T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

# ÜÇ KEZ İYONLAŞMIŞ SERYUMUN (Ce IV) ATOMİK YAPI HESAPLAMALARI

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**Büşra ALPARSLAN**

**Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK**

**Tez Danışmanı : Yrd. Doç. Dr. Betül USTA**

**Haziran 2017**

T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

# ÜÇ KEZ İYONLAŞMIŞ SERYUMUN (Ce IV) ATOMİK YAPI HESAPLAMALARI

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Büşra ALPARSLAN

Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK

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

| | | |
|---|---|---|
| Prof. Dr. | Prof. Dr. | Yrd. Doç. Dr. |
| Seda SAĞDINÇ | Leyla ÖZDEMİR | Betül USTA |
| Jüri Başkanı | Üye | 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.

Büşra ALPARSLAN

01.06.2017

## TEŞEKKÜR

Yüksek lisans eğitimim boyunca bana sabır göstererek vakit ayıran, bana her konuda yardımcı olan, bilgi ve tecrübelerini benden esirgemeyen değerli danışman hocam Yrd. Doç. Dr. Betül USTA'ya teşekkürlerimi sunarım.

Yoğun çalışmalarım sırasında sabır gösterdiği ve bana katlandığı için eşim Coşkun TOPÇU'ya, çalışmalarım sırasında bana destek olan ve çalışmamın her aşamasında benden yardımlarını esirgemeyen arkadaşım Elif AKGÜN'e ve aileme çok teşekkür ederim.

# İÇİNDEKİLER

TEŞEKKÜR ..... i
İÇİNDEKİLER ..... ii
KISALTMALAR LİSTESİ ..... iv
ŞEKİLLER LİSTESİ ..... v
TABLOLAR LİSTESİ ..... vi
ÖZET ..... vii
SUMMARY ..... vii

BÖLÜM 1.
GİRİŞ ..... 1

BÖLÜM 2.
HESAPLAMA YÖNTEMİ ..... 4
2.1. Merkezi Alan Yaklaşıklığı ve Çarpım Dalga Fonksiyonları..... 4
2.2. Hartree-Fock (HF) Yaklaşıklığı ..... 8
2.3.Çok Elektronlu Atomlarda Elektronların Karşılıklı Etkileşmesi ..... 9
2.4. Relativistik Hartree-Fock (HFR) Yöntemi..... 10
2.4.1. Bir-elektron ve toplam bağlanma enerjileri..... 11
2.4.2. Enerji seviyelerinin Landé *g*-çarpanları..... 14
2.4.3. Relativistik düzeltmeler..... 16
2.5. Işımalı Geçişler..... 18
2.5.1. Elektrik dipol geçişleri..... 18
2.6. HFR ile Atomik Yapı Hesaplama Adımları..... 22

BÖLÜM 3.
TARTIŞMA VE SONUÇ …….……..…… 25
3.1. Ce IV'ün Bazı Seviyelerinin Enerjileri, Landé *g*-çarpanları ve Yarı Ömürleri……..... 26
3.2. Ce IV'ün Elektrik Dipol Geçişleri için Dalga Boyları, Ağırlıklı Salınıcı Şiddetleri ve Geçiş Olasılıkları……..... 39

KAYNAKLAR…….. 50
ÖZGEÇMİŞ……... 52

## KISALTMALAR LİSTESİ

| | |
|---|---|
| CSFs | : Konfigürasyon hal fonksiyonları (Configuration state functions) |
| DHF | : Dirac Hartree-Fock |
| EHF | : Genişletilmiş Hartree-Fock (Extended Hartree-Fock) |
| HF | : Hartree-Fock |
| HFR | : Relativistik Hartree-Fock (Relativistic Hartree-Fock) |
| NHF | : Ortogonal olmayan Hartree-Fock (Nonorthogonal Hartree-Fock) |
| NIST | : National institute of standards and technology's web site |
| QED | : Kuantum elektrodinamik (Quantum electrodynamic) |
| SCF | : Öz-uyum alan (Self-consistent field) |
| SDHF | : Tekli-determinant Hartree-Fock (Single-determinant Hartree-Fock) |
| SUHF | : Spin-kısıtlamasız Hartree-Fock (Spin-unrestricted Hartree-Fock) |
| UHF | : Kısıtlanmamış Hartree-Fock (Unrestricted Hartree-Fock) |

# ŞEKİLLER LİSTESİ

Şekil 2.1. HFR ile atomik yapı hesap adımları..... 24

# TABLOLAR LİSTESİ


Tablo 3.1. Ce IV'ün düşük seviyelerinin E enerjileri ($cm^{-1}$) ve Landé *g*-çarpanları…… 27

Tablo 3.2. Ce IV'ün yüksek uyarılmış seviyelerinin E enerjileri ($cm^{-1}$) ve Landé *g*-çarpanları…….. 29

Tablo 3.3. Ce IV'ün $5p^6 5d$ ve $5p^6 6p$ seviyeleri için yarı ömürleri (ns)……... 37

Tablo 3.4. Ce IV'ün bazı uyarılmış seviyelerinin yarı ömürleri (ns) ……. 37

Tablo 3.5. Ce IV'ün elektrik dipol (E1) geçişleri için $\lambda$ dalga boyları (Å), log(*gf*) logaritmik ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve $gA_{ki}$ ağırlıklı geçiş olasılıkları ($s^{-1}$)…….. 42

# ÖZET

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

Bu çalışmada, relativistik Hartree-Fock (Relativistic Hartree-Fock–HFR) yöntemi kullanılarak üç kez iyonlaşmış seryumun (Ce IV, Z = 58) bazı uyarılmış seviyelerinin relativistik enerjileri, Landé *g*-çarpanları, yarı ömürleri ve bu seviyeler arasındaki elektrik dipol (E1) geçişine ait dalga boyları, salınıcı şiddetleri ve geçiş olasılıkları gibi geçiş parametreleri hesaplanmaktadır.

İlk bölümde; Ce IV ile ilgili yapılmış mevcut çalışmalar, ikinci bölümde; relativistik Hartree-Fock yöntemi hakkında özet bilgiler verilmektedir. Cowan'ın program paketi kullanılarak elde edilen sonuçlar diğer deneysel ve teorik çalışmalar ile karşılaştırmalı olarak son bölümde sunulmaktadır.

