34)$$

şeklindeki matris özdeğer problemine götürür. Burada $\mathbf{H}$,

$$H_{ij} = \langle \gamma_i L_i S_i JM_J | H_{BP} | \gamma_j L_j S_j JM_J \rangle \quad (2.35)$$

elemanlı matristir. Böylece Breit-Pauli Hamiltonyeninin özdeğer ve özfonksiyonlarını bulma problemi, LSJ çiftlenimli konfigürasyon hal fonksiyonları arasındaki matris elemanlarının bulunmasına ve her J değeri için matris köşegenleştirmesine indirgenir.

(2.32)'ye karşılık gelen enerji ifadesi

$$E = E_{NR} + E_{RS} + E_{FS} \quad (2.36)$$

olarak dikkate alınabilir. Burada E_{NR} ,

$$E_{NR} = \langle \gamma LSJM_J | H_{NR} | \gamma LSJM_J \rangle \quad (2.37)$$

şeklinde relativistik olmayan enerjidir, E_{RS} ve E_{FS} sırasıyla, relativistik kaymadan ve ince yapı katkılarından elde edilen relativistik enerji düzeltmeleridir.

Relativistik kayma işlemcilerinin tümü L ve S ile sıra değiştirirler ve böylece E_{RS} J 'den (ve M_J 'den) bağımsızdır ve E_{NR} relativistik olmayan LS terim enerjisinin kaymasını gösterir. İnce yapı enerjisi,

$$E_{FS} = E_{SO} + E_{SOO} + E_{SS} \quad (2.38)$$

olarak yazılabilir. Burada E_{SO} , E_{SOO} ve E_{SS} sırasıyla spin-yörünge, spin-diğer yörünge ve spin-spin etkileşme işlemcilerine karşılık gelen enerjilerdir. Bu enerjilerin hepsi J kuantum sayısına bağlıdır ve E_{NR} relativistik olmayan LS terim enerjisinin bir yarılmasını (ince yapı seviyeleri) verir. Açısal momentumların toplama kurallarını kullanarak L ve S 'nin verilen değerlerine karşılık gelen J 'nin mümkün değerleri

$$|L-S|, |L-S|+1, \dots, L+S-1, L+S \quad (2.39)$$

dir. Terimdeki seviyelerin sayısı $L \leq S$ ise $2S+1$ çokluğu ile; $L < S$ ise $2L+1$ çokluğu ile verilir.

Daha açık olarak ince yapı enerji seviyeleri

$$E_{SO} = \{J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)\} \zeta_{SO}(\gamma LS) \quad (2.40)$$

$$E_{soo} = \{J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)\} \zeta_{soo}(\gamma LS) \quad (2.41)$$

ve

$$E_{ss} = \left\{ \frac{3}{4} C(C+1) - L(L+1) - S(S+1) \right\} \zeta_{ss}(\gamma LS) \quad (2.42)$$

şeklinde verilir. Burada $C = J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)$ 'dir. $\zeta_{so}(\gamma LS)$, $\zeta_{soo}(\gamma LS)$ ve $\zeta_{ss}(\gamma LS)$ J 'den bağımsız çarpanlardır. Eğer spin-spin terimi ihmal edilirse J ve $J-1$ iki komşu ince yapı seviyeleri arasındaki enerji farkının

$$\Delta E_{FS} = 2\zeta J \quad (2.43)$$

olduğu görülür. Burada $\zeta = \zeta_{so}(\gamma LS) + \zeta_{soo}(\gamma LS)$ 'dir. Buna ince yapı için 'Landé aralık kuralı' denir. ζ pozitif ise ince yapı enerjisi J ile artar; bu durumda ince yapının normal olduğu, ζ negatif ise tersinir olduğu söylenir.

2.5.2. Enerji seviyelerinin Landé g -çarpanları

Zeeman etkisi, dış manyetik alan ile atomun manyetik momenti arasındaki

$$H_m = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} \quad (2.44)$$

şeklindeki etkileşimden ortaya çıkar. Burada $\boldsymbol{\mu}$ manyetik moment ve $\mathbf{B}$ manyetik alandır. Breit-Pauli yaklaşıklığında manyetik momente iki katkı vardır: Elektronların spin hareketinden ve yörünge hareketinden gelen katkılar. Bu iki katkı eklendiğinde

$$\boldsymbol{\mu} = -\mu_B(\mathbf{L} + g_s \mathbf{S}) \quad (2.45)$$

elde edilir. Burada μ_B Bohr manyetonu ve g_s kuantum elektrodinamik (QED) etkiler için düzeltilen elektron spininin g çarpanıdır ($g_s = 2,00232$). Dış alanın yönü z -yönünde seçildiğinde, etkileşim enerjisi

$$\begin{aligned}\Delta E(\gamma JM) &= \langle \Psi(\gamma JM) | H_m | \Psi(\gamma JM) \rangle \\ &= \mu_B B \sum_{j,k} c_j c_k \langle \Phi(\gamma_j L_j S_j JM) | L_z + g_s S_z | \Phi(\gamma_k L_k S_k JM) \rangle\end{aligned}\quad (2.46)$$

şeklindedir. CSF'ler arasındaki matris elemanları da

$$\langle \Phi(\gamma LSJM) | L_z + g_s S_z | \Phi(\gamma' L' S' JM) \rangle = \delta_{\gamma\gamma'} \delta_{LL'} \delta_{SS'} g_J(LS) M \quad (2.47)$$

olarak oluşturulabilir. Burada g_J , herhangi bir terim karışımı olmaksızın (yani saf LS çiftleniminde) Landé g -çarpanıdır:

$$g_J(LS) = 1 + (g_s - 1) \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \quad (2.48)$$

Bu ifade dikkate alındığında enerji yarılmaları

$$\Delta E(\gamma LS) = \mu_B B g_{\gamma J} M \quad (2.49)$$

olur.

2.5.3. Enerji seviyeleri arasındaki geçişler

İki hal arasındaki elektromanyetik geçiş, karşılık gelen fotonun açısai momentum ve paritesi ile belirlenir. Soğurulan veya yayımlanan foton k açısai momentumu ve $\pi = (-1)^k$ pariteye sahip ise geçişe ‘elektrik çok-kutuplu (Ek) geçiş’; foton $\pi = (-1)^{k+1}$ pariteli ise geçişe ‘manyetik çok-kutuplu (Mk) geçiş’ denir. Her birçok-

kutup, paritesi π ve rankı k olan $O_q^{\pi(k)}$ küresel tensör işlemcisi ile tanımlanır. Bu elektrik ve manyetik geçişler için,

$$E_q^{(k)} = \sum_{i=1}^N r^{(k)}(i) C_q^{(k)}(i) \quad (2.50)$$

$$M_q^{(k)} = \alpha \sqrt{k(2k-1)} \left[\frac{1}{k+1} MA_q^{(k)} + \frac{1}{2} g_s MB_q^{(k)} \right] \quad (2.51)$$

şeklindedir. Burada $MA_q^{(k)}$ ve $MB_q^{(k)}$

$$MA_q^{(k)} = \sum_{i=1}^N r^{(k-1)}(i) \left[\mathbf{C}^{(k-1)}(i) \times \mathbf{I}^{(1)}(i) \right]_q^{(k)} \quad (2.52)$$

$$MB_q^{(k)} = \sum_{i=1}^N r^{(k-1)}(i) \left[\mathbf{C}^{(k-1)}(i) \times \mathbf{s}^{(1)}(i) \right]_q^{(k)} \quad (2.53)$$

olarak tanımlanır.

Bir $\gamma' J' M'$ üst seviye ve bir γJM alt seviye arasındaki geçişi tanımlamak için geçiş integrali

$$I_q^{\pi k}(\gamma JM, \gamma' J' M') = \langle \gamma JM | O_q^{\pi(k)} | \gamma' J' M' \rangle \quad (2.54)$$

ve bileşen şiddeti $s^{\pi k}$

$$s^{\pi k}(\gamma JM, \gamma' J' M') = \sum_q \left| I_q^{\pi k}(\gamma JM, \gamma' J' M') \right|^2 \quad (2.55)$$

şeklinde tanımlanır.

Yalnızca M kuantum sayılarında katlı olan seviyelere sahip sistemlerle ilgilenildiğinde gözlenebilen nicelik böylece bu kuantum sayıları üzerinden bileşen şiddetlerinin toplamı olacağından çizgi şiddeti

$$S^{\pi k}(\gamma J, \gamma' J') = \sum_{M, M', q} \left| \langle \gamma J M | O_q^{\pi(k)} | \gamma' J' M' \rangle \right|^2 \quad (2.56)$$

dır. Wigner-Eckart teoreminden ve ortogonallik bağıntısından (M ve M' 'ler üzerinden toplam) çizgi şiddeti, indirgenmiş matris elemanlarının karesi olarak elde edilir:

$$S^{\pi k}(\gamma' J', \gamma J) = \left| \langle \gamma J \| \mathbf{O}^{\pi(k)} \| \gamma' J' \rangle \right|^2 \quad (2.57)$$

Bir üst seviyeden bir alt seviyeye yayınlama için geçiş olasılığı (veya hızı)

$$A^{\pi k}(\gamma' J', \gamma J) = 2C_k \left[\alpha(E_{\gamma' J'} - E_{\gamma J}) \right]^{2k+1} \frac{S^{\pi k}(\gamma' J', \gamma J)}{g_{J'}} \quad (2.58)$$

ile verilir. Burada $g_{J'}$,

$$g_{J'} = 2J' + 1 \quad (2.59)$$

şeklinde üst seviyenin istatistiksel ağırlığıdır ve

$$C_k = \frac{(2k+1)(k+1)}{k[(2k+1)!!]^2} \quad (2.60)$$

şeklinde tanımlıdır. Salıncı şiddeti soğurma ya da yayınlamadaki geçişi temsil eder. Düşük haldeki bir atom foton soğurarak üst seviyeye uyarıldığında soğurma salıncı şiddeti

$$f^{\pi k}(\gamma J, \gamma' J') = \frac{1}{\alpha} C_k \left[\alpha (E_{\gamma' J'} - E_{\gamma J}) \right]^{2k-1} \frac{S^{\pi k}(\gamma J, \gamma' J')}{g_J} \quad (2.61)$$

dir. Benzer bir ifade $\gamma' J'$ ile γJ yer değiştirmek suretiyle yayınlama şiddeti içinde uygulanır. Bu durumda sadece işaret değişikliği yeterli olacaktır. Esas olan (özel bir önemi olan), ağırlıklı salınıcı şiddeti veya gf değeridir. Ağırlıklı salınıcı şiddeti

$$gf^{\pi k}(\gamma J, \gamma' J') = g_J f^{\pi k}(\gamma J, \gamma' J') \quad (2.62)$$

ile verilir. Bu özellik iki seviye arasında çizgi şiddeti gibi (işareti hariç) tamamen simetriktr.

Bu elektrik ve manyetik çok-kutuplu geçişler için

$$A^{Ek} \propto \alpha^{2k+1} \quad (2.63)$$

$$A^{Mk} \propto \alpha^{2k+3} \quad (2.64)$$

dir. Genelde en büyük geçiş hızı elektrik dipol ($E1$) ışımasında olacaktır ($1/\alpha^2$ çarpım kadar). Bu nedenle, $E1$ geçişleri ‘izinli’, daha yüksek dereceden elektrik ve tüm manyetik geçişler ‘yasaklı’ olarak adlandırılır.

Kesin seçim kuralları tüm konfigürasyon hal fonksiyonları için uygulanır. Verilen bir atomik hal fonksiyonuna ait açılımdaki tüm konfigürasyon hal fonksiyonları aynı paritelidir. Böylece ilk kuralın geçiş işlemcilerinin paritesi ile ilişkili olacağı açıktır. Parite, elektrik işlemcileri için $(-1)^k$ ile manyetik işlemcileri için $(-1)^{k-1}$ ile belirlidir. π ve π' ile iki halin paritesi olmak üzere π'/π dikkate alınır

$$E^{(k)} : \frac{\pi'}{\pi} = (-1)^k \quad (2.65)$$

$$\mathbf{M}^{(k)} : \frac{\pi'}{\pi} = (-1)^{k-1} \quad (2.66)$$

olduğu görülür. Yani, $E1$ elektrik dipol işlemcisi farklı pariteli halleri, $M1$ manyetik dipol ve $E2$ elektrik kuadrupol ise aynı pariteli halleri dikkate alır. Verilen bir atomik hal fonksiyonuna ait bir açılımdaki tüm CSF'ler için ortak olan diğer bir özellik toplam J değeri içindir. Bunun için tüm çok-kutuplu işlemcileri

$$\Delta J = J - J' = 0, \pm 1, \dots, \pm k, \quad k \leq J + J' \quad (2.67)$$

seçim kuralını verir. Bu kural $J \neq J' \neq 0$ kısıtlamasını içerecek şekildedir.

CSF'lerin farklı açısal momentumları geçişe katılıp katılmamalarına göre aktif veya pasif olarak sınıflandırılabilirler. Pasif momentumlar, aktifler (2.67)'deki kurala göre oluşurken değişmeyecektir. Dikkate alınacak ilk kural, uzaysal ve spin uzayını temsil eden farklı işlemcilerin ranklarına bağlıdır. $\mathbf{E}^{(k)}$ işlemcisinin spinden bağımsız olduğu ve spinlerin daima elektrik çok-kutup geçişleri için pasif olduğu açıktır. Böylece spin için seçim kuralı,

$$\mathbf{E}^{(k)} : \Delta S = 0 \quad (2.68)$$

olarak verilebilir. Aynı seçim kuralı $\mathbf{MA}^{(k)}$ işlemcisi için geçerlidir. Ancak, $\mathbf{MB}^{(k)}$ işlemcisi bir-ranklı bir spin işlemcisi içerir ve bu nedenle manyetik çok-kutup geçişler 1 kadar farklı spinli CSF'lerle ilgili olabilir.

Uzay açısal momentumlarına ait seçim kurallarını elde etmek için, $\mathbf{E}^{(k)}$ işlemcisine karşılık gelen tensörün rankının k olduğuna dikkat edilir. Bu, seçim kuralını

$$\mathbf{E}^{(k)} : \Delta L = 0, \pm 1, \dots, \pm k, \quad k \leq L + L' \quad (2.69)$$

olarak tayin eder.

Manyetik geçişler için biraz daha dikkatli olmak gerekir. Çünkü uzay tensörü $\mathbf{MA}^{(k)}$ 'da k ranklı $\mathbf{MB}^{(k)}$ 'da $k-1$ ranklıdır. Bu durumda $\mathbf{MA}^{(k)}$ ve $\mathbf{MB}^{(k)}$ 'ya ait uzay ve spin momentumları için seçim kuralları;

$$\mathbf{MA}^{(k)} : \Delta S = 0, \Delta L = 0, \pm 1, \dots, \pm k, k \leq L + L' \quad (2.70)$$

$$\mathbf{MB}^{(k)} : \Delta S = 0, \pm 1, \Delta L = 0, \pm 1, \dots, \pm(k-1), k-1 \leq L + L' \quad (2.71)$$

şeklinde birleştirilebilir.

2.6. Relativistik Hartree-Fock (HFR) Yöntemi

Cowan tarafından geliştirilen bu yaklaşık yöntemde [28] Hamiltonyen

$$H = -\sum_i \nabla_i^2 - \sum_i \frac{2Z}{r_i} + \sum_{i>j} \frac{2}{r_{ij}} + \sum_i \xi_i(r_i)(L_i \cdot S_i) \quad (2.72)$$

dir. Burada uzaklıklar Bohr (a_0) ve tüm enerjiler Rydberg (Ry) birimlerindedir. $r_i = |\mathbf{r}_i|$ çekirdekten i . elektrona olan uzaklık, $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$, i . ve j . elektronlar arasındaki uzaklık ve $i > j$ üzerinden toplam elektronların tüm çiftleri üzerindedir. ξ_i , yörünge- ve spin-açıl momentum işlemcilerinin skaler çarpımının bir orantı sayısıdır:

$$\xi(r) = \frac{\alpha^2}{2} \frac{1}{r} \left(\frac{dV}{dr} \right) \quad (2.73)$$

Bu yaklaşıklıkta da amaç ilgilenilen her kararlı kuantum hali için atomun Ψ^k dalga fonksiyonunu ve E^k enerjisini elde etmek için

$$H\Psi^k = E^k\Psi^k \quad (2.74)$$

şeklindeki Schrödinger denklemini çözmektir. Ancak, dalga fonksiyonu $4N$ değişkenlidir (her bir elektron için üç uzay ve bir spin koordinatı) ve kuantum mekaniksel problem oldukça karmaşıktır. $N > 1$ için, gerçek çözümler tam bulunmayabilir ve bir tip ya da başka bir tip yaklaşımlar gereklidir. Genel bir yaklaşım, birkaç ayarlanabilen parametreler içeren dalga fonksiyonlarının birkaç şeklini kabul etmek ve bu parametrelerin değerlerini, mümkün en iyi fonksiyonu verecek şekilde değiştirmektir.

HFR yönteminde merkezi alan yaklaşıklığını esas alarak atomun dalga fonksiyonu antisimetrik bireysel dalga fonksiyonlarının çarpımından oluşur. Bu yöntemde bir konfigürasyonun ortalama enerjisi belirlenir. Sonra toplam ortalama enerji tüm konfigürasyonların ortalama enerjisinden elde edilir.

2.6.1. Bir-elektron ve toplam bağlanma enerjileri

(2.72)'deki Hamiltonyen işlemcisinin ilk iki ve sonuncu terimleri

$$\sum_{i=1}^N f_i \equiv \sum_i f(\mathbf{r}_i) \quad (2.75)$$

şeklindeki bir-elektron işlemcileridir. Bu işlemciler tüm N elektronların uzaysal ve spin koordinatlarında simetriktir ve son terim tüm $N(N-1)/2$ koordinat çiftleri için simetrik olan,

$$\sum_{i=2}^N \sum_{j=1}^{i-1} g_{ij} \equiv \sum_{i>j} \sum g(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \quad (2.76)$$

şeklindeki iki elektron işlemcisidir. Hamiltonyenin spin-yörünge terimi için köşegen matris elemanı

$$\langle \Psi | \sum_i \xi_i(\mathbf{l}_i, \mathbf{s}_i) | \Psi \rangle = \sum_i \langle n_i l_i m_{l_i} m_{s_i} | \xi(\mathbf{l}, \mathbf{s}) | n_i l_i m_{l_i} m_{s_i} \rangle \quad (2.77)$$

dir. s elektronları için spin-yörünge etkileşimi sıfır geldiğinden geriye kalan terimler için ortalama enerji

$$E_{ort.} = \sum_i \langle i | -\nabla^2 | i \rangle_{ort.} + \sum_i \langle i | -2Z / r_1 | i \rangle_{ort.} + \sum_{i>j} \left[\langle ij | 2 / r_{12} | ij \rangle_{ort.} - \langle ij | 2 / r_{12} | ji \rangle_{ort.} \right] \quad (2.78)$$

şeklinde yazılır. Böylece bir $n_i l_i$ yörüngesindeki bir elektronun konfigürasyon-ortalama bağlanma enerjisi

$$E^i = E_k^i + E_n^i + \sum_{j \neq i} E^{ij} \quad (2.79)$$

olur. Tüm N elektronun konfigürasyon-ortalama toplam bağlanma enerjisi

$$E_{ort.} = \frac{1}{2} \sum_i (E_k^i + E_n^i + E^i) \quad (2.80)$$

şeklinde yazılabilir. Yani, i yörüngesindeki bir elektronun ortalama bir-elektron bağlanma enerjisi, kinetik enerji, çekirdek ile etkileşimden oluşan potansiyel enerji ve atomdaki diğer $N-1$ elektronla etkileşim enerjisinin toplamıdır. Atomun ortalama bağlanma enerjisi, tüm kinetik enerji ve tüm elektron-çekirdek enerjileri toplamı ve tüm elektron çiftleri üzerinden toplanan elektron-elektron Coulomb etkileşimlerinden oluşur. Elektron-elektron Coulomb etkileşimlerinden dolayı konfigürasyon-ortalama toplam bağlanma enerjisinin $(E_{ort.}) \sum E^i$ 'ye eşit olmadığı açıktır. (2.79)'daki terimler kısaca, kinetik enerji için

$$E_k^i \equiv \langle i | -\nabla^2 | i \rangle_{ort.} = \int_0^\infty P_{n_i l_i}^*(r) \left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l_i(l_i+1)}{r^2} \right] P_{n_i l_i}(r) dr, \quad (2.81)$$

elektron-çekirdek etkileşme enerjisi için

$$E_n^i \equiv \langle i | -2Z/r | i \rangle = \int_0^\infty (-2Z/r) |P_i(r)|^2 dr \quad (2.82)$$

ve elektron-elektron Coulomb etkileşim enerjisi, özdeş olmayan elektronlar için

$$E^{ij} = F^0(ij) - \frac{1}{2} \sum_k \begin{pmatrix} l_i & k & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 G^k(ij) \quad (2.83)$$

ve özdeş elektronlar için

$$E^{ii} = F^0(ii) - \frac{(2l_i + 1)}{(4l_i + 1)} \sum_{k>0} \begin{pmatrix} l_i & k & l_i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 F^k(ii) \quad (2.84)$$

dür. Burada F^k ve G^k Slater integralleri, aşağıdaki şekilde tanımlanan daha genel R^k integralinin özel durumlarıdır:

$$R^k(\alpha, \beta; \alpha', \beta') = \int_0^\infty \int_0^\infty P(\alpha; r) P(\alpha'; r) U^k(r, s) P(\beta; s) P(\beta'; s) dr ds \quad (2.85)$$

Burada

$$U^k(r, s) = \frac{s^k}{r^{k+1}}, \quad r \geq s$$

$$= \frac{r^k}{s^{k+1}}, \quad r < s \quad (2.86)$$

şeklindedir. Bu durumda

$$F^k(nl, n'l') = R^k(nl, n'l'; nl, n'l') \quad (2.87)$$

ve

$$G^k(nl, n'l') = R^k(nl, n'l'; n'l', nl) \quad (2.88)$$

şeklindedir.

2.6.2. Relativistik düzeltmeler

HFR yönteminde bir-elektron ve toplam bağlanma enerjileri için E_r^i ve E_r relativistik düzeltmeleri alınır:

$$E_r = \sum_{i=1}^N E_r^i = \sum_{i=1}^N (E_m^i + E_D^i) \quad (2.89)$$

Burada kütle-hız ve Darwin katkıları

$$E_m^i = -\frac{1}{4} \alpha^2 \int_0^\infty P_i(r) (\varepsilon_i - V^i(r))^2 P_i(r) dr \quad (2.90)$$

ve

$$E_D^i = -\delta_{l_0} \frac{1}{4} \alpha^2 \int_0^\infty P_i(r) \left[\frac{dV^i(r)}{dr} \right] \left[r \frac{dr^{-1} P_i(r)}{dr} \right] dr \quad (2.91)$$

şeklinde verilir. Burada $\alpha \cong 1/137,036$ ince yapı sabitidir ve tüm enerjiler Rydberg birimindedir. Bu ifadeler $V^i(r)$ merkezi alan potansiyel enerji fonksiyonu içerirler. Büyük Z 'ler için katkı düzeltmeleri uygun olmayabildiğinden $P_{nl}(r)$ radyal fonksiyonlarına relativistik düzeltmeleri katmak istenebilir. Bu yaklaşıklıkta, Dirac Hartree-Fock (DHF) denklemlerine Pauli-tipi yaklaşıklık kullanılır. DHF denklemleri için yerel-potansiyel yaklaşımları

$$P'_\kappa = -\frac{\kappa}{r} P_\kappa + \frac{\alpha}{2} \left(\varepsilon_i - V^i + \frac{4}{\alpha^2} \right) Q_\kappa \quad (2.92)$$

ve

$$Q'_\kappa = \frac{\alpha}{2}(V^i - \varepsilon_i)P_\kappa + \frac{\kappa}{r}Q_\kappa \quad (2.93)$$

şeklindedir. Burada P_κ ve Q_κ sırasıyla büyük ve küçük bileşenli radyal fonksiyonlardır. ε_i ve V^i Rydberg biriminde ölçülür ve

$$\kappa = \begin{cases} l_i, & j = l_i - 1/2 \\ -l_i - 1, & j = l_i + 1/2 \end{cases} \quad (2.94)$$

dür. Q_κ için ilk denklem çözülüp ikinci denklemde yerine koyarak ve $\kappa(\kappa+1) = l_i(l_i+1)$ olduğuna dikkat ederek P_κ için bir denklem elde edilir. Bu diferansiyel denklem yalnızca bir terimde κ 'yı içerir; o da κ/r 'dir. Bu katsayı $(2j+1)$ ağırlıklı ortalama ile yer değiştirilirse

$$\frac{2l_i l_i / r - (2l_i + 2)(l_i + 1)/r}{(4l_i + 2)} = -\frac{1}{r} \quad (2.95)$$

ve buradan da j 'den bağımsız radyal dalga fonksiyonu için

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l_i(l_i+1)}{r^2} + V^i(r) - \frac{\alpha^2}{4}[\varepsilon_i - V^i(r)]^2 \right. \\ \left. - \delta_{l_i 0} \frac{\alpha^2}{4} \left[1 + \frac{\alpha^2}{4}(\varepsilon_i - V^i(r)) \right]^{-1} \left(\frac{dV^i}{dr} \right) \left(\frac{dP_i/dr}{P_i} - \frac{1}{r} \right) \right\} P_i(r) = \varepsilon_i P_i(r) \quad (2.96)$$

diferansiyel denklemi elde edilir. Bu sonucun kütle-hız ve Darwin işlemcilerinin relativistik olmayan diferansiyel denkleme eklendiğinde basitçe elde edildiği görülebilir. Yalnızca fark $[]^{-1}$ 'li terimin bulunmasıdır. Bu spin-yörünge terimidir. Buradaki ek, $r=0$ 'da r^{-3} yerine r^{-2} Darwin terimindeki tekilleri barındırdığı için

önemlidir. Spin-yörünge terimini (2.96)'dan çıkararak kütle bağımsız radyal fonksiyonlar elde edilir. (2.96)'dan elde edilen etki de $(2j+1)$ ağırlıklı ortalamanın ilk P_κ relativistik fonksiyona alınmasıdır.

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l_i(l_i+1)}{r^2} + V^i(r) \right] P_i(r) = \varepsilon_i P_i(r) \quad (2.97)$$

(2.97) ile karşılaştırma yapıldığında (2.96)'nın sol parantez içindeki çarpan yalnızca V^i 'de P_i 'yi değil onun yanında ε_i 'yi de içerdiğini gösterir. Ancak relativistik terimlerin etkileri küçüktür ve SCF iterasyonuna yakınsamada problem oluşturmaz. HF denklemlerine iki relativistik terimin eklenmesi de 'HFR yöntemi' olarak adlandırılır.

2.6.3. Işımalı geçişler

2.6.3.1. Elektrik dipol geçişleri

Bu yöntemde elektrik dipol momenti üç değişik şekilde incelenmektedir:

$$\left\langle \gamma JM \left| \sum_i \mathbf{r}(i) \right| \gamma' J' M' \right\rangle, \quad (2.98)$$

$$2(E' - E)^{-1} \left\langle \gamma JM \left| \sum_i \nabla_i \right| \gamma' J' M' \right\rangle \quad (2.99)$$

ve

$$2(E' - E)^{-2} \left\langle \gamma JM \left| \sum_i \nabla_i V \right| \gamma' J' M' \right\rangle \quad (2.100)$$

Burada E ve E' , γJM ve $\gamma' J'M'$ hallerinin enerjileri (rydberg olarak), V merkezi alan potansiyel enerjisidir ve tüm uzaklıklar (bunların gradyanı) Bohr birimindedir. (2.98) ve (2.99)'daki işlemciler sırasıyla klasik momentum ve kuvvettir. Bu üç alternatif, uzunluk, hız ve ivme şekilleri olarak adlandırılır. Gerçek dalga fonksiyonları kullanıldığında hepsi eşittir fakat yaklaşık dalga fonksiyonları kullanıldığında genellikle oldukça farklı sonuçlar verirler. İvme ve hız şekilleri yaklaşık fonksiyonların türevlerini içerir. Özellikle ivme şekli integrallenen küçük r değerine doğru yoğunlaştığı için kötü sonuçlar verir. Hız şekli, iyi değişim dalga fonksiyonları kullanıldığında ve $|E' - E|$ geçiş enerjisi küçük olmadığı zaman çok iyi sonuçlar verir. Uzunluk şekli büyük r değerleri için doğru sonuç verir. Ancak, bu HF radyal fonksiyonlar kullanıldığında bir dezavantaj sağlar. Uzunluk şekli hesapsal olarak en basittir ve genellikle bu şekil hesaplarda kullanılır.

Elektrik dipol çizgi şiddeti

$$S \equiv \left| \langle \gamma J \| \mathbf{P}^{(1)} \| \gamma' J' \rangle \right|^2 \quad (2.101)$$

olarak bilinir. Burada

$$\mathbf{P}_q^{(1)} \equiv \sum_{i=1}^N r_q^{(1)}(i) = \sum_{i=1}^N r_i C_q^{(1)}(i) \quad (2.102)$$

$-ea_0$ biriminde ölçülen atomun klasik dipol momentidir.

$\gamma' J'M'$ uyarılmış halden γJ seviyesinin tüm M hallere olan geçiş olasılığı

$$A = \frac{64\pi^4 e^2 a_0^2 \sigma^3}{3h} S \sum_{Mq} \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & q & M' \end{pmatrix}^2 = \frac{64\pi^4 e^2 a_0^2 \sigma^3}{3h(2J'+1)} S \quad (2.103)$$

şeklinde yazılabilir. Bu nicelik M' 'den bağımsızdır. Ağırlıklı geçiş olasılığı da

$$gA = (2J'+1)A = \frac{64\pi^4 e^2 a_0^2 \sigma^3}{3h} S \quad (2.104)$$

dir. Burada $\sigma = (E_j - E_{j'})/hc$ 'dir ve S niceliği tüm mümkün M, M' geçişlerini içeren spektrum çizgisinin toplam şiddetinin bir ölçüsüdür. Spektrum çizgilerinin incelenmesi için çoğunlukla kullanılan bir diğer nicelik salıncı şiddetidir:

$$f_{ij} = \frac{8\pi^2 m c a_0^2 \sigma}{3h(2J+1)} S = \frac{2(E_j - E_i)}{3(2J+1)} S \quad (2.105)$$

Bu nicelik özel bir i düşük enerjili seviyeden j üst seviyenin tüm $(2J'+1)$ hallerine olan soğurmanın toplam olasılığını gösterir.

Yayınlama için karşılık gelen nicelik genellikle negatif olarak alınır. Ağırlıklı salıncı şiddeti de

$$gf = (2J+1) f_{ij} = -(2J'+1) f_{ji} \quad (2.106)$$

veya

$$gf = \frac{8\pi^2 m c a_0^2 \sigma}{3h} S \quad (2.107)$$

şeklindedir. Ağırlıklı geçiş olasılığı ile ağırlıklı salıncı şiddeti arasındaki bağıntı da böylece

$$gA = \frac{8\pi^2 e^2 \sigma^2}{mc} gf \quad (2.108)$$

olur.

2.6.3.2. Manyetik dipol ve elektrik kuadrupol geçişleri

Manyetik dipol geçişleri için geçiş olasılıkları elektrik dipol geçişleri için tanımlanan ifadeyle aynıdır. Sadece elektrik dipol moment işlemcisi manyetik dipol moment işlemcisiyle yer değiştirmelidir:

$$\mu^{(1)} = -\mu_0 \sum_i \left[\mathbf{I}_i^{(1)} + g_s \mathbf{S}_i^{(1)} \right] \quad (2.109)$$

$$\mu^{(1)} = -\mu_0 \left[\mathbf{J}^{(1)} + (g_s - 1) \mathbf{S}^{(1)} \right] \quad (2.110)$$

Manyetik dipol geçişleri için ağırlıklı geçiş olasılığı

$$gA_{M1} = (2J' + 1) \sum_M a_{M1} = \frac{64\pi^4 e^2 a_0^2 (\alpha/2)^2 \sigma^3}{3h} \left| \left\langle \gamma \mathbf{J} \left\| \mathbf{J}^{(1)} + \mathbf{S}^{(1)} \right\| \gamma' \mathbf{J}' \right\rangle \right|^2 \quad (2.111)$$

şeklinde yazılır. $\gamma' J' M'$ üst seviyesinden tüm γJ seviyelerine olan toplam geçiş olasılığı A_{M1} , M' 'den bağımsızdır.

Elektrik dipol işlemcisine benzer şekilde elektrik kuadrupol işlemcisi $-ea_0^2$ biriminde

$$\mathbf{P}_q^{(2)} = \sum_i r_i^2 C_q^{(2)}(i) \quad (2.112)$$

şeklinde verilir.

Elektrik kuadrupol geçişleri için ağırlıklı geçiş olasılığı

$$gA_{E2} = (2J' + 1) \sum_M a_{E2} = \frac{64\pi^6 e^2 a_0^4 \sigma^5}{15h} \left| \left\langle \gamma \mathbf{J} \left\| \mathbf{P}^{(2)} \right\| \gamma' \mathbf{J}' \right\rangle \right|^2 \quad (2.113)$$

dir. $\gamma'J'M'$ üst seviyesinden tüm γJ seviyelerine olan toplam geiş olasılığı elektrik ve manyetik dipol geişlerinde olduđu gibi M' 'den bağımsızdır. Elektrik dipol, manyetik dipol ve elektrik kuadrupol geişleri 2.5.3. kesiminde bahsedilen seçim kurallarını yine sağlamalıdır.



