

T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

ÜÇ KEZ İYONLAŞMIŞ LANTANIN (La IV) ATOMİK YAPI HESAPLAMALARI

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Ebru ŞİRİN YILDIRIM

Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK

Tez Danışmanı : Doç. Dr. Betül USTA

Şubat 2021

T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

ÜÇ KEZ İYONLAŞMIŞ LANTANIN (La IV) ATOMİK YAPI HESAPLAMALARI

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Ebru ŞİRİN YILDIRIM

Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK

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

Doç. Dr.
Adil BAŞOĞLU
Jüri Başkanı

Doç. Dr.
Betül USTA
Üye

Doç. Dr.
Halil ARSLAN
Üye

BEYAN

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

Ebru ŞİRİN YILDIRIM

24.02.2021

TEŞEKKÜR

Yüksek lisans eğitimim boyunca değerli bilgi ve deneyimlerinden yararlandığım, her konuda bilgi ve desteğini almaktan çekinmediğim, araştırmanın planlanmasından yazılmasına kadar tüm aşamalarında yardımlarını esirgemeyen, teşvik eden, aynı titizlikte beni yönlendiren, tez sürecinde yaşadığım sağlık sorunlarımda yanımda olan, akademik çalışmadaki titizliği ve hassasiyeti ile bana örnek olan değerli danışman hocam Doç. Dr. Betül USTA'ya teşekkürlerimi sunarım.

Yüksek lisans eğitimi konusunda beni cesaretlendiren eşime, hayatım boyunca her konuda maddi manevi desteğini esirgemeyen anne ve babama, tez yazımı sürecinde bana yardım eden kardeşime teşekkür ederim. Tez yazımı sürecinde dünyaya gelip tezime anlam katan sevgili kızım Esil Ada YILDIRIM'a sonsuz teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

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

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

BÖLÜM 3.

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

3.1. La IV'ün Düşük Seviyelerinin Enerjileri ve Landé g -çarpanları.....	33
--	----

3.2. La IV'ün Elektrik Dipol Geişleri için Dalga Boyları, Salımcı Şiddetleri ve Geiş Olasılıkları.....	39
---	----

3.3. La IV'ün Elektrik Kuadropol ve Manyetik Dipol Geişleri için Dalga Boyları, Salımcı Şiddetleri ve Geiş Olasılıkları.....	41
---	----

KAYNAKLAR	67
-----------------	----

ÖZGEÇMİŞ.....	69
---------------	----

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 düzenlemesi (Mass Correction)
MCHF	: Çok konfigürasyonlu Hartree-Fock (Multiconfiguration Hartree-Fock)
MC-SCF	: Çok konfigürasyonlu-Öz-Uyum Alan (Multiconfiguration Self-Consistent Field)
MCHF+BP	: Çok konfigürasyonlu Hartree-Fock + Breit-Pauli
NHF	: Ortogonal olmayan Hartree-Fock (Nonorthogonal Hartree-Fock)
NIST	: National Institute of Standards and Technology's Web Site
NR	: Relativistik olmayan (Non-Relativistic)
OO	: Yörünge-yörünge (Orbit-Orbit)
RS	: Relativistik kayma (Relativistic Shift)
SCF	: Öz-uyum alan (Self-Consistent Field)
SO	: Çekirdek spin-yörünge (Spin-Orbit)
SOO	: Spin-diğer yörünge (Spin-Other Orbit)
SS	: Spin-spin
SSC	: Spin-spin temas (Spin-Spin Contact)

ŞEKİLLER LİSTESİ

- Şekil 3.1. Bu çalışmadan elde edilen enerjilerin (MCHF+BP ve HFR hesaplamaları) Epstein ve Reader [4] ile karşılaştırılması..... 39
- Şekil 3.2. Bu çalışmadan elde edilen dalga boylarının (MCHF+BP ve HFR hesaplamaları) Loginov [7] ile karşılaştırılması..... 41

TABLolar LİSTESİ

Tablo 3.1.	La IV'ün bazı uyarılmış seviyelerinin E enerjileri (cm^{-1}) ve Landé g-çarpanları.....	36
Tablo 3.2.	La IV'ün elektrik dipol (E1) geçişleri için λ dalga boyları ($\text{\AA}$), $\log(gf)$ logaritmik ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve A_{ji} geçiş olasılıkları (s^{-1}).....	44
Tablo 3.3.	La IV'ün bazı yeni E1 geçişleri için λ dalga boyları ($\text{\AA}$), $\log(gf)$ logaritmik ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve A_{ji} geçiş olasılıkları (s^{-1}).....	50
Tablo 3.4.	La IV'nün bazı elektrik kuadrupol (E2) ve manyetik dipol (M1) geçişleri için λ dalga boyları ($\text{\AA}$), $\log(gf)$ logaritmik ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve gA_{ji} ağırlıklı geçiş olasılıkları (s^{-1}).....	56
Tablo 3.5.	La IV'ün bazı yeni E2 ve M1 geçişleri için λ dalga boyları ($\text{\AA}$), $\log(gf)$ logaritmik ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve gA_{ji} ağırlıklı geçiş olasılıkları (s^{-1})	59

ÖZET

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

Bu çalışmada, üç kez iyonlaşmış lantanın (La IV, $Z = 57$) izinli ve yasaklı geçişleri çok konfigürasyonlu Hartree-Fock (Multiconfiguration Hartree-Fock–MCHF) ve relativistik Hartree-Fock (Relativistic Hartree-Fock–HFR) yöntemleri kullanılarak incelenmiştir. La IV'ün $5p^6$, $5p^5nf$ ($n = 4, 5$), $5p^5ns$ ($n = 6, 7, 8$), $5p^5np$ ($n = 6, 7$) ve $5p^5nd$ ($n = 5, 6$) konfigürasyonlarının relativistik enerjileri ve Landé g -çarpanları ve bu seviyeler arasındaki elektrik dipol (E1), elektrik kuadrupol (E2) ve manyetik dipol (M1) geçişleri için dalga boyları, salınıcı şiddetleri, geçiş olasılıkları gibi geçiş parametreleri hesaplanmıştır.

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

ATOMIC STRUCTURE CALCULATIONS OF TRIPLY IONIZED LANTHANUM (La IV)

SUMMARY

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

In this study, the allowed and forbidden transitions of triply ionized lanthanum (La IV, $Z = 57$) were investigated using the multiconfiguration Hartree-Fock (Multiconfiguration Hartree-Fock–MCHF) and the relativistic Hartree-Fock (Relativistic Hartree-Fock–HFR) methods. The relativistic energies and Landé g -factors for $5p^6$, $5p^5nf$ ($n = 4, 5$), $5p^5ns$ ($n = 6, 7, 8$), $5p^5np$ ($n = 6, 7$), and $5p^5nd$ ($n = 5, 6$) configurations and the transition parameters, such as wavelengths, oscillator strengths, and transition probabilities (or rates), for the electric dipole (E1), electric quadrupole (E2) and, magnetic dipole (M1) transitions between these levels were calculated for La IV.

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

BÖLÜM 1. GİRİŞ

Nadir toprak metalleri olarak isimlendirilen metaller sınıfında yer alan lantanitler, 51 ile 71 atom numaraları arasındaki elementleri kapsar. Bu atomlar için nadir toprak elementleri tanımlaması yapılmasına rağmen, mevcut çalışmalara göre bu atomların yer kabuğundaki bollukları diğer bilinen atomlarıki kadardır.

Lantanitlerin ilk üyesi olan lantan atomu çeşitli teknolojik alanlarda önemli uygulamalara sahiptir. Karbon esaslı aydınlatmada, optik camların yapımında, pahalı kamera merceklerinde, çakmaktaşı ve pil elektrotlarının üretilmesinde, sinema endüstrisinde stüdyo aydınlatmalarında ve projeksiyonlarda kullanılır [1]. Ayrıca, iyonlaşmış lantanitlerin spektrumuna, kuantum bilgisi, aydınlatma endüstrisi, lazer malzemeleri ve yıldız fiziği gibi çeşitli fizik alanlarında büyük ilgi duyulmaktadır [2].

Lantanitler için dalga boyları, ışımalı geçiş oranları ve bununla ilgili güvenilir spektroskopik verilere ihtiyaç giderek artmaktadır. Nadir toprak elementlerinin spektrumlarının detaylı analizleri, farklı türdeki yıldızların kimyasal bileşenlerinde bulunanlar hakkında yararlı bilgiler sağlar.

Yıldız spektrumlarında genellikle düşük yük durumlarında nötr atomlar ve iyonlar hakimdir. Üç kez iyonlaşmış lantanitlerin çizgilerinin de Saha denklemi ile tanımlanan iyonlaşma dengesine göre sıcak yıldız spektrumlarında görünmesi beklenir. Atomik veri eksikliği nedeniyle, üç kez iyonlaşmış lantanitler sıcak yıldız spektrumlarında henüz tanımlanmamış ve araştırılamamıştır [2].

Lantanın üç kez iyonlaşmış hali (La IV, $Z = 57$) ksenon (Xe) izoelektronik diziliminin bir üyesidir. Bu nedenle, tipik bir nadir gaz benzeri enerji seviyesi

yapısına sahip olması beklenir. La IV'ün taban konfigürasyonu [Cd, kadmiyum] $5p^6$ ve uyarılmış halleri de [Cd] $5p^5nl$ şeklindedir. La IV'ün elektronik yapısı ile Xe I'in ki arasındaki fark, La IV'deki $5p^54f$ konfigürasyonunun Xe I'in enerjisinden çok daha düşük olması gerçeğinden kaynaklanır. Bu lantanda görünen 4f yörüngelerinin çöküşünden kaynaklanır.

Üç kez iyonlaşmış lantanın enerji seviyeleri, ışıınım ömürleri ve geçiş parametreleri ile ilgili mevcut teorik ve deneysel çalışmalar nötral ya da diğer iyonlaşmış hallerine göre daha azdır. La IV spektrumlarının ilk incelemesi Epstein ve Reader'ın çalışmalarıdır [3, 4]. İlk çalışmalarında La IV'ün $5p^6-5p^55d$ ve $5p^6-5p^56s$ geçişlerini rapor etmişlerdir [3]. Daha sonra 190 tane geçişi belirlediler ve $5p^6$, $5p^55d$, $5p^56s$, $5p^56d$, $5p^57s$ ve $5p^54f$ uyarılmış seviyelerini sınıflandırdılar [4]. $4d^{10} - 4d^9nf$, np ($n = 6-10$) geçişleri Hansen ve arkadaşları tarafından analiz edilmiştir [5]. Biémont ve çalışma grubu, La IV için atomik yapı ve geçiş oranları hesaplamalarını yapmışlardır [2]. Eliav ve Kaldor, La IV'ün uyarılma enerjilerini hesaplamak için göreceli orta dereceli Hamiltonyen Fock–alan çift küme yöntemini (relativistic intermediate Hamiltonian Fock-space coupled-cluster method) uygulamışlardır [6]. Son zamanlarda, Loginov, La IV'ün deneysel (ışın-folyo spektroskopisi) ve teorik olarak (Hartree-Fock göreceli yaklaşımı ve Dirac-Fock yaklaşımı) geçiş olasılıklarını ve yarı ömürlerini sunmuştur [7]. La IV için yasak geçiş parametreleri ile ilgili sadece bir çalışma vardır [8, 9]. Son yıllarda Karaçoban Usta ve çalışma grubu tarafından La IV'ün elektrik dipol, elektrik kuadrupol ve manyetik dipol geçişleri için oldukça çeşitli hesaplamalar yapılmıştır [8–11].

Bu çalışmada, üç kez iyonlaşmış lantanın atomik özelliklerinin incelenmesi için çok elektronlu atomlar için kullanılan konfigürasyon etkileşimini ve relativistik etkileri içeren hesaplama yöntemleri kullanıldı. Çok konfigürasyonlu Hartree-Fock (Multiconfiguration Hartree-Fock–MCHF) [12] ve relativistik Hartree-Fock (Relativistic Hartree-Fock–HFR) [13] yöntemleri kullanılarak La IV'ün $5p^6$, $5p^5nf$ ($n = 4, 5$), $5p^5ns$ ($n = 6, 7, 8$), $5p^5np$ ($n = 6, 7$) ve $5p^5nd$ ($n = 5, 6$) konfigürasyonları 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 [10, 11]. Ayrıca, elektrik kuadrupol (E2) ve manyetik dipol (M1) geçişleri için dalga boyları, salınıcı şiddetleri ve geçiş olasılıkları sunuldu. Hesaplamalar MCHF atomik yapı paketi [14] ve Cowan'ın HFR program paketi [15] ile elde edildi.



BÖLÜM 2. HESAPLAMA YÖNTEMLERİ

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

2.1. Çok Elektronlu Atomlar için Relativistik Olmayan Hamiltonyen

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

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

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

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

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

2.2. Merkezi Alan Yaklaşıklığı ve Çarpım Dalga Fonksiyonları

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

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

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

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

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

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

olduğundan ve H_0 ayrıştırılabildiği için özdeğer ve özfonksiyonlar sırasıyla

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

ve

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

olarak yazılır. Schrödinger denklemi de böylece

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

olur. Burada $U(r)$ potansiyeli

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

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

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

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

Bu fonksiyon

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

2.3. Hartree-Fock (HF) Yaklaşıklığı

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

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

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

2.4. Çok Elektronlu Atomlarda Elektronların Karşılıklı Etkileşmesi

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

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

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

2.5. Çok Konfigürasyonlu Hartree-Fock (MCHF) Yöntemi

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

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

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

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

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

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

olur.

Hamiltonyenin matris elamanları

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

şeklinde olur.

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

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

2.5.1. Relativistik etkiler

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

Breit-Pauli Hamiltonyeni

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

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

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

şeklinde ifade edilir. Burada

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

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

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

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

ve

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

(2.32)'ye karşılık gelen enerji ifadesi

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

olarak dikkate alınabilir. Burada E_{NR} ,

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

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

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

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

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

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

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

Daha açık olarak ince yapı enerji seviyeleri

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

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

ve

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

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

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

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

2.5.2. Enerji seviyelerinin Landé g -çarpanları

Zeeman etkisi, dış manyetik alan ile atomun manyetik momenti arasındaki

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

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

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

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

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

şeklindedir. CSF'ler arasındaki matris elemanları da

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

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

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

Bu ifade dikkate alındığında enerji yarılmaları

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

olur.

2.5.3. Enerji seviyeleri arasındaki geçişler

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

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

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

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

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

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

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

olarak tanımlanır.

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

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

ve bileşen şiddeti $s^{\pi k}$

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

şeklinde tanımlanır.

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

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

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

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

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

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

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

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

şeklinde üst seviyenin istatistiksel ağırlığıdır ve

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

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

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

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

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

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

Bu elektrik ve manyetik çok-kutuplu geçişler için

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

olarak tayin eder.

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

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

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

şeklinde birleştirilebilir.

2.6. Relativistik Hartree-Fock (HFR) Yöntemi

Cowan tarafından geliştirilen bu yaklaşık yöntemde [28] Hamiltonyen

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

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

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

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

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

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

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

2.6.1. Bir-elektron ve toplam bağlanma enerjileri

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

olur. Tüm N elektronun konfigürasyon-ortalama toplam bağlanma enerjisi

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

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

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

elektron-çekirdek etkileşme enerjisi için

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

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

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

ve özdeş elektronlar için

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

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

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

Burada

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

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

şeklindedir. Bu durumda

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

ve

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

şeklindedir.

2.6.2. Relativistik düzeltmeler

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

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

Burada kütle-hız ve Darwin katkıları

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

ve

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

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

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

ve

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

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

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

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

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

ve buradan da j 'den bağımsız radyal dalga fonksiyonu için

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

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

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

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

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

2.6.3. Işımalı geçişler

2.6.3.1. Elektrik dipol geçişleri

Bu yöntemde elektrik dipol momenti üç değişik şekilde incelenmektedir:

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

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

ve

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

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

Elektrik dipol çizgi şiddeti

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

olarak bilinir. Burada

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

$-ea_0$ biriminde ölçülen atomun klasik dipol momentidir.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

veya

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

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

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

olur.

2.6.3.2. Manyetik dipol ve elektrik kuadrupol geçişleri

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

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

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

Manyetik dipol geçişleri için ağırlıklı geçiş olasılığı

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

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

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

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

şeklinde verilir.

Elektrik kuadrupol geçişleri için ağırlıklı geçiş olasılığı

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

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



BÖLÜM 3. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

Bu çalışmada, nadir toprak metallere lantan atomunun üç kez iyonlaşmış hali için atomik hesaplamalar yapıldı. Atomik hesaplamalar için Fischer tarafından geliştirilen ve relativistik düzeltmeler için Breit-Pauli Hamiltonyenini temel alan çok konfigürasyonlu Hartree-Fock yöntemini içeren MCHF atomik yapı paketi [14] ve Cowan tarafından geliştirilen relativistik Hartree-Fock yöntemini kullanılan Cowan paketi [15] kullanıldı. Bu atomik paketler ile La IV'ün düşük seviye enerjileri, Landé g -çarpanları, izinli (E1) ve yasaklı (E2, M1) geçişleri için dalga boyları, salınıcı şiddetleri ve geçiş olasılıkları elde edildi. Bu iki yöntemle elde edilen atomik hesaplama sonuçları Tablo 3.1., Tablo 3.2., Tablo 3.3., Tablo 3.4. ve Tablo 3.5.'te sunulmuştur ve literatürdeki önceki çalışma sonuçları ile karşılaştırılmıştır.

3.1. La IV'ün Düşük Seviyelerinin Enerjileri ve Landé g -çarpanları

MCHF+BP ve HFR yöntemleriyle üç kez iyonlaşmış lantanın [Cd] özü dışında $5p^6$, $5p^5nf$ ($n = 4, 5$), $5p^5ns$ ($n = 6, 7, 8$), $5p^5np$ ($n = 6, 7$) ve $5p^5nd$ ($n = 5, 6$) düşük seviyelerinin enerjileri ve Landé g -çarpanları için hesaplanan sonuçlar diğer çalışmalarla karşılaştırmalı olarak Tablo 3.1.'de sunulmaktadır. Enerji seviyeleri $5p^6$ 1S_0 taban hal seviyesine göre cm^{-1} birim sistemine göre verilmektedir. Ayrıca konfigürasyon terimleri, karşılaştırma değerleri $j[K]$ gösteriminde verildiği için hem $j[K]$ hem de ^{2S+1}L gösterimine göre sunulmaktadır. Tabloda tek pariteli seviyeler “o” indisiyle belirtilmektedir.