# ATOMIC STRUCTURE CALCULATIONS OF THE TRIPLY IONIZED CERIUM ATOM (Ce IV)

## SUMMARY

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

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

In the first chapter previous works on Ce IV have been given. Second chapter deals with relativistic Hartree-Fock method. Results obtained using the Cowan's program package have been compared with other experimental and theoretical works in the last chapter.

# BÖLÜM 1. GİRİŞ

Nadir toprak elementleri olarak da bilinen lantanitler (Z = 57−71), 4f yörüngesine elektron katılımıyla oluşan konfigürasyon yapısına sahiptir. Özellikle +3 değerlikli hallerinde birbirlerine çok benzeyen özellikler gösterirler. Kuvvetli elektropozitif olmaları nedeniyle, üretilmeleri zordur. Çoğunun iyon hallerinin karakteristik renkleri vardır. Genellikle oksit ve fluorürleri karışımının elektrolizi ile karışım halinde elde edilirler. Ayrıca birçok bileşikleri paramanyetik özellikler gösterir.

Lantanitlerin spektrum yapı bilgisine pek çok alanda ihtiyaç vardır. Örneğin güneşin spektrumunda ve farklı türdeki yıldızların kimyasal bileşenlerinde bulundukları için astrofizikte önemlidirler. Yine ticari amaçlı olarak matal-halojenür yüksek-yoğunluklu boşaltım lambalarında kullanılmaktadır. Ayrıca, lambaların dizaynı ve sistem kontrolleri için kullanılan modellerde doğru atomik verilere ihtiyaç vardır [1].

Seryum tabiatta en bol bulunan nadir toprak elementlerindendir. Seryum ve bileşiklerinin pek çok kullanım alanı vardır. Bu metal çakmaktaşı olarak, çeşitli alaşımlarda yükseltgenmeyi önleyici ve vakum tüplerinde oksijen giderici olarak kullanılır. Jet motorlarında kullanılan, yüksek sıcaklığa dayanıklı alaşımlar %3 oranında seryum ihtiva ederler. Metal olarak, sinema, televizyon ve benzeri sanayilerde aydınlatma maksadıyla kullanılan karbonla doyurulmuş ark lambalarında da kullanılır. Ayrıca, cam üretiminde renk giderici olarak ve porselen kaplamalarda saydamsızlık verici olarak faydalanılır.

Bu çalışmada seryumun üç kez iyonlaşmış hali (Ce IV, Z = 58) için atomik yapı hesaplamaları yapıldı. Sezyum (Cs) benzeri elektron diziliminin bir üyesi olarak, üç kez iyonlaşmış seryum (Ce IV) iyonu, tam dolu $5p^6$ alt kabuğunun dışında tek

değerlik (valans) elektronuyla basit bir elektronik yapıya sahiptir. Ce IV'ün taban konfigürasyonu [Cd]$5p^6$4f ve uyarılmış halleri de [Cd]$5p^6$nl şeklindedir.

Üç kez iyonlaşmış seryumla ilgili mevcut çalışmalar nötral ya da diğer iyonlaşmış hallerine göre daha azdır. Ce IV'ün 6s−6p spektrumundaki sınıflandırılmış ilk çizgileri, Gibbs ve White tarafından verilmiştir [2]. Seryumun yoğunlaştırılmış kıvılcım spektrumu mor ötesi ışınlarda Badami tarafından incelenmiştir [3]. $5p^6$5d taban konfigürasyonu ile enerji seviyelerinin ilk seti Lang tarafından sunulmuştur [4]. Lang, Ce IV'ün 4f−5d çoklu geçişinin yerleştirilmesinde ve $5p^6$4f gibi taban konfigürasyonunun belirlenmesinde başarılı olmuştur [5]. Lang tarafından bulunan 6d $^2$D terimi çok büyük bir ince yapı yarılmasına sahiptir [6]. Ce IV'ün enerji seviyelerinin derlemesi Martin ve çalışma arkadaşları tarafından verilmiştir [7]. Migdalek ve Baylis iyonlaşma potansiyellerinde, öz kutuplaşması, gevşeme ve relativistik etkilerin önemini çalışmışlardır [8]. Daha sonra Ce IV'teki 6s−6p geçişleri için relativistik tek-konfigürasyonlu Hartree–Fock yöntemi ile salınıcı şiddetlerini rapor etmişlerdir [9]. Tek-konfigürasyonlu relativistik Hartree–Fock iyonlaşma potansiyelleri Migdalek ve Bojara tarafından öz polarizasyon için iki farklı yaklaşıklık kullanılarak elde edilmiştir [10]. Migdalek ve Wyrozumska relativistik model potansiyel yaklaşıklığının farklı çeşitleri ile 6s−6p, 5d−6p, 4f−5d, 5d−5f, 5d−6f, 6p−6d ve 6p−7d geçişlerinin salınıcı şiddetlerini hesaplamışlardır. Bu yöntemler öz polarizasyonu içeren fakat değerlik-öz elektronlarının değiş tokuşunu içermeyen model potansiyelli, öz-polarizasyonlu ve yarı klasik değiş-tokuşlu model potansiyelli ve öz-polarizasyonlu ve deneysel olarak düzeltilmiş değiş-tokuşlu model potansiyelli yöntemleridir [11]. Zhang ve çalışma arkadaşları lazer spektrosopik teknikleri kullanarak Ce IV için ilk yarı ömür ölçümlerini rapor etmişlerdir [12]. Ce IV için enerjiler, geçiş olasılıkları ve elektron-dipol-momenti arttırma faktörleri Savukov ve çalışma arkadaşları tarafından relativistik çok cisim katkı teorisi kullanılarak sunulmuştur [13]. Reader ve Wyart üç kez iyonlaşmış seryumun enerji seviyelerini ve dalga boyu ölçümlerini rapor etmişlerdir [14]. Zilitis, Ce IV'ün rezonans geçişleri için Dirac-Fock yöntemi ile salınıcı şiddetlerini hesaplamıştır [15] Ayrıca, Glushkov içerisinde Ce IV'ünde bulunduğu Cs ve Rb benzeri iyonların salınıcı şiddetlerini sunmuştur [16].