BÖLÜM 3. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Bu çalışmada, toprak alkali metallere olan magnezyum atomunun bir kez iyonlaşmış haline ait bazı atomik hesaplamalar yapıldı. Mg II için konfigürasyon etkileşme yöntemlerinden olan Fischer [29] tarafından geliştirilen ve relativistik düzeltmeler için Breit-Pauli Hamiltonyenini temel alan çok konfigürasyonlu Hartree-Fock yöntemi (MCHF) çerçevesinde kullanılan MCHF atomik yapı paketi ve Cowan tarafından geliştirilen relativistik Hartree-Fock yöntemi (HFR) çerçevesinde kullanılan Cowan paketi [30] ile bazı seviye enerjileri, Landé g -çarpanları, izinli (E1) ve yasaklı (E2) geçişler için dalga boyları, salınıcı şiddetleri ve geçiş olasılıkları elde edildi.

Bir kez iyonlaşmış magnezyum için MCHF yöntemi ile hesaplama adımları aşağıdaki gibidir.

- 1) Mg II için kapalı alt tabakaları girilerek çiftlenmiş konfigürasyon hal listesi üretildi. Bunun için Mg II'e ait kapalı dolu tabakalar $[\text{Ne}, 1s^2 2s^2 2p^6]$ ve $3s$ açık tabakası girildi. Yapılan hesaplamada sadece değerlik (valans) elektronlarının üst tabakalara uyarıldığı değerlik elektronları arasındaki karşılıklı etkileşmenin dikkate alındığı konfigürasyonlar seçildi. Çift pariteli seviyeler için ns ($n = 3-9$), nd ($n = 3-9$), ng ($n = 5-9$) ve ni ($n = 7-9$) konfigürasyonları ele alındı. Her bir konfigürasyon için LS-çiftlenim modeli göre elde edilen konfigürasyon hal listesi bir çıktı dosyasına yazıldı.
- 2) Elde edilen konfigürasyon hal listesi giriş verisi olarak alınarak relativistik olmayan Hamiltonyenin matris elemanlarını ifade etmek için gerekli olan açılal integraller hesaplandı ve integral listesi bir sonraki adım için depolandı.

- 3) MCHF yöntemi ile elde edilen konfigürasyon hal listesi ve integral listesi kullanılarak relativistik olmayan radyal fonksiyonları, konfigürasyon açılım katsayıları ve enerjiler hesaplandı. Radyal dalga fonksiyonları ve açılım katsayılı konfigürasyon hal listesi oluşturuldu.
- 4) Hesaplamalarda relativistik katkıları ele almak için Breit-Pauli Hamiltonyenin matris elemanlarını ifade etmek için gerekli olan açılmalı integraller hesaplandı. Verilen bir konfigürasyon hal listesi için tüm matris elemanları hesaplandı.
- 5) Breit-Pauli yaklaşıklığında bir etkileşme matrisinin özdeğer ve özvektörleri hesaplandı.
- 6) Konfigürasyon etkileşmesiyle üretilen elektronik dalga fonksiyonları kullanılarak zayıf dış manyetik alandaki manyetik alt seviyelerinin ayrılmasını belirlemek enerji seviyeleri için köşegen ve köşegen-dışı Landé g -çarpanları hesaplandı [31].
- 7) Daha sonra, tek pariteli seviyeler için n_p ($n = 3-9$), n_f ($n = 4-9$) ve n_h ($n = 6-9$) konfigürasyonları ele alınarak baştan başlanarak tüm hesaplama adımları tekrar hesaplandı.
- 8) İzinli geçişlerini hesaplamak için zıt pariteli seviyeler için elektrik dipol (E1) geçiş işlemcilerinin matris elemanları için gerekli olan açılmalı integraller ve tüm matris elemanları hesaplandı.
- 9) Geçiş matris elemanlarıyla birlikte zıt pariteli haller için verilen dalga fonksiyonlarıyla dalga boyları, salınıcı şiddetleri ve geçiş olasılıkları LSJ çiftlenimine göre hesaplandı ve bir çıktı dosyasına yazıldı.

- 10) Yasak geçişleri hesaplamak için aynı pariteli seviyeler için ayrı ayrı olarak elektrik kuadrupol (E2) geçiş işlemcilerinin matris elemanları için gerekli olan açısıl integraller ve tüm matris elemanları hesaplandı.
- 11) Geçiş matris elemanlarıyla birlikte aynı pariteli haller için verilen dalga fonksiyonlarıyla dalga boyları, salınıcı şiddetleri ve geçiş olasılıkları LSJ çiftlenimine göre hesaplandı ve bir çıktı dosyasına yazıldı.

HFR yöntemi ile hesaplama adımları ise aşağıdaki gibidir.

- 1) Mg II için [Ne] özü dışında çift pariteli seviyeler için ns ($n = 3-9$), nd ($n = 3-9$), ng ($n = 5-9$) ve ni ($n = 7-9$), tek pariteli seviyeler için np ($n = 3-9$), nf ($n = 4-9$) ve nh ($n = 6-9$) konfigürasyonları seçilerek hesaplama için giriş dosyası hazırlandı.
- 2) En küçük kareler yönteminde spin-yörünge parametrelerinin ölçeklendirme faktörü temel kuantum mekaniksel hesaptaki değerlerinde bırakılırken Slater parametreleri (F^k ve G^k) ve konfigürasyon etkileşme (R^k) integrallerinin ölçeklendirme faktörlerinin iyileştirilmemiş değerleri 0,95 olarak seçildi.
- 3) Relativistik Hartree-Fock yaklaşık yöntemi kullanarak radyal dalga fonksiyonları hesaplandı. Çıkış dosyası radyal Coulomb (F^k ve G^k) ve spin-yörünge integrallerini içerir.
- 4) İlk olarak, elektrik dipol (E1) ve kuadrupol (E2) radyal integralleri ve konfigürasyon-etkileşme Coulomb integrallerini (R^k) hesaplamak için gerekli dalga fonksiyonları hesaplandı.
- 5) Hesaplanan veriler ile özdeğer (enerji seviyeleri) ve özvektörleri hesaplamak için J toplam açısıl momentumun olası her değeri için enerji matrisi kuruldu.

- 6) E1 ve E2 ışımalı spektrumu için dalga boyları, salınıcı şiddetleri ve geçiş olasılıkları hesaplandı.
- 7) Daha yüksek doğrulukta sonuçlar için, tekrarlamalı bir yöntemle deneysel enerji seviyelerine en-küçük kareler yöntemi ile bir uydurulmasını yaparak $E_{ort.}$, F^k , G^k , ξ ve R^k çeşitli radyal enerji parametreleri değiştirildi.
- 8) Elde edilen en küçük kareler uydurma parametrelerinin sonuçları atomik enerji seviyelerinin ve spektrumlarının hesaplanmasında tekrar kullanıldı.

MCHF+BP ve HFR yöntemleri ile elde edilen sonuçlar Tablo 3.1., Tablo 3.2. ve Tablo 3.3.'te verilmiştir ve literatürdeki önceki çalışma sonuçları ile karşılaştırılmıştır.

3.1. Mg II'nin Bazı Seviyelerinin Enerjileri ve Landé g -çarpanları

Bir kez iyonlaşmış magnezyumun [Ne] özü dışında ns ($n = 3-9$), nd ($n = 3-9$), ng ($n = 5-9$), ni ($n = 7-9$), np ($n = 3-9$), nf ($n = 4-9$) ve nh ($n = 6-9$) seviyelerinin enerjileri ve Landé g -çarpanları MCHF+BP ve HFR yöntemleriyle hesaplandı. Elde edilen sonuçlar diğer çalışmalarla karşılaştırmalı olarak Tablo 3.1.'de sunulmaktadır. Enerji seviyeleri 3s $^1S_0$ taban hal seviyesine göre cm^{-1} birim sistemine göre verilmektedir. Tabloda tek pariteli seviyeler “o” indisıyla belirtilmektedir. Mg II için enerji seviyeleri ve Landé g -çarpanları NIST verileri [7], Karaçoban Usta [26] ve Fischer ve ark. [18] tarafından yapılan çalışmalarla karşılaştırılmaktadır.

MCHF+BP hesabında tek ve çift pariteli seviyelerinde değerlik elektronları arasındaki karşılıklı etkileşme dikkate alındı. Tablo 3.1.'de ns ($n = 3-9$), nd ($n = 3-9$), ng ($n = 5-9$) ve ni ($n = 7-9$), np ($n = 3-9$), nf ($n = 4-9$) ve nh ($n = 6-9$) konfigürasyonların seviye enerjileri ve Landé g -çarpanları verilmektedir. Tabloda bu seviyeler için deneysel [7] ve teorik [18, 26] sonuçlar ile karşılaştırma yapılmıştır. Elde edilen sonuçlarda (4p, 5s ve 5p seviyeleri hariç) uyum iyidir. Elde edilen sonuçların doğruluğunu göstermek için yüzde farklar (hata) $[|E_b - E_d|/E_d] \times 100$

hesaplandı. Burada E_b bu çalışmayı, E_d ise diğer çalışmaları göstermektedir. Elde edilen sonuçlar ile diğer çalışmalardaki sonuçlar arasındaki yüzde fark, 4p, 5s ve 5p seviyeleri dışında, % 0,10–3,36 [7, 26] ve % 0,03–3,44 [18] aralığındadır. Landé g -çarpanları da karşılaştırma değerleriyle [26] iyi bir uyum içindedir.

HFR hesaplamalarında alınan konfigürasyon setinde de sadece değerlik elektronları arasındaki karşılıklı etkileşme etkileri dikkate alındı. Tablo 3.1.'de Mg II'nin ns ($n = 3-9$), nd ($n = 3-9$), ng ($n = 5-9$), ni ($n = 7-9$), np ($n = 3-9$), nf ($n = 4-9$) ve nh ($n = 6-9$) konfigürasyonlarının seviye enerjileri ve Landé g -çarpanları verilmektedir. Enerji seviyeleri ve Landé g -çarpanları sonuçları diğer çalışmalarla karşılaştırıldığında uyumlu olduğu görülmektedir. Elde edilen enerji sonuçlar ile Fischer ve ark. [18] çalışmasıyla olan yüzde fark %0,00–0,26 aralığındadır. Diğer çalışma sonuçlarıyla [7, 26] hem enerji seviyeleri hem de Landé g -çarpanları birebir uyumludur.

Tablo 3.1. Mg II'nin bazı uyarılmış seviyelerinin E enerjileri (cm^{-1}) ve Landé g -çarpanları

Seviye		E (cm^{-1})			Landé g -çarpanı		
Konf.	Terim	Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma		Diğer çalışmalar
		MCHF+BP	HFR		MCHF+BP	HFR	
3s	$^2S_{1/2}$	0,00	0,00	0,00 ^{a,b}	2,002	2,002	2,002 ^b
3p	$^2P^o_{1/2}$	34569,78	35669,31	35669,31 ^{a,b}	0,666	0,666	0,666 ^b
				35704,14 ^c			
	$^2P^o_{3/2}$	34639,64	35760,88	35760,88 ^{a,b}	1,334	1,334	1,334 ^b
				35803,80 ^c			
4s	$^2S_{1/2}$	68009,75	69804,95	69804,95 ^{a,b}	2,002	2,002	2,002 ^b
				69730,16 ^c			
3d	$^2D_{5/2}$	69676,05	71490,19	71490,19 ^{a,b}	1,200	1,200	1,200 ^b
				71679,95 ^c			
	$^2D_{3/2}$	69675,58	71491,06	71491,06 ^{a,b}	0,800	0,800	0,800 ^b
				71669,31 ^c			
4p	$^2P^o_{1/2}$	94750,90	80619,50	80619,50 ^{a,b}	0,666	0,666	0,666 ^b
				80564,26 ^c			
	$^2P^o_{3/2}$	94764,57	80650,02	80650,02 ^{a,b}	1,334	1,334	1,334 ^b
				80598,44 ^c			
5s	$^2S_{1/2}$	101284,75	92790,51	92790,51 ^{a,b}	2,002	2,002	2,002 ^b
				92718,10 ^c			

Tablo 3.1. (Devamı)

Seviye		E (cm ⁻¹)			Landé <i>g</i> -çarpanı		
Konf.	Terim	Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma		Diğer çalışmalar
		MCHF+BP	HFR		MCHF+BP	HFR	
4d	² D _{5/2}	91209,02	93310,59	93310,59 ^{a,b}	1,200	1,200	1,200 ^b
				93376,95 ^c			
	² D _{3/2}	91208,84	93311,11	93311,11 ^{a,b}	0,800	0,800	0,800 ^b
4f	² F _{5/2}	91490,02	93799,63	93799,63 ^{a,b}	0,857	0,857	0,857 ^b
				93712,65 ^c			
	² F _{7/2}	91490,15	93799,75	93799,75 ^{a,b}	1,143	1,143	1,143 ^b
5p	² P _{1/2}	103434,85	97455,12	97455,12 ^{a,b}	0,666	0,666	0,666 ^b
				97390,79 ^c			
	² P _{3/2}	103444,30	97468,92	97468,92 ^{a,b}	1,334	1,334	1,334 ^b
6s	² S _{1/2}	106666,66	103196,75	103196,75 ^{a,b}	2,002	2,002	2,002 ^b
				103118,89 ^c			
	² D _{5/2}	101190,97	103419,70	103419,70 ^{a,b}	1,200	1,200	1,200 ^b
5d	² D _{3/2}	101190,88	103420,00	103420,00 ^{a,b}	0,800	0,800	0,800 ^b
				103428,61 ^c			
	² F _{5/2}	101366,63	103689,86	103689,86 ^{a,b}	0,857	0,857	0,857 ^b
5f	² F _{7/2}	101366,70	103689,92	103689,92 ^{a,b}	1,143	1,143	1,143 ^b
				103607,86 ^c			
	² G _{7/2}	101325,62	103705,66	103705,66 ^{a,b}	0,889	0,889	0,889 ^b
6p	² P _{1/2}	108146,33	105622,34	103705,66 ^{a,b}	1,111	1,111	1,111 ^b
				105549,07 ^c			
	² P _{3/2}	108152,99	105629,72	105629,72 ^{a,b}	1,334	1,334	1,334 ^b
7s	² S _{1/2}	109910,52	108784,33	105557,15 ^c	2,002	2,002	2,002 ^b
				108703,70 ^c			
	² D _{5/2}	106609,55	108900,02	108900,02 ^{a,b}	1,200	1,200	1,200 ^b
6d	² D _{3/2}	106609,50	108900,20	108872,86 ^c	0,800	0,800	0,800 ^b
				108871,05 ^c			
	² F _{5/2}	106732,02	109062,32	109062,32 ^{a,b}	0,857	0,857	0,857 ^b
6f	² F _{7/2}	106732,06	109062,35	108979,98 ^c	1,143	1,143	1,143 ^b
				109062,35 ^{a,b}			
				108979,73 ^c			

Tablo 3.1. (Devamı)

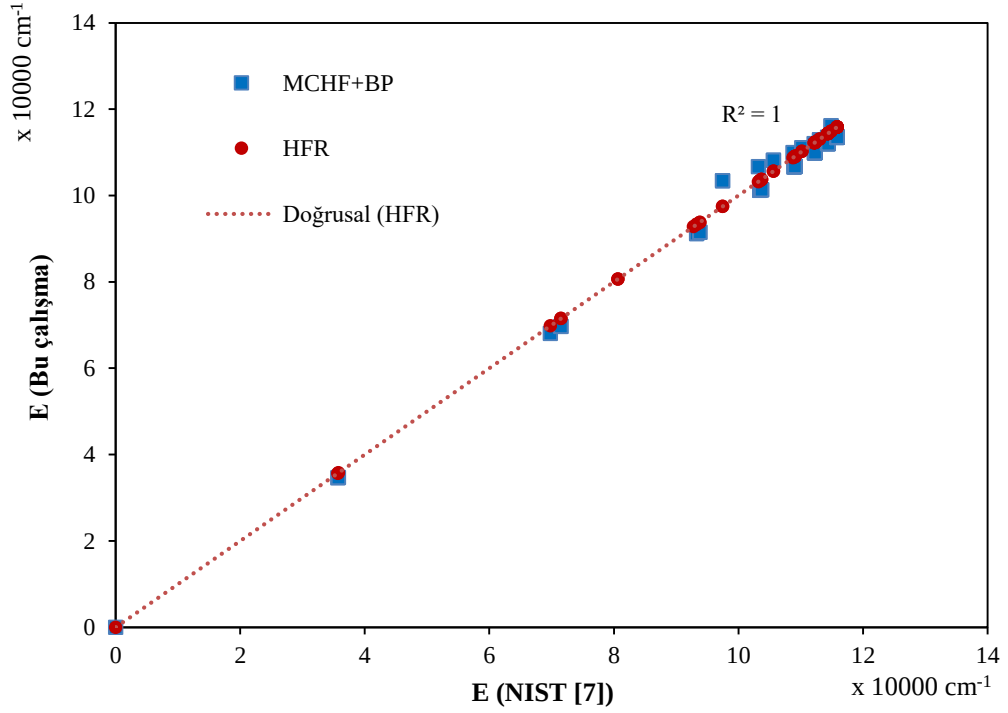
Seviye		E (cm ⁻¹)			Landé <i>g</i> -çarpanı		
Konf.	Terim	Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma		Diğer çalışmalar
		MCHF+BP	HFR		MCHF+BP	HFR	
6g	² G _{7/2}	106690,46	109072,05	109072,05 ^{a,b}	0,889	0,889	0,889 ^b
	² G _{9/2}	106690,48	109072,05	109072,05 ^{a,b}	1,111	1,111	1,111 ^b
6h	² H _{9/2}	106733,38	109073,97	109073,97 ^{a,b}	0,909	0,909	0,909 ^b
	² H _{11/2}	106733,39	109073,97	109073,97 ^{a,b}	1,091	1,091	1,091 ^b
7p	² P _{1/2}	111016,28	110203,58	110203,58 ^{a,b}	0,666	0,666	0,666 ^b
	² P _{3/2}	111021,09	110207,99	110207,99 ^{a,b}	1,334	1,334	1,334 ^b
8s	² S _{1/2}	112015,09	112129,20	112129,20 ^{a,b}	2,002	2,002	2,002 ^b
	² D _{5/2}	109873,54	112197,05	112197,05 ^{a,b}	1,200	1,200	1,200 ^b
7d	² D _{3/2}	109873,51	112197,17	112197,17 ^{a,b}	0,800	0,800	0,800 ^b
	² F _{5/2}	109967,25	112301,47	112301,47 ^{a,b}	0,857	0,857	0,857 ^b
7f	² F _{7/2}	109967,27	112301,47	112301,47 ^{a,b}	1,143	1,143	1,143 ^b
	² G _{7/2}	109925,29	112307,79	112307,79 ^{a,b}	0,889	0,889	0,889 ^b
7g	² G _{9/2}	109925,30	112307,79	112307,79 ^{a,b}	1,111	1,111	1,111 ^b
	² H _{9/2}	109968,20	112309,06	112309,06 ^{a,b}	0,909	0,909	0,909 ^b
7h	² H _{11/2}	109968,21	112309,06	112309,06 ^{a,b}	1,091	1,091	1,091 ^b
	² I _{11/2}	109925,32	112309,45	112309,45 ^b	0,923	0,923	0,923 ^b
7i	² I _{13/2}	109925,33	112309,45	112309,45 ^b	1,077	1,077	1,077 ^b
8p	² P _{1/2}	112920,19	113030,25	113030,25 ^{a,b}	0,666	0,666	0,666 ^b
	² P _{3/2}	112923,53	113033,09	113033,09 ^{a,b}	1,334	1,334	1,334 ^b
9s	² S _{1/2}	113457,52	114289,36	114289,36 ^{a,b}	2,002	2,002	2,002 ^b
	² D _{5/2}	111990,05	114332,68	114332,68 ^{a,b}	1,200	1,200	1,200 ^b
8d	² D _{3/2}	111990,04	114332,74	114332,74 ^{a,b}	0,800	0,800	0,800 ^b
	² F _{5/2}	112067,04	114403,55	114403,55 ^{a,b}	0,857	0,857	0,857 ^b
8f	² F _{7/2}	112067,05	114403,55	114403,55 ^{a,b}	1,143	1,143	1,143 ^b

Tablo 3.1. (Devamı)

Seviye		E (cm ⁻¹)			Landé g-çarpanı		
Konf.	Terim	Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma		Diğer çalışmalar
		MCHF+BP	HFR		MCHF+BP	HFR	
8g	² G _{7/2}	112024,82	114407,88	114407,88 ^{a,b}	0,889	0,889	0,889 ^b
	² G _{9/2}	112024,83	114407,88	114407,88 ^{a,b}	1,111	1,111	1,111 ^b
8h	² H _{9/2}	112067,73	114408,74	114408,74 ^{a,b}	0,909	0,909	0,909 ^b
	² H _{11/2}	112067,73	114408,74	114408,74 ^{a,b}	1,091	1,091	1,091 ^b
8i	² I _{11/2}	112024,84	114409,02	114409,02 ^b	0,923	0,923	0,923 ^b
	² I _{13/2}	112024,85	114409,02	114409,02 ^b	1,077	1,077	1,077 ^b
9p	² P _{0/2}	116106,75	114896,79	114896,79 ^{a,b}	0,666	0,666	0,666 ^b
				114829,34 ^c			
	² P _{3/2}	116153,24	114898,72	114898,72 ^{a,b}	1,334	1,334	1,334 ^b
				114831,53 ^c			
9d	² D _{5/2}	113440,12	115794,39	115794,39 ^{a,b}	1,200	1,200	1,200 ^b
				115828,42 ^c			
	² D _{3/2}	113440,11	115794,44	115794,44 ^{a,b}	0,800	0,800	0,800 ^b
				115827,77 ^c			
9f	² F _{5/2}	113506,64	115844,60	115844,60 ^{a,b}	0,857	0,857	0,857 ^b
				115845,05 ^c			
	² F _{7/2}	113506,65	115844,60	115844,60 ^{a,b}	1,143	1,143	1,143 ^b
				115844,95 ^c			
9g	² G _{7/2}	113464,24	115847,67	115847,67 ^{a,b}	0,889	0,889	0,889 ^b
	² G _{9/2}	113464,25	115847,67	115847,67 ^{a,b}	1,111	1,111	1,111 ^b
9h	² H _{9/2}	113507,15	115848,28	115848,28 ^{a,b}	0,909	0,909	0,909 ^b
	² H _{11/2}	113507,16	115848,28	115848,28 ^{a,b}	1,091	1,091	1,091 ^b
9i	² I _{11/2}	113464,27	115848,51	115848,51 ^b	0,923	0,923	0,923 ^b
	² I _{13/2}	113464,27	115848,51	115848,51 ^b	1,077	1,077	1,077 ^b

^aNIST [7] ; ^bKaraçoban Usta [26] ; ^cFischer ve ark. [18]

Şekil 3.1.'de elde edilen enerji sonuçları ile NIST [7]'deki verilerle karşılaştırılması gösterilmiştir. Şekil 3.1.'den görüldüğü gibi, hesaplamalardan elde edilen enerji sonuçları [7] ile iyi uyum içindedir. Doğrusal korelasyon katsayısı R^2 , HFR hesaplaması için 1,00 ve MCHF+BP hesaplaması için 0,99'dur (4p ve 5s seviyeleri hariç).



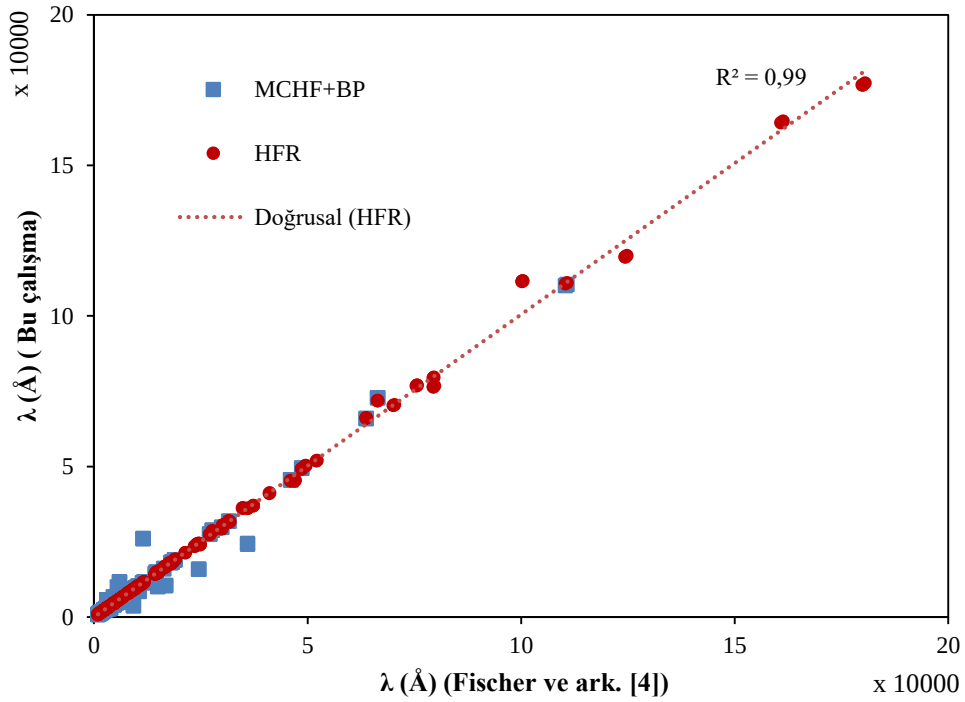
Şekil 3.1. Bu çalışmadan elde edilen enerjilerin (MCHF+BP ve HFR hesaplamaları) NIST [7] ile karşılaştırılması.

3.2. Mg II'nin Elektrik Dipol Geçişleri için Dalga Boyları, Salıncı Şiddetleri ve Geçiş Olasılıkları

Mg II'in elektrik dipol (E1) geçişlerinin ışıma parametreleri MCHF+BP ve HFR yöntemleriyle hesaplandı. Tablo 3.2.'de ns ($n = 3-9$) – n'p ($n' = 3-9$), nd ($n = 3-9$) – n'p ($n' = 3-9$), nd ($n = 3-9$) – n'f ($n' = 4-9$), ng ($n = 5-9$) – n'f ($n' = 4-9$), ng ($n = 5-9$) – n'h ($n' = 6-9$), ve ni ($n = 7-9$) – n'g ($n' = 6-9$) geçişlerinin λ dalga boyları (Å), f salıncı şiddetleri ve A_{ji} geçiş olasılıkları (s^{-1}) sunulmaktadır [24]. Tablo sadece tek pariteli seviyeler “o” indisiyle belirtilmektedir, salıncı şiddetleri ve geçiş olasılıkları için 10'un kuvvetleri parantez içinde yazılmaktadır. Bu geçişler için karşılaştırma değerleri literatürde mevcuttur. Bu tabloda diğer çalışmalarla bir karşılaştırma yapıldı. Diğer çalışmalarda karşılaştırmak için elde edilen ağırlıklı geçiş olasılıkları (gA_{ji}) üst seviyenin istatistiksel ağırlığına ($g_j = 2j+1$) bölünmesi ile ve ağırlıklı salıncı şiddetleri (gf) alt seviyenin istatistiksel ağırlığına ($g_i = 2i+1$) bölümü alınarak sunuldu.

MCHF+BP atomik yapı paketiyle [29] zıt pariteli seviyeler arasındaki izinli geçişleri için mümkün 557 tane E1 geçişleri elde edildi. Ağırlıklı salınıcı şiddetleri salınıcı şiddetlerine çevrildi. Elde edilen sonuçlar, bazı geçişler hariç olmak üzere diğer çalışmalarla ve HFR sonuçlarıyla uyumludur. Dalga boyu sonuçları iyi olmamasına rağmen salınıcı şiddetleri ve geçiş olasılıklarında uyumun olduğu görüldü. Elde edilen sonuçların doğruluğunu göstermek için λ (MCHF+BP) / λ ([18]) oran ortalaması 1,30 olarak hesaplandı. Karşılaştırma değeri olmayan seviyelerde HFR ile uyumun olduğu görülmektedir. Ayrıca, E1 geçişlerinin dalga boyları karşılaştırması Şekil 3.2.'de gösterilmektedir (bazı geçişler hariç). Salınıcı şiddetleri ve geçiş olasılıkları karşılaştırma değeri ile karşılaştırıldığında özellikle $n = 9$ seviyeleri için uyumsuzluğun çok olduğu görüldü.

HFR program paketiyle [30] ise zıt pariteli seviyeler arasında yapılan izinli geçiş hesabında 557 tane mümkün E1 geçişleri elde edildi ve bu veriler Tablo 3.2.'de verilmektedir. Hesaplama en küçük kareler yöntemiyle elde edilen enerji değerleri deneysel verilere uydurma yapılarak elde edilen parametrelerle geçişler tekrar hesaplandı. Dalga boyu verileri Fischer ve ark. [18]'in sundukları sonuçlarıyla karşılaştırıldığında elde edilen sonuçların uyumlu olduğu görülmektedir ve λ (HFR) / λ ([18]) oran ortalaması 1,00 olarak bulunmuştur. Salınıcı şiddetleri için diğer çalışmalar karşılaştırıldığında f (HFR) / λ ([18]) oran ortalaması 1,03 ve 5s–8p ve 5s–9p geçişleri hariç f (HFR) / λ ([4]) oran ortalaması 1,02 hesaplanmıştır. Ayrıca, dalga boyları karşılaştırması Şekil 3.2.'te sunulmuştur. Geçiş olasılıkları için oran ortalama karşılaştırılması yapıldığında, A_{ji} (HFR) / A_{ji} ([18]) oran ortalaması 0,98 ve A_{ji} (HFR) / A_{ji} ([4]) oran ortalaması 1,03 (5s–8p ve 5s–9p geçişleri hariç) olarak bulunmuştur. Bu oranlarda HFR çalışmasının diğer çalışmalarla uyumunun çok iyi olduğunu göstermektedir.



Şekil 3.2. Bu çalışmadan elde edilen dalga boylarının (MCHF+BP ve HFR hesaplamaları) Fischer ve ark. [4] ile karşılaştırılması.

3.3. Mg II'nin Elektrik Kuadrupol Geçişleri için Dalga Boyları, Salınıcı Şiddetleri ve Geçiş Olasılıkları

MCHF+BP ve HFR yöntemleriyle Mg II'nin elektrik kuadrupol geçişlerine ait dalga boyları, salınıcı şiddetleri ve geçiş olasılıkları hesaplandı. Aynı pariteli seviyeler arasında yasaklı geçişleri için MCHF+BP atomik yapı paketiyle [29] mümkün 1156 ve HFR program paketiyle [30] mümkün 740 tane E2 geçişleri elde edildi. ns ($n = 3-5$) – nd ($n = 3-9$), nd ($n = 3-5$) – nd ($n = 4-9$), nd ($n = 3-5$) – ng ($n = 5-9$), np ($n = 3-5$) – np ($n = 4-9$), np ($n = 3-5$) – nf ($n = 4-9$), nf ($n = 4, 5$) – nf ($n = 5-9$) ve nf ($n = 4, 5$) – nh ($n = 6-9$) yasaklı geçişlerinin λ dalga boyları (Å), $\log(gf)$ logaritmik ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve A_{ji} geçiş olasılıkları (s^{-1}) Tablo 3.3.'te sunulmaktadır. Tabloda sadece tek pariteli seviyeler “o” indisıyla belirtilmektedir ve geçiş olasılıkları için 10'un kuvvetleri parantez içinde yazılmaktadır. Mg II'nin dalga boyu verileri Majumder ve arkadaşları [5] ve Karaçoban Usta ve Sever [25], ağırlıklı salınıcı şiddetleri Karaçoban Usta ve Sever [25] ve geçiş olasılıkları ise Majumder ve

arkadaşları [5], Çelik ve çalışma grubu [6] ve Karaçoban Usta ve Sever [25]'deki verilerle karşılaştırmalı olarak verilmiştir.

Tabloda MCHF+BP sonuçlarında ağırlıklı salınıcı şiddetleri logaritmik ağırlıklı salınıcı şiddetlerine çevrilerek sunuldu. Elde edilen sonuçlar, bazı geçişler hariç olmak üzere diğer çalışmalarla uyumludur. Dalga boyu sonuçları iyi olmasına rağmen geçiş olasılıklarında uyumun az olduğu görüldü. Elde edilen sonuçların doğruluğunu göstermek için λ (MCHF+BP) / λ ([5]) oran ortalaması 0,96 olarak hesaplandı (4p – 4f, 4p – 5f, 5p – 5f geçişleri hariç). Logaritmik ağırlıklı salınıcı şiddetleri HFR ile karşılaştırıldığında uyumlu olduğu görülmektedir. Geçiş olasılıkları için elde edilen sonuçlar genellikle karşılaştırma değerleri ile iyi uyumlu değildir. 4f – nf (n = 4–9), 5f – nf (n = 4–9), 4f – nh (n = 6–9) ve 5f – nh (n = 6–9) için HFR ile uyum oldukça iyidir.

HFR yasaklı geçişlerinin bir kısmının dalga boyları, logaritmik ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve geçiş olasılıkları Tablo 3.3.'te verilmektedir. Hesaplama en küçük kareler yöntemiyle elde edilen enerji değerleri deneysel verilere uydurma yapılarak elde edilen parametrelerle geçişler tekrar hesaplandı. Dalga boyu verilerinin [5]'deki sunulan sonuçlarla karşılaştırıldığında tüm hesaplamalar için elde edilen sonuçların uyumlu olduğu görülmektedir. λ (HFR) / λ ([5]) oran ortalaması 1,00 olarak bulunmuştur. Logaritmik ağırlıklı salınıcı şiddetlerinin MCHF+BP ile karşılaştırıldığında uyumlu olduğu görülmektedir. Geçiş olasılıkları da diğer çalışma sonuçları ile oldukça uyumludur. Geçiş olasılıkları için oran ortalama karşılaştırılması yapıldığında, 3d $^2D_{5/2}$ –5d $^2D_{3/2}$ ve 4f $^2F_{7/2}^0$ –5f $^2F_{7/2}^0$ geçişleri hariç, A_{ki} (HFR) / A_{ki} ([6]) için 1,01 bulunmuştur. A_{ki} (HFR) / A_{ki} ([5]) oran ortalaması ise 1,05 olarak (3d $^2D_{5/2}$ –5d $^2D_{3/2}$ ve 5p $^2P_{1/2}^0$ –5f $^2F_{5/2}^0$ geçişleri hariç) hesaplanmıştır.