Üç kez iyonlaşmış lantan için MCHF+BP yönteminde, ilk olarak La IV için kapalı alt tabakalar girilerek LS çiftlenimine göre konfigürasyon hal listesi üretildi. Bunun için La IV'e ait kapalı tabakalar [Cd (kadmium), $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2$

$4p^6 4d^{10} 5s^2]$ ve $5p^6$ açık tabakası girildi. $5p^6$ kapalı tabaka olmasına rağmen açık tabaka kısmında girildi. Yapılan hesaplamada sadece değerlik (valans) elektronlarının üst tabakalara uyarıldığı değerlik elektronları arasındaki karşılıklı etkileşmenin dikkate alındığı konfigürasyonlar seçildi. Çift pariteli seviyeler için $5p^6$, $5p^5nf$ ($n = 4, 5$) ve $5p^5np$ ($n = 6, 7$) konfigürasyonları ele alındı. Her bir konfigürasyon için LS -çiftlenim modeli göre elde edilen konfigürasyon hal listesi bir çıktı dosyasına yazıldı. Elde edilen konfigürasyon hal listesi giriş verisi olarak alınarak relativistik olmayan Hamiltonyenin matris elemanları için gerekli olan açısallı integraller hesaplandı ve integral listesi bir sonraki adım için depolandı. MCHF yöntemi ile elde edilen konfigürasyon hal listesi ve integral listesi kullanılarak relativistik olmayan radyal fonksiyonları, konfigürasyon açılım katsayıları ve enerjiler hesaplandı. Radyal dalga fonksiyonları ve açılım katsayılı konfigürasyon hal listesi oluşturuldu. Hesaplamalarda relativistik katkıları ele almak için Breit-Pauli Hamiltonyenin matris elemanları için gerekli olan açısallı integraller hesaplandı. Verilen bir konfigürasyon hal listesi için tüm matris elemanları hesaplandı. Breit-Pauli yaklaşıklığında bir etkileşme matrisinin özdeğer ve özvektörleri hesaplandı. Konfigürasyon etkileşmesiyle üretilen elektronik dalga fonksiyonları kullanılarak zayıf dış manyetik alandaki manyetik alt seviyelerinin ayrılmasını belirlemek enerji seviyeleri için köşegen ve köşegen-dışı Landé g -çarpanları hesaplandı [16]. Daha sonra, tek pariteli seviyeler için $5p^5ns$ ($n = 6, 7, 8$) ve $5p^5nd$ ($n = 5, 6$) konfigürasyonları ele alınarak hesaplama adımları baştan başlanarak tekrar yapıldı. MCHF+BP hesabında tek ve çift pariteli seviyelerinde değerlik elektronları arasındaki karşılıklı etkileşme dikkate alınarak A ve B üst indisleriyle belirtilen iki çalışma yapıldı. Bu iki çalışmada ele alınan konfigürasyonlar aynı olmasına rağmen MCHF hesabında başlangıç dalga fonksiyonları farklı alındı.

Tablo 3.1.'de $5p^6$, $5p^5nf$ ($n = 4, 5$), $5p^5ns$ ($n = 6, 7, 8$), $5p^5np$ ($n = 6, 7$) ve $5p^5nd$ ($n = 5, 6$) konfigürasyonlarının seviye enerjileri ve Landé g -çarpanları sunulmuştur. A ve B çalışma sonuçlarından, HFR ve diğer çalışmalarla uyumlu olan çalışma üst indis ile belirtilerek tabloda verilmiştir. La IV için enerji seviyeleri Epstein ve Reader [4] ve Eliav ve Kaldor [6] tarafından yapılan çalışma sonuçları ile karşılaştırılmıştır. Elde edilen 5f, 7s, 7p ve 8s seviyelerinde uyum azdır. Elde edilen sonuçların

doğruluğunu göstermek için yüzde farklar (hata) $[|E_b - E_d|/E_d] \times 100$ hesaplandı. Burada E_b bu çalışmayı, E_d ise diğer çalışmaları göstermektedir. Elde edilen sonuçlar ile diğer çalışmalardaki sonuçlar arasındaki yüzde fark 7s, 5f ve 7p seviyeleri dışında, % 0,40–12,88 [4] aralığındadır. Landé g -çarpanları da HFR sonuçları ile iyi bir uyum içindedir.

HFR hesaplama yönteminde ise La IV için [Cd] özü dışında çift pariteli seviyeler için $5p^6$, $5p^5nf$ ($n = 4, 5$) ve $5p^5np$ ($n = 6, 7$), tek pariteli seviyeler için $5p^5ns$ ($n = 6, 7, 8$) ve $5p^5nd$ ($n = 5, 6$) konfigürasyonları seçilerek hesaplama için giriş dosyası hazırlandı. 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 integrallerinin (R^k) ölçeklendirme faktörlerinin iyileştirilmemiş değerleri 0,85 olarak seçildi. Relativistik Hartree-Fock yöntemi kullanarak radyal dalga fonksiyonları hesaplandı. Çıkış dosyası radyal Coulomb (F^k ve G^k) ve ξ spin-yörünge integrallerini içerir. İlk olarak, elektrik dipol (E1), elektrik kuadrupol (E2) ve manyetik dipol (M1) radyal integralleri ve konfigürasyon-etkileşme Coulomb integrallerini (R^k) hesaplamak için gerekli dalga fonksiyonları hesaplandı. Hesaplanan veriler ile özdeğer (enerji seviyeleri) ve özvektörleri hesaplamak için J toplam açısal momentumun olası her değeri için enerji matrisi kuruldu. Daha yüksek doğrulukta sonuçlar için, tekrarlamalı bir yöntemle deneysel enerji seviyelerine en-küçük kareler yöntemi ile bir uydurulmasını yaparak $E_{ort.}$, F^k , G^k , ξ ve R^k çeşitli radyal enerji parametreleri değiştirildi [17]. Elde edilen en küçük kareler uydurma parametrelerinin sonuçları atomik enerji seviyelerinin hesaplanmasında tekrar kullanıldı.

HFR hesaplamalarında alınan konfigürasyon setinde de sadece değerlik elektronları arasındaki karşılıklı etkileşme etkileri dikkate alındı. Tablo 3.1.'de La IV'ün $5p^6$, $5p^5nf$ ($n = 4, 5$), $5p^5ns$ ($n = 6, 7, 8$), $5p^5np$ ($n = 6, 7$) ve $5p^5nd$ ($n = 5, 6$) konfigürasyonlarının seviye enerjileri ve Landé g -çarpanları verilmektedir [10]. Enerji seviyeleri diğer çalışmalarla karşılaştırıldığında sonuçların oldukça uyumlu olduğu görülmektedir. Elde edilen enerji sonuçlar ile Epstein ve Reader [4]'ün

çalışmasıyla olan yüzde fark %0,00–0,17 aralığındadır. Enerji sonuçları diğer çalışma sonuçlarıyla [6] uyumludur. Landé g -çarpanları MCHF+BP sonuçları ile uyum içindedir.

Şekil 3.1.'de elde edilen enerji sonuçları ile Epstein ve Reader [4] tarafından verilen verilerle arasındaki karşılaştırma gösterilmiştir. Şekil 3.1.'den görüldüğü gibi, hesaplamalardan elde edilen enerji sonuçları [4] ile iyi uyum içindedir. Doğrusal korelasyon katsayısı R^2 , HFR hesaplaması için 1,00 ve MCHF+BP hesaplaması için 0,98'dir (7s, 5f ve 7p seviyeleri hariç).

Tablo 3.1. La IV'ün bazı uyarılmış seviyelerinin E enerjileri (cm^{-1}) ve Landé g -çarpanları

Seviye				E (cm^{-1})			g -factor	
Konf.	Terim			Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma	
	jK	LS	J	MCHF+BP	HFR		MCHF+BP	HFR
5p ⁶		¹ S	0	0,00	0,000	0,00	0,000 ^A	0,000
5p ⁵ 4f	3/2 [3/2]	³ D	1	147554,31 ^A	143246,45	143354,72 ^a 142689 ^b	0,499 ^A	0,499
5p ⁵ 4f	3/2 [3/2]	³ D	2	150424,31 ^A	145946,26	145948,96 ^a 145332 ^b	1,142 ^A	1,132
5p ⁵ 4f	3/2 [9/2]	³ G	5	154102,80 ^A	148797,50	148854 ^a 148425 ^b	1,200 ^A	1,200
5p ⁵ 4f	3/2 [9/2]	³ G	4	154553,64 ^A	149203,47	149137 ^a 149142 ^b	1,041 ^A	1,043
5p ⁵ 4f	3/2 [5/2]	³ D	3	154992,09 ^A	150099,91	149927,18 ^a 148947 ^b	1,287 ^A	1,268
5p ⁵ 4f	3/2 [7/2]	³ G	3	159374,31 ^A	153288,10	153339,10 ^a 153140 ^b	0,870 ^B	0,882
5p ⁵ 4f	3/2 [7/2]	¹ G	4	159374,31 ^A	157075,92	157093 ^a 157087 ^b	1,114 ^A	1,135
5p ⁵ 4f	3/2 [5/2]	³ F	2	167203,45 ^A	160500,89	160486,34 ^a 160494 ^b	0,829 ^A	0,816
5p ⁵ 4f	1/2[7/2]	¹ F	3	174146,12 ^A	168228,50	168161 ^a 169414 ^b	0,934 ^A	0,905
5p ⁵ 4f	1/2 [5/2]	³ F	3	177579,20 ^A	171223,10	171265 ^a 172362 ^b	1,104 ^B	1,112
5p ⁵ 4f	1/2 [7/2]	³ F	4	177343,30 ^A	171620,89	171654 ^a 173260 ^b	1,130 ^B	1,123
5p ⁵ 4f	1/2 [5/2]	¹ D	2	180455,39 ^A	175003,31	175013,82 ^a	0,861 ^A	0,886

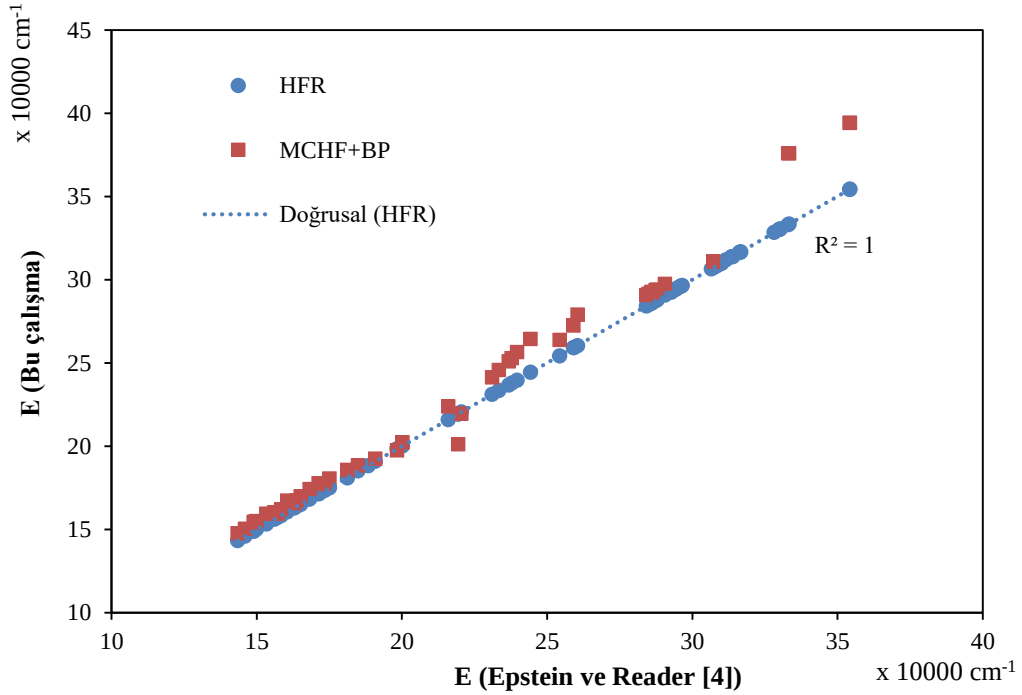
Tablo 3.1. (Devamı)

Seviye			E (cm ⁻¹)				g-factor	
Konf.	Terim		J	Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma	
	jK	LS		MCHF+BP	HFR		MCHF+BP	HFR
5p ⁵ 5d	3/2 [1/2]	³ P ^o	0	160147,56 ^A	156044,40	156100,30 ^a 156816 ^b	0,000 ^A	0,000
5p ⁵ 5d	3/2 [1/2]	³ P ^o	1	162075,80 ^A	158321,16	158412,61 ^a 159193 ^b	1,456 ^A	1,434
5p ⁵ 5d	3/2 [3/2] ^o	³ P ^o	2	165795,23 ^A	162774,42	162867,66 ^a 163770 ^b	1,439 ^A	1,415
5p ⁵ 5d	3/2 [7/2] ^o	³ F ^o	4	167429,36 ^A	163895,02	163693,30 ^a 164503 ^b	1,251 ^A	1,251
5p ⁵ 5d	3/2 [7/2] ^o	³ F ^o	3	169757,66 ^A	164993,82	165070,77 ^a 166008 ^b	1,089 ^A	1,093
5p ⁵ 5d	3/2 [5/2] ^o	¹ D ^o	2	—	168204,41	167921,72 ^a 168943 ^b	—	0,896
5p ⁵ 5d	3/2 [5/2] ^o	³ D ^o	3	177635,30 ^A	173341,88	173335,41 ^a 174805 ^b	1,200 ^A	1,210
5p ⁵ 5d	3/2 [3/2] ^o	³ D ^o	1	185629,36 ^A	180853,50	181154,97 ^a	0,561 ^A	0,588
5p ⁵ 5d	1/2 [5/2] ^o	³ F ^o	2	188417,05 ^A	185081,10	184885,80 ^a 185712 ^b	0,862 ^A	0,835
5p ⁵ 5d	1/2 [3/2] ^o	³ D ^o	2	—	188275,68	188393,20 ^a		1,193
5p ⁵ 5d	1/2 [5/2] ^o	¹ F ^o	3	192540,12 ^A	190854,61	190831,70 ^a	1,127 ^A	1,115
5p ⁵ 5d	1/2 [3/2] ^o	¹ P ^o	1	223725,73 ^A	215937,40	215919,23 ^a	0,983 ^A	0,982
5p ⁵ 6s	3/2 [3/2] ^o	³ P ^o	2	197497,16 ^B	198360,02	198303,15 ^a	1,365 ^A	1,496
5p ⁵ 6s	3/2 [3/2] ^o	¹ P ^o	1	202290,53 ^B	200133,48	200183,26 ^a	1,233 ^A	1,204
5p ⁵ 6s	1/2 [1/2] ^o	³ P ^o	0	201120,81 ^B	219265,08	219336,85 ^a	0,000 ^A	0,000
5p ⁵ 6s	1/2 [1/2] ^o	³ P ^o	1	219473,97 ^B	220580,32	220506,85 ^a	1,266 ^A	1,293
5p ⁵ 6p	3/2 [1/2]	³ S	1	241352,33 ^B	231050,89	231008,71 ^a	1,874 ^B	1,832
5p ⁵ 6p	3/2 [5/2]	³ D	2	245774,92 ^B	233391,23	233401,52 ^a	1,144 ^B	1,145
5p ⁵ 6p	3/2 [5/2]	³ D	3	251002,06 ^B	236666,61	236790,42 ^a	1,334 ^A	1,334
5p ⁵ 6p	3/2 [3/2]	¹ P	1	252753,12 ^B	237752,90	237727,30 ^a	1,000 ^B	1,063
5p ⁵ 6p	3/2 [3/2]	³ P	2	256402,94 ^B	239645,37	239654,29 ^a	1,330 ^B	1,347
5p ⁵ 6p	3/2 [1/2]	³ P	0	264395,38 ^B	244376,51	244301,79 ^a	0,000 ^A	0,000
5p ⁵ 6p	1/2 [3/2]	³ D	1	263731,06 ^B	254267,89	254251,34 ^a	0,694 ^B	0,662
5p ⁵ 6p	1/2 [1/2]	³ P	1	272532,78 ^B	259101,32	259085,89 ^a	1,402 ^B	1,446
5p ⁵ 6p	1/2 [3/2]	¹ D	2	—	259242,30	259224,33 ^a	—	1,176
5p ⁵ 6p	1/2 [1/2]	¹ S	0	279024,22 ^B	260391,90	260449,83 ^a	0,000 ^A	0,000
5p ⁵ 6d	3/2 [1/2] ^o	³ P ^o	0	290765,59 ^A	284250,42	284206,15 ^a	0,000 ^A	0,000
5p ⁵ 6d	3/2 [1/2] ^o	³ P ^o	1	291419,31 ^A	284973,61	284981,97 ^a	1,376 ^A	1,362
5p ⁵ 6d	3/2 [7/2] ^o	³ F ^o	4	292052,44 ^A	285729,96	285856,18 ^a	1,250 ^A	1,251
5p ⁵ 6d	3/2 [7/2] ^o	³ F ^o	3	292670,75 ^A	286118,80	285951,00 ^a	1,057 ^A	1,058
5p ⁵ 6d	3/2 [3/2] ^o	³ P ^o	2	292427,94 ^A	286120,80	286298,26 ^a	1,261 ^A	1,341

Tablo 3.1. (Devamı)

Seviye				E (cm ⁻¹)			g-factor	
Konf.	Terim			Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma	
	jK	LS	J	MCHF+BP	HFR		MCHF+BP	HFR
5p ⁵ 6d	3/2 [5/2] ^o	¹ D ^o	2	293850,75 ^A	287390,13	287402,66 ^a	0,957 ^A	0,955
5p ⁵ 6d	3/2 [5/2] ^o	³ D ^o	3	294069,16 ^A	287814,68	287874,01 ^a	1,240 ^A	1,240
5p ⁵ 6d	3/2 [3/2] ^o	¹ P ^o	1	297393,84 ^A	290777,81	290596,17 ^a	0,842 ^A	0,814
5p ⁵ 6d	1/2 [5/2] ^o	³ F ^o	2	310936,69 ^A	307319,88	307182,98 ^a	0,774 ^A	0,772
5p ⁵ 6d	1/2 [3/2] ^o	³ D ^o	2	—	307756,73	307398,42 ^a	—	1,268
5p ⁵ 6d	1/2 [5/2] ^o	¹ F ^o	3	—	307990,82	308151,35 ^a	—	1,119
5p ⁵ 6d	1/2 [3/2] ^o	³ D ^o	1	—	309702,17	310049,76 ^a	—	0,826
5p ⁵ 7s	3/2 [3/2] ^o	³ P ^o	2	389671,97 ^A	292432,89	292080,31 ^a	1,501 ^A	1,499
5p ⁵ 7s	3/2 [3/2] ^o	¹ P ^o	1	384038,41 ^B	292427,21	292777,84 ^a	1,167 ^A	1,165
5p ⁵ 7s	1/2 [1/2] ^o	³ P ^o	0	402329,78 ^B	313717,62	313512,37 ^a	0,000 ^B	0,000
5p ⁵ 7s	1/2 [1/2] ^o	³ P ^o	1	402334,69 ^B	313711,78	313917,03 ^a	1,333 ^A	1,334
5p ⁵ 5f	3/2 [3/2]	³ D	1	361040,25 ^B	293520,60	293509,80 ^a	0,498 ^B	0,499
5p ⁵ 5f	3/2 [3/2]	³ D	2	363067,22 ^B	294040,51	294027,80 ^a	1,127 ^A	1,118
5p ⁵ 5f	3/2 [9/2]	³ G	5	364066,69 ^B	294540,79	294517,20 ^a	1,200 ^B	1,200
5p ⁵ 5f	3/2 [9/2]	¹ G	4	—	294584,99	294565,70 ^a	1,114 ^A	1,025
5p ⁵ 5f	3/2 [5/2]	³ D	3	403621,09 ^A	295473,02	295437,00 ^a	1,232 ^A	1,202
5p ⁵ 5f	3/2 [5/2]	¹ D	2	405051,53 ^A	295917,50	295890,40 ^a	0,878 ^A	0,856
5p ⁵ 5f	3/2 [7/2]	¹ F	3	—	296360,52	296338,50 ^a	—	0,947
5p ⁵ 5f	3/2 [7/2]	³ F	4	387918,59 ^B	296556,48	296550,60 ^a	1,160 ^A	1,181
5p ⁵ 5f	1/2 [7/2]	³ G	3	386373,50 ^B	316200,59	316124,60 ^a	0,885 ^B	0,836
5p ⁵ 5f	1/2 [7/2]	³ G	4	366294,44 ^B	316475,03	316432,80 ^a	1,044 ^B	1,094
5p ⁵ 5f	1/2 [5/2]	³ F	3	387590,94 ^B	316498,19	316464,70 ^a	1,150 ^A	1,184
5p ⁵ 5f	1/2 [5/2]	³ F	2	421209,19 ^A	316716,49	316674,10 ^a	0,827 ^A	0,860
5p ⁵ 7p	3/2 [1/2]	³ S	1	390392,84 ^B	306576,41	306533,10 ^a	1,633 ^A	1,804
5p ⁵ 7p	3/2 [5/2]	¹ D	2	—	307365,18	307314,30 ^a	1,730	1,135
5p ⁵ 7p	3/2 [5/2]	³ D	3	393081,75 ^B	308528,91	308427,20 ^a	1,333 ^B	1,333
5p ⁵ 7p	3/2 [3/2]	¹ P	1	393312,56 ^B	309059,51	309041,90 ^a	1,117 ^A	1,062
5p ⁵ 7p	3/2 [3/2]	³ P	2	394118,03 ^B	309682,41	309666,90 ^a	1,178 ^A	1,361
5p ⁵ 7p	3/2 [1/2]	¹ S	0	393959,41 ^B	311785,89	311556,20 ^a	0,000 ^B	0,000
5p ⁵ 7p	1/2 [3/2]	³ D	1	409318,81 ^B	328395,70	328164,10 ^a	0,662 ^B	0,659
5p ⁵ 7p	1/2 [3/2]	³ D	2	411944,09 ^B	330058,27	329917,10 ^a	1,161 ^A	1,477
5p ⁵ 7p	1/2 [1/2]	³ P	1	482177,88 ^A	330186,12	329941,70 ^a	1,388 ^A	1,171
5p ⁵ 7p	1/2 [1/2]	³ P	0	467189,44 ^A	330568,51	330318,70 ^a	0,000 ^A	0,000
5p ⁵ 8s	3/2 [3/2] ^o	³ P ^o	2	375884,16 ^A	333003,71	333008,70 ^a	1,501 ^A	1,501
5p ⁵ 8s	3/2 [3/2] ^o	¹ P ^o	1	375893,88 ^A	333321,99	333299,40 ^a	1,167 ^A	1,172
5p ⁵ 8s	1/2 [1/2] ^o	³ P ^o	0	394185,25 ^A	354201,78	354205,30 ^a	0,000 ^A	0,000
5p ⁵ 8s	1/2 [1/2] ^o	³ P ^o	1	394190,12 ^A	354361,02	354285,80 ^a	1,333 ^A	1,329

^aEpstein ve Reader [4], ^bEliav ve Kaldor [6]



Şekil 3.1. Bu çalışmadan elde edilen enerjilerin (MCHF+BP ve HFR hesaplamaları) Epstein ve Reader [4] ile karşılaştırılması.

