

**T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**SERYUMUN BEŞİNCİ SPEKTRUMUNUN (Ce V)
MCHF VE HFR YÖNTEMLERİ İLE İNCELENMESİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Elif AKGÜN

Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK

Tez Danışmanı : Yrd. Doç. Dr. Betül USTA

Haziran 2017

T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**SERYUMUN BEŞİNCİ SPEKTRUMUNUN (Ce V)
MCHF VE HFR YÖNTEMLERİ İLE İNCELENMESİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Elif AKGÜN

Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK

Bu tez 01 / 06 / 2017 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından oybirliği ile kabul edilmiştir.



Prof. Dr.
Seda SAĞDINÇ
Jüri Başkanı



Prof. Dr.
Leyla ÖZDEMİR
Üye



Yrd. Doç. Dr.
Betül USTA
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 AKGÜN

01.06.2017

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 Yrd. Doç. Dr. Betül USTA'ya teşekkürlerimi sunarım.

Bu çalışmayı hazırlamamda benden yardımlarını esirgemeyen çok kıymetli arkadaşım Büşra ALPARSLAN'a teşekkürü bir borç bilirim. Ayrıca, çalışmalarım sırasında benden maddi ve manevi desteklerini esirgemeyen, hayatım boyunca her konuda yanımda olan aileme sonsuz teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

TEŞEKKÜR	i
İÇİNDEKİLER	ii
KISALTMALAR LİSTESİ	iv
ŞEKİLLER LİSTESİ	vi
TABLolar LİSTESİ	vii
ÖZET	viii
SUMMARY	ix
BÖLÜM 1.	
GİRİŞ	1
BÖLÜM 2.	
HESAPLAMA YÖNTEMLERİ.....	3
2.1. Çok Elektronlu Atomlar için Relativistik Olmayan Hamiltonyen.....	3
2.2. Merkezi Alan Yaklaşıklığı ve Çarpım Dalga Fonksiyonları.....	4
2.3. Hartree-Fock (HF) Yaklaşıklığı.....	8
2.4. Çok Elektronlu Atomlarda Elektronların Karşılıklı Etkileşmesi.....	10
2.5. Çok Konfigürasyonlu Hartree-Fock (MCHF) Yöntemi.....	11
2.5.1. Relativistik etkiler.....	13
2.5.1.1. Breit-Pauli Hamiltonyeni ve dalga fonksiyonu.....	13
2.5.1.2. İnce yapı seviyeleri.....	16
2.5.2. Enerji seviyelerinin Landé g-çarpanları.....	18
2.5.3. Enerji seviyeleri arasındaki geçişler.....	19
2.5.4. MCHF ile atomik yapı hesaplama adımları.....	22

2.6. Relativistik Hartree-Fock (HFR) Yöntemi.....	25
2.6.1. Bir-elektron ve toplam bağlanma enerjileri.....	26
2.6.2. Relativistik düzeltmeler.....	29
2.6.3. Işımalı geçişler.....	31
2.6.3.1. Elektrik dipol geçişleri.....	31
2.6.4. HFR ile atomik yapı hesaplama adımları.....	33
BÖLÜM 3.	
TARTIŞMAVE SONUÇ.....	36
3.1. Ce V'in Bazı Seviyelerinin Enerjileri ve Landé g -çarpanları.....	37
3.2. Ce V'in Elektrik Dipol Geçişleri için Dalga Boyları, Ağırlıklı Salınıcı Şiddetleri ve Geçiş Olasılıkları.....	51
KAYNAKLAR	72
ÖZGEÇMİŞ	74

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)
QED	: Kuantum elektrodinamik (Quantum Electrodynamic)
RS	: Relativistik kayma (Relativistic Shift)
SCF	: Öz-uyum alan (Self-Consistent Field)
SDHF	: Tekli-determinant Hartree-Fock (Single-Determinant Hartree-Fock)
SO	: Çekirdek spin-yörünge (Spin-Orbit)
SOO	: Spin-diğer yörünge (Spin-Other Orbit)

SPHF	: Spin-kutuplanmış Hartree-Fock (Spin-Polarized Hartree-Fock)
SS	: Spin-spin
SSC	: Spin-spin temas (Spin-Spin Contact)
SUHF	: Spin-kısıtlamasız Hartree-Fock (Spin-Unrestricted Hartree-Fock)
UHF	: Kısıtlanmamış Hartree-Fock (Unrestricted Hartree-Fock)



ŞEKİLLER LİSTESİ

Şekil 2.1.	MCHF ile atomik yapı hesap adımları.....	24
Şekil 2.2.	HFR ile atomik yapı hesap adımları.....	35



TABLolar LİSTESİ

Tablo 3.1.	Ce V'in elektrik dipol geişleri için konfigürasyon setleri.....	36
Tablo 3.2.	Ce V'in düşük seviyelerinin E enerjileri (cm^{-1}) ve Landé g- çarpanları.....	39
Tablo 3.3.	Ce V'in bazı uyarılmış seviyelerinin E enerjileri (cm^{-1}) ve Landé g-çarpanları.....	43
Tablo 3.4.	Ce V'in elektrik dipol (E1) geişleri için λ dalga boyları ($\text{\AA}$), $\log(gf)$ logaritmik ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve gA_{ki} ağırlıklı geiş olasılıkları (s^{-1}).....	53

ÖZET

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

Bu çalışmada, çok konfigürasyonlu Hartree-Fock (Multiconfiguration Hartree-Fock–MCHF) ve relativistik Hartree-Fock (Relativistic Hartree-Fock–HFR) yöntemleri kullanılarak dört kez iyonlaşmış seryumun (Ce V, $Z = 58$) bazı uyarılmış seviyelerinin relativistik enerjileri ve Landé g -çarpanları ve bu seviyeler arasındaki elektrik dipol (E1) geçişine ait dalga boyları, salınıcı şiddetleri ve geçiş olasılıkları gibi geçiş parametreleri hesaplanmaktadır.

İlk bölümde; Ce V ile ilgili yapılmış mevcut çalışmalar, ikinci bölümde; çok konfigürasyonlu Hartree-Fock ve relativistik Hartree-Fock yöntemleri hakkında özet bilgiler verilmektedir. MCHF atomik yapı paketi ve Cowan'ın program paketi kullanılarak elde edilen sonuçlar diğer çalışmalar ile karşılaştırmalı olarak son bölümde sunulmaktadır.

INVESTIGATION OF THE FIFTH SPECTRUM OF CERIUM (Ce V) USING MCHF AND HFR METHODS

SUMMARY

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

In this study, the relativistic energies and Landé g -factors for some excited levels and the transition parameters, such as wavelengths, oscillator strengths, and transition probabilities (or rates), for the electric dipole (E1) transitions between these levels in four-times ionized cerium (Ce V, $Z = 58$) have been calculated using the multiconfiguration Hartree-Fock (MCHF) and the relativistic Hartree-Fock (HFR) methods.

In the first chapter previous works on Ce V have been given. Second chapter deals with the multiconfiguration Hartree-Fock and the relativistic Hartree-Fock methods. Results obtained using the MCHF atomic structure package and the Cowan's program package have been compared with other works in the last chapter.

BÖLÜM 1. GİRİŞ

Lantanitler periyodik sistemin üçüncü yan grubunda bulunan nadir toprak metalleri olarak isimlendirilen metaller sınıfında yer alır ve 57 ile 71 atom numaraları arasındaki elementleri kapsar. En önemli ortak özellikleri, elektron değişiminin yalnızca 4f yörüngesine elektron katılımıyla gerçekleşmesidir. Kuvvetli elektropozitif olmaları nedeniyle, üretilmeleri zordur. Çoğunun iyon hallerinin karakteristik renkleri vardır. Genellikle oksit ve fluorürleri karışımının elektrolizi ile karışım halinde elde edilirler. Ayrıca birçok bileşikleri paramanyetik özellikler gösterir.

Lantanitlerin ve iyonlarının atomik yapı özelliklerini belirlemek (deney ve teori ile) 4f tabakasının karmaşık elektronik yerleşimi nedeniyle zordur ve geçmişte bu nedenle az çalışılmış veya çalışmalardan sonuç alınımı zor olmuştur. Nadir toprak elementleri olarak da bilinen lantanitler güneşinkileri de içeren pek çok spektrumda ortaya çıktıkları için özellikle astrofizikte çok önemlidir. Aynı zamanda bu atomların spektrumlarının detaylı analizi astrofizik dışında görünür bölgede yayınlanma spektrumları nedeni ile de ilgi çekmektedir. Nadir toprak element tuzları, ticari bakımdan da önem göstermektedir. Özellikle bu alanda metal-halojenür yüksek-yoğunluklu deşarj lambalarında kullanılmakta; lambaların dizaynı ve sistem kontrolleri için kullanılan modellerde bulunan spektrum verilerine ihtiyaç duyulmaktadır.

Seryum tabiatta en bol bulunan nadir toprak elementlerindendir. Seryum ve bileşiklerinin pek çok kullanım alanı vardır. Bu metal çakmaktaşı olarak, çeşitli alaşımlarda yükseltgenmeyi önleyici ve vakum tüplerinde oksijen giderici olarak kullanılır. Jet motorlarında kullanılan, yüksek sıcaklığa dayanıklı alaşımlar %3 oranında seryum ihtiva ederler. Metal olarak, sinema, televizyon ve benzeri

sanayilerde aydınlatma maksadıyla kullanılan karbonla doyurulmuş ark lambalarında da kullanılır. Ayrıca, cam üretiminde renk giderici olarak ve porselen kaplamalarda saydamsızlık verici olarak faydalanılır.

Ksenon (Xe) benzer elektron diziliminin bir üyesi olarak, dört kez iyonlaşmış seryumun (Ce V, $Z = 58$) taban hal konfigürasyonu $[Cd] 5p^6$ 'dır ve uyarılmış seviyeleri $[Cd] 5p^5nl$ şeklindedir. Ce V ile ilgili şimdiye kadar yapılan çalışmalar çok azdır. Bu iyonla ait ilk çalışma olarak, Reader ve Ekberg'in $5p^6 - 5p^55d$ ve $5p^6 - 5p^56s$ rezonans çizgilerini rapor ettikleri çalışma sayılabilir [2]. Daha sonra, Reader ve Epstein, Ce V'in $5p^57s$ 'nin enerjisini ve iyonlaşma potansiyelini sundu [3]. Ce V için yapılan daha yeni bir çalışmada, Redfors ve Reader tarafından yapılmıştır. Çalışmalarında $5p^54f$, $5p^55d$, $5p^56s$, $5p^56p$ ve $5p^56d$ seviyelerinin enerjilerini ve 107 çizgisini belirlemişlerdir [4].

Ce V'in atomik yapı özelliklerinin incelenmesi için çok elektronlu atomlar için kullanımı yaygın olan konfigürasyon etkileşimi ve relativistik etkileri içeren hesaplama yöntemlerinden faydalandı. Konfigürasyon etkileşme yöntemlerinden olan ve elektronların karşılıklı etkileşmesini ve relativistik etkileri dikkate alan çok konfigürasyonlu Hartree-Fock (Multiconfiguration Hartree-Fock-MCHF) [5] ve relativistik Hartree-Fock (Relativistic Hartree-Fock-HFR) [6] yöntemleri kullanılarak Ce V'in $5p^6$, $5p^5nf$ ($n = 4-10$), $5p^5np$ ($n = 6-10$), $5p^5nd$ ($n = 5-10$), $5p^5ns$ ($n = 6-10$) ve $5p^5ng$ ($n = 5-7$) konfigürasyonlarına ait seviyeler için relativistik enerjiler, Landé g-çarpanları ve bu seviyeler arasındaki elektrik dipol (E1) geçişleri için dalga boyları, salınıcı şiddetleri, geçiş olasılıkları gibi geçiş parametreleri hesaplandı [7]. Hesaplamalar da MCHF atomik yapı paketi [8] ve Cowan'ın HFR program paketi [9] kullanıldı.

BÖLÜM 2. HESAPLAMA YÖNTEMLERİ

Bu çalışmada kullanılan çok konfigürasyonlu Hartree-Fock (MCHF) ve relativistik Hartree-Fock (HFR) yöntemlerinin her ikisi de elektronlar arası karşılıklı etkileşimleri dikkate alan konfigürasyon etkileşme yöntemini ve çok elektronlu sistemlerin Schrödinger denklemini Hartree-Fock yaklaşıklığı ile çözmeyi temel alır. Yöntemler farklı derecelerde relativistik katkılar içerir. Ayrıca HFR yönteminde hesaplama ile elde edilen enerji değerleri deneysel enerji değerleri dikkate alınarak yapılır. Her iki yöntemde literatürde yaygın olarak kullanılmaktadır.

2.1. Çok Elektronlu Atomlar için Relativistik Olmayan Hamiltonyen

Kuantum mekaniğinde N -elektronlu bir atomun kararlı hali $\psi(q_1, \dots, q_N)$ dalga fonksiyonu ile tanımlanır. $q_i = (r_i, \sigma_i)$, i . elektronun uzay ve spin koordinatlarını gösterir. 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. Dalga denklemi bir özdeğer problemidir ve çözümleri yalnızca belirli E değerleri için vardır. Tüm özdeğerler takımı işlemcinin özdeğer spektrumunu olarak bilinir.

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-yörüngesinin paritesi $(-1)^l$, Slater determinantının paritesi ise

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

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, $\Phi(\gamma L M_L S M_S)$ veya $|\gamma L M_L S M_S\rangle$ 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

$$E = \langle \Phi(\gamma L M_L S M_S) | H | \Phi(\gamma L M_L S M_S) \rangle \quad (2.13)$$

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 yaklaşıklıktır. 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 yaklaşıklığındaki

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, atom, molekül ve katıhal sistemlerini içeren kuantum mekaniğinin pek çok alanına başarılı bir şekilde uygulanmaktadır. 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.

Yörüngeler $(n_1 l_1)^{q_1} (n_2 l_2)^{q_2} \dots (n_m l_m)^{q_m}$ şeklindeki tekli konfigürasyonun yörüngeleri olduğu zaman Hartree-Fock yöntemleri değişik şekilde sınıflandırılabilir. Bu yöntemler, esas olarak radyal fonksiyonun yörünge kuantum sayılarına bağlılığına göre değişiklik gösterir. Radyal fonksiyon sadece (nl) kuantum sayılarına bağlı ise dalga fonksiyonu bir tekli Slater determinantı şeklindedir. Bu durumda yaklaşıklığa ‘tekli-determinant Hartree-Fock (SDHF) yöntemi’ denir.

Bir tekli determinant ortogonallik şartını sağlamazsa bu ‘ortogonal olmayan Hartree-Fock (NHF)’ olarak adlandırılır. Bu yöntemin açık-tabaka için genişletilmiş halide ‘genişletilmiş Hartree-Fock (EHF)’ olarak bilinir. Aslında, genişletilmiş Hartree-Fock yöntemi, ortogonal olmayan Hartree-Fock yönteminin özel bir durumudur. HF yönteminde olduğu gibi ortogonal olmayan ve genişletilmiş HF yöntemlerinin her ikisinde de toplam dalga fonksiyonu L^2 ve S^2 ’nin bir öz fonksiyonudur.

Tekli determinant şeklinde ifade edilen radyal fonksiyon spin bileşenine de bağlı ise, yöntem ‘spin-kutuplanmış Hartree-Fock (SPHF)’ veya ‘spin-kısıtlamasız Hartree-Fock (SUHF) yöntemi’ adını alır. Radyal fonksiyonun n, l, m_s kuantum sayılarının yanı sıra m_l kuantum sayına da bağlı olması durumunda yöntem ‘kısıtlanmamış Hartree-Fock (UHF) yöntemi’ olarak adlandırılır. SUHF ve UHF’nin her ikisinde, radyal fonksiyonlar belirlendikten sonra yaklaşık izdüşüm işlemcileri L^2 ve S^2 ’nin özfonksiyonlarını elde etmek için uygulanabilir.

Aslında SUHF, UHF ve EHF yöntemleri tartışmalıdır. UHF’nin felsefesi kısıtlamayı gevşek tutmakta ve verilen bir nl için yörünge m_l ve m_s kuantum sayıları serbesttir. Fakat pratikte m_s bağıllığı kısıtlanmaz ve biraz bu yaklaşım SUHF’ye benzer. İzdüşüm işlemcilerine bir değişim uygulandığında, UHF de EHF’ye benzerdir.

2.4. Çok Elektronlu Atomlarda Elektronların Karşılıklı Etkileşmesi

Hartree-Fock yöntemi pek çok atomik özelliğin oldukça iyi tahminlerini verir. Fakat dikkatli analiz yapıldığında, sistematik farklılıklar gözlenebilir. 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.

Enerji seviye değerlerini ve ısımalı geçiş parametrelerini de etkileyen elektronların karşılıklı etkileşmeleri genel olarak üç farklı şekilde sınıflandırılır. a ve b iki yörünge olmak üzere, ab yörüngelerinden elektron uyarılmaları gerçekleştiğinde, ab yörüngelerinin ikisi de değerlik (valans) yörüngesi ise bu korelasyona değerlik-değerlik korelasyonu, ab yörüngelerinin biri öz, diğeri değerlik yörüngesi ise bu korelasyona öz-değerlik korelasyonu denir. Yani öz-değerlik korelasyonunda değerlik yörüngesinin yanı sıra, kapalı alt tabakalardan da uyarılmalar olur. Elektron uyarılmalarının yapıldığı yörüngelerin her ikisi de öz yörüngesi ise bu korelasyona da öz-öz korelasyonu denir. Bu korelasyon modelinde tüm uyarılmalar kapalı yörüngelerden olur [5].

2.5. Çok Konfigürasyonlu Hartree-Fock (MCHF) Yöntemi

Fischer tarafından geliştirilen bu yönteme [5] 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 denklemine 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

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(\gamma LS) &= \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M c_i c_j \langle \Phi(\gamma_i LS) | H | \Phi(\gamma_j LS) \rangle \\ &= \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M c_i c_j H_{ij} = \sum_{i=1}^M c_i^2 H_{ii} + 2 \sum_{i>j}^M c_i c_j H_{ij} \end{aligned} \quad (2.18)$$

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 (veya karışım 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 hesaplamaya ‘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

Ağır atomlar veya yüksekçe iyonlaşmış sistemlere doğru gidildiğinde relativistik etkilerin önemi hızla artmaktadır. 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.

2.5.1.1. Breit-Pauli Hamiltonyeni ve dalga fonksiyonu

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_{RS} , $\mathbf{L}$ ve $\mathbf{S}$ ile sıra değiştirir. 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

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

dir. H_{FS} işlemcisi, spin ve yörünge açısal momentumları arasındaki etkileşimi tanımlar. H_{FS} bir etkileşme terimi olduğu için $\mathbf{L}$ ve $\mathbf{S}$ ile sıra deęiřtirmezken, $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ toplam açısal momentumla sıra deęiřtirir. 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 $\mathbf{J}$ toplam açısal momentum işlemcisi ile sıra değiştirir ve karşılık gelen dalga fonksiyonu ise $\mathbf{J}^2$ 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.

2.5.1.2. İnce yapı seviyeleri

(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.

E_{so} ve E_{soo} 'nun her ikisi bir ranklı spin ve uzay işlemcilerinin çarpımıdır:

$$E_{so} = \langle \gamma LSJM_J | H_{so} | \gamma LSJM_J \rangle \propto J(J+1) - L(L+1) - S(S+1) \quad (2.40)$$

$$E_{soo} = \langle \gamma LSJM_J | H_{soo} | \gamma LSJM_J \rangle \propto J(J+1) - L(L+1) - S(S+1) \quad (2.41)$$

E_{ss} 'de iki ranklı iki tensör işlemcisinin bir skaler çarpımıdır:

$$E_{ss} = \langle \gamma LSJM_J | H_{ss} | \gamma LSJM_J \rangle \propto \frac{3}{4} C(C+1) - L(L+1) - S(S+1) \quad (2.42)$$

Burada $C = J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)$ 'dir. Daha açık olarak ince yapı enerji seviyeleri

$$E_{so} = \{J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)\} \zeta_{so}(\gamma LS) \quad (2.43)$$

$$E_{soo} = \{J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)\} \zeta_{soo}(\gamma LS) \quad (2.44)$$

ve

$$E_{ss} = \left\{ \frac{3}{4} C(C+1) - L(L+1) - S(S+1) \right\} \zeta_{ss}(\gamma LS) \quad (2.45)$$

şeklinde verilir. Burada $\zeta_{so}(\gamma LS)$, $\zeta_{soo}(\gamma LS)$ 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

$$\Delta E_{FS} = 2\zeta J \quad (2.46)$$

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

$$H_m = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} \quad (2.47)$$

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

$$\boldsymbol{\mu} = -\mu_B(\mathbf{L} + g_s \mathbf{S}) \quad (2.48)$$

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

$$\Delta E(\gamma JM) = \langle \gamma JM | H_m | \gamma JM \rangle = \mu_B B \langle \gamma JM | L_z + g_s S_z | \gamma JM \rangle \quad (2.49)$$

$$\begin{aligned} \Delta E(\gamma JM) &= \langle \Psi(\gamma JM) | H_m | \Psi(\gamma JM) \rangle \\ &= \mu_B B \sum_{j,k} c_j c_k \langle \Phi(\gamma_j L_j S_j JM) | L_z + g_s S_z | \Phi(\gamma_k L_k S_k JM) \rangle \end{aligned} \quad (2.50)$$

şeklinde dir. CSF'ler arasındaki matris elemanları da

$$\langle \Phi(\gamma LS JM) | L_z + g_s S_z | \Phi(\gamma' L' S' JM) \rangle = \delta_{\gamma\gamma'} \delta_{LL'} \delta_{SS'} g_J(LS) M \quad (2.51)$$

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

$$g_J(LS) = 1 + (g_s - 1) \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \quad (2.52)$$

Bu ifade dikkate alındığında enerji yarılması

$$\Delta E(\gamma LS) = \mu_B B g_{\gamma J} M \quad (2.53)$$

olur.