Sonuç olarak, MCHF+BP ve HFR hesaplamaları değerlik elektronları arasındaki karşılıklı etkileşimleri içermektedir. Elektronlar arasındaki karşılıklı etkileşme etkileri ve relativistik etkiler elementlerin spektrumlarında önemli rol oynamaktadır. Bu yüzden her iki hesaplamada da öz–değerlik ve öz–öz elektronları arasındaki

karşılıklı etkileşmelerde hesaba dahil edilerek hem E1 geçişlerinde hem de E2 geçişlerindeki uyumsuzluklar iyileştirilebilir.

DeneySEL çalışmaların yasak geçişlerin belirlenmesinde çok nadir olması teorik çalışmalar üzerindeki önemini arttırmaktadır. Bu çalışmada elde edilen sonuçların diğer hesap sonuçlarıyla uyumlu olması izinli ve yasaklı geçişler için bu yöntemlerin kullanılabileceğinin bir göstergesidir.



Tablo 3.2. Mg II'nin elektrik dipol (E1) geçişleri için λ dalga boyları (Å), f salınıcı şiddetleri ve A_{ji} geçiş olasılıkları (s^{-1})

Geçişler				λ (Å)			f				A_{ji} (s^{-1})			
Alt seviye	Üst seviye	g_i	g_j	Bu çalışma		Diğer	Bu çalışma		Diğer		Bu çalışma		Diğer	
				MCHF+BP	HFR	çalışmalar	MCHF+BP	HFR	çalışmalar		MCHF+BP	HFR	çalışmalar	
3s ² S	3p ² P ^o	2	2	2891,80	2803,52	2800,80 ^a	3,20(-1)	3,20(-1)	3,06(-1) ^a	–	2,54(8)	2,68(8)	2,60(8) ^a	–
3s ² S	3p ² P ^o	2	4	2885,97	2796,35	2793,00 ^a	6,40(-1)	6,30(-1)	6,14(-1) ^a	–	2,55(8)	2,70(8)	2,62(8) ^a	–
3s ² S	4p ² P ^o	2	2	1055,39	1240,39	1241,25 ^a	6,25(-4)	1,40(-4)	2,58(-4) ^a	–	3,74(6)	6,10(5)	1,11(6) ^a	–
3s ² S	4p ² P ^o	2	4	1055,24	1239,93	1240,72 ^a	1,20(-3)	2,80(-4)	4,44(-4) ^a	–	3,58(6)	6,11(5)	9,60(5) ^a	–
3s ² S	5p ² P ^o	2	2	966,79	1026,11	1026,79 ^a	3,32(-4)	3,90(-4)	5,42(-4) ^a	–	2,37(6)	2,46(6)	3,42(6) ^a	–
3s ² S	5p ² P ^o	2	4	966,70	1025,97	1026,63 ^a	6,30(-4)	7,80(-4)	1,02(-3) ^a	–	2,26(6)	2,47(6)	3,23(6) ^a	–
3s ² S	6p ² P ^o	2	2	924,67	946,77	947,43 ^a	2,39(-4)	2,80(-4)	3,78(-4) ^a	–	1,87(6)	2,07(6)	2,80(6) ^a	–
3s ² S	6p ² P ^o	2	4	924,61	946,70	947,35 ^a	4,57(-4)	5,55(-4)	7,21(-4) ^a	–	1,78(6)	2,07(6)	2,68(6) ^a	–
3s ² S	7p ² P ^o	2	2	900,76	907,41	908,05 ^a	1,77(-4)	1,85(-4)	2,49(-4) ^a	–	1,45(6)	1,50(6)	2,01(6) ^a	–
3s ² S	7p ² P ^o	2	4	900,73	907,38	908,01 ^a	3,37(-4)	3,70(-4)	4,77(-4) ^a	–	1,39(6)	1,50(6)	1,93(6) ^a	–
3s ² S	8p ² P ^o	2	2	885,58	884,72	885,35 ^a	1,31(-4)	1,25(-4)	1,68(-4) ^a	–	1,11(6)	1,07(6)	1,43(6) ^a	–
3s ² S	8p ² P ^o	2	4	885,55	884,70	885,32 ^a	2,50(-4)	2,50(-4)	3,24(-4) ^a	–	1,06(6)	1,07(6)	1,38(6) ^a	–
3s ² S	9p ² P ^o	2	2	861,27	870,35	870,86 ^a	1,37(-3)	0,90(-4)	1,22(-4) ^a	–	1,23(7)	0,78(6)	1,07(6) ^a	–
3s ² S	9p ² P ^o	2	4	860,93	870,33	870,84 ^a	2,66(-3)	1,75(-4)	2,35(-4) ^a	–	1,20(7)	0,78(6)	1,03(6) ^a	–
3p ² P ^o	4s ² S	2	2	2990,48	2929,49	2938,93 ^a	1,49(-1)	1,39(-1)	1,49(-1) ^a	–	1,11(8)	1,09(8)	1,15(8) ^a	–
3p ² P ^o	4s ² S	4	2	2996,75	2937,37	2947,56 ^a	1,48(-1)	1,39(-1)	1,49(-1) ^a	–	2,20(8)	2,16(8)	2,29(8) ^a	–
4s ² S	4p ² P ^o	2	2	3738,41	9246,84	9230,12 ^a	0,89(-1)	4,67(-1)	4,64(-1) ^a	–	4,26(7)	3,64(7)	3,63(7) ^a	–
4s ² S	4p ² P ^o	2	4	3736,50	9220,88	9201,09 ^a	1,78(-1)	9,37(-1)	9,31(-1) ^a	–	4,25(7)	3,67(7)	3,66(7) ^a	–
4s ² S	5p ² P ^o	2	2	2821,98	3616,62	3615,25 ^a	4,49(-2)	2,80(-4)	3,49(-4) ^a	–	3,75(7)	1,42(5)	1,78(5) ^a	–
4s ² S	5p ² P ^o	2	4	2821,23	3614,82	3613,27 ^a	0,89(-1)	5,60(-4)	7,98(-4) ^a	–	3,74(7)	1,43(5)	2,04(5) ^a	–
4s ² S	6p ² P ^o	2	2	2490,71	2791,94	2791,82 ^a	2,79(-2)	5,50(-5)	4,70(-5) ^a	–	2,99(7)	4,58(4)	4,01(4) ^a	–

Tablo 3.2. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)			f				A_{ji} (s ⁻¹)			
Alt seviye	Üst seviye	g_i	g_j	Bu çalışma		Diğer	Bu çalışma		Diğer		Bu çalışma		Diğer	
				MCHF+BP	HFR	çalışmalar	MCHF+BP	HFR	çalışmalar		MCHF+BP	HFR	çalışmalar	
4s ² S	6p ² P ^o	2	4	2490,29	2791,37	2791,19 ^a	0,55(-1)	1,05(-4)	7,47(-5) ^a	–	2,98(7)	4,58(4)	3,19(4) ^a	–
4s ² S	7p ² P ^o	2	2	2324,48	2475,33	2475,51 ^a	1,88(-2)	9,50(-5)	9,36(-5) ^a	–	2,32(7)	1,03(5)	1,02(5) ^a	–
4s ² S	7p ² P ^o	2	4	2324,22	2475,07	2475,22 ^a	3,74(-2)	1,90(-4)	1,68(-4) ^a	–	2,30(7)	10,3(4)	9,14(4) ^a	–
4s ² S	8p ² P ^o	2	2	2226,63	2313,46	2313,74 ^a	1,26(-2)	8,50(-5)	8,56(-5) ^a	–	1,70(7)	1,05(5)	1,07(5) ^a	–
4s ² S	8p ² P ^o	2	4	2226,46	2313,31	2313,58 ^a	2,50(-2)	1,70(-4)	1,57(-4) ^a	–	1,68(7)	1,05(5)	9,80(4) ^a	–
4s ² S	9p ² P ^o	2	2	2079,11	2217,70	2217,34 ^a	1,59(-1)	6,50(-5)	7,11(-5) ^a	–	2,45(8)	9,02(4)	9,63(4) ^a	–
4s ² S	9p ² P ^o	2	4	2077,10	2217,60	2217,23 ^a	3,22(-1)	1,35(-4)	1,32(-4) ^a	–	2,49(8)	9,02(4)	8,95(4) ^a	–
3p ² P ^o	3d ² D	4	6	2853,38	2798,82	2787,37 ^a	8,73(-1)	8,49(-1)	8,54(-1) ^a	–	4,77(8)	4,80(8)	4,88(8) ^a	–
3p ² P ^o	3d ² D	2	4	2847,74	2791,62	2780,47 ^a	9,73(-1)	9,46(-1)	9,48(-1) ^a	–	4,00(8)	4,10(8)	4,08(8) ^a	–
3p ² P ^o	3d ² D	4	4	2853,42	2798,76	2788,19 ^a	9,70(-2)	9,43(-2)	9,48(-2) ^a	–	7,94(7)	8,00(7)	8,13(7) ^a	–
3d ² D	4p ² P ^o	6	4	3984,67	10917,33	11212,66 ^a	1,97(-2)	1,71(-1)	1,80(-1) ^a	1,82(-1) ^b	1,24(7)	1,44(7)	1,43(7) ^a	1,53(7) ^b
3d ² D	4p ² P ^o	4	2	3984,67	10954,64	11242,33 ^a	0,29(-1)	1,42(-1)	1,49(-1) ^a	1,51(-1) ^b	1,24(7)	1,58(7)	1,58(7) ^a	1,68(7) ^b
3d ² D	4p ² P ^o	4	4	3984,59	10918,22	11199,30 ^a	0,33(-2)	2,85(-2)	3,00(-2) ^a	3,03(-2) ^b	1,38(6)	1,60(6)	1,59(6) ^a	1,70(6) ^b
3d ² D	5p ² P ^o	4	2	2961,23	3851,46	3887,80 ^a	9,05(-3)	4,11(-3)	3,51(-3) ^a	3,37(-3) ^b	1,38(7)	3,69(6)	3,10(6) ^a	2,33(6) ^b
3d ² D	5p ² P ^o	6	4	2960,45	3849,31	3887,13 ^a	1,09(-2)	4,93(-3)	4,27(-3) ^a	4,04(-3) ^b	1,24(7)	3,33(6)	2,82(6) ^a	2,14(6) ^b
3d ² D	5p ² P ^o	4	4	2960,41	3849,42	3885,52 ^a	1,81(-3)	8,23(-4)	7,13(-4) ^a	6,74(-4) ^b	1,38(6)	3,70(5)	3,15(5) ^a	2,37(5) ^b
3d ² D	6p ² P ^o	6	4	2598,15	2929,15	2951,84 ^a	7,10(-3)	1,43(-3)	1,21(-3) ^a	1,27(-3) ^b	1,05(7)	1,67(6)	1,39(6) ^a	1,48(6) ^b
3d ² D	6p ² P ^o	4	2	2598,56	2929,85	2951,61 ^a	5,90(-3)	1,19(-3)	1,00(-3) ^a	1,06(-3) ^b	1,19(7)	1,85(6)	1,53(6) ^a	1,65(6) ^b
3d ² D	6p ² P ^o	4	4	2598,11	2929,22	2950,91 ^a	1,18(-3)	2,38(-4)	2,03(-4) ^a	2,11(-4) ^b	1,17(6)	1,85(5)	1,55(5) ^a	1,64(5) ^b
3d ² D	7p ² P ^o	6	4	2417,90	2582,79	2600,73 ^a	5,04(-3)	6,48(-4)	5,48(-4) ^a	4,95(-4) ^b	8,63(6)	9,73(5)	8,10(5) ^a	7,43(5) ^b
3d ² D	7p ² P ^o	4	2	2418,16	2583,14	2600,34 ^a	4,21(-3)	5,40(-4)	4,51(-4) ^a	4,07(-4) ^b	9,60(6)	1,08(6)	8,90(5) ^a	8,14(5) ^b

Tablo 3.2. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)			f				A_{ji} (s ⁻¹)			
Alt seviye	Üst seviye	g_i	g_j	Bu çalışma		Diğer	Bu çalışma		Diğer		Bu çalışma		Diğer	
				MCHF+BP	HFR	çalışmalar	MCHF+BP	HFR	çalışmalar		MCHF+BP	HFR	çalışmalar	
3d ² D	7p ² P ^o	4	4	2417,87	2582,84	2600,01 ^a	8,40(-4)	1,08(-4)	9,16(-5) ^a	8,25(-5) ^b	9,59(5)	1,08(5)	9,04(4) ^a	8,25(4) ^b
3d ² D	8p ² P ^o	6	4	2312,24	2407,15	2422,87 ^a	3,76(-3)	3,60(-4)	3,03(-4) ^a	2,93(-4) ^b	7,03(6)	6,20(5)	5,15(5) ^a	5,05(5) ^b
3d ² D	8p ² P ^o	4	2	2312,40	2407,36	2422,43 ^a	3,14(-3)	3,00(-4)	2,49(-4) ^a	2,41(-4) ^b	7,84(6)	6,89(5)	5,67(5) ^a	5,54(5) ^b
3d ² D	8p ² P ^o	4	4	2312,22	2407,20	2422,25 ^a	6,26(-4)	6,00(-5)	5,07(-5) ^a	4,87(-5) ^b	7,81(5)	6,89(4)	5,76(4) ^a	5,61(4) ^b
3d ² D	9p ² P ^o	6	4	2151,57	2303,69	2317,41 ^a	3,14(-2)	2,23(-4)	1,94(-4) ^a	1,91(-4) ^b	6,79(7)	4,20(5)	3,62(5) ^a	3,60(5) ^b
3d ² D	9p ² P ^o	4	2	2153,70	2303,84	2316,96 ^a	2,56(-2)	1,85(-4)	1,60(-4) ^a	1,57(-4) ^b	7,37(7)	4,66(5)	3,97(5) ^a	3,95(5) ^b
3d ² D	9p ² P ^o	4	4	2151,54	2303,73	2316,84 ^a	5,23(-3)	3,75(-5)	3,24(-5) ^a	3,18(-5) ^b	7,54(6)	4,67(4)	4,03(4) ^a	4,00(4) ^b
3d ² D	4f ² F ^o	6	6	4582,82	4482,40	4538,71 ^a	4,74(-2)	4,44(-2)	4,67(-2) ^a	4,69(-2) ^b	1,51(7)	1,47(7)	1,51(7) ^a	1,56(7) ^b
3d ² D	4f ² F ^o	6	8	4582,79	4482,40	4539,39 ^a	9,50(-1)	8,88(-1)	9,35(-1) ^a	9,38(-1) ^b	2,26(8)	2,21(8)	2,27(8) ^a	2,34(8) ^b
3d ² D	4f ² F ^o	4	6	4582,72	4482,55	4536,52 ^a	9,95(-1)	9,33(-1)	9,82(-1) ^a	9,85(-1) ^b	2,11(8)	2,06(8)	2,12(8) ^a	2,18(8) ^b
3d ² D	5f ² F ^o	6	6	3154,54	3105,62	3132,06 ^a	7,58(-3)	7,79(-3)	7,61(-3) ^a	7,88(-3) ^b	5,08(6)	5,39(6)	5,17(6) ^a	5,45(6) ^b
3d ² D	5f ² F ^o	6	8	3154,54	3105,62	3132,05 ^a	1,51(-1)	1,56(-1)	1,52(-1) ^a	1,58(-1) ^b	7,62(7)	8,08(7)	7,76(7) ^a	8,18(7) ^b
3d ² D	5f ² F ^o	4	6	3154,49	3105,69	3131,01 ^a	1,59(-1)	1,64(-1)	1,60(-1) ^a	1,66(-1) ^b	7,11(7)	7,54(7)	7,25(7) ^a	7,63(7) ^b
3d ² D	6f ² F ^o	6	6	2697,78	2661,55	2680,96 ^a	2,60(-3)	2,82(-3)	2,67(-3) ^a	2,81(-3) ^b	2,41(6)	2,65(6)	2,48(6) ^a	2,64(6) ^b
3d ² D	6f ² F ^o	6	8	2697,78	2661,55	2680,98 ^a	5,30(-2)	5,63(-2)	5,35(-2) ^a	5,61(-2) ^b	3,62(7)	3,98(7)	3,72(7) ^a	3,96(7) ^b
3d ² D	6f ² F ^o	4	6	2697,74	2661,60	2680,20 ^a	5,52(-2)	5,92(-2)	5,62(-2) ^a	5,89(-2) ^b	3,37(7)	3,71(7)	3,48(7) ^a	3,70(7) ^b
3d ² D	7f ² F ^o	6	8	2481,15	2450,30	2466,80 ^a	2,47(-2)	2,75(-2)	2,57(-2) ^a	2,71(-2) ^b	2,01(7)	2,29(7)	2,11(7) ^a	2,26(7) ^b
3d ² D	7f ² F ^o	6	6	2481,15	2450,30	2466,79 ^a	1,24(-3)	1,37(-3)	1,28(-3) ^a	1,36(-3) ^b	1,34(6)	1,52(6)	1,41(6) ^a	1,51(6) ^b
3d ² D	7f ² F ^o	4	6	2481,12	2450,35	2466,14 ^a	2,60(-2)	2,88(-2)	2,70(-2) ^a	2,85(-2) ^b	1,88(7)	2,14(7)	1,97(7) ^a	2,11(7) ^b
3d ² D	8f ² F ^o	6	8	2358,24	2330,28	2345,11 ^a	1,342(-2)	1,57(-2)	1,46(-2) ^a	1,54(-2) ^b	1,21(7)	1,45(7)	1,33(7) ^a	1,42(7) ^b
3d ² D	8f ² F ^o	6	6	2358,24	2330,28	2345,10 ^a	0,671(-3)	7,85(-4)	7,33(-4) ^a	7,72(-4) ^b	8,05(5)	9,65(5)	8,89(5) ^a	9,49(5) ^b

Tablo 3.2. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)			f				A_{ji} (s ⁻¹)			
Alt seviye	Üst seviye	g_i	g_j	Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma		Diğer çalışmalar		Bu çalışma		Diğer çalışmalar	
				MCHF+BP	HFR		MCHF+BP	HFR			MCHF+BP	HFR		
3d ² D	8f ² F ^o	4	6	2358,21	2330,32	2344,52 ^a	1,41(-2)	1,65(-2)	1,54(-2) ^a	1,62(-2) ^b	1,13(7)	1,35(7)	1,25(7) ^a	1,33(7) ^b
3d ² D	9f ² F ^o	6	6	2280,78	2254,57	2264,23 ^a	3,61(-4)	4,97(-4)	5,42(-4) ^a	4,87(-4) ^b	4,63(5)	6,52(5)	7,06(5) ^a	6,39(5) ^b
3d ² D	9f ² F ^o	6	8	2280,78	2254,57	2264,24 ^a	7,23(-3)	9,94(-3)	1,08(-2) ^a	9,74(-3) ^b	6,95(6)	9,79(6)	1,06(7) ^a	9,59(6) ^b
3d ² D	9f ² F ^o	4	6	2280,75	2254,61	2263,69 ^a	7,58(-3)	1,04(-2)	1,14(-2) ^a	1,02(-2) ^b	6,48(6)	9,13(6)	9,89(6) ^a	8,95(6) ^b
3p ² P ^o	5s ² S	2	2	1498,93	1750,67	1753,96 ^a	5,72(-3)	1,79(-2)	1,83(-2) ^a	–	1,70(7)	3,89(7)	3,96(7) ^a	–
3p ² P ^o	5s ² S	4	2	1500,50	1753,48	1757,03 ^a	5,87(-3)	1,79(-2)	1,83(-2) ^a	–	3,48(7)	7,75(7)	7,91(7) ^a	–
4p ² P ^o	5s ² S	2	2	15302,03	8216,25	8227,85 ^a	3,08(-1)	2,61(-1)	2,69(-1) ^a	2,63(-1) ^b	8,77(6)	2,58(7)	2,65(7) ^a	2,60(7) ^b
4p ² P ^o	5s ² S	4	2	15334,13	8236,86	8251,06 ^a	3,00(-1)	2,60(-1)	2,70(-1) ^a	2,63(-1) ^b	1,76(7)	5,12(7)	5,29(7) ^a	5,16(7) ^b
5s ² S	5p ² P ^o	2	2	46281,21	21438,07	21400,95 ^a	1,49	6,10(-1)	6,08(-1) ^a	6,06(-1) ^b	2,31(6)	8,85(6)	8,85(6) ^a	8,80(6) ^b
5s ² S	5p ² P ^o	2	4	46484,72	21374,82	21332,02 ^a	0,74	1,22	1,21 ^a	1,21 ^b	2,29(6)	8,93(6)	8,92(6) ^a	8,87(6) ^b
5s ² S	6p ² P ^o	2	2	14568,74	7793,08	7793,64 ^a	2,42(-3)	1,40(-3)	1,68(-3) ^a	7,39(-4) ^b	7,61(4)	1,53(5)	1,84(5) ^a	8,12(4) ^b
5s ² S	6p ² P ^o	2	4	14554,61	7788,62	7788,74 ^a	5,26(-3)	2,80(-3)	3,59(-3) ^a	1,62(-3) ^b	8,28(4)	1,54(5)	1,97(5) ^a	8,91(4) ^b
5s ² S	7p ² P ^o	2	2	10272,47	5742,80	–	4,59(-4)	5,00(-6)	–	2,02(-5) ^b	2,90(4)	1,21(3)	–	4,08(3) ^b
5s ² S	7p ² P ^o	2	4	10267,40	5741,37	–	1,03(-3)	1,00(-5)	–	5,39(-5) ^b	3,25(4)	1,21(3)	–	5,46(3) ^b
5s ² S	8p ² P ^o	2	2	8594,02	4940,78	–	1,97(-4)	1,50(-5)	–	2,67(-6) ^b	1,78(4)	4,17(3)	–	7,30(2) ^b
5s ² S	8p ² P ^o	2	4	8591,55	4940,09	–	4,42(-4)	3,00(-5)	–	8,85(-6) ^b	2,00(4)	4,17(3)	–	1,21(3) ^b
5s ² S	9p ² P ^o	2	2	6746,47	4523,60	4522,59 ^a	3,30(-3)	3,00(-5)	2,09(-5) ^a	1,59(-6) ^b	4,84(5)	9,05(3)	6,83(3) ^a	5,18(2) ^b
5s ² S	9p ² P ^o	2	4	6725,38	4523,20	4522,14 ^a	7,34(-3)	5,50(-5)	3,42(-5) ^a	5,16(-6) ^b	5,41(5)	9,05(3)	5,58(3) ^a	8,41(2) ^b
3p ² P ^o	4d ² D	2	4	1765,58	1734,86	1734,08 ^a	4,03(-2)	3,65(-2)	4,05(-2) ^a	–	4,32(7)	4,04(7)	4,49(7) ^a	–
3p ² P ^o	4d ² D	4	6	1767,76	1737,63	1736,92 ^a	3,72(-2)	3,28(-2)	3,62(-2) ^a	–	5,29(7)	4,83(7)	5,34(7) ^a	–

Tablo 3.2. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)			f				A_{ji} (s ⁻¹)			
Alt seviye	Üst seviye	g_i	g_j	Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma		Diğer		Bu çalışma		Diğer	
				MCHF+BP	HFR		MCHF+BP	HFR	çalışmalar		MCHF+BP	HFR	çalışmalar	
3p ² P ^o	4d ² D	4	4	1767,76	1737,61	1737,09 ^a	4,13(-3)	3,65(-3)	4,01(-3) ^a	–	8,82(6)	8,05(6)	8,86(6) ^a	–
4p ² P ^o	4d ² D	2	4	28220,02	7879,23	7808,10 ^a	0,74	1,25	1,23 ^a	1,29 ^b	6,16(6)	6,73(7)	6,74(7) ^a	6,94(7) ^b
4p ² P ^o	4d ² D	4	6	28112,94	7898,49	7825,64 ^a	0,66	1,12	1,11 ^a	1,16 ^b	5,60(6)	8,02(7)	8,05(7) ^a	8,27(7) ^b
4p ² P ^o	4d ² D	4	4	28111,49	7898,18	7829,00 ^a	0,74(-1)	1,25(-1)	1,23(-1) ^a	1,29(-1) ^b	6,23(5)	1,34(7)	1,34(7) ^a	1,38(7) ^b
4d ² D	5p ² P ^o	6	4	8170,46	24048,30	24820,41 ^a	0,28(-1)	3,46(-1)	3,57(-1) ^a	3,60(-1) ^b	4,18(6)	5,98(6)	5,80(6) ^a	6,22(6) ^b
4d ² D	5p ² P ^o	4	2	8176,66	24131,28	24879,79 ^a	2,30(-2)	2,87(-1)	2,97(-1) ^a	3,00(-1) ^b	4,58(6)	6,58(6)	6,41(6) ^a	6,86(6) ^b
4d ² D	5p ² P ^o	4	4	8170,34	24051,18	24786,68 ^a	0,47(-2)	5,76(-2)	5,96(-2) ^a	6,00(-2) ^b	4,65(5)	6,64(5)	6,46(5) ^a	6,91(5) ^b
4d ² D	6p ² P ^o	6	4	5899,98	8117,44	8210,04 ^a	1,53(-2)	9,46(-3)	7,95(-3) ^a	6,70(-3) ^b	4,39(6)	1,44(6)	1,18(6) ^a	1,02(6) ^b
4d ² D	6p ² P ^o	4	2	5902,23	8122,62	8211,79 ^a	1,26(-2)	7,88(-3)	6,55(-3) ^a	5,49(-3) ^b	4,83(6)	1,59(6)	1,30(6) ^a	1,11(6) ^b
4d ² D	6p ² P ^o	4	4	5899,91	8117,77	8206,35 ^a	2,54(-3)	1,58(-3)	1,33(-3) ^a	1,12(-3) ^b	4,87(5)	1,60(5)	1,32(5) ^a	1,13(5) ^b
4d ² D	7p ² P ^o	6	4	5045,88	5918,09	5968,83 ^a	9,77(-3)	2,69(-3)	2,22(-3) ^a	2,02(-3) ^b	3,84(6)	7,69(5)	6,25(5) ^a	5,77(5) ^b
4d ² D	7p ² P ^o	4	2	5047,06	5919,79	5968,59 ^a	8,11(-3)	2,24(-3)	1,83(-3) ^a	1,66(-3) ^b	4,25(6)	8,53(5)	6,86(5) ^a	6,30(5) ^b
4d ² D	7p ² P ^o	4	4	5045,83	5918,26	5966,88 ^a	1,63(-3)	4,48(-4)	3,73(-4) ^a	3,36(-4) ^b	4,27(5)	8,54(4)	6,98(4) ^a	6,41(4) ^b
4d ² D	8p ² P ^o	6	4	4605,10	5070,36	5108,22 ^a	5,98(-3)	1,23(-3)	1,01(-3) ^a	9,85(-4) ^b	2,82(6)	4,77(5)	3,88(5) ^a	3,84(5) ^b
4d ² D	8p ² P ^o	4	2	4605,77	5071,23	5107,60 ^a	5,00(-3)	1,02(-3)	8,33(-4) ^a	8,09(-4) ^b	3,14(6)	5,29(5)	4,26(5) ^a	4,20(5) ^b
4d ² D	8p ² P ^o	4	4	4605,06	5070,49	5106,79 ^a	1,00(-3)	2,05(-4)	1,69(-4) ^a	1,64(-4) ^b	3,14(5)	5,29(4)	4,33(4) ^a	4,26(4) ^b
4d ² D	9p ² P ^o	6	4	4008,85	4632,17	4661,01 ^a	1,07(-1)	6,83(-4)	5,86(-4) ^a	5,83(-4) ^b	6,70(7)	3,19(5)	2,69(5) ^a	2,72(5) ^b
4d ² D	9p ² P ^o	4	2	4016,31	4632,70	4660,29 ^a	0,87(-1)	5,70(-4)	4,81(-4) ^a	4,79(-4) ^b	7,25(7)	3,54(5)	2,95(5) ^a	2,98(5) ^b
4d ² D	9p ² P ^o	4	4	4008,83	4632,28	4659,82 ^a	1,79(-2)	1,15(-4)	9,79(-5) ^a	9,71(-5) ^b	7,45(6)	3,54(4)	3,01(4) ^a	3,02(4) ^b
4d ² D	4f ² F ^o	6	6	355064,35	204457,17	–	1,56(-3)	2,75(-3)	–	2,73(-3) ^b	8,25(1)	4,38(2)	–	4,37(2) ^b
4d ² D	4f ² F ^o	6	8	354909,43	204456,75	–	3,12(-2)	5,49(-2)	–	5,46(-2) ^b	1,24(3)	6,57(3)	–	6,57(3) ^b

Tablo 3.2. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)		f					A_{ji} (s ⁻¹)			
Alt seviye	Üst seviye	g_i	g_j	Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma		Diğer çalışmalar		Bu çalışma		Diğer çalışmalar	
				MCHF+BP	HFR		MCHF+BP	HFR			MCHF+BP	HFR		
4d ² D	4f ² F ^o	4	6	354832,02	204665,98	–	3,27(-2)	5,76(-2)	–	5,73(-2) ^b	1,16(3)	6,12(3)	–	6,10(3) ^b
4d ² D	5f ² F ^o	6	6	9841,59	9634,56	9774,30 ^a	4,03(-2)	3,62(-2)	3,94(-2) ^a	3,92(-2) ^b	2,77(6)	2,60(6)	2,75(6) ^a	2,82(6) ^b
4d ² D	5f ² F ^o	6	8	9841,53	9634,56	9774,27 ^a	8,06(-1)	7,25(-1)	7,88(-1) ^a	7,84(-1) ^b	4,16(7)	3,91(7)	4,13(7) ^a	4,23(7) ^b
4d ² D	5f ² F ^o	4	6	9841,41	9635,02	9769,06 ^a	8,46(-1)	7,61(-1)	8,27(-1) ^a	8,23(-1) ^b	3,88(7)	3,65(7)	3,85(7) ^a	3,94(7) ^b
4d ² D	6f ² F ^o	6	6	6440,04	6348,52	6409,01 ^a	8,77(-3)	8,57(-3)	8,77(-3) ^a	8,84(-3) ^b	1,41(6)	1,42(6)	1,42(6) ^a	1,46(6) ^b
4d ² D	6f ² F ^o	6	8	6440,03	6348,52	6409,11 ^a	1,75(-1)	1,71(-1)	1,75(-1) ^a	1,77(-1) ^b	2,12(7)	2,13(7)	2,14(7) ^a	2,19(7) ^b
4d ² D	6f ² F ^o	4	6	6439,96	6348,72	6406,76 ^a	1,84(-1)	1,80(-1)	1,84(-1) ^a	1,86(-1) ^b	1,98(7)	1,99(7)	2,00(7) ^a	2,05(7) ^b
4d ² D	7f ² F ^o	6	8	5329,35	5265,68	5307,48 ^a	6,86(-2)	6,98(-2)	6,99(-2) ^a	7,14(-2) ^b	1,21(7)	1,26(7)	1,24(7) ^a	1,29(7) ^b
4d ² D	7f ² F ^o	6	6	5329,35	5265,68	5307,44 ^a	3,43(-3)	3,49(-3)	3,49(-3) ^a	3,57(-3) ^b	8,05(5)	8,40(5)	8,27(5) ^a	8,59(5) ^b
4d ² D	7f ² F ^o	4	6	5329,30	5265,82	5305,89 ^a	7,20(-2)	7,33(-2)	7,34(-2) ^a	7,50(-2) ^b	1,13(7)	1,18(7)	1,16(7) ^a	1,20(7) ^b
4d ² D	8f ² F ^o	6	8	4794,19	4740,93	4774,43 ^a	3,41(-2)	3,63(-2)	3,61(-2) ^a	3,70(-2) ^b	7,43(6)	8,08(6)	7,91(6) ^a	8,23(6) ^b
4d ² D	8f ² F ^o	6	6	4794,19	4740,93	4774,39 ^a	1,70(-3)	1,82(-3)	1,80(-3) ^a	1,85(-3) ^b	4,95(5)	5,39(5)	5,27(5) ^a	5,49(5) ^b
4d ² D	8f ² F ^o	4	6	4794,15	4741,04	4773,14 ^a	3,58(-2)	3,81(-2)	3,79(-2) ^a	3,88(-2) ^b	6,93(6)	7,54(6)	7,39(6) ^a	7,68(6) ^b
4d ² D	9f ² F ^o	6	6	4484,67	4437,74	4450,75 ^a	0,91(-3)	1,08(-3)	1,25(-3) ^a	1,10(-3) ^b	3,02(5)	3,67(5)	4,21(5) ^a	3,73(5) ^b
4d ² D	9f ² F ^o	6	8	4484,67	4437,74	4450,77 ^a	1,82(-2)	2,17(-2)	2,50(-2) ^a	2,20(-2) ^b	4,53(6)	5,50(6)	6,32(6) ^a	5,59(6) ^b
4d ² D	9f ² F ^o	4	6	4484,63	4437,84	4449,67 ^a	1,91(-2)	2,27(-2)	2,63(-2) ^a	2,31(-2) ^b	4,23(6)	5,14(6)	5,90(6) ^a	5,22(6) ^b
3p ² P ^o	6s ² S	2	2	1387,03	1480,88	1483,35 ^a	2,80(-3)	6,23(-3)	6,33(-3) ^a	–	9,71(6)	1,89(7)	1,92(7) ^a	–
3p ² P ^o	6s ² S	4	2	1388,38	1482,89	1485,55 ^a	2,89(-3)	6,22(-3)	6,33(-3) ^a	–	2,00(7)	1,89(7)	3,82(7) ^a	–
4p ² P ^o	6s ² S	2	2	8390,33	4429,25	4433,68 ^a	5,48(-2)	3,06(-2)	3,10(-2) ^a	3,37(-2) ^b	5,19(6)	1,04(7)	1,05(7) ^a	–
4p ² P ^o	6s ² S	4	2	8399,97	4435,23	4440,41 ^a	5,50(-2)	3,05(-2)	3,10(-2) ^a	3,38(-2) ^b	1,04(7)	2,07(7)	2,09(7) ^a	–
5p ² P ^o	6s ² S	2	2	30939,28	17416,75	17457,80 ^a	5,11(-1)	3,79(-1)	3,87(-1) ^a	3,80(-1) ^b	3,56(6)	8,34(6)	8,46(6) ^a	8,35(6) ^b