Bu çalışmada Ce IV'ün atomik özelliklerinin incelenmesi için çok elektronlu atomlar için kullanılan konfigürasyon etkileşimi ve relativistik etkileri içeren relativistik Hartree-Fock (Relativistic Hartree-Fock–HFR) [17] yaklaşıklığı kullanılarak $5p^6nf$ (n = 4−30), $5p^6np$ (n = 6−30), $5p^6nd$ (n = 5−30), $5p^6ns$ (n = 6−30) ve $5p^6ng$ (n = 5−30) konfigürasyonlara ait seviyeler için relativistik enerjileri, Landé *g*-çarpanları, seviye yarı ömürleri ve bu seviyeler arasındaki elektrik dipol (E1) geçişleri için dalga boyları, salınıcı şiddetleri, geçiş olasılıkları hesaplandı [18]. Hesaplamalar Cowan'ın HFR program paketi [19] ile elde edildi.

# BÖLÜM 2. HESAPLAMA YÖNTEMİ

## 2.1. 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 ve merkezi alan yaklaşıklığına ve değişim yöntemine dayanır.

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

$$H \approx H_0 = \sum_{i=1}^{N} \left( -\frac{1}{2}\nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} + V(r_i) \right) \tag{2.1}$$

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

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

$$H_0\psi_0(q_1,...,q_N) = E_0\psi_0(q_1,...,q_N) \tag{2.2}$$

olduğundan ve $H_0$ ayrıştırılabildiği için özdeğer ve özfonksiyonlar sırasıyla

$$E_0 = \sum_{i=1}^{N} E_i \tag{2.3}$$

ve

$$\psi_0(q_1,...,q_N) = \prod_{i=1}^{N} \phi(\alpha_i;q_i) \tag{2.4}$$

olarak yazılır. Schrödinger denklemi de böylece

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + U(r)\right]\phi(\alpha;q) = E\phi(\alpha;q) \tag{2.5}$$

olur. Burada $U(r)$ potansiyeli

$$U(r) = -\left(\frac{Z}{r}\right) + V(r) \tag{2.6}$$

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

$H_0$ Hamiltonyeni elektron koordinatlarının yer değişiminden bağımsız olduğu için (2.4) çarpım fonksiyonundaki koordinatların yer değişimi ile bir özfonksiyon elde edilir. Yer değiştirmiş çarpım fonksiyonları birleştirilerek antisimetrik bir fonksiyon oluşturulur:

$$\Phi(q_1,...,q_N) = A\prod_{i=1}^{N} \phi(\alpha_i;q_i) \tag{2.7}$$

Bu fonksiyon

$$\Phi(q_1,...,q_N)=\frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix}\phi(\alpha_1;q_1) & \phi(\alpha_1;q_2) & \dots & \phi(\alpha_1;q_N)\\ \phi(\alpha_2;q_1) & \phi(\alpha_2;q_2) & \dots & \phi(\alpha_2;q_N)\\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots\\ \phi(\alpha_N;q_1) & \phi(\alpha_N;q_2) & \dots & \phi(\alpha_N;q_N)\end{vmatrix} \tag{2.8}$$

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

$$\pi=(-1)^{l_1}(-1)^{l_2}...(-1)^{l_N}=(-1)^{\sum_i l_i} \tag{2.9}$$

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

$$-\sum_{i=1}^{N}V(r_i)+\sum_{i<j}^{N}\frac{1}{r_{ij}} \tag{2.10}$$

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

$$E = \langle \Phi(\gamma L M_L S M_S) | H | \Phi(\gamma L M_L S M_S) \rangle \tag{2.11}$$

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

$$\begin{array}{l} L = 0\ 1\ 2\ 3\ 4\ 5\ 6\ 7\ \ldots \\ \quad S\ P\ D\ F\ G\ H\ I\ K\ \ldots \end{array} \tag{2.12}$$

şeklinde spektroskopik gösterimle verilir ve 2*S*+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 $\psi$ özfonksiyonlarına iyi bir yaklaşıklıktır. Daha iyi yaklaşıklıklar CSF'lerin lineer birleşimi olarak elde edilir:

$$\Psi(\gamma LS) = \sum_{i=1}^{M} c_i \Phi(\gamma_i LS) \tag{2.13}$$

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

## 2.2. Hartree-Fock (HF) Yaklaşıklığı

Merkezi alan yaklaşıklığına göre her bir elektron aynı $(-Z/r)+V(r)$ potansiyelinde hareket ettiği için $V(r)$'nin seçimi önemlidir. Hartree, her bir elektronun kendi potansiyeline sahip olduğunu ileri sürmüştür. Bir $nl$ elektronu için potansiyel, sistemdeki diğer elektronların küresel olarak ortalama yük dağılımından (veya elektron bulutundan) belirlenir. Bu kabullenimden Hartree, Hartree denklemleri olarak bilinen denklemleri türetti. Bunlar bir elektronun bir diğerine bağlı yük dağılımı şeklinde katlı radyal denklemlerdir. Hartree bu denklemlerin 'öz uyumlu alan' denilen tekrarlamalı bir yöntem ile çözülebileceğini önermiştir. Hartree dalga denkleminin çözümü, radyal fonksiyonların çarpımı olan küresel simetrik bir dalga fonksiyonu verir. Fock, bu denklemlerin Pauli dışarlama ilkesini sağlamadığına dikkat çekmiştir. Basit sistemleri ele alarak, bir tek determinant ve değişim prensibini uygulayarak, 'değiş tokuş terimleri' denilen antisimetriklikten ortaya çıkan bazı ek terimler hariç Hartree denklemlerine benzer denklemler türetmiştir.

HF yaklaşıklığı, çok elektronlu sistemler için yaklaşık toplam dalga fonksiyonlarını elde eden bir yöntemdir. Bu yöntem, atom, molekül ve katıhal sistemlerini içeren kuantum mekaniğinin pek çok alanına başarılı bir şekilde uygulanmaktadır. Bu yöntem merkezi alan yaklaşıklığını ve değişim prensibini esas alır.

Hartree-Fock yöntemi yaklaşık toplam dalga fonksiyonunu elde etmek amacı ile özetle üç kısımdan oluşur. Birinci olarak, dalga fonksiyonu için bir fonksiyon seçilir ve daha sonra, belirlenecek olan baz (temel) fonksiyonları cinsinden tanımlanır. Sonra bu fonksiyonlar cinsinden toplam enerji için bir ifade türetilir. Son olarak, değişim prensibi uygulanır ve türetilen denklemlerin çözümleri toplam enerjiyi kararlı yapan fonksiyonlardır.