2.5.3. Enerji seviyeleri arasındaki geçişler

Bir atomun enerji seviyeleri genellikle sonsuz yarı ömürlü kararlı haller olarak kabul edilir. Bir elektromanyetik alan varlığında bu durum değişir. Fotonların soğurulması atomları ve iyonları daha yüksek seviyelere uyaracaktır. Aynı anda yayınlama ile bir kez ışıma yapacaktır.

İki hal arasındaki elektromanyetik geçiş, karşılık gelen fotonun açısal momentum ve paritesi ile belirlenir. Soğurulan veya yayınlanan foton k açısal momentumu ve $\pi = (-1)^k$ pariteye sahip ise geçişe ‘elektrik çok-kutuplu (Ek) geçiş’ denir. Her birçok-kutup, paritesi π ve rankı k olan $O_q^{\pi(k)}$ küresel tensör işlemcisi ile tanımlanır.

Bu elektrik geçişler için,

$$E_q^{(k)} = \sum_{i=1}^N r^k(i) C_q^{(k)}(i) \quad (2.54)$$

şeklindedir.

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

$$I_q^{\pi k}(\gamma J M, \gamma' J' M') = \langle \gamma J M | O_q^{\pi(k)} | \gamma' J' M' \rangle \quad (2.55)$$

ve bileşen şiddeti $S^{\pi k}$

$$S^{\pi k}(\gamma J M, \gamma' J' M') = \sum_q \left| I_q^{\pi k}(\gamma J M, \gamma' J' M') \right|^2 \quad (2.56)$$

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

$$S^{\pi k}(\gamma J, \gamma' J') = \sum_{M, M', q} \left| \langle \gamma J M | O_q^{\pi(k)} | \gamma' J' M' \rangle \right|^2 \quad (2.57)$$

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

$$S^{\pi k}(\gamma' J', \gamma J) = \left| \langle \gamma J \| \mathbf{O}^{\pi(k)} \| \gamma' J' \rangle \right|^2 \quad (2.58)$$

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

$$A^{\pi k}(\gamma' J', \gamma J) = 2C_k \left[\alpha(E_{\gamma' J'} - E_{\gamma J}) \right]^{2k+1} \frac{S^{\pi k}(\gamma' J', \gamma J)}{g_{J'}} \quad (2.59)$$

ile verilir. Burada $g_{J'}$

$$g_{J'} = 2J' + 1 \quad (2.60)$$

şeklinde üst seviyenin istatistiksel ağırlığıdır ve

$$C_k = \frac{(2k+1)(k+1)}{k[(2k+1)!!]^2} \quad (2.61)$$

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

$$f^{\pi k}(\gamma J, \gamma' J') = \frac{1}{\alpha} C_k [\alpha(E_{\gamma' J'} - E_{\gamma J})]^{2k-1} \frac{S^{\pi k}(\gamma J, \gamma' J')}{g_J} \quad (2.62)$$

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 salıncı şiddeti veya gf değeridir. Ağırlıklı salıncı şiddeti

$$gf^{\pi k}(\gamma J, \gamma' J') = g_J f^{\pi k}(\gamma J, \gamma' J') \quad (2.63)$$

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

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 belirlidir. π ve π' ile iki halin paritesi olmak üzere π'/π dikkate alınır

$$\mathbf{E}^{(k)} : \frac{\pi'}{\pi} = (-1)^k \quad (2.64)$$

olduğu görülür. Yani, $E1$ elektrik dipol işlemcisi farklı 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

$$\Delta J = J - J' = 0, \pm 1, \dots, \pm k, \quad k \leq J + J' \quad (2.65)$$

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 (2.65)'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,

$$\mathbf{E}^{(k)} : \Delta S = 0 \quad (2.66)$$

olarak verilebilir.

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

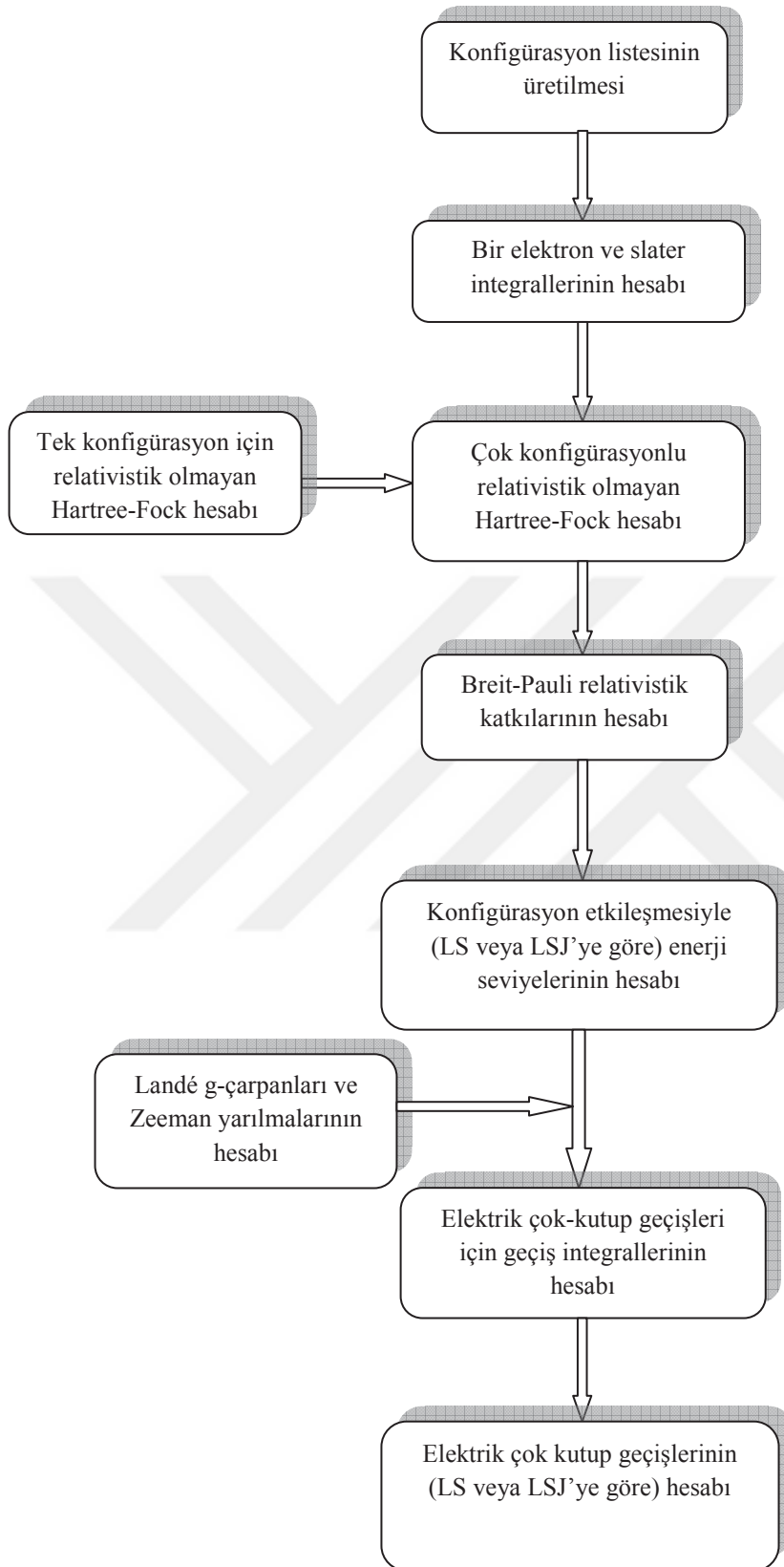
$$\mathbf{E}^{(k)} : \Delta L = 0, \pm 1, \dots, \pm k, \quad k \leq L + L' \quad (2.67)$$

olarak tayin eder.

2.5.4. MCHF ile atomik yapı hesaplama adımları

MCHF program paketi [8] ile hesaplama adımları aşağıdaki şekilde özetlenebilir:

1. Verilen bir atomun kapalı alt tabakaları okunarak bazı kurallara göre çiftlenmiş konfigürasyon hal listesi üretilir.
2. Slater integralleri ve kinetik integrallerin lineer birleşimi olarak relativistik olmayan Hamiltonyenin matris elemanlarını ifade etmek için gerekli olan açısall integraller hesaplanır. Verilen bir konfigürasyon hal listesi için tüm matris elemanları veya seçilenler hesaplanabilir.
3. MCHF yaklaşıklığında relativistik olmayan radyal fonksiyonları, konfigürasyon açılım katsayıları ve enerji hesaplanır. Radyal dalga fonksiyonları ve açılım katsayılı konfigürasyon hal listesi oluşturulur.
4. Radyal integrallerin lineer birleşimi olarak Breit-Pauli Hamiltonyenin matris elemanlarını ifade etmek için gerekli olan açısall integraller hesaplanır. Verilen bir konfigürasyon hal listesi için tüm matris elemanları veya seçilenler hesaplanabilir. Yörüngeler ortogonal olarak kabul edilir. Breit-Pauli LSJ yaklaşıklığında, dalga fonksiyonu farklı LS terimli konfigürasyon hal fonksiyonlarına açılır.
5. Hem relativistik olmayan hem de Breit-Pauli yaklaşıklığında bir etkileşme matrisinin özdeğer ve özvektörleri hesaplanır.
6. Konfigürasyon etkileşmesiyle üretilen elektronik dalga fonksiyonları kullanılarak zayıf dış manyetik alandaki manyetik alt seviyelerinin ayrılmasını belirlemek için köşegen ve köşegen-dışı Landé g -çarpanları hesaplanır [11].
7. Radyal integrallerin lineer birleşimi olarak $E1$ geçiş işlemcilerinin matris elemanlarını ifade etmek için gerekli olan açısall integralleri hesaplanır. İki konfigürasyon hali arasındaki geçiş için tüm matris elemanları hesaplanır.
8. Geçiş matris elemanlarıyla birlikte zıt veya aynı pariteli ilk ve son haller için verilen dalga fonksiyonlarıyla salıncı şiddetleri ve geçiş olasılıkları LS ve LSJ çiftlenimine göre hesaplanır.



Şekil 2.1. MCHF ile atomik yapı hesap adımları

2.6. Relativistik Hartree-Fock (HFR) Yöntemi

Cowan tarafından geliştirilen bu yaklaşık yöntemde [6] Hamiltonyen atomik birimlerde

$$H = -\sum_i \nabla_i^2 - \sum_i \frac{2Z}{r_i} + \sum_{i>j} \frac{2}{r_{ij}} + \sum_i \xi_i(r_i)(\mathbf{l}_i \cdot \mathbf{s}_i) \quad (2.68)$$

olarak alınır. Burada $r_i = |\mathbf{r}_i|$ 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 üzerindendir. ξ_i , yörünge- ve spin-açısıl momentum işlemcilerinin skaler çarpımının bir orantı sayısıdır:

$$\xi(r) = \frac{\alpha^2}{2} \frac{1}{r} \left(\frac{dV}{dr} \right) \quad (2.69)$$

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

$$H\Psi^k = E^k\Psi^k \quad (2.70)$$

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 yaklaşıklıklar 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

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

$$\sum_{i=1}^N f_i \equiv \sum_i f(\mathbf{r}_i) \quad (2.71)$$

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,

$$\sum_{i=2}^N \sum_{j=1}^{i-1} g_{ij} \equiv \sum_{i>j} \sum g(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \quad (2.72)$$

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

$$\langle \Psi | \sum_i \xi_i(\mathbf{l}_i, \mathbf{s}_i) | \Psi \rangle = \sum_i \langle n_i l_i m_{l_i} m_{s_i} | \xi(\mathbf{l}, \mathbf{s}) | n_i l_i m_{l_i} m_{s_i} \rangle \quad (2.73)$$

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

$$E_{ort.} = \sum_i \langle i | -\nabla^2 | i \rangle_{ort.} + \sum_i \langle i | -2Z/r_1 | i \rangle_{ort.} + \sum_{i>j} \left[\langle ij | 2/r_{12} | ij \rangle_{ort.} - \langle ij | 2/r_{12} | ji \rangle_{ort.} \right] \quad (2.74)$$

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

$$E^i = E_k^i + E_n^i + \sum_{j \neq i} E^{ij} \quad (2.75)$$

olur. Tüm N elektronun konfigürasyon-ortalama toplam bağlanma enerjisi

$$E_{ort.} = \sum_i E_k^i + \sum_i E_n^i + \sum_{i>j} E^{ij} \quad (2.76)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_i (E_k^i + E_n^i + E^i) \quad (2.77)$$

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. (2.75)'deki terimler kısaca, kinetik enerji için

$$E_k^i \equiv \langle i | -\nabla^2 | i \rangle_{ort.} = \int_0^\infty P_{n,l_i}^*(r) \left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l_i(l_i+1)}{r^2} \right] P_{n,l_i}(r) dr, \quad (2.78)$$

elektron-çekirdek etkileşme enerjisi için

$$E_n^i \equiv \langle i | -2Z/r | i \rangle = \int_0^\infty (-2Z/r) |P_i(r)|^2 dr \quad (2.79)$$

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

$$E^{ij} = F^0(ij) - \frac{1}{2} \sum_k \begin{pmatrix} l_i & k & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 G^k(ij) \quad (2.80)$$

ve özdeş elektronlar için

$$E^{ii} = F^0(ii) - \frac{(2l_i + 1)}{(4l_i + 1)} \sum_{k>0} \begin{pmatrix} l_i & k & l_i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 F^k(ii) \quad (2.81)$$

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

$$R^k(\alpha, \beta; \alpha', \beta') = \int_0^\infty \int_0^\infty P(\alpha; r) P(\alpha'; r) U^k(r, s) P(\beta; s) P(\beta'; s) dr ds \quad (2.82)$$

Burada

$$U^k(r, s) = \frac{s^k}{r^{k+1}}, \quad r \geq s \\ = \frac{r^k}{s^{k+1}}, \quad r < s \quad (2.83)$$

şeklindedir. Bu durumda

$$F^k(nl, n'l') = R^k(nl, n'l'; nl, n'l') \quad (2.84)$$

ve

$$G^k(nl, n'l') = R^k(nl, n'l'; n'l', nl) \quad (2.85)$$

dir.

2.6.2. Relativistik düzeltmeler

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

$$E_r = \sum_{i=1}^N E_r^i = \sum_{i=1}^N (E_m^i + E_D^i) \quad (2.86)$$

Burada kütle-hız ve Darwin katkıları

$$E_m^i = -\frac{1}{4} \alpha^2 \int_0^\infty P_i(r) (\varepsilon_i - V^i(r))^2 P_i(r) dr \quad (2.87)$$

ve

$$E_D^i = -\delta_{l,0} \frac{1}{4} \alpha^2 \int_0^\infty P_i(r) \left[\frac{dV^i(r)}{dr} \right] \left[r \frac{dr^{-1} P_i(r)}{dr} \right] dr \quad (2.88)$$

şeklinde verilir. Burada $\alpha \cong 1/137,036$ ince yapı sabitidir ve tüm enerjiler Rydbergs 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

$$P'_\kappa = -\frac{\kappa}{r} P_\kappa + \frac{\alpha}{2} \left(\varepsilon_i - V^i + \frac{4}{\alpha^2} \right) Q_\kappa \quad (2.89)$$

ve

$$Q'_\kappa = \frac{\alpha}{2} (V^i - \varepsilon_i) P_\kappa + \frac{\kappa}{r} Q_\kappa \quad (2.90)$$

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

$$\kappa = \begin{cases} l_i, & j = l_i - 1/2 \\ -l_i - 1, & j = l_i + 1/2 \end{cases} \quad (2.91)$$

dir. 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

$$\frac{2l_i l_i / r - (2l_i + 2)(l_i + 1)/r}{(4l_i + 2)} = -\frac{1}{r} \quad (2.92)$$

ve buradan da j 'den bağımsız radyal dalga fonksiyonu için

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l_i(l_i+1)}{r^2} + V^i(r) - \frac{\alpha^2}{4} [\varepsilon_i - V^i(r)]^2 \right. \\ \left. - \delta_{l_i 0} \frac{\alpha^2}{4} \left[1 + \frac{\alpha^2}{4} (\varepsilon_i - V^i(r)) \right]^{-1} \left(\frac{dV^i}{dr} \right) \left(\frac{dP_i/dr}{P_i} - \frac{1}{r} \right) \right\} P_i(r) = \varepsilon_i P_i(r) \quad (2.93)$$

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 (2.93)'den çıkararak kütle bağımsız radyal

fonksiyonlar elde edilir. (2.93)'den elde edilen etki de $(2j+1)$ ağırlıklı ortalamanın ilk P_κ relativistik fonksiyona alınmasıdır.

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l_i(l_i+1)}{r^2} + V^i(r) \right] P_i(r) = \varepsilon_i P_i(r) \quad (2.94)$$

(2.94) ile karşılaştırma yapıldığında (2.93)'ün 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 momentini üç değişik şekilde incelenmektedir:

$$\left\langle \gamma JM \left| \sum_i \mathbf{r}(i) \right| \gamma' J' M' \right\rangle, \quad (2.95)$$

$$2(E' - E)^{-1} \left\langle \gamma JM \left| \sum_i \nabla_i \right| \gamma' J' M' \right\rangle \quad (2.96)$$

ve

$$2(E' - E)^{-2} \left\langle \gamma JM \left| \sum_i \nabla_i V \right| \gamma' J' M' \right\rangle \quad (2.97)$$

Burada E ve E' , γJM ve $\gamma' J' M'$ hallerinin enerjileri (rydbergs olarak), V merkezi alan potansiyel enerjisidir ve tüm uzaklıklar (bunların gradyanı) Bohr birimindedir.

(2.95) ve (2.96)'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

$$S \equiv \left| \langle \gamma J \| \mathbf{P}^{(1)} \| \gamma' J' \rangle \right|^2 \quad (2.98)$$

olarak bilinir. Burada

$$\mathbf{P}_q^{(1)} \equiv \sum_{i=1}^N r_q^{(1)}(i) = \sum_{i=1}^N r_i C_q^{(1)}(i) \quad (2.99)$$

$-ea_0$ biriminde ölçülen atomun klasik dipol momentidir.