3.2. La IV'ün Elektrik Dipol Geçişleri için Dalga Boyları, Salıncı Şiddetleri ve Geçiş Olasılıkları

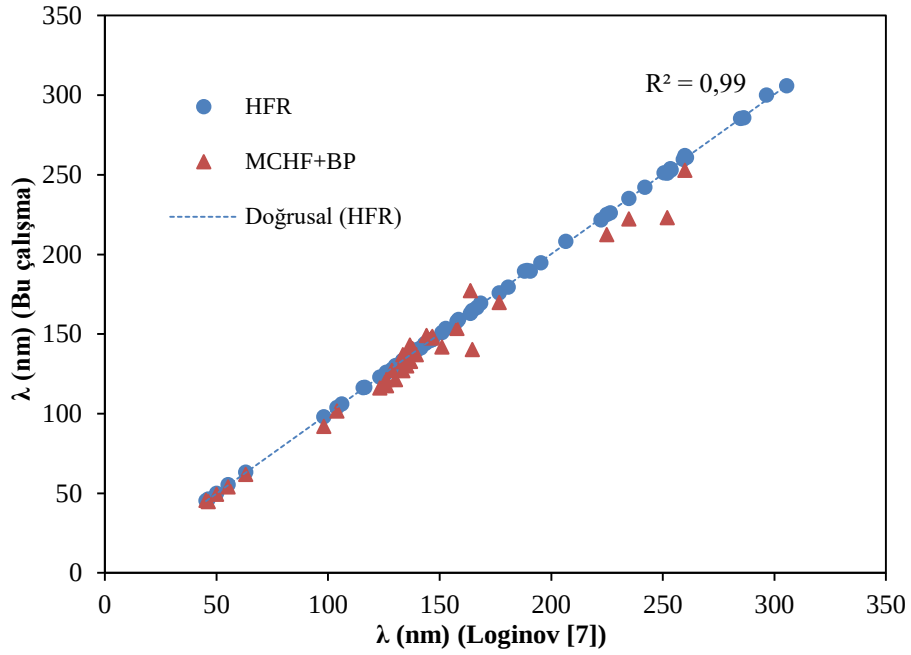
La IV'ün elektrik dipol (E1) geçişlerinin ışıma parametreleri MCHF+BP ve HFR yöntemleriyle hesaplandı ve Tablo 3.2.'de $5p^6 - 5p^56s$, $5p^6 - 5p^55d$, $5p^56p - 5p^56s$ ve $5p^56p - 5p^57s$ ve $5p^56p - 5p^55d$ geçişlerinin λ dalga boyları (nm), $\log(gf)$ logaritmik ağırlıklı salıncı şiddetleri ve A_{ji} geçiş olasılıkları (s^{-1}) sunulmaktadır [11]. Bu tabloda diğer çalışmalarla da bir karşılaştırma yapılmıştır. Diğer çalışmalarla karşılaştırmak için elde edilen ağırlıklı geçiş olasılıkları (gA_{ji}) üst seviyenin istatistiksel ağırlığına ($g_j = 2j+1$) bölümü alınarak sunulmuştur. Tabloda sadece tek pariteli seviyeler “o” indisıyla belirtilmektedir ve geçiş olasılıkları için 10'un kuvvetleri parantez içinde yazılmaktadır.

MCHF+BP hesaplamalarında seviye enerjileri Kısım 3.1. anlatıldığı gibi elde edildikten sonra izinli geçişleri hesaplamak için zıt pariteli seviyeler için elektrik

dipol (E1) geiş iřlemcilerinin matris elemanlarının aısal integralleri ve tm matris elemanları hesaplandı. Geiş matris elemanlarıyla zıt pariteli haller iin verilen dalga fonksiyonları kullanılarak *LSJ* iftlenimine gre A ve B hesabında mmkn 930 tane E1 geiřleri elde edildi. Ağırlıklı salınıcı řiddetleri logaritmik ağırlıklı salınıcı řiddetlerine evrildi. Elde edilen sonular, bazı geiřler hari olmak zere diğerk alıřmalarla ve HFR sonularıyla uyumludur. Tabloda uyumun iyi olduėu alıřma verildi ve st indis olarak hangi alıřma sonucu oldu belirtildi. Genel olarak B alıřma sonularında dalga boyu sonuları uyumlu iken, A alıřmasında logaritmik ağırlıklı salınıcı řiddetleri ve geiş olasılıkları daha uyumludur. Elde edilen sonuların doėruluėunu gstermek iin λ (MCHF+BP) / λ ([7]) oran ortalaması 0,93 olarak hesapladı. Ayrıca, E1 geiřlerinin dalga boyları karřılařtırması řekil 3.2.’te gsterilmektedir. Logaritmik ağırlıklı salınıcı řiddetleri sonularının HFR ile uyumun iyi olduėu grlmektedir. Geiş olasılıkları karřılařtırma deėerleri ile karřılařtırıldığında uyumun az olduėu grld.

HFR program paketiyle [15] hesaplanan veriler ile enerji seviyeleri ve zvektrleri hesaplamak iin J toplam aısal momentumun olası her deėeri iin enerji matrisi kurulduktan sonra zıt pariteli seviyeler arasında yapılan izinli geiş hesabında 927 tane mmkn E1 ıřımalı spektrumunun dalga boyları, salınıcı řiddetleri ve geiş olasılıkları hesaplandı. En-kk kareler yntemi ile bir uydurulmasını yaparak radyal enerji parametreleri deėiřtirildi. Elde edilen en kk kareler uydurma parametrelerinin sonuları atomik spektrumlarının hesaplanmasında tekrar kullanıldı. Tablo 3.2.’deki dalga boyu verileri, Loginov [7]’nin alıřma sonularıyla karřılařtırıldığında olduka uyumlu olduėu grlmektedir ve λ (HFR) / λ ([8]) oran ortalaması 1,00 olarak bulunmuřtur. Ayrıca, dalga boyları karřılařtırması řekil 3.2.’te gsterilmektedir. Logaritmik ağırlıklı salınıcı řiddetleri sonularının MCHF+BP ile uyumun iyi olduėu grlmektedir. $5p^56p \ ^3D_2 - 5p^55d \ ^3D^o_2$, $5p^56p \ ^3D_3 - 5p^55d \ ^3P^o_2$, $5p^56p \ ^3P_2 - 5p^55d \ ^3D^o_2$ ve $5p^56p \ ^3P_1 - 5p^56s \ ^3P^o_2$ geiřleri hari, geiş olasılıkları iin A_{ji} (HFR) / A_{ji} ([8]) oran ortalaması 1,12 olarak bulunmuřtur. Bu oran sonuların uyumunun bir gstergesidir.

Tablo 3.3.'de MCHF+BP ve HFR hesaplamalarından elde edilen $5p^54f - 5p^55d$, $5p^54f - 5p^56s$, $5p^54f - 5p^56d$, $5p^56p - 5p^56s$ ve $5p^56p - 5p^55d$ ve $5p^56p - 5p^56d$ geçişleri yeni veriler olarak sunulmuştur. Tabloda sadece tek pariteli seviyeler “0” indisiyle belirtilmektedir ve geçiş olasılıkları için 10’un kuvvetleri parantez içinde yazılmaktadır. Bu tablodaki verilerin birbiriyle uyumlu olduğu görülmüştür.



Şekil 3.2. Bu çalışmadan elde edilen dalga boylarının (MCHF+BP ve HFR hesaplamaları) Loginov [7] ile karşılaştırılması.

3.3. La IV'ün Elektrik Kuadrupol ve Manyetik Dipol Geçişleri için Dalga Boyları, Salıncı Şiddetleri ve Geçiş Olasılıkları

La IV'ün elektrik kuadrupol (E2) ve manyetik dipol (M1) geçişlerine ait dalga boyları, salıncı şiddetleri ve geçiş olasılıkları MCHF+BP ve HFR yöntemleriyle hesaplandı. Bazı $5p^55d - 5p^56d$, $5p^56s - 5p^56d$, $5p^6 - 5p^56p$, $5p^6 - 5p^57p$, $5p^56p - 5p^57p$, $5p^55d - 5p^55d$, $5p^56s - 5p^56s$, $5p^56d - 5p^56d$, $5p^57s - 5p^57s$, $5p^56p - 5p^56p$ ve $5p^54f - 5p^54f$ yasaklı (E2, M1) geçişlerinin λ dalga boyları (Å), $\log(gf)$ logaritmik ağırlıklı salıncı şiddetleri ve gA_{ji} ağırlıklı geçiş olasılıkları (s^{-1}) Tablo 3.4.'te sunulmaktadır. Tabloda sadece tek pariteli seviyeler “0” indisiyle belirtilmektedir ve

geçiş olasılıkları için 10'un kuvvetleri parantez içinde yazılmaktadır. La IV'ün yasak geçişleri Karaçoban Usta ve Eser [9]'daki verilerle karşılaştırmalı olarak verilmiştir. MCHF+BP hesaplamalarında seviye enerjileri elde edildikten sonra yasaklı geçişlerini hesaplamak için aynı pariteli seviyeler için ayrı ayrı olarak elektrik kuadrupol (E2) ve manyetik dipol (M1) geçiş işlemcilerinin matris elemanlarının açısıl integralleri ve tüm matris elemanları hesaplandı. Geçiş matris elemanlarıyla *LSJ* çiftlenimine göre mümkün 1700 (A çalışması) ve 1572 (B çalışması) E2 ve 1104 (A çalışması) ve 1156 (B çalışması) M1 geçişleri elde edildi. Elde edilen ağırlıklı salınıcı şiddetleri logaritmik ağırlıklı salınıcı şiddetlerine çevrildi. Tabloda sadece A çalışmasına ait veriler verildi. MCHF+BP sonuçlarında ağırlıklı salınıcı şiddetleri logaritmik ağırlıklı salınıcı şiddetlerine ve geçiş olasılıkları ağırlıklı geçiş olasılıklarına çevrilerek sunuldu. Elde edilen sonuçlar, bazı geçişler hariç olmak üzere diğer çalışmalarla uyumludur. Elde edilen sonuçların doğruluğunu göstermek için yapılan oran ortalaması hesaplamasında λ (MCHF+BP) / λ ([9])'un oran ortalaması 0,98, $\log(gf)$ (MCHF+BP) / $\log(gf)$ ([9])'un oran ortalaması 1,00 ve gA_{ji} (MCHF+BP) / gA_{ji} ([9])'un oran ortalaması 1,54 elde edilmiştir.

HFR program paketiyle [15] aynı pariteli seviyeler arasında yapılan yasaklı geçiş hesabında 1224 tane mümkün E1 ve 932 tane mümkün M1 ışımalı spektrumunun dalga boyları, salınıcı şiddetleri ve geçiş olasılıkları hesaplandı. Hesaplama en küçük kareler yöntemiyle elde edilen enerji değerleri deneysel verilere uydurma yapılarak elde edilen parametrelerle geçişler tekrar hesaplandı. Elde edilen bu sonuçların bir kısmının dalga boyları, logaritmik ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve geçiş olasılıkları Tablo 3.4.'te verilmektedir. Elde edilen veriler [9]'daki sunulan sonuçlarla karşılaştırıldığında tüm hesaplamalar için elde edilen sonuçların uyumlu olduğu görülmektedir. λ (HFR) / λ ([9]) ve $\log(gf)$ (HFR) / $\log(gf)$ ([9]) oran ortalaması 1,00 olarak bulunmuştur. Geçiş olasılıklarının gA_{ji} (HFR) / gA_{ji} ([9]) oran ortalaması 0,96 elde edilmiştir. Bu sonuçlarda uyumun oldukça iyi olduğunu göstermektedir.

Yeni veriler sunmak için Tablo 3.5.'te HFR hesaplamalarından elde edilen $5p^54f - 5p^54f$, $5p^54f - 5p^55f$, $5p^54f - 5p^56p$ ve $5p^54f - 5p^57p$ yasaklı geçişleri verilmiştir. Bu

tabloda sadece ağırlıklı geçiş olasılığı 10^0 ile 10^3 aralığında olan geçişler sunulmuştur ve geçiş olasılıkları için 10'un kuvvetleri parantez içinde yazılmıştır.

MCHF+BP ve HFR hesaplamalarında değerlik elektronları arasındaki karşılıklı etkileşmeleri içermektedir. Elektronlar arasındaki karşılıklı etkileşme etkileri ve relativistik etkiler elementlerin spektrumlarında önemli rol oynamaktadır. Bu yüzden her iki hesaplamada da öz-değerlik ve öz-öz elektronları arasındaki karşılıklı etkileşmelerde hesaba dahil edilerek hem izinli (E1) geçişlerde hem de yasaklı (E2, M1) geçişlerdeki uyumsuzluklar iyileştirilebilir.

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

Tablo 3.2. La IV'ün elektrik dipol (E1) geçişleri için λ dalga boyları (Å), $\log(gf)$ logaritmik ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve A_{ji} geçiş olasılıkları (s^{-1})

Geçişler				λ (nm)			$\log(gf)$		A_{ji} (s ⁻¹)		
Üst Seviye		Alt seviye		Bu çalışma		Diğer	Bu çalışma		Bu çalışma		Diğer
Konf.	Terim	Konf.	Terim	MCHF+BP	HFR	çalışmalar	MCHF+BP	HFR	MCHF+BP	HFR	çalışmalar
5p ⁵ 6s	¹ P ₀₁	5p ⁶	¹ S ₀	49,416 ^B	49,967	49,949 ^a 49,954 ^b	-0,322 ^A	-0,288	3,98(9) ^A	4,58(9)	3,79(9) ^a 3,99(9) ^{c1} 4,65(9) ^{c2}
5p ⁵ 6s	³ P ₀₁	5p ⁶	¹ S ₀	45,549 ^B	45,335	45,356 ^a 45,350 ^b	-0,662 ^A	-0,126	2,33(9) ^A	8,09(9)	3,40(9) ^a 1,05(10) ^{c1} 5,44(9) ^{c2}
5p ⁵ 5d	¹ P ₀₁	5p ⁶	¹ S ₀	44,715 ^A	46,310	46,314 ^a 46,314 ^b	0,782 ^A	0,812	6,75(10) ^A	6,72(10)	8,67(10) ^a 5,04(10) ^{c1} 6,76(10) ^{c2}
5p ⁵ 5d	³ D ₀₁	5p ⁶	¹ S ₀	53,896 ^A	55,293	55,204 ^a 55,202 ^b	-0,526 ^A	-0,442	2,279(9) ^A	2,63(9)	3,65(9) ^a 2,05(9) ^{c1} 1,64(9) ^{c2}
5p ⁵ 5d	³ P ₀₁	5p ⁶	¹ S ₀	61,733 ^A	63,163	63,122 ^a 63,126 ^b	-2,335 ^B	-2,486	2,98(7) ^B	1,82(7)	4,10(7) ^a 1,69(7) ^{c1} 2,92(7) ^{c2}
5p ⁵ 6p	³ S ₁	5p ⁵ 5d	¹ D ₀₂	—	159,118	158,456 ^a 158,511 ^b	—	-1,511	—	2,71(7)	4,06(7) ^a
5p ⁵ 6p	³ S ₁	5p ⁵ 5d	³ P ₀₀	137,009 ^B	133,322	133,525 ^a 133,496 ^b	-0,289 ^A	-0,637	3,42(8) ^A	2,89(8)	2,93(8) ^a
5p ⁵ 6p	³ S ₁	5p ⁵ 5d	³ P ₀₁	140,726 ^B	137,495	137,760 ^a 137,749 ^b	-0,055 ^A	-0,306	5,72(9) ^A	5,82(8)	5,87(8) ^a

Tablo 3.2. (Devamı)

Geçişler				λ (nm)		$\log(gf)$		A_{ji} (s^{-1})			
Üst Seviye		Alt seviye		Bu çalışma		Diğer	Bu çalışma		Bu çalışma		Diğer
Konf.	Terim	Konf.	Terim	MCHF+BP	HFR	çalışmalar	MCHF+BP	HFR	MCHF+BP	HFR	çalışmalar
5p ⁵ 6p	³ S ₁	5p ⁵ 5d	³ P ₂	148,499 ^B	146,463	146,656 ^a 146,754 ^b	-0,024 ^A	-0,265	5,89(9) ^A	5,63(8)	3,54(8) ^a
5p ⁵ 6p	³ S ₁	5p ⁵ 6s	³ P ₀	228,399 ^B	305,896	305,536 ^a 305,668 ^b	-0,086 ^A	0,051	3,78(9) ^A	2,67(8)	3,13(8) ^a
5p ⁵ 7s	³ P ₀	5p ⁵ 6p	³ S ₁	177,182 ^A	162,914	163,776 ^a 163,742 ^b	-2,496 ^A	-0,258	1,354(6) ^A	2,78(8)	3,35(8) ^a
5p ⁵ 6p	³ D ₂	5p ⁵ 5d	¹ F ₀	222,133 ^B	235,092	234,814 ^a 234,836 ^b	-1,328 ^A	-1,479	1,32(8) ^A	8,02(6)	3,95(6) ^a
5p ⁵ 6p	³ D ₂	5p ⁵ 5d	³ D ₀	115,686 ^B	166,530	166,575 ^a 166,484 ^b	-2,098 ^A	-1,077	2,73(8) ^A	4,03(7)	3,09(7) ^a
5p ⁵ 6p	³ D ₂	5p ⁵ 5d	³ D ₀	—	221,653	222,225 ^a 222,112 ^b	—	-1,109	—	2,11(7)	2,02(6) ^a
5p ⁵ 6p	³ D ₂	5p ⁵ 5d	³ F ₀	147,491 ^B	146,204	146,302 ^a 146,347 ^b	0,433 ^A	0,113	1,02(10) ^A	8,09(8)	7,61(8) ^a
5p ⁵ 6p	³ D ₂	5p ⁵ 5d	¹ D ₀	—	153,405	152,682 ^a 152,719 ^b	—	-0,444	—	2,04(8)	1,87(8) ^a
5p ⁵ 6p	³ D ₂	5p ⁵ 5d	³ P ₀	132,481 ^B	133,209	133,374 ^a 133,353 ^b	-0,403 ^A	-0,908	1,63(9) ^A	9,29(7)	4,55(7) ^a
5p ⁵ 6p	³ D ₂	5p ⁵ 6s	³ P ₀	—	285,460	284,768 ^a 284,830 ^b	-0,139 ^A	-0,055	2,03(9) ^A	1,44(8)	1,68(8) ^a
5p ⁵ 7s	³ P ₀	5p ⁵ 6p	³ D ₂	—	169,388	168,392 ^a 168,417 ^b	—	-0,226	—	4,60(8)	5,04(8) ^a