Yörüngeler $(n_1 l_1)^{q_1}(n_2 l_2)^{q_2}...(n_m l_m)^{q_m}$ şeklindeki tekli konfigürasyonun yörüngeleri olduğu zaman Hartree-Fock yöntemleri değişik şekilde sınıflandırılabilir. Bu yöntemler, esas olarak radyal fonksiyonun yörünge kuantum sayılarına bağlılığına

göre değişiklik gösterir. Radyal fonksiyon sadece $(nl)$ kuantum sayılarına bağlı ise dalga fonksiyonu bir tekli Slater determinantı şeklindedir. Bu durumda yaklaşıklığa 'tekli-determinant Hartree-Fock (SDHF) yöntemi' denir.

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

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

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

### 2.3. Çok Elektronlu Atomlarda Elektronların Karşılıklı Etkileşmesi

Hartree-Fock yöntemi pek çok atomik özelliğin oldukça iyi tahminlerini verir. Fakat dikkatli analiz yapıldığında, sistematik farklılıklar gözlenebilir. Gözlenen veriler relativistik etkiler, sonlu kütle ve çekirdek hacmi gibi diğer etkileri içerir ve hafif (küçük) atomlar için küçüktürler. Böyle sistemler için farklılığın en büyük kaynağı,

Hartree-Fock çözümünün Schrödinger denkleminin gerçek çözümüne bir yaklaşıklık olması gerçeğinden ve elektronların hareketindeki karşılıklı etkileşme fikrinin ihmalinden ortaya çıkar. Hartree-Fock yönteminde, her bir elektronun diğer elektronlar tarafından belirlenen bir alanda bağımsız olarak hareket ettiği kabul edilir. Bu nedenle enerjideki hata 'karşılıklı etkileşme (korelasyon) enerjisi' olarak tanımlanır.

$$E^{Kor.} = E^{Gerçek} - E^{HF} \tag{2.14}$$

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

Enerji seviye değerlerini ve ışımalı geçiş parametrelerini de etkileyen elektronların karşılıklı etkileşmeleri genel olarak üç farklı şekilde sınıflandırılır. a ve b iki yörünge olmak üzere, ab yörüngelerinden elektron uyarılmaları gerçekleştiğinde, ab yörüngelerinin ikisi de değerlik (valans) yörüngesi ise bu korelasyona değerlik-değerlik korelasyonu, ab yörüngelerinin biri öz, diğeri değerlik yörüngesi ise bu korelasyona öz-değerlik korelasyonu denir. Yani öz-değerlik korelasyonunda değerlik yörüngesinin yanı sıra, kapalı alt tabakalardan da uyarılmalar olur. Elektron uyarılmalarının yapıldığı yörüngelerin her ikisi de öz yörüngesi ise bu korelasyona da öz-öz korelasyonu denir. Bu korelasyon modelinde tüm uyarılmalar kapalı yörüngelerden olur [20].

## 2.4. Relativistik Hartree-Fock (HFR) Yöntemi

Cowan tarafından geliştirilen bu yaklaşık yöntemde [17] Hamiltonyen atomik birimlerde

$$\boldsymbol{H} = -\sum_i \nabla_i^2 - \sum_i \frac{2Z}{r_i} + \sum_{i>j} \frac{2}{r_{ij}} + \sum_i \xi_i(r_i)(\boldsymbol{l}_i.\boldsymbol{s}_i) \tag{2.15}$$

olarak alınır. Burada $r_i = |\boldsymbol{r}_i|$ çekirdekten $i.$ elektrona olan uzaklık, $r_{ij} = |\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|$, $i.$ ve $j.$ elektronlar arasındaki uzaklık ve $i > j$ üzerinden toplam elektronların tüm çiftleri üzerindendir. $\xi_i$, yörünge- ve spin-açısal momentum işlemcilerinin skaler çarpımının bir orantı sayısıdır:

$$\xi(r) = \frac{\alpha^2}{2}\frac{1}{r}\left(\frac{dV}{dr}\right) \tag{2.16}$$

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

$$\boldsymbol{H}\Psi^k = E^k\Psi^k \tag{2.17}$$

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

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

### 2.4.1. Bir-elektron ve toplam bağlanma enerjileri

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

$$\sum_{i=1}^{N} f_i \equiv \sum_i f\left(\boldsymbol{r}_i\right) \tag{2.18}$$

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

$$\sum_{i=2}^{N}\sum_{j=1}^{i-1} g_{ij} \equiv \sum\sum_{i>j} g\left(\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{r}_j\right) \tag{2.19}$$

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

$$\left\langle \Psi \middle| \sum_i \xi_i\left(\boldsymbol{l}_i.\boldsymbol{s}_i\right) \middle| \Psi \right\rangle = \sum_i \left\langle n_i l_i m_{l_i} m_{s_i} \middle| \xi\left(\boldsymbol{l}.\boldsymbol{s}\right) \middle| n_i l_i m_{l_i} m_{s_i} \right\rangle \tag{2.20}$$

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

$$E_{ort.} = \sum_i \left\langle i \middle| -\nabla^2 \middle| i \right\rangle_{ort.} + \sum_i \left\langle i \middle| -2Z/r_1 \middle| i \right\rangle_{ort.} + \sum_{i>j}\left[\left\langle ij \middle| 2/r_{12} \middle| ij \right\rangle_{ort.} - \left\langle ij \middle| 2/r_{12} \middle| ji \right\rangle_{ort.}\right] \tag{2.21}$$

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

$$E^i = E_k^i + E_n^i + \sum_{j\neq i} E^{ij} \tag{2.22}$$

olur. Tüm $N$ elektronun konfigürasyon-ortalama toplam bağlanma enerjisi

$$E_{ort.} = \sum_i E_k^i + \sum_i E_n^i + \sum \sum_{i>j} E^{ij} \tag{2.23}$$

$$= \frac{1}{2} \sum_i \left( E_k^i + E_n^i + E^i \right) \tag{2.24}$$

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

$$E_k^i \equiv \left\langle i \middle| -\nabla^2 \middle| i \right\rangle_{ort.} = \int_0^\infty P_{n_i l_i}^*(r) \left[ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l_i(l_i+1)}{r^2} \right] P_{n_i l_i}(r)\, dr\,, \tag{2.25}$$

elektron-çekirdek etkileşme enerjisi için

$$E_n^i \equiv \left\langle i \middle| -2Z/r \middle| i \right\rangle = \int_0^\infty (-2Z/r) \left| P_i(r) \right|^2 dr \tag{2.26}$$