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

$$A = \frac{64\pi^4 e^2 a_0^2 \sigma^3}{3h} S \sum_{Mq} \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & q & M' \end{pmatrix}^2 = \frac{64\pi^4 e^2 a_0^2 \sigma^3}{3h(2J'+1)} S \quad (2.100)$$

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

$$gA = (2J'+1)A = \frac{64\pi^4 e^2 a_0^2 \sigma^3}{3h} S \quad (2.101)$$

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:

$$f_{ij} = \frac{8\pi^2 m c a_0^2 \sigma}{3h(2J+1)} S = \frac{2(E_j - E_i)}{3(2J+1)} S \quad (2.102)$$

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

$$gf = (2J+1)f_{ij} = -(2J'+1)f_{ji} \quad (2.103)$$

veya

$$gf = \frac{8\pi^2 m c a_0^2 \sigma}{3h} S \quad (2.104)$$

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

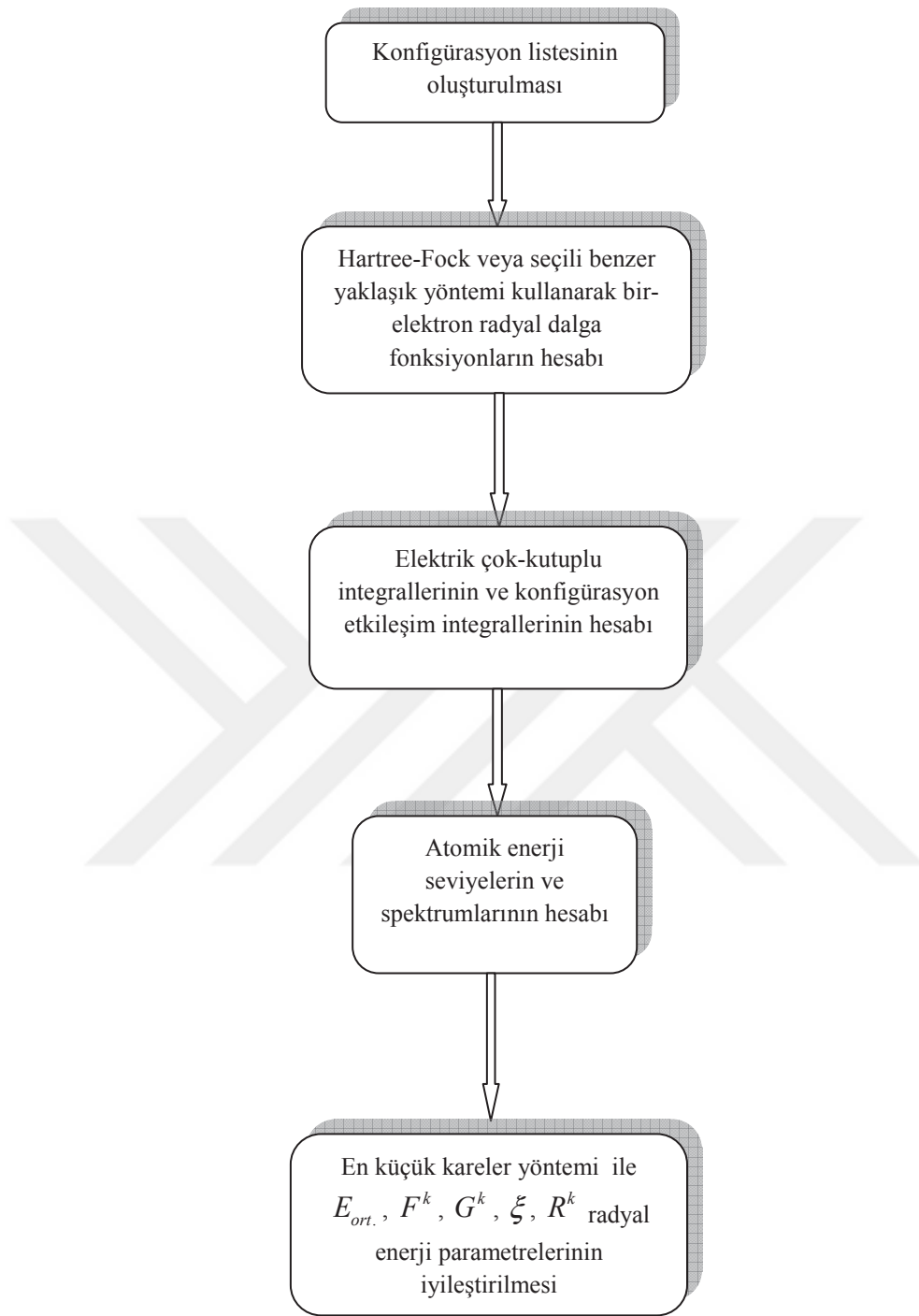
$$gA = \frac{8\pi^2 e^2 \sigma^2}{mc} gf \quad (2.105)$$

olur.

2.6.4. HFR ile atomik yapı hesaplama adımları

Cowan program paketi [9] ile hesaplama adımları aşağıdaki şekildedir:

1. Hartree-Fock veya herhangi bir yaklaşık yöntemi kullanarak özel elektron konfigürasyonlarının herhangi bir sayısının her biri için bir-elektron (bağlı veya serbest) radyal dalga fonksiyonları hesaplanır. Her konfigürasyon için çıkış dosyası konfigürasyonun ortalama enerjisini ($E_{ort.}$) ve bu konfigürasyonun enerji düzeylerini hesaplamakta gerekli olan radyal Coulomb (F^k ve G^k) ve spin-yörünge integrallerini içerir.
2. Konfigürasyonların her bir çiftleri arasındaki elektrik dipol ($E1$) radyal integralleri ve etkileşme konfigürasyonlarının her bir çifti arasındaki konfigürasyon-etkileşme Coulomb integrallerini (R^k) hesaplamak için gerekli dalga fonksiyonları kullanılır. Hesaplanan veriler atomik spektrumların hesaplanmasında kullanılır.
3. Özdeğer (enerji seviyeleri) ve özvektörleri hesaplamak için her bir matris köşegenleştirilerek J toplam açısal momentumun olası her değeri için enerji matrisi kurulur.
4. $E1$ ışımalı spektrumu için dalga boyları, salınıcı şiddetleri, geçiş olasılıkları ve yarı ömürler hesaplanır.
5. Daha yüksek doğrulukta sonuçlar istenildiğinde, 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 değiştirilir. En küçük kareler uydurma parametrelerinin sonuçları atomik enerji seviyelerinin ve spektrumlarının hesaplanmasında tekrar kullanılabilir.



Şekil 2.2. HFR ile atomik yapı hesap adımları

BÖLÜM 3. TARTIŞMA VE SONUÇ

Bu çalışmada, lantanit atomlarından olan seryum atomunun dört kez iyonlaşmış haline ait bazı atomik hesaplamalar yapıldı. Ce V için konfigürasyon etkileşme yöntemlerinden olan Fischer tarafından geliştirilen ve relativistik düzeltmeler için Breit-Pauli Hamiltonyenini temel alan çok konfigürasyonlu Hartree-Fock yöntemi (MCHF) [5] çerçevesinde kullanılan MCHF atomik yapı paketi [8] ve Cowan tarafından geliştirilen relativistik Hartree-Fock yöntemi (HFR) [6] çerçevesinde kullanılan Cowan paketi [9] ile bazı seviye enerjileri, Landé g-çarpanları, elektrik dipol geçişleri için dalga boyları, salınıcı şiddetleri ve geçiş olasılıkları elde edildi.

Ce V'in taban seviyesi [Cd] $5p^6 \ ^1S_0$ 'dır. Tablo 3.1.'de hesaplamalarda dikkate alınan konfigürasyon setleri verilmektedir. Bu konfigürasyon setlerinde Ce V'in [Cd] özü dışında MCHF+BP ve HFR yöntemleriyle yapılan A, B ve C hesaplamalarında değerlik elektronları arasındaki karşılıklı etkileşme dikkate alınırken, sadece MCHF+BP yöntemiyle yapılan D hesabında [Pd] özü dışında değerlik-değerlik ve öz-değerlik elektronları arasındaki karşılıklı etkileşmeler de dikkate alındı.

Tablo 3.1.Ce V'in elektrik dipol geçişleri için konfigürasyon setleri

Seviyeler	Konfigürasyonlar			
	A	B	C	D
MCHF+BP hesaplamaları için:				
Çift parite	$5p^6, 5p^5nf (n = 4-9), 5p^5np (n = 6-8)$	$5p^6, 5p^5nf (n = 4-9), 5p^5np (n = 6-9), 5p^44f^2$	Konf. B çalışması ile aynı, MCHF çalışması farklı	$5s^25p^6, 5s^25p^5nf (n = 4-6), 5s^25p^5np (n = 6-8), 5s^25p^44f^2, 5s5p^65d$
Tek parite	$5p^5nd (n = 5-9), 5p^5ns (n = 6-9), 5p^5ng (n = 5, 6)$	$5p^5nd (n = 5, 6), 5p^5ns (n = 6, 7), 5p^55g$	B çalışma ile aynı	$5s^25p^5nd (n = 5-8), 5s^25p^5ns (n = 6-8), 5s^25p^55g, 5s5p^64f, 5s5p^66p$
HFR hesaplamaları için:				
Tek parite	$5p^6, 5p^54f, 5p^56p$	$5p^6, 5p^5nf (n = 4-7), 5p^5np (n = 6-8)$	$5p^6, 5p^5nf (n = 4-10), 5p^5np (n = 6-10)$	
Çift parite	$5p^5nd (n = 5, 6), 5p^56s$	$5p^5nd (n = 5-8), 5p^5ns (n = 6-8), 5p^5ng (n = 5, 6)$	$5p^5nd (n = 5-10), 5p^5ns (n = 6-10), 5p^5ng (n = 5-7)$	

3.1. Ce V'in Bazı Seviyelerinin Enerjileri ve Landé g -çarpanları

Dört kez iyonlaşmış seryumun [Cd] özü dışında $5p^6$, $5p^5nf$ ($n = 4-10$), $5p^5np$ ($n = 6-10$), $5p^5nd$ ($n = 5-10$), $5p^5ns$ ($n = 6-10$) ve $5p^5ng$ ($n = 5-7$) seviyelerinin enerjileri ve Landé g -çarpanları MCHF+BP ve HFR yöntemleriyle hesaplandı. Elde edilen sonuçlar diğer çalışmalarla karşılaştırmalı olarak Tablo 3.2. ve Tablo 3.3.'te sunulmaktadır. Enerji seviyeleri $5p^6 \ ^1S_0$ taban hal seviyesine göre cm^{-1} birim sistemine göre verilmektedir. Tabloda farklı konfigürasyon setlerine göre hesaplanan sonuçlar MCHF+BP için A, B, C ve D ve HFR için A, B ve C harfleriyle ve sadece tek pariteli seviyeler “^o” indisiyle belirtilmektedir. Ayrıca konfigürasyon terimleri, karşılaştırma değerleri $[K]_J$ gösteriminde verildiği için hem $[K]_J$ hem de ^{2S+1}L gösterimine göre sunulmaktadır. Ce V için enerji seviyeleri NIST verileri [10] ve Readfors ve Reader tarafından yapılan çalışmayla [4] karşılaştırılmaktadır. Landé g -çarpanları için karşılaştırma değerleri mevcut değildir.

MCHF+BP hesapları Tablo 3.1.'de verilen konfigürasyon setlerinde A, B ve C'nin tek ve çift pariteli seviyelerinde değerlik elektronları arasındaki karşılıklı etkileşme dikkate alınırken, D'nin tek ve çift pariteli seviyelerinde öz ve değerlik elektronları arasındaki karşılıklı etkileşme de hesaba dahil edildi. İlk olarak MCHF yöntemi kullanılarak seçilen konfigürasyonlar için elde edilen dalga fonksiyonlarının baskınlığını belirleyen karışım katsayıları ve relativistik olmayan enerjiler hesaplandı. Elde edilen bu dalga fonksiyonlarında Breit-Pauli relativistik düzeltmelerini dikkate almak için Breit-Pauli Hamiltoniyeni ile köşegenleştirilerek karışım katsayıları yeniden belirlendi ve Breit-Pauli relativistik düzeltmeleri dikkate alınarak konfigürasyon etkileşme yöntemiyle seviye enerjileri elde edildi. MCHF dalga fonksiyonları ve seviye enerjileri kullanılarak Zeeman programıyla [11] seviyelerin Landé g -çarpanları hesaplandı. Tablo 3.2. ve Tablo 3.3.'te $5p^6$, $5p^5nf$ ($n = 4, 5, 7-9$), $5p^5np$ ($n = 6-9$), $5p^5nd$ ($n = 5-9$), $5p^5ns$ ($n = 6-9$) ve $5p^55g$ konfigürasyonların seviye enerjileri ve Landé g -çarpanları verilmektedir. Tablo 3.2.'de $5p^6$, $5p^54f$, $5p^56p$, $5p^55d$ ve $5p^56d$ seviyeleri için deneysel [10] ve teorik [4] sonuçları olduğundan sadece bu seviyeler için karşılaştırma yapılmıştır. Çift pariteli seviyelerden A, B ve D

çalışmalarında $5p^56p$ seviyesi hariç uyum iyidir. C hesabı ile bu seviyede düzelme görülmektedir. Fakat bu seferde $5p^54f$ seviyesi için uyum azalmaktadır. Karşılaştırma değerleri olmayan $5p^5np$ ($n = 7, 8$) seviyeleri HFR sonuçlarıyla uyumluyken ve $5p^59p$ 'de uyum daha azdır. C çalışmasının $5p^5nf$ ($n = 5, 7-9$) seviyeleri HFR ile uyum içindedir. Tek pariteli seviyelerde ise $5p^55d$ seviyesinin C hesabında uyum az, $5p^56d$ için B ve D sonuçları iyidir. $5p^56s$ seviyesi için A hesabı diğer hesaplardan karşılaştırma değerine daha yakındır. Ayrıca karşılaştırma değeri olmayan $5p^5nd$ ($n = 7-9$), $5p^5ns$ ($n = 7-9$) ve $5p^55g$ seviyeleri HFR ile uyumludur. 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 , diğer çalışmaları göstermektedir. Elde edilen sonuçlar ile [4] çalışmasındaki sonuçlar arasındaki yüzde fark, $5p^56p$ seviyesi dışında, A, B ve D çalışmaları için %0,05–19 aralığındadır. Karşılaştırma değerleri olmadığından Landé g -çarpanları da HFR ile karşılaştırıldığında bazı C sonuçları hariç uyum içindedirler.

HFR hesaplamalarında alınan konfigürasyon setlerinde sadece değerlik elektronları arasındaki karşılıklı etkileşme etkileri dikkate alındı. Özden uyarılarak öz ve değerlik elektronları arasındaki karşılıklı etkileşmelerin alındığı hesaplamalar HFR de mümkün olmadı. 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 integralleri (R^k) ölçeklendirme faktörlerinin iyileştirilmemiş değerleri A, B ve C hesapları için 0,75 olarak seçildi. HFR sonuçlarının karşılaştırma değeri olanlar ve yeni veriler sunmak amacıyla yüksekçe uyarılmış seviyeleri de sunulmaktadır. Tablo 3.2. ve Tablo 3.3.'te Ce V'in $5p^6$, $5p^5nf$ ($n = 4-10$), $5p^5np$ ($n = 6-10$), $5p^5nd$ ($n = 5-10$), $5p^5ns$ ($n = 6-10$) ve $5p^5ng$ ($n = 5-7$) konfigürasyonlarının seviye enerjileri ve Landé g -çarpanları verilmektedir. Enerji seviyeleri NIST verileri [10] ve Readfords ve Reader tarafından yapılan çalışmayla [4] karşılaştırıldığında sonuçların uyumlu olduğu görülmektedir. Elde edilen sonuçlar ile [4] çalışmayla olan yüzde farklar A, B ve C hesaplamaları için sırasıyla %0,00–1.23, %0,00–0,30 ve %0,00–0,49 aralığındadır. Ayrıca, karşılaştırma değerleri olmadığından Landé g -çarpanları da MCHF+BP ile karşılaştırıldığında tüm seviyeler için uyum vardır.

Tablo 3.2. Ce V'in düşük seviyelerinin E enerjileri (cm⁻¹) ve Landé g-çarpınları

Seviyeler			E (cm ⁻¹)			g-çarpanı	
Konf.	Terim		Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma	
	[K] _J	^{2S+1} L	MCHF+ BP	HFR		MCHF+ BP	HFR
5p ⁶		¹ S ₀	A	0,00	0,00	0,00 ^{a,b}	
			B	0,00	0,00		
			C	0,00	0,00		
			D	0,00			
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})4f	² [3/2] ₁	³ D	A	109964,96	107262,02	107397,7 ^a	0,499
			B	111327,80	107422,52		0,499
			C	256375,31	107474,99		0,499
			D	111338,97			0,499
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})4f	² [3/2] ₂	³ D	A	113355,52	110384,71	110442,0 ^a	1,135
			B	114650,21	110539,94		1,133
			C	259235,70	110571,89		1,133
			D	114665,50			1,140
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})4f	² [9/2] ₄	³ G	A	117061,63	113583,77	113765,4 ^a	1,038
			B	118366,53	113622,61		1,038
			C	265760,22	113747,01		1,051
			D	118423,88			1,037
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})4f	² [9/2] ₅	³ G	A	117421,39	113376,41	113862,1 ^a	1,200
			B	118970,84	113541,33		1,200
			C	262483,28	113553,02		1,200
			D	119030,58			1,200
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})4f	² [5/2] ₃	³ D	A	118702,38	115101,57	115092,7 ^a	1,273
			B	119847,98	115226,04		1,269
			C	263504,94	115239,70		1,277
			D	119872,49			1,270
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})4f	² [7/2] ₃	³ G	A	122644,45	117977,38	118067,4 ^a	0,917
			B	123714,28	117996,11		0,907
			C	289638,78	117997,42		0,906
			D	123772,02			0,907
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})4f	² [7/2] ₄	³ F	A	127185,69	122127,83	122023,6 ^a	1,137
			B	127890,05	122079,80		1,133
			C	274825,44	122075,18		1,133
			D	127947,16			1,133
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})4f	² [5/2] ₂	¹ D	A	145339,39	124643,00	124534,4 ^a	0,836
			B	146050,53	124668,90		0,847
			C	283243,81	124771,79		0,743
			D	146075,06			0,846
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})4f	² [7/2] ₃	³ G	A	139839,95	137168,93	137154,4 ^a	0,872
			B	140571,59	137203,33		0,881
			C	270377,59	137210,59		0,875
			D	140630,58			0,881
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})4f	² [5/2] ₃	³ F	A	144041,20	140562,59	140590,8 ^a	1,104
			B	144450,89	140607,53		1,107
			C	291411,53	140594,59		1,107
			D	144500,36			1,107
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})4f	² [7/2] ₄	³ F	A	143837,75	141399,79	141367,7 ^a	1,124
			B	144451,84	141425,46		1,129
			C	293117,06	141421,71		1,115
			D	144509,61			1,129

Tablo 3.2. (Devamı)

Seviyeler		E (cm ⁻¹)				g-çarpanı	
Konf.	Terim	Bu çalışma		Diğer çalışmalar		Bu çalışma	
	[K] _J 2S+1L	MCHF+ BP	HFR			MCHF+ BP	HFR
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})4f	² [5/2] ₂ ¹ D	A	129217,19	143588,9 ^a		0,860	0,869
		B	130184,12			0,852	0,870
		C	307963,41			1,047	0,871
		D	130203,84			0,852	
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})5d	² [1/2] ₀ ³ P ^o	A	173711,84	178342,1 ^a			
		B	175253,14				
		C	190899,22				
		D	175458,72				
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})5d	² [1/2] ₁ ³ P ^o	A	176614,70	181115,3 ^a 181116 ^b		1,454	1,427
		B	178241,19			1,455	1,428
		C	193887,27			1,455	1,429
		D	178447,91			1,455	
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})5d	² [3/2] ₂ ³ P ^o	A	182445,30	186467,0 ^a		1,439	1,404
		B	184261,36			1,440	1,404
		C	199907,44			1,440	1,405
		D	184456,47			1,437	
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})5d	² [7/2] ₄ ³ F ^o	A	183880,38	187276,8 ^a		1,251	1,251
		B	185881,84			1,250	1,251
		C	201527,92			1,250	1,251
		D	183786,89			1,251	
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})5d	² [7/2] ₃ ³ F ^o	A	185702,03	188300,8 ^a		1,090	1,092
		B	187596,77			1,090	1,093
		C	203242,84			1,090	1,092
		D	185858,59			1,089	
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})5d	² [5/2] ₂ ³ F ^o	A	190312,41	191452,8 ^a		0,889	0,908
		B	192240,59			0,892	0,904
		C	207886,67			0,892	0,902
		D	190981,84			0,918	
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})5d	² [5/2] ₃ ³ D ^o	A	198573,89	198021,3 ^a		1,210	1,212
		B	200710,36			1,210	1,212
		C	216356,44			1,210	1,212
		D	200804,77			1,208	
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})5d	² [3/2] ₁ ³ D ^o	A	206615,17	207055,1 ^a 207057 ^b		0,552	0,591
		B	208570,80			0,553	0,591
		C	224216,88			0,553	0,590
		D	208770,14			0,553	
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})5d	² [5/2] ₂ ³ F ^o	A	207999,62	210772,8 ^a		0,841	0,830
		B	209937,62			0,839	0,834
		C	225583,70			0,839	0,835
		D	209150,75			0,815	
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})5d	² [3/2] ₂ ³ D ^o	A	213304,28	215691,4 ^a		1,163	1,192
		B	215380,05			1,162	1,192
		C	231026,12			1,162	1,192
		D	215582,58			1,161	
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})5d	² [5/2] ₃ ¹ F ^o	A	215754,67	218332,5 ^a		1,117	1,113
		B	217875,17			1,117	1,113
		C	233521,25			1,117	1,110
		D	217420,03			1,120	
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})6s	² [3/2] ₂ ³ P ^o	A	254472,25	246732,3 ^a		1,501	1,501
		B	260286,28			1,501	1,501

Tablo 3.2. (Devamı)