Tablo 3.2. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)			f				A_{ji} (s ⁻¹)			
Alt seviye	Üst seviye	g_i	g_j	Bu çalışma		Diğer	Bu çalışma		Diğer		Bu çalışma		Diğer	
				MCHF+BP	HFR	çalışmalar	MCHF+BP	HFR	çalışmalar		MCHF+BP	HFR	çalışmalar	
5p ² P ^o	6s ² S	4	2	31030,10	17458,71	17503,94 ^a	5,14(-1)	3,79(-1)	3,88(-1) ^a	3,79(-1) ^b	7,12(6)	1,66(7)	1,69(7) ^a	1,66(7) ^b
6s ² S	6p ² P ^o	2	2	67538,95	41225,21	41149,19 ^a	9,53(-1)	7,49(-1)	7,47(-1) ^a	7,47(-1) ^b	1,39(6)	2,94(6)	2,94(6) ^a	2,97(6) ^b
6s ² S	6p ² P ^o	2	4	67236,29	41100,66	41012,85 ^a	1,91	1,50	1,49 ^a	1,50 ^b	1,41(6)	2,97(6)	2,97(6) ^a	3,00(6) ^b
6s ² S	7p ² P ^o	2	2	22981,28	14271,65	14271,55 ^a	1,50(-2)	2,87(-3)	3,31(-3) ^a	2,45(-3) ^b	1,90(5)	9,38(4)	1,09(5) ^a	8,03(4) ^b
6s ² S	7p ² P ^o	2	4	22955,94	14262,79	14261,75 ^a	3,11(-2)	5,74(-3)	6,99(-3) ^a	4,88(-3) ^b	1,97(5)	9,40(4)	1,15(5) ^a	8,00(4) ^b
6s ² S	8p ² P ^o	2	2	15989,54	10169,32	10171,64 ^a	3,77(-3)	1,05(-4)	1,58(-4) ^a	1,98(-4) ^b	9,83(4)	6,91(3)	1,02(4) ^a	1,28(4) ^b
6s ² S	8p ² P ^o	2	4	15981,00	10166,37	10168,43 ^a	0,78(-2)	2,15(-4)	3,64(-4) ^a	3,82(-4) ^b	1,02(5)	6,91(3)	1,17(4) ^a	1,23(4) ^b
3p ² P ^o	5d ² D	2	4	1501,04	1476,00	1476,64 ^a	7,83(-3)	6,48(-3)	7,67(-3) ^a	—	1,16(7)	0,99(7)	1,17(7) ^a	—
3p ² P ^o	5d ² D	4	6	1502,61	1478,00	1478,75 ^a	7,17(-3)	5,83(-3)	6,83(-3) ^a	—	1,41(7)	1,18(7)	1,39(7) ^a	—
3p ² P ^o	5d ² D	4	4	1502,61	1478,00	1478,82 ^a	7,97(-4)	6,48(-3)	7,54(-4) ^a	—	2,35(6)	1,97(6)	2,30(6) ^a	—
4p ² P ^o	5d ² D	2	4	15525,10	4385,88	4374,22 ^a	1,40	7,76(-2)	8,60(-2) ^a	9,04(-2) ^b	1,94(7)	1,35(7)	1,50(7) ^a	1,57(7) ^b
4p ² P ^o	5d ² D	4	6	15557,93	4391,79	4380,17 ^a	1,26	6,97(-2)	7,71(-2) ^a	8,11(-2) ^b	2,32(7)	1,61(7)	1,79(7) ^a	1,87(7) ^b
4p ² P ^o	5d ² D	4	4	15558,15	4391,74	4380,77 ^a	1,41(-1)	7,75(-3)	8,54(-3) ^a	9,01(-3) ^b	3,87(6)	2,68(6)	2,97(6) ^a	3,12(6) ^b
5p ² P ^o	5d ² D	2	4	44540,62	16764,88	16570,91 ^a	0,97	1,52	1,48 ^a	1,46 ^b	3,27(6)	1,80(7)	1,80(7) ^a	1,73(7) ^b
5p ² P ^o	5d ² D	4	6	44355,47	16804,46	16603,78 ^a	0,88	1,36	1,33 ^a	1,31 ^b	2,97(6)	2,15(7)	2,15(7) ^a	2,07(7) ^b
5p ² P ^o	5d ² D	4	4	44353,74	16803,76	16612,48 ^a	0,98(-1)	1,51(-1)	1,48(-1) ^a	1,46(-1) ^b	3,30(5)	3,58(6)	3,58(6) ^a	3,44(6) ^b
5d ² D	6p ² P ^o	6	4	14358,56	45247,87	46980,66 ^a	0,24(-1)	5,16(-1)	5,29(-1) ^a	5,22(-1) ^b	1,18(6)	2,52(6)	2,39(6) ^a	2,55(6) ^b
5d ² D	6p ² P ^o	4	2	14372,13	45404,00	47089,66 ^a	1,99(-2)	4,28(-1)	4,38(-1) ^a	4,33(-1) ^b	1,29(6)	2,77(6)	2,64(6) ^a	2,80(6) ^b
5d ² D	6p ² P ^o	4	4	14358,38	45252,96	46911,20 ^a	0,40(-2)	8,59(-2)	8,78(-2) ^a	8,69(-2) ^b	1,31(5)	2,80(5)	2,66(5) ^a	2,83(5) ^b
5d ² D	7p ² P ^o	6	4	10169,45	14731,34	14920,83 ^a	0,96(-2)	1,33(-2)	1,07(-2) ^a	1,14(-2) ^b	9,29(5)	6,11(5)	4,84(5) ^a	5,25(5) ^b
5d ² D	7p ² P ^o	4	2	10174,33	14741,33	14924,54 ^a	0,79(-2)	1,10(-2)	8,87(-3) ^a	9,47(-3) ^b	1,02(6)	6,78(5)	5,31(5) ^a	5,82(5) ^b

Tablo 3.2. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)			f				A_{ji} (s ⁻¹)			
Alt seviye	Üst seviye	g_i	g_j	Bu çalışma		Diğer	Bu çalışma		Diğer		Bu çalışma		Diğer	
				MCHF+BP	HFR	çalışmalar	MCHF+BP	HFR	çalışmalar		MCHF+BP	HFR	çalışmalar	
5d ² D	7p ² P ^o	4	4	10169,36	14731,88	14913,82 ^a	1,60(-3)	2,21(-3)	1,80(-3) ^a	1,90(-3) ^b	1,03(5)	6,79(4)	5,41(4) ^a	5,83(4) ^b
5d ² D	8p ² P ^o	6	4	8522,88	10402,20	10499,09 ^a	4,75(-3)	3,69(-3)	2,94(-3) ^a	2,86(-3) ^b	6,55(5)	3,42(5)	2,67(5) ^a	2,64(5) ^b
5d ² D	8p ² P ^o	4	2	8525,24	10405,56	10499,03 ^a	3,95(-3)	3,08(-3)	2,42(-3) ^a	2,34(-3) ^b	7,25(5)	3,79(5)	2,93(5) ^a	2,88(5) ^b
5d ² D	8p ² P ^o	4	4	8522,81	10402,47	10495,62 ^a	7,92(-4)	6,15(-4)	4,93(-4) ^a	4,76(-4) ^b	7,28(4)	3,80(4)	2,98(4) ^a	2,93(4) ^b
5d ² D	9p ² P ^o	6	4	6683,22	8711,52	8769,69 ^a	7,06(-2)	1,68(-3)	1,37(-3) ^a	1,38(-3) ^b	1,58(7)	2,21(5)	1,79(5) ^a	1,81(5) ^b
5d ² D	9p ² P ^o	4	2	6704,02	8713,19	8768,95 ^a	5,74(-2)	1,40(-3)	1,13(-3) ^a	1,13(-3) ^b	1,71(7)	2,46(5)	1,96(5) ^a	1,98(5) ^b
5d ² D	9p ² P ^o	4	4	6683,19	8711,71	8767,26 ^a	1,17(-2)	2,80(-4)	2,30(-4) ^a	2,29(-4) ^b	1,76(6)	2,46(4)	2,00(4) ^a	2,02(4) ^b
4f ² F ^o	5d ² D	6	6	10306,05	10395,01	—	0,75(-3)	1,05(-3)	—	8,55(-4) ^b	4,69(4)	6,50(4)	—	5,28(4) ^b
4f ² F ^o	5d ² D	6	4	10306,14	10394,74	10295,68 ^a	1,05(-2)	1,47(-2)	1,15(-2) ^a	1,20(-2) ^b	9,86(5)	1,36(6)	1,09(6) ^a	1,11(6) ^b
4f ² F ^o	5d ² D	8	6	10306,18	10395,01	10288,83 ^a	1,12(-2)	1,58(-2)	1,22(-2) ^a	1,28(-2) ^b	9,39(5)	1,30(6)	1,03(6) ^a	1,06(6) ^b
5d ² D	5f ² F ^o	6	6	567292,88	370096,24	—	3,48(-3)	5,38(-3)	—	5,38(-3) ^b	0,72(2)	2,62(2)	—	2,62(2) ^b
5d ² D	5f ² F ^o	6	8	567095,13	370094,87	—	6,96(-2)	1,07(-1)	—	1,08(-1) ^b	1,08(3)	3,93(3)	—	3,93(3) ^b
5d ² D	5f ² F ^o	4	6	567010,42	370437,61	—	0,731(-1)	1,13(-1)	—	1,13(-1) ^b	1,01(3)	3,65(3)	—	3,65(3) ^b
5d ² D	6f ² F ^o	6	6	18040,34	17722,33	18013,60 ^a	3,75(-2)	3,29(-2)	3,63(-2) ^a	3,44(-2) ^b	7,69(5)	6,98(5)	7,46(5) ^a	7,31(5) ^b
5d ² D	6f ² F ^o	6	8	18040,23	17722,32	18014,38 ^a	7,50(-1)	6,57(-1)	7,26(-1) ^a	6,88(-1) ^b	1,16(7)	1,05(7)	1,12(7) ^a	1,10(7) ^b
5d ² D	6f ² F ^o	4	6	18040,05	17723,11	18003,38 ^a	7,87(-1)	6,90(-1)	7,61(-1) ^a	7,23(-1) ^b	1,08(7)	9,77(6)	1,04(7) ^a	1,02(7) ^b
5d ² D	7f ² F ^o	6	8	11390,47	11258,98	11376,99 ^a	1,80(-1)	1,73(-1)	1,80(-1) ^a	1,84(-1) ^b	7,01(6)	6,82(6)	6,97(6) ^a	7,25(6) ^b
5d ² D	7f ² F ^o	6	6	11390,50	11258,98	11376,80 ^a	9,10(-3)	8,64(-3)	9,03(-3) ^a	9,18(-3) ^b	4,67(5)	4,55(5)	4,65(5) ^a	4,83(5) ^b
5d ² D	7f ² F ^o	4	6	11390,38	11259,30	11372,72 ^a	0,91(-1)	1,81(-1)	1,89(-1) ^a	1,93(-1) ^b	6,54(6)	6,36(6)	6,51(6) ^a	6,76(6) ^b
5d ² D	8f ² F ^o	6	8	9194,01	9104,32	9180,01 ^a	7,46(-2)	7,44(-2)	7,65(-2) ^a	7,65(-2) ^b	4,42(6)	4,49(6)	4,54(6) ^a	4,62(6) ^b
5d ² D	8f ² F ^o	6	6	9194,02	9104,32	9179,87 ^a	3,73(-3)	3,72(-3)	3,82(-3) ^a	3,82(-3) ^b	2,95(5)	3,00(5)	3,03(5) ^a	3,08(5) ^b

Tablo 3.2. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)			f				A_{ji} (s ⁻¹)			
Alt seviye	Üst seviye	g_i	g_j	Bu çalışma		Diğer	Bu çalışma		Diğer	Bu çalışma		Diğer	Bu çalışma	
				MCHF+BP	HFR	çalışmalar	MCHF+BP	HFR	çalışmalar	MCHF+BP	HFR	çalışmalar	MCHF+BP	HFR
5d ² D	8f ² F ^o	4	6	9193,94	9104,52	9177,22 ^a	7,83(-2)	7,82(-2)	8,03(-2) ^a	8,03(-2) ^b	4,12(6)	4,19(6)	4,24(6) ^a	4,31(6) ^b
5d ² D	9f ² F ^o	6	6	8119,37	8048,35	8053,84 ^a	1,84(-3)	2,01(-3)	2,37(-3) ^a	2,09(-3) ^b	1,87(5)	2,06(5)	2,44(5) ^a	2,15(5) ^b
5d ² D	9f ² F ^o	6	8	8119,36	8048,35	8053,90 ^a	3,69(-2)	4,01(-2)	4,74(-2) ^a	4,18(-2) ^b	2,80(6)	3,10(6)	3,66(6) ^a	3,23(6) ^b
5d ² D	9f ² F ^o	4	6	8119,31	8048,52	8051,80 ^a	3,87(-2)	4,21(-2)	4,98(-2) ^a	4,38(-2) ^b	2,61(6)	2,89(6)	3,41(6) ^a	3,01(6) ^b
4f ² F ^o	5g ² G	6	8	10164,95	10094,89	–	1,36	1,33	–	1,35 ^b	6,48(7)	6,54(7)	–	6,62(7) ^b
4f ² F ^o	5g ² G	8	8	10165,08	10094,89	–	3,72(-2)	3,70(-2)	–	3,75(-2) ^b	2,40(6)	2,42(6)	–	2,45(6) ^b
4f ² F ^o	5g ² G	8	10	10165,04	10094,89	–	1,30	1,30	–	1,31 ^b	6,72(7)	6,78(7)	–	6,87(7) ^b
5g ² G	6f ² F ^o	8	6	18489,59	18668,56	–	7,20(-3)	7,88(-3)	–	7,11(-3) ^b	1,87(5)	2,01(5)	–	1,82(5) ^b
5g ² G	6f ² F ^o	8	8	18489,47	18668,56	–	2,66(-4)	2,93(-4)	–	2,63(-4) ^b	5,20(3)	5,59(3)	–	5,04(3) ^b
5g ² G	6f ² F ^o	10	8	18489,60	18668,56	–	7,46(-3)	8,18(-3)	–	7,38(-3) ^b	1,82(5)	1,96(5)	–	1,77(5) ^b
5g ² G	7f ² F ^o	8	8	11567,93	11633,59	–	4,23(-5)	4,63(-5)	–	4,16(-5) ^b	2,11(3)	2,29(3)	–	2,05(3) ^b
5g ² G	7f ² F ^o	8	6	11567,96	11633,59	–	1,14(-3)	1,25(-3)	–	1,12(-3) ^b	7,59(4)	8,24(4)	–	7,39(4) ^b
5g ² G	7f ² F ^o	10	8	11567,99	11633,59	–	1,20(-3)	1,30(-3)	–	1,17(-3) ^b	7,38(4)	8,01(4)	–	7,19(4) ^b
5g ² G	8f ² F ^o	8	8	9309,25	9347,72	–	1,39(-5)	1,50(-5)	–	1,38(-5) ^b	1,08(3)	1,18(3)	–	1,05(3) ^b
5g ² G	8f ² F ^o	8	6	9309,26	9347,72	–	3,78(-4)	4,18(-4)	–	3,72(-4) ^b	3,89(4)	4,25(4)	–	3,78(4) ^b
5g ² G	8f ² F ^o	10	8	9309,29	9347,72	–	3,92(-4)	4,33(-4)	–	3,86(-4) ^b	3,78(4)	4,13(4)	–	3,68(4) ^b
5g ² G	9f ² F ^o	8	6	8209,11	8237,98	–	1,73(-4)	1,93(-4)	–	1,70(-4) ^b	2,29(4)	2,52(4)	–	2,23(4) ^b
5g ² G	9f ² F ^o	8	8	8209,10	8237,98	–	6,41D-06	7,50(-6)	–	6,30(-6) ^b	6,35(2)	7,00(2)	–	6,20(2) ^b
5g ² G	9f ² F ^o	10	8	8209,13	8237,98	–	1,80(-4)	1,99(-4)	–	1,77(-4) ^b	2,22(4)	2,45(4)	–	2,17(4) ^b
5g ² G	6h ² H ^o	8	10	18484,97	18627,87	–	1,69	1,68	–	1,68 ^b	2,64(7)	2,58(7)	–	2,58(7) ^b

Tablo 3.2. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)			f				A_{ji} (s ⁻¹)			
Alt seviye	Üst seviye	g_i	g_j	Bu çalışma		Diğer	Bu çalışma		Diğer	Bu çalışma		Diğer	Bu çalışma	
				MCHF+BP	HFR	çalışmalar	MCHF+BP	HFR	çalışmalar	MCHF+BP	HFR	çalışmalar	MCHF+BP	HFR
5g ² G	6h ² H ^o	10	12	18485,06	18627,87	–	1,65	1,65	–	1,65 ^b	2,70(7)	2,64(7)	–	2,64(7) ^b
5g ² G	6h ² H ^o	10	10	18485,10	18627,87	–	3,07(-2)	3,05(-2)	–	3,05(-2) ^b	5,99(5)	5,86(5)	–	5,86(5) ^b
5g ² G	7h ² H ^o	8	10	11569,86	11623,31	–	2,00(-1)	2,02(-1)	–	2,02(-1) ^b	8,08(6)	7,98(6)	–	7,98(6) ^b
5g ² G	7h ² H ^o	10	12	11569,90	11623,31	–	2,00(-1)	1,98(-1)	–	1,98(-1) ^b	8,27(6)	8,16(6)	–	8,16(6) ^b
5g ² G	7h ² H ^o	10	10	11569,91	11623,31	–	3,70(-3)	3,67(-3)	–	3,67(-3) ^b	1,84(5)	1,81(5)	–	1,81(5) ^b
5g ² G	8h ² H ^o	8	10	9308,67	9343,17	–	6,01(-2)	6,00(-2)	–	6,00(-2) ^b	3,70(6)	3,67(6)	–	3,67(6) ^b
5g ² G	8h ² H ^o	10	12	9308,70	9343,17	–	5,90(-2)	5,90(-2)	–	5,89(-2) ^b	3,79(6)	3,75(6)	–	3,75(6) ^b
5g ² G	8h ² H ^o	10	10	9308,71	9343,17	–	1,09(-3)	1,09(-3)	–	1,09(-3) ^b	8,42(4)	8,34(4)	–	8,33(4) ^b
5g ² G	9h ² H ^o	8	10	8208,77	8235,47	–	2,60(-2)	2,60(-2)	–	2,59(-2) ^b	2,06(6)	2,05(6)	–	2,04(6) ^b
5g ² G	9h ² H ^o	10	12	8208,79	8235,47	–	2,55(-2)	2,55(-2)	–	2,55(-2) ^b	2,11(6)	2,09(6)	–	2,09(6) ^b
5g ² G	9h ² H ^o	10	10	8208,79	8235,47	–	4,73(-4)	4,73(-4)	–	4,72(-4) ^b	4,68(4)	4,65(4)	–	4,64(4) ^b
3p ² P ^o	7s ² S	2	2	1327,31	1367,71	–	1,58(-3)	3,00(-3)	–	–	5,98(6)	1,07(7)	–	–
3p ² P ^o	7s ² S	4	2	1328,55	1369,42	–	1,65(-3)	3,00(-3)	–	–	1,25(7)	2,13(7)	–	–
4p ² P ^o	7s ² S	2	2	6594,89	3550,53	3553,73 ^a	2,99(-2)	1,05(-2)	1,06(-2) ^a	1,22(-2) ^b	4,58(6)	5,57(6)	5,62(6) ^a	–
4p ² P ^o	7s ² S	4	2	6600,85	3554,37	3558,05 ^a	3,00(-2)	1,05(-2)	1,06(-2) ^a	1,22(-2) ^b	0,92(7)	1,11(7)	1,12(7) ^a	–
5p ² P ^o	7s ² S	2	2	15439,53	8826,75	8839,46 ^a	8,42(-2)	4,29(-2)	4,30(-2) ^a	4,69(-2) ^b	2,35(6)	3,67(6)	3,67(6) ^a	4,02(6) ^b
5p ² P ^o	7s ² S	4	2	15462,11	8837,51	8851,27 ^a	8,43(-2)	4,28(-2)	4,30(-2) ^a	4,69(-2) ^b	4,70(6)	7,31(6)	7,32(6) ^a	8,02(6) ^b
6p ² P ^o	7s ² S	2	2	56685,66	31626,55	31699,40 ^a	7,30(-1)	4,97(-1)	5,05(-1) ^a	4,96(-1) ^b	1,52(6)	3,31(6)	3,35(6) ^a	3,31(6) ^b
6p ² P ^o	7s ² S	4	2	56900,63	31700,25	31780,78 ^a	7,36(-1)	4,95(-1)	5,06(-1) ^a	4,95(-1) ^b	3,03(6)	6,58(6)	6,69(6) ^a	6,57(6) ^b
7s ² S	7p ² P ^o	2	2	90364,83	70457,27	70317,06 ^a	1,15	8,87(-1)	8,85(-1) ^a	8,86(-1) ^b	0,94(6)	1,19(6)	1,19(6) ^a	1,19(6) ^b
7s ² S	7p ² P ^o	2	4	89974,29	70241,93	70079,67 ^a	2,30	1,78	1,77 ^a	1,78 ^b	0,95(6)	1,20(6)	1,20(6) ^a	1,20(6) ^b

Tablo 3.2. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)			f				A_{ji} (s ⁻¹)			
Alt seviye	Üst seviye	g_i	g_j	Bu çalışma		Diğer	Bu çalışma		Diğer		Bu çalışma		Diğer	
				MCHF+BP	HFR	çalışmalar	MCHF+BP	HFR	çalışmalar		MCHF+BP	HFR	çalışmalar	
7s ² S	8p ² P ^o	2	2	33220,06	23552,13	23549,11 ^a	3,54(-2)	4,48(-3)	5,07(-3) ^a	3,92(-3) ^b	2,39(5)	5,38(4)	6,10(4) ^a	3,93(4) ^b
7s ² S	8p ² P ^o	2	4	33183,19	23536,33	23531,93 ^a	0,80(-1)	8,96(-3)	1,06(-2) ^a	7,80(-3) ^b	2,43(5)	5,39(4)	6,39(4) ^a	4,14(4) ^b
7s ² S	9p ² P ^o	2	2	16137,39	16359,92	16324,83 ^a	1,17(-1)	2,90(-4)	3,85(-4) ^a	3,86(-4) ^b	2,99(6)	7,17(3)	9,63(3) ^a	9,61(3) ^b
7s ² S	9p ² P ^o	2	4	16017,22	16354,70	16319,01 ^a	2,42(-1)	5,75(-4)	8,47(-4) ^a	7,53(-4) ^b	3,14(6)	7,18(3)	1,06(4) ^a	9,38(3) ^b
3p ² P ^o	6d ² D	2	4	1388,13	1365,54	1366,74 ^a	2,60(-3)	2,04(-3)	2,53(-3) ^a	–	4,51(6)	3,64(6)	4,51(6) ^a	–
3p ² P ^o	6d ² D	4	6	1389,48	1367,26	1368,57 ^a	2,40(-3)	1,83(-3)	2,25(-3) ^a	–	5,52(6)	4,35(6)	5,33(6) ^a	–
3p ² P ^o	6d ² D	4	4	1389,48	1367,25	1368,60 ^a	2,66(-4)	2,00(-3)	2,47(-4) ^a	–	9,19(5)	7,26(5)	8,80(6) ^a	–
4p ² P ^o	6d ² D	2	4	8430,78	3535,97	3532,72 ^a	1,42(-1)	1,86(-2)	2,17(-2) ^a	2,28(-2) ^b	6,66(6)	4,97(6)	5,81(6) ^a	6,07(6) ^b
4p ² P ^o	6d ² D	4	6	8440,48	3539,82	3536,77 ^a	1,27(-1)	1,67(-2)	1,94(-2) ^a	2,04(-2) ^b	7,95(6)	5,94(6)	6,91(6) ^a	7,26(6) ^b
4p ² P ^o	6d ² D	4	4	8440,52	3539,79	3536,99 ^a	1,41(-2)	1,86(-3)	2,15(-3) ^a	2,27(-3) ^b	1,32(6)	9,90(5)	1,15(6) ^a	1,21(6) ^b
5p ² P ^o	6d ² D	2	4	31496,54	8737,32	8710,60 ^a	1,82	1,12(-1)	1,22(-1) ^a	1,29(-1) ^b	6,14(6)	4,90(6)	5,38(6) ^a	5,62(6) ^b
5p ² P ^o	6d ² D	4	6	31590,18	8748,06	8720,70 ^a	1,65	1,01(-1)	1,09(-1) ^a	1,15(-1) ^b	7,35(6)	5,86(6)	6,42(6) ^a	6,69(6) ^b
5p ² P ^o	6d ² D	4	4	31590,67	8747,87	8722,07 ^a	1,83(-1)	1,12(-2)	1,21(-2) ^a	1,28(-2) ^b	1,22(6)	9,77(5)	1,07(6) ^a	1,12(6) ^b
6p ² P ^o	6d ² D	2	4	65027,44	30507,79	30102,49 ^a	1,29	1,77	1,71 ^a	1,70 ^b	2,03(6)	6,33(6)	6,30(6) ^a	6,09(6) ^b
6p ² P ^o	6d ² D	4	6	64748,85	30578,69	30159,48 ^a	1,16	1,59	1,54 ^a	1,53 ^b	1,84(6)	7,54(6)	7,54(6) ^a	7,29(6) ^b
6p ² P ^o	6d ² D	4	4	64746,82	30576,37	30175,87 ^a	1,29(-1)	1,76(-1)	1,71(-1) ^a	1,70(-1) ^b	2,05(5)	1,26(6)	1,26(6) ^a	1,22(6) ^b
6d ² D	7p ² P ^o	6	4	22658,74	76455,58	79504,20 ^a	0,382(-1)	6,82(-1)	6,93(-1) ^a	6,92(-1) ^b	7,45(5)	1,17(6)	1,10(6) ^a	1,19(6) ^b
6d ² D	7p ² P ^o	4	2	22683,18	76725,42	79695,26 ^a	0,315(-1)	5,67(-1)	5,77(-1) ^a	5,75(-1) ^b	8,17(5)	1,28(6)	1,21(6) ^a	1,30(6) ^b
6d ² D	7p ² P ^o	4	4	22658,49	76470,14	79390,47 ^a	0,637(-2)	1,14(-1)	1,15(-1) ^a	1,15(-1) ^b	8,27(4)	1,30(5)	1,22(5) ^a	1,32(5) ^b
6d ² D	8p ² P ^o	6	4	15836,43	24195,21	24507,44 ^a	1,24(-2)	1,65(-2)	1,31(-2) ^a	–	4,95(5)	2,81(5)	2,17(5) ^a	–
6d ² D	8p ² P ^o	4	2	15844,71	24213,37	24515,25 ^a	1,03(-2)	1,37(-2)	1,08(-2) ^a	–	5,47(5)	3,12(5)	2,38(5) ^a	–

Tablo 3.2. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)			f				A_{ji} (s ⁻¹)			
Alt seviye	Üst seviye	g_i	g_j	Bu çalışma		Diğer	Bu çalışma		Diğer		Bu çalışma		Diğer	
				MCHF+BP	HFR	çalışmalar	MCHF+BP	HFR	çalışmalar		MCHF+BP	HFR	çalışmalar	
6d ² D	8p ² P ^o	4	4	15836,31	24196,67	24496,62 ^a	2,07(-3)	2,75(-3)	2,19(-3) ^a	–	5,51(4)	3,13(4)	2,43(4) ^a	–
6d ² D	9p ² P ^o	6	4	10477,50	16670,14	16782,26 ^a	1,11(-1)	4,50(-3)	3,57(-3) ^a	3,54(-3) ^b	1,01(7)	1,62(5)	1,27(5) ^a	1,27(5) ^b
6d ² D	9p ² P ^o	4	2	10528,74	16676,26	16783,35 ^a	0,91(-1)	3,75(-3)	2,93(-3) ^a	2,89(-3) ^b	1,09(7)	1,80(5)	1,39(5) ^a	1,39(5) ^b
6d ² D	9p ² P ^o	4	4	10477,45	16670,83	16777,19 ^a	1,86(-2)	7,50(-4)	6,00(-4) ^a	5,89(-4) ^b	1,13(6)	1,80(4)	1,42(4) ^a	1,41(4) ^b
4f ² F ^o	6d ² D	6	6	6612,39	6622,39	–	1,31(-4)	1,80(-4)	–	1,42(-4) ^b	1,99(4)	2,73(4)	–	2,16(4) ^b
4f ² F ^o	6d ² D	6	4	6612,41	6622,28	6597,00 ^a	1,83(-3)	2,52(-3)	2,03(-3) ^a	1,99(-3) ^b	4,19(5)	5,74(5)	4,66(5) ^a	4,55(5) ^b
4f ² F ^o	6d ² D	8	6	6612,44	6622,39	6594,78 ^a	1,96(-3)	2,69(-3)	2,16(-3) ^a	2,13(-3) ^b	3,99(5)	5,46(5)	4,42(5) ^a	4,33(5) ^b
5f ² F ^o	6d ² D	6	6	19070,21	19193,49	18993,36 ^a	1,92(-3)	2,63(-3)	2,10(-3) ^a	2,17(-3) ^b	3,54(4)	4,76(4)	3,88(4) ^a	3,93(4) ^b
5f ² F ^o	6d ² D	6	4	19070,39	19192,57	18999,86 ^a	2,70(-2)	3,68(-2)	2,95(-2) ^a	3,04(-2) ^b	7,43(5)	10,0(5)	8,19(5) ^a	8,26(5) ^b
5f ² F ^o	6d ² D	8	6	19070,44	19193,49	18993,46 ^a	2,89(-2)	3,94(-2)	3,15(-2) ^a	3,26(-2) ^b	7,07(5)	9,52(5)	7,77(5) ^a	7,87(5) ^b
6d ² D	7f ² F ^o	6	8	29768,93	29398,79	29891,52 ^a	7,32(-1)	6,28(-1)	7,02(-1) ^a	6,97(-1) ^b	4,13(6)	3,64(6)	3,93(6) ^a	4,03(6) ^b
6d ² D	7f ² F ^o	6	6	29769,12	29398,80	29890,23 ^a	3,66(-2)	3,14(-2)	3,51(-2) ^a	3,48(-2) ^b	2,76(5)	2,43(5)	2,62(5) ^a	2,69(5) ^b
6d ² D	7f ² F ^o	4	6	29768,69	29400,95	29874,14 ^a	7,70(-1)	6,60(-1)	7,36(-1) ^a	7,32(-1) ^b	3,86(6)	3,39(6)	3,66(6) ^a	3,76(6) ^b
6d ² D	8f ² F ^o	6	8	18321,48	18170,25	18352,04 ^a	0,18	1,73(-1)	1,84(-1) ^a	1,86(-1) ^b	2,76(6)	2,62(6)	2,73(6) ^a	2,82(6) ^b
6d ² D	8f ² F ^o	6	6	18321,53	18170,26	18351,46 ^a	0,92(-2)	8,65(-3)	9,21(-3) ^a	9,30(-3) ^b	1,84(5)	1,75(5)	1,82(5) ^a	1,88(5) ^b
6d ² D	8f ² F ^o	4	6	18321,36	18171,08	18345,40 ^a	1,94(-1)	1,82(-1)	1,93(-1) ^a	1,95(-1) ^b	2,57(6)	2,45(6)	2,55(6) ^a	2,63(6) ^b
6d ² D	9f ² F ^o	6	6	14497,67	14399,68	14342,69 ^a	–	3,84(-3)	4,61(-3) ^a	4,07(-3) ^b	–	1,23(5)	1,50(5) ^a	1,31(5) ^b
6d ² D	9f ² F ^o	6	8	14497,65	14399,68	14342,89 ^a	–	7,68(-2)	9,23(-2) ^a	8,15(-2) ^b	–	1,85(6)	2,24(6) ^a	1,97(6) ^b
6d ² D	9f ² F ^o	4	6	14497,57	14400,19	14338,98 ^a	–	8,06(-2)	9,68(-2) ^a	8,55(-2) ^b	–	1,73(6)	2,09(6) ^a	1,83(6) ^b
4f ² F ^o	6g ² G	6	8	6577,19	6547,76	–	1,82(-1)	1,84(-1)	–	1,83(-1) ^b	2,10(7)	2,15(7)	–	2,14(7) ^b