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

$$E^{ij} = F^0(ij) - \frac{1}{2} \sum_k \begin{pmatrix} l_i & k & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 G^k(ij) \tag{2.27}$$

ve özdeş elektronlar için

$$E^{ii} = F^0(ii) - \frac{(2l_i+1)}{(4l_i+1)} \sum_{k>0} \begin{pmatrix} l_i & k & l_i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 F^k(ii) \tag{2.28}$$

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

$$R^k(\alpha,\beta;\alpha',\beta') = \int_0^\infty\int_0^\infty P(\alpha;r)P(\alpha';r)U^k(r,s)P(\beta;s)P(\beta';s)drds \tag{2.29}$$

Burada

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

$$= \frac{r^k}{s^{k+1}}, \quad r < s \tag{2.30}$$

şeklindedir. Bu durumda

$$F^k(nl,n'l') = R^k(nl,n'l';nl,n'l') \tag{2.31}$$

ve

$$G^k(nl,n'l') = R^k(nl,n'l';n'l',nl) \tag{2.32}$$

dir.

### 2.4.2. Enerji seviyelerinin Landé *g*-çarpanları

Zeeman etkisi, dış manyetik alan ile atomun manyetik momenti arasındaki

$$H_m = -\boldsymbol{\mu}.\mathbf{B} \tag{2.33}$$

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

$$\boldsymbol{\mu} = -\mu_B(\mathbf{L} + g_S\mathbf{S}) \tag{2.34}$$

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

$$\Delta E(\gamma JM) = \langle \gamma JM | H_m | \gamma JM \rangle = \mu_B B \langle \gamma JM | L_z + g_s S_z | \gamma JM \rangle \tag{2.35}$$

$$\begin{aligned}\Delta E(\gamma JM) &= \langle \Psi(\gamma JM) | H_m | \Psi(\gamma JM) \rangle \\ &= \mu_B B \sum_{j,k} c_j c_k \langle \Phi(\gamma_j L_j S_j JM) | L_z + g_s S_z | \Phi(\gamma_k L_k S_k JM) \rangle\end{aligned} \tag{2.36}$$

şeklindedir. CSF'ler arasındaki matris elemanları da

$$\langle \Phi(\gamma LSJM) | L_z + g_s S_z | \Phi(\gamma' L' S' JM) \rangle = \delta_{\gamma\gamma'} \delta_{LL'} \delta_{SS'} g_J(LS) M \tag{2.37}$$

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

$$g_J(LS) = 1 + (g_s - 1)\frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \tag{2.38}$$

Bu ifade dikkate alındığında enerji yarılması

$$\Delta E(\gamma LS) = \mu_B B g_{\gamma J} M \tag{2.39}$$

olur.

### 2.4.3. Relativistik düzeltmeler

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

$$E_r = \sum_{i=1}^{N} E_r^i = \sum_{i=1}^{N} \left( E_m^i + E_D^i \right) \tag{2.40}$$

Burada kütle-hız ve Darwin katkıları

$$E_m^i = -\frac{1}{4}\alpha^2 \int_0^\infty P_i(r)\left(\varepsilon_i - V^i(r)\right)^2 P_i(r)\,dr \tag{2.41}$$

ve

$$E_D^i = -\delta_{l_i 0}\frac{1}{4}\alpha^2 \int_0^\infty P_i(r)\left[\frac{dV^i(r)}{dr}\right]\left[r\frac{dr^{-1}P_i(r)}{dr}\right]dr \tag{2.42}$$

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

$$P'_\kappa = -\frac{\kappa}{r}P_\kappa + \frac{\alpha}{2}\left(\varepsilon_i - V^i + \frac{4}{\alpha^2}\right)Q_\kappa \tag{2.43}$$

ve

$$Q'_\kappa = \frac{\alpha}{2}\left(V^i - \varepsilon_i\right)P_\kappa + \frac{\kappa}{r}Q_\kappa \tag{2.44}$$

şeklindedir. Burada $P_\kappa$ ve $Q_\kappa$ sırasıyla büyük ve küçük bileşenli radyal fonksiyonlardır. $\varepsilon_i$ ve $V^i$ Rydbergs biriminde ölçülür ve

$$\kappa = \begin{cases} l_i, \; j = l_i - 1/2 \\ -l_i - 1, \; j = l_i + 1/2 \end{cases} \tag{2.45}$$

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

$$\frac{2l_i l_i / r - (2l_i+2)(l_i+1)/r}{(4l_i+2)} = -\frac{1}{r} \tag{2.46}$$

ve buradan da *j*'den bağımsız radyal dalga fonksiyonu için

$$\begin{aligned} &\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l_i(l_i+1)}{r^2} + V^i(r) - \frac{\alpha^2}{4}\left[\varepsilon_i - V^i(r)\right]^2 \right. \\ &\left. -\delta_{l_i 0}\frac{\alpha^2}{4}\left[1 + \frac{\alpha^2}{4}\left(\varepsilon_i - V^i(r)\right)\right]^{-1}\left(\frac{dV^i}{dr}\right)\left(\frac{dP_i/dr}{P_i} - \frac{1}{r}\right)\right\} P_i(r) = \varepsilon_i P_i(r) \end{aligned} \tag{2.47}$$

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 (2.47)'den çıkararak kütle bağımsız radyal

fonksiyonlar elde edilir. (2.47)'den elde edilen etki de $(2j+1)$ ağırlıklı ortalamanın ilk $P_\kappa$ relativistik fonksiyona alınmasıdır.

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2}+\frac{l_i(l_i+1)}{r^2}+V^i(r)\right]P_i(r)=\varepsilon_i P_i(r) \tag{2.48}$$

(2.48) ile karşılaştırma yapıldığında (2.47)'nin sol parantez içindeki çarpan yalnızca $V^i$'de $P_i$'yi değil onun yanında $\varepsilon_i$'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.