Seviyeler			E (cm ⁻¹)			g-çarpanı		
Konf.	Terim		Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma		
	[K] _J	^{2S+1} L	MCHF+ BP	HFR		MCHF+ BP	HFR	
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})6s	² [3/2] ₁	¹ P ^o	C	275932,38	247507,23	1,501	1,501	
			D	259618,27		1,501		
			A	256893,84	247534,13	247397,5 ^a	1,208	1,184
			B	262325,84	247423,35	247396 ^b	1,182	1,181
			C	277971,94	247390,88		1,182	1,179
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})5d	² [3/2] ₁	¹ P ^o	D	261746,94		1,188		
			A	269457,06	250397,78	250399,2 ^a	1,005	0,983
			B	267266,41	250398,46	250399 ^b	1,027	0,982
			C	282912,47	249943,52		1,027	0,981
			D	267340,84			1,022	
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})6s	² [1/2] ₀	³ P ^o	A	275965,91	272473,31	272080,9 ^a		
			B	281704,38	272558,15			
			C	297350,44	272527,15			
			D	281035,19				
			A	277670,94	273195,52	273474,9 ^a	1,279	1,317
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})6s	² [1/2] ₁	³ P ^o	B	283409,91	273111,29	273477 ^b	1,282	1,320
			C	299056,00	272995,88		1,282	1,322
			D	282767,94			1,281	
			A	404094,78	287393,99	287276,9 ^a	1,727	1,683
			B	406145,53	287052,77		1,734	1,752
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})6p	² [1/2] ₁	³ S	C	301012,22	287044,70		1,876	1,753
			D	421094,56			1,647	
			A	409357,16	289133,80	289094,5 ^a	1,160	1,201
			B	411634,19	289142,14		1,161	1,179
			C	304165,78	289143,18		1,179	1,179
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})6p	² [5/2] ₂	³ D	D	424452,03			1,159	
			A	435125,00	293655,89	293129,1 ^a	1,326	1,334
			B	436611,91	293359,37		1,319	1,334
			C	307508,34	293371,49		1,334	1,334
			D	465210,91			1,314	
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})6p	² [3/2] ₁	¹ P	A	438744,56	293911,21	293994,6 ^a	1,222	1,189
			B	440727,41	294028,69		1,163	1,129
			C	309567,34	294027,52		1,021	1,129
			D	465401,84			1,323	
			A	444482,28	296458,49	296950,1 ^a	1,317	1,312
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})6p	² [3/2] ₂	³ P	B	446614,31	296627,01		1,320	1,326
			C	312300,62	297721,79		1,298	1,327
			D	473008,41			1,313	
			A	441047,69	303683,61	302192,2 ^a		
			B	443425,53	302469,70			
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})6p	² [1/2] ₀	³ P	C	317759,66	302471,51			
			D	463624,31				
			A	424640,28	313354,30	313188,4 ^a	0,679	0,664
			B	426499,50	313453,79		0,676	0,661
			C	326597,66	313470,22		0,665	0,771
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})6p	² [3/2] ₁	³ D	D	444828,50			0,612	
			A	460116,34	319577,99	320129,0 ^a	1,347	1,466
			B	462079,03	319718,75		1,348	1,460
			C	331865,25	319708,37		1,439	1,459
			D	489217,78			1,368	

Tablo 3.2. (Devamı)

Seviyeler		E (cm ⁻¹)				g-çarpanı	
Konf.	Terim	Bu çalışma		Diğer çalışmalar		Bu çalışma	
	[K] _J 2S+1L	MCHF+ BP	HFR			MCHF+ BP	HFR
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})6p	² [3/2] ₂ ³ D	A	459870,28	320989,21	320312,8 ^a	1,160	1,155
		B	462157,62	320575,96		1,152	1,163
		C	331772,03	320580,02		1,092	1,173
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})6p	² [1/2] ₀ ¹ S	A	334682,59	325713,09	321764,4 ^a		
		B	—	321606,80			
		C	—	321707,49			
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})6d	² [1/2] ₀ ³ P ^o	A	417666,72	352349,23	352187,8 ^a		
		B	382145,16	352262,77			
		C	397791,25	352281,87			
		D	381378,16				
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})6d	² [1/2] ₁ ³ P ^o	A	417820,25	353425,79	353148,7 ^a	1,391	1,367
		B	384169,16	353369,05		1,409	1,364
		C	399815,22	353397,52		1,409	1,373
		D	383321,00			1,409	
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})6d	² [3/2] ₂ ³ P ^o	A	418259,62	355272,99	355069,8 ^a	1,501	1,345
		B	388043,50	355293,27		1,382	1,342
		C	403689,56	355335,91		1,382	1,342
		D	386977,97			1,374	
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})6d	² [7/2] ₄ ³ F ^o	A	418103,34	354721,78	355312,0 ^a	1,251	1,251
		B	388135,72	354963,56		1,250	1,251
		C	403781,81	355018,97		1,250	1,251
		D	385057,62			1,251	
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})6d	² [7/2] ₃ ³ F ^o	A	418176,62	355240,54	355425,0 ^a	1,039	1,072
		B	387912,31	354823,32		1,069	1,052
		C	403558,41	354783,27		1,069	1,050
		D	385686,19			1,073	
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})6d	² [5/2] ₂ ¹ D ^o	A	418695,56	356920,95	356954,4 ^a	0,971	0,952
		B	391620,84	356926,11		0,927	0,955
		C	407266,91	357977,78		0,927	0,957
		D	389761,78			0,911	
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})6d	² [5/2] ₃ ³ D ^o	A	418717,75	357984,94	357671,7 ^a	1,263	1,228
		B	394674,41	357728,34		1,214	1,244
		C	410320,50	357753,71		1,214	1,247
		D	393154,81			1,206	
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})6d	² [3/2] ₁ ¹ P ^o	A	418581,22	361166,21	361221,8 ^a	0,790	0,812
		B	424116,47	362001,51		0,928	0,798
		C	439762,56	362294,49		0,928	0,795
		D	421628,62			0,918	
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})6d	² [5/2] ₂ ³ F ^o	A	439804,84	381159,35	381720,5 ^a	0,762	0,777
		B	409571,22	382465,38		0,813	0,777
		C	425217,28	382427,92		0,813	0,777
		D	407024,66			0,834	
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})6d	² [3/2] ₂ ³ D ^o	A	439814,69	382139,67	381809,0 ^a	1,286	1,260
		B	412850,84	383447,44		1,210	1,262
		C	428496,94	383430,39		1,210	1,271
		D	411534,88			1,213	
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})6d	² [5/2] ₃ ³ F ^o	A	439861,38	382694,92	382826,9 ^a	1,114	1,121
		B	413366,69	383666,32		1,133	1,118
		C	429012,78	383705,07		1,133	1,122
		D	411032,22			1,138	

Tablo 3.2. (Devamı)

Seviyeler			E (cm ⁻¹)			g-çarpanı		
Konf.	Terim		Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma		
	[K] _J	^{2S+1} L	MCHF+ BP	HFR		MCHF+ BP	HFR	
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})6d	² [3/2] ₁ ^o	³ D ^o	A	440027,78	384331,88	383857,4 ^a	0,818	0,820
			B	402255,03	387043,23		0,662	0,840
			C	417901,09	387273,51		0,662	0,843
			D	400651,66			0,672	

^aReadfors ve Reader [4], ^bNIST Atomic Spectra Database [10]Tablo 3.3. Ce V'in bazı uyarılmış seviyelerinin E enerjileri (cm⁻¹) ve Landé g-çarpanları

Seviyeler			E (cm ⁻¹)		g-çarpanı		
Konf.	Terim		Bu çalışma		Bu çalışma		
	[K] _J	^{2S+1} L	MCHF+ BP	HFR	MCHF+ BP	HFR	
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})5f	2[3/2] ₁	³ D	A	439776,53	—	0,525	—
			B	439603,12	356784,16	0,578	0,499
			C	395231,38	357779,38	0,499	0,499
			D	431651,97		0,590	
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})5f	2[3/2] ₂	³ D	A	439494,72	—	1,112	—
			B	439826,56	357720,51	1,111	1,113
			C	395959,56	357705,12	1,114	1,113
			D	436058,00		1,103	
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})5f	2[9/2] ₅	³ G	A	440256,09	—	1,200	—
			B	440241,31	358123,64	1,200	1,200
			C	396186,09	358132,79	1,200	1,200
			D	436995,44		1,200	
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})5f	2[9/2] ₄	³ G	A	440394,31	—	1,024	—
			B	440354,03	358415,51	1,024	1,028
			C	396660,44	358420,40	1,028	1,028
			D	437368,94		1,025	
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})5f	2[5/2] ₃	³ D	A	441782,72	—	1,206	—
			B	441813,88	359441,30	1,200	1,205
			C	397378,91	359433,18	1,202	1,205
			D	436896,06		1,235	
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})5f	2[5/2] ₂	¹ D	B	441260,38	360817,51	0,895	0,860
			C	398769,72	370808,32	0,855	0,870
			D	439263,25		0,890	
			A	442149,72	—	0,947	—
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})5f	2[7/2] ₃	¹ F	B	441851,31	360666,15	0,949	0,945
			C	398528,94	370772,59	0,947	0,945
			D	439984,28		0,937	
			A	442214,62	—	1,181	—
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})5f	2[7/2] ₄	³ F	B	441904,88	361048,92	1,183	1,177
			C	398719,50	371042,10	1,177	1,177
			D	440119,44		1,172	
			B	—	383618,10	—	1,208
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})7s	2[3/2] ^o ₁	¹ P ^o	C	—	383720,02	—	1,209
			D	435304,59		1,167	
			B	—	381936,80	—	1,499
			C	—	381939,35	—	1,500
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})5f	2[7/2] ₄	³ G	A	460870,41	—	1,094	—
			B	460713,91	385148,32	1,092	1,095

Tablo 3.3. (Devamı)

Seviyeler			E (cm ⁻¹)		g-çarpanı		
Konf.	Terim		Bu çalışma		Bu çalışma		
	[K] _J	^{2S+1} L	MCHF+ BP	HFR	MCHF+ BP	HFR	
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})5f	² [5/2] ₃	³ D	C	419755,44	385140,09	1,094	1,095
			D	458253,47		1,101	
			A	460992,66	—	1,184	—
			B	460825,38	384870,74	1,188	1,179
			C	419603,03	384873,71	1,180	1,179
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})5f	² [5/2] ₂	³ F	D	456010,75		1,165	
			A	441440,56	—	0,868	—
			B	460711,16	385629,64	0,860	0,864
			C	420522,62	385724,25	0,862	0,874
			D	458630,84		0,842	
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})5f	² [7/2] ₃	³ G	A	460752,12	—	0,836	—
			B	460612,06	384590,39	0,833	0,840
			C	419426,44	384587,75	0,837	0,839
			D	458024,28		0,847	
			A	460870,41	—	1,094	—
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})5f	² [7/2] ₄	³ G	B	460713,91	385148,32	1,092	1,095
			C	419755,44	385140,09	1,094	1,095
			D	458253,47		1,101	
			A	460992,66	—	1,184	—
			B	460825,38	384870,74	1,188	1,179
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})5f	² [5/2] ₃	³ D	C	419603,03	384873,71	1,180	1,179
			D	456010,75		1,165	
			A	441440,56	—	0,868	—
			B	460711,16	385629,64	0,860	0,864
			C	420522,62	385724,25	0,862	0,874
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})5f	² [5/2] ₂	³ F	D	458630,84		0,842	
			B	—	389626,70	—	1,767
			C	452391,00	389711,48	1,806	1,779
			B	—	397228,99		
			C	—	397219,98		
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})7s	² [1/2] ^o ₁	³ P ^o	D	456848,91			
			B	—	398235,30	—	1,292
			C	—	398227,09	—	1,292
			B	—	395517,73		
			C	452500,50	395458,30		
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})7s	² [1/2] ^o ₀	¹ S	B	—	390484,33	—	1,143
			C	452515,53	390471,71	1,167	1,142
			B	—	392394,06	—	1,332
			C	452587,66	392385,83	1,334	1,333
			B	—	392737,25	—	1,096
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})7p	² [3/2] ₁	¹ P	C	452725,31	392739,98	1,034	1,094
			B	—	393578,63	—	1,351
			C	—	393574,30	—	1,352
			B	—	415672,36	—	0,634
			C	474911,31	415774,92	0,689	0,737
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})7p	² [3/2] ₂	³ P	B	—	418067,02	—	1,160
			C	—	418159,10		
			C	475010,19	418074,19	1,088	1,171
			B	—	418107,59		
			C	—			

Tablo 3.3. (Devamı)

Seviyeler			E (cm ⁻¹)			g-çarpanı	
Konf.	Terim		Bu çalışma			Bu çalışma	
	[K] _J	^{2S+1} L	MCHF+ BP	HFR	MCHF+ BP	HFR	
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})7p	2[1/2] ₁	³ P	B	—	418419,45	—	1,469
			C	—	418387,90	—	1,470
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})5g	2[13/2] ^o ₅	¹ H ^o	A	427894,75	—	1,016	—
			B	—	416219,85	—	1,016
			C	—	417221,79	—	1,017
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})5g	2[7/2] ^o ₄	³ F ^o	A	429120,94	—	1,143	—
			B	—	416860,75	—	1,129
			C	—	417857,51	—	1,129
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})5g	2[7/2] ^o ₃	³ G ^o	A	429551,28	—	0,886	—
			B	—	417013,82	—	0,873
			C	—	417012,77	—	0,873
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})5g	2[9/2] ^o ₄	¹ G ^o	A	430087,25	—	0,947	—
			B	—	417274,42	—	0,957
			C	—	417277,12	—	0,957
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})5g	2[9/2] ^o ₅	³ G ^o	A	430169,91	—	1,138	—
			B	—	417300,25	—	1,147
			C	—	417291,74	—	1,147
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})5g	2[5/2] ^o ₂	³ F ^o	A	426810,88	—	0,666	—
			B	—	415747,19	—	0,666
			C	—	415753,80	—	0,777
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})5g	2[5/2] ^o ₃	³ F ^o	A	427242,56	—	1,055	—
			B	—	415943,76	—	1,053
			C	—	415950,75	—	1,053
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})5g	2[13/2] ^o ₆	³ H ^o	A	427646,03	—	1,167	—
			B	—	416148,46	—	1,167
			C	—	417154,98	—	1,177
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})6f	2[3/2] ₁	³ D	B	—	420237,77	—	0,535
			C	—	420217,12	—	0,535
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})8s	2[3/2] ^o ₂	³ P ^o	A	443791,75	—	1,501	—
			B	—	427292,21	—	1,501
			C	—	427290,48	—	1,501
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})8s	2[3/2] ^o ₁	¹ P ^o	A	443807,12	—	1,167	—
			B	—	427642,79	—	1,172
			C	—	427741,78	—	1,172
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})6f	2[3/2] ₂	³ D	B	—	420844,55	—	1,079
			C	—	420813,45	—	1,082
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})6f	2[9/2] ₅	³ G	B	—	420462,74	—	1,200
			C	—	420478,78	—	1,200
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})6f	2[9/2] ₄	³ G	B	—	420649,66	—	1,031
			C	—	420758,11	—	1,030
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})6f	2[5/2] ₃	³ D	B	—	421167,51	—	1,191
			C	—	421171,44	—	1,191
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})6f	2[5/2] ₂	¹ D	B	—	421967,22	—	0,888
			C	—	421952,31	—	0,884
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})6f	2[7/2] ₃	¹ F	B	—	421655,18	—	0,954
			C	—	421753,51	—	0,954
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})6f	2[7/2] ₄	³ F	B	—	421879,12	—	1,182
			C	—	421875,87	—	1,182
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})7d	2[1/2] ^o ₀	³ P ^o	B	—	420290,97		
			C	—	420298,37		

Tablo 3.3. (Devamı)

Seviyeler			E (cm ⁻¹)			g-çarpanı	
Konf.	Terim		Bu çalışma			Bu çalışma	
	[K] _J	^{2S+1} L	MCHF+ BP	HFR	MCHF+ BP	HFR	
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})7d	² [1/2] ^o ₁	³ P ^o	D 440610,62	–			
			B –	420746,08	–	1,324	
			C –	420753,02	–	1,322	
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})7d	² [7/2] ^o ₃	³ F ^o	D 440799,59	–	1,358	–	
			B –	421277,84	–	1,059	
			C –	421272,17	–	1,058	
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})7d	² [7/2] ^o ₄	³ F ^o	D 440956,16	–	1,045	–	
			B –	421384,18	–	1,251	
			C –	421401,91	–	1,251	
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})7d	² [3/2] ^o ₂	³ P ^o	D 440875,75	–	1,251	–	
			B –	421506,24	–	1,309	
			C –	421511,40	–	1,307	
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})7d	² [3/2] ^o ₁	¹ P ^o	D 441125,03	–	1,315	–	
			B –	423924,22	–	0,846	
			C –	424070,04	–	0,847	
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})7d	² [5/2] ^o ₂	¹ D ^o	D 441586,44	–	0,817	–	
			B –	422018,08	–	0,977	
			C –	422018,78	–	0,979	
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})7d	² [5/2] ^o ₃	³ D ^o	D 441364,00	–	0,966	–	
			B –	422413,39	–	1,245	
			C –	422415,81	–	1,245	
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})8p	² [1/2] ₁	³ S	D 441441,25	–	1,257	–	
			A 492790,22	–	1,669	–	
			B –	436877,54	–	1,746	
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})8p	² [1/2] ₀	¹ S	C –	437857,99	–	1,759	
			A 515471,88	–			
			B 516252,81	439936,84			
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})8p	² [5/2] ₂	³ D	C –	439857,49			
			A 492898,56	–	1,150		
			B 494491,44	437150,07	1,151	1,137	
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})8p	² [5/2] ₃	³ D	C –	437159,50	–	1,133	
			A 494047,81	–	1,334	–	
			B 495585,12	438172,58	1,334	1,333	
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})8p	² [3/2] ₁	¹ P	C –	438148,92	–	1,333	
			A 494207,50	–	1,180	–	
			B 495720,69	438473,26	1,186	1,103	
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})8p	² [3/2] ₂	³ P	C –	438477,77	–	1,092	
			A 494620,88	–	1,348	–	
			B 496106,72	438868,01	1,348	1,360	
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})5g	² [9/2] ^o ₄	³ H ^o	C –	438857,12	–	1,375	
			A 450220,56	–	0,874	–	
			B –	442412,66	–	0,864	
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})5g	² [9/2] ^o ₅	³ H ^o	C –	442402,57	–	0,874	
			A 450369,84	–	1,078	–	
			B –	442465,35	–	1,071	
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})5g	² [7/2] ^o ₄	³ F ^o	C –	442452,3	–	1,071	
			A 450347,88	–	1,135	–	
			B –	442436,65	–	1,150	
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})5g	² [7/2] ^o ₃	³ G ^o	C –	442425,75	–	1,150	
			A 450695,12	–	0,891	–	

Tablo 3.3. (Devamı)

Seviyeler			E (cm ⁻¹)		g-çarpımı	
Konf.	Terim		Bu çalışma		Bu çalışma	
	[K] _J	^{2S+1} L	MCHF+ BP	HFR	MCHF+ BP	HFR
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})6f	2[5/2] ₃	³ D	B –	442594,73	–	0,907
			C –	442583,78	–	0,907
			B –	446744,65	–	1,194
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})6f	2[5/2] ₂	³ F	C –	447717,11	–	1,194
			B –	447184,59	–	0,879
			C –	447175,89	–	0,879
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})7d	2[5/2] ^o ₃	³ F ^o	B –	447542,56	–	1,114
			C –	447505,33	–	1,114
			D 463062,31	–	1,109	–
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})7d	2[3/2] ^o ₂	³ P ^o	B –	447372,97	–	1,278
			C –	447337,11	–	1,278
			D 462655,31	–	1,289	–
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})7d	2[3/2] ^o ₁	³ D ^o	B –	448383,96	–	0,831
			C –	448427,18	–	0,832
			D 462825,94	–	0,823	–
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})8s	2[1/2] ^o ₀	³ P ^o	A 465327,38	–		
			B –	453065,28		
			C –	453043,88		
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})8s	2[1/2] ^o ₁	³ P ^o	A 465334,53		1,333	–
			B –	453247,22	–	1,330
			C –	453223,94	–	1,329
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})9s	2[3/2] ^o ₂	³ P ^o	A 473456,53	–	1,501	–
			C –	457707,44	–	1,501
			A 473474,34	–	1,167	–
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})9s	2[3/2] ^o ₁	¹ P ^o	C –	457797,13	–	1,179
			A 455075,41	–		
			B –	453856,80		
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})8d	2[1/2] ^o ₁	³ P ^o	C –	453871,41		
			A 455177,28	–	1,387	–
			B –	454102,96	–	1,308
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})8d	2[7/2] ^o ₃	³ F ^o	C –	454112,78	–	1,309
			A 455397,41	–	1,040	–
			B –	454361,44	–	1,058
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})8d	2[7/2] ^o ₄	³ F ^o	C –	454378,43	–	1,057
			A 455344,72	–	1,251	–
			B –	454427,96	–	1,251
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})8d	2[3/2] ^o ₂	³ D ^o	C –	454434,58	–	1,251
			A 476963,91	–	1,090	–
			B –	454500,03	–	1,299
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})8d	2[3/2] ^o ₁	¹ P ^o	C –	454503,74	–	1,302
			A 455649,69	–	0,788	–
			B –	455847,00	–	0,860
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})8d	2[5/2] ^o ₂	¹ D ^o	C –	455882,48	–	0,870
			A 455687,69	–	0,973	–
			B –	454756,10	–	0,983
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})8d	2[5/2] ^o ₃	³ D ^o	C –	454759,57	–	0,981
			A 455703,88	–	1,263	–
			B –	454963,12	–	1,247
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})7f	2[3/2] ₁	³ D	C –	454957,28	–	1,248
			B 488498,16	453211,99	0,499	0,500

Tablo 3.3. (Devamı)