Tablo 3.2. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)		f				A_{ji} (s ⁻¹)				
Alt seviye	Üst seviye	g_i	g_j	Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma		Diğer çalışmalar		
				MCHF+BP	HFR		MCHF+BP	HFR		MCHF+BP	HFR			
4f ² F ^o	6g ² G	8	10	6577,23	6547,76	–	1,77(-1)	1,79(-1)	–	1,78(-1) ^b	2,18(7)	2,23(7)	–	2,22(7) ^b
4f ² F ^o	6g ² G	8	8	6577,24	6547,76	–	5,05(-3)	5,11(-3)	–	5,09(-3) ^b	7,79(5)	7,95(5)	–	7,91(5) ^b
5f ² F ^o	6g ² G	6	8	18780,35	18579,76	–	1,17	1,16	–	1,19 ^b	1,67(7)	1,68(7)	–	1,72(7) ^b
5f ² F ^o	6g ² G	8	10	18780,49	18579,76	–	1,14	1,13	–	1,15 ^b	1,73(7)	1,75(7)	–	1,79(7) ^b
5f ² F ^o	6g ² G	8	8	18780,57	18579,76	–	3,26(-2)	3,23(-2)	–	3,30(-2) ^b	6,17(5)	6,23(5)	–	6,37(5) ^b
6g ² G	7f ² F ^o	10	8	30504,07	30965,51	–	2,00(-2)	2,18(-2)	–	1,98(-2) ^b	1,81(5)	1,90(5)	–	1,72(5) ^b
6g ² G	7f ² F ^o	8	8	30503,86	30965,50	–	7,20(-4)	7,80(-4)	–	7,07(-4) ^b	5,16(3)	5,42(3)	–	4,92(3) ^b
6g ² G	7f ² F ^o	8	6	30504,07	30965,51	–	1,90(-2)	2,11(-2)	–	1,91(-2) ^b	1,86(5)	1,95(5)	–	1,77(5) ^b
6g ² G	8f ² F ^o	10	8	18597,25	18756,80	–	3,47(-3)	3,77(-3)	–	3,42(-3) ^b	8,38(4)	8,93(4)	–	8,10(4) ^b
6g ² G	8f ² F ^o	8	8	18597,17	18756,80	–	1,24(-4)	1,35(-4)	–	1,22(-4) ^b	2,39(3)	2,55(3)	–	2,31(3) ^b
6g ² G	8f ² F ^o	8	6	18597,22	18756,80	–	3,35(-3)	3,63(-3)	–	3,29(-3) ^b	8,62(4)	9,19(4)	–	8,33(4) ^b
6g ² G	9f ² F ^o	10	8	14669,78	14765,60	–	1,02(-3)	1,31(-3)	–	1,18(-3) ^b	4,65(4)	5,00(4)	–	4,51(4) ^b
6g ² G	9f ² F ^o	8	6	14669,76	14765,60	–	1,16(-3)	1,26(-3)	–	1,14(-3) ^b	4,78(4)	5,14(4)	–	4,64(4) ^b
6g ² G	9f ² F ^o	8	8	14669,73	14765,60	–	4,28(-5)	4,63(-5)	–	4,21(-5) ^b	1,33(3)	1,43(3)	–	1,29(3) ^b
6g ² G	7h ² H ^o	10	12	30503,67	30892,79	–	1,50	1,46	–	1,47 ^b	8,87(6)	8,52(6)	–	8,54(6) ^b
6g ² G	7h ² H ^o	10	10	30503,75	30892,80	–	2,70(-2)	2,71(-2)	–	2,71(-2) ^b	1,97(5)	1,89(5)	–	1,90(5) ^b
6g ² G	7h ² H ^o	8	10	30503,54	30892,79	–	1,5	1,49	–	1,49 ^b	8,67(6)	8,33(6)	–	8,35(6) ^b
6g ² G	8h ² H ^o	10	12	18594,91	18738,52	–	2,63(-1)	2,61(-1)	–	2,61(-1) ^b	4,23(6)	4,13(6)	–	4,13(6) ^b
6g ² G	8h ² H ^o	10	10	18594,93	18738,52	–	4,87(-3)	4,83(-3)	–	4,84(-3) ^b	9,40(4)	9,18(4)	–	9,19(4) ^b
6g ² G	8h ² H ^o	8	10	18594,86	18738,52	–	2,67(-1)	2,66(-1)	–	2,66(-1) ^b	4,13(6)	4,04(6)	–	4,04(6) ^b
6g ² G	9h ² H ^o	10	12	14668,69	14757,53	–	9,19(-2)	9,15(-2)	–	9,14(-2) ^b	2,37(6)	2,34(6)	–	2,33(6) ^b

Tablo 3.2. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)			f				A_{ji} (s ⁻¹)			
Alt seviye	Üst seviye	g_i	g_j	Bu çalışma		Diğer	Bu çalışma		Diğer		Bu çalışma		Diğer	
				MCHF+BP	HFR	çalışmalar	MCHF+BP	HFR	çalışmalar		MCHF+BP	HFR	çalışmalar	
6g ² G	9h ² H ^o	10	10	14668,70	14757,53	–	1,70(-3)	1,69(-3)	–	1,69(-3) ^b	5,28(4)	5,19(4)	–	5,19(4) ^b
6g ² G	9h ² H ^o	8	10	14668,66	14757,53	–	9,36(-2)	9,32(-2)	–	9,31(-2) ^b	2,32(6)	2,28(6)	–	2,28(6) ^b
3p ² P ^o	8s ² S	2	2	1291,24	1307,88	1309,88 ^a	0,96(-3)	1,70(-3)	1,72(-3) ^a	–	3,86(6)	6,63(6)	6,68(6) ^a	–
3p ² P ^o	8s ² S	4	2	1292,41	1309,44	1311,59 ^a	1,03(-3)	1,70(-3)	1,72(-3) ^a	–	0,83(7)	1,32(7)	1,33(7) ^a	–
4p ² P ^o	8s ² S	2	2	5790,92	3173,63	3176,33 ^a	5,74(-3)	5,09(-3)	5,15(-3) ^a	6,03(-3) ^b	5,68(6)	3,37(6)	3,40(6) ^a	3,99(6) ^b
4p ² P ^o	8s ² S	4	2	5795,51	3176,70	3179,79 ^a	2,87(-2)	5,09(-3)	5,14(-3) ^a	6,03(-3) ^b	1,14(7)	6,72(6)	6,78(6) ^a	7,97(6) ^b
5p ² P ^o	8s ² S	2	2	11652,27	6814,73	6823,00 ^a	5,19(-2)	1,47(-2)	1,47(-2) ^a	1,67(-2) ^b	2,55(6)	2,11(6)	2,10(6) ^a	2,40(6) ^b
5p ² P ^o	8s ² S	4	2	11665,12	6821,14	6830,03 ^a	5,21(-2)	1,47(-2)	1,47(-2) ^a	1,67(-2) ^b	5,11(6)	4,20(6)	4,19(6) ^a	4,80(6) ^b
6p ² P ^o	8s ² S	2	2	25844,80	15368,54	15389,27 ^a	1,16(-1)	5,48(-2)	5,49(-2) ^a	6,08(-2) ^b	1,10(6)	1,55(6)	1,54(6) ^a	1,72(6) ^b
6p ² P ^o	8s ² S	4	2	25889,40	15385,92	15408,43 ^a	1,16(-1)	5,48(-2)	5,48(-2) ^a	6,06(-2) ^b	2,30(6)	3,09(6)	3,08(6) ^a	3,42(6) ^b
7p ² P ^o	8s ² S	2	2	100149,32	51931,87	52048,90 ^a	1,01	6,13(-1)	6,22(-1) ^a	6,12(-1) ^b	6,69(5)	1,52(6)	1,53(6) ^a	1,51(6) ^b
7p ² P ^o	8s ² S	4	2	100633,41	52049,47	52179,73 ^a	1,01	6,12(-1)	6,24(-1) ^a	6,10(-1) ^b	1,33(6)	3,01(6)	3,06(6) ^a	3,01(6) ^b
8s ² S	8p ² P ^o	2	2	110415,63	110987,79	110736,57 ^a	1,24	1,02	1,02 ^a	1,03 ^b	6,83(5)	5,55(5)	5,55(5) ^a	5,59(5) ^b
8s ² S	8p ² P ^o	2	4	110009,35	110637,70	110357,59 ^a	2,49	2,05	2,04 ^a	2,07 ^b	6,86(5)	5,60(5)	5,60(5) ^a	5,65(5) ^b
8s ² S	9p ² P ^o	2	2	24436,57	36132,39	35942,29 ^a	4,82(-1)	6,15(-3)	6,94(-3) ^a	5,48(-3) ^b	5,39(6)	3,14(4)	3,58(4) ^a	2,80(4) ^b
8s ² S	9p ² P ^o	2	4	24162,05	36106,94	35914,08 ^a	0,981	1,23(-2)	1,44(-2) ^a	1,09(-2) ^b	5,61(6)	3,15(4)	3,74(4) ^a	2,80(4) ^b
3p ² P ^o	7d ² D	2	4	1327,97	1306,72	1308,14 ^a	1,14(-3)	0,87(-3)	1,12(-3) ^a	–	2,16(6)	1,69(6)	2,18(6) ^a	–
3p ² P ^o	7d ² D	4	6	1329,20	1308,28	1309,83 ^a	1,06(-3)	0,78(-3)	9,91(-4) ^a	–	2,67(6)	2,00(6)	2,57(6) ^a	–
3p ² P ^o	7d ² D	4	4	1329,20	1308,28	1309,85 ^a	1,18(-4)	0,88(-4)	1,09(-4) ^a	–	4,44(5)	3,40(5)	4,23(5) ^a	–
4p ² P ^o	7d ² D	2	4	6611,04	3166,80	3166,12 ^a	5,03(-2)	7,18(-3)	8,67(-3) ^a	9,08(-3) ^b	3,83(6)	2,39(6)	2,88(6) ^a	3,02(6) ^b

Tablo 3.2. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)		f				A_{ji} (s ⁻¹)				
Alt seviye	Üst seviye	g_i	g_j	Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma		Diğer çalışmalar		
				MCHF+BP	HFR		MCHF+BP	HFR		MCHF+BP	HFR			
4p ² P ^o	7d ² D	4	6	6617,01	3169,86	3169,43 ^a	4,51(-2)	6,46(-3)	7,74(-3) ^a	8,16(-3) ^b	4,58(6)	2,86(6)	3,42(6) ^a	3,61(6) ^b
4p ² P ^o	7d ² D	4	4	6617,02	3169,86	3169,55 ^a	5,01(-3)	7,18(-4)	8,56(-4) ^a	9,06(-4) ^b	7,63(5)	4,76(5)	5,68(5) ^a	6,02(5) ^b
5p ² P ^o	7d ² D	2	4	15528,30	6783,34	6776,03 ^a	1,70(-1)	3,01(-2)	3,43(-2) ^a	3,62(-2) ^b	2,35(6)	2,18(6)	2,49(6) ^a	2,62(6) ^b
5p ² P ^o	7d ² D	4	6	15551,08	6789,70	6782,44 ^a	1,52(-1)	2,70(-2)	3,07(-2) ^a	3,25(-2) ^b	2,80(6)	2,61(6)	2,97(6) ^a	3,13(6) ^b
5p ² P ^o	7d ² D	4	4	15551,15	6789,70	6782,97 ^a	1,69(-2)	3,01(-3)	3,40(-3) ^a	3,61(-3) ^b	4,66(5)	4,35(5)	4,93(5) ^a	5,22(5) ^b
6p ² P ^o	7d ² D	2	4	57900,98	15209,82	15152,39 ^a	2,24	1,43(-1)	1,54(-1) ^a	1,60(-1) ^b	2,23(6)	2,06(6)	2,24(6) ^a	2,30(6) ^b
6p ² P ^o	7d ² D	4	6	58124,32	15226,84	15168,28 ^a	2,02	1,28(-1)	1,38(-1) ^a	1,43(-1) ^b	2,66(6)	2,46(6)	2,67(6) ^a	2,74(6) ^b
6p ² P ^o	7d ² D	4	4	58125,28	15226,84	15170,96 ^a	2,24(-1)	1,43(-2)	1,53(-2) ^a	1,59(-2) ^b	4,43(5)	4,11(5)	4,44(5) ^a	4,57(5) ^b
7p ² P ^o	7d ² D	2	4	87439,08	50163,01	49435,10 ^a	1,57	2,01	1,93 ^a	1,94 ^b	1,37(6)	2,66(6)	2,64(6) ^a	2,57(6) ^b
7p ² P ^o	7d ² D	4	6	87075,54	50272,70	49524,51 ^a	1,41	1,80	1,74 ^a	1,75 ^b	1,24(6)	3,17(6)	3,17(6) ^a	3,07(6) ^b
7p ² P ^o	7d ² D	4	4	87073,38	50272,73	49553,11 ^a	1,56(-1)	2,00(-1)	1,94(-1) ^a	1,94(-1) ^b	1,38(5)	5,29(5)	5,27(5) ^a	5,12(5) ^b
7d ² D	8p ² P ^o	6	4	32780,83	119624,52	124471,63 ^a	0,57(-1)	8,46(-1)	8,56(-1) ^a	8,61(-1) ^b	5,29(5)	5,92(5)	5,53(5) ^a	6,02(5) ^b
7d ² D	8p ² P ^o	4	2	32816,50	120033,75	124772,26 ^a	0,47(-1)	7,03(-1)	7,13(-1) ^a	7,14(-1) ^b	5,84(5)	6,51(5)	6,10(5) ^a	6,61(5) ^b
7d ² D	8p ² P ^o	4	4	32780,52	119624,38	124291,33 ^a	0,95(-2)	1,41(-1)	1,42(-1) ^a	1,43(-1) ^b	5,87(4)	6,58(4)	6,16(4) ^a	6,68(4) ^b
7d ² D	9p ² P ^o	6	4	15922,88	37014,43	37290,14 ^a	0,22	1,93(-2)	1,53(-2) ^a	1,50(-2) ^b	9,08(6)	1,41(5)	1,10(5) ^a	1,10(5) ^b
7d ² D	9p ² P ^o	4	2	16041,57	37041,17	37304,33 ^a	1,88(-1)	1,61(-2)	1,25(-2) ^a	1,23(-2) ^b	9,77(6)	1,56(5)	1,20(5) ^a	1,20(5) ^b
7d ² D	9p ² P ^o	4	4	15922,81	37014,42	37273,94 ^a	0,38(-1)	3,22(-3)	2,56(-3) ^a	2,51(-3) ^b	1,01(6)	1,57(4)	1,23(4) ^a	1,22(4) ^b
4f ² F ^o	7d ² D	6	6	5438,31	5435,55	—	4,57(-5)	6,33(-5)	—	4,92(-5) ^b	1,03(4)	1,44(4)	—	1,11(4) ^b
4f ² F ^o	7d ² D	6	4	5438,32	5435,55	5424,16 ^a	6,41(-4)	8,93(-4)	7,25(-4) ^a	6,89(-4) ^b	2,17(5)	3,02(5)	2,46(5) ^a	2,33(5) ^b
4f ² F ^o	7d ² D	8	6	5438,35	5435,55	5422,84 ^a	6,86(-4)	9,56(-4)	7,75(-4) ^a	7,38(-4) ^b	2,06(5)	2,88(5)	2,34(5) ^a	2,22(5) ^b
5f ² F ^o	7d ² D	6	6	11752,72	11754,75	11706,87 ^a	3,56(-4)	4,75(-4)	3,91(-4) ^a	3,86(-4) ^b	1,72(4)	2,29(4)	1,90(4) ^a	1,86(4) ^b

Tablo 3.2. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)			f				A_{ji} (s ⁻¹)			
Alt seviye	Üst seviye	g_i	g_j	Bu çalışma		Diğer	Bu çalışma		Diğer	Bu çalışma		Diğer	Bu çalışma	
				MCHF+BP	HFR	çalışmalar	MCHF+BP	HFR	çalışmalar	MCHF+BP	HFR	çalışmalar	MCHF+BP	HFR
5f ² F ^o	7d ² D	6	4	11752,76	11754,75	11708,46 ^a	4,99(-3)	6,65(-3)	5,50(-3) ^a	5,41(-3) ^b	3,62(5)	4,81(5)	4,01(5) ^a	3,92(5) ^b
5f ² F ^o	7d ² D	8	6	11752,81	11754,75	11706,90 ^a	5,35(-3)	7,13(-3)	5,86(-3) ^a	5,79(-3) ^b	3,45(5)	4,59(5)	3,80(5) ^a	3,73(5) ^b
6f ² F ^o	7d ² D	6	6	31828,86	31899,96	31546,95 ^a	3,36(-3)	4,53(-3)	3,68(-3) ^a	3,77(-3) ^b	2,22(4)	2,97(4)	2,47(4) ^a	2,47(4) ^b
6f ² F ^o	7d ² D	6	4	31829,15	31899,97	31558,55 ^a	4,71(-2)	6,34(-2)	5,18(-2) ^a	5,28(-2) ^b	4,65(5)	6,23(5)	5,20(5) ^a	5,20(5) ^b
6f ² F ^o	7d ² D	8	6	31829,22	31899,97	31544,55 ^a	5,05(-2)	6,79(-2)	5,53(-2) ^a	5,66(-2) ^b	4,43(5)	5,94(5)	4,94(5) ^a	4,95(5) ^b
7d ² D	8f ² F ^o	6	8	45564,67	45322,68	46040,76 ^a	7,34(-1)	6,18(-1)	7,00(-1) ^a	6,92(-1) ^b	1,77(6)	1,51(6)	1,65(6) ^a	1,69(6) ^b
7d ² D	8f ² F ^o	6	6	45564,94	45322,70	46037,13 ^a	3,67(-2)	3,09(-2)	3,50(-2) ^a	3,46(-2) ^b	1,18(5)	1,00(5)	1,10(5) ^a	1,12(5) ^b
7d ² D	8f ² F ^o	4	6	45576,78	45322,68	46012,45 ^a	7,70(-1)	6,49(-1)	7,33(-1) ^a	7,27(-1) ^b	1,65(6)	1,41(6)	1,54(6) ^a	1,57(6) ^b
7d ² D	9f ² F ^o	4	6	27520,18	27416,03	27053,64 ^a	1,94(-1)	1,83(-1)	2,22(-1) ^a	1,99(-1) ^b	1,14(6)	1,08(6)	1,35(6) ^a	–
7d ² D	9f ² F ^o	6	6	27512,89	27416,04	27062,17 ^a	9,26(-3)	8,71(-3)	1,05(-2) ^a	9,45(-3) ^b	8,15(4)	7,73(4)	9,63(4) ^a	–
7d ² D	9f ² F ^o	6	8	27520,31	27416,03	27062,88 ^a	1,85(-1)	1,74(-1)	2,11(-1) ^a	1,89(-1) ^b	1,22(6)	1,16(6)	1,44(6) ^a	–
4f ² F ^o	7g ² G	6	8	5423,04	5403,04	–	5,82(-2)	5,94(-2)	–	5,87(-2) ^b	9,91(6)	1,02(7)	–	1,01(7) ^b
4f ² F ^o	7g ² G	8	10	5423,08	5403,04	–	5,66(-2)	5,78(-2)	–	5,70(-2) ^b	1,03(7)	1,06(7)	–	1,04(7) ^b
4f ² F ^o	7g ² G	8	8	5423,08	5403,04	–	1,62(-3)	1,65(-3)	–	1,63(-3) ^b	3,67(5)	3,77(5)	–	3,72(5) ^b
5f ² F ^o	7g ² G	6	8	11681,65	11603,75	–	2,27(-1)	2,29(-1)	–	2,30(-1) ^b	8,34(6)	8,50(6)	–	8,53(6) ^b
5f ² F ^o	7g ² G	8	10	11681,71	11603,75	–	2,22(-1)	2,22(-1)	–	2,23(-1) ^b	8,65(6)	8,81(6)	–	8,85(6) ^b
5f ² F ^o	7g ² G	8	8	11681,73	11603,76	–	6,32(-3)	6,35(-3)	–	6,38(-3) ^b	3,09(5)	3,15(5)	–	3,16(5) ^b
6f ² F ^o	7g ² G	6	8	31312,90	30811,88	–	1,09	1,08	–	1,11 ^b	5,58(6)	5,69(6)	–	5,86(6) ^b
6f ² F ^o	7g ² G	8	10	31313,12	30811,88	–	1,06	1,05	–	1,08 ^b	5,78(6)	5,90(6)	–	6,07(6) ^b
6f ² F ^o	7g ² G	8	8	31313,24	30811,89	–	3,03(-2)	3,00(-2)	–	3,09(-2) ^b	2,07(5)	2,11(5)	–	2,17(5) ^b
7g ² G	8f ² F ^o	10	8	46678,46	47716,78	–	3,68(-2)	3,94(-2)	–	–	1,41(5)	1,44(5)	–	–

Tablo 3.2. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)			f				A_{ji} (s ⁻¹)			
Alt seviye	Üst seviye	g_i	g_j	Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma		Diğer çalışmalar		
				MCHF+BP	HFR		MCHF+BP	HFR		MCHF+BP	HFR			
7g ² G	8f ² F ^o	8	6	46665,73	47716,78	–	3,54(-2)	3,79(-2)	–	–	1,45(5)	1,48(5)	–	–
7g ² G	8f ² F ^o	8	8	46665,44	47716,75	–	1,31(-3)	1,41(-3)	–	–	4,02(3)	4,12(3)	–	–
7g ² G	9f ² F ^o	10	8	27910,44	28274,15	–	6,68(-3)	7,17(-3)	–	6,54(-3) ^b	7,15(4)	7,48(4)	–	6,83(4) ^b
7g ² G	9f ² F ^o	8	6	27910,43	28274,15	–	6,44(-3)	6,91(-3)	–	6,31(-3) ^b	7,35(4)	7,69(4)	–	7,02(4) ^b
7g ² G	9f ² F ^o	8	8	27910,34	28274,15	–	2,38(-4)	2,56(-4)	–	2,34(-4) ^b	2,04(3)	2,14(3)	–	1,95(3) ^b
6h ² H ^o	7g ² G	12	10	31326,16	30923,38	–	6,21(-3)	6,37(-3)	–	6,29(-3) ^b	5,06(4)	5,33(4)	–	5,26(4) ^b
6h ² H ^o	7g ² G	10	10	31326,04	30923,37	–	1,38(-4)	1,41(-4)	–	1,40(-4) ^b	9,37(2)	9,87(2)	–	9,74(2) ^b
6h ² H ^o	7g ² G	10	8	31326,16	30923,38	–	6,07(-3)	6,23(-3)	–	6,15(-3) ^b	5,16(4)	5,43(4)	–	5,36(4) ^b
7g ² G	8h ² H ^o	10	12	46663,73	47598,63	–	1,39	1,36	–	1,37 ^b	3,56(6)	3,34(6)	–	3,36(6) ^b
7g ² G	8h ² H ^o	10	10	46663,87	47598,65	–	2,58(-2)	2,52(-2)	–	2,53(-2) ^b	7,91(4)	7,43(4)	–	7,46(4) ^b
7g ² G	8h ² H ^o	8	10	46663,59	47598,63	–	1,42	1,39	–	1,39 ^b	3,48(6)	3,27(6)	–	3,28(6) ^b
7g ² G	9h ² H ^o	10	12	27914,12	28244,59	–	2,89(-1)	2,86(-1)	–	2,86(-1) ^b	2,06(6)	1,99(6)	–	1,99(6) ^b
7g ² G	9h ² H ^o	10	10	27914,16	28244,60	–	5,35(-3)	5,29(-3)	–	5,29(-3) ^b	4,58(4)	4,42(4)	–	4,43(4) ^b
7g ² G	9h ² H ^o	8	10	27914,05	28244,59	–	2,93(-1)	2,91(-1)	–	2,91(-1) ^b	2,02(6)	1,95(6)	–	1,95(6) ^b
6h ² H ^o	7i ² I	10	12	31325,86	30908,07	–	1,98	2,01	–	2,01 ^b	1,12(7)	1,17(7)	–	1,19(7) ^b
6h ² H ^o	7i ² I	12	12	31325,99	30908,08	–	2,53(-2)	2,57(-2)	–	–	1,73(5)	1,80(5)	–	–
6h ² H ^o	7i ² I	12	14	31325,93	30908,07	–	1,95	1,98	–	–	1,14(7)	1,19(7)	–	–
7i ² I	8h ² H ^o	12	10	46664,26	47634,95	–	5,51(-3)	5,40(-3)	–	5,48(-3) ^b	2,03(4)	1,91(4)	–	1,90(4) ^b
7i ² I	8h ² H ^o	12	12	46664,11	47634,93	–	8,40(-5)	8,33(-5)	–	–	2,60(2)	2,44(2)	–	–
7i ² I	8h ² H ^o	14	12	46664,26	47634,95	–	5,60(-3)	5,48(-3)	–	–	1,99(4)	1,88(4)	–	–

Tablo 3.2. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)			f				A_{ji} (s ⁻¹)			
Alt seviye	Üst seviye	g_i	g_j	Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma		Diğer çalışmalar		Bu çalışma		Diğer çalışmalar	
				MCHF+BP	HFR		MCHF+BP	HFR			MCHF+BP	HFR		
7i ² I	9h ² H ^o	12	10	27914,29	28257,38	–	7,09(-4)	7,02(-4)	–	7,11(-4) ^b	7,29(3)	7,03(3)	–	7,02(3) ^b
7i ² I	9h ² H ^o	12	12	27914,26	28257,37	–	1,09(-5)	1,08(-5)	–	–	9,34(1)	9,02(1)	–	–
7i ² I	9h ² H ^o	14	12	27914,31	28257,38	–	8,40(-4)	7,12(-4)	–	–	7,19(3)	6,94(3)	–	–
3p ² P ^o	9s ² S	2	2	1267,63	1271,94	1273,80 ^a	0,59(-3)	1,06(-3)	1,09(-3) ^a	–	2,44(6)	4,39(6)	4,47(6) ^a	–
3p ² P ^o	9s ² S	4	2	1268,76	1273,42	1275,41 ^a	0,67(-3)	1,06(-3)	1,09(-3) ^a	–	5,61(6)	8,76(6)	8,92(6) ^a	–
4p ² P ^o	9s ² S	2	2	5344,38	2970,01	2972,18 ^a	5,50(-2)	2,92(-3)	2,97(-3) ^a	3,50(-3) ^b	1,28(7)	2,21(6)	2,24(6) ^a	2,65(6) ^b
4p ² P ^o	9s ² S	4	2	5348,29	2972,70	2975,20 ^a	5,54(-2)	2,92(-3)	2,97(-3) ^a	3,50(-3) ^b	2,58(7)	4,40(6)	4,48(6) ^a	5,28(6) ^b
5p ² P ^o	9s ² S	2	2	9975,21	5940,25	5945,71 ^a	8,04(-2)	7,12(-3)	7,17(-3) ^a	8,29(-3) ^b	5,39(6)	1,35(6)	1,35(6) ^a	1,57(6) ^b
5p ² P ^o	9s ² S	4	2	9984,63	5945,13	5951,05 ^a	8,08(-2)	7,11(-3)	7,16(-3) ^a	8,28(-3) ^b	1,08(7)	2,68(6)	2,70(6) ^a	3,12(6) ^b
6p ² P ^o	9s ² S	2	2	18825,04	11538,02	11546,57 ^a	1,15(-1)	1,87(-2)	1,87(-2) ^a	2,10(-2) ^b	2,17(6)	9,36(5)	9,39(5) ^a	1,05(6) ^b
6p ² P ^o	9s ² S	4	2	18848,69	11547,81	11557,35 ^a	1,15(-1)	1,87(-2)	1,87(-2) ^a	2,09(-2) ^b	4,33(6)	1,87(6)	1,87(6) ^a	2,10(6) ^b
7p ² P ^o	9s ² S	2	2	40961,26	24475,01	24486,90 ^a	2,00(-1)	6,66(-2)	6,70(-2) ^a	7,16(-2) ^b	7,96(5)	7,42(5)	7,45(5) ^a	7,97(5) ^b
7p ² P ^o	9s ² S	4	2	41042,01	24501,10	24515,81 ^a	1,99(-1)	6,66(-2)	6,69(-2) ^a	7,15(-2) ^b	1,58(6)	1,48(6)	1,49(6) ^a	1,59(6) ^b
8p ² P ^o	9s ² S	2	2	186303,09	79415,50	79396,42 ^a	1,45	7,29(-1)	7,45(-1) ^a	7,28(-1) ^b	2,80(5)	7,71(5)	7,85(5) ^a	7,70(5) ^b
8p ² P ^o	9s ² S	4	2	187471,29	79595,72	79592,39 ^a	1,45	7,28(-1)	7,44(-1) ^a	7,26(-1) ^b	5,52(5)	1,53(6)	1,57(6) ^a	1,53(6) ^b
9s ² S	9p ² P ^o	2	2	37738,72	164636,15	161370,79 ^a	2,63	1,16	1,16 ^a	1,16 ^b	1,23(7)	2,85(5)	2,98(5) ^a	2,85(5) ^b
9s ² S	9p ² P ^o	2	4	37087,96	164109,03	160803,56 ^a	5,30	2,33	2,33 ^a	2,32 ^b	1,28(7)	2,88(5)	3,01(5) ^a	2,88(5) ^b
3p ² P ^o	8d ² D	2	4	1291,66	1271,24	1272,73 ^a	5,77(-4)	4,45(-4)	5,94(-4) ^a	–	1,15(6)	0,92(6)	1,22(6) ^a	–
3p ² P ^o	8d ² D	4	6	1292,83	1272,72	1274,33 ^a	5,50(-4)	4,00(-4)	5,25(-4) ^a	–	1,46(6)	1,10(6)	1,44(6) ^a	–
3p ² P ^o	8d ² D	4	4	1292,83	1272,72	1274,35 ^a	6,11(-5)	4,50(-5)	5,77(-5) ^a	–	2,44(5)	1,83(5)	2,37(5) ^a	–

Tablo 3.2. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)			f				A_{ji} (s ⁻¹)			
Alt seviye	Üst seviye	g_i	g_j	Bu çalışma		Diğer	Bu çalışma		Diğer	Bu çalışma		Diğer	Bu çalışma	
				MCHF+BP	HFR	çalışmalar	MCHF+BP	HFR	çalışmalar	MCHF+BP	HFR	çalışmalar	MCHF+BP	HFR
4p ² P ^o	8d ² D	2	4	5799,33	2966,20	2966,37 ^a	3,40(-2)	3,54(-3)	4,40(-3) ^a	4,59(-3) ^b	3,37(6)	1,34(6)	1,67(6) ^a	1,74(6) ^b
4p ² P ^o	8d ² D	4	6	5803,93	2968,88	2969,32 ^a	3,05(-2)	3,18(-3)	3,92(-3) ^a	4,12(-3) ^b	4,03(6)	1,60(6)	1,98(6) ^a	2,08(6) ^b
4p ² P ^o	8d ² D	4	4	5803,94	2968,88	2969,38 ^a	3,40(-3)	3,53(-4)	4,33(-4) ^a	4,58(-4) ^b	6,72(5)	2,68(5)	3,28(5) ^a	3,47(5) ^b
5p ² P ^o	8d ² D	2	4	11686,38	5925,01	5922,54 ^a	6,88(-2)	1,25(-2)	1,47(-2) ^a	1,54(-2) ^b	1,68(6)	1,18(6)	1,40(6) ^a	1,47(6) ^b
5p ² P ^o	8d ² D	4	6	11699,29	5929,86	5927,58 ^a	6,16(-2)	1,12(-2)	1,31(-2) ^a	1,39(-2) ^b	2,00(6)	1,42(6)	1,67(6) ^a	1,75(6) ^b
5p ² P ^o	8d ² D	4	4	11699,31	5929,86	5927,84 ^a	6,84(-3)	1,25(-3)	1,45(-3) ^a	1,54(-3) ^b	3,34(5)	2,36(5)	2,76(5) ^a	2,92(5) ^b
6p ² P ^o	8d ² D	2	4	26013,23	11480,66	11459,51 ^a	1,86(-1)	4,06(-2)	4,58(-2) ^a	4,77(-2) ^b	9,17(5)	1,03(6)	1,16(6) ^a	1,21(6) ^b
6p ² P ^o	8d ² D	4	6	26058,29	11490,36	11469,17 ^a	1,66(-1)	3,65(-2)	4,10(-2) ^a	4,26(-2) ^b	1,09(6)	1,23(6)	1,39(6) ^a	1,44(6) ^b
6p ² P ^o	8d ² D	4	4	26058,41	11490,36	11470,13 ^a	1,84(-2)	4,05(-3)	4,55(-3) ^a	4,73(-3) ^b	1,81(5)	2,05(5)	2,30(5) ^a	2,39(5) ^b
7p ² P ^o	8d ² D	2	4	102726,75	24218,35	24098,64 ^a	2,68	1,71(-1)	1,84(-1) ^a	1,88(-1) ^b	8,47(5)	9,74(5)	1,06(6) ^a	1,07(6) ^b
7p ² P ^o	8d ² D	4	6	103234,27	24243,89	24122,42 ^a	2,41	1,54(-1)	1,65(-1) ^a	1,69(-1) ^b	1,01(6)	1,17(6)	1,26(6) ^a	1,28(6) ^b
7p ² P ^o	8d ² D	4	4	103236,14	24243,89	24126,65 ^a	2,68(-1)	1,71(-2)	1,83(-2) ^a	1,87(-2) ^b	1,68(5)	1,94(5)	2,10(5) ^a	2,13(5) ^b
8p ² P ^o	8d ² D	2	4	107444,30	76775,37	75454,75 ^a	1,67	2,25	2,17 ^a	2,17 ^b	9,67(5)	1,27(6)	1,27(6) ^a	1,23(6) ^b
8p ² P ^o	8d ² D	4	6	107061,57	76943,73	75590,19 ^a	1,49	2,02	1,95 ^a	1,96 ^b	8,72(5)	1,52(6)	1,52(6) ^a	1,47(6) ^b
8p ² P ^o	8d ² D	4	4	107059,56	76943,79	75631,73 ^a	1,66(-1)	2,24(-1)	2,17(-1) ^a	2,17(-1) ^b	9,69(4)	2,53(5)	2,53(5) ^a	2,45(5) ^b
8d ² D	9p ² P ^o	6	4	24016,81	176663,15	180064,86 ^a	0,58	1,01	1,02 ^a	1,03 ^b	1,01(7)	3,23(5)	3,17(5) ^a	3,29(5) ^b
8d ² D	9p ² P ^o	4	2	24287,92	177273,84	180539,32 ^a	0,48	8,38(-1)	8,56(-1) ^a	8,52(-1) ^b	1,09(7)	3,56(5)	3,50(5) ^a	3,62(5) ^b
8d ² D	9p ² P ^o	4	4	24016,71	176662,84	179829,63 ^a	0,97(-1)	1,68(-1)	1,71(-1) ^a	1,71(-1) ^b	1,12(6)	3,59(4)	3,53(4) ^a	3,66(4) ^b
4f ² F ^o	8d ² D	6	6	4876,81	4870,21	—	2,13(-5)	3,00(-5)	—	2,75(-5) ^b	5,98(3)	8,64(3)	—	7,74(3) ^b
4f ² F ^o	8d ² D	6	4	4876,82	4870,21	4863,15 ^a	2,90(-4)	4,30(-4)	3,55(-4) ^a	3,85(-4) ^b	1,26(5)	1,81(5)	1,50(5) ^a	1,62(5) ^b
4f ² F ^o	8d ² D	8	6	4876,84	4870,21	4862,20 ^a	3,20(-4)	4,61(-4)	3,75(-4) ^a	4,13(-4) ^b	1,20(5)	1,73(5)	1,41(5) ^a	1,55(5) ^b