## 2.5. Işımalı Geçişler

### 2.5.1. Elektrik dipol geçişleri

Bu yöntemde elektrik dipol momenti üç değişik şekilde incelenmektedir:

$$\left\langle \gamma JM \left| \sum_i \boldsymbol{r}(i) \right| \gamma' J' M' \right\rangle, \tag{2.49}$$

$$2(E'-E)^{-1}\left\langle \gamma JM \left| \sum_i \nabla_i \right| \gamma' J' M' \right\rangle \tag{2.50}$$

ve

$$2(E'-E)^{-2}\left\langle \gamma JM \left| \sum_i \nabla_i V \right| \gamma' J' M' \right\rangle \tag{2.51}$$

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

(2.50) ve (2.51)'deki 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

$$\boldsymbol{S} \equiv \left|\left\langle \gamma J \left\| \boldsymbol{P}^{(1)} \right\| \gamma' J' \right\rangle\right|^2 \tag{2.52}$$

olarak bilinir. Burada

$$\boldsymbol{P}_q^{(1)} \equiv \sum_{i=1}^{N} r_q^{(1)}(i) = \sum_{i=1}^{N} r_i C_q^{(1)}(i) \tag{2.53}$$

$-ea_0$ biriminde ölçülen atomun klasik dipol momentidir.

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

$$A = \frac{64\pi^4 e^2 a_0^2 \sigma^3}{3h} \boldsymbol{S} \sum_{Mq} \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & q & M' \end{pmatrix}^2 = \frac{64\pi^4 e^2 a_0^2 \sigma^3}{3h(2J'+1)} \boldsymbol{S} \tag{2.54}$$

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

$$gA = (2J'+1)A = \frac{64\pi^4 e^2 a_0^2 \sigma^3}{3h} \boldsymbol{S} \tag{2.55}$$

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

$$f_{ij} = \frac{8\pi^2 mca_0^2\sigma}{3h(2J+1)}\boldsymbol{S} = \frac{2(E_j - E_i)}{3(2J+1)}\boldsymbol{S} \tag{2.56}$$

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 salınıcı şiddeti de

$$gf = (2J+1)f_{ij} = -(2J'+1)f_{ji} \tag{2.57}$$

veya

$$gf = \frac{8\pi^2 mca_0^2\sigma}{3h}\boldsymbol{S} \tag{2.58}$$

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

$$gA = \frac{8\pi^2 e^2\sigma^2}{mc}gf \tag{2.59}$$

olur.

$j$ seviyesindeki hallerin herhangi birinde atomun doğal yarı ömrü

$$\tau_j = \frac{1}{\sum_i A_{ji}} \tag{2.60}$$

ile verilir.

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

$$\mathbf{E}^{(k)} : \frac{\pi'}{\pi} = (-1)^k \tag{2.61}$$

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

$$\Delta J = J - J' = 0, \pm 1, ..., \pm k \,,\ k \le J + J' \tag{2.62}$$

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

CSF'lerin farklı açısal momentumları geçişe katılıp katılmamalarına göre aktif veya pasif olarak sınıflandırılabilirler. Pasif momentumlar, aktifler (2.62)'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,

$$\mathbf{E}^{(k)} : \Delta S = 0 \tag{2.63}$$

olarak verilebilir.

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

$$\mathbf{E}^{(k)} : \Delta L = 0, \pm 1, ..., \pm k \ , \ k \leq L + L' \tag{2.64}$$

olarak tayin eder.

## 2.6. HFR ile Atomik Yapı Hesaplama Adımları

Cowan program paketi [19] ile hesaplama adımları aşağıdaki şekildedir:

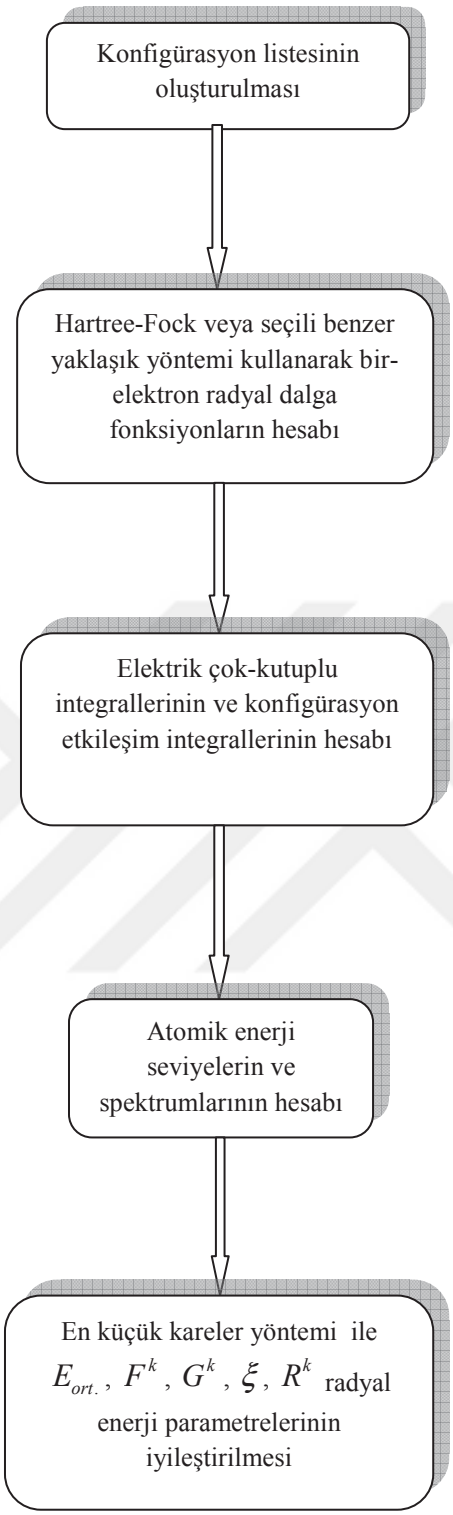
1. Hartree-Fock veya herhangi bir yaklaşık yöntemi kullanarak özel elektron konfigürasyonlarının herhangi bir sayısının her biri için bir-elektron (bağlı veya serbest) radyal dalga fonksiyonları hesaplanır. Her konfigürasyon için çıkış dosyası konfigürasyonun ortalama enerjisini $(E_{ort.})$ ve bu konfigürasyonun enerji düzeylerini hesaplamakta gerekli olan radyal Coulomb $(F^k$ ve $G^k)$ ve spin-yörünge integrallerini içerir.