Seviyeler			E (cm ⁻¹)		g-çarpımı		
Konf.	Terim		Bu çalışma		Bu çalışma		
	[K] _J	^{2S+1} L	MCHF+ BP	HFR	MCHF+ BP	HFR	
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})6g	2[5/2] ^o ₂	3F ^o	C	444735,66	453187,34	0,499	0,500
			B	—	450561,51	—	0,666
			C	—	450570,38	—	0,777
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})6g	2[5/2] ^o ₃	3F ^o	B	—	450731,03	—	1,051
			C	—	450747,36	—	1,050
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})6g	2[13/2] ^o ₆	3H ^o	B	—	450786,11	—	1,167
			C	—	450803,85	—	1,177
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})6g	2[13/2] ^o ₅	1H ^o	B	—	450818,36	—	1,016
			C	—	450812,39	—	1,017
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})6g	2[7/2] ^o ₄	3F ^o	B	—	451201,39	—	1,126
			C	—	451204,72	—	1,127
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})6g	2[7/2] ^o ₃	3G ^o	B	—	451343,13	—	0,871
			C	—	451352,09	—	0,871
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})6g	2[9/2] ^o ₄	1G ^o	B	—	451421,12	—	0,960
			C	—	451414,41	—	0,959
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})6g	2[9/2] ^o ₅	3G ^o	B	—	451439,95	—	1,149
			C	—	451435,87	—	1,149
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})7f	2[3/2] ₂	3D	B	488650,16	453560,01	1,112	1,094
			C	445088,34	453539,95	1,112	1,094
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})7f	2[9/2] ₅	3G	B	488825,88	453586,87	1,200	1,200
			C	445251,41	453591,22	1,200	1,200
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})7f	2[9/2] ₄	3G	B	488894,97	453698,12	1,024	1,029
			C	445466,25	453794,98	1,026	1,029
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})7f	2[5/2] ₃	3D	B	467980,97	454040,44	1,186	1,184
			C	445897,41	454023,52	1,188	1,185
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})7f	2[5/2] ₂	1D	B	468389,62	454391,30	0,878	0,855
			C	446351,81	454371,59	0,845	0,857
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})7f	2[7/2] ₃	1F	B	489620,31	454239,89	0,957	0,957
			C	446435,44	454231,19	0,956	0,957
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})7f	2[7/2] ₄	3F	B	489651,31	454337,99	1,188	1,186
			C	446502,28	454330,70	1,185	1,187
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})8p	2[3/2] ₁	3D	A	512639,62	—	0,660	—
			B	514228,78	462957,75	0,661	0,666
			C	—	472845,21	—	1,131
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})8p	2[3/2] ₂	3D	A	514059,41	—	1,168	—
			B	515511,84	464351,03	1,156	1,169
			C	—	474299,08	—	1,177
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})8p	2[1/2] ₀	3P	A	503040,53	463998,93		
			B	503864,06	—		
			C	—	473735,30		
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})8p	2[1/2] ₁	3P	A	514007,41	—	1,490	—
			B	515482,09	464231,28	1,663	1,485
			C	—	474735,51	—	1,524
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})6g	2[9/2] ^o ₄	3H ^o	B	—	476854,95	—	0,862
			C	—	477891,38	—	0,872
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})6g	2[9/2] ^o ₅	3H ^o	B	—	476889,64	—	1,069
			C	—	477923,05	—	1,079
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})6g	2[7/2] ^o ₄	3F ^o	B	—	476872,62	—	1,153
			C	—	477915,84	—	1,153
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})6g	2[7/2] ^o ₃	3G ^o	B	—	477012,08	—	0,912

Tablo 3.3. (Devamı)

Seviyeler			E (cm ⁻¹)		g-çarpımı	
Konf.	Terim		Bu çalışma		Bu çalışma	
	[K] _J	^{2S+1} L	MCHF+ BP	HFR	MCHF+ BP	HFR
			C –	477054,26	–	0,912
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})7g	² [5/2] ₂	³ F ^o	C –	471424,38	–	0,777
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})7g	² [5/2] ₃	³ F ^o	C –	471527,81	–	1,050
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})7g	² [13/2] ₇	³ H ^o	C –	471571,57	–	1,177
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})7g	² [13/2] ₅	¹ H ^o	C –	471715,00	–	1,017
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})7g	² [7/2] ₄	³ G ^o	C –	471812,07	–	1,124
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})7g	² [7/2] ₃	³ G ^o	C –	471914,77	–	0,870
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})7g	² [9/2] ₄	¹ G ^o	C –	471953,50	–	0,971
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})7g	² [9/2] ₅	³ G ^o	C –	471978,54	–	1,148
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})9p	² [1/2] ₁	³ S	C 482030,53	473090,87	1,806	1,251
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})9p	² [1/2] ₀	¹ S	C 482143,88	475308,91	–	–
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})9p	² [5/2] ₂	¹ D	C 482149,53	473470,31	1,089	1,150
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})9p	² [5/2] ₃	³ D	C 482222,94	474119,18	1,334	1,334
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})9p	² [3/2] ₁	¹ P	C 482361,56	474207,42	1,034	1,088
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})9p	² [3/2] ₂	³ P	C 482395,91	474574,28	1,410	1,343
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})10p	² [5/2] ₂	¹ D	C –	479717,43	–	1,027
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})7f	² [7/2] ₃	³ G	B 508869,62	479568,30	0,826	0,826
			C 467987,44	479573,79	0,866	0,847
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})9d	² [1/2] ₀	³ P ^o	A 484443,25	–		
			C –	473731,90		
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})9d	² [1/2] ₁	³ P ^o	A 484607,56	–	1,389	–
			C –	473883,77	–	1,308
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})9d	² [7/2] ₃	¹ F ^o	A 484957,19	–	1,040	–
			C –	474054,98	–	1,059
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})9d	² [7/2] ₄	³ F ^o	A 484869,41	–	1,251	–
			C –	474094,72	–	1,251
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})9d	² [3/2] ₂	³ D ^o	A 485035,69	–	1,312	–
			C –	474133,79	–	1,297
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})9d	² [3/2] ₁	¹ P ^o	A 485375,06	–	0,790	–
			C –	474902,48	–	0,870
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})9d	² [5/2] ₂	¹ D ^o	A 485437,22	–	0,972	–
			C –	474295,91	–	0,984
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})9d	² [5/2] ₃	³ D ^o	A 485462,62	–	1,262	–
			C –	474429,18	–	1,247
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})7f	² [7/2] ₄	³ G	B 508934,50	479744,48	1,087	1,086
			C 468138,81	479749,53	1,089	1,087
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})7f	² [5/2] ₃	³ D	B 489260,38	479665,42	1,197	1,200
			C 508915,06	479710,15	1,156	1,193
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})7f	² [5/2] ₂	³ F	B 489370,41	479945,10	0,844	0,883
			C 509015,59	480094,22	0,875	1,023
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})10s	² [3/2] ₂	³ P ^o	C –	477072,79	–	1,501
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})10s	² [3/2] ₁	¹ P ^o	C –	477178,75	–	1,179
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})8f	² [3/2] ₁	³ D	C 472404,62	473279,43	0,499	0,499
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})8f	² [3/2] ₂	³ D	C 472654,06	473431,89	1,112	1,087
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})8f	² [9/2] ₅	³ G	C 472752,00	473491,27	1,200	1,200
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})8f	² [9/2] ₄	³ G	C 472886,53	473547,19	1,025	1,032
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})8f	² [5/2] ₃	³ D	C 473247,69	473781,32	1,184	1,182
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})8f	² [5/2] ₂	¹ D	C 473431,22	473989,59	0,840	0,870
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})8f	² [7/2] ₃	¹ F	C 473539,47	473851,23	0,958	0,959
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})8f	² [7/2] ₄	³ F	C 473567,84	473928,57	1,188	1,184

Tablo 3.3. (Devamı)

Seviyeler			E (cm ⁻¹)		g-çarpımı	
Konf.	Terim		Bu çalışma		Bu çalışma	
	[K] _J	^{2S+1} L	MCHF+ BP	HFR	MCHF+ BP	HFR
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})9f	² [3/2] ₁	³ D	C 507386,09	487245,07	0,500	0,500
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})8d	² [5/2] ₂	³ F ^o	A 476961,62	—	0,961	—
			B —	480130,02	—	0,768
			C —	480159,50	—	0,778
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})8d	² [5/2] ₃	³ F ^o	A 477002,56	—	1,113	—
			B —	480466,16	—	1,113
			C —	480478,85	—	1,113
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})8d	² [3/2] ₂	³ P ^o	A 455441,44	—	1,308	—
			B —	480370,79	—	1,284
			C —	480388,51	—	1,284
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})8d	² [3/2] ₁	³ D ^o	A 477110,56	—	0,824	—
			B —	480919,22	—	0,831
			C —	480970,87	—	0,832
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})10d	² [1/2] ₀	³ P ^o	C —	487734,88	—	—
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})10d	² [1/2] ₁	³ P ^o	C —	487735,77	—	1,304
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})10d	² [7/2] ₃	¹ F ^o	C —	487837,56	—	1,057
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})10d	² [7/2] ₄	³ F ^o	C —	487872,27	—	1,251
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})10d	² [3/2] ₂	³ D ^o	C —	487899,79	—	1,295
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})10d	² [3/2] ₁	¹ P ^o	C —	487409,48	—	0,874
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})10d	² [5/2] ₂	¹ D ^o	C —	487004,76	—	0,985
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})10d	² [5/2] ₃	³ D ^o	C —	487087,93	—	1,250
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})9f	² [3/2] ₂	³ D	C 507874,97	487377,14	1,117	1,090
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})9f	² [9/2] ₅	³ G	C 508157,78	487405,73	1,200	1,200
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})9f	² [9/2] ₄	³ G	C 508477,06	487447,09	1,026	1,030
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})9f	² [5/2] ₃	³ D	C 509130,78	487575,76	1,196	1,181
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})9f	² [5/2] ₂	¹ D	C 509776,03	487737,79	0,850	0,857
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})9f	² [7/2] ₃	¹ F	C 510001,59	487753,71	0,950	0,970
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})9f	² [7/2] ₄	³ F	C 510094,03	487798,71	1,181	1,187
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})9s	² [1/2] ₀	³ P ^o	A 495003,97	—	—	—
			C —	483451,98	—	—
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})9s	² [1/2] ₁	³ P ^o	A 495011,19	—	1,333	—
			C —	483547,18	—	1,332
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})9p	² [3/2] ₁	³ D	C 504492,72	489344,32	0,624	0,773
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})9p	² [3/2] ₂	³ D	C 504604,50	490177,81	1,167	1,178
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})9p	² [1/2] ₀	³ P	C 504585,16	489923,57	—	—
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})9p	² [1/2] ₁	³ P	C 504629,84	490102,49	1,536	1,494
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})10p	² [5/2] ₃	³ D	C —	480357,48	—	1,321
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})10p	² [1/2] ₁	³ S	C —	479752,79	—	1,732
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})10p	² [1/2] ₀	¹ S	C —	480903,20	—	—
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})10p	² [3/2] ₁	¹ P	C —	480372,05	—	1,107
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})10p	² [3/2] ₂	³ P	C —	480529,26	—	1,337
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})8f	² [7/2] ₃	³ G	C 495354,31	499433,75	0,831	0,824
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})7g	² [9/2] ₄	³ H ^o	C —	497593,87	—	0,871
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})7g	² [9/2] ₅	³ H ^o	C —	497727,59	—	1,078
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})7g	² [7/2] ₄	³ F ^o	C —	497597,83	—	1,155
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})7g	² [7/2] ₃	¹ F ^o	C —	497797,24	—	0,914
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})8f	² [7/2] ₄	³ G	C 495446,00	499541,83	1,086	1,085
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})8f	² [5/2] ₃	³ D	C 495352,03	499507,40	1,192	1,202
5p ⁵ (² P ^o _{1/2})8f	² [5/2] ₂	³ F	C 495586,59	499772,01	0,879	0,887
5p ⁵ (² P ^o _{3/2})10f	² [3/2] ₁	³ D	C —	495183,28	—	0,499

Tablo 3.3. (Devamı)

Seviyeler			E (cm ⁻¹)		g-çarpımı	
Konf.	Terim		Bu çalışma		Bu çalışma	
			MCHF+ BP	HFR	MCHF+ BP	HFR
5p ⁵ (² P _{3/2} ^o)10f	² [3/2] ₂	³ D	C –	495250,89	–	1,084
5p ⁵ (² P _{3/2} ^o)10f	² [9/2] ₅	³ G	C –	495272,82	–	1,200
5p ⁵ (² P _{3/2} ^o)10f	² [9/2] ₄	¹ G	C –	495297,51	–	1,032
5p ⁵ (² P _{3/2} ^o)10f	² [5/2] ₃	³ F	C –	495370,51	–	1,180
5p ⁵ (² P _{3/2} ^o)10f	² [5/2] ₂	¹ D	C –	495511,00	–	0,872
5p ⁵ (² P _{3/2} ^o)10f	² [7/2] ₃	¹ F	C –	495437,97	–	0,970
5p ⁵ (² P _{3/2} ^o)10f	² [7/2] ₄	³ F	C –	495474,01	–	1,184
5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)9d	² [5/2] ₂	³ F ^o	A 506557,06	–	0,759	–
		C –	499902,21	–	0,777	
5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)10s	² [1/2] ₀	³ P ^o	C –	501922,81	–	
5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)10p	² [3/2] ₁	³ D	C –	505703,19	–	0,775
5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)10p	² [3/2] ₂	³ D	C –	507253,21	–	1,178
5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)10p	² [1/2] ₀	³ P	C –	507097,79	–	
5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)10p	² [1/2] ₁	³ P	C –	507205,80	–	1,497
5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)10s	² [1/2] ₁	³ P ^o	C –	501981,22	–	1,333
5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)9d	² [5/2] ₃	³ F ^o	A 506620,97	–	1,114	–
		C –	500117,85	–	1,112	
5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)9d	² [3/2] ₂	³ P ^o	A 506572,09	–	1,290	–
		C –	500051,75	–	1,287	
5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)9d	² [3/2] ₁	³ D ^o	A 506805,44	–	0,819	–
		C –	500350,76	–	0,831	
5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)10d	² [5/2] ₂	³ F ^o	C –	512789,31	–	0,777
5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)10d	² [5/2] ₃	³ F ^o	C –	512823,73	–	1,112
5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)10d	² [3/2] ₂	³ P ^o	C –	512787,02	–	1,287
5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)10d	² [3/2] ₁	³ D ^o	C –	512983,98	–	0,832
5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)9f	² [7/2] ₃	³ G	C 531183,69	512322,42	0,833	0,824
5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)9f	² [7/2] ₄	³ G	C 531183,69	512395,99	1,091	1,084
5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)9f	² [5/2] ₃	³ D	C 531281,31	512372,58	1,181	1,203
5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)9f	² [5/2] ₂	³ F	C 531787,12	512480,80	0,864	0,887
5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)10f	² [7/2] ₃	³ G	C –	521177,13	–	0,824
5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)10f	² [7/2] ₄	³ G	C –	521229,37	–	1,084
5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)10f	² [5/2] ₃	³ D	C –	521204,09	–	1,203
5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)10f	² [5/2] ₂	³ F	C –	521287,89	–	0,887

3.2. Ce V'in Elektrik Dipol Geçişleri için Dalga Boyları, Ağırlıklı Salınıcı Şiddetleri ve Geçiş Olasılıkları

Ce V'in elektrik dipol geçişlerinin ışıma parametreleri MCHF ve HFR yöntemleriyle hesaplandı. 5p⁶ – 5p⁵nd (n = 5, 6), 5p⁶ – 5p⁵6s, 5p⁵nd (n = 5, 6) – 5p⁵4f, 5p⁵nd (n = 5, 6) – 5p⁵6p, 5p⁵6s – 5p⁵4f ve 5p⁵6s – 5p⁵6p geçişlerinin λ (Å) dalga boyları, log (gf) logaritmik ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve gA_{ki} (s⁻¹) ağırlıklı geçiş olasılıkları Tablo 3.4.'te sunulmaktadır. Tabloda sadece tek pariteli seviyeleri “^o” indisiyle belirtilmektedir ve geçiş olasılıkları için 10'un kuvvetleri parantez içinde

yazılmaktadır. Ce V'in sadece dalga boyu verileri Readfors ve Reader'in sundukları gözlem sonuçlarıyla [4] karşılaştırılmaktadır. Diğer ışıma parametreleri için karşılaştırma verileri mevcut değildir ve ilk kez bu çalışma ile sunulmuştur [7].

MCHF+BP atomik yapı paketiyle [8] Tablo 3.1.'de verilen konfigürasyon setlerindeki tek ve çift pariteli seviyeler arasında yapılan A, B, C ve D geçişleri için sırasıyla 3614, 5622, 5622 ve 8618 mümkün E1 geçişleri elde edildi. Tablo 3.3.'te hesaplanan geçişler için farklı konfigürasyon setlerine ait hesaplamaları A, B, C ve D harfleriyle verilmektedir. Ağırlıklı salınıcı şiddetleri logaritmik ağırlıklı salınıcı şiddetlerine ve geçiş olasılıkları da ağırlıklı geçiş olasılıklarına çevrildi. Sadece dalga boyu verileri için karşılaştırma değeri olduğundan A, B ve D'nin dalga boyu sonuçları birçok geçiş için karşılaştırma değerleri ile uyumlu olduğu görülmektedir. $5p^56p - 5p^55d$ ve bazı $5p^55d - 5p^54f$ geçişlerinde C hesabı iyi uyumlu olmasına rağmen diğer geçişlerde uyumlu değildir. $5p^56p \ ^2[1/2]_0 - 5p^55d \ ^2[3/2]_1$ geçişinde B hesabı, $5p^56p \ ^2[1/2]_0 - 5p^56s \ ^2[1/2]_1$ geçişinde A, B ve D hesabı uyumsuzdur. Diğer ışıma parametrelerinde karşılaştırma değeri olmadığından HFR ile karşılaştırıldığında bazı geçişler hariç uyumlu olduğu görülmektedir. Öz ve değerlik elektronları arasındaki karşılıklı etkileşmenin de hesaba alınarak yapılan D hesabında bazı geçişler için iyileştirme olmuştur.

HFR program paketiyle [9] Tablo 3.1.'de verilen konfigürasyon setlerindeki tek ve çift pariteli seviyeler arasında yapılan A, B ve C hesapları için sırasıyla 373, 3521 ve 9206 tane mümkün E1 geçişleri elde edildi ve bu geçişlerin bir kısmının dalga boyları, logaritmik ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve ağırlıklı geçiş olasılıkları A, B ve C harfleriyle Tablo 3.4.'te verilmektedir. A, B ve C hesaplarında en küçük kareler yöntemiyle elde edilen enerji değerleri deneysel verilere uydurma yapılarak elde edilen parametrelerle geçişler tekrar hesaplandı. Dalga boyu verileri Readfors ve Reader'in sundukları gözlem sonuçlarıyla [4] karşılaştırıldığında tüm hesaplamalar için elde edilen sonuçların uyumlu olduğu görülmektedir.