Tablo 3.2. (Devamı)

Geçişler				λ (nm)		$\log(gf)$		A_{ji} (s^{-1})			
Üst Seviye		Alt seviye		Bu çalışma		Diğer	Bu çalışma		Bu çalışma		Diğer
Konf.	Terim	Konf.	Terim	MCHF+BP	HFR	çalışmalar	MCHF+BP	HFR	MCHF+BP	HFR	çalışmalar
5p ⁵ 6p	³ D ₃	5p ⁵ 5d	³ D ^o ₃	153,492 ^B	157,916	157,789 ^a 157,592 ^b	-0,548 ^A	-0,665	8,574(8) ^A	8,26(7)	7,92(7) ^a
5p ⁵ 6p	³ D ₃	5p ⁵ 5d	³ F ^o ₄	132,703 ^B	137,416	136,926 ^a 136,804 ^b	0,577 ^A	0,325	1,279(10) ^A	1,06(9)	1,07(9) ^a
5p ⁵ 6p	³ D ₃	5p ⁵ 5d	³ F ^o ₃	136,934 ^B	139,523	139,481 ^a 139,432 ^b	-0,338 ^A	-0,515	1,512(9) ^A	1,49(8)	1,43(8) ^a
5p ⁵ 6p	³ D ₃	5p ⁵ 5d	³ P ^o ₂	129,887 ^B	135,332	135,288 ^a 135,276 ^b	-1,639 ^B	-0,579	1,296(7) ^B	1,37(8)	2,96(7) ^a
5p ⁵ 7s	³ P ^o ₂	5p ⁵ 6p	³ D ₃	—	179,320	180,736 ^a 180,866 ^b	—	0,166	—	6,07(8)	5,96(8) ^a
5p ⁵ 6p	¹ P ₁	5p ⁵ 5d	³ D ^o ₁	169,759 ^B	175,749	176,683 ^a 176,765 ^b	—	-0,591	—	1,85(8)	1,12(8) ^a
5p ⁵ 6p	¹ P ₁	5p ⁵ 5d	¹ D ^o ₂	—	143,785	143,186 ^a 143,255 ^b	—	-0,121	—	8,14(8)	7,41(8) ^a
5p ⁵ 6p	¹ P ₁	5p ⁵ 5d	³ F ^o ₂	—	189,855	189,147 ^a 189,147 ^b	—	-1,700	—	1,23(7)	5,76(6) ^a
5p ⁵ 6p	¹ P ₁	5p ⁵ 5d	³ P ^o ₁	121,270 ^B	125,894	126,071 ^a 126,079 ^b	-1,407 ^A	-1,634	3,38(8) ^A	3,26(7)	4,35(6) ^a
5p ⁵ 6p	¹ P ₁	5p ⁵ 5d	³ P ^o ₂	126,998 ^B	133,372	133,481 ^a 133,496 ^b	-0,393 ^A	-0,986	3,36(9) ^A	1,29(8)	1,88(8) ^a
5p ⁵ 6p	¹ P ₁	5p ⁵ 6s	³ P ^o ₂	181,212 ^B	253,853	253,422 ^a 253,275 ^b	-3,450 ^A	-2,033	2,28(5) ^A	3,20(6)	3,38(6) ^a

Tablo 3.2. (Devamı)

Geçişler				λ (nm)		$\log(gf)$		A_{ji} (s^{-1})			
Üst Seviye		Alt seviye		Bu çalışma		Diğer	Bu çalışma		Bu çalışma		Diğer
Konf.	Terim	Konf.	Terim	MCHF+BP	HFR	çalışmalar	MCHF+BP	HFR	MCHF+BP	HFR	çalışmalar
5p ⁵ 6p	³ P ₂	5p ⁵ 5d	³ D ₀₃	141,741 ^B	150,822	150,949 ^a 150,787 ^b	0,362 ^A	0,148	1,05(10) ^A	8,25(8)	7,04(8) ^a
5p ⁵ 6p	³ P ₂	5p ⁵ 5d	³ D ₀₂	—	194,667	195,259 ^a 195,080 ^b	—	-0,655	—	7,79(7)	1,18(7) ^a
5p ⁵ 6p	³ P ₂	5p ⁵ 5d	¹ D ₀₂	—	139,976	139,450 ^a 139,432 ^b	—	-3,792	—	1,10(5)	2,64(5) ^a
5p ⁵ 6p	³ P ₂	5p ⁵ 5d	³ P ₀₁	116,130 ^B	122,965	123,166 ^a 123,090 ^b	-2,723 ^B	-1,161	1,87(6) ^B	6,09(7)	1,01(8) ^a
5p ⁵ 6p	³ P ₂	5p ⁵ 5d	³ P ₀₂	121,372 ^B	130,088	130,228 ^a 130,231 ^b	-1,031 ^A	-0,536	4,984(8) ^A	2,29(8)	3,60(8) ^a
5p ⁵ 6p	³ P ₂	5p ⁵ 6s	¹ P ₀₁	—	253,088	253,732 ^a 253,576 ^b	—	0,030	—	2,23(8)	2,36(8) ^a
5p ⁵ 6p	³ P ₂	5p ⁵ 6s	³ P ₀₂	181,127 ^B	242,217	241,950 ^a 241,758 ^b	0,213 ^A	0,143	6,532(9) ^A	3,16(8)	1,68(8) ^a
5p ⁵ 7s	¹ P ₀₁	5p ⁵ 6p	³ P ₂	—	189,459	188,073 ^a 188,157 ^b	—	-0,309	—	3,04(8)	2,68(8) ^a
5p ⁵ 7s	³ P ₀₂	5p ⁵ 6p	³ P ₂	—	189,439	190,631 ^a 190,744 ^b	—	-0,069	—	3,17(8)	2,08(8) ^a
5p ⁵ 6p	³ P ₀	5p ⁵ 6s	¹ P ₀₁	—	226,024	226,382 ^a 226,591 ^b	—	-0,243	—	7,47(8)	7,67(8) ^a
5p ⁵ 7s	¹ P ₀₁	5p ⁵ 6p	³ P ₀	—	208,114	206,572 ^a 206,650 ^b	—	-0,713	—	9,94(7)	9,08(7) ^a

Tablo 3.2. (Devamı)

Geçişler				λ (nm)		$\log(gf)$		A_{ji} (s^{-1})			
Üst Seviye		Alt seviye		Bu çalışma		Diğer	Bu çalışma		Bu çalışma		Diğer
Konf.	Terim	Konf.	Terim	MCHF+BP	HFR	çalışmalar	MCHF+BP	HFR	MCHF+BP	HFR	çalışmalar
5p ⁵ 6p	³ D ₁	5p ⁵ 5d	¹ P ^o ₁	–	260,889	260,583 ^a 260,801 ^b	–	-0,647	–	7,36(7)	2,24(7) ^a
5p ⁵ 6p	³ D ₁	5p ⁵ 5d	³ D ^o ₁	143,092 ^B	136,213	136,705 ^a 136,804 ^b	-1,878 ^B	-1,296	1,438(7) ^B	6,05(7)	6,11(7) ^a
5p ⁵ 6p	³ D ₁	5p ⁵ 5d	¹ D ^o ₂	–	116,193	115,753 ^a 115,835 ^b	–	-1,629	–	3,87(7)	4,03(7) ^a
5p ⁵ 6p	³ D ₁	5p ⁵ 5d	³ F ^o ₂	149,037 ^B	144,536	144,112 ^a 144,163 ^b	-0,098 ^A	-0,021	5,540(9) ^A	1,02(9)	9,83(8) ^a
5p ⁵ 6p	³ D ₁	5p ⁵ 6s	³ P ^o ₀	216,335 ^B	285,691	286,286 ^a 286,330 ^b	–	-0,307	–	1,34(8)	1,44(8) ^a
5p ⁵ 7s	¹ P ^o ₁	5p ⁵ 6p	³ D ₁	252,716 ^A	262,059	259,808 ^a 259,750 ^b	-2,064 ^A	-2,420	2,99(5) ^A	1,23(6)	8,19(5) ^a
5p ⁵ 6p	³ P ₁	5p ⁵ 5d	³ D ^o ₁	127,086 ^B	127,799	128,654 ^a 128,319 ^b	-1,020 ^A	-1,289	7,66(8) ^A	7,00(7)	5,79(7) ^a
5p ⁵ 6p	³ P ₁	5p ⁵ 5d	³ D ^o ₂	–	141,192	141,535 ^a 141,458 ^b	–	-0,041	–	1,02(9)	1,08(9) ^a
5p ⁵ 6p	³ P ₁	5p ⁵ 5d	³ P ^o ₂	101,501 ^B	103,813	103,920 ^a 103,930 ^b	-1,333 ^A	-1,511	4,54(8) ^A	6,35(7)	1,07(8) ^a
5p ⁵ 6p	³ P ₁	5p ⁵ 6s	³ P ^o ₂	140,174 ^B	164,633	164,553 ^a 164,521 ^b	-0,331 ^A	-0,905	3,60(9) ^A	1,02(8)	3,52(7) ^a
5p ⁵ 6p	³ P ₁	5p ⁵ 6s	³ P ^o ₀	222,969 ^B	251,027	251,959 ^a 251,502 ^b	0,100	-0,042	7,76(9)	3,21(8)	3,55(8) ^a

Tablo 3.2. (Devamı)

Geçişler				λ (nm)		$\log(gf)$		A_{ji} (s^{-1})			
Üst Seviye		Alt seviye		Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma		Bu çalışma		Diğer çalışmalar
Konf.	Terim	Konf.	Terim	MCHF+BP	HFR		MCHF+BP	HFR	MCHF+BP	HFR	
5p ⁵ 6p	³ P ₁	5p ⁵ 6s	³ P _{0,1}	–	259,599	259,217 ^a 259,130 ^b	–	-0,317	–	1,59(8)	1,90(8) ^a
5p ⁵ 7s	¹ P _{0,1}	5p ⁵ 6p	³ P ₁	–	300,067	296,464 ^a 296,258 ^b	-3,229 ^A	-3,425	2,57(3) ^A	9,27(4)	1,63(5) ^a
5p ⁵ 6p	¹ D ₂	5p ⁵ 5d	¹ F _{0,3}	–	146,225	146,099 ^a 146,215 ^b	–	0,223	–	1,43(9)	9,39(8) ^a
5p ⁵ 6p	¹ D ₂	5p ⁵ 5d	³ D _{0,3}	–	116,413	116,424 ^a 116,429 ^b	–	-3,158	–	6,84(5)	5,37(5) ^a
5p ⁵ 6p	¹ D ₂	5p ⁵ 5d	³ F _{0,3}	–	106,102	106,144 ^a 106,209 ^b	–	-1,483	–	3,89(7)	5,88(7) ^a
5p ⁵ 6p	¹ S ₀	5p ⁵ 5d	¹ P _{0,1}	212,396 ^B	224,949	224,859 ^a 224,495 ^b	-2,159 ^B	-0,478	1,02(7) ^B	4,38(8)	2,52(8) ^a
5p ⁵ 6p	¹ S ₀	5p ⁵ 5d	³ D _{0,1}	117,401 ^B	125,725	126,188 ^a 126,112 ^b	-0,828 ^A	-1,214	9,97(9) ^A	2,57(8)	3,09(8) ^a
5p ⁵ 6p	¹ S ₀	5p ⁵ 5d	³ P _{0,1}	91,969 ^B	97,971	98,069 ^a 98,003 ^b	-2,547 ^A	-2,507	2,20(8) ^A	2,16(7)	8,46(7) ^a
5p ⁵ 6p	¹ S ₀	5p ⁵ 6s	³ P _{0,1}	168,129 ^B	251,183	250,530 ^a 250,281 ^b	-0,325 ^A	-0,232	2,43(10)	6,20(8)	5,65(8) ^a

^aLoginov [7], ^bNIST [17], ^{c1}Biémont ve ark. [2, HFR+CP (B)], ^{c2}Biémont ve ark. [2, MCDF]

Tablo 3.3. La IV'ün bazı yeni E1 geçişleri için λ dalga boyları (Å), $\log(gf)$ logaritmik ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve A_{ji} geçiş olasılıkları (s^{-1})

Geçişler						λ (Å)		$\log(gf)$		A_{ji} (s^{-1})	
Üst seviye			Alt seviye			Bu çalışma		Bu çalışma		Bu çalışma	
Konf.	Terim	J	Konf.	Terim	J	MCHF+BP	HFR	MCHF+BP	HFR	MCHF+BP	HFR
5p ⁵ 4f	³ D	1	5p ⁵ 5d	³ P ^o	0	7996,27 ^A	7813,73	-1,767 ^A	-1,618	1,78(6) ^A	0,88(6)
5p ⁵ 4f	³ D	1	5p ⁵ 5d	³ P ^o	1	6928,05 ^A	6633,61	-1,745 ^A	-1,575	8,32(5) ^A	1,34(6)
5p ⁵ 4f	³ D	2	5p ⁵ 5d	³ P ^o	1	8647,47 ^A	8080,86	-1,486 ^A	-1,321	9,71(5) ^A	9,75(5)
5p ⁵ 4f	³ D	2	5p ⁵ 5d	³ P ^o	2	6543,00 ^A	5942,41	-1,647 ^A	-1,422	7,02(5) ^A	1,43(6)
5p ⁵ 4f	³ D	3	5p ⁵ 5d	³ P ^o	2	9332,08 ^A	7889,83	-0,533 ^A	-1,058	8,34(5) ^A	1,34(6)
5p ⁵ 4f	³ G	5	5p ⁵ 5d	³ F ^o	4	7553,35 ^A	6623,60	-0,833 ^A	-0,643	1,90(6) ^A	3,14(6)
5p ⁵ 4f	³ G	4	5p ⁵ 5d	³ F ^o	3	6615,25 ^A	6332,98	-0,904 ^A	-0,758	3,57(5) ^A	3,22(6)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 5d	³ F ^o	2	7213,60 ^A	6704,08	-1,082 ^A	-0,917	2,12(6) ^A	2,56(6)
5p ⁵ 4f	³ D	3	5p ⁵ 5d	³ D ^o	3	4433,45 ^A	4302,56	-1,581 ^A	-1,414	1,27(6) ^A	1,98(6)
5p ⁵ 4f	³ D	1	5p ⁵ 5d	³ D ^o	1	2632,44 ^A	2659,08	-2,222 ^A	-2,273	1,92(6) ^A	1,68(6)
5p ⁵ 4f	³ D	2	5p ⁵ 5d	³ D ^o	1	2847,57 ^A	2864,74	-2,560 ^A	-2,401	7,54(5) ^A	6,46(5)
5p ⁵ 4f	³ F	2	5p ⁵ 5d	³ D ^o	1	5453,01 ^A	4913,38	-1,267 ^A	-1,057	4,04(6) ^A	4,85(6)
5p ⁵ 4f	³ F	4	5p ⁵ 5d	¹ F ^o	3	6618,39 ^A	2960,44	-2,635 ^B	-1,958	2,39(6) ^B	0,93(6)
5p ⁵ 4f	³ D	3	5p ⁵ 6s	³ P ^o	2	2917,74 ^A	2072,11	-1,618 ^B	-2,080	1,28(7) ^B	1,29(7)
5p ⁵ 4f	³ D	2	5p ⁵ 6s	¹ P ^o	1	1517,14 ^B	1845,45	-2,625 ^A	-2,720	1,00(6) ^A	0,75(6)
5p ⁵ 4f	³ F	2	5p ⁵ 5d	¹ P ^o	1	1821,65 ^B	1803,87	-1,188 ^A	-1,313	4,58(7) ^A	1,99(7)
5p ⁵ 4f	¹ D	2	5p ⁵ 5d	¹ P ^o	1	2315,73 ^A	2442,95	-0,883 ^A	-0,806	5,42(7) ^A	3,50(7)
5p ⁵ 4f	³ D	1	5p ⁵ 6s	³ P ^o	0	1622,11 ^A	1315,47	-2,811 ^A	-2,854	1,99(6) ^B	1,80(6)
5p ⁵ 4f	³ D	2	5p ⁵ 6s	³ P ^o	1	1644,26 ^A	1339,87	-2,764	-2,803	1,42(6) ^A	1,17(6)
5p ⁵ 4f	¹ D	2	5p ⁵ 6s	³ P ^o	1	3248,16 ^A	2194,09	-2,834 ^B	-2,523	1,39(6) ^B	0,83(6)
5p ⁵ 4f	³ D	1	5p ⁵ 6d	³ P ^o	0	698,70 ^A	709,20	-2,688 ^A	-3,175	2,80(7) ^A	2,96(6)
5p ⁵ 4f	³ D	1	5p ⁵ 6d	³ P ^o	1	695,52 ^A	705,58	-2,690 ^A	-3,163	5,17(6) ^B	3,07(6)

Tablo 3.3. (Devamı)

Geçişler						λ (Å)		$\log(gf)$		A_{ji} (s ⁻¹)	
Üst seviye			Alt seviye			Bu çalışma		Bu çalışma		Bu çalışma	
Konf.	Terim	J	Konf.	Terim	J	MCHF+BP	HFR	MCHF+BP	HFR	MCHF+BP	HFR
5p ⁵ 4f	³ D	2	5p ⁵ 6d	³ P ^o	1	709,68 ^A	719,28	-2,385 ^A	-2,824	1,39(7) ^B	0,39(7)
5p ⁵ 4f	³ G	5	5p ⁵ 6d	³ F ^o	4	725,36 ^A	730,28	-1,777 ^A	-2,186	1,67(7) ^B	0,74(7)
5p ⁵ 4f	³ D	3	5p ⁵ 6d	³ F ^o	4	730,07 ^A	737,30	-3,192 ^A	-2,766	0,89(6) ^A	3,00(6)
5p ⁵ 4f	³ D	2	5p ⁵ 6d	³ F ^o	3	703,44 ^A	713,41	-3,410 ^A	-3,030	0,75(6) ^A	2,45(6)
5p ⁵ 4f	³ G	4	5p ⁵ 6d	³ F ^o	3	724,48 ^A	730,38	-1,911 ^B	-2,096	1,31(7) ^B	1,11(7)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 6d	³ F ^o	3	750,70 ^A	752,84	-2,933 ^A	-3,165	1,17(6) ^B	1,15(6)
5p ⁵ 4f	³ D	2	5p ⁵ 6d	³ P ^o	2	704,64 ^A	713,40	-2,616 ^A	-3,041	6,50(6) ^A	2,38(6)
5p ⁵ 4f	³ D	3	5p ⁵ 6d	³ P ^o	2	728,08 ^A	735,18	-2,167 ^A	-2,597	1,19(7) ^B	4,46(6)
5p ⁵ 4f	³ D	1	5p ⁵ 6d	¹ D ^o	2	683,95 ^A	693,75	-3,542 ^A	-3,421	0,82(6) ^A	1,75(6)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 6d	¹ D ^o	2	744,11 ^A	745,70	-2,169 ^A	-2,398	1,63(7) ^A	0,69(7)
5p ⁵ 4f	³ F	2	5p ⁵ 6d	¹ D ^o	2	790,14 ^A	788,09	-3,025 ^A	-2,863	2,02(6) ^A	2,94(6)
5p ⁵ 4f	³ D	3	5p ⁵ 6d	³ D ^o	3	719,48 ^A	726,14	-1,669 ^A	-3,056	2,41(6) ^B	1,59(6)
5p ⁵ 4f	³ D	2	5p ⁵ 6d	¹ P ^o	1	680,82 ^A	690,46	-3,232	-3,245	1,26(6) ^B	1,59(6)
5p ⁵ 4f	³ F	2	5p ⁵ 6d	¹ P ^o	1	768,62 ^A	767,59	-1,739 ^A	-1,412	6,86(7) ^A	8,76(7)
5p ⁵ 4f	¹ D	2	5p ⁵ 6d	¹ P ^o	1	855,79 ^A	863,75	-2,266 ^A	-1,441	1,64(7) ^A	6,47(7)
5p ⁵ 4f	³ D	1	5p ⁵ 6d	³ F ^o	2	612,39 ^A	609,48	-3,978 ^A	-3,433	3,74(5) ^A	2,21(6)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 6d	³ F ^o	2	660,18 ^A	752,84	-2,856 ^A	-3,165	2,87(6) ^B	1,15(6)
5p ⁵ 4f	¹ D	2	5p ⁵ 6d	³ F ^o	2	766,91 ^A	755,76	-3,562 ^A	-3,231	0,62(6) ^A	1,37(6)
5p ⁵ 4f	³ D	3	5p ⁵ 6d	³ P ^o	2	641,00 ^A	735,18	-2,835 ^B	-2,597	4,74(6) ^A	4,46(6)
5p ⁵ 4f	³ F	3	5p ⁵ 6d	³ P ^o	2	871,37 ^A	870,34	-3,172 ^A	-3,240	1,18(6) ^A	0,72(6)
5p ⁵ 4f	¹ D	2	5p ⁵ 6d	³ P ^o	2	893,77 ^A	899,95	-4,237 ^A	-3,503	1,30(5) ^A	5,17(5)
5p ⁵ 4f	³ F	4	5p ⁵ 6d	³ F ^o	3	746,74 ^A	774,94	-1,962 ^B	-2,983	4,25(5) ^B	1,28(6)