2. Konfigürasyonların her bir çiftleri arasındaki elektrik dipol $(E1)$ radyal integralleri ve etkileşme konfigürasyonlarının her bir çifti arasındaki konfigürasyon-etkileşme Coulomb integrallerini $(R^k)$ hesaplamak için gerekli dalga fonksiyonları kullanılır. Hesaplanan veriler atomik spektrumların hesaplanmasında kullanılır.

3. Özdeğer (enerji seviyeleri) ve özvektörleri hesaplamak için her bir matris köşegenleştirilerek $J$ toplam açısal momentumun olası her değeri için enerji matrisi kurulur.

4. $E1$ ışımalı spektrumu için dalga boyları, salınıcı şiddetleri, geçiş olasılıkları ve yarı ömürler hesaplanır.

5. Daha yüksek doğrulukta sonuçlar istenildiğinde, tekrarlamalı bir yöntemle deneysel enerji seviyelerine en-küçük kareler yöntemi ile bir uydurulmasını yaparak $E_{ort.}$, $F^k$, $G^k$, $\xi$ ve $R^k$ çeşitli radyal enerji parametreleri değiştirilir. En küçük kareler uydurma parametrelerinin sonuçları atomik enerji seviyelerinin ve spektrumlarının hesaplanmasında tekrar kullanılabilir




Şekil 2.1. HFR ile atomik yapı hesap adımları

# BÖLÜM 3. TARTIŞMA VE SONUÇ

Bu çalışmada, lantanit atomlarından olan seryum (Z = 58) atomunun üç kez iyonlaşmış haline ait bazı atomik hesaplamalar yapıldı. Ce IV için konfigürasyon etkileşme yöntemlerinden Cowan [17] tarafından geliştirilen relativistik Hartree-Fock yöntemi (HFR) kullanılarak bazı seviye enerjileri, Landé *g*-çarpanları, dalga boyları, salınıcı şiddetleri, geçiş olasılıkları ve seviye yarı ömürleri hesaplamaları Cowan program paketi [19] ile elde edildi.

Ce IV'ün taban seviyesi [Xe] 4f $^2F^o_{5/2}$ dir. Hesaplamalar için A, B, C ve D olarak isimlendirilen dört konfigürasyon seti seçildi. Bu konfigürasyon setleri değerlik elektronun üst seviye uyarılmalarına ve öz-değerlik elektronları arasındaki karşılıklı etkileşmelere göre seçilmiştir. A hesabında [Xe] özü dışında nf (n = 4−30), np (n = 6−30), nd (n = 5−30), ng (n = 5−30) ve ns (n = 6−30) konfigürasyonları, B hesabında [Cd] özü dışında $5p^6nf$ (n = 4−20), $5p^6np$ (n = 6−20), $5p^54f^2$, $5p^54f6p$, $5p^6nd$ (n=5−20), $5p^6ng$ (n = 5−20) ve $5p^6ns$ (n = 6−20), $5p^54f5d$ ve $5p^54f6s$ konfigürasyonları, C hesabında [Cd] özü dışında $5p^6nf$ (n = 4 − 10), $5p^6np$ (n = 6−10), $5p^54f^2$, $5p^56p^2$, $5p^54f6p$, $5p^6nd$ (n = 5−10), $5p^6ng$ (n = 5−10), $5p^6ns$ (n = 6 − 10), $5p^54f5d$, $5p^56s6p$, $5p^55d6p$ ve $5p^54f6s$ konfigürasyonları ve D hesabında ise [Cd] özü dışında $5p^6nf$ (n = 4 − 10), $5p^6np$ (n = 6 − 10), $5p^54f^2$, $5p^56p^2$, $5p^54f6p$, $5p^6nd$ (n = 5−10), $5p^6ng$ (n = 5−10), $5p^6ns$ (n = 6 − 10), $5p^54f5d$, $5p^54f6s$, $5p^54f6d$ ve $5p^55d6p$ konfigürasyonları alınarak hesaplamalar yapıldı.

Cowan [17] tarafından geliştirilen relativistik Hartree-Fock yaklaşıklığı Schrödinger denklemine dayalı olmasına rağmen spin-yörünge etkisi yanında kütle-hız düzeltmeleri ve Darwin katkıları gibi relativistik etkileri de içerir. HFR hesaplamalarında, Hamiltonyenin hesaplanan özdeğerleri mevcut deneysel enerji seviyeleri kullanılarak en küçük kareler yöntemi ile gözlenen enerji seviyelerine

uydurma yaparak iyileştirildi. En küçük kareler yönteminde spin-yörünge parametrelerinin ölçeklendirme faktörü temel kuantum mekaniksel hesaptaki değerlerinde bırakılırken Slater parametreleri ($F^k$ ve $G^k$) ve konfigürasyon etkileşme integralleri ($R^k$) için ölçeklendirme faktörlerinin iyileştirilmemiş A, B, C ve D hesapları için 0,75 olarak seçildi. Ölçeklendirme faktörlerinin bu düşük değerleri ağır elementler için Cowan [17] tarafından öne sürülmüştür. En küçük kareler yöntemiyle elde edilen uydurma parametreleriyle elektrik dipol geçişleri tekrar hesaplandı.

## 3.1. Ce IV'ün Bazı Seviyelerinin Enerjileri, Landé *g*-çarpanları ve Yarı Ömürleri

HFR [19] program paketi ile Ce IV'ün $5p^6nf$ (n = 4 − 30), $5p^6np$ (n = 6 − 30), $5p^6nd$ (n = 5−30), $5p^6ng$ (n = 5−30) ve $5p^6ns$ (n = 6 − 30) konfigürasyonlarının relativistik enerjileri ve Landé *g*-çarpanları için elde edilen sonuçlar Tablo 3.1. ve Tablo 3.2.'de 4f $^2F^o_{5/2}$ taban hal seviyesine göre $cm^{-1}$ birim sistemine göre verilmektedir. Tablolarda farklı konfigürasyon setlerine göre hesaplanan sonuçlar A, B, C ve D harfleriyle ve sadece tek pariteli seviyeler "$^o$" indisiyle belirtilmektedir.