Tablo 3.4. Ce V'in elektrik dipol (E1) geçişleri için λ dalga boyları (Å), $\log(gf)$ logaritmik ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve gA_{ki} ağırlıklı geçiş olasılıkları (s^{-1})

Geçişler				λ (Å)		Diğer çalışmalar	$\log(gf)$		gA_{ki} (s ⁻¹)		
Üst seviye	Alt seviye	Bu çalışma		Bu çalışma			Bu çalışma				
		MCHF+BP	HFR	MCHF+BP	HFR		MCHF+BP	HFR			
5p ⁵ (² P _{3/2} ^o)5d	² [1/2] ₀ ^o	5p ⁵ (² P _{3/2} ^o)4f	² [3/2] ₁	A	1568,37	1407,709	1409,195 ^a	-1,252	-1,107	1,52(8)	2,63(8)
				B	1562,32	1410,968	-1,243	-1,109	1,56(8)	2,61(8)	
				C	1525,94	1412,931	-0,452	-1,109	3,37(8)	2,60(8)	
				D	1561,39		-1,243		1,56(8)		
5p ⁵ (² P _{3/2} ^o)6p	² [1/2] ₁	5p ⁵ (² P _{3/2} ^o)5d	² [1/2] ₀ ^o	A	434,09	916,636	917,980 ^a	-3,320	-0,663	1,69(7)	1,73(9)
				B	433,26	919,481	-3,415	-0,573	1,37(7)	2,11(9)	
				C	907,69	919,077	-4,504	-0,567	2,54(5)	2,14(9)	
				D	406,98		-1,818		6,13(8)		
5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)6p	² [3/2] ₁	5p ⁵ (² P _{3/2} ^o)5d	² [1/2] ₀ ^o	A	398,54	740,439	—	-1,571	-2,277	1,13(9)	6,42(7)
				B	398,15	739,875	-1,670	-2,026	9,00(8)	1,15(8)	
				C	736,62	739,533	-2,710	-2,085	2,40(7)	1,00(8)	
				D	371,13		-0,785		7,95(9)		
5p ⁵ (² P _{3/2} ^o)5d	² [1/2] ₁ ^o	5p ⁶	¹ S ₀	A	566,16	552,450	552,134 ^a	-2,551	-2,662	5,85(7)	4,77(7)
				B	560,78	552,383	-2,503	-2,445	6,66(7)	7,85(7)	
				C	515,92	552,548	-2,503	-2,413	7,87(7)	8,43(7)	
				D	560,62		-2,487		6,92(7)		
5p ⁵ (² P _{3/2} ^o)5d	² [1/2] ₁ ^o	5p ⁵ (² P _{3/2} ^o)4f	² [3/2] ₁	A	1500,07	1355,935	1356,192 ^a	-1,275	-1,118	1,57(8)	2,77(8)
				B	1492,64	1358,490	-1,266	-1,116	1,62(8)	2,77(8)	
				C	1598,84	1360,271	-0,514	-1,117	7,99(8)	2,75(8)	
				D	1491,76		-1,267		1,62(8)		
5p ⁵ (² P _{3/2} ^o)5d	² [1/2] ₁ ^o	5p ⁵ (² P _{3/2} ^o)4f	² [3/2] ₂	A	1580,45	1415,886	1414,959 ^a	-0,938	-0,799	3,08(8)	5,29(8)
				B	1570,53	1418,565	-0,928	-0,800	3,19(8)	5,25(8)	
				C	1528,92	1420,296	-0,132		1,26(9)	5,23(8)	
				D	1569,66		-0,928		3,19(8)		
5p ⁵ (² P _{3/2} ^o)5d	² [1/2] ₁ ^o	5p ⁵ (² P _{3/2} ^o)4f	² [5/2] ₂	A	2108,54	1774,029	1767,382 ^a	-3,556	-3,318	4,17(5)	1,02(6)
				B	2076,65	1774,157	-3,800	-3,402	2,45(5)	8,40(5)	
				C	876,13	1775,630	-3,761	-3,441	9,04(5)	7,67(5)	
				D	2075,33		-3,788		2,52(5)		

Tablo 3.4. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)		$\log(gf)$		gA_{ki} (s ⁻¹)			
Üst seviye	Alt seviye	Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma		Bu çalışma				
		MCHF+BP	HFR		MCHF+BP	HFR	MCHF+BP	HFR			
$5p^5(^2P^o_{3/2})5d$	$^2[3/2]^o_2$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[3/2]_1$	A	1379,42	1264,544	1264,429 ^a	-2,190	-2,004	2,26(7)	4,13(7)
				B	1369,57	1265,951	-2,182	-2,004	2,34(7)	4,13(7)	
				C	1769,13	1267,384	-1,505	-2,006	1,11(8)	4,10(7)	
				D	1369,05		-2,165		2,44(7)		
$5p^5(^2P^o_{3/2})5d$	$^2[3/2]^o_2$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[3/2]_2$	A	1447,10	1316,531	1315,354 ^a	-1,171	-0,990	2,15(8)	3,94(8)
				B	1434,86	1317,964	-1,162	-0,983	2,23(8)	4,00(8)	
				C	1683,91	1319,335	-0,444	-0,984	8,47(8)	3,97(8)	
				D	1434,38		-1,161		2,24(8)		
$5p^5(^2P^o_{3/2})5d$	$^2[3/2]^o_2$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[5/2]_3$	A	1568,46	1403,699	1401,064 ^a	-0,678	-0,546	5,70(8)	9,63(8)
				B	1550,50	1404,721	-0,669	-0,546	5,95(8)	9,61(8)	
				C	1570,98	1405,917	0,109	-0,546	2,48(9)	9,60(8)	
				D	1550,15		-0,669		5,95(8)		
$5p^5(^2P^o_{3/2})5d$	$^2[7/2]^o_4$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[9/2]_5$	A	1504,38	1347,216	1362,125 ^a	-0,339	-0,192	1,35(9)	2,36(9)
				B	1492,69	1355,132	-0,331	-0,192	1,40(9)	2,33(9)	
				C	1639,01	1356,250	0,424	-0,193	5,39(9)	2,33(9)	
				D	1546,02		-0,348		1,25(9)		
$5p^5(^2P^o_{3/2})5d$	$^2[7/2]^o_4$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[9/2]_4$	A	1496,28	1350,990	1360,331 ^a	-1,630	-1,422	6,98(7)	1,38(8)
				B	1479,35	1356,626	-1,633	-1,427	7,09(7)	1,36(8)	
				C	1555,46	1357,962	-0,715	-1,427	5,32(8)	1,35(8)	
				D	1531,66		-1,654		6,30(7)		
$5p^5(^2P^o_{3/2})5d$	$^2[7/2]^o_4$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[5/2]_3$	A	1533,94	1379,273	1385,346 ^a	-2,267	-2,393	1,53(7)	1,42(7)
				B	1512,50	1386,792	-2,277	-2,526	1,54(7)	1,03(7)	
				C	1612,01	1388,001	-1,557	-2,525	9,14(7)	1,03(7)	
				D	1566,41		-2,204		1,70(7)		
$5p^5(^2P^o_{3/2})5d$	$^2[7/2]^o_4$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[7/2]_3$	A	1632,66	1436,241	1444,901 ^a	-3,26	-3,028	1,37(6)	3,03(6)
				B	1606,44	1442,195	-3,246	-2,990	1,47(6)	3,28(6)	
				C	1451,23	1443,244	-2,054	-2,991	3,59(7)	3,27(6)	
				D	1668,32		-3,329		1,12(6)		

Tablo 3.4. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)		$\log(gf)$		gA_{ki} (s ⁻¹)		
Üst seviye	Alt seviye			Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma		Bu çalışma	
				MCHF+BP	HFR		MCHF+BP	HFR	MCHF+BP	HFR
$5p^5(^2P^o_{3/2})5d$	$^2[7/2]^o_4$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[7/2]_4$	A	1763,41	1532,497 ^a	-1,550	-1,383	6,05(7)	1,18(8)
				B	1721,95	1532,447	-1,521	-1,378	6,78(7)	1,19(8)
				C	1363,24	1533,259	-0,747	-1,378	6,43(8)	1,19(8)
				D	1793,22		-1,551		5,84(7)	
$5p^5(^2P^o_{3/2})5d$	$^2[7/2]^o_4$	$5p^5(^2P^o_{1/2})4f$	$^2[7/2]_4$	A	2495,73	2178,222 ^a	-2,609	-2,759	2,63(6)	2,48(6)
				B	2408,21	2178,201	-2,666	-2,776	2,48(6)	2,35(6)
				C	1091,15	2180,360	-1,573	-2,782	1,50(8)	2,32(6)
				D	2550,06		-2,729		1,91(6)	
$5p^5(^2P^o_{3/2})5d$	$^2[7/2]^o_3$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[9/2]_4$	A	1456,58	1341,640 ^a	-0,466	-0,325	1,08(9)	1,76(9)
				B	1442,75	1342,532	-0,462	-0,327	1,11(9)	1,75(9)
				C	1598,09	1343,095	0,306	-0,327	4,11(9)	1,74(9)
				D	1484,55		-0,481		1,00(9)	
$5p^5(^2P^o_{3/2})5d$	$^2[7/2]^o_3$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[5/2]_3$	A	1492,24	1365,964 ^a	-1,897	-1,556	3,80(7)	9,91(7)
				B	1235,42	1372,068	-1,236	-1,515	2,54(8)	1,08(8)
				C	1657,84	1372,473	-1,498	-1,517	7,71(7)	1,08(8)
				D	1517,18		-1,933		3,38(7)	
$5p^5(^2P^o_{3/2})5d$	$^2[7/2]^o_3$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[7/2]_3$	A	1585,51	1423,824 ^a	-1,409	-1,286	1,03(8)	1,70(8)
				B	1297,39	1426,277	-3,005	-1,297	3,92(6)	1,66(8)
				C	1488,27	1426,462	-0,522	-1,296	9,04(8)	1,66(8)
				D	1612,58		-1,418		9,80(7)	
$5p^5(^2P^o_{3/2})5d$	$^2[7/2]^o_3$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[7/2]_4$	A	1708,52	1508,812 ^a	-2,035	-2,441	2,11(7)	1,06(7)
				B	1672,56	1514,487	-1,954	-2,322	2,65(7)	1,39(7)
				C	1395,87	1514,332	-5,573	-2,339	7,11(3)	1,33(7)
				D	1728,99		-1,945		2,53(7)	
$5p^5(^2P^o_{3/2})5d$	$^2[7/2]^o_3$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[5/2]_2$	A	1769,96	1568,225 ^a	-2,949	-2,737	2,40(6)	4,94(6)
				B	1739,29	1576,296	-2,939	-2,715	2,54(6)	5,17(6)
				C	954,40	1576,312	-4,382	-2,717	4,26(5)	5,15(6)
				D	1799,19		-3,006		2,03(6)	

Geçişler				λ (Å)		Diğer çalışmalar	$\log(gf)$		gA_{ki} (s ⁻¹)	
Üst seviye	Alt seviye			Bu çalışma			Bu çalışma		Bu çalışma	
				MCHF+BP	HFR		MCHF+BP	HFR	MCHF+BP	HFR
$5p^5(^2P^o_{3/2})5d$	$^2[7/2]^o_3$	$5p^5(^2P^o_{1/2})4f$	$^2[7/2]_3$	A	2179,11	1955,172 ^a	-2,915	-3,134	1,71(6)	1,28(6)
				B	1660,56		-4,519	-3,190	7,32(4)	1,12(6)
				C	—			-3,203	7,52(5)	1,08(6)
				D	2213,96		-3,257	—		
$5p^5(^2P^o_{3/2})5d$	$^2[7/2]^o_3$	$5p^5(^2P^o_{1/2})4f$	$^2[5/2]_3$	A	2398,81	2095,999 ^a	-2,498	-2,574	3,68(6)	4,04(6)
				B	1774,89		-2,212	-2,608	1,30(7)	3,71(6)
				C	1133,45		-1,245	-2,609	2,95(8)	3,70(6)
				D	2421,51		-2,489		3,68(6)	
$5p^5(^2P^o_{3/2})5d$	$^2[7/2]^o_3$	$5p^5(^2P^o_{1/2})4f$	$^2[7/2]_4$	A	2387,16	2130,691 ^a	-2,713	-3,104	2,26(6)	1,15(6)
				B	2312,66		-2,529	-2,922	3,68(6)	1,74(6)
				C	1111,96		-2,102	-2,902	3,32(7)	1,82(6)
				D	2422,05		-2,348		5,10(6)	
$5p^5(^2P^o_{3/2})5d$	$^2[5/2]^o_2$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[3/2]_2$	A	1299,20	1234,403 ^a	-2,456	-2,388	1,38(7)	1,81(7)
				B	1287,46		-2,429	-2,316	1,50(7)	2,13(7)
				C	1945,29		-1,900	-2,295	2,22(7)	2,23(7)
				D	1311,61		-2,659		8,51(6)	
$5p^5(^2P^o_{3/2})5d$	$^2[5/2]^o_2$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[5/2]_3$	A	1396,18	1309,589 ^a	-3,493	-2,600	1,10(6)	9,87(6)
				B	1379,79		-3,567	-2,761	9,50(5)	6,79(6)
				C	1796,12		-1,238	-2,823	8,53(7)	5,89(6)
				D	1407,75		-3,196		2,14(6)	
$5p^5(^2P^o_{3/2})5d$	$^2[5/2]^o_2$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[7/2]_3$	A	1477,50	1362,668 ^a	-0,590	-0,459	7,85(8)	1,27(9)
				B	1457,55		-0,583	-0,454	8,19(8)	1,28(9)
				C	1598,77		0,152	-0,454	2,65(9)	
				D	1489,52		-0,599		7,58(8)	1,28(9)
$5p^5(^2P^o_{3/2})5d$	$^2[5/2]^o_2$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[5/2]_2$	A	1636,42	1494,356 ^a	-1,524	-1,348	7,45(7)	1,35(8)
				B	1609,31		-1,512	-1,373	7,91(7)	1,28(8)
				C	998,66		-2,540	-1,373	1,93(7)	1,28(8)
				D	1647,34		-1,563		6,72(7)	

Tablo 3.4. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)		Diğer çalışmalar	$\log(gf)$		gA_{ki} (s ⁻¹)		
Üst seviye	Alt seviye	Bu çalışma		Bu çalışma	Bu çalışma		MCHF+BP	HFR	MCHF+BP	HFR	
		MCHF+BP	HFR								
$5p^5(^2P^o_{3/2})5d$	$^2[5/2]^o_2$	$5p^5(^2P^o_{1/2})4f$	$^2[7/2]_3$	A	1980,7	1827,976	1841,673 ^a	-3,808	-5,062	2,65(5)	1,73(4)
				B	1932,33	1830,428	-2,989	-4,912	1,83(6)	2,44(4)	
				C	1988,98	1830,009	-2,423	-4,541	6,36(6)	5,74(4)	
$5p^5(^2P^o_{3/2})5d$	$^2[5/2]^o_3$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[3/2]_2$	A	1173,27	1140,539	1141,824 ^a	-2,304	-2,185	2,40(7)	3,35(7)
				B	1160,87	1141,340	-2,300	-2,167	2,48(7)	3,48(7)	
				C	—	1141,613	—	-2,167	—	3,48(7)	
$5p^5(^2P^o_{3/2})5d$	$^2[5/2]^o_3$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[9/2]_4$	D	1161,91			-2,299		2,48(7)	
				A	1226,60	1183,729	1186,65 ^a	-1,625	-1,784	1,05(8)	7,83(7)
				B	1213,21	1182,962	-1,580	-1,755	1,19(8)	8,37(7)	
$5p^5(^2P^o_{3/2})5d$	$^2[5/2]^o_3$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[5/2]_3$	C	2021,14	1183,134		-1,958	-1,765	1,40(7)	8,18(7)
				D	1214,97		-1,595		1,15(8)		
				A	1251,80	1205,386	1205,859 ^a	-1,244	-1,106	2,43(8)	3,60(8)
$5p^5(^2P^o_{3/2})5d$	$^2[5/2]^o_3$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[5/2]_3$	B	1235,42	1205,833		-1,236	-1,093	2,54(8)	3,71(8)
				C	1331,34	1205,872	-1,245	-1,092	2,14(8)	3,71(8)	
				D	1236,74		-1,239		2,52(8)		
$5p^5(^2P^o_{3/2})5d$	$^2[5/2]^o_3$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[7/2]_3$	A	1316,77	1248,670	1250,718 ^a	-3,058	-2,590	3,37(6)	1,10(7)
				B	1297,39	1247,503	-3,005	-2,488	3,92(6)	1,39(7)	
				C	1849,17	1247,352	-3,567	-2,492	5,29(5)	1,38(7)	
$5p^5(^2P^o_{3/2})5d$	$^2[5/2]^o_3$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[7/2]_4$	D	1299,40			-3,025		3,73(6)	
				A	1400,52	1316,920	1315,826 ^a	-0,468	-0,325	1,16(9)	1,82(9)
				B	1371,70	1314,467	-0,464	-0,324	1,22(9)	1,83(9)	
$5p^5(^2P^o_{3/2})5d$	$^2[5/2]^o_3$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[7/2]_4$	C	—	1314,025		—	-0,323	—	1,83(9)
				D	1373,94		-0,466		1,21(9)		
				A	1441,54	1362,034	1360,786 ^a	-4,956	-4,441	3,55(4)	1,30(5)
$5p^5(^2P^o_{3/2})5d$	$^2[5/2]^o_3$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[5/2]_2$	B	1416,27	1360,779		-4,847	-4,323	4,74(4)	1,71(5)
				C	1090,94	1360,441	-2,643	-4,345	1,79(7)	1,63(5)	
				D	1417,90		-5,029		3,10(4)		
$5p^5(^2P^o_{3/2})5d$	$^2[5/2]^o_3$	$5p^5(^2P^o_{1/2})4f$	$^2[5/2]_3$	A	1833,30	1739,132	1741,233 ^a	-2,184	-2,335	1,30(7)	1,02(7)
				B	1774,89	1737,659	-2,212	-2,375	1,30(7)	9,32(6)	

Tablo 3.4. (Devamı)											
Geçişler				λ (Å)		Diğer çalışmalar	$\log(gf)$		gA_{ki} (s ⁻¹)		
Üst seviye	Alt seviye	Bu çalışma		Bu çalışma	Bu çalışma		Bu çalışma				
		MCHF+BP	HFR		MCHF+BP		HFR	MCHF+BP	HFR		
5p ⁵ (² P _{3/2} ^o)5d	² [5/2] ₃	5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)4f	² [7/2] ₄	C	1778,40	1736,937		-2,203	-2,375	1,32(7)	9,33(6)
				A	1826,49	1764,827	1765,111 ^a	-1,860	-2,305	2,76(7)	1,06(7)
				B	1774,92	1762,712		-1,907	-2,247	2,62(7)	1,22(7)
				C	1301,78	1762,255		-1,474	-2,266	1,03(8)	1,16(7)
				D	1778,70			-1,942		2,41(7)	
5p ⁵ (² P _{3/2} ^o)5d	² [3/2] ₁	5p ⁶	¹ S ₀	A	483,96	484,262	482,963 ^a	-0,834	-0,517	9,75(9)	8,65(9)
				B	479,27	484,395		-0,788	-0,432	1,10(10)	1,05(10)
				C	446,11	484,363		-0,788	-0,419	1,27(10)	1,08(10)
				D	479,17			-0,795		1,09(10)	
				A	1291,79	1221,647	1211,818 ^a	-0,960	-0,749	1,02(9)	7,96(8)
5p ⁵ (² P _{3/2} ^o)5d	² [3/2] ₁	5p ⁵ (² P _{3/2} ^o)4f	² [5/2] ₂	B	1274,39	1222,879		-0,929	-0,740	1,13(9)	8,12(8)
				C	1193,26	1222,570		-1,115	-0,737	5,03(8)	8,17(8)
				A	—	1585,387	1575,641 ^a	—	-1,213	—	1,63(8)
5p ⁵ (² P _{3/2} ^o)5d	² [3/2] ₁	5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)4f	² [5/2] ₂	B	1597,39	1587,577		-1,185	-1,214	3,99(8)	1,62(8)
				C	1692,50	1587,400		-0,057	-1,219	2,86(9)	1,60(8)
				A	1299,20	992,368	—	-2,456	-2,633	1,38(7)	1,58(7)
				B	1287,46	995,193		-2,429	-2,598	1,50(7)	1,70(7)
				C	1945,29	995,444		-1,900	-2,592	2,22(7)	1,72(7)
5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)5d	² [5/2] ₂	5p ⁵ (² P _{3/2} ^o)4f	² [3/2] ₂	D	991,64			-2,157		4,73(7)	
				A	1119,68	1041,101	—	-2,882	-2,932	6,98(6)	7,20(6)
				B	1379,79	1043,875		-3,567	-2,953	9,50(5)	6,82(6)
				C	2632,29	1043,952		-2,131	-2,957	5,09(6)	6,75(6)
				D	1045,63			-3,724		1,15(6)	
5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)5d	² [5/2] ₂	5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)4f	² [7/2] ₃	A	1466,85	1351,630	1358,358 ^a	-0,549	-0,420	8,77(8)	1,39(9)
				B	1457,55	1354,653		-0,583	-0,417	8,19(8)	-0,417
				C	1598,77	1354,666		0,152	-0,417	2,65(9)	-0,417
				A	—	960,991	957,514 ^a	—	-0,003	—	7,18(9)
5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)6p	² [1/2] ₁	5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)5d	² [3/2] ₂	B	—	960,453		—	0,019	—	7,55(9)
				C	—	960,521		—	0,020	—	7,57(9)