Tablo 3.2. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)			f				A_{ji} (s ⁻¹)			
Alt seviye	Üst seviye	g_i	g_j	Bu çalışma		Diğer	Bu çalışma		Diğer	Bu çalışma		Diğer	Bu çalışma	
				MCHF+BP	HFR	çalışmalar	MCHF+BP	HFR	çalışmalar	MCHF+BP	HFR	çalışmalar	MCHF+BP	HFR
5f ² F ^o	8d ² D	6	6	9411,08	9396,02	9373,55 ^a	1,28(-4)	1,73(-4)	1,44(-4) ^a	1,38(-4) ^b	0,96(4)	1,31(4)	1,10(4) ^a	1,04(4) ^b
5f ² F ^o	8d ² D	6	4	9411,10	9396,02	9374,19 ^a	1,79(-3)	2,43(-3)	2,03(-3) ^a	1,94(-3) ^b	2,02(5)	2,75(5)	2,31(5) ^a	2,19(5) ^b
5f ² F ^o	8d ² D	8	6	9411,13	9396,02	9373,58 ^a	1,91(-3)	2,60(-3)	2,16(-3) ^a	2,07(-3) ^b	1,92(5)	2,62(5)	2,19(5) ^a	2,09(5) ^b
6f ² F ^o	8d ² D	6	6	19015,37	18973,89	18881,47 ^a	6,44(-4)	8,48(-4)	7,15(-4) ^a	7,00(-4) ^b	1,19(4)	1,57(4)	1,34(4) ^a	1,30(4) ^b
6f ² F ^o	8d ² D	6	4	19015,44	18973,90	18884,06 ^a	0,90(-2)	1,19(-2)	1,00(-2) ^a	0,98(-2) ^b	2,50(5)	3,30(5)	2,82(5) ^a	2,72(5) ^b
6f ² F ^o	8d ² D	8	6	19015,50	18973,90	18880,61 ^a	0,97(-2)	1,27(-2)	1,07(-2) ^a	1,05(-2) ^b	2,38(5)	3,14(5)	2,67(5) ^a	2,59(5) ^b
7f ² F ^o	8d ² D	8	6	49437,13	49232,01	48593,56 ^a	7,41(-2)	9,96(-2)	8,24(-2) ^a	8,35(-2) ^b	2,70(5)	3,65(5)	3,10(5) ^a	3,06(5) ^b
7f ² F ^o	8d ² D	6	6	49436,59	49231,98	48596,98 ^a	4,94(-3)	6,64(-3)	5,49(-3) ^a	5,57(-3) ^b	1,35(4)	1,83(4)	1,55(4) ^a	1,53(4) ^b
7f ² F ^o	8d ² D	6	4	49437,02	49232,01	48614,14 ^a	6,91(-2)	9,30(-2)	7,73(-2) ^a	7,79(-2) ^b	2,83(5)	3,84(5)	3,27(5) ^a	3,22(5) ^b
8d ² D	9f ² F ^o	6	6	65913,18	66141,94	63739,89 ^a	3,70(-2)	3,10(-2)	3,93(-2) ^a	3,49(-2) ^b	5,69(4)	4,72(4)	6,45(4) ^a	5,33(4) ^b
8d ² D	9f ² F ^o	6	8	65894,74	66141,90	63743,81 ^a	7,41(-1)	6,19(-1)	7,86(-1) ^a	6,99(-1) ^b	8,53(5)	7,08(5)	9,67(5) ^a	7,99(5) ^b
8d ² D	9f ² F ^o	4	6	65912,42	66141,90	63710,39 ^a	7,78(-1)	6,50(-1)	8,23(-1) ^a	7,33(-1) ^b	7,96(5)	6,61(5)	9,01(5) ^a	7,46(5) ^b
4f ² F ^o	8g ² G	6	8	4868,56	4852,44	—	2,65(-2)	2,72(-2)	—	2,67(-2) ^b	5,59(6)	5,77(6)	—	5,67(6) ^b
4f ² F ^o	8g ² G	8	8	4868,59	4852,44	—	7,36(-4)	7,54(-4)	—	7,41(-4) ^b	2,07(5)	2,14(5)	—	2,10(5) ^b
4f ² F ^o	8g ² G	8	10	4868,58	4852,44	—	2,57(-2)	2,64(-2)	—	2,60(-2) ^b	5,80(6)	5,98(6)	—	5,88(6) ^b
5f ² F ^o	8g ² G	6	8	9380,38	9330,10	—	8,41(-2)	8,52(-2)	—	8,49(-2) ^b	4,78(6)	4,90(6)	—	4,88(6) ^b
5f ² F ^o	8g ² G	8	8	9380,44	9330,10	—	2,34(-3)	2,37(-3)	—	2,36(-3) ^b	1,77(5)	1,81(5)	—	1,81(5) ^b
5f ² F ^o	8g ² G	8	10	9380,43	9330,10	—	8,18(-2)	8,29(-2)	—	8,25(-2) ^b	4,96(6)	5,08(6)	—	5,06(6) ^b
6f ² F ^o	8g ² G	6	8	18890,47	18706,97	—	2,43(-1)	2,44(-1)	—	2,46(-1) ^b	3,41(6)	3,48(6)	—	3,52(6) ^b
6f ² F ^o	8g ² G	8	8	18890,60	18706,97	—	6,75(-3)	6,77(-3)	—	6,84(-3) ^b	1,26(5)	1,29(5)	—	1,30(5) ^b
6f ² F ^o	8g ² G	8	10	18890,56	18706,97	—	2,36(-1)	2,37(-1)	—	2,39(-1) ^b	3,53(6)	3,61(6)	—	3,65(6) ^b

Tablo 3.2. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)		f					A_{ji} (s ⁻¹)			
Alt seviye	Üst seviye	g_i	g_j	Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma		Diğer çalışmalar		Bu çalışma		Diğer çalışmalar	
				MCHF+BP	HFR		MCHF+BP	HFR			MCHF+BP	HFR		
7f ² F ^o	8g ² G	8	8	48601,67	47474,36	–	2,92(-2)	2,89(-2)	–	2,99(-2) ^b	8,24(4)	8,55(4)	–	8,85(4) ^b
7f ² F ^o	8g ² G	8	10	48601,41	47474,34	–	1,02	1,01	–	1,05 ^b	2,31(6)	2,39(6)	–	2,48(6) ^b
7f ² F ^o	8g ² G	6	8	48601,15	47474,34	–	1,05	1,04	–	–	2,22(6)	2,31(6)	–	2,39(6) ^b
8g ² G	9f ² F ^o	8	6	67458,84	69604,00	–	5,44(-2)	5,76(-2)	–	5,43(-2) ^b	1,06(5)	1,06(5)	–	9,97(4) ^b
8g ² G	9f ² F ^o	8	8	67458,34	69603,95	–	2,01(-3)	2,14(-3)	–	2,01(-3) ^b	2,96(3)	2,94(3)	–	2,77(3) ^b
8g ² G	9f ² F ^o	10	8	67458,84	69604,00	–	5,65(-2)	5,98(-2)	–	5,63(-2) ^b	1,03(5)	1,03(5)	–	9,69(4) ^b
6h ² H ^o	8g ² G	12	10	18895,31	18748,01	–	9,00(-4)	9,13(-4)	–	8,98(-4) ^b	2,00(4)	2,08(4)	–	2,05(4) ^b
6h ² H ^o	8g ² G	10	8	18895,30	18748,01	–	8,74(-4)	8,92(-4)	–	8,78(-4) ^b	2,04(4)	2,12(4)	–	2,08(4) ^b
6h ² H ^o	8g ² G	10	10	18895,26	18748,01	–	1,99(-5)	2,00(-5)	–	2,00(-5) ^b	3,71(2)	3,85(2)	–	3,79(2) ^b
7h ² H ^o	8g ² G	12	10	48636,82	47646,30	–	1,70(-2)	1,74(-2)	–	1,72(-2) ^b	5,69(4)	6,13(4)	–	6,05(4) ^b
7h ² H ^o	8g ² G	10	8	48636,87	47646,30	–	1,64(-2)	1,70(-2)	–	1,68(-2) ^b	5,80(4)	6,24(4)	–	6,16(4) ^b
7h ² H ^o	8g ² G	10	10	48636,61	47646,27	–	3,74(-4)	3,86(-4)	–	3,81(-4) ^b	1,05(3)	1,14(3)	–	1,12(3) ^b
8g ² G	9h ² H ^o	8	10	67435,58	69425,11	–	1,37	1,33	–	1,33 ^b	1,62(6)	1,48(6)	–	1,48(6) ^b
8g ² G	9h ² H ^o	10	12	67435,88	69425,11	–	1,35	1,31	–	1,31 ^b	1,65(6)	1,51(6)	–	1,51(6) ^b
8g ² G	9h ² H ^o	10	10	67436,08	69425,16	–	2,50(-2)	2,42(-2)	–	2,43(-2) ^b	3,67(4)	3,35(4)	–	3,36(4) ^b
6h ² H ^o	8i ² I	10	12	18895,20	18744,14	–	2,15(-1)	2,17(-1)		2,17(-1) ^b	3,35(6)	3,43(6)	–	3,48(6) ^b
6h ² H ^o	8i ² I	12	12	18895,25	18744,14	–	2,75(-3)	2,78(-3)		–	5,15(4)	5,28(4)	–	
6h ² H ^o	8i ² I	12	14	18895,24	18744,14	–	2,12(-1)	2,14(-1)	–	–	3,40(6)	3,48(6)	–	–
8i ² I	9h ² H ^o	12	10	67436,78	69478,27	–	1,53(-1)	1,49(-2)	–	1,52(-2) ^b	2,70(4)	2,47(4)	–	2,48(4) ^b
8i ² I	9h ² H ^o	12	12	67436,58	69478,22	–	2,36(-4)	2,29(-4)	–	–	3,47(2)	3,17(2)	–	–

Tablo 3.2. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)			f				A_{ji} (s ⁻¹)			
Alt seviye	Üst seviye	g_i	g_j	Bu çalışma		Diğer	Bu çalışma		Diğer		Bu çalışma		Diğer	
				MCHF+BP	HFR	çalışmalar	MCHF+BP	HFR	çalışmalar		MCHF+BP	HFR	çalışmalar	
8i ² I	9h ² H ^o	14	12	67436,78	69478,27	–	1,56(-2)	1,51(-2)	–	–	2,67(4)	2,44(4)	–	–
3p ² P ^o	9d ² D	2	4	1267,91	1248,05	1248,07 ^a	2,96(-4)	1,30(-4)	4,21(-4) ^a	–	6,14(5)	5,53(5)	8,99(5) ^a	–
3p ² P ^o	9d ² D	4	6	1269,04	1249,48	1249,62 ^a	3,08(-4)	2,32(-4)	3,71(-4) ^a	–	8,51(5)	6,62(5)	10,6(5) ^a	–
3p ² P ^o	9d ² D	4	4	1269,04	1249,48	1249,63 ^a	3,42(-5)	2,50(-5)	4,08(-5) ^a	–	1,42(5)	1,10(5)	1,74(5) ^a	–
4p ² P ^o	9d ² D	2	4	5349,35	2842,94	2835,79 ^a	5,14(-2)	2,02(-3)	3,04(-3) ^a	2,99(-3) ^b	5,99(6)	8,33(5)	1,26(6) ^a	1,24(6) ^b
4p ² P ^o	9d ² D	4	6	5353,27	2845,40	2838,49 ^a	4,63(-2)	1,82(-3)	2,70(-3) ^a	2,66(-3) ^b	7,17(6)	9,97(5)	1,49(6) ^a	1,46(6) ^b
4p ² P ^o	9d ² D	4	4	5353,27	2845,40	2838,54 ^a	5,15(-3)	2,03(-4)	2,99(-4) ^a	2,95(-4) ^b	1,20(6)	1,66(5)	2,47(5) ^a	2,43(5) ^b
5p ² P ^o	9d ² D	2	4	9992,56	5452,77	5423,88 ^a	5,81(-2)	6,45(-3)	9,19(-3) ^a	8,36(-3) ^b	2,61(6)	7,24(5)	1,04(6) ^a	9,38(5) ^b
5p ² P ^o	9d ² D	4	6	10002,00	5456,88	5428,14 ^a	7,02(-2)	5,80(-3)	8,21(-3) ^a	7,44(-3) ^b	3,12(6)	8,67(5)	1,24(6) ^a	1,11(6) ^b
5p ² P ^o	9d ² D	4	4	10002,02	5456,88	5428,33 ^a	7,80(-3)	6,45(-4)	9,09(-4) ^a	8,27(-4) ^b	5,20(5)	1,44(5)	2,06(5) ^a	1,85(5) ^b
6p ² P ^o	9d ² D	2	4	18886,93	9830,91	9728,86 ^a	1,19(-1)	1,75(-2)	2,36(-2) ^a	2,11(-2) ^b	1,11(6)	6,03(5)	8,33(5) ^a	7,28(5) ^b
6p ² P ^o	9d ² D	4	6	18910,69	9838,02	9735,89 ^a	1,06(-1)	1,57(-2)	2,11(-2) ^a	1,88(-2) ^b	1,32(6)	7,21(5)	9,93(5) ^a	8,65(5) ^b
6p ² P ^o	9d ² D	4	4	18910,74	9838,02	9736,51 ^a	1,18(-2)	1,75(-3)	2,34(-3) ^a	2,09(-3) ^b	2,20(5)	1,20(5)	1,65(5) ^a	1,44(5) ^b
7p ² P ^o	9d ² D	2	4	41255,41	17886,53	17537,91 ^a	2,34(-1)	5,03(-2)	6,46(-2) ^a	5,82(-2) ^b	4,59(5)	5,24(5)	6,99(5) ^a	6,07(5) ^b
7p ² P ^o	9d ² D	4	6	41337,10	17900,45	17550,73 ^a	2,08(-1)	4,52(-2)	5,78(-2) ^a	5,23(-2) ^b	5,42(5)	6,28(5)	8,34(5) ^a	7,26(5) ^b
7p ² P ^o	9d ² D	4	4	41337,32	17900,46	17552,74 ^a	2,31(-2)	5,03(-3)	6,41(-3) ^a	5,81(-3) ^b	9,03(4)	1,05(5)	1,39(5) ^a	1,21(5) ^b
8p ² P ^o	9d ² D	2	4	192545,42	36176,82	34750,95 ^a	3,25	1,98(-1)	2,32(-1) ^a	2,18(-1) ^b	2,93(5)	5,05(5)	6,40(5) ^a	5,57(5) ^b
8p ² P ^o	9d ² D	4	6	193788,53	36214,16	34780,55 ^a	2,90	1,78(-1)	2,08(-1) ^a	1,96(-1) ^b	3,46(5)	6,05(5)	7,64(5) ^a	6,65(5) ^b
8p ² P ^o	9d ² D	4	4	193793,47	36214,17	34788,44 ^a	0,32	1,98(-2)	2,31(-2) ^a	2,18(-2) ^b	5,77(4)	1,01(5)	1,27(5) ^a	1,11(5) ^b
9p ² P ^o	9d ² D	2	4	36850,13	111408,08	100157,68 ^a	0,73	2,48	2,53 ^a	2,46 ^b	1,79(6)	6,67(5)	8,43(5) ^a	6,61(5) ^b
9p ² P ^o	9d ² D	4	6	36850,31	111650,63	100311,81 ^a	3,28	2,23	2,28 ^a	2,21 ^b	1,61(7)	7,95(5)	1,01(6) ^a	7,88(5) ^b

Tablo 3.2. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)			f				A_{ji} (s ⁻¹)			
Alt seviye	Üst seviye	g_i	g_j	Bu çalışma		Diğer	Bu çalışma		Diğer	Bu çalışma		Diğer	Bu çalışma	
				MCHF+BP	HFR	çalışmalar	MCHF+BP	HFR	çalışmalar	MCHF+BP	HFR	çalışmalar	MCHF+BP	HFR
9p ² P ^o	9d ² D	4	4	37492,50	111650,76	100377,44 ^a	1,82	2,48(-1)	2,54(-1) ^a	2,45(-1) ^b	1,73(7)	1,33(5)	1,68(5) ^a	1,31(5) ^b
4f ² F ^o	9d ² D	6	6	4554,63	4546,55	–	1,13(-5)	1,67(-5)	–	1,55(-5) ^b	3,62(3)	5,64(3)	–	5,01(3) ^b
4f ² F ^o	9d ² D	6	4	4554,63	4546,55	4521,79 ^a	1,58(-4)	2,45(-4)	2,39(-4) ^a	2,17(-4) ^b	7,61(4)	1,18(5)	1,17(5) ^a	1,05(5) ^b
4f ² F ^o	9d ² D	8	6	4554,65	4546,55	4520,98 ^a	1,70(-4)	2,63(-4)	2,56(-4) ^a	2,33(-4) ^b	7,25(4)	1,13(5)	1,11(5) ^a	1,00(5) ^b
5f ² F ^o	9d ² D	6	6	8280,72	8261,39	–	5,91(-5)	8,50(-5)	–	7,78(-5) ^b	5,75(3)	8,92(3)	–	7,60(3) ^b
5f ² F ^o	9d ² D	6	4	8280,73	8261,39	8183,37 ^a	0,83(-3)	1,19(-3)	1,17(-3) ^a	1,09(-3) ^b	1,21(5)	1,74(5)	1,75(5) ^a	1,60(5) ^b
5f ² F ^o	9d ² D	8	6	8280,76	8261,39	8182,95 ^a	0,89(-3)	1,27(-3)	1,25(-3) ^a	1,17(-3) ^b	1,15(5)	1,66(5)	1,66(5) ^a	1,52(5) ^b
6f ² F ^o	9d ² D	6	6	14904,53	14854,21	14601,86 ^a	2,30(-4)	3,15(-4)	3,10(-4) ^a	2,95(-4) ^b	6,91(3)	9,52(3)	9,71(3) ^a	8,91(3) ^b
6f ² F ^o	9d ² D	6	4	14904,56	14854,21	14603,25 ^a	3,22(-3)	4,41(-3)	4,36(-3) ^a	4,13(-3) ^b	1,45(5)	2,00(5)	2,05(5) ^a	1,87(5) ^b
6f ² F ^o	9d ² D	8	6	14904,61	14854,21	14601,34 ^a	3,45(-3)	4,72(-3)	4,65(-3) ^a	4,42(-3) ^b	1,38(5)	1,90(5)	1,94(5) ^a	1,78(5) ^b
7f ² F ^o	9d ² D	8	6	28791,60	28629,51	27699,81 ^a	1,43(-2)	1,91(-2)	1,83(-2) ^a	1,81(-2) ^b	1,54(5)	2,07(5)	2,12(5) ^a	1,97(5) ^b
7f ² F ^o	9d ² D	6	6	28791,42	28629,51	27700,92 ^a	0,96(-3)	1,27(-3)	1,22(-3) ^a	1,21(-3) ^b	7,68(3)	1,04(4)	1,06(4) ^a	9,84(3) ^b
7f ² F ^o	9d ² D	6	4	28791,53	28629,51	27705,92 ^a	1,34(-2)	1,78(-2)	1,71(-1) ^a	1,69(-1) ^b	1,61(5)	2,18(5)	2,24(5) ^a	2,07(5) ^b
8f ² F ^o	9d ² D	8	6	72859,45	71895,95	66375,61 ^a	0,98(-1)	1,34(-1)	1,24(-1) ^a	1,27(-1) ^b	1,64(5)	2,30(5)	2,50(5) ^a	2,19(5) ^b
8f ² F ^o	9d ² D	6	6	72858,75	71895,89	66383,15 ^a	6,51(-3)	8,90(-3)	8,28(-3) ^a	8,49(-3) ^b	8,18(3)	1,15(4)	1,25(4) ^a	1,10(4) ^b
8f ² F ^o	9d ² D	6	4	72859,45	71895,95	66411,89 ^a	0,91(-1)	1,25(-1)	1,16(-1) ^a	1,19(-1) ^b	1,72(5)	2,41(5)	2,64(5) ^a	2,30(5) ^b
4f ² F ^o	9g ² G	6	8	4549,63	4535,56	–	1,45(-2)	1,50(-2)	–	1,47(-2) ^b	3,51(6)	3,64(6)	–	3,56(6) ^b
4f ² F ^o	9g ² G	8	8	4549,65	4535,56	–	4,00(-4)	4,15(-4)	–	4,07(-4) ^b	1,30(5)	1,35(5)	–	1,32(5) ^b
4f ² F ^o	9g ² G	8	10	4549,65	4535,56	–	1,41(-2)	1,45(-2)	–	1,43(-2) ^b	3,64(6)	3,77(6)	–	3,70(6) ^b
5f ² F ^o	9g ² G	6	8	8264,21	8225,17	–	4,13(-2)	4,21(-2)	–	4,17(-2) ^b	3,02(6)	3,11(6)	–	3,08(6) ^b

Tablo 3.2. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)			f				A_{ji} (s ⁻¹)			
Alt seviye	Üst seviye	g_i	g_j	Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma		Diğer çalışmalar		
				MCHF+BP	HFR		MCHF+BP	HFR		MCHF+BP	HFR			
5f ² F ^o	9g ² G	8	8	8264,25	8225,17	–	1,15(-3)	1,17(-3)	–	1,16(-3) ^b	1,12(5)	1,15(5)	–	1,14(5) ^b
5f ² F ^o	9g ² G	8	10	8264,21	8225,17	–	3,10(-2)	4,09(-2)	–	4,05(-2) ^b	3,02(6)	3,22(6)	–	3,20(6) ^b
6f ² F ^o	9g ² G	6	8	14851,13	14737,52	–	9,66(-2)	9,75(-2)	–	9,77(-2) ^b	2,190(6)	2,25(6)	–	2,25(6) ^b
6f ² F ^o	9g ² G	8	8	14851,21	14737,53	–	2,68(-3)	2,71(-3)	–	2,71(-3) ^b	8,11(4)	8,32(4)	–	8,34(4) ^b
6f ² F ^o	9g ² G	8	10	14851,19	14737,52	–	9,33(-2)	9,48(-2)	–	9,50(-2) ^b	2,27(6)	2,33(6)	–	2,33(6) ^b
7f ² F ^o	9g ² G	8	8	28592,98	28199,20	–	6,95(-3)	6,96(-3)	–	7,07(-3) ^b	5,67(4)	5,84(4)	–	5,94(4) ^b
7f ² F ^o	9g ² G	8	10	28592,93	28199,19	–	2,43(-1)	2,44(-1)	–	2,48(-1) ^b	1,59(6)	1,64(6)	–	1,66(6) ^b
7f ² F ^o	9g ² G	6	8	28592,80	28199,19	–	2,50(-1)	2,51(-1)	–	2,55(-1) ^b	1,53(6)	1,58(6)	–	1,60(6) ^b
8f ² F ^o	9g ² G	8	8	71601,17	69242,49	–	0,28(-1)	2,84(-2)	–	2,92(-2) ^b	3,72(4)	3,96(4)	–	4,06(4) ^b
8f ² F ^o	9g ² G	8	10	71600,83	69242,44	–	1,00	0,99	–	1,02 ^b	1,04(6)	1,11(6)	–	1,14(6) ^b
8f ² F ^o	9g ² G	6	8	71600,49	69242,44	–	1,03	1,02	–	1,05 ^b	1,00(6)	1,07(6)	–	1,10(6) ^b
6h ² H ^o	9g ² G	12	10	14854,13	14762,98	–	2,76(-4)	2,82(-4)	–	2,77(-4) ^b	1,00(4)	1,04(4)	–	1,02(4) ^b
6h ² H ^o	9g ² G	10	8	14854,11	14762,98	–	2,70(-4)	2,76(-4)	–	2,71(-4) ^b	1,02(4)	1,05(4)	–	1,04(4) ^b
6h ² H ^o	9g ² G	10	10	14854,10	14762,98	–	6,13(-6)	6,00(-6)	–	6,16(-6) ^b	1,85(2)	1,92(2)	–	1,89(2) ^b
7h ² H ^o	9g ² G	12	10	28608,40	28259,77	–	2,69(-3)	2,76(-3)	–	2,72(-3) ^b	2,63(4)	2,77(4)	–	2,73(4) ^b
7h ² H ^o	9g ² G	10	8	28608,38	28259,77	–	2,64(-3)	2,70(-3)	–	2,66(-3) ^b	2,68(4)	2,82(4)	–	2,78(4) ^b
7h ² H ^o	9g ² G	10	10	28608,32	28259,76	–	6,00(-5)	6,10(-5)	–	6,05(-5) ^b	4,88(2)	5,13(2)	–	5,05(2) ^b
8h ² H ^o	9g ² G	12	10	71635,50	69492,75	–	3,05(-2)	3,19(-2)	–	3,17(-2) ^b	4,77(4)	5,29(4)	–	5,26(4) ^b
8h ² H ^o	9g ² G	10	8	71635,50	69492,75	–	3,00(-2)	3,12(-2)	–	3,10(-2) ^b	4,86(4)	5,39(4)	–	5,36(4) ^b
8h ² H ^o	9g ² G	10	10	71635,16	69492,70	–	6,80(-4)	7,09(-4)	–	7,05(-4) ^b	8,83(2)	9,80(2)	–	9,74(2) ^b

Tablo 3.2. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)		f					A_{ji} (s ⁻¹)			
Alt seviye	Üst seviye	g_i	g_j	Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma		Diğer çalışmalar		Bu çalışma		Diğer çalışmalar	
				MCHF+BP	HFR		MCHF+BP	HFR			MCHF+BP	HFR		
6h ² H ^o	9i ² I	10	12	14854,06	14761,24	–	5,94(-2)	5,98(-2)	–	5,98(-2) ^b	1,50(6)	1,53(6)	–	1,55(6) ^b
6h ² H ^o	9i ² I	12	12	14854,09	14761,24	–	7,61(-4)	7,67(-4)	–	–	2,30(4)	2,35(4)	–	–
6h ² H ^o	9i ² I	12	14	14854,08	14761,24	–	5,86(-2)	5,90(-2)	–	–	1,52(6)	1,55(6)	–	–
7h ² H ^o	9i ² I	10	12	28600,38	28253,37	–	2,94(-1)	2,97(-1)	–	–	2,00(6)	2,07(6)	–	–
7h ² H ^o	9i ² I	12	12	28600,45	28253,38	–	3,77(-3)	3,82(-3)	–	–	3,07(4)	3,19(4)	–	–
7h ² H ^o	9i ² I	12	14	28600,41	28253,37	–	2,90(-1)	2,94(-1)	–	–	2,03(6)	2,15(6)	–	–
8h ² H ^o	9i ² I	12	10	71614,74	69454,04	–	1,36	1,40	–	1,68 ^b	1,77(6)	2,33(6)	–	1,97(6) ^b
8h ² H ^o	9i ² I	12	12	71615,08	69454,09	–	2,09(-2)	2,16(-2)	–	–	2,72(4)	2,99(4)	–	–
8h ² H ^o	9i ² I	14	12	71614,85	69454,04	–	1,38	1,43	–	–	1,80(6)	2,30(6)	–	–

^a Fischer ve ark. [18], ^b Çelik ve ark. [4]

Tablo 3.3. Mg II'nin elektrik kuadrupol (E1) geçişleri için λ dalga boyları (Å), $\log(gf)$ logaritmik ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve A_{ji} geçiş olasılıkları (s^{-1})

Geçişler		λ (Å)				$\log(gf)$			A_{ji} (s^{-1})				
		Bu çalışma		Diğer		Bu çalışma		Diğer	Bu çalışma		Diğer		
		MCHF+BP	HFR	çalışmalar		MCHF+BP	HFR	çalışmalar	MCHF+BP	HFR	çalışmalar		
Alt seviye	Üst seviye												
3s $^2S_{1/2}$	3d $^2D_{5/2}$	1435,21	1398,79	1398,79 ^a	1398,79 ^b	-5,05	-5,05	-5,05 ^b	4,79(3)	5,03(3)	4,94(3) ^c	5,01(3) ^a	5,03(3) ^b
3s $^2S_{1/2}$	3d $^2D_{3/2}$	1435,22	1398,78	1398,77 ^a	1398,78 ^b	-5,23	-5,23	-5,23 ^b	4,79(3)	5,03(3)	4,94(3) ^c	5,01(3) ^a	5,03(3) ^b
3s $^2S_{1/2}$	4d $^2D_{5/2}$	1096,38	1071,69	1071,69 ^a	1071,69 ^b	-6,07	-6,16	-6,16 ^b	7,81(2)	6,63(2)	7,01(2) ^c	6,58(2) ^a	6,63(2) ^b
3s $^2S_{1/2}$	4d $^2D_{3/2}$	1096,38	1071,68	1071,68 ^a	1071,68 ^b	-6,25	-6,34	-6,34 ^b	7,81(2)	6,63(2)	7,01(2) ^c	6,59(2) ^a	6,63(2) ^b
3s $^2S_{1/2}$	5d $^2D_{5/2}$	988,23	966,93	996,93 ^a	966,93 ^b	6,94	-6,87	-6,87 ^b	1,31(2)	1,62(2)	—	4,43(2) ^a	1,62(2) ^b
3s $^2S_{1/2}$	5d $^2D_{3/2}$	988,23	966,93	966,93 ^a	966,93 ^b	-7,11	-7,04	-7,04 ^b	1,31(2)	1,62(2)	—	4,43(2) ^a	1,62(2) ^b
3s $^2S_{1/2}$	6d $^2D_{5/2}$	938,00	918,27	—	918,27 ^b	-7,37	-7,37	-7,37 ^b	5,43(1)	5,59(1)	—	—	5,59(1) ^b
3s $^2S_{1/2}$	6d $^2D_{3/2}$	938,00	918,27	—	918,27 ^b	-7,54	-7,55	-7,55 ^b	5,43(1)	5,59(1)	—	—	5,59(1) ^b
3s $^2S_{1/2}$	7d $^2D_{3/2}$	910,14	891,29	—	891,29 ^b	-8,03	-7,94	-7,94 ^b	1,87(1)	2,42(1)	—	—	2,42(1) ^b
3s $^2S_{1/2}$	7d $^2D_{5/2}$	910,14	891,29	—	891,29 ^b	-7,86	-7,76	-7,76 ^b	1,87(1)	2,43(1)	—	—	2,43(1) ^b
3s $^2S_{1/2}$	8d $^2D_{3/2}$	892,94	874,64	—	874,64 ^b	-9,06	-8,25	-8,25 ^b	1,80(0)	1,23(1)	—	—	1,23(1) ^b
3s $^2S_{1/2}$	8d $^2D_{5/2}$	892,94	874,64	—	874,64 ^b	-8,89	-8,07	-8,07 ^b	1,80(0)	1,23(1)	—	—	1,23(1) ^b
3s $^2S_{1/2}$	9d $^2D_{3/2}$	881,52	863,60	—	863,60 ^b	-7,65	-8,51	-8,51 ^b	4,81(1)	7,00(0)	—	—	7,00(0) ^b
3s $^2S_{1/2}$	9d $^2D_{5/2}$	881,52	863,60	—	863,60 ^b	-7,47	-8,33	-8,33 ^b	4,81(1)	7,00(0)	—	—	7,00(0) ^b
4s $^2S_{1/2}$	3d $^2D_{5/2}$	60012,85	59340,07	59338,7 ^a	—	-8,95	-8,98	—	3,45(-4)	3,28(-4)	—	3,42(-4) ^a	—
4s $^2S_{1/2}$	3d $^2D_{3/2}$	60030,16	59313,71	59308,1 ^a	—	-9,13	-9,16	—	3,45(-4)	3,29(-4)	—	3,42(-4) ^a	—
4s $^2S_{1/2}$	4d $^2D_{5/2}$	4310,48	4254,31	4254,3 ^a	—	-5,31	-5,30	—	2,94(2)	3,09(2)	3,00(2) ^c	2,93(2) ^a	—
4s $^2S_{1/2}$	4d $^2D_{3/2}$	4310,51	4254,21	4254,2 ^a	—	-5,48	-5,48	—	2,94(2)	3,09(2)	3,00(2) ^c	2,93(2) ^a	—
4s $^2S_{1/2}$	5d $^2D_{5/2}$	3013,75	2974,89	2974,9 ^a	—	-6,12	-6,12	—	0,92(2)	0,94(2)	1,02(2) ^c	1,25(2) ^a	—
4s $^2S_{1/2}$	5d $^2D_{3/2}$	3013,76	2974,87	2974,8 ^a	—	-6,30	-6,30	—	0,92(2)	0,94(2)	1,02(2) ^c	1,25(2) ^a	—
4s $^2S_{1/2}$	6d $^2D_{5/2}$	2590,69	2557,87	—	—	-6,62	-6,64	—	4,01(1)	3,87(1)	4,06(1) ^c	—	—