Tablo 3.3. (Devamı)

Geçişler						λ (Å)		$\log(gf)$		A_{ji} (s ⁻¹)	
Üst seviye			Alt seviye			Bu çalışma		Bu çalışma		Bu çalışma	
Konf.	Terim	J	Konf.	Terim	J	MCHF+BP	HFR	MCHF+BP	HFR	MCHF+BP	HFR
5p ⁵ 6d	³ P ^o	1	5p ⁶	¹ S	0	343,25 ^A	350,91	-1.617 ^B	-1,684	4.81(8) ^B	3,74(8)
5p ⁵ 6p	³ S	1	5p ⁵ 5d	³ P ^o	0	1370.09 ^B	1333,22	-0,289 ^A	-0,637	3,42(9) ^A	2,88(8)
5p ⁵ 6p	¹ P	1	5p ⁵ 5d	³ P ^o	0	1184.99 ^B	1223,86	-2.250 ^B	-2,579	8.88(6) ^B	3,91(6)
5p ⁵ 6p	³ D	1	5p ⁵ 5d	³ P ^o	0	1048.58 ^B	1018,09	-1,315 ^A	-1,926	3.56(8) ^B	2,54(7)
5p ⁵ 6p	³ S	1	5p ⁵ 5d	³ P ^o	1	1407.26 ^B	1374,95	-0,056 ^A	-0,306	5,72(9) ^A	0,58(9)
5p ⁵ 6p	³ D	2	5p ⁵ 5d	³ P ^o	1	1324.81 ^B	1332,09	-0.982	-0,908	6,33(8) ^A	0,93(8)
5p ⁵ 6p	¹ P	1	5p ⁵ 5d	³ P ^o	1	1212.70 ^B	1258,94	-1.407 ^A	-1,634	0,75(7) ^B	3,26(7)
5p ⁵ 6p	³ P	2	5p ⁵ 5d	³ P ^o	1	1161.30 ^B	1229,65	-0.968 ^A	-1,161	4,98(8) ^A	0,61(8)
5p ⁵ 6p	³ P	0	5p ⁵ 5d	³ P ^o	1	1062.67 ^B	1162,04	-1,626 ^A	-2,286	6,31(8) ^A	2,56(7)
5p ⁵ 6p	³ D	1	5p ⁵ 5d	³ P ^o	1	1070.22 ^B	1042,24	-0.808 ^B	-1,690	3.02(8) ^B	0,42(8)
5p ⁵ 6p	³ P	1	5p ⁵ 5d	³ P ^o	1	978.09 ^B	992,26	-2.622 ^B	-4,330	5.54(6) ^B	1,06(5)
5p ⁵ 6p	¹ S	0	5p ⁵ 5d	³ P ^o	1	919.69 ^B	979.71	-2,547 ^A	-2.507	2,20(8) ^A	2.16(7)
5p ⁵ 6p	³ S	1	5p ⁵ 5d	³ P ^o	2	1484.99 ^B	1464,64	-0,025 ^A	-0,265	5.89(9) ^A	0,19(9)
5p ⁵ 6p	³ D	2	5p ⁵ 5d	³ P ^o	2	1393.47 ^B	1416,09	-2,637 ^B	-1,690	0,71(7) ^A	1,68(7)
5p ⁵ 6p	³ D	3	5p ⁵ 5d	³ P ^o	2	1298.87 ^B	1353,32	-0,040 ^A	-0,579	0,13(8) ^B	1,72(8)
5p ⁵ 6p	¹ P	1	5p ⁵ 5d	³ P ^o	2	1269.98 ^B	1333,72	-0,393 ^A	-0,986	3.36(9) ^A	0,63(8)
5p ⁵ 6p	³ P	2	5p ⁵ 5d	³ P ^o	2	1213.72 ^B	1300,88	-0.477 ^A	-0,536	1,72(9) ^A	0,23(9)
5p ⁵ 6p	³ D	1	5p ⁵ 5d	³ P ^o	2	1114.59 ^B	1092,97	-1.823 ^B	-2,767	2.68(7) ^B	3,18(6)
5p ⁵ 6p	³ P	1	5p ⁵ 5d	³ P ^o	2	1015.01 ^B	1038,13	-1,343 ^A	-1,511	4.54(8)	0,65(8)
5p ⁵ 6p	³ D	3	5p ⁵ 5d	³ F ^o	4	1327.03 ^B	1374,16	0.577 ^A	0,325	1,28(10) ^A	1,06(9)
5p ⁵ 6p	³ D	2	5p ⁵ 5d	³ F ^o	3	1474.91 ^B	1462,04	0,431 ^A	0,113	1.02(10) ^A	0,81(9)
5p ⁵ 6p	³ D	3	5p ⁵ 5d	³ F ^o	3	1369.34 ^B	1395,22	-0,339 ^A	-0,515	1.51(9) ^A	1,49(8)

Tablo 3.3. (Devamı)

Geçişler						λ (Å)		$\log(gf)$		A_{ji} (s ⁻¹)	
Üst seviye			Alt seviye			Bu çalışma		Bu çalışma		Bu çalışma	
Konf.	Terim	J	Konf.	Terim	J	MCHF+BP	HFR	MCHF+BP	HFR	MCHF+BP	HFR
5p ⁵ 6p	³ P	2	5p ⁵ 5d	³ F ^o	3	1275.04 ^B	1339,56	-3.708 ^A	-2,549	0,97(6) ^A	2,10(6)
5p ⁵ 6p	³ S	1	5p ⁵ 5d	³ F ^o	2	2236.20 ^B	1591,18	-1,291 ^A	-1,511	2,38(8) ^A	2,71(7)
5p ⁵ 6p	³ D	2	5p ⁵ 5d	³ F ^o	2	1556.81 ^B	1534,05	-0.146 ^A	-0,444	2,58(9) ^A	0,20(9)
5p ⁵ 6p	³ D	3	5p ⁵ 5d	³ F ^o	2	1439.66 ^B	1460,66	-1,818 ^A	-2,317	4,83(7) ^A	0,22(7)
5p ⁵ 6p	¹ P	1	5p ⁵ 5d	³ F ^o	2	1404.26 ^B	1437,84	-0,446 ^A	-0,121	2,75(9) ^A	0,81(9)
5p ⁵ 6p	³ D	1	5p ⁵ 5d	³ F ^o	2	1216.69 ^B	1445,36	-0,038 ^A	-0,021	5,32(9) ^A	1,02(9)
5p ⁵ 6p	³ P	1	5p ⁵ 5d	³ F ^o	2	1099.00 ^B	1100,15	-4.082 ^B	-3,157	1,52(5) ^B	1,28(6)
5p ⁵ 6p	³ D	2	5p ⁵ 5d	³ D ^o	3	1156.86 ^B	1665,30	-1,097 ^A	-1,077	2,74(8) ^A	0,40(8)
5p ⁵ 6p	³ D	3	5p ⁵ 5d	³ D ^o	3	1534.92 ^B	1579,16	-0.547 ^A	-0,665	8,57(8) ^A	0,83(8)
5p ⁵ 6p	³ P	2	5p ⁵ 5d	³ D ^o	3	1417.41 ^B	1508,21	0.362 ^A	0,148	1,05(10) ^A	0,82(9)
5p ⁵ 6p	³ S	1	5p ⁵ 5d	³ D ^o	1	2104.98 ^B	2175,34	-1.044 ^A	-2,482	4,37(8) ^A	1,55(6)
5p ⁵ 6p	³ D	2	5p ⁵ 5d	³ D ^o	1	1925.71 ^B	1903,39	-2.197 ^A	-1,982	3,05(7) ^A	0,38(7)
5p ⁵ 6p	¹ P	1	5p ⁵ 5d	³ D ^o	1	1697.59 ^B	1757,49	-0.962 ^A	-0,591	7,31(8) ^A	1,85(8)
5p ⁵ 6p	³ P	0	5p ⁵ 5d	³ D ^o	1	1417.45 ^B	1574,23	-0,293 ^A	-0,538	1,06(10) ^A	7,79(8)
5p ⁵ 6p	³ D	1	5p ⁵ 5d	³ D ^o	1	1430.92 ^B	1362,13	-1.877 ^B	-1,296	1,44(7) ^B	6,05(7)
5p ⁵ 6p	³ P	1	5p ⁵ 5d	³ D ^o	1	1270.86 ^B	1277,99	-1.020 ^A	-1,289	7,66(8) ^A	0,70(8)
5p ⁵ 6p	¹ S	0	5p ⁵ 5d	³ D ^o	1	1174.01 ^B	1257,25	-0.828 ^A	-1,214	9,97(9) ^A	2,58(8)
5p ⁵ 6p	³ P	2	5p ⁵ 5d	³ D ^o	2	1598.54 ^B	1946,67	-2.705 ^B	-1,897	1,03(6) ^B	4,14(6)
5p ⁵ 6p	³ D	2	5p ⁵ 5d	¹ F ^o	3	2221.33 ^A	2350,91	-1,328 ^A	-1,479	1,32(8) ^A	0,80(7)
5p ⁵ 6p	³ D	3	5p ⁵ 5d	¹ F ^o	3	1990.24 ^B	2182,83	-1,866 ^A	-2,065	3,45(7) ^A	1,72(6)
5p ⁵ 6p	¹ P	1	5p ⁵ 5d	¹ P ^o	1	4805.21 ^B	4583,90	-0.434 ^A	-1,00	1,50(9) ^A	1,06(7)
5p ⁵ 6p	³ P	0	5p ⁵ 5d	¹ P ^o	1	3081.38 ^B	3516,28	-1.380 ^A	-0,833	5,33(8) ^A	7,93(7)

Tablo 3.3. (Devamı)

Geçişler						λ (Å)		$\log(gf)$		A_{ji} (s ⁻¹)	
Üst seviye			Alt seviye			Bu çalışma		Bu çalışma		Bu çalışma	
Konf.	Terim	J	Konf.	Terim	J	MCHF+BP	HFR	MCHF+BP	HFR	MCHF+BP	HFR
5p ⁵ 6p	³ D	1	5p ⁵ 5d	¹ P ^o	1	3145.77 ^B	2608,89	-1.696 ^A	-0,647	7,15(7) ^B	7,36(7)
5p ⁵ 6p	³ P	1	5p ⁵ 5d	¹ P ^o	1	2463.64 ^B	2316,75	-0.795 ^A	-0,830	8,23(8) ^A	0,61(8)
5p ⁵ 6p	¹ S	0	5p ⁵ 5d	¹ P ^o	1	2123.96 ^B	2249,49	-2.159 ^B	-0,478	1.02(7) ^B	4,38(8)
5p ⁵ 6p	³ S	1	5p ⁵ 6s	³ P ^o	2	2283.99 ^B	3058,96	-0.085 ^A	0,051	3.78(9) ^A	1,82(7)
5p ⁵ 6p	³ D	2	5p ⁵ 6s	³ P ^o	2	2074.45 ^B	2854,60	-0.052 ^A	-0,055	3,32(9) ^A	1,44(8)
5p ⁵ 6p	³ D	3	5p ⁵ 6s	³ P ^o	2	2007.66 ^B	2610,52	0.340 ^A	0,506	5,79(9) ^A	0,45(9)
5p ⁵ 6p	¹ P	1	5p ⁵ 6s	³ P ^o	2	1812.12 ^B	2538,53	-1.966	-2,033	6.64(7) ^A	3,20(6)
5p ⁵ 6p	³ P	2	5p ⁵ 6s	³ P ^o	2	1699.71 ^B	2422,16	0.150 ^A	0,143	2,71(9) ^A	0,32(9)
5p ⁵ 6p	³ P	1	5p ⁵ 6s	³ P ^o	2	2313.05 ^B	1646,33	-0.330 ^A	-0,905	3.60(9) ^A	1,02(8)
5p ⁵ 6p	³ D	2	5p ⁵ 6s	¹ P ^o	1	1995.28 ^B	3006,82	-0.029 ^A	0,083	1,28(8) ^A	1,79(8)
5p ⁵ 6p	¹ P	1	5p ⁵ 6s	¹ P ^o	1	1984.50 ^B	2658,20	0.119 ^A	0,139	7,97(9) ^A	0,43(9)
5p ⁵ 6p	³ P	2	5p ⁵ 6s	¹ P ^o	1	1850.47 ^B	2530,88	0.246 ^A	0,030	6,66(9) ^A	0,22(9)
5p ⁵ 6p	³ P	0	5p ⁵ 6s	¹ P ^o	1	1612.05 ^B	2260,24	-0.327 ^A	-0,243	8,86(9) ^A	7,47(8)
5p ⁵ 6p	³ D	1	5p ⁵ 6s	¹ P ^o	1	2387.81 ^B	1847,25	-3.468 ^B	-2,348	1.33(5) ^B	2,93(6)
5p ⁵ 6p	¹ S	0	5p ⁵ 6s	¹ P ^o	1	1304.43 ^B	1659,52	-3.155 ^B	-1,745	2.74(6) ^B	4,36(7)
5p ⁵ 6p	³ D	1	5p ⁵ 6s	³ P ^o	0	2163.35 ^B	2856,91	-0.339 ^A	-0,307	2,02(9) ^A	1,34(8)
5p ⁵ 6p	³ P	1	5p ⁵ 6s	³ P ^o	0	1817.31 ^B	2510,27	-0.100 ^A	-0,042	7,76(9) ^A	3,20(8)
5p ⁵ 6p	³ P	0	5p ⁵ 6s	³ P ^o	1	2229.69 ^B	4202,36	-3.564 ^B	-2,804	3.66(5) ^B	5,93(5)
5p ⁵ 6p	³ D	1	5p ⁵ 6s	³ P ^o	1	2836.78 ^B	2968,45	-0.062 ^A	-0,147	3.71(9) ^A	1,80(8)
5p ⁵ 6p	³ P	1	5p ⁵ 6s	³ P ^o	1	2263.21 ^B	2595,99	-0.093 ^A	-0,317	4,85(9) ^A	1,59(8)
5p ⁵ 6p	¹ S	0	5p ⁵ 6s	³ P ^o	1	1681.29 ^B	2511,83	-0.369 ^A	-0,232	2,43(10) ^A	6,20(8)
5p ⁵ 6d	³ P ^o	0	5p ⁵ 6p	³ S	1	1735.21 ^B	1879,71	-1.195 ^A	-0,062	2,56(7) ^A	1,64(9)

Tablo 3.3. (Devamı)

Geçişler						λ (Å)		$\log(gf)$		A_{ji} (s ⁻¹)	
Üst seviye			Alt seviye			Bu çalışma		Bu çalışma		Bu çalışma	
Konf.	Terim	J	Konf.	Terim	J	MCHF+BP	HFR	MCHF+BP	HFR	MCHF+BP	HFR
5p ⁵ 6d	³ P ^o	0	5p ⁵ 6p	¹ P	1	2163.14 ^B	2150,65	-2,373 ^A	-2,012	4,41(6) ^A	1,40(7)
5p ⁵ 6d	³ P ^o	0	5p ⁵ 6p	³ P	1	3780.80 ^B	3865,14	-3,541 ^A	-1,695	4,60(5) ^A	9,01(6)
5p ⁵ 6d	³ P ^o	1	5p ⁵ 6p	³ S	1	1715.75 ^B	1854,50	-0.969 ^A	0,281	4,17(7) ^A	1,23(9)
5p ⁵ 6d	³ P ^o	1	5p ⁵ 6p	³ D	2	1856.63 ^B	3886,31	-2.483 ^B	-3,530	2.12(6) ^B	0,43(5)
5p ⁵ 6d	³ P ^o	1	5p ⁵ 6p	¹ P	1	2132.98 ^B	2117,71	-2.281 ^A	-2,228	5,35(6) ^A	2,93(6)
5p ⁵ 6d	³ P ^o	1	5p ⁵ 6p	³ P	2	2313.05 ^B	2206,13	-1.228 ^A	-0,473	3,98(7) ^A	1,54(8)
5p ⁵ 6d	³ P ^o	1	5p ⁵ 6p	³ P	0	2837.64 ^B	2463,23	-2.086 ^A	-1,564	2,73(7) ^A	1,00(7)
5p ⁵ 6d	³ P ^o	1	5p ⁵ 6p	³ P	1	3689.61 ^B	3865,14	-1.512 ^A	-1,695	4,84(7) ^A	3,00(6)
5p ⁵ 6d	³ F ^o	3	5p ⁵ 6p	³ P	2	1583.31 ^B	2151.77	-1.393 ^A	-0.833	2,63(7) ^A	3,02(7)
5p ⁵ 6d	³ P ^o	2	5p ⁵ 6p	³ D	3	2014.40 ^B	2022,07	-2,021 ^A	-0,472	2.69(6) ^B	1,10(8)
5p ⁵ 6d	³ P ^o	2	5p ⁵ 6p	¹ P	1	2088.06 ^B	2067,48	-0,887 ^A	-0,262	1.29(8) ^A	1,71(8)
5p ⁵ 6d	³ P ^o	2	5p ⁵ 6p	³ P	2	2260.31 ^B	2151,67	-0,620 ^A	0,200	1,57(8) ^A	0,45(9)
5p ⁵ 6d	³ P ^o	2	5p ⁵ 6p	³ D	1	2709.03 ^B	3139,42	-2,101 ^A	-2,059	1.49(7) ^A	1,18(6)
5p ⁵ 6d	¹ D ^o	2	5p ⁵ 6p	³ S	1	1647.04 ^B	1774,96	-1,384 ^A	-0,607	1.42(7) ^A	1,05(8)
5p ⁵ 6d	¹ D ^o	2	5p ⁵ 6p	³ D	2	3358.59 ^B	3552,66	-3,002 ^A	-3,780	1.18(5) ^B	1,75(4)
5p ⁵ 6d	¹ D ^o	2	5p ⁵ 6p	³ D	3	1958.28 ^B	1971,47	-2,181 ^A	-1,263	2,41(6) ^A	1,87(7)
5p ⁵ 6d	¹ D ^o	2	5p ⁵ 6p	¹ P	1	2027.81 ^B	2014.62	-0,804	0.399	1.49(8) ^A	8,23(8)
5p ⁵ 6d	³ D ^o	3	5p ⁵ 6p	³ D	3	1949.94 ^B	1955,11	-1.018 ^A	0,076	3,49(7) ^A	2,95(8)
5p ⁵ 6d	³ D ^o	3	5p ⁵ 6p	³ P	2	2179.46 ^B	2076.01	-0.201 ^A	0.640	3,92(8) ^A	9,65(8)
5p ⁵ 6d	¹ P ^o	1	5p ⁵ 6p	¹ P	1	1891.88 ^B	1885,91	-1.291 ^A	-0,082	4,34(7) ^A	5,18(8)
5p ⁵ 6d	¹ P ^o	1	5p ⁵ 6p	³ P	2	2032.21 ^B	1955,70	-3.183 ^B	-2,108	3.53(5) ^B	4,53(6)
5p ⁵ 6d	¹ P ^o	1	5p ⁵ 6p	³ P	0	2084.42 ^A	2155,11	-1.438 ^A	0,045	5,59(7) ^A	5,31(8)