Tablo 3.4. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)		Diğer çalışmalar	$\log(gf)$		gA_{ki} (s ⁻¹)		
Üst seviye	Alt seviye	Bu çalışma		Bu çalışma	Bu çalışma		Bu çalışma	Bu çalışma			
		MCHF+BP	HFR						MCHF+BP	HFR	MCHF+BP
$5p^5(^2P^o_{1/2})5d$	$^2[3/2]^o_2$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[3/2]_1$	A	967,56	923,730	—	-2,923	-2,972	8,51(6)	8,34(6)
				B	960,30	924,396	-2,914	-2,917	8,81(6)	9,45(6)	
				C	3934,90	924,784	-2,720	-2,913	1,37(6)	9,53(6)	
				D	959,98		-2,921		8,69(6)		
$5p^5(^2P^o_{1/2})5d$	$^2[3/2]^o_2$	$5p^5(^2P^o_{1/2})4f$	$^2[5/2]_3$	A	1443,48	1334,113	1331,550 ^a	-0,553	-0,422	8,97(8)	1,42(9)
				B	1408,23	1333,445	-0,545	-0,414	9,59(8)	1,45(9)	
				C	1654,46	1333,269	0,181	-0,414	2,64(9)	1,45(9)	
				D	1408,29		-0,547		9,54(8)		
$5p^5(^2P^o_{1/2})5d$	$^2[3/2]^o_2$	$5p^5(^2P^o_{1/2})4f$	$^2[5/2]_2$	A	1471,05	1387,055	—	-1,684	-1,641	6,38(7)	7,93(7)
				B	1440,68	1386,055	-1,682	-1,660	6,69(7)	7,60(7)	
				C	1912,96	1386,236	-1,842	-1,659	2,63(7)	7,61(7)	
				D	1440,23		-1,685		6,64(7)		
$5p^5(^2P^o_{1/2})5d$	$^2[5/2]^o_3$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[5/2]_3$	A	1030,23	968,745	—	-2,027	-2,215	5,91(7)	4,33(7)
				B	1019,27	970,404	-2,035	-2,196	5,93(7)	4,51(7)	
				C	3327,84	970,873	-1,795	-2,191	9,64(6)	4,56(7)	
				D	1025,92		-1,963		6,90(7)		
$5p^5(^2P^o_{1/2})5d$	$^2[5/2]^o_3$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[7/2]_4$	A	1128,89	1039,501	—	-1,637	-1,992	1,21(8)	6,29(7)
				B	1110,28	1039,543	-1,708	-2,024	1,06(8)	5,84(7)	
				C	2416,98	1039,775	-1,569	-2,043	2,39(7)	5,59(7)	
				D	1118,59		-1,785		8,75(7)		
$5p^5(^2P^o_{1/2})5d$	$^2[5/2]^o_3$	$5p^5(^2P^o_{1/2})4f$	$^2[7/2]_3$	A	1317,03	1232,150	—	-1,682	-1,581	8,00(7)	1,15(8)
				B	1292,23	1233,464	-1,675	-1,572	8,43(7)	1,17(8)	
				C	2708,23	1234,123	-2,631	-1,572	2,12(6)	1,17(8)	
				D	1303,52		-1,673		8,34(7)		
$5p^5(^2P^o_{1/2})5d$	$^2[5/2]^o_3$	$5p^5(^2P^o_{1/2})4f$	$^2[5/2]_3$	A	1394,17	1285,921	1286,305 ^a	-1,928	-1,726	4,05(7)	7,58(7)
				B	1360,43	1287,526	-1,923	-1,721	4,30(7)	7,64(7)	
				C	1725,70	1287,910	-1,456	-1,722	7,84(7)	7,62(7)	
				D	1372,77		-1,955		3,93(7)		

Tablo 3.4. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)		Diğer çalışmalar	$\log(gf)$		gA_{ki} (s ⁻¹)		
Üst seviye	Alt seviye	Bu çalışma		Bu çalışma	Bu çalışma		Bu çalışma				
		MCHF+BP	HFR		MCHF+BP		HFR	MCHF+BP	HFR		
$5p^5(^2P^o_{1/2})5d$	$^2[5/2]^o_3$	$5p^5(^2P^o_{1/2})4f$	$^2[7/2]_4$	A	1390,23	1299,916	1299,297 ^a	-0,418	-0,275	1,32(9)	2,09(9)
				B	1360,45	1301,229		-0,410	-0,276	1,40(9)	2,09(9)
				C	1676,36	1301,777		0,328	-0,276	3,93(9)	2,08(9)
				D	1372,94			-0,420		1,35(9)	
$5p^5(^2P^o_{3/2})6s$	$^2[3/2]^o_2$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[3/2]_2$	A	708,56	734,968	—	-4,146	-3,105	9,49(5)	9,70(6)
				B	686,26	736,056		-4,059	-3,401	1,24(6)	4,89(6)
				C	—	735,643		—	-3,520	—	3,72(6)
				D	690,23			-4,050		1,25(6)	
$5p^5(^2P^o_{3/2})6s$	$^2[3/2]^o_2$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[5/2]_3$	A	736,47	761,363	—	-3,391	-2,388	4,99(6)	4,71(7)
				B	711,64	762,351		-3,344	-2,758	5,97(6)	2,00(7)
				C	—	761,802		—	-2,886	—	1,50(7)
				D	715,97			-3,334		6,04(6)	
$5p^5(^2P^o_{3/2})6s$	$^2[3/2]^o_2$	$5p^5(^2P^o_{1/2})4f$	$^2[5/2]_3$	A	905,43	944,445	—	-3,665	-2,421	1,76(6)	2,83(7)
				B	862,68	945,254		-3,744	-2,987	1,61(6)	7,70(6)
				C	—	944,174		—	-3,142	—	5,40(6)
				D	869,24			-3,730		1,64(6)	
$5p^5(^2P^o_{3/2})6p$	$^2[1/2]_1$	$5p^5(^2P^o_{3/2})6s$	$^2[3/2]^o_2$	A	—	2442,057	2466,420 ^a	—	0,083	—	1,35(9)
				B	—	2459,804		—	0,088	—	1,35(9)
				C	—	2466,861		—	0,087	—	1,34(9)
$5p^5(^2P^o_{3/2})6p$	$^2[5/2]_2$	$5p^5(^2P^o_{3/2})6s$	$^2[3/2]^o_2$	A	—	2342,530	2360,591 ^a	—	0,106	—	1,55(9)
				B	—	2339,564		—	0,065	—	1,42(9)
				C	—	2345,439		—	0,065	—	1,41(9)
$5p^5(^2P^o_{3/2})6p$	$^2[5/2]_3$	$5p^5(^2P^o_{3/2})6s$	$^2[3/2]^o_2$	A	—	2118,150	2155,318 ^a	—	0,525	—	4,98(9)
				B	—	2129,460		—	0,523	—	4,91(9)
				C	—	2133,823		—	0,523	—	4,88(9)
$5p^5(^2P^o_{3/2})6p$	$^2[3/2]_1$	$5p^5(^2P^o_{3/2})6s$	$^2[3/2]^o_2$	A	—	2106,757	2115,855 ^a	—	-1,342	—	6,83(7)
				B	—	2099,536		—	-2,213	—	9,27(6)
				C	—	2104,365		—	-2,225	—	8,96(6)
$5p^5(^2P^o_{3/2})6p$	$^2[3/2]_2$	$5p^5(^2P^o_{3/2})6s$	$^2[3/2]^o_2$	A	—	1999,456	1991,325 ^a	—	-0,006	—	1,65(9)

Tablo 3.4. (Devamı)										
Geçişler				λ (Å)		$\log(gf)$		gA_{ki} (s ⁻¹)		
Üst seviye	Alt seviye			Bu çalışma		Diğer	Bu çalışma		Bu çalışma	
				MCHF+BP	HFR	çalışmalar	MCHF+BP	HFR	MCHF+BP	HFR
$5p^5(^2P^o_{1/2})6p$	$^2[1/2]_1$	$5p^5(^2P^o_{3/2})6s$	$^2[3/2]^o_2$	B	—	1990,925	—	0,072	—	1,99(9)
				C	—	1995,432	—	0,073	—	1,98(9)
				A	—	1367,369	—	-1,768	—	6,09(7)
				B	—	1363,891	—	-1,635	—	8,31(7)
				C	—	1366,099	—	-1,649	—	8,01(7)
$5p^5(^2P^o_{3/2})6s$	$^2[3/2]^o_1$	$5p^6$	1S_0	A	389,25	403,984	404,209 ^a	-0,013	-0,373	4,27(10)
				B	381,09	404,165		0,389	-0,325	1,12(11)
				C	359,82	404,218		0,321	-0,306	1,08(11)
				D	382,16			-0,182		3,00(10)
				A	680,54	712,900	—	-4,363	-3,538	6,25(5)
$5p^5(^2P^o_{3/2})6s$	$^2[3/2]^o_1$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[3/2]_1$	B	661,90	714,281		-4,139	-3,854	1,11(6)
				C	—	714,663		—	-3,976	—
				D	665,19			-4,153		1,06(6)
				A	696,61	729,131	—	-3,760	-3,058	2,39(6)
				B	676,78	730,548		-3,466	-3,371	4,98(6)
$5p^5(^2P^o_{3/2})6s$	$^2[3/2]^o_1$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[3/2]_2$	C	—	730,892		—	-3,493	—
				D	680,24			-3,525		4,31(6)
				A	—	2403,868	2398,256 ^a	—	-0,070	—
				B	—	2397,002		—	-0,007	—
				C	—	2395,078		—	-0,007	—
$5p^5(^2P^o_{3/2})6p$	$^2[3/2]_1$	$5p^5(^2P^o_{3/2})6s$	$^2[3/2]^o_1$	A	—	2156,239	2146,057 ^a	—	0,140	—
				B	—	2145,677		—	0,156	—
				C	—	2144,237		—	0,155	—
				A	—	2043,972	2018,054 ^a	—	0,171	—
				B	—	2032,369		—	0,128	—
$5p^5(^2P^o_{3/2})6p$	$^2[3/2]_2$	$5p^5(^2P^o_{3/2})6s$	$^2[3/2]^o_1$	C	—	2031,248		—	0,128	—
				A	—	1780,963	1824,990 ^a	—	-0,328	—
				B	—	1816,649		—	-0,298	—
				C	—	1815,520		—	-0,298	—
										1,02(9)

Tablo 3.4. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)			$\log(gf)$		gA_{ki} (s ⁻¹)		
Üst seviye	Alt seviye			Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma		Bu çalışma		
				MCHF+BP	HFR		MCHF+BP	HFR	MCHF+BP	HFR	
$5p^5(^2P^o_{1/2})6p$	$^2[1/2]_0$	$5p^5(^2P^o_{1/2})5d$	$^2[3/2]^o_1$	A	—	1327,756	1401,241 ^a	—	-0,181	—	2,50(9)
				B	552,43	1404,327		-2,172	-0,603	1,47(8)	8,43(8)
				C	—	1395,420		—	-0,631	—	8,01(8)
$5p^5(^2P^o_{1/2})5d$	$^2[3/2]^o_1$	$5p^6$	1S_0	A	371,10	399,3644	399,361 ^a	0,965	0,866	4,47(11)	3,07(11)
				B	381,09	399,3636		0,389	0,932	1,12(11)	3,58(11)
				C	353,54	400,090		0,844	0,933	3,73(11)	3,57(11)
				D	374,16			0,905		3,83(11)	
$5p^5(^2P^o_{1/2})5d$	$^2[3/2]^o_1$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[5/2]_2$	A	712,99	795,197	—	-0,807	-1,020	2,04(9)	1,01(9)
				B	756,29	795,358		-1,930	-1,017	1,37(8)	1,01(9)
				C	—	798,200		—	-1,017	—	1,01(9)
				D	729,59			-0,984		1,30(9)	
$5p^5(^2P^o_{1/2})5d$	$^2[3/2]^o_1$	$5p^5(^2P^o_{1/2})4f$	$^2[5/2]_2$	A	805,60	934,804	936,241 ^a	-0,748	-0,669	1,84(9)	1,64(9)
				B	859,42	935,065		-1,788	-0,652	1,47(8)	1,70(9)
				C	—	939,116		—	-0,648	—	1,70(9)
				D	825,14			-0,825		1,46(9)	
$5p^5(^2P^o_{1/2})6s$	$^2[1/2]^o_0$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[3/2]_1$	A	602,36	605,285	—	-4,120	-3,091	1,39(6)	1,48(7)
				B	586,65	605,562		-3,933	-3,307	2,26(6)	8,97(6)
				C	—	605,835		—	-3,419	—	6,92(6)
				D	589,55			-3,924		2,28(6)	
$5p^5(^2P^o_{1/2})6p$	$^2[3/2]_1$	$5p^5(^2P^o_{1/2})6s$	$^2[1/2]^o_0$	A	—	2446,123	2432,642 ^a	—	-0,368	—	4,77(8)
				B	—	2445,250		—	-0,345	—	5,04(8)
				C	—	2442,957		—	-0,346	—	5,04(8)
$5p^5(^2P^o_{1/2})6p$	$^2[1/2]_1$	$5p^5(^2P^o_{1/2})6s$	$^2[1/2]^o_0$	A	—	2122,929	2081,251 ^a	—	-0,029	—	1,39(9)
				B	—	2120,414		—	-0,043	—	1,34(9)
				C	—	2119,445		—	-0,041	—	1,35(9)
$5p^5(^2P^o_{1/2})6s$	$^2[1/2]^o_1$	$5p^6$	1S_0	A	360,12	366,038	365,661 ^a	-1,333	-0,419	2,39(9)	1,90(10)
				B	352,74	366,151		-0,917	-0,400	6,49(9)	1,98(10)
				C	334,45	366,305		-1,214	-0,415	3,65(9)	1,91(10)
				D	353,74			-1,168		3,62(9)	

Tablo 3.4. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)			$\log(gf)$		gA_{ki} (s ⁻¹)		
Üst seviye	Alt seviye			Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma		Bu çalışma		
				MCHF+BP	HFR		MCHF+BP	HFR	MCHF+BP	HFR	
$5p^5(^2P^o_{1/2})6s$	$^2[1/2]^o_1$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[3/2]_2$	A	608,53	614,209	—	-3,660	-2,973	3,94(6)	1,88(7)
				B	592,27	615,114		-3,655	-3,219	4,21(6)	1,06(7)
				C	—	615,672		—	-3,331	—	8,22(6)
				D	595,14			-3,648		4,24(6)	
$5p^5(^2P^o_{1/2})6s$	$^2[1/2]^o_1$	$5p^5(^2P^o_{1/2})4f$	$^2[5/2]_2$	A	673,55	770,582	—	-2,552	-3,615	4,13(7)	2,73(6)
				B	652,28	771,264		-2,964	-3,725	1,70(7)	2,11(6)
				C	—	771,989		—	-3,860	—	1,54(6)
				D	655,78			-2,951		1,74(7)	
$5p^5(^2P^o_{1/2})6p$	$^2[3/2]_1$	$5p^5(^2P^o_{1/2})6s$	$^2[1/2]^o_1$	A	—	2490,114	2518,038 ^a	—	-0,101	—	8,52(8)
				B	—	2478,777		—	-0,110	—	8,42(8)
				C	—	2471,316		—	-0,108	—	8,52(8)
$5p^5(^2P^o_{1/2})6p$	$^2[1/2]_1$	$5p^5(^2P^o_{1/2})6s$	$^2[1/2]^o_1$	A	—	2155,984	2143,434 ^a	—	-0,325	—	6,79(8)
				B	—	2145,580		—	-0,293	—	7,38(8)
				C	—	2140,757		—	-0,292	—	7,42(8)
$5p^5(^2P^o_{1/2})6p$	$^2[3/2]_2$	$5p^5(^2P^o_{1/2})6s$	$^2[1/2]^o_1$	A	—	2092,324	2135,022 ^a	—	0,386	—	3,71(9)
				B	—	2106,831		—	0,381	—	3,62(9)
				C	—	2101,543		—	0,382	—	3,64(9)
$5p^5(^2P^o_{1/2})6p$	$^2[1/2]_0$	$5p^5(^2P^o_{1/2})6s$	$^2[1/2]^o_1$	A	260,63	1904,130	2070,845 ^a	-2,941	-0,332	1,12(8)	8,56(8)
				B	238,35	2062,044		-2,585	-0,343	3,05(8)	7,13(8)
				C	—	2057,166		—	-0,344	—	7,13(8)
				D	383,13			-2,542		1,30(8)	
$5p^5(^2P^o_{3/2})6d$	$^2[1/2]^o_0$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[3/2]_1$	A	324,98	408,018	—	-3,883	-2,534	8,27(6)	1,17(8)
				B	369,14	408,429		-2,060	-2,252	4,26(8)	2,24(8)
				C	—	408,468		—	-2,229	—	2,36(8)
				D	589,55			-3,924		2,28(6)	
$5p^5(^2P^o_{3/2})6d$	$^2[1/2]^o_0$	$5p^5(^2P^o_{3/2})6p$	$^2[1/2]_1$	A	—	1539,522	1540,573 ^a	—	-0,058	—	2,46(9)
				B	—	1533,504		—	-0,060	—	2,47(9)
				C	—	1532,867		—	-0,061	—	2,47(9)

Tablo 3.4. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)			$\log(gf)$		gA_{ki} (s ⁻¹)		
Üst seviye		Alt seviye		Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma		Bu çalışma		
				MCHF+BP	HFR		MCHF+BP	HFR	MCHF+BP	HFR	
$5p^5(^2P^o_{3/2})6d$	$^2[1/2]^o_0$	$5p^5(^2P^o_{1/2})6p$	$^2[3/2]_1$	A	—	2564,438	—	—	-3,402	—	4,02(5)
				B	2258,05	2576,715	—	-1,448	-2,313	1,55(7)	4,88(6)
				C	—	2575,887	—	—	-2,326	—	4,75(6)
$5p^5(^2P^o_{3/2})6d$	$^2[1/2]^o_1$	$5p^6$	1S_0	A	239,33	282,944	—	-2,838	-1,676	1,69(8)	1,76(9)
				B	260,25	282,990	—	-2,284	-2,669	5,12(8)	1,79(8)
				C	250,15	282,967	—	-2,201	-2,852	6,71(8)	1,17(8)
				D	260,93	—	—	-2,299	—	4,92(8)	—
$5p^5(^2P^o_{3/2})6d$	$^2[1/2]^o_1$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[3/2]_1$	A	324,81	406,233	—	-3,949	-2,490	7,11(6)	1,31(8)
				B	366,40	406,592	—	-2,044	-2,302	4,49(8)	2,01(8)
				C	697,43	406,615	—	-1,262	-2,278	7,50(8)	2,13(8)
				D	367,77	—	—	-2,053	—	4,36(8)	—
$5p^5(^2P^o_{3/2})6d$	$^2[1/2]^o_1$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[3/2]_2$	A	328,43	411,453	—	-3,466	-2,185	2,12(7)	2,57(8)
				B	370,92	411,812	—	-1,732	-1,941	8,99(8)	4,50(8)
				C	711,63	411,818	—	-0,922	-1,923	1,58(9)	4,69(8)
				D	372,33	—	—	-1,745	—	8,66(8)	—
$5p^5(^2P^o_{3/2})6d$	$^2[1/2]^o_1$	$5p^5(^2P^o_{3/2})6p$	$^2[1/2]_1$	A	—	1514,421	1518,101 ^a	—	0,274	—	5,47(9)
				B	—	1507,923	—	—	0,265	—	5,40(9)
				C	—	1507,093	—	—	0,265	—	5,41(9)
$5p^5(^2P^o_{3/2})6d$	$^2[1/2]^o_1$	$5p^5(^2P^o_{3/2})6p$	$^2[5/2]_2$	A	—	1555,403	—	—	-0,484	6,47(7)	9,04(8)
				B	1283,59	1556,977	—	-1,575	-0,440	1,64(7)	9,99(8)
				C	1366,86	1556,316	—	-2,339	-0,442	1,31(8)	9,95(8)
				D	2426,14	—	—	-0,715	—	—	—
$5p^5(^2P^o_{3/2})6d$	$^2[1/2]^o_1$	$5p^5(^2P^o_{3/2})6p$	$^2[3/2]_1$	A	—	1680,260	—	—	-0,901	—	2,97(8)
				B	—	1685,191	—	—	-1,232	—	1,38(8)
				C	1108,76	1684,354	—	-2,858	-1,245	—	1,34(8)
				D	—	—	—	—	—	7,52(6)	—
$5p^5(^2P^o_{3/2})6d$	$^2[1/2]^o_1$	$5p^5(^2P^o_{3/2})6p$	$^2[3/2]_2$	A	3751,52	1755,393	1779,403 ^a	-2,559	-0,538	7,85(5)	6,28(8)
				B	1603,51	1762,359	—	-3,092	-0,517	1,26(6)	6,52(8)
				C	—	1761,314	—	—	-0,521	—	6,48(8)
				D	1114,06	—	—	-3,740	—	5,87(5)	—