Tablo 3.3. (Devamı)

Geçişler		λ (Å)				$\log(gf)$			A_{ji} (s ⁻¹)				
		Bu çalışma		Diğer	çalışmalar	Bu çalışma		Diğer	çalışmalar	Bu çalışma		Diğer	çalışmalar
		MCHF+BP	HFR			MCHF+BP	HFR			MCHF+BP	HFR		
Alt seviye	Üst seviye												
4s ² S _{1/2}	6d ² D _{3/2}	2590,69	2557,86	–	–	-6,79	-6,82	–	–	4,01(1)	3,87(1)	4,06(1) ^c	–
4s ² S _{1/2}	7d ² D _{5/2}	2388,70	2358,93	–	–	-7,00	-7,02	–	–	1,97(1)	1,92(1)	2,08(1) ^c	–
4s ² S _{1/2}	7d ² D _{3/2}	2388,70	2358,93	–	–	-7,17	-7,19	–	–	1,97(1)	1,92(1)	2,08(1) ^c	–
4s ² S _{1/2}	8d ² D _{5/2}	2273,74	2245,79	–	–	-7,34	-7,31	–	–	0,98(1)	1,09(1)	1,21(1) ^c	–
4s ² S _{1/2}	8d ² D _{3/2}	2273,75	2245,79	–	–	-7,52	-7,48	–	–	0,98(1)	1,09(1)	1,21(1) ^c	–
4s ² S _{1/2}	9d ² D _{5/2}	2201,17	2174,41	–	–	-8,08	-7,54	–	–	1,91(0)	6,78(0)	7,69(0) ^c	–
4s ² S _{1/2}	9d ² D _{3/2}	2201,17	2174,41	–	–	-8,25	-7,72	–	–	1,91(0)	6,78(0)	7,69(0) ^c	–
3d ² D _{5/2}	4d ² D _{5/2}	–	4582,87	–	–	–	-5,95	-5,95 ^b	–	–	6,00(1)	6,36(1) ^c	–
3d ² D _{5/2}	4d ² D _{3/2}	4644,08	4582,76	4582,75 ^a	–	-6,53	-6,55	-6,55 ^b	–	2,28(1)	2,25(1)	2,38(1) ^c	1,56(1) ^a
3d ² D _{3/2}	4d ² D _{5/2}	4643,94	4583,02	4583 ^a	4583,02 ^b	-6,53	-6,55	-6,55 ^b	–	1,52(1)	1,50(1)	1,59(1) ^c	1,55(1) ^a
3d ² D _{3/2}	4d ² D _{3/2}	–	4582,92	–	4582,92 ^b	–	-6,18	-6,18 ^b	–	–	5,25(1)	5,56(1) ^c	–
3d ² D _{5/2}	5d ² D _{5/2}	–	3131,90	–	3131,90 ^b	–	-6,60	-6,60 ^b	–	–	2,86(1)	2,98(1) ^c	–
3d ² D _{5/2}	5d ² D _{3/2}	3173,11	3131,88	3131,86 ^a	3131,88 ^b	-7,21	-7,20	-7,20 ^b	–	1,01(1)	1,07(1)	1,12(2) ^c	0,534(-2) ^a
3d ² D _{3/2}	5d ² D _{5/2}	3173,05	3131,97	3131,98 ^a	3131,97 ^b	-7,21	-7,20	-7,20 ^b	–	6,72(0)	7,14(0)	7,46(0) ^c	5,15(0) ^a
3d ² D _{3/2}	5d ² D _{3/2}	–	3131,95	–	3131,95 ^b	–	-6,83	-6,83 ^b	–	–	2,50(1)	2,67(1) ^c	–
3d ² D _{5/2}	6d ² D _{5/2}	–	2673,10	–	2673,10 ^b	–	-7,00	-7,00 ^b	–	–	1,57(1)	1,63(1) ^c	–
3d ² D _{5/2}	6d ² D _{3/2}	2707,57	2673,08	–	2673,08 ^b	-7,70	-7,60	-7,60 ^b	–	4,50(0)	5,89(0)	6,11(0) ^c	–
3d ² D _{3/2}	6d ² D _{5/2}	2707,53	2673,15	–	2673,15 ^b	-7,70	-7,60	-7,60 ^b	–	3,00(0)	3,93(0)	4,07(0) ^c	–
3d ² D _{3/2}	6d ² D _{3/2}	–	2673,13	–	2673,13 ^b	–	-7,23	-7,23 ^b	–	–	1,37(1)	1,43(1) ^c	–
3d ² D _{5/2}	7d ² D _{3/2}	2487,72	2456,59	–	2456,59 ^b	-8,27	-7,89	-7,89 ^b	–	1,44(0)	3,59(0)	3,71(0) ^c	–
3d ² D _{5/2}	7d ² D _{5/2}	–	2456,59	–	2456,59 ^b	–	-7,28	-7,28 ^b	–	–	9,57(0)	9,90(0) ^c	–

Tablo 3.3. (Devamı)

Geçişler		λ (Å)				$\log(gf)$			A_{ji} (s ⁻¹)				
		Bu çalışma		Diğer	çalışmalar	Bu çalışma		Diğer	çalışmalar	Bu çalışma		Diğer	çalışmalar
		MCHF+BP	HFR			MCHF+BP	HFR			MCHF+BP	HFR		
Alt seviye	Üst seviye												
3d ² D _{3/2}	7d ² D _{3/2}	—	2456,63	—	2456,63 ^b	—	-7,52	-7,52 ^b	—	8,37(0)	8,66(0) ^c	—	8,37(0) ^b
3d ² D _{3/2}	7d ² D _{5/2}	2487,69	2456,63	—	2456,63 ^b	-8,27	-7,89	-7,89 ^b	0,96(0)	2,39(0)	2,47(0) ^c	—	2,39(0) ^b
3d ² D _{5/2}	8d ² D _{3/2}	2363,29	2334,13	—	2334,13 ^b	-10,10	-8,12	-8,12 ^b	2,34(-2)	2,35(0)	2,43(0) ^c	—	2,35(0) ^b
3d ² D _{5/2}	8d ² D _{5/2}	—	2334,13	—	2334,13 ^b	—	-7,51	-7,51 ^b	—	6,27(0)	6,48(0) ^c	—	6,27(0) ^b
3d ² D _{3/2}	8d ² D _{3/2}	—	2334,17	—	2334,17 ^b	—	-7,75	-7,75 ^b	—	5,49(0)	5,67(0) ^c	—	5,49(0) ^b
3d ² D _{3/2}	8d ² D _{5/2}	2363,26	2334,17	—	2334,17 ^b	-10,10	-8,12	-8,12 ^b	1,57(-2)	1,57(0)	1,62(0) ^c	—	1,57(0) ^b
3d ² D _{5/2}	9d ² D _{3/2}	2284,98	2257,12	—	2257,12 ^b	-7,40	-8,30	-8,30 ^b	2,89(1)	1,63(0)	1,68(0) ^c	—	1,63(0) ^b
3d ² D _{5/2}	9d ² D _{5/2}	—	2257,12	—	2257,12 ^b	—	-7,70	-7,70 ^b	—	4,34(0)	4,49(0) ^c	—	4,34(0) ^b
3d ² D _{3/2}	9d ² D _{3/2}	—	2257,16	—	2257,16 ^b	—	-7,94	-7,94 ^b	—	3,93(0)	3,93(0) ^c	—	3,93(0) ^{bb}
3d ² D _{3/2}	9d ² D _{5/2}	2284,95	2257,16	—	2257,16 ^b	-7,40	-8,30	—	1,93(1)	1,12(0)	1,12(0) ^c	—	1,12(0) ^b
3d ² D _{5/2}	5g ² G _{7/2}	3159,60	3104,10	—	—	-6,05	-6,10	—	7,42(1)	6,83(1)	—	—	—
3d ² D _{5/2}	5g ² G _{9/2}	3159,60	3104,10	—	—	-4,95	-5,01	—	7,42(2)	6,83(2)	—	—	—
3d ² D _{3/2}	5g ² G _{7/2}	3159,55	3104,17	—	—	-5,10	-5,15	—	6,68(2)	6,15(2)	—	—	—
3d ² D _{5/2}	6g ² G _{7/2}	2701,65	2660,85	—	—	-6,32	-6,36	—	5,51(1)	5,21(1)	—	—	—
3d ² D _{5/2}	6g ² G _{9/2}	2701,65	2660,85	—	—	-5,22	-5,26	—	5,51(2)	5,21(2)	—	—	—
3d ² D _{3/2}	6g ² G _{7/2}	2701,62	2660,91	—	—	-5,36	-5,40	—	4,96(2)	4,68(2)	—	—	—
3d ² D _{5/2}	7g ² G _{7/2}	2484,52	2449,92	—	—	-6,54	-6,58	—	3,89(1)	3,63(1)	—	—	—
3d ² D _{5/2}	7g ² G _{9/2}	2484,52	2449,92	—	—	-5,44	-5,49	—	3,89(2)	3,63(2)	—	—	—
3d ² D _{3/2}	7g ² G _{7/2}	2484,49	2449,97	—	—	-5,58	-5,63	—	3,50(2)	3,27(2)	—	—	—
3d ² D _{5/2}	8g ² G _{7/2}	2361,34	2330,04	—	—	-6,70	-6,78	—	3,02(1)	2,56(1)	—	—	—
3d ² D _{5/2}	8g ² G _{9/2}	2361,34	2330,04	—	—	-5,60	-5,68	—	3,02(2)	2,56(2)	—	—	—

Tablo 3.3. (Devamı)

Geçişler		λ (Å)				$\log(gf)$			A_{ji} (s ⁻¹)				
		Bu çalışma		Diğer		Bu çalışma		Diğer	Bu çalışma		Diğer		
		MCHF+BP	HFR	çalışmalar		MCHF+BP	HFR	çalışmalar	MCHF+BP	HFR	çalışmalar		
Alt seviye	Üst seviye												
3d ² D _{3/2}	8g ² G _{7/2}	2361,32	2330,08	–	–	-5,74	-5,82	–	2,72(2)	2,31(2)	–	–	–
3d ² D _{5/2}	9g ² G _{7/2}	2283,72	2254,41	–	–	-6,61	-6,95	–	3,91(1)	1,85(1)	–	–	–
3d ² D _{5/2}	9g ² G _{9/2}	2283,72	2254,41	–	–	-5,52	-5,85	–	3,91(2)	1,85(2)	–	–	–
3d ² D _{3/2}	9g ² G _{7/2}	2283,70	2254,45	–	–	-5,66	-5,99	–	3,52(2)	1,67(2)	–	–	–
3p ² P _{1/2}	4p ² P _{3/2}	1661,27	2223,18	2223,2 ^a	2223,18 ^b	-9,24	-5,94	-5,94 ^b	3,48(-1)	3,92(2)	3,85(2) ^c	3,97(2) ^a	3,92(2) ^b
3p ² P _{3/2}	4p ² P _{1/2}	1663,58	2229,23	2229,2 ^a	2229,23 ^b	-9,05	-5,94	-5,94 ^b	1,08(0)	7,73(2)	7,60(2) ^c	7,90(2) ^a	7,73(2) ^b
3p ² P _{3/2}	4p ² P _{3/2}	–	2227,71	2227,7 ^a	2227,71 ^b	–	-5,94	-5,94 ^b	–	3,88(2)	3,82(2) ^c	3,75(2) ^a	3,88(2) ^b
3p ² P _{1/2}	5p ² P _{3/2}	1451,92	1618,14	1618,1 ^a	1618,14 ^b	-9,08	-6,51	-6,51 ^b	6,53(-1)	1,96(2)	1,53(2) ^c	1,44(2) ^a	1,96(2) ^b
3p ² P _{3/2}	5p ² P _{1/2}	1453,59	1620,90	1620,9 ^a	1620,90 ^b	-9,02	-6,52	-6,52 ^b	1,51(0)	3,88(2)	3,05(2) ^c	2,86(2) ^a	3,88(2) ^b
3p ² P _{3/2}	5p ² P _{3/2}	–	1620,54	1620,5 ^a	1620,54 ^b	–	-6,51	-6,51 ^b	–	1,94(2)	1,53(2) ^c	1,30(2) ^a	1,94(2) ^b
3p ² P _{1/2}	6p ² P _{3/2}	1359,01	1429,38	–	1429,38 ^b	-8,85	-6,88	-6,88 ^b	1,27(0)	1,09(2)	1,04(2) ^c	–	1,09(2) ^b
3p ² P _{3/2}	6p ² P _{1/2}	1360,42	1431,40	–	1431,40 ^b	-8,66	-6,88	-6,88 ^b	3,90(0)	2,16(2)	2,06(2) ^c	–	2,16(2) ^b
3p ² P _{3/2}	6p ² P _{3/2}	–	1431,25	–	1431,25 ^b	–	-6,88	-6,88 ^b	–	1,08(2)	1,03(2) ^c	–	1,08(2) ^b
3p ² P _{1/2}	7p ² P _{3/2}	1308,02	1341,59	–	1341,59 ^b	-9,13	-7,15	-7,15 ^b	7,20(-1)	6,60(1)	5,11(1) ^c	–	6,60(1) ^b
3p ² P _{3/2}	7p ² P _{1/2}	1309,30	1343,32	–	1343,32 ^b	-8,66	-7,15	-7,15 ^b	4,26(0)	1,31(2)	1,02(2) ^c	–	1,31(2) ^b
3p ² P _{3/2}	7p ² P _{3/2}	–	1343,24	–	1343,24 ^b	–	-7,15	-7,15 ^b	–	6,56(1)	5,10(1) ^c	–	6,56(1) ^b
3p ² P _{1/2}	8p ² P _{3/2}	1276,26	1292,6	–	1292,60 ^b	-9,74	-7,37	-7,37 ^b	1,84(-1)	4,29(1)	3,33(1) ^c	–	4,29(1) ^b
3p ² P _{3/2}	8p ² P _{1/2}	1277,46	1294,18	–	1294,18 ^b	-8,91	-7,37	-7,37 ^b	2,48(0)	8,53(1)	6,64(1) ^c	–	8,53(1) ^b
3p ² P _{3/2}	8p ² P _{3/2}	–	1294,13	–	1294,13 ^b	–	-7,37	-7,37 ^b	–	4,26(1)	3,32(1) ^c	–	4,26(1) ^b
3p ² P _{1/2}	9p ² P _{3/2}	1225,74	1262,16	–	1262,16 ^b	-6,93	-7,55	-7,55 ^b	1,31(2)	2,94(1)	2,29(1) ^c	–	2,94(1) ^b
3p ² P _{3/2}	9p ² P _{1/2}	1227,49	1263,65	–	1263,65 ^b	-7,20	-7,55	-7,55 ^b	1,38(2)	5,85(1)	4,56(1) ^c	–	5,85(1) ^b

Tablo 3.3. (Devamı)

Geçişler		λ (Å)				$\log(gf)$			A_{ji} (s ⁻¹)				
		Bu çalışma		Diğer çalışmalar		Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma		Diğer çalışmalar		
		MCHF+BP	HFR			MCHF+BP	HFR		MCHF+BP	HFR			
Alt seviye	Üst seviye												
3p ² P _{3/2} ^o	9p ² P _{3/2} ^o	–	1263,62	–	1263,62 ^b	–	-7,55	-7,55 ^b	–	2,92(1)	2,28(1) ^c	–	2,92(1) ^b
3p ² P _{1/2} ^o	4f ² F _{5/2} ^o	1756,84	1720,27	1720,3 ^a	1720,27 ^b	-5,13	-5,17	-5,17 ^b	2,66(3)	2,56(3)	2,86(3) ^c	2,62(3) ^a	2,56(3) ^b
3p ² P _{3/2} ^o	4f ² F _{5/2} ^o	1759,00	1722,99	1722,9 ^a	1722,99 ^b	-5,68	-5,71	-5,71 ^b	7,48(2)	7,25(2)	8,12(2) ^c	7,46(2) ^a	7,25(2) ^b
3p ² P _{3/2} ^o	4f ² F _{7/2} ^o	1759,00	1722,99	1723,0 ^a	1722,99 ^b	-4,90	-4,94	-4,94 ^b	3,37(3)	3,26(3)	3,65(3) ^c	3,36(3) ^a	3,26(3) ^b
3p ² P _{1/2} ^o	5f ² F _{5/2} ^o	1497,08	1470,15	1470,1 ^a	1470,15 ^b	-5,54	-5,55	-5,55 ^b	1,44(3)	1,46(3)	1,37(3) ^c	1,17(3) ^a	1,46(3) ^b
3p ² P _{3/2} ^o	5f ² F _{5/2} ^o	1498,64	1472,13	1472,1 ^a	1472,13 ^b	-6,08	-6,09	-6,09 ^b	4,11(2)	4,14(2)	3,90(2) ^c	3,33(2) ^a	4,14(2) ^b
3p ² P _{3/2} ^o	5f ² F _{7/2} ^o	1498,64	1472,13	1472,1 ^a	1472,13 ^b	-5,30	-5,32	-5,32 ^b	1,85(3)	1,87(3)	1,76(3) ^c	1,50(3) ^a	1,87(3) ^b
3p ² P _{1/2} ^o	6f ² F _{5/2} ^o	1385,77	1362,53	–	1362,53 ^b	-5,84	-5,84	-5,84 ^b	8,37(2)	8,60(2)	8,30(2) ^c	–	8,60(2) ^b
3p ² P _{3/2} ^o	6f ² F _{5/2} ^o	1387,11	1364,23	–	1364,23 ^b	-6,38	-6,39	-6,39 ^b	2,39(2)	2,44(2)	2,36(2) ^c	–	2,44(2) ^b
3p ² P _{3/2} ^o	6f ² F _{7/2} ^o	1387,11	1364,23	–	1364,23 ^b	-5,61	-5,61	-5,61 ^b	1,07(3)	1,10(3)	1,06(3) ^c	–	1,10(3) ^b
3p ² P _{1/2} ^o	7f ² F _{5/2} ^o	1326,30	1304,94	–	1304,94 ^b	-6,07	-6,08	-6,08 ^b	5,30(2)	5,42(2)	5,32(2) ^c	–	5,42(2) ^b
3p ² P _{3/2} ^o	7f ² F _{5/2} ^o	1327,53	1306,50	–	1306,50 ^b	-6,62	-6,63	-6,63 ^b	1,50(2)	1,54(2)	1,52(2) ^c	–	1,54(2) ^b
3p ² P _{3/2} ^o	7f ² F _{7/2} ^o	1327,53	1306,50	–	1306,50 ^b	-5,85	-5,85	-5,85 ^b	6,74(2)	6,93(2)	6,82(2) ^c	–	6,93(2) ^b
3p ² P _{1/2} ^o	8f ² F _{5/2} ^o	1290,37	1270,10	–	1270,10 ^b	-6,26	-6,28	-6,28 ^b	3,68(2)	3,62(2)	3,59(2) ^c	–	3,62(2) ^b
3p ² P _{3/2} ^o	8f ² F _{5/2} ^o	1291,53	1271,58	–	1271,58 ^b	-6,82	-6,83	-6,83 ^b	1,01(2)	1,03(2)	1,02(2) ^c	–	1,03(2) ^b
3p ² P _{3/2} ^o	8f ² F _{7/2} ^o	1291,53	1271,58	–	1271,58 ^b	-6,04	-6,05	-6,05 ^b	4,53(2)	4,63(2)	4,61(2) ^c	–	4,63(2) ^b
3p ² P _{1/2} ^o	9f ² F _{5/2} ^o	1266,84	1247,27	–	1247,27 ^b	-6,33	-6,45	-6,45 ^b	3,26(2)	2,54(2)	2,54(2) ^c	–	2,54(2) ^b
3p ² P _{3/2} ^o	9f ² F _{5/2} ^o	1267,96	1248,69	–	1248,69 ^b	-6,97	-7,00	-7,00 ^b	7,47(1)	7,21(1)	7,22(1) ^c	–	7,21(1) ^b
3p ² P _{3/2} ^o	9f ² F _{7/2} ^o	1267,96	1248,69	–	1248,69 ^b	-6,19	-6,22	-6,22 ^b	3,36(2)	3,24(2)	3,25(2) ^c	–	3,24(2) ^b
3d ² D _{5/2}	5s ² S _{1/2}	3163,69	4694,77	4694,8 ^a	–	-7,00	-6,58	–	3,34(1)	3,94(1)	–	1,48(1) ^a	–

Tablo 3.3. (Devamı)

Geçişler		λ (Å)				$\log(gf)$			A_{ji} (s ⁻¹)				
		Bu çalışma		Diğer çalışmalar		Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma			Diğer çalışmalar	
		MCHF+BP	HFR			MCHF+BP	HFR		MCHF+BP	HFR			
Alt seviye	Üst seviye												
3d ² D _{3/2}	5s ² S _{1/2}	3163,64	4694,94	4694,9 ^a	–	-7,17	-6,76	–	2,23(1)	2,63(1)	–	1,47(1) ^a	–
4d ² D _{5/2}	5s ² S _{1/2}	9924,84	192269,98	192278,1 ^a	–	-6,48	-9,34	–	1,12(1)	1,36(-5)	–	1,44(-5) ^a	–
4d ² D _{3/2}	5s ² S _{1/2}	9924,66	192085,69	192086,1 ^a	–	-6,68	-9,52	–	7,46(0)	1,37(-5)	–	1,45(-5) ^a	–
5s ² S _{1/2}	5d ² D _{5/2}	–	9408,04	9408,0 ^a	–	–	-5,48	–	–	4,15(1)	4,32(1) ^c	4,22(1) ^a	–
5s ² S _{1/2}	5d ² D _{3/2}	–	9407,82	9407,8 ^a	–	–	-5,66	–	–	4,15(1)	4,32(1) ^c	4,22(1) ^a	–
5s ² S _{1/2}	6d ² D _{5/2}	18780,08	6207,52	–	–	-5,63	-6,20	–	7,40(0)	1,84(1)	–	–	–
5s ² S _{1/2}	6d ² D _{3/2}	18780,25	6207,42	–	–	-5,81	-6,37	–	7,40(0)	1,84(1)	–	–	–
5s ² S _{1/2}	7d ² D _{3/2}	11643,13	5152,89	–	–	-6,51	-6,82	–	3,80(0)	9,49(0)	–	–	–
5s ² S _{1/2}	7d ² D _{5/2}	11643,10	5152,89	–	–	-6,33	-6,64	–	3,80(0)	9,49(0)	–	–	–
5s ² S _{1/2}	8d ² D _{3/2}	9341,18	4642,05	–	–	-6,97	-7,15	–	2,04(0)	5,51(0)	–	–	–
5s ² S _{1/2}	8d ² D _{5/2}	9341,16	4642,05	–	–	-6,80	-6,97	–	2,04(0)	5,50(0)	–	–	–
5s ² S _{1/2}	9d ² D _{3/2}	8226,82	4347,09	–	–	-7,46	-7,40	–	0,85(0)	3,48(0)	–	–	–
5s ² S _{1/2}	9d ² D _{5/2}	8226,82	4347,09	–	–	-7,29	-7,23	–	0,85(0)	3,48(0)	–	–	–
4d ² D _{5/2}	5d ² D _{5/2}	–	9892,08	–	–	–	-5,91	–	–	1,39(1)	1,43(1) ^c	–	–
4d ² D _{5/2}	5d ² D _{3/2}	10018,18	9891,83	9891,77 ^a	–	-6,51	-6,52	–	5,16(0)	5,20(0)	3,57(0) ^c	3,42(0) ^a	–
4d ² D _{3/2}	5d ² D _{5/2}	10017,90	9892,57	9892,6 ^a	–	-6,51	-6,52	–	3,44(0)	3,46(0)	5,36(0) ^c	3,39(0) ^a	–
4d ² D _{3/2}	5d ² D _{3/2}	–	9892,32	–	–	–	-6,15	–	–	1,21(1)	1,25(1) ^c	–	–
4d ² D _{5/2}	6d ² D _{5/2}	–	6414,62	–	–	–	-6,51	–	–	8,28(0)	8,47(0) ^c	–	–
4d ² D _{5/2}	6d ² D _{3/2}	6493,31	6414,51	–	–	-7,13	-7,12	–	2,93(0)	3,11(0)	3,18(0) ^c	–	–
4d ² D _{3/2}	6d ² D _{5/2}	6493,21	6414,82	–	–	-7,13	-7,12	–	1,95(0)	2,07(0)	2,12(0) ^c	–	–
4d ² D _{3/2}	6d ² D _{3/2}	–	6414,72	–	–	–	-6,75	–	–	7,24(0)	7,42(0) ^c	–	–

Tablo 3.3. (Devamı)

Geçişler		λ (Å)				$\log(gf)$			A_{ji} (s ⁻¹)				
		Bu çalışma		Diğer	çalışmalar	Bu çalışma		Diğer	çalışmalar	Bu çalışma		Diğer	çalışmalar
		MCHF+BP	HFR			MCHF+BP	HFR			MCHF+BP	HFR		
Alt seviye	Üst seviye												
4d ² D _{5/2}	7d ² D _{3/2}	5357,77	5294,79	–	–	-7,57	-7,49	–	–	1,55(0)	1,94(0)	1,99(0) ^c	–
4d ² D _{5/2}	7d ² D _{5/2}	–	5294,79	–	–	–	-6,88	–	–	–	5,19(0)	5,30(0) ^c	–
4d ² D _{3/2}	7d ² D _{3/2}	–	5294,93	–	–	–	-7,12	–	–	–	4,54(0)	4,64(0) ^c	–
4d ² D _{3/2}	7d ² D _{5/2}	5357,71	5294,93	–	–	-7,57	-7,49	–	–	1,04(0)	1,30(0)	1,32(0) ^c	–
4d ² D _{5/2}	8d ² D _{3/2}	4812,09	4756,90	–	–	-8,13	-7,76	–	–	0,53(0)	1,29(0)	–	–
4d ² D _{5/2}	8d ² D _{5/2}	–	4756,90	–	–	–	-7,15	–	–	–	3,44(0)	–	–
4d ² D _{3/2}	8d ² D _{3/2}	–	4757,01	–	–	–	-7,39	–	–	–	3,01(0)	–	–
4d ² D _{3/2}	8d ² D _{5/2}	4812,04	4757,01	–	–	-8,13	-7,76	–	–	3,55(-1)	8,61(-1)	–	–
4d ² D _{5/2}	9d ² D _{3/2}	4498,21	4447,65	–	–	-8,12	-7,97	–	–	6,22(-1)	9,00(-1)	–	–
4d ² D _{5/2}	9d ² D _{5/2}	–	4447,65	–	–	–	-7,37	–	–	–	2,40(0)	–	–
4d ² D _{3/2}	9d ² D _{3/2}	–	4447,75	–	–	–	-7,60	–	–	–	2,10(0)	–	–
4d ² D _{3/2}	9d ² D _{5/2}	4498,17	4447,75	–	–	-8,12	-7,97	–	–	4,15(-1)	6,00(-1)	–	–
4d ² D _{5/2}	5g ² G _{7/2}	9884,75	9619,92	–	–	-6,08	-6,08	–	–	6,96(0)	7,46(0)	–	–
4d ² D _{5/2}	5g ² G _{9/2}	9884,71	9619,92	–	–	-4,99	-4,99	–	–	6,96(1)	7,46(1)	–	–
4d ² D _{3/2}	5g ² G _{7/2}	9884,57	9620,38	–	–	-5,13	-5,13	–	–	6,27(1)	6,72(1)	–	–
4d ² D _{5/2}	6g ² G _{7/2}	6459,35	6344,57	–	–	-7,97	-8,63	–	–	2,12(-1)	4,88(-2)	–	–
4d ² D _{5/2}	6g ² G _{9/2}	6459,34	6344,57	–	–	-6,88	-7,53	–	–	2,12(0)	4,88(-1)	–	–
4d ² D _{3/2}	6g ² G _{7/2}	6459,27	6344,77	–	–	-7,02	-7,67	–	–	1,91(0)	4,39(-1)	–	–
4d ² D _{5/2}	7g ² G _{7/2}	5342,95	5263,93	–	–	-7,34	-7,53	–	–	1,34(0)	8,84(-1)	–	–
4d ² D _{5/2}	7g ² G _{9/2}	5342,94	5263,93	–	–	-6,24	-6,44	–	–	1,34(1)	0,88(1)	–	–
4d ² D _{3/2}	7g ² G _{7/2}	5342,89	5264,07	–	–	-6,38	-6,58	–	–	1,21(1)	0,79(1)	–	–

Tablo 3.3. (Devamı)

Geçişler		λ (Å)				$\log(gf)$			A_{ji} (s ⁻¹)				
		Bu çalışma		Diğer çalışmalar		Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma			Diğer çalışmalar	
		MCHF+BP	HFR			MCHF+BP	HFR		MCHF+BP	HFR			
Alt seviye	Üst seviye												
4d ² D _{5/2}	8g ² G _{7/2}	4804,04	4739,94	–	–	-7,30	-7,49	–	1,82(0)	1,21(0)	–	–	–
4d ² D _{5/2}	8g ² G _{9/2}	4804,04	4739,94	–	–	-6,20	-6,39	–	1,82(1)	1,21(1)	–	–	–
4d ² D _{3/2}	8g ² G _{7/2}	4804,00	4740,05	–	–	-6,34	-6,53	–	1,63(1)	1,09(1)	–	–	–
4d ² D _{5/2}	9g ² G _{7/2}	4493,33	4437,13	–	–	-7,15	-7,55	–	2,93(0)	1,19(0)	–	–	–
4d ² D _{5/2}	9g ² G _{9/2}	4493,33	4437,13	–	–	-6,05	-6,45	–	2,93(1)	1,19(1)	–	–	–
4d ² D _{3/2}	9g ² G _{7/2}	4493,29	4437,23	–	–	-6,19	-6,60	–	2,64(1)	1,07(1)	–	–	–
4p ² P _{1/2}	5p ² P _{3/2}	11499,82	5934,93	5934,9 ^a	–	-6,21	-6,00	–	7,72(0)	4,76(1)	4,31(1) ^c	4,44(1) ^a	–
4p ² P _{3/2}	5p ² P _{1/2}	11530,50	5950,56	5950,6 ^a	–	-6,21	-6,00	–	1,55(1)	9,39(1)	8,63(1) ^c	8,84(1) ^a	–
4p ² P _{3/2}	5p ² P _{3/2}	–	5945,67	5945,7 ^a	–	–	-6,00	–	–	4,72(1)	4,31(1) ^c	4,14(1) ^a	–
4p ² P _{1/2}	6p ² P _{3/2}	7459,47	3998,36	–	–	-7,41	-6,56	–	1,16(0)	2,85(1)	2,54(1) ^c	–	–
4p ² P _{3/2}	6p ² P _{1/2}	7470,80	4004,41	–	–	-7,40	-6,57	–	2,38(0)	5,66(1)	5,07(1) ^c	–	–
4p ² P _{3/2}	6p ² P _{3/2}	–	4003,23	–	–	–	-6,57	–	–	2,84(1)	2,54(1) ^c	–	–
4p ² P _{1/2}	7p ² P _{3/2}	6144,51	3379,70	–	–	-7,18	-6,92	–	2,93(0)	1,78(1)	1,59(1) ^c	–	–
4p ² P _{3/2}	7p ² P _{1/2}	6151,50	3383,68	–	–	-7,19	-6,92	–	5,70(0)	3,53(1)	3,17(1) ^c	–	–
4p ² P _{3/2}	7p ² P _{3/2}	–	3383,18	–	–	–	-6,92	–	–	1,77(1)	1,59(1) ^c	–	–
4p ² P _{1/2}	8p ² P _{3/2}	5501,25	3085,13	–	–	-5,85	-7,18	–	7,82(1)	1,17(1)	1,05(1) ^c	–	–
4p ² P _{3/2}	8p ² P _{1/2}	5506,41	3088,30	–	–	-5,85	-7,18	–	1,54(2)	2,33(1)	2,10(1) ^c	–	–
4p ² P _{3/2}	8p ² P _{3/2}	–	3088,03	–	–	–	-7,18	–	–	1,16(1)	1,05(1) ^c	–	–
4p ² P _{1/2}	9p ² P _{3/2}	4671,08	2917,22	–	–	-4,50	-7,39	–	7,82(2)	8,07(0)	7,33(0) ^c	–	–
4p ² P _{3/2}	9p ² P _{1/2}	4684,25	2919,98	–	–	-4,99	-7,39	–	1,56(3)	1,61(1)	1,46(1) ^c	–	–
4p ² P _{3/2}	9p ² P _{3/2}	–	2919,81	–	–	–	-7,39	–	–	8,04(0)	7,31(0) ^c	–	–

Tablo 3.3. (Devamı)