Tablo 3.4. La IV'nün bazı elektrik kuadrupol (E2) ve manyetik dipol (M1) geçişleri için λ dalga boyları (Å), $\log(gf)$ logaritmik ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve gA_{ji} ağırlıklı geçiş olasılıkları (s^{-1})

Geçişler							λ (Å)				$\log(gf)$				gA_{ji} (s ⁻¹)			
Alt seviye			Üst seviye			Tipi	Bu çalışma		Diğer çalışmalar		Bu çalışma		Diğer çalış.		Bu çalışma		Diğer çalışmalar	
Konf.	Terim	J	Konf.	Terim	J		MCHF+BP	HFR	[9]	[9]	MCHF+BP	HFR	[9]	[9]	MCHF+BP	HFR	[9]	[9]
5p ⁵ 5d	³ P ^o	2	5p ⁵ 6d	³ P ^o	0	E2	800,19	823,20	823,94	871,97	-5,906	-5,907	-5,887	-5,748	1,29(4)	1,21(4)	1,28(4)	7,83(4)
5p ⁵ 6s	³ P ^o	2	5p ⁵ 6d	³ P ^o	0	E2	1022,6	1164,27	1164,25	1228,00	-5,395	-5,398	-5,417	-5,411	2,56(4)	1,97(4)	1,88(4)	8,59(4)
5p ⁵ 5d	³ P ^o	1	5p ⁵ 6d	³ P ^o	1	E2	–	789,56	790,04	828,25	–	-6,039	-5,927	-5,760	–	9,78(3)	1,26(4)	1,69(4)
5p ⁵ 5d	³ P ^o	2	5p ⁵ 6d	³ P ^o	1	E2	796,03	818,33	818,98	862,98	-5,622	-5,836	-5,852	-5,663	2,51(4)	1,45(4)	1,40(4)	3,24(4)
5p ⁵ 6s	³ P ^o	2	5p ⁵ 6d	³ P ^o	1	E2	1015,82	1154,55	1154,37	1210,20	-4,969	-4,949	-4,957	-4,964	6,27(4)	5,62(4)	5,53(4)	8,24(4)
5p ⁵ 5d	³ P ^o	2	5p ⁵ 6d	³ F ^o	4	E2	792,03	813,30	813,20	852,25	-5,274	-5,679	-5,724	-5,554	5,65(4)	2,11(4)	1,91(4)	1,43(4)
5p ⁵ 5d	³ F ^o	4	5p ⁵ 6d	³ F ^o	4	E2	–	820,78	819,02	864,18	–	-5,289	-5,187	-4,996	–	5,09(4)	6,46(4)	9,02(4)
5p ⁵ 5d	³ F ^o	3	5p ⁵ 6d	³ F ^o	4	E2	817,70	828,25	827,43	882,38	-6,108	-5,675	-5,627	-5,449	3,46(4)	2,05(4)	2,30(4)	2,37(4)
5p ⁵ 5d	³ D ^o	3	5p ⁵ 6d	³ F ^o	4	E2	873,99	889,77	889,61	966,67	-6,091	-5,744	-5,795	-5,543	0,71(4)	1,51(4)	1,35(4)	1,59(4)
5p ⁵ 5d	³ F ^o	4	5p ⁵ 6d	³ F ^o	3	E2	798,46	818,17	816,94	858,68	-6,402	-5,961	-5,867	-5,550	4,14(3)	1,09(4)	1,36(4)	3,28(4)
5p ⁵ 5d	³ F ^o	3	5p ⁵ 6d	³ F ^o	3	E2	–	825,57	825,31	876,64	–	-5,626	-5,586	-5,441	–	2,29(4)	2,54(4)	3,15(4)
5p ⁵ 5d	³ D ^o	3	5p ⁵ 6d	³ F ^o	3	E2	–	886,70	887,16	959,79	–	-5,745	-5,805	-5,653	–	1,53(4)	1,33(4)	1,61(4)
5p ⁵ 6s	¹ P ^o	1	5p ⁵ 6d	³ F ^o	3	E2	1014,97	1162,98	1163,36	1206,20	-4,511	-4,752	-4,770	-4,818	1,98(5)	8,72(4)	8,37(4)	2,99(4)
5p ⁵ 5d	³ P ^o	0	5p ⁵ 6d	³ P ^o	2	E2	755,97	768,77	768,90	799,28	-6,562	-6,185	-5,996	-5,793	3,19(3)	7,37(3)	1,14(4)	3,37(3)
5p ⁵ 5d	³ P ^o	1	5p ⁵ 6d	³ P ^o	2	E2	767,15	782,47	782,65	815,42	-6,038	-6,070	-5,957	-5,713	1,04(4)	9,27(3)	1,20(4)	1,17(4)
5p ⁵ 5d	³ D ^o	3	5p ⁵ 6d	³ P ^o	2	E2	871,14	839,69	887,02	962,59	-5,959	-6,517	-5,628	-5,461	9,60(3)	2,87(3)	2,00(4)	3,49(4)
5p ⁵ 6s	³ P ^o	2	5p ⁵ 6d	³ P ^o	2	E2	–	1139,48	1138,65	1183,00	–	-5,061	-4,833	-4,862	–	4,46(4)	7,55(4)	6,55(4)
5p ⁵ 6s	¹ P ^o	1	5p ⁵ 6d	³ P ^o	2	E2	1017,48	1162,96	1163,12	1210,60	-5,017	-5,335	-5,392	-5,391	6,15(4)	2,28(4)	2,00(4)	1,11(4)
5p ⁵ 5d	³ F ^o	3	5p ⁵ 6d	¹ D ^o	2	E2	805,85	817,01	817,01	863,18	-6,085	-5,664	-5,654	-5,436	8,40(3)	2,17(4)	2,22(4)	4,60(4)
5p ⁵ 5d	³ D ^o	1	5p ⁵ 6d	¹ D ^o	2	E2	924,03	938,64	938,86	1027,00	-5,864	-5,642	-5,799	-5,582	1,06(4)	1,73(4)	1,20(4)	9,94(3)
5p ⁵ 6s	³ P ^o	2	5p ⁵ 6d	¹ D ^o	2	E2	–	1123,21	1123,14	1154,60	–	-5,391	-5,401	-5,434	–	2,14(4)	2,10(4)	1,84(4)

Tablo 3.4. (Devamı)

Geçişler							λ (Å)				$\log(gf)$				gA_{ji} (s ⁻¹)			
Alt seviye			Üst seviye			Tipi	Bu çalışma		Diğer çalışmalar		Bu çalışma		Diğer çalış.		Bu çalışma		Diğer çalışmalar	
Konf.	Terim	J	Konf.	Terim	J		MCHF+BP	HFR	[9]	[9]	MCHF+BP	HFR	[9]	[9]	MCHF+BP	HFR	[9]	[9]
5p ⁵ 6s	¹ P ^o	1	5p ⁵ 6d	¹ D ^o	2	E2	1002,96	1146,04	1146,94	1180,90	-4,643	-4,842	-4,829	-4,820	1,51(5)	7,31(4)	7,52(4)	4,34(4)
5p ⁵ 5d	³ P ^o	2	5p ⁵ 6d	³ D ^o	3	E2	779,58	799,74	800,07	826,72	-6,521	-6,109	-5,873	-5,668	3,30(3)	8,11(3)	1,40(4)	1,50(4)
5p ⁵ 5d	³ F ^o	4	5p ⁵ 6d	³ D ^o	3	E2	789,64	806,97	805,70	837,95	-3,160	-5,691	-5,648	-5,475	7,35(3)	2,08(4)	2,31(4)	4,09(4)
5p ⁵ 5d	³ D ^o	3	5p ⁵ 6d	³ D ^o	3	E2	—	873,56	873,91	933,97	—	-5,670	-5,701	-5,392	—	1,87(4)	1,74(4)	3,10(4)
5p ⁵ 6s	³ P ^o	2	5p ⁵ 6d	³ D ^o	3	E2	989,19	1117,88	1117,14	1140,10	-4,825	-4,790	-4,764	-4,863	10,1(5)	8,66(4)	9,21(4)	5,02(4)
5p ⁵ 6s	¹ P ^o	1	5p ⁵ 6d	³ D ^o	3	E2	1000,77	1140,49	1140,69	1165,70	-4,804	-5,046	-5,032	-4,901	4,47(4)	4,62(4)	4,76(4)	2,64(4)
5p ⁵ 6s	¹ P ^o	1	5p ⁵ 6d	¹ P ^o	1	E2	—	1103,21	1104,09	857,29	—	-5,002	-4,979	-5,668	—	5,46(4)	5,74(4)	1,95(4)
5p ⁵ 5d	³ F ^o	2	5p ⁵ 6d	³ F ^o	2	E2	844,62	818,07	818,18	761,61	-6,350	-5,503	-5,467	-6,458	4,17(3)	3,12(4)	3,40(4)	4,01(3)
5p ⁵ 5d	¹ F ^o	3	5p ⁵ 6d	³ F ^o	2	E2	—	858,62	858,93	920,89	—	-5,873	-5,863	-5,638	—	1,21(4)	1,24(4)	2,54(4)
5p ⁵ 6s	³ P ^o	0	5p ⁵ 6d	³ F ^o	2	E2	983,80	1135,66	1137,33	1175,30	-4,661	-5,035	-5,058	-5,034	1,50(5)	4,77(4)	4,51(4)	8,93(3)
5p ⁵ 6s	³ P ^o	1	5p ⁵ 6d	³ F ^o	2	E2	1003,94	1152,87	1153,29	1192,80	-4,859	-5,047	-5,012	-5,017	9,10(4)	4,51(4)	4,87(4)	2,70(4)
5p ⁵ 6s	³ P ^o	1	5p ⁵ 6d	³ D ^o	1	E2	—	1122,05	1119,26	1351,60	—	-4,955	-4,950	-5,859	—	5,87(4)	5,97(4)	5,05(3)
5p ⁶	¹ S	0	5p ⁵ 6p	³ D	2	E2	—	385,73	385,19	435,50	—	-4,884	-4,827	-5,041	—	5,86(5)	6,70(5)	6,40(4)
5p ⁶	¹ S	0	5p ⁵ 7p	³ D	2	E2	—	302,18	303,11	326,48	—	-5,373	-5,115	-4,904	—	3,08(5)	5,57(5)	1,56(5)
5p ⁶	¹ S	0	5p ⁵ 6p	³ P	2	E2	—	417,28	417,15	424,38	—	-5,061	-5,014	-5,264	—	3,32(5)	3,71(5)	4,03(4)
5p ⁶	¹ S	0	5p ⁵ 7p	³ P	2	E2	—	322,91	322,93	322,91	—	-5,373	-5,564	-5,079	—	3,08(5)	1,75(5)	1,07(5)
5p ⁵ 6p	³ S	1	5p ⁵ 7p	³ D	3	E2	—	1290,69	1292,40	1241,10	—	-5,205	-5,182	-5,055	—	2,50(4)	2,63(4)	1,63(4)
5p ⁵ 6p	³ D	3	5p ⁵ 7p	³ S	1	E2	—	1430,42	1432,32	1406,30	—	-5,276	-5,282	-5,050	—	1,73(4)	1,70(4)	7,00(4)
5p ⁵ 6p	³ D	2	5p ⁵ 7p	³ P	2	E2	—	1369,56	1309,15	1249,00	—	-5,515	-5,382	-5,200	—	1,09(4)	1,62(4)	2,69(4)
5p ⁵ 6p	³ D	3	5p ⁵ 7p	³ D	3	E2	—	1391,55	1394,51	1343,00	—	-5,394	-5,384	-5,176	—	1,39(4)	1,42(4)	2,46(4)
5p ⁵ 6p	³ D	2	5p ⁵ 7p	¹ P	1	E2	—	1321,55	1319,96	1264,00	—	-5,518	-5,518	-5,394	—	1,16(4)	1,16(4)	2,80(4)
5p ⁵ 6p	³ D	3	5p ⁵ 7p	³ P	2	E2	—	1369,56	1370,80	1293,10	—	-5,515	-5,491	-5,150	—	1,09(4)	1,15(4)	3,95(4)

Tablo 3.4. (Devamı)

Geçişler							λ (Å)				$\log(gf)$				gA_{ji} (s ⁻¹)			
Alt seviye			Üst seviye			Tipi	Bu çalışma		Diğer çalışmalar		Bu çalışma		Diğer çalış.		Bu çalışma		Diğer çalışmalar	
Konf.	Terim	J	Konf.	Terim	J		MCHF+BP	HFR	[9]	[9]	MCHF+BP	HFR	[9]	[9]	MCHF+BP	HFR	[9]	[9]
5p ⁵ 6p	³ D	2	5p ⁵ 7p	³ D	3	E2	–	1391,55	1330,76	1295,50	–	-5,525	-5,534	-5,379	–	1,12(4)	1,10(4)	1,18(4)
5p ⁵ 5d	³ P ^o	1	5p ⁵ 5d	³ D ^o	1	M1	–	4438,06	4450,02	3656,90	–	-6,504	-6,512	-6,567	–	1,06(2)	1,04(2)	1,35(2)
5p ⁵ 5d	³ P ^o	2	5p ⁵ 5d	³ D ^o	2	M1	–	3921,36	3915,14	3529,70	–	-6,188	-6,176	-6,197	–	2,81(2)	2,90(2)	3,40(2)
5p ⁵ 5d	³ D ^o	3	5p ⁵ 5d	³ D ^o	2	M1	–	6696,20	6675,44	6924,40	–	-6,041	-6,038	-6,073	–	1,35(2)	1,37(2)	1,65(2)
5p ⁵ 5d	³ F ^o	4	5p ⁵ 5d	¹ F ^o	3	M1	3982,36	3709,25	3690,46	3436,60	-5,802	-5,713	-5,719	-5,757	6,63(2)	9,39(2)	9,36(2)	1,27(3)
5p ⁵ 5d	³ D ^o	3	5p ⁵ 5d	¹ F ^o	3	M1	–	5710,12	5744,13	5941,80	–	-5,938	-5,939	-5,928	–	2,36(2)	2,33(2)	2,23(2)
5p ⁵ 5d	³ P ^o	1	5p ⁵ 5d	¹ P ^o	1	M1	–	1735,62	1737,13	1420,10	–	-7,147	-7,123	-7,297	–	1,59(2)	1,66(2)	1,67(2)
5p ⁵ 5d	³ F ^o	2	5p ⁵ 5d	¹ P ^o	1	M1	1984,08	2094,98	2094,78	1737,60	-7,148	-7,018	-7,000	-7,188	1,20(2)	1,45(2)	1,52(2)	2,39(2)
5p ⁵ 5d	³ D ^o	2	5p ⁵ 5d	¹ P ^o	1	M1	–	3615,11	3629,47	2686,20	–	-6,707	-6,698	-6,772	–	1,00(2)	1,02(2)	2,60(2)
5p ⁵ 6s	¹ P ^o	1	5p ⁵ 6s	³ P ^o	0	M1	6603,32	5226,95	5223,02	5249,00	-6,244	-6,199	-6,202	-6,201	0,87(2)	1,54(2)	1,54(2)	4,57(2)
5p ⁵ 6s	³ P ^o	2	5p ⁵ 6s	³ P ^o	1	M1	4550,25	4500,39	4502,30	4498,60	-6,312	-5,885	-5,878	-5,905	1,57(3)	4,28(2)	4,36(2)	6,84(2)
5p ⁵ 6d	³ F ^o	3	5p ⁵ 6d	³ F ^o	2	M1	5474,67	4716,74	4736,33	4710,10	-5,769	-5,699	-5,699	-5,701	3,73(2)	5,99(2)	5,94(2)	8,39(2)
5p ⁵ 6d	¹ D ^o	2	5p ⁵ 6d	³ F ^o	2	M1	–	5017,63	5029,50	5140,80	–	-6,179	-6,203	-6,176	–	1,75(2)	1,65(2)	1,68(2)
5p ⁵ 7s	¹ P ^o	1	5p ⁵ 7s	³ P ^o	0	M1	5468,71	4696,96	4821,18	4838,90	-6,306	-6,241	-6,223	-6,219	1,10(2)	1,73(2)	1,72(2)	5,16(2)
5p ⁵ 7s	³ P ^o	2	5p ⁵ 7s	³ P ^o	1	M1	5461,88	4699,50	4581,02	4519,90	-5,909	-5,845	-5,847	-5,855	2,75(2)	4,31(2)	4,52(2)	7,60(2)
5p ⁵ 7p	³ D	2	5p ⁵ 7p	³ D	1	M1	–	4754,98	4796,26	4722,20	–	-5,847	-5,863	-5,842	–	4,19(2)	3,98(2)	7,16(2)
5p ⁵ 4f	³ D	3	5p ⁵ 4f	³ F	3	M1	–	4734,13	4734,01	3954,60	–	-6,056	-6,056	-6,053	–	2,61(2)	2,62(2)	3,77(2)
5p ⁵ 6p	³ P	2	5p ⁵ 6p	³ P	1	M1	–	5139,81	5066,04	5128,30	–	-6,119	-6,122	-6,126	–	1,94(2)	1,96(2)	3,16(2)
5p ⁵ 6p	³ S	1	5p ⁵ 6p	¹ S	0	M1	–	3408,20	3407,02	3116,90	–	-6,455	-6,521	-6,640	–	1,63(2)	1,73(2)	4,70(2)
5p ⁵ 4f	³ D	2	5p ⁵ 4f	¹ D	2	M1	–	3441,50	3440,81	2857,10	–	-6,538	-6,539	-6,590	–	1,63(2)	1,63(2)	2,10(2)

Tablo 3.5. La IV'ün bazı yeni E2 ve M1 geçişleri için λ dalga boyları (Å), $\log(gf)$ logaritmik ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve gA_{ji} ağırlıklı geçiş olasılıkları (s^{-1})