Tablo 3.4. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)			$\log(gf)$		gA_{ki} (s ⁻¹)		
Üst seviye	Alt seviye			Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma		Bu çalışma		
				MCHF+BP	HFR		MCHF+BP	HFR	MCHF+BP	HFR	
$5p^5(^2P^o_{3/2})6d$	$^2[7/2]^o_4$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[9/2]_5$	A	332,56	414,343	—	-2,889	-1,517	7,78(7)	1,18(9)
				B	371,41	414,212		-1,059	-1,386	4,22(9)	1,60(9)
				C	708,01	414,137		-0,343	-1,369	6,03(9)	1,66(9)
				D	376,01			-1,192		3,03(9)	
$5p^5(^2P^o_{3/2})6d$	$^2[7/2]^o_4$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[9/2]_4$	A	332,16	414,700	—	-4,300	-2,746	3,03(6)	6,96(7)
				B	370,57	414,351		-2,397	-2,627	1,95(8)	9,18(7)
				C	724,82	414,296		-1,467	-2,611	4,33(8)	9,52(7)
				D	375,15			-2,550		1,33(8)	
$5p^5(^2P^o_{3/2})6d$	$^2[7/2]^o_4$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[5/2]_3$	A	333,98	417,327	—	-5,473	-3,163	2,01(5)	2,63(7)
				B	372,62	417,122		-3,066	-2,654	4,13(7)	8,51(7)
				C	713,17	417,050		-2,927	-2,677	1,55(7)	8,06(7)
				D	377,20			-2,336		2,16(8)	
$5p^5(^2P^o_{3/2})6d$	$^2[7/2]^o_4$	$5p^5(^2P^o_{3/2})6p$	$^2[5/2]_3$	A	—	1637,573	1608,160 ^a	—	0,882	—	1,90(10)
				B	—	1623,265		—	0,874	—	1,89(10)
				C	—	1622,126		—	0,873	—	1,89(10)
$5p^5(^2P^o_{3/2})6d$	$^2[7/2]^o_3$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[9/2]_4$	A	—	413,810	—	—	-1,531	2,92(9)	1,15(9)
				B	370,88	414,592		-1,220	-1,488	4,58(9)	1,26(9)
				C	726,00	414,701		-0,441	-1,486	—	1,27(9)
				D	374,27			-1,297		2,40(9)	
$5p^5(^2P^o_{3/2})6d$	$^2[7/2]^o_3$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[7/2]_3$	A	378,39	421,473	—		-2,469		1,28(8)
				B	—	422,248		-2,157	-2,428	3,24(8)	1,40(8)
				C	751,18	422,322		-1,287	-2,427	6,11(8)	1,40(8)
				D	381,91			-2,278		2,41(8)	
$5p^5(^2P^o_{3/2})6d$	$^2[7/2]^o_3$	$5p^5(^2P^o_{3/2})6p$	$^2[5/2]_2$	A	—	1512,705	1507,607 ^a	—	0,702	—	1,47(10)
				B	—	1522,503		—	0,702	—	1,45(10)
				C	—	1523,461		—	0,699	—	1,44(10)
$5p^5(^2P^o_{3/2})6d$	$^2[7/2]^o_3$	$5p^5(^2P^o_{3/2})6p$	$^2[5/2]_3$	A	—	1623,782	1605,239 ^a	—	-0,071	—	2,15(9)
				B	—	1626,967		—	-0,250	—	1,42(9)
				C	—	1628,354		—	-0,270	—	1,35(9)
				D	1256,30			-3,573		1,13(6)	

Tablo 3.4. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)		Diğer çalışmalar	$\log(gf)$		gA_{ki} (s ⁻¹)		
Üst seviye	Alt seviye	Bu çalışma		Bu çalışma	Bu çalışma						
		MCHF+BP	HFR		MCHF+BP		HFR	MCHF+BP	HFR		
$5p^5(^2P^o_{3/2})6d$	$^2[3/2]^o_2$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[3/2]_2$	A	327,96	408,349	—	-3,728 ^A	-2,313	1,16(7)	1,95(8)
				B	365,66	408,574		-1,874	-2,227	6,67(8)	2,37(8)
				C	692,54	408,556		-1,162	-2,206	9,58(8)	2,49(8)
				D	367,33			-1,912		6,06(8)	
$5p^5(^2P^o_{3/2})6d$	$^2[3/2]^o_2$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[5/2]_3$	A	333,81	416,369	—	-3,318	-1,886	2,88(7)	5,00(8)
				B	372,75	416,549		-1,448	-1,716	1,71(9)	7,39(8)
				C	713,64	416,499		-0,708	-1,701 ^C	2,57(9)	7,65(8)
				D	374,49			-1,474		1,60(9)	
$5p^5(^2P^o_{3/2})6d$	$^2[3/2]^o_2$	$5p^5(^2P^o_{3/2})6p$	$^2[1/2]_1$	A	—	1473,208	1475,078 ^a	—	-0,018	—	2,95(9)
				B	—	1465,404		—	0,084	—	3,77(9)
				C	—	1464,315		—	0,088	—	3,81(9)
$5p^5(^2P^o_{3/2})6d$	$^2[3/2]^o_2$	$5p^5(^2P^o_{3/2})6p$	$^2[5/2]_2$	A	2403,29	1511,961	—	-1,944	-0,086	1,31(7)	2,39(9)
				B	1005,36	1511,688		-2,970	-0,216	7,07(6)	1,78(9)
				C	—	1510,740		—	-0,208	—	1,81(9)
				D	2662,44			-0,975		9,97(7)	
$5p^5(^2P^o_{3/2})6d$	$^2[3/2]^o_2$	$5p^5(^2P^o_{3/2})6p$	$^2[3/2]_1$	A	—	1629,677	—		-0,082	—	2,08(9)
				B	—	1632,263			-0,271	—	1,34(9)
				C	1063,09	1631,099		-3,747	-0,284	1,06(6)	1,30(9)
$5p^5(^2P^o_{3/2})6d$	$^2[3/2]^o_2$	$5p^5(^2P^o_{3/2})6p$	$^2[3/2]_2$	A	—	1700,259	1720,590 ^a	—	0,184	—	3,53(9)
				B	—	1704,556		—	0,194	—	3,59(9)
				C	1094,91	1703,166		-3,994	0,192	5,64(5)	3,58(9)
				D	1161,38			-3,499		1,57(6)	
$5p^5(^2P^o_{3/2})6d$	$^2[5/2]^o_2$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[7/2]_3$	A	333,36	418,508	—	-3,409	-1,675	2,34(7)	8,05(8)
				B	373,15	418,532		-1,377	-1,677	2,01(9)	8,00(8)
				C	730,82	418,463		-0,606	-1,669	3,10(9)	8,15(8)
				D	376,06			-1,432		1,74(9)	
$5p^5(^2P^o_{3/2})6d$	$^2[5/2]^o_2$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[5/2]_2$	A	345,43	430,518	—	-3,815	-2,467	8,56(6)	1,23(8)
				B	382,38	430,557		-2,256	-2,364	2,53(8)	1,56(8)
				C	—	430,468		—	-2,389	—	1,47(8)
				D	385,38			-2,325		2,13(8)	

Tablo 3.4. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)			$\log(gf)$		gA_{ki} (s ⁻¹)	
Üst seviye		Alt seviye		Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma		Bu çalışma	
				MCHF+BP	HFR		MCHF+BP	HFR	MCHF+BP	HFR
$5p^5(^2P^o_{3/2})6d$	$^2[5/2]^o_2$	$5p^5(^2P^o_{3/2})6p$	$^2[1/2]_1$	A	1438,290	—	—	-0,170	—	2,18(9)
				B	1431,159	—	—	-0,408	—	1,27(9)
				C	1430,164	—	—	-0,419	—	1,24(9)
$5p^5(^2P^o_{3/2})6d$	$^2[5/2]^o_2$	$5p^5(^2P^o_{3/2})6p$	$^2[5/2]_2$	A	1475,205	1473,624 ^a	—	0,109	—	3,94(9)
				B	1475,273	—	—	0,094	—	3,80(9)
				C	1474,416	—	—	0,091	—	3,79(9)
$5p^5(^2P^o_{3/2})6d$	$^2[5/2]^o_2$	$5p^5(^2P^o_{3/2})6p$	$^2[3/2]_1$	A	1587,056	1588,325 ^a	—	0,366	—	6,14(9)
				B	1589,888	—	—	0,423	—	6,99(9)
				C	1588,837	—	—	0,426	—	7,04(9)
$5p^5(^2P^o_{3/2})6d$	$^2[5/2]^o_3$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[5/2]_3$	A	333,30	—	-3,631	-2,263	1,41(7)	2,15(8)
				B	363,76	—	-1,900	-2,370	6,34(8)	1,67(8)
				C	714,30	—	-2,347	-2,352	5,88(7)	1,74(8)
				D	366,02	—	-1,979		5,22(8)	
$5p^5(^2P^o_{3/2})6d$	$^2[5/2]^o_3$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[7/2]_4$	A	343,00	—	-3,097	-1,434	4,53(7)	1,37(9)
				B	374,72	—	-1,154	-1,528	3,34(9)	1,10(9)
				C	777,15	—	-1,920	-1,535	1,33(8)	1,08(9)
				D	377,17	—	-1,175		3,14(9)	
$5p^5(^2P^o_{3/2})6d$	$^2[5/2]^o_3$	$5p^5(^2P^o_{3/2})6p$	$^2[5/2]_3$	A	1554,506	1549,367 ^a	—	0,063	—	3,19(9)
				B	1553,543	—	—	0,115	—	3,60(9)
				C	1553,227	—	—	0,126	—	3,70(9)
				D	1386,38	—	—		1,57(7)	
$5p^5(^2P^o_{3/2})6d$	$^2[5/2]^o_3$	$5p^5(^2P^o_{3/2})6p$	$^2[3/2]_2$	A	1625,315	1646,859 ^a	—	0,668	—	1,18(10)
				B	1636,625	—	—	0,645	—	1,10(10)
				C	1635,807	—	—	0,641	—	1,09(10)
$5p^5(^2P^o_{3/2})6d$	$^2[3/2]^o_1$	$5p^6$	1S_0	A	238,89	—	-2,220	0,083	7,05(8)	1,05(11)
				B	235,74	—	-0,199	-0,828	7,59(10)	1,30(10)
				C	227,43	—	0,042	-0,967	1,42(11)	9,45(9)
				D	237,22	—	-0,236		6,89(10)	

Tablo 3.4. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)		Diğer çalışmalar	$\log(gf)$		gA_{ki} (s ⁻¹)		
Üst seviye	Alt seviye	Bu çalışma		Bu çalışma	Bu çalışma		Bu çalışma	Bu çalışma			
		MCHF+BP	HFR						MCHF+BP	HFR	MCHF+BP
$5p^5(^2P^o_{3/2})6d$	$^2[3/2]^o_1$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[3/2]_1$	A	306,10	393,849	—	-4,838	-3,703	1,03(6)	8,51(6)
				B	319,62	392,805	-3,906	-4,375	8,10(6)	1,82(6)	
				C	545,46	392,419	-4,016	-4,376	2,16(6)	1,82(6)	
				D	322,36	-3,907	7,94(6)				
$5p^5(^2P^o_{3/2})6d$	$^2[3/2]^o_1$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[3/2]_2$	A	324,01	398,753	—	-4,545	-3,065	1,81(6)	3,61(7)
				B	323,05	397,675	-3,816	-3,316	9,77(6)	2,04(7)	
				C	554,11	397,262	-3,154	-3,323	1,52(7)	2,01(7)	
				D	325,85	-4,144	4,51(6)				
$5p^5(^2P^o_{3/2})6d$	$^2[3/2]^o_1$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[5/2]_2$	A	345,57	422,791	—	-2,749	-1,168	9,94(7)	2,54(9)
				B	340,12	421,349	-1,491	-1,610	1,86(9)	9,22(8)	
				C	759,06	420,817	-1,147	-1,678	8,25(8)	7,90(8)	
				D	343,23	-1,555	1,58(9)				
$5p^5(^2P^o_{3/2})6d$	$^2[3/2]^o_1$	$5p^5(^2P^o_{3/2})6p$	$^2[3/2]_1$	A	—	1486,877	1487,498 ^a	—	-0,090	—	2,45(9)
				B	—	1471,176	—	0,017	—	3,21(9)	
				C	—	1464,837	—	0,025	—	3,30(9)	
$5p^5(^2P^o_{3/2})6d$	$^2[3/2]^o_1$	$5p^5(^2P^o_{3/2})6p$	$^2[1/2]_0$	A	—	1739,654	1694,062 ^a	—	-0,016	—	2,12(9)
				B	—	1679,775	—	0,138	—	3,25(9)	
				C	—	1671,598	—	0,143	—	3,32(9)	
$5p^5(^2P^o_{1/2})6d$	$^2[5/2]^o_2$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[3/2]_1$	A	303,16	365,100	—	-4,422	-4,379	2,75(6)	2,09(6)
				B	335,20	363,579	-5,718	-3,514	1,14(5)	1,54(7)	
				C	592,47	363,685	-3,722	-3,533	3,61(6)	1,48(7)	
				D	338,28	-2,851	8,21(7)				
$5p^5(^2P^o_{1/2})6d$	$^2[5/2]^o_2$	$5p^5(^2P^o_{3/2})4f$	$^2[3/2]_2$	A	306,31	369,310	—	-4,624	-3,858	1,69(6)	6,79(6)
				B	338,98	367,747	-3,371	-3,734	2,47(7)	9,09(6)	
				C	602,68	367,841	-3,095	-3,712	1,47(7)	9,58(6)	
				D	342,13	-2,724	1,07(8)				
$5p^5(^2P^o_{1/2})6d$	$^2[5/2]^o_2$	$5p^5(^2P^o_{1/2})4f$	$^2[7/2]_3$	A	333,36	409,852	—	-3,409	-1,672	2,34(7)	8,46(8)
				B	371,63	407,727	-1,358	-1,622	2,12(9)	9,57(8)	

Geçişler				λ (Å)		$\log(gf)$		gA_{ki} (s ⁻¹)	
Üst seviye		Alt seviye		Bu çalışma		Diğer	Bu çalışma		Bu çalışma
				MCHF+BP	HFR	çalışmalar	MCHF+BP	HFR	MCHF+BP HFR
5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)6d	² [5/2] ₂ ^o	5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)6p	² [3/2] ₁	C	646,07		-2,325	-1,612	7,57(7) 9,81(8)
				D	375,49		-1,445		1,70(9)
				A	—	1474,816	—	0,590	— 1,19(10)
				B	—	1449,030	—	0,590	— 1,24(10)
5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)6d	² [5/2] ₂ ^o	5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)6p	² [3/2] ₂	C	—	1449,955	—	0,590	— 1,23(10)
				A	—	1661,955	—	-0,254	— 1,35(9)
				B	—	1615,783	—	-0,230	— 1,51(9)
				C	—	1616,871	—	-0,229	— 1,51(9)
5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)6d	² [3/2] ₂ ^o	5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)4f	² [5/2] ₃	A	338,08	—	-3,231	-1,653	3,43(7) 8,66(8)
				B	372,46		-1,279	-1,630	2,53(9) 9,22(8)
				C	747,67		-2,192	-1,620	7,67(7) 9,44(8)
				D	374,59		-1,305		2,35(9)
5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)6d	² [3/2] ₂ ^o	5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)6p	² [3/2] ₁	A	—	1453,795	—	-1,943	— 3,60(7)
				B	—	1428,701	—	-3,226	— 1,94(6)
				C	—	1429,180	—	-3,298	— 1,64(6)
				A	—	1598,420	—	0,577	— 9,87(9)
5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)6d	² [3/2] ₂ ^o	5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)6p	² [1/2] ₁	B	—	1569,152	—	0,584	— 1,04(10)
				C	—	1569,316	—	0,584	— 1,04(10)
				A	343,00	—	-3,097	-1,447	4,53(7) 1,39(9)
				B	410,61		-3,859	-1,459	5,47(6) 1,36(9)
5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)6d	² [5/2] ₃ ^o	5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)4f	² [7/2] ₄	C	713,17		-2,927	1,459	1,21(7) 1,36(9)
				D	414,76		-3,371		1,65(7)
				A	—	1123,101	—	-2,168	— 3,59(7)
				B	—	1107,334	—	-2,494	— 1,74(7)
5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)6d	² [5/2] ₃ ^o	5p ⁵ (² P _{3/2} ^o)6p	² [5/2] ₃	C	—	1108,234	—	-2,448	— 1,94(7)
				A	—	1620,593	—	0,767	— 1,49(10)
				B	—	1585,028	—	0,774	— 1,58(10)
				C	—	1586,671	—	0,773	— 1,57(10)

Tablo 3.4. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)		Diğer çalışmalar	$\log(gf)$		gA_{ki} (s ⁻¹)		
Üst seviye	Alt seviye	Bu çalışma		Bu çalışma	Bu çalışma		Bu çalışma				
		MCHF+BP	HFR		MCHF+BP		HFR	MCHF+BP	HFR		
5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)6d	² [3/2] ₁ ^o	5p ⁶	¹ S ₀	A	238,89	260,191	–	-2,220	-0,129	7,05(8)	7,31(10)
				B	248,55	258,369	–	-0,665	-0,941	2,33(10)	1,14(10)
				C	239,32	258,222	–	-0,466	-1,029	3,98(10)	9,35(9)
				D	249,64		–	-0,626		2,53(10)	
5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)6d	² [3/2] ₁ ^o	5p ⁵ (² P _{3/2} ^o)4f	² [3/2] ₂	A	306,10	365,033	–	-4,838	-4,310	1,03(6)	2,45(6)
				B	347,60	361,659	–	-2,667	-3,925	1,19(8)	6,06(6)
				C	619,32	361,413	–	-2,710	-3,795	3,39(7)	8,18(6)
				D	349,76		–	-2,718		1,04(8)	
5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)6d	² [3/2] ₁ ^o	5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)4f	² [5/2] ₂	A	321,73	415,095	–	-3,532	-1,249	1,90(7)	2,18(9)
				B	367,44	410,527	–	-1,245	-1,615	2,50(9)	9,60(8)
				C	–	410,167	–	–	-1,671	–	8,46(8)
				D	369,86		–	-1,281		2,55(9)	–
5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)6d	² [3/2] ₁ ^o	5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)6p	² [3/2] ₁	A	–	1408,896	1415,046 ^a	–	-0,158	–	2,34(9)
				B	–	1358,890	–	–	-0,123	–	2,72(9)
				C	–	1354,953	–	–	-0,116	–	2,78(9)
5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)6d	² [3/2] ₁ ^o	5p ⁵ (² P _{1/2} ^o)6p	² [1/2] ₀	A	–	1705,932	1610,488 ^a	–	-0,022	–	2,18(9)
				B	–	1528,202	–	–	0,189	–	4,41(9)
				C	–	1523,067	–	–	0,197	-	4,52(9)

^aRedfors ve Reader [4]

Bu hesaplamalar öz-değerlik elektronları arasındaki karşılıklı etkileşimleri içermektedir. Elektronları arasındaki karşılıklı etkileşme etkileri ve relativistik etkiler ağır elementlerin spektrumlarında önemli rol oynamaktadır. Ce V gibi ağır atomların ışımsal atomik özelliklerin yapı hesaplamasında ve doğru tahmininde kompleks konfigürasyon etkileşimi ve relativistik etkiler aynı anda ele alınmalıdır. Migdalek ve Bojara [12] teori ve deney arasındaki uyuşmanın geliştirilmesinde relativistik etkilerin ve öz kutuplaşmanın önemli bir rolü olduğunu göstermişlerdir. Bu nedenle HFR hesaplamaları iyonik öz etkilerinin polarizasyonu hesaba katmak için geliştirilen HFR yöntemi kullanılarak geliştirilebilir. Ayrıca, hesaplamalarda kullanılan MCHF atomik yapı paketinin yeni sürümünün [13] kullanılmasıyla MCHF+BP hesapları iyileştirilebilir.

KAYNAKLAR

- [1] Biémont, E., Quinet, P., Recent advances in the study of lanthanide atoms and ions. Phys. Scr., T105: 38–54, 2003.
- [2] Reader, J., Ekberg, J.O., Resonance lines of Ce V and Ce VI. J. Opt. Soc. Am. 62: 464–464, 1972.
- [3] Reader, J., Epstein, G.L., Resonance lines of Cs II, Ba III and La V, J. Opt. Soc. Am. 65: 638–641, 1975.
- [4] Redfors, A., Reader, J., Spectrum and energy levels of the xenonlike ion Ce V, Phys. Rev. A, 43: 2367–2373, 1991.
- [5] Fischer, C.F., Brage, T., Jönsson, P., Computational Atomic Structure-an MCHF Approach, IOP, Bristol 1997.
- [6] Cowan, R.D., The Theory of Atomic Structure and Spectra, University of California Press, 1981.
- [7] Karaçoban Usta, B., Akgün, E., Alparslan, B., Electric dipole transitions for four-times ionized cerium (Ce V). AIP Conference Proceedings, 1722: 200001–4, 2016.
- [8] Fischer, C.F., The MCHF atomic-structure package, Comput. Phys. Commun., 128: 635–636, 2000.
- [9] <http://www.tcd.ie/Physics/People/Cormac.McGuinness/Cowan/>, Eriřim Tarihi: 26.04.2017.
- [10] <http://physics.nist.gov/asd>, Eriřim Tarihi: 26.04.2017.
- [11] 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.
- [12] Migdalek, J., Bojara, A., Relativistic effects, core polarisation and relaxation in ionisation potentials along Rb and Cs isoelectronic sequences. J. Phys. B: At. Mol. Phys. 17: 1943–1951, 1984.

- [13] Fischer, C.F., Tachiev, G., Gaigalas, G., Godefroid, M.R., An MCHF atomic-structure package for large-scale calculations, *Comput. Phys. Comm.*, 176:559–579, 2007.



ÖZGEÇMİŞ

Elif AKGÜN, 25.04.1990 yılında Sakarya Kaynarca’da doğdu. İlk, orta ve lise eğitimini Sakarya’da tamamladı. İlköğretimini Fevzi Çakmak İlköğretim Okulu’nda, lise eğitimini Mithat Paşa Şükrü Ayna Lisesi’nde tamamladı. 2008 yılında başladığı Sakarya Üniversitesi Fizik Bölümü’nü 2012 yılında bitirdi. 2013 yılında Sakarya Üniversitesi Fizik Bölümünde yüksek lisans eğitimine başladı ve halen yüksek lisans eğitimine devam etmektedir.