Geçişler		λ (Å)				$\log(gf)$			A_{ji} (s ⁻¹)				
		Bu çalışma		Diğer çalışmalar		Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma		Diğer		
		MCHF+BP	HFR			MCHF+BP	HFR		MCHF+BP	HFR	çalışmalar		
Alt seviye	Üst seviye												
4p ² P _{1/2} ^o	4f ² F _{5/2} ^o	30658,29	7587,14	7587,2 ^a	–	-7,19	-5,61	–	2,27(-1)	4,76(1)	4,66(1) ^c	4,73(1) ^a	–
4p ² P _{3/2} ^o	4f ² F _{5/2} ^o	30530,24	7604,71	7604,8 ^a	–	-7,73	-6,16	–	3,32(-2)	1,34(1)	1,32(1) ^c	1,34(1) ^a	–
4p ² P _{3/2} ^o	4f ² F _{7/2} ^o	30531,38	7604,71	7604,7 ^a	–	-6,95	-5,38	–	1,99(-1)	6,05(1)	5,94(1) ^c	6,02(1) ^a	–
4p ² P _{1/2} ^o	5f ² F _{5/2} ^o	15111,34	4334,56	4334,6 ^a	–	-5,56	-6,00	–	1,34(1)	5,89(1)	4,80(1) ^c	4,80(1) ^a	–
4p ² P _{3/2} ^o	5f ² F _{5/2} ^o	15142,65	4340,29	4340,3 ^a	–	-6,10	-6,55	–	3,81(0)	1,67(1)	1,38(1) ^c	1,37(1) ^a	–
4p ² P _{3/2} ^o	5f ² F _{7/2} ^o	15142,51	4340,29	4340,3 ^a	–	-5,32	-5,77	–	1,71(1)	7,52(1)	6,21(1) ^c	6,18(1) ^a	–
4p ² P _{1/2} ^o	6f ² F _{5/2} ^o	8344,17	3515,83	–	–	-7,11	-6,10	–	1,22(0)	7,20(1)	6,52(1) ^c	–	–
4p ² P _{3/2} ^o	6f ² F _{5/2} ^o	8353,70	3519,60	–	–	-7,65	-6,64	–	3,57(-1)	2,05(1)	1,87(1) ^c	–	–
4p ² P _{3/2} ^o	6f ² F _{7/2} ^o	8353,68	3519,60	–	–	-6,87	-5,86	–	1,61(0)	9,20(1)	8,41(1) ^c	–	–
4p ² P _{1/2} ^o	7f ² F _{5/2} ^o	6570,06	3156,37	–	–	-7,03	-6,28	–	2,37(0)	5,84(1)	5,52(1) ^c	–	–
4p ² P _{3/2} ^o	7f ² F _{5/2} ^o	6575,97	3159,40	–	–	-7,57	-6,83	–	6,86(-1)	1,66(1)	1,58(1) ^c	–	–
4p ² P _{3/2} ^o	7f ² F _{7/2} ^o	6575,96	3159,40	–	–	-6,79	-6,05	–	3,09(0)	7,47(1)	7,11(1) ^c	–	–
4p ² P _{1/2} ^o	8f ² F _{5/2} ^o	5773,36	2959,98	–	–	-9,39	-6,46	–	1,34(-2)	4,43(1)	4,28(1) ^c	–	–
4p ² P _{3/2} ^o	8f ² F _{5/2} ^o	5777,92	2962,65	–	–	-9,96	-7,00	–	3,59(-3)	1,26(1)	1,23(1) ^c	–	–
4p ² P _{3/2} ^o	8f ² F _{7/2} ^o	5777,92	2962,65	–	–	-9,19	-6,23	–	1,62(-2)	5,66(1)	5,51(1) ^c	–	–
4p ² P _{1/2} ^o	9f ² F _{5/2} ^o	5330,22	2838,88	–	–	-5,55	-6,62	–	1,11(2)	3,34(1)	3,27(1) ^c	–	–
4p ² P _{3/2} ^o	9f ² F _{5/2} ^o	5334,11	2841,34	–	–	-6,08	-7,16	–	3,19(1)	9,49(0)	9,36(0) ^c	–	–
4p ² P _{3/2} ^o	9f ² F _{7/2} ^o	5334,10	2841,34	–	–	-5,31	-6,38	–	1,44(2)	4,27(1)	4,21(1) ^c	–	–
4f ² F _{5/2} ^o	5f ² F _{5/2} ^o	–	10111,02	–	–	–	-6,11	–	–	8,36(0)	8,24(1) ^c	–	–
4f ² F _{5/2} ^o	5f ² F _{7/2} ^o	10122,10	10111,02	–	–	-6,89	-6,89	–	1,05(0)	1,05(0)	1,05(0) ^c	–	–
4f ² F _{7/2} ^o	5f ² F _{5/2} ^o	10122,28	10111,02	–	–	-6,89	-6,89	–	1,40(0)	1,30(0)	1,40(0) ^c	–	–

Tablo 3.3. (Devamı)

Geçişler		λ (Å)				$\log(gf)$			A_{ji} (s ⁻¹)				
		Bu çalışma		Diğer çalışmalar		Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma			Diğer çalışmalar	
		MCHF+BP	HFR			MCHF+BP	HFR		MCHF+BP	HFR			
Alt seviye	Üst seviye												
4f ² F _{7/2} ^o	5f ² F _{7/2} ^o	—	10111,02	—	—	—	-5,97	—	—	8,71(0)	1,47(0) ^c	—	—
4f ² F _{5/2} ^o	6f ² F _{5/2} ^o	—	6551,96	—	—	—	-6,80	—	—	4,13(0)	—	—	—
4f ² F _{5/2} ^o	6f ² F _{7/2} ^o	10124,87	6551,96	—	—	-7,57	-7,58	—	5,22(-1)	5,16(-1)	—	—	—
4f ² F _{7/2} ^o	6f ² F _{5/2} ^o	6560,87	6551,96	—	—	-7,57	-7,58	—	6,95(-1)	6,88(-1)	—	—	—
4f ² F _{7/2} ^o	6f ² F _{7/2} ^o	—	6551,96	—	—	—	-6,66	—	—	4,30(0)	—	—	—
4f ² F _{5/2} ^o	7f ² F _{5/2} ^o	—	5404,88	—	—	—	-7,21	—	—	2,34(0)	—	—	—
4f ² F _{5/2} ^o	7f ² F _{7/2} ^o	5412,06	5404,88	—	—	-7,57	-7,99	—	2,97(-1)	2,93(-1)	—	—	—
4f ² F _{7/2} ^o	7f ² F _{5/2} ^o	5412,10	5404,88	—	—	-7,57	-7,99	—	3,95(-1)	3,91(-1)	—	—	—
4f ² F _{7/2} ^o	7f ² F _{7/2} ^o	—	5404,88	—	—	—	-7,07	—	—	2,44(0)	—	—	—
4f ² F _{5/2} ^o	8f ² F _{5/2} ^o	—	4853,47	—	—	—	-7,51	—	—	1,47(0)	—	—	—
4f ² F _{5/2} ^o	8f ² F _{7/2} ^o	4859,79	4853,47	—	—	-8,28	-8,29	—	1,85(-1)	1,83(-1)	—	—	—
4f ² F _{7/2} ^o	8f ² F _{5/2} ^o	4859,82	4853,47	—	—	-8,28	-8,29	—	2,46(-1)	2,45(-1)	—	—	—
4f ² F _{7/2} ^o	8f ² F _{7/2} ^o	—	4853,47	—	—	—	-7,37	—	—	1,53(0)	—	—	—
4f ² F _{5/2} ^o	9f ² F _{5/2} ^o	—	4536,20	—	—	—	-7,74	—	—	9,84(-1)	—	—	—
4f ² F _{5/2} ^o	9f ² F _{7/2} ^o	4542,02	4536,20	—	—	-8,54	-8,52	—	1,16(-1)	1,23(-1)	—	—	—
4f ² F _{7/2} ^o	9f ² F _{5/2} ^o	4542,05	4536,20	—	—	-8,54	-8,52	—	1,55(-1)	1,64(-1)	—	—	—
4f ² F _{7/2} ^o	9f ² F _{7/2} ^o	—	4536,20	—	—	—	-7,60	—	—	1,02(0)	—	—	—
4f ² F _{5/2} ^o	6h ² H _{9/2} ^o	6560,24	6546,94	—	—	-4,93	-4,93	—	1,84(2)	1,82(2)	—	—	—
4f ² F _{7/2} ^o	6h ² H _{9/2} ^o	6560,29	6546,94	—	—	-6,14	-6,15	—	1,11(1)	1,10(1)	—	—	—
4f ² F _{7/2} ^o	6h ² H _{11/2} ^o	6560,28	6546,94	—	—	-4,82	-4,83	—	1,95(2)	1,93(2)	—	—	—
4f ² F _{5/2} ^o	7h ² H _{9/2} ^o	5411,79	5402,66	—	—	-5,21	-5,22	—	1,39(2)	1,38(2)	—	—	—

Tablo 3.3. (Devamı)

Geçişler		λ (Å)				$\log(gf)$			A_{ji} (s ⁻¹)				
		Bu çalışma		Diğer çalışmalar		Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma			Diğer çalışmalar	
		MCHF+BP	HFR			MCHF+BP	HFR		MCHF+BP	HFR			
Alt seviye	Üst seviye												
4f ² F _{7/2} ^o	7h ² H _{9/2} ^o	5411,83	5402,66	–	–	-6,43	-6,44	–	8,40(0)	8,36(0)	–	–	–
4f ² F _{7/2} ^o	7h ² H _{11/2} ^o	5411,82	5402,66	–	–	-5,11	-5,12	–	1,47(2)	1,46(2)	–	–	–
4f ² F _{5/2} ^o	8h ² H _{9/2} ^o	4859,63	4852,25	–	–	-5,46	-5,47	–	9,74(1)	9,71(1)	–	–	–
4f ² F _{7/2} ^o	8h ² H _{9/2} ^o	4859,66	4852,25	–	–	-6,68	-6,68	–	5,90(0)	5,89(0)	–	–	–
4f ² F _{7/2} ^o	8h ² H _{11/2} ^o	4859,66	4852,25	–	–	-5,36	-5,36	–	1,03(2)	1,03(2)	–	–	–
4f ² F _{5/2} ^o	9h ² H _{9/2} ^o	4541,92	4535,43	–	–	-5,67	-5,67	–	6,96(1)	6,94(1)	–	–	–
4f ² F _{7/2} ^o	9h ² H _{9/2} ^o	4541,94	4535,44	–	–	-6,89	-6,89	–	4,22(0)	4,21(0)	–	–	–
4f ² F _{7/2} ^o	9h ² H _{11/2} ^o	4541,94	4535,43	–	–	-5,56	-5,57	–	7,39(1)	7,36(1)	–	–	–
5d ² D _{5/2}	6d ² D _{5/2}	–	18247,18	–	–	–	-5,95	–	–	3,77(0)	–	–	–
5d ² D _{5/2}	6d ² D _{3/2}	18455,20	18246,35	–	–	-6,55	-6,55	–	1,39(0)	1,41(0)	–	–	–
5d ² D _{3/2}	6d ² D _{5/2}	18454,73	18248,01	–	–	-6,55	-6,55	–	9,29(-1)	9,41(-1)	–	–	–
5d ² D _{3/2}	6d ² D _{3/2}	–	18247,18	–	–	–	-6,18	–	–	3,30(0)	–	–	–
5d ² D _{5/2}	7d ² D _{3/2}	11517,37	11392,90	–	–	-7,14	-7,12	–	9,10(-1)	9,71(-1)	–	–	–
5d ² D _{5/2}	7d ² D _{5/2}	–	11392,90	–	–	–	-6,52	–	–	2,59(0)	–	–	–
5d ² D _{3/2}	7d ² D _{3/2}	–	11393,22	–	–	–	-6,75	–	–	2,26(0)	–	–	–
5d ² D _{3/2}	7d ² D _{5/2}	11517,22	11393,22	–	–	-7,14	-7,12	–	6,06(-1)	6,47(-1)	–	–	–
5d ² D _{5/2}	8d ² D _{3/2}	9260,06	9163,38	–	–	-7,59	-7,47	–	5,04(-1)	6,66(-1)	–	–	–
5d ² D _{5/2}	8d ² D _{5/2}	–	9163,38	–	–	–	-6,87	–	–	1,78(0)	–	–	–
5d ² D _{3/2}	8d ² D _{3/2}	–	9163,59	–	–	–	-7,11	–	–	1,55(0)	–	–	–
5d ² D _{3/2}	8d ² D _{5/2}	9259,97	9163,59	–	–	-7,59	-7,48	–	3,36(-1)	4,44(-1)	–	–	–
5d ² D _{5/2}	9d ² D _{3/2}	8163,84	8081,00	–	–	-8,91	-7,73	–	3,04(-2)	4,72(-1)	–	–	–

Tablo 3.3. (Devamı)

Geçişler		λ (Å)				$\log(gf)$			A_{ji} (s ⁻¹)				
		Bu çalışma		Diğer çalışmalar		Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma			Diğer çalışmalar	
		MCHF+BP	HFR			MCHF+BP	HFR		MCHF+BP	HFR			
Alt seviye	Üst seviye												
5d ² D _{5/2}	9d ² D _{5/2}	—	8081,00	—	—	—	-7,13	—	—	1,26(0)	—	—	—
5d ² D _{3/2}	9d ² D _{3/2}	—	8081,17	—	—	—	-7,37	—	—	1,10(0)	—	—	—
5d ² D _{3/2}	9d ² D _{5/2}	8163,77	8081,17	—	—	-8,91	-7,73	—	2,02(-2)	3,15(-1)	—	—	—
5d ² D _{5/2}	6g ² G _{7/2}	18183,51	17691,60	—	—	-6,14	-6,15	—	1,81(0)	1,90(0)	—	—	—
5d ² D _{5/2}	6g ² G _{9/2}	18183,44	17691,59	—	—	-5,05	-5,05	—	1,81(1)	1,90(1)	—	—	—
5d ² D _{3/2}	6g ² G _{7/2}	18183,22	17692,38	—	—	-5,19	-5,19	—	1,63(1)	1,71(1)	—	—	—
5d ² D _{5/2}	7g ² G _{7/2}	11449,09	11251,00	—	—	-7,73	-7,50	—	1,18(-1)	2,07(-1)	—	—	—
5d ² D _{5/2}	7g ² G _{9/2}	11449,07	11251,00	—	—	-6,63	-6,41	—	1,18(0)	2,07(0)	—	—	—
5d ² D _{3/2}	7g ² G _{7/2}	11448,97	11251,31	—	—	-6,78	-6,55	—	1,06(0)	1,87(0)	—	—	—
5d ² D _{5/2}	8g ² G _{7/2}	9230,33	9100,67	—	—	-9,42	-9,35	—	3,70(-3)	4,52(-3)	—	—	—
5d ² D _{5/2}	8g ² G _{9/2}	9230,32	9100,67	—	—	-8,32	-8,25	—	3,70(-2)	4,52(-2)	—	—	—
5d ² D _{3/2}	8g ² G _{7/2}	9230,26	9100,88	—	—	-8,47	-8,39	—	3,33(-2)	4,07(-2)	—	—	—
5d ² D _{5/2}	9g ² G _{7/2}	8147,78	8046,35	—	—	-8,04	-9,08	—	1,15(-1)	1,06(-2)	—	—	—
5d ² D _{5/2}	9g ² G _{9/2}	8147,78	8046,35	—	—	-6,94	-7,99	—	1,15(0)	1,06(-1)	—	—	—
5d ² D _{3/2}	9g ² G _{7/2}	8147,73	8046,51	—	—	-7,08	-8,13	—	1,04(0)	9,55(-2)	—	—	—
5p ² P _{1/2}	6p ² P _{3/2}	21194,78	12232,94	—	—	-6,25	-6,07	—	2,09(0)	9,39(0)	—	—	—
5p ² P _{3/2}	6p ² P _{1/2}	21267,45	12264,67	—	—	-6,24	-6,08	—	4,20(0)	1,85(1)	—	—	—
5p ² P _{3/2}	6p ² P _{3/2}	—	12253,63	—	—	—	-6,08	—	—	9,31(0)	—	—	—
5p ² P _{1/2}	7p ² P _{3/2}	13181,76	7841,38	—	—	-7,45	-6,63	—	3,37(-1)	6,43(0)	—	—	—
5p ² P _{3/2}	7p ² P _{1/2}	13206,59	7852,56	—	—	-7,44	-6,63	—	6,92(-1)	1,28(1)	—	—	—

Tablo 3.3. (Devamı)

Geçişler		λ (Å)				$\log(gf)$			A_{ji} (s ⁻¹)				
		Bu çalışma		Diğer çalışmalar		Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma			Diğer çalışmalar	
		MCHF+BP	HFR			MCHF+BP	HFR		MCHF+BP	HFR			
Alt seviye	Üst seviye												
5p ² P _{3/2} ^o	7p ² P _{3/2} ^o	—	7849,88	—	—	—	-6,63	—	—	6,40(0)	—	—	—
5p ² P _{1/2} ^o	8p ² P _{3/2} ^o	10538,87	6419,33	—	—	-6,59	-6,97	—	3,86(0)	4,38(0)	—	—	—
5p ² P _{3/2} ^o	8p ² P _{1/2} ^o	10553,10	6426,20	—	—	-6,60	-6,97	—	7,53(0)	8,71(0)	—	—	—
5p ² P _{3/2} ^o	8p ² P _{3/2} ^o	—	6425,02	—	—	—	-6,97	—	—	4,36(0)	—	—	—
5p ² P _{1/2} ^o	9p ² P _{3/2} ^o	7862,63	5732,74	—	—	-5,15	-7,22	—	1,90(2)	3,08(0)	—	—	—
5p ² P _{3/2} ^o	9p ² P _{1/2} ^o	7897,37	5737,93	—	—	-5,15	-7,22	—	3,77(2)	6,12(0)	—	—	—
5p ² P _{3/2} ^o	9p ² P _{3/2} ^o	—	5737,28	—	—	—	-7,22	—	—	3,06(0)	—	—	—
4f ² F _{5/2} ^o	5p ² P _{1/2} ^o	8371,83	27356,80	—	—	-7,94	-7,22	—	5,46(-1)	2,70(-1)	—	—	—
4f ² F _{5/2} ^o	5p ² P _{3/2} ^o	8365,20	27253,90	—	—	-8,47	-7,76	—	8,08(-2)	3,93(-2)	—	—	—
4f ² F _{7/2} ^o	5p ² P _{3/2} ^o	8365,29	27253,91	—	—	-7,69	-6,98	—	4,85(-1)	2,36(-1)	—	—	—
5p ² P _{1/2} ^o	5f ² F _{5/2} ^o	48337,71	16039,00	16039,2 ^a	—	-6,95	-5,64	—	1,59(-1)	0,98(1)	1,02(1) ^c	1,16(3) ^a	—
5p ² P _{3/2} ^o	5f ² F _{5/2} ^o	48117,69	16074,58	16121,4 ^a	—	-7,49	-6,19	—	2,32(-2)	2,78(0)	2,88(0) ^c	2,86(0) ^a	—
5p ² P _{3/2} ^o	5f ² F _{7/2} ^o	48119,12	16074,58	16121,2 ^a	—	-6,71	-5,41	—	1,39(-1)	1,25(1)	1,30(1) ^c	1,29(1) ^a	—
5p ² P _{1/2} ^o	6f ² F _{5/2} ^o	30328,97	8615,34	—	—	-5,72	-6,71	—	2,30(0)	2,90(0)	—	—	—
5p ² P _{3/2} ^o	6f ² F _{5/2} ^o	30416,21	8625,60	—	—	-6,26	-7,26	—	6,51(-1)	8,24(-1)	—	—	—
5p ² P _{3/2} ^o	6f ² F _{7/2} ^o	30415,89	8625,60	—	—	-5,49	-6,48	—	2,93(0)	3,71(0)	—	—	—
5p ² P _{1/2} ^o	7f ² F _{5/2} ^o	15308,30	6735,64	—	—	-7,37	-6,57	—	2,02(-1)	6,57(0)	—	—	—
5p ² P _{3/2} ^o	7f ² F _{5/2} ^o	15330,50	6741,91	—	—	-7,90	-7,12	—	6,04(-2)	1,87(0)	—	—	—
5p ² P _{3/2} ^o	7f ² F _{7/2} ^o	15330,44	6741,91	—	—	-7,11	-6,34	—	2,72(-1)	8,41(0)	—	—	—
5p ² P _{1/2} ^o	8f ² F _{5/2} ^o	11584,54	5900,26	—	—	-7,67	-6,67	—	1,76(-1)	6,79(0)	—	—	—
5p ² P _{3/2} ^o	8f ² F _{5/2} ^o	11597,24	5905,07	—	—	-8,20	-7,22	—	5,22(-2)	1,93(0)	—	—	—

Tablo 3.3. (Devamı)

Geçişler		λ (Å)				$\log(gf)$			A_{ji} (s ⁻¹)				
		Bu çalışma		Diğer	Bu çalışma		Diğer	Bu çalışma		Diğer			
Alt seviye	Üst seviye	MCHF+BP	HFR	çalışmalar	MCHF+BP	HFR	çalışmalar	MCHF+BP	HFR	çalışmalar			
5p ² P _{3/2}	8f ² F _{o7/2}	11597,23	5905,07	–	–	-7,42	-6,44	–	2,35(-1)	8,70(0)	–	–	–
5p ² P _{1/2}	9f ² F _{o5/2}	9928,72	5437,89	–	–	-7,42	-6,80	–	8,70(0)	5,94(0)	–	–	–
5p ² P _{o3/2}	9f ² F _{o5/2}	9938,05	5441,97	–	–	-6,65	-7,35	–	2,49(0)	1,69(0)	–	–	–
5p ² P _{o3/2}	9f ² F _{o7/2}	9938,04	5441,97	–	–	-5,88	-6,57	–	1,12(1)	7,61(0)	–	–	–
5f ² F _{o5/2}	6f ² F _{o5/2}	–	18613,65	–	–	–	-6,05	–	–	2,89(0)	–	–	–
5f ² F _{o5/2}	6f ² F _{o7/2}	18637,85	18613,65	–	–	-6,82	-6,82	–	3,62(-1)	3,61(-1)	–	–	–
5f ² F _{o7/2}	6f ² F _{o5/2}	18638,18	18613,66	–	–	-6,82	-6,82	–	4,83(-1)	4,82(-1)	–	–	–
5f ² F _{o7/2}	6f ² F _{o7/2}	–	18613,65	–	–	–	-5,90	–	–	3,01(0)	–	–	–
5f ² F _{o5/2}	7f ² F _{o5/2}	–	11612,24	–	–	–	-6,67	–	–	1,78(0)	–	–	–
5f ² F _{o5/2}	7f ² F _{o7/2}	11627,04	11612,24	–	–	-7,44	-7,44	–	2,23(-1)	2,22(-1)	–	–	–
5f ² F _{o7/2}	7f ² F _{o5/2}	11627,16	11612,25	–	–	-7,44	-7,44	–	2,98(-1)	2,96(-1)	–	–	–
5f ² F _{o7/2}	7f ² F _{o7/2}	–	11612,24	–	–	–	-6,52	–	–	1,85(0)	–	–	–
5f ² F _{o5/2}	8f ² F _{o5/2}	–	9333,93	–	–	–	-7,05	–	–	1,14(0)	–	–	–
5f ² F _{o5/2}	8f ² F _{o7/2}	9345,43	9333,93	–	–	-7,82	-7,83	–	1,43(-1)	1,43(-1)	–	–	–
5f ² F _{o7/2}	8f ² F _{o5/2}	9345,49	9333,93	–	–	-7,82	-7,83	–	1,91(-1)	1,91(-1)	–	–	–
5f ² F _{o7/2}	8f ² F _{o7/2}	–	9333,93	–	–	–	-6,91	–	–	1,19(0)	–	–	–
5f ² F _{o5/2}	9f ² F _{o5/2}	–	8227,27	–	–	–	-7,33	–	–	7,78(-1)	–	–	–
5f ² F _{o5/2}	9f ² F _{o7/2}	8237,22	8227,27	–	–	-8,11	-8,10	–	9,52(-2)	9,72(-2)	–	–	–
5f ² F _{o7/2}	9f ² F _{o5/2}	8237,27	8227,27	–	–	-8,11	-8,10	–	1,27(-1)	1,30(-1)	–	–	–
5f ² F _{o7/2}	9f ² F _{o7/2}	–	8227,27	–	–	–	-7,18	–	–	8,10(-1)	–	–	–

Tablo 3.3. (Devamı)

Geçişler		λ (Å)			$\log(gf)$			A_{ji} (s ⁻¹)					
		Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma		Diğer çalışmalar			
Alt seviye	Üst seviye	MCHF+BP	HFR		MCHF+BP	HFR		MCHF+BP	HFR				
5f ² F ^o _{5/2}	6h ² H ^o _{9/2}	18633,27	18573,20	–	–	-5,13	-5,13	–	1,42(1)	1,43(1)	–	–	–
5f ² F ^o _{7/2}	6h ² H ^o _{9/2}	18633,49	18573,20	–	–	-6,34	-6,35	–	8,59(-1)	8,64(-1)	–	–	–
5f ² F ^o _{7/2}	6h ² H ^o _{11/2}	18633,44	18573,20	–	–	-5,02	-5,03	–	1,50(1)	1,51(1)	–	–	–
5f ² F ^o _{5/2}	7h ² H ^o _{9/2}	11625,79	11602,00	–	–	-6,09	-6,14	–	3,94(0)	3,64(0)	–	–	–
5f ² F ^o _{7/2}	7h ² H ^o _{9/2}	11625,87	11602,00	–	–	-7,31	-7,35	–	2,39(-1)	2,20(-1)	–	–	–
5f ² F ^o _{7/2}	7h ² H ^o _{11/2}	11625,86	11602,00	–	–	-6,00	-6,03	–	4,18(0)	3,86(0)	–	–	–
5f ² F ^o _{5/2}	8h ² H ^o _{9/2}	9344,84	9329,40	–	–	5,89	-5,91	–	9,88(0)	9,47(0)	–	–	–
5f ² F ^o _{7/2}	8h ² H ^o _{9/2}	9344,89	9329,40	–	–	-7,10	-7,13	–	5,99(-1)	5,74(-1)	–	–	–
5f ² F ^o _{7/2}	8h ² H ^o _{11/2}	9344,89	9329,40	–	–	-5,78	-5,80	–	1,05(1)	1,01(1)	–	–	–
5f ² F ^o _{5/2}	9h ² H ^o _{9/2}	8236,88	8224,77	–	–	-5,96	-5,98	–	1,07(1)	1,03(1)	–	–	–
5f ² F ^o _{7/2}	9h ² H ^o _{9/2}	8236,92	8224,77	–	–	-7,18	-7,20	–	6,48(-1)	6,26(-1)	–	–	–
5f ² F ^o _{7/2}	9h ² H ^o _{11/2}	8236,92	8224,77	–	–	-5,86	-5,88	–	1,13(1)	1,10(1)	–	–	–

^aMajumder ve ark. [5], ^bKaraçoban Usta ve Sever [25], ^cÇelik ve ark. [6]

KAYNAKLAR

- [1] Civiř, S., Ferus, M., Chernov, V.E., Zanozina, E.M., Infrared transitions and oscillator strengths of Ca and Mg. *Astron. Astrophys.*, 554: A24p1–6, 2013.
- [2] Öztürk, F., Kaçar, İ., Magnezyum alaşımları ve kullanım alanlarının incelenmesi. *Niğde Üniversitesi Mühendislik Bilimleri Dergisi*, 1(1): 12–20, 2012.
- [3] Demirci, M., Vanlı, A.S., Akdoğan, A., Savunma sanayinde kullanılan magnezyum alaşımları ve uygulama alanları. *International Journal of Engineering Research and Development*, 7(4): 13–20, 2015.
- [4] Çelik, G., Ateş, Ş., Özarslan, S., Taşer, M., Transition probabilities, oscillator strengths and lifetimes for singly ionized magnesium. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, 112: 2330–2334, 2011.
- [5] Majumder, S., Gopakumar, G., Chaudhuri, R.K., Das, B.P., Merlitz, H., Mahapatra, U.S., Mukherjee, D., Theoretical studies of electric quadrupole transition probabilities in Mg II. *Eur. Phys. J. D*, 28: 3–9, 2004.
- [6] Çelik, G., Doğan, D., Ateş, Ş., Taşer, M., Electric quadrupole transition probabilities for singly ionized magnesium. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* 113: 1601–5, 2012.
- [7] <http://physics.nist.gov/asd>, Eriřim Tarihi: 15.12.2020.
- [8] Lundin, L., Engman, B., Hilke, J., Martinson, I., Lifetime measurements in Mg I–Mg IV. *Phys. Scr.*, 8: 274–278, 1973.
- [9] Lindgard, A., Nielsen, S.E., Numerical approach to transition probabilities in the Columb approximation: Be I and Mg II Rydberg series. *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.*, 8: 1183–1199, 1975.
- [10] Liljeby, L., Lindgard, A., Mannervik, S., Veje, E., Jelenkovic, B., Lifetimes in Mg I and Mg II; Beam-Foil measurements and numerical Coulomb approximation calculations. *Phys. Scr.*, 21: 805–810, 1980.
- [11] Biémont, E., Brault, J.W., The infrared spectrum of magnesium ($1800 < \alpha < 9000 \text{ cm}^{-1}$) and an extension of the term systems of Mg I and Mg II. *Phys. Scr.*, 34: 751–758, 1986.

- [12] Fischer, C.F., Energy levels and lifetimes for some core-excited quartet states in Na I and Mg II. *Phys. Rev. A*, 34: 1167–1176, 1986.
- [13] Brage, T, Gaardsted, J.O., Experimental and theoretical study of core-excited states of Mg II. *Phys. Scr.*, 44: 336–342, 1991.
- [14] Safronova, M.S., Derevianko, A., Johnson, W.R., Relativistic many-body calculations of energy levels, hyperfine constants, transition rates for sodiumlike ions, $Z=11-16$. *Phys. Rev. A*, 58: 1016–1028, 1998.
- [15] Theodosiou, C.E., Federman, S.R., Accurate calculation of Mg II 3s-np oscillator strengths. *Astrophys. J.*, 527: 470–473, 1999.
- [16] Zheng, N.Wu, Wang, T., Yang, R.Y., Zhou, T., Dong, X.M., Yong, G.W., Hai T.W., Transitions probabilities for Be I, Be II, Mg I and Mg II. *At. Data and Nucl. Data Tables*, 79: 109–141, 2001.
- [17] Dzuba, V.A., Johnson, W.R., Coupled-cluster single-double calculations of the relativistic energy shifts in C IV, Na I, Mg II, Al III, Si IV, Ca II, and Zn II. *Phys. Rev. A*, 76: 062510–6, 2007.
- [18] Fischer, C.F., Tachiev, G., Irimia, A., Relativistic energy levels, lifetimes, and transition probabilities for the sodium-like to argon-like sequences. *At. Data and Nucl. Data Tables*, 92: 607–812, 2006.
- [19] Ali, M.A., Electric quadrupole transition probability in sodium and potassium sequences, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, 11: 1611–1619, 1971.
- [20] Tull, C.E., Jackson, M., McEachran, R.P., Cohen, M., Electric quadrupole transitions in Na I, Mg II and Al III. *Can. J. Phys.*, 50: 1169–1174, 1972.
- [21] Godefroid, M., Magnusson, C.E., Zetterberg, P.O., Joelsson, I., Forbidden transitions in Na- and Mg-like spectra. *Phys. Scr.*, 32: 125–128, 1985.
- [22] Charro, E., Martín, I., Intensities of E2 spectral lines in the astrophysically important ion Mg II. *Astrophys. J.*, 585: 1191–1196, 2003.
- [23] Doğan, D., Yasak geçişler. Selçuk Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Anabilim Dalı, Yüksek Lisans Tezi, 2013.
- [24] Karaçoban Usta, B., Saka, E.G., Akgün, E., Alparslan, B., Electric dipole transition parameters for singly ionized magnesium (Mg II). *AIP Conference Proceedings*, 1722: 200002–4, 2016.
- [25] Karaçoban Usta, B., Sever, S., Electric quadrupole transition parameters for singly ionized magnesium (Mg II). *AIP Conference Proceedings*, 1815: 100003–4, 2017.

- [26] Karaçoban Usta, B., Calculations for energies, lifetimes, and transition parameters of E1 and E2 transitions in Mg II. *Can. J. Phys.*, 97(8): 828–841, 2019.
- [27] Fischer, C.F., Brage, T., Jönsson, P., *Computational Atomic Structure-an MCHF Approach*, IOP, Bristol 1997.
- [28] Cowan, R.D., *The Theory of Atomic Structure and Spectra*, University of California Press, 1981.
- [29] Fischer, C.F., The MCHF atomic-structure package. *Comput. Phys. Commun.*, 128: 635–636, 2000.
- [30] <http://www.tcd.ie/Physics/People/Cormac.McGuinness/Cowan/>, Eriřim Tarihi: 15.12.2020.
- [31] Jönsson, P., Gustafsson, S., A program for computing weak and intermediate field Zeeman splittings from MCHF wave functions. *Comput. Phys. Commun.*, 144: 188–199, 2002.

ÖZGEÇMİŞ

İlk, orta ve lise eğitimini İstanbul'da tamamladı. İlköğretimini İlhami Ahmed Örnekal İlköğretim Okulu'nda, lise eğitimini Özel İhlas Anadolu Lisesi'nde tamamladı. 2008 yılında başladığı Sakarya Üniversitesi Fizik Bölümü'nü 2013 yılında bitirdi. Marmara Üniversitesi'nde Pedagojik Formasyon eğitimini 2013 yılında tamamladı. 2013 yılında Sakarya Üniversitesi Fizik Bölümü'nde yüksek lisans eğitime başladı ve halen yüksek lisans eğitime devam etmektedir.