Geçişler							λ (Å)	$\log(gf)$	gA_{ji} (s^{-1})
Alt seviye			Üst seviye			Tipi	Bu çalışma	Bu çalışma	Bu çalışma
Konf.	Terim	J	Konf.	Terim	J		(HFR)	(HFR)	(HFR)
5p ⁵ 4f	³ G	5	5p ⁵ 5f	³ F	4	E2	676,78	-6,221	8,75(3)
5p ⁵ 4f	³ D	2	5p ⁵ 5f	³ D	3	E2	668,78	-6,236	8,66(3)
5p ⁵ 4f	³ G	4	5p ⁵ 5f	¹ F	3	E2	679,55	-6,254	8,05(3)
5p ⁵ 4f	³ F	4	5p ⁵ 5f	³ D	3	E2	722,56	-6,221	7,68(3)
5p ⁵ 4f	³ D	3	5p ⁵ 5f	³ D	2	E2	694,73	-6,311	6,76(3)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 5f	¹ G	4	E2	707,73	-6,348	5,97(3)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 5f	¹ D	2	E2	701,12	-6,361	5,92(3)
5p ⁵ 4f	³ D	2	5p ⁵ 5f	³ D	1	E2	677,62	-6,391	5,90(3)
5p ⁵ 4f	³ F	2	5p ⁵ 5f	¹ D	2	E2	738,46	-6,333	5,68(3)
5p ⁵ 4f	³ D	1	5p ⁵ 5f	³ D	2	E2	663,16	-6,468	5,16(3)
5p ⁵ 4f	³ F	4	5p ⁵ 5f	³ G	5	E2	727,46	-6,429	4,69(3)
5p ⁵ 4f	³ G	4	5p ⁵ 5f	³ G	5	E2	688,05	-6,487	4,59(3)
5p ⁵ 4f	³ D	3	5p ⁵ 5f	³ D	3	E2	687,89	-6,544	4,03(3)
5p ⁵ 4f	³ F	2	5p ⁵ 5f	¹ F	3	E2	736,05	-6,537	3,58(3)
5p ⁵ 4f	³ F	4	5p ⁵ 5f	¹ G	4	E2	727,23	-6,588	3,26(3)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 5f	³ G	4	E2	674,55	-6,672	3,12(3)
5p ⁵ 4f	³ G	5	5p ⁵ 6p	³ D	3	E2	1138,06	-6,227	3,06(3)
5p ⁵ 4f	³ D	1	5p ⁵ 5f	¹ D	2	E2	655,00	-6,710	3,03(3)
5p ⁵ 4f	³ F	4	5p ⁵ 5f	³ G	3	E2	691,66	-6,670	2,98(3)
5p ⁵ 4f	³ F	3	5p ⁵ 5f	³ F	2	E2	687,32	-6,684	2,92(3)
5p ⁵ 4f	³ D	1	5p ⁵ 5f	³ D	1	E2	665,45	-6,727	2,82(3)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 5f	³ F	2	E2	673,46	-6,718	2,81(3)
5p ⁵ 4f	³ D	3	5p ⁵ 5f	³ D	3	E2	600,97	-6,824	2,77(3)
5p ⁵ 4f	³ F	4	5p ⁵ 5f	³ D	3	E2	690,24	-6,715	2,70(3)
5p ⁵ 4f	³ G	5	5p ⁵ 7p	³ D	3	E2	626,05	-6,802	2,69(3)
5p ⁵ 4f	³ F	3	5p ⁵ 5f	³ G	4	E2	688,46	-6,728	2,63(3)
5p ⁵ 4f	³ F	4	5p ⁵ 6p	³ D	2	E2	1141,27	-6,323	2,43(3)
5p ⁵ 4f	³ G	5	5p ⁵ 5f	¹ G	4	E2	685,93	-6,783	2,34(3)
5p ⁵ 4f	³ D	2	5p ⁵ 5f	¹ F	3	E2	664,83	-6,850	2,13(3)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 5f	³ G	3	E2	613,83	-6,921	2,12(3)
5p ⁵ 4f	¹ D	2	5p ⁵ 5f	³ D	3	E2	706,74	-6,828	1,98(3)
5p ⁵ 4f	¹ D	2	5p ⁵ 5f	³ G	3	E2	708,23	-6,854	1,86(3)
5p ⁵ 4f	³ F	4	5p ⁵ 7p	³ D	2	E2	630,66	-6,966	1,81(3)
5p ⁵ 4f	³ F	2	5p ⁵ 5f	³ D	2	E2	748,84	-6,837	1,73(3)
5p ⁵ 4f	³ G	4	5p ⁵ 7p	³ D	2	E2	632,26	-6,999	1,67(3)
5p ⁵ 4f	³ F	2	5p ⁵ 5f	³ F	2	E2	640,14	-6,993	1,66(3)
5p ⁵ 4f	³ F	3	5p ⁵ 6p	³ P	1	E2	1137,94	-6,509	1,60(3)

Tablo 3.5. (Devamı)

Geçişler							λ (Å)	$\log(gf)$	gA_{ji} (s^{-1})
Alt seviye			Üst seviye			Tipi	Bu çalışma	Bu çalışma	Bu çalışma
Konf.	Terim	J	Konf.	Terim	J		(HFR)	(HFR)	(HFR)
5p ⁵ 4f	³ D	1	5p ⁵ 5f	³ D	3	E2	656,92	-6,987	1,59(3)
5p ⁵ 4f	³ G	4	5p ⁵ 6p	³ D	2	E2	1187,82	-6,475	1,59(3)
5p ⁵ 4f	³ D	2	5p ⁵ 5f	³ F	4	E2	663,97	-6,986	1,56(3)
5p ⁵ 4f	³ F	4	5p ⁵ 6p	³ P	2	E2	1211,10	-6,508	1,41(3)
5p ⁵ 4f	³ D	2	5p ⁵ 5f	³ D	2	E2	675,25	-7,026	1,38(3)
5p ⁵ 4f	³ D	2	5p ⁵ 5f	³ F	2	E2	585,58	-7,150	1,38(3)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 6p	³ D	1	E2	1162,26	-6,564	1,35(3)
5p ⁵ 4f	³ D	3	5p ⁵ 7p	³ P	2	E2	626,64	-7,113	1,31(3)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 5f	³ D	3	E2	703,31	-7,021	1,29(3)
5p ⁵ 4f	³ D	3	5p ⁵ 5f	³ D	1	E2	697,25	-7,083	1,13(3)
5p ⁵ 4f	³ G	4	5p ⁵ 5f	³ G	4	E2	597,83	-7,220	1,12(3)
5p ⁵ 4f	³ D	3	5p ⁵ 6p	³ P	2	E2	1116,75	-6,686	1,10(3)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 7p	³ D	1	E2	624,35	-7,219	1,03(3)
5p ⁵ 4f	³ F	3	5p ⁵ 7p	³ P	1	E2	629,58	-7,223	1,01(3)
5p ⁵ 4f	³ D	3	5p ⁵ 5f	³ G	4	E2	601,05	-7,284	9,61(2)
5p ⁵ 4f	³ F	4	5p ⁵ 7p	³ P	2	E2	655,28	-7,210	9,58(2)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 6p	¹ P	1	E2	1183,92	-6,738	8,70(2)
5p ⁵ 4f	³ D	1	5p ⁵ 7p	³ S	1	E2	612,26	-7,334	8,24(2)
5p ⁵ 4f	³ G	4	5p ⁵ 5f	³ D	3	E2	683,67	-7,242	8,17(2)
5p ⁵ 4f	³ F	4	5p ⁵ 5f	³ D	2	E2	730,12	-7,186	8,16(2)
5p ⁵ 4f	¹ D	2	5p ⁵ 7p	³ P	0	E2	642,82	-7,318	7,76(2)
5p ⁵ 4f	³ D	2	5p ⁵ 7p	³ P	2	E2	610,74	-7,392	7,26(2)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 5f	³ F	2	E2	611,89	-7,400	7,09(2)
5p ⁵ 4f	³ F	3	5p ⁵ 5f	³ D	2	E2	814,22	-7,154	7,05(2)
5p ⁵ 4f	³ G	4	5p ⁵ 5f	¹ D	2	E2	681,60	-7,341	6,55(2)
5p ⁵ 4f	³ G	5	5p ⁵ 5f	³ D	3	E2	681,78	-7,351	6,39(2)
5p ⁵ 4f	³ F	2	5p ⁵ 5f	³ D	1	E2	751,77	-7,272	6,32(2)
5p ⁵ 4f	³ D	2	5p ⁵ 7p	³ S	1	E2	622,55	-7,438	6,28(2)
5p ⁵ 4f	³ D	1	5p ⁵ 6p	³ S	1	E2	1138,89	-6,916	6,25(2)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 5f	¹ D	2	E2	783,15	-7,242	6,22(2)
5p ⁵ 4f	³ F	3	5p ⁵ 5f	³ F	4	E2	797,87	-7,229	6,19(2)
5p ⁵ 4f	³ F	2	5p ⁵ 7p	¹ S	0	E2	661,00	-7,396	6,13(2)
5p ⁵ 4f	³ D	3	5p ⁵ 7p	³ P	1	E2	555,68	-7,550	6,09(2)
5p ⁵ 4f	³ F	2	5p ⁵ 5f	¹ G	4	E2	745,80	-7,309	5,89(2)
5p ⁵ 4f	³ D	3	5p ⁵ 5f	¹ F	3	E2	683,71	-7,386	5,87(2)
5p ⁵ 4f	³ D	2	5p ⁵ 6p	³ P	2	E2	1067,25	-7,001	5,84(2)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 7p	¹ P	1	E2	641,97	-7,463	5,57(2)
5p ⁵ 4f	³ F	2	5p ⁵ 7p	¹ P	1	E2	673,14	-7,433	5,44(2)

Tablo 3.5. (Devamı)

Geçişler							λ (Å)	$\log(gf)$	gA_{ji} (s^{-1})
Alt seviye			Üst seviye			Tipi	Bu çalışma	Bu çalışma	Bu çalışma
Konf.	Terim	J	Konf.	Terim	J		(HFR)	(HFR)	(HFR)
5p ⁵ 4f	³ D	2	5p ⁵ 6p	³ S	1	E2	1175,02	-6,958	5,32(2)
5p ⁵ 4f	³ D	2	5p ⁵ 5f	³ G	4	E2	586,41	-7,567	5,25(2)
5p ⁵ 4f	³ F	4	5p ⁵ 5f	³ G	4	E2	627,36	-7,524	5,07(2)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 5f	³ D	3	E2	674,45	-7,469	4,98(2)
5p ⁵ 4f	¹ D	2	5p ⁵ 5f	³ G	4	E2	706,86	-7,435	4,90(2)
5p ⁵ 4f	¹ D	2	5p ⁵ 6p	¹ S	0	E2	1171,12	-7,004	4,82(2)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 5f	¹ G	4	E2	791,41	-7,353	4,73(2)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 5f	³ G	4	E2	612,79	-7,579	4,69(2)
5p ⁵ 4f	³ G	4	5p ⁵ 6p	³ D	3	E2	1143,34	-7,041	4,64(2)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 6p	³ D	2	E2	1248,39	-6,977	4,52(2)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 5f	¹ F	3	E2	780,45	-7,392	4,44(2)
5p ⁵ 4f	³ G	4	5p ⁵ 7p	³ D	3	E2	627,65	-7,583	4,42(2)
5p ⁵ 4f	³ F	4	5p ⁵ 5f	³ D	3	E2	807,41	-7,366	4,41(2)
5p ⁵ 4f	³ F	2	5p ⁵ 6p	³ P	0	E2	1192,24	-7,035	4,33(2)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 7p	³ D	2	E2	649,03	-7,567	4,30(2)
5p ⁵ 4f	³ G	5	5p ⁵ 5f	¹ F	3	E2	677,68	-7,569	3,92(2)
5p ⁵ 4f	³ D	1	5p ⁵ 5f	¹ F	3	E2	653,11	-7,614	3,80(2)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 6p	³ D	2	E2	1098,73	-7,169	3,75(2)
5p ⁵ 4f	³ F	4	5p ⁵ 7p	³ D	3	E2	660,27	-7,614	3,73(2)
5p ⁵ 4f	³ F	4	5p ⁵ 6p	³ D	3	E2	1256,43	-7,066	3,63(2)
5p ⁵ 4f	³ D	1	5p ⁵ 5f	³ G	3	E2	578,19	-7,740	3,63(2)
5p ⁵ 4f	¹ D	2	5p ⁵ 7p	³ D	1	E2	651,92	-7,644	3,56(2)
5p ⁵ 4f	³ F	4	5p ⁵ 5f	³ G	5	E2	813,54	-7,462	3,48(2)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 5f	³ G	5	E2	707,95	-7,592	3,40(2)
5p ⁵ 4f	³ F	3	5p ⁵ 5f	³ G	5	E2	810,91	-7,500	3,21(2)
5p ⁵ 4f	³ F	3	5p ⁵ 5f	³ G	3	E2	689,76	-7,644	3,19(2)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 7p	³ D	1	E2	571,08	-7,808	3,18(2)
5p ⁵ 4f	³ D	3	5p ⁵ 5f	¹ G	4	E2	692,11	-7,651	3,11(2)
5p ⁵ 4f	³ F	2	5p ⁵ 5f	³ D	3	E2	641,04	-7,730	3,02(2)
5p ⁵ 4f	³ D	3	5p ⁵ 6p	³ P	1	E2	917,42	-7,433	2,92(2)
5p ⁵ 4f	³ D	3	5p ⁵ 5f	³ F	2	E2	600,18	-7,808	2,88(2)
5p ⁵ 4f	³ D	3	5p ⁵ 5f	¹ D	2	E2	685,79	-7,698	2,84(2)
5p ⁵ 4f	³ F	4	5p ⁵ 5f	³ D	3	E2	627,27	-7,782	2,80(2)
5p ⁵ 4f	³ F	3	5p ⁵ 6p	³ D	2	E2	1136,12	-7,271	2,77(2)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 5f	³ D	1	E2	713,10	-7,687	2,70(2)
5p ⁵ 4f	³ D	2	5p ⁵ 7p	³ P	0	E2	541,65	-7,945	2,58(2)
5p ⁵ 4f	³ F	2	5p ⁵ 6p	¹ P	1	E2	1294,46	-7,191	2,56(2)
5p ⁵ 4f	³ D	1	5p ⁵ 7p	³ P	1	E2	535,30	-7,964	2,53(2)

Tablo 3.5. (Devamı)

Geçişler							λ (Å)	$\log(gf)$	gA_{ji} (s^{-1})
Alt seviye			Üst seviye			Tipi	Bu çalışma	Bu çalışma	Bu çalışma
Konf.	Terim	J	Konf.	Terim	J		(HFR)	(HFR)	(HFR)
5p ⁵ 4f	³ F	4	5p ⁵ 7p	³ D	2	E2	577,67	-7,906	2,48(2)
5p ⁵ 4f	³ D	3	5p ⁵ 7p	¹ P	1	E2	629,09	-7,841	2,43(2)
5p ⁵ 4f	³ F	4	5p ⁵ 5f	³ F	2	E2	689,20	-7,769	2,39(2)
5p ⁵ 4f	³ D	3	5p ⁵ 7p	³ D	2	E2	635,87	-7,846	2,35(2)
5p ⁵ 4f	³ G	4	5p ⁵ 5f	³ D	2	E2	690,43	-7,779	2,33(2)
5p ⁵ 4f	³ D	1	5p ⁵ 5f	³ F	2	E2	576,47	-7,953	2,24(2)
5p ⁵ 4f	³ D	3	5p ⁵ 6p	¹ P	1	E2	1140,86	-7,362	2,23(2)
5p ⁵ 4f	³ F	3	5p ⁵ 5f	³ D	3	E2	804,83	-7,665	2,23(2)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 7p	³ D	2	E2	617,45	-7,898	2,21(2)
5p ⁵ 4f	³ D	2	5p ⁵ 7p	¹ S	0	E2	602,99	-7,925	2,18(2)
5p ⁵ 4f	³ D	2	5p ⁵ 5f	³ G	3	E2	587,36	-7,965	2,10(2)
5p ⁵ 4f	¹ D	2	5p ⁵ 7p	³ P	1	E2	644,93	-7,900	2,02(2)
5p ⁵ 4f	³ D	3	5p ⁵ 6p	³ D	2	E2	916,23	-7,598	2,01(2)
5p ⁵ 4f	³ D	2	5p ⁵ 7p	³ D	2	E2	542,77	-8,055	1,99(2)
5p ⁵ 4f	³ F	3	5p ⁵ 7p	³ D	2	E2	629,08	-7,928	1,99(2)
5p ⁵ 4f	³ D	1	5p ⁵ 7p	³ P	2	E2	600,83	-7,968	1,99(2)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 5f	³ F	4	E2	697,99	-7,866	1,86(2)
5p ⁵ 4f	³ D	3	5p ⁵ 6p	³ S	1	E2	1235,31	-7,372	1,86(2)
5p ⁵ 4f	¹ D	2	5p ⁵ 6p	³ D	1	E2	1261,60	-7,370	1,79(2)
5p ⁵ 4f	³ F	2	5p ⁵ 5f	³ G	3	E2	642,26	-7,972	1,72(2)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 6p	³ D	1	E2	990,30	-7,614	1,66(2)
5p ⁵ 4f	¹ D	2	5p ⁵ 6p	³ P	1	E2	1189,09	-7,461	1,63(2)
5p ⁵ 4f	¹ D	2	5p ⁵ 7p	¹ P	1	E2	745,96	-7,893	1,53(2)
5p ⁵ 4f	³ D	2	5p ⁵ 6p	³ D	2	E2	1143,58	-7,542	1,46(2)
5p ⁵ 4f	³ D	1	5p ⁵ 6p	³ P	2	E2	1037,36	-7,628	1,46(2)
5p ⁵ 4f	³ F	4	5p ⁵ 5f	³ D	2	E2	816,86	-7,840	1,45(2)
5p ⁵ 4f	³ D	2	5p ⁵ 5f	¹ D	2	E2	666,79	-8,017	1,44(2)
5p ⁵ 4f	³ D	2	5p ⁵ 7p	³ D	2	E2	619,51	-8,082	1,44(2)
5p ⁵ 4f	³ D	3	5p ⁵ 5f	³ G	3	E2	602,04	-8,107	1,44(2)
5p ⁵ 4f	³ D	3	5p ⁵ 6p	³ D	3	E2	1155,18	-7,543	1,43(2)
5p ⁵ 4f	³ D	3	5p ⁵ 7p	³ D	2	E2	555,29	-8,181	1,43(2)
5p ⁵ 4f	³ D	2	5p ⁵ 6p	³ P	0	E2	1015,95	-7,663	1,41(2)
5p ⁵ 4f	¹ D	2	5p ⁵ 5f	³ D	1	E2	843,76	-7,839	1,36(2)
5p ⁵ 4f	³ G	5	5p ⁵ 5f	³ D	3	E2	596,30	-8,142	1,35(2)
5p ⁵ 4f	³ D	1	5p ⁵ 6p	³ P	1	E2	863,15	-7,826	1,34(2)
5p ⁵ 4f	³ G	4	5p ⁵ 5f	³ D	3	E2	597,75	-8,147	1,33(2)
5p ⁵ 4f	³ G	4	5p ⁵ 5f	³ F	2	E2	596,97	-8,163	1,29(2)
5p ⁵ 4f	³ F	3	5p ⁵ 5f	³ D	1	E2	817,68	-7,902	1,25(2)

Tablo 3.5. (Devamı)

Geçişler							λ (Å)	$\log(gf)$	gA_{ji} (s ⁻¹)
Alt seviye			Üst seviye			Tipi	Bu çalışma	Bu çalışma	Bu çalışma
Konf.	Terim	J	Konf.	Terim	J		(HFR)	(HFR)	(HFR)
5p ⁵ 4f	³ F	4	5p ⁵ 5f	³ F	4	E2	800,41	-7,924	1,24(2)
5p ⁵ 4f	¹ D	2	5p ⁵ 5f	¹ D	2	E2	827,03	-7,899	1,23(2)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 5f	³ D	3	E2	785,89	-7,944	1,23(2)
5p ⁵ 4f	¹ D	2	5p ⁵ 7p	¹ S	0	E2	731,09	-8,013	1,21(2)
5p ⁵ 4f	¹ D	2	5p ⁵ 7p	³ D	2	E2	644,40	-8,123	1,21(2)
5p ⁵ 4f	³ G	4	5p ⁵ 6p	³ D	2	E2	908,77	-7,875	1,08(2)
5p ⁵ 4f	³ D	3	5p ⁵ 6p	³ D	2	E2	1200,60	-7,640	1,06(2)
5p ⁵ 4f	¹ D	2	5p ⁵ 5f	³ F	4	E2	822,69	-7,968	1,06(2)
5p ⁵ 4f	³ F	4	5p ⁵ 5f	¹ D	2	E2	720,25	-8,085	1,06(2)
5p ⁵ 4f	³ G	4	5p ⁵ 7p	³ D	2	E2	552,54	-8,339	1,00(2)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 6p	³ P	1	E2	1100,44	-7,749	9,82(1)
5p ⁵ 4f	³ F	4	5p ⁵ 6p	³ D	2	E2	978,80	-7,852	9,79(1)
5p ⁵ 4f	³ D	2	5p ⁵ 6p	¹ S	0	E2	873,78	-7,958	9,63(1)
5p ⁵ 4f	³ F	4	5p ⁵ 7p	³ D	2	E2	665,38	-8,196	9,60(1)
5p ⁵ 4f	³ F	4	5p ⁵ 5f	³ G	3	E2	628,44	-8,253	9,44(1)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 5f	³ D	1	E2	798,14	-8,071	8,89(1)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 7p	³ D	2	E2	565,30	-8,380	8,71(1)
5p ⁵ 4f	¹ D	2	5p ⁵ 6p	³ D	2	E2	1187,10	-7,746	8,50(1)
5p ⁵ 4f	³ D	1	5p ⁵ 5f	³ D	3	E2	577,19	-8,375	8,43(1)
5p ⁵ 4f	³ F	3	5p ⁵ 5f	¹ F	3	E2	799,12	-8,103	8,24(1)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 7p	³ P	1	E2	617,93	-8,330	8,16(1)
5p ⁵ 4f	³ D	1	5p ⁵ 7p	³ D	2	E2	534,93	-8,511	7,19(1)
5p ⁵ 4f	³ D	2	5p ⁵ 6p	³ D	2	E2	882,64	-8,079	7,14(1)
5p ⁵ 4f	¹ D	2	5p ⁵ 5f	³ D	3	E2	830,08	-8,133	7,12(1)
5p ⁵ 4f	³ F	4	5p ⁵ 5f	¹ F	3	E2	801,67	-8,190	6,70(1)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 7p	³ D	3	E2	644,16	-8,387	6,60(1)
5p ⁵ 4f	³ D	3	5p ⁵ 5f	³ G	5	E2	692,32	-8,330	6,51(1)
5p ⁵ 4f	³ F	2	5p ⁵ 6p	³ D	2	E2	1371,92	-7,752	6,28(1)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 6p	³ D	2	E2	943,80	-8,084	6,18(1)
5p ⁵ 4f	³ F	2	5p ⁵ 5f	³ D	3	E2	740,89	-8,315	5,88(1)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 6p	³ D	3	E2	1199,35	-7,917	5,62(1)
5p ⁵ 4f	³ D	3	5p ⁵ 7p	³ S	1	E2	639,07	-8,464	5,61(1)
5p ⁵ 4f	³ G	5	5p ⁵ 5f	³ G	4	E2	596,38	-8,525	5,60(1)
5p ⁵ 4f	³ D	1	5p ⁵ 6p	³ D	2	E2	1109,33	-8,005	5,36(1)
5p ⁵ 4f	³ D	3	5p ⁵ 7p	³ D	3	E2	631,20	-8,601	4,19(1)
5p ⁵ 4f	³ G	4	5p ⁵ 7p	³ P	2	E2	623,13	-8,614	4,18(1)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 7p	³ S	1	E2	652,37	-8,582	4,11(1)
5p ⁵ 4f	¹ D	2	5p ⁵ 5f	³ D	2	E2	840,07	-8,367	4,06(1)

Tablo 3.5. (Devamı)

Geçişler							λ (Å)	$\log(gf)$	gA_{ji} (s^{-1})
Alt seviye			Üst seviye			Tipi	Bu çalışma	Bu çalışma	Bu çalışma
Konf.	Terim	J	Konf.	Terim	J		(HFR)	(HFR)	(HFR)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 6p	³ S	1	E2	1285,96	-8,004	4,00(1)
5p ⁵ 4f	³ F	2	5p ⁵ 7p	³ D	2	E2	680,90	-8,585	3,74(1)
5p ⁵ 4f	¹ D	2	5p ⁵ 7p	³ D	2	E2	755,50	-8,527	3,47(1)
5p ⁵ 4f	³ F	2	5p ⁵ 6p	³ P	1	E2	1014,19	-8,274	3,45(1)
5p ⁵ 4f	³ D	2	5p ⁵ 6p	³ D	3	E2	1102,29	-8,203	3,44(1)
5p ⁵ 4f	³ G	4	5p ⁵ 6p	³ P	2	E2	1105,68	-8,232	3,20(1)
5p ⁵ 4f	³ F	4	5p ⁵ 5f	¹ G	4	E2	813,25	-8,505	3,15(1)
5p ⁵ 4f	³ F	3	5p ⁵ 6p	³ P	2	E2	1461,51	-7,997	3,15(1)
5p ⁵ 4f	³ F	3	5p ⁵ 7p	³ D	3	E2	728,30	-8,613	3,07(1)
5p ⁵ 4f	³ F	4	5p ⁵ 6p	³ D	2	E2	1310,35	-8,232	2,28(1)
5p ⁵ 4f	³ F	2	5p ⁵ 7p	³ P	0	E2	588,00	-8,939	2,22(1)
5p ⁵ 4f	³ D	2	5p ⁵ 6p	³ D	1	E2	923,18	-8,558	2,16(1)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 6p	¹ P	1	E2	1438,34	-8,195	2,06(1)
5p ⁵ 4f	³ G	4	5p ⁵ 5f	³ G	3	E2	598,81	-8,966	2,01(1)
5p ⁵ 4f	³ D	1	5p ⁵ 7p	¹ P	1	E2	603,09	-8,962	2,00(1)
5p ⁵ 4f	³ F	2	5p ⁵ 6p	³ S	1	E2	1417,43	-8,248	1,88(1)
5p ⁵ 4f	³ F	2	5p ⁵ 7p	³ D	1	E2	595,61	-9,007	1,85(1)
5p ⁵ 4f	³ F	4	5p ⁵ 5f	¹ D	2	E2	804,53	-8,746	1,85(1)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 6p	³ D	2	E2	1534,62	-8,205	1,77(1)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 5f	³ G	5	E2	791,69	-8,791	1,72(1)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 5f	³ D	3	E2	612,71	-9,055	1,57(1)
5p ⁵ 4f	¹ D	2	5p ⁵ 5f	¹ F	3	E2	824,01	-8,811	1,52(1)
5p ⁵ 4f	³ F	3	5p ⁵ 7p	³ S	1	E2	738,81	-8,908	1,51(1)
5p ⁵ 4f	³ D	1	5p ⁵ 7p	³ D	1	E2	540,10	-9,186	1,49(1)
5p ⁵ 4f	³ F	4	5p ⁵ 6p	³ D	3	E2	1537,38	-8,285	1,46(1)
5p ⁵ 4f	³ D	1	5p ⁵ 6p	¹ P	1	E2	1058,13	-8,613	1,45(1)
5p ⁵ 4f	³ F	2	5p ⁵ 5f	³ F	4	E2	734,99	-8,952	1,38(1)
5p ⁵ 4f	³ F	4	5p ⁵ 7p	³ D	2	E2	736,68	-8,970	1,32(1)
5p ⁵ 4f	³ D	3	5p ⁵ 6p	³ D	1	E2	959,99	-8,742	1,31(1)
5p ⁵ 4f	³ F	2	5p ⁵ 6p	³ D	1	E2	1066,47	-8,652	1,31(1)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 7p	³ P	2	E2	639,41	-9,123	1,23(1)
5p ⁵ 4f	³ F	3	5p ⁵ 6p	³ D	3	E2	1528,03	-8,380	1,19(1)
5p ⁵ 4f	³ F	4	5p ⁵ 6p	³ P	2	E2	1470,06	-8,415	1,19(1)
5p ⁵ 4f	³ D	2	5p ⁵ 6p	³ P	1	E2	883,74	-8,869	1,16(1)
5p ⁵ 4f	³ D	2	5p ⁵ 6p	¹ P	1	E2	1089,25	-8,721	1,07(1)
5p ⁵ 4f	³ F	4	5p ⁵ 5f	³ F	2	E2	626,41	-9,223	1,02(1)
5p ⁵ 4f	³ F	2	5p ⁵ 7p	³ P	1	E2	589,77	-9,323	9,12
5p ⁵ 4f	³ D	1	5p ⁵ 6p	³ D	2	E2	862,10	-9,013	8,71

Tablo 3.5. (Devamı)

Geçişler							λ (Å)	$\log(gf)$	gA_{ji} (s ⁻¹)
Alt seviye			Üst seviye			Tipi	Bu çalışma	Bu çalışma	Bu çalışma
Konf.	Terim	J	Konf.	Terim	J		(HFR)	(HFR)	(HFR)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 5f	³ D	2	E2	710,47	-9,195	8,44
5p ⁵ 4f	³ F	2	5p ⁵ 6p	¹ S	0	E2	1001,09	-8,926	7,89
5p ⁵ 4f	³ F	3	5p ⁵ 6p	¹ P	1	E2	1503,09	-8,576	7,84
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 5f	³ F	4	E2	779,25	-9,188	7,13
5p ⁵ 4f	³ D	2	5p ⁵ 5f	¹ G	4	E2	672,77	-9,323	7,01
5p ⁵ 4f	³ F	2	5p ⁵ 7p	³ S	1	E2	684,58	-9,312	6,93
5p ⁵ 4f	³ D	1	5p ⁵ 7p	³ D	2	E2	609,32	-9,443	6,47
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 6p	³ P	1	E2	945,06	-9,088	6,10
5p ⁵ 4f	¹ D	2	5p ⁵ 6p	³ P	2	E2	1546,98	-8,704	5,52
5p ⁵ 4f	¹ D	2	5p ⁵ 7p	³ P	2	E2	742,51	-9,363	5,24
5p ⁵ 4f	³ F	4	5p ⁵ 5f	¹ F	3	E2	717,95	-9,394	5,22
5p ⁵ 4f	¹ D	2	5p ⁵ 7p	³ D	3	E2	748,92	-9,366	5,12
5p ⁵ 4f	³ F	2	5p ⁵ 7p	³ P	2	E2	670,32	-9,464	5,10
5p ⁵ 4f	³ G	4	5p ⁵ 5f	³ F	4	E2	678,64	-9,455	5,08
5p ⁵ 4f	³ F	2	5p ⁵ 5f	³ G	4	E2	641,13	-9,522	4,87
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 7p	³ P	1	E2	565,71	-9,637	4,80
5p ⁵ 4f	³ D	2	5p ⁵ 7p	³ P	1	E2	543,15	-9,684	4,68
5p ⁵ 4f	³ F	3	5p ⁵ 5f	¹ G	4	E2	810,62	-9,395	4,08
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 7p	¹ P	1	E2	710,07	-9,520	3,99
5p ⁵ 4f	³ F	3	5p ⁵ 6p	³ S	1	E2	1671,46	-8,781	3,95
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 6p	³ P	2	E2	1157,98	-9,104	3,92
5p ⁵ 4f	³ F	2	5p ⁵ 6p	³ D	3	E2	1312,93	-9,002	3,86
5p ⁵ 4f	³ F	3	5p ⁵ 6p	³ D	1	E2	1204,17	-9,120	3,49
5p ⁵ 4f	³ D	1	5p ⁵ 6p	³ D	3	E2	1070,43	-9,329	2,73
5p ⁵ 4f	³ F	4	5p ⁵ 7p	³ D	3	E2	730,42	-9,662	2,73
5p ⁵ 4f	³ F	4	5p ⁵ 6p	³ D	2	E2	1618,90	-9,012	2,47
5p ⁵ 4f	¹ D	2	5p ⁵ 5f	¹ G	4	E2	836,25	-9,587	2,47
5p ⁵ 4f	³ F	3	5p ⁵ 7p	³ D	1	E2	636,24	-9,827	2,46
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 6p	³ D	3	E2	1461,17	-9,121	2,36
5p ⁵ 4f	³ F	4	5p ⁵ 7p	³ P	2	E2	724,31	-9,734	2,35
5p ⁵ 4f	³ F	3	5p ⁵ 7p	³ P	2	E2	722,23	-9,823	1,92
5p ⁵ 4f	¹ D	2	5p ⁵ 6p	³ P	0	E2	1441,48	-9,234	1,87
5p ⁵ 4f	³ D	1	5p ⁵ 7p	³ D	3	E2	605,02	-10,001	1,82
5p ⁵ 4f	³ D	2	5p ⁵ 7p	¹ P	1	E2	613,07	-10,004	1,76
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 6p	³ S	1	E2	1591,79	-9,215	1,61
5p ⁵ 4f	¹ D	2	5p ⁵ 7p	³ S	1	E2	760,03	-9,939	1,33
5p ⁵ 4f	¹ D	2	5p ⁵ 6p	³ S	1	E2	1784,20	-9,230	1,23
5p ⁵ 4f	³ D	2	5p ⁵ 7p	³ D	3	E2	615,07	-10,209	1,09

Tablo 3.5. (Devamı)

Geçişler							λ (Å)	$\log(gf)$	gA_{ji} (s^{-1})
Alt seviye			Üst seviye			Tipi	Bu çalışma	Bu çalışma	Bu çalışma
Konf.	Terim	J	Konf.	Terim	J		(HFR)	(HFR)	(HFR)
5p ⁵ 4f	³ D	3	5p ⁵ 4f	³ F	4	M1	4646,63	-6,523	9,27(1)
5p ⁵ 4f	³ F	2	5p ⁵ 4f	³ F	3	M1	9326,44	-6,018	7,35(1)
5p ⁵ 4f	³ F	2	5p ⁵ 4f	¹ D	2	M1	6895,41	-6,422	5,31(1)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 4f	³ F	3	M1	5575,69	-6,769	3,65(1)
5p ⁵ 4f	³ D	2	5p ⁵ 4f	³ G	3	M1	4487,88	-7,001	3,30(1)
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 4f	³ F	4	M1	5454,71	-6,957	2,47(1)
5p ⁵ 4f	³ D	2	5p ⁵ 4f	³ F	2	M1	6870,66	-6,86	1,95(1)
5p ⁵ 4f	³ D	3	5p ⁵ 4f	¹ D	2	M1	4015,52	-7,333	1,92(1)
5p ⁵ 4f	³ D	3	5p ⁵ 4f	³ G	3	M1	5516,15	-7,086	1,80(1)
5p ⁵ 4f	³ D	1	5p ⁵ 4f	³ F	2	M1	5795,60	-7,184	1,30(1)
5p ⁵ 4f	³ G	4	5p ⁵ 4f	³ F	3	M1	4541,40	-7,521	9,75
5p ⁵ 4f	³ F	2	5p ⁵ 4f	³ G	3	M1	12940,65	-6,648	8,95
5p ⁵ 4f	³ D	3	5p ⁵ 4f	³ F	2	M1	9614,47	-6,913	8,82
5p ⁵ 4f	³ D	2	5p ⁵ 4f	³ D	3	M1	24075,21	-6,129	8,55
5p ⁵ 4f	³ G	5	5p ⁵ 4f	³ F	4	M1	12079,58	-6,751	8,11
5p ⁵ 4f	³ G	4	5p ⁵ 4f	³ G	3	M1	24481,99	-6,174	7,46
5p ⁵ 4f	³ D	3	5p ⁵ 4f	³ F	4	M1	14334,81	-6,681	6,77
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 4f	³ F	2	M1	13864,25	-6,729	6,48
5p ⁵ 4f	³ F	4	5p ⁵ 4f	³ G	3	M1	8966,55	-7,265	4,51
5p ⁵ 4f	³ G	4	5p ⁵ 4f	³ F	4	M1	4460,82	-7,902	4,20
5p ⁵ 4f	³ G	4	5p ⁵ 4f	³ F	4	M1	12702,50	-6,994	4,19
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 4f	¹ D	2	M1	14760,54	-6,893	3,92
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 4f	³ F	4	M1	29477,67	-6,39	3,13
5p ⁵ 4f	³ F	3	5p ⁵ 4f	¹ D	2	M1	26453,57	-6,571	2,56
5p ⁵ 4f	³ G	3	5p ⁵ 4f	³ F	4	M1	26400,35	-6,604	2,38
5p ⁵ 4f	³ D	1	5p ⁵ 4f	³ D	2	M1	37039,53	-6,341	2,22

KAYNAKLAR

- [1] Karaçoban Usta, B., Dört kez iyonlaşmış lantanın (La V) yarı ömür hesaplamaları. Erciyes Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Dergisi, 36(2): 221–227, 2020.
- [2] Biémont, E., Clar, M., Enzonga, S.Y., Fivet, V., Quinet, P., Träbert, E., Garnir, H.P., Atomic structure calculations and beam-foil observations of La IV. Can. J. Phys., 87: 1275–1282, 2009.
- [3] Reader, J., Epstein, G.L., Resonance lines of Cs II, Ba III, and La IV. J. Opt. Soc. Am., 65: 638–641, 1975.
- [4] Epstein, G.L., Reader, J., Spectrum and energy levels of triply ionized lanthanum (La IV). J. Opt. Soc. Am., 69: 511–520, 1979.
- [5] Hansen, J.E., Brilly, J., Kennedy, E.T., Sullivan, G.O., Rise and fall of the $4d^{10} \rightarrow 4d^9 4f$ resonance in the Xe isoelectronic sequence. Phys. Rev. Lett., 63: 1934–1937, 1989.
- [6] Eliav, E., Kaldor, U., Transition energies of Rn- and Fr-like actinide ions by relativistic intermediate Hamiltonian Fock-space coupled-cluster methods. Chem. Phys., 392: 78–82, 2012.
- [7] Loginov, A.V., The probabilities of radiative transitions and lifetimes of levels in the spectra of Cu XX, La IV. Opt. Spectrosc., 122: 345–362, 2017.
- [8] Karaçoban Usta, B., Eser, S., Theoretical studies of allowed (E1) and forbidden (E2 and M1) transitions in La IV. Acta Phys. Pol. A, 137: 1187–1192, 2020.
- [9] Karaçoban Usta, B., Eser, S., Theoretical studies of allowed (E1) and forbidden (E2 and M1) transitions in La IV–Supplement. Acta Phys. Pol. A, 137: S1–S42, 2020.
- [10] Karaçoban Usta, B., Şirin Yıldırım, E., Lifetimes of levels in the spectra of xenon-like lanthanum (La IV). AIP Conference Proceedings, 2042: 020017–4, 2018.

- [11] Karaçoban Usta, B., Şirin Yıldırım, E., Atomic structure calculations of triply ionized lanthanum (La IV). AIP Conference Proceedings, 2042: 020018–4, 2018.
- [12] Fischer, C.F., Brage, T., Jönsson, P., Computational Atomic Structure-an MCHF Approach, IOP, Bristol 1997.
- [13] Cowan, R.D., The Theory of Atomic Structure and Spectra, University of California Press, 1981.
- [14] Fischer, C.F., The MCHF atomic-structure package. Comput. Phys. Commun., 128: 635–636, 2000.
- [15] <http://www.tcd.ie/Physics/People/Cormac.McGuinness/Cowan/>, Erişim Tarihi: 30.12.2020.
- [16] 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.
- [17] <http://physics.nist.gov/asd>, Erişim Tarihi: 30.12.2020.

ÖZGEÇMİŞ

İlk, orta ve lise eğitimini İstanbul'da tamamladı. 2006 yılında Cengizhan Anadolu Lisesi'nden mezun oldu. 2007 yılında başladığı Gazi Üniversitesi Fizik Bölümü'nü 2012 yılında bitirdi. 2017 yılında Sakarya Üniversitesi Fizik Bölümü'nde yüksek lisans eğitimine başladı ve halen yüksek lisans eğitimine devam etmektedir.