Tablo 3.1.'de $5p^64f$ (n = 4−6), $5p^6np$ (n = 6, 7), $5p^6nd$ (n = 5−8) ve $5p^6ns$ (n = 6−8) $5p^6ng$ (n = 5, 6) seviyeleri için deneysel [21] ve teorik [11, 13, 14] sonuçları olduğundan sadece bu seviyeler için karşılaştırma yapılmıştır. Enerji sonuçlarının çoğu diğer çalışmalarla iyi bir uyum içindedir. Elde edilen sonuçların doğruluğunu göstermek için yüzde farklar (hata) $[|E_b - E_d|/E_d]\times100$ hesaplandı. Burada $E_b$, bu çalışmayı, $E_d$, diğer çalışmaları göstermektedir. Elde edilen sonuçlar ile diğer deneysel çalışmalardaki [21] sonuçlar arasındaki yüzde fark, $5p^65f$ $^2F^o_{7/2}$ ve $5p^66d$ seviyeleri dışında %0,00−0,02 aralığındadır. A, B, C ve D hesaplamaları için diğer teorik sonuçlar arasındaki yüzde farklar, [13] ile %1,28−4,57 ve [14] ile %0,00−0,71 aralığında olduğu görülmektedir. [11] çalışma ile olan yüzde farklar ise A, B, C ve D hesaplamaları için sırasıyla %0,00−1,35, %0,00−1,33, %0,00−1,64 ve %0,00−1,07 aralığındadır. $5p^66d$ uyarılmış seviyeleri için uyum azdır. $5p^66s$ ve $5p^66p$ seviyeleri dışında, Landé *g*-çarpanları sonuçları ilk kez bu çalışma ile rapor edilmiştir [18]. Landé *g*-çarpanlarının astrofizik gibi birçok bilimsel alanda önemi iyi bilinmektedir.

Ce IV için veri tabanlarında mevcut olmayan $5p^6nf$ (n = 7 − 30), $5p^6np$ (n = 8 − 30), $5p^6nd$ (n = 9−30), $5p^6ng$ (n = 7−30) ve $5p^6ns$ (n = 9 − 30) konfigürasyonlarının enerjileri ve Landé *g*-çarpanları Tablo 3.1. ve Tablo 3.2.'de sunulmaktadır.

Tablo 3.1. Ce IV'ün düşük seviyelerinin E enerjileri ($cm^{-1}$) ve Landé *g*-çarpanları

| Seviyeler | | | E ($cm^{-1}$) | | *g*-çarpanı | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| Konf. | Terim | | Bu çalışma | Diğer çalışmalar | Bu çalışma | Diğer çalışmalar |
| $5p^64f$ | $^2F^o_{5/2}$ | A | 0,00 | 0,00[a] | 0,857 | – |
| | | B | 0,00 | | 0,857 | |
| | | C | 0,00 | | 0,857 | |
| | | D | -0,10 | | 0,857 | |
| | $^2F^o_{7/2}$ | A | 2252,90 | 2253[a] | 1,143 | – |
| | | B | 2253,00 | 2214[b] | 1,143 | |
| | | C | 2253,00 | 2252,50[c] | 1,143 | |
| | | D | 2253,00 | 2253,13[d] | 1,143 | |
| $5p^65d$ | $^2D_{3/2}$ | A | 49737,00 | 49737[a] | 0,800 | – |
| | | B | 49736,83 | 47563[b] | 0,800 | |
| | | C | 49737,14 | 49737,30[c] | 0,800 | |
| | | D | 49737,00 | 49737,20[d] | 0,800 | |
| | $^2D_{5/2}$ | A | 52226,00 | 52226[a] | 1,200 | – |
| | | B | 52225,91 | 50146[b] | 1,200 | |
| | | C | 52226,03 | 52226,33[c] | 1,200 | |
| | | D | 52226,40 | 52226,05[d] | 1,200 | |
| $5p^66s$ | $^2S_{1/2}$ | A | 86602,00 | 86602[a] | 2,002 | 1,95[a] |
| | | B | 86602,13 | 84578[b] | 2,002 | |
| | | C | 86610,45 | 86602,10[c] | 2,002 | |
| | | D | 86602,20 | 86602,20[d] | 2,002 | |
| $5p^66p$ | $^2P^o_{1/2}$ | A | 122585,00 | 122585[a] | 0,666 | 0,65[a] |
| | | B | 122585,00 | 120481[b] | 0,666 | |
| | | C | 122584,40 | 122585,29[c] | 0,666 | |
| | | D | 122584,90 | 122585,13[d] | 0,666 | |
| | $^2P^o_{3/2}$ | A | 127292,00 | 127292[a] | 1,334 | 1,36[a] |
| | | B | 127292,00 | 125136[b] | 1,334 | |
| | | C | 127294,70 | 127292,24[c] | 1,334 | |
| | | D | 127292,00 | 127292,21[d] | 1,334 | |
| $5p^66d$ | $^2D_{5/2}$ | A | 177198,00 | 177198[a] | 1,200 | – |
| | | B | 177114,81 | 177199,23[c] | 1,071 | |
| | | C | 178719,18 | 175827,57[d] | 1,221 | |
| | | D | 177185,40 | | 1,021 | |
| | $^2D_{3/2}$ | A | 178913,00 | 178913[a] | 0,800 | – |
| | | B | 178887,42 | 175072[b] | 0,877 | |
| | | C | 178569,12 | 178913,57[c] | 0,935 | |
| | | D | 178429,91 | 176533,62[d] | 0,831 | |
| $5p^67s$ | $^2S_{1/2}$ | A | 183502,00 | 183502[a] | 2,002 | – |
| | | B | 183542,07 | 181176[b] | 1,997 | |
| | | C | 183531,16 | 183501,73[c] | 1,995 | |
| | | D | 183511,81 | | 1,944 | |
| $5p^65f$ | $^2F^o_{5/2}$ | A | 184545,00 | 184545[a] | 0,857 | – |
| | | B | 184544,99 | 184543,00[c] | 0,857 | |
| | | C | 184546,30 | 183333,17[d] | 0,857 | |
| | | D | 184545,40 | | 0,857 | |

Tablo 3.1. (Devamı)

| Seviyeler | | | E ($cm^{-1}$) | | *g*-çarpanı | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| Konf. | Terim | | Bu çalışma | Diğer çalışmalar | Bu çalışma | Diğer çalışmalar |
| | $^2F^o_{7/2}$ | A | 184746,00 | 184746[a] | 1,143 | – |
| | | B | 185580,42 | 184744,88[c] | 1,141 | |
| | | C | 184744,80 | 183436,98[d] | 1,143 | |
| | | D | 184774,00 | | 1,162 | |
| $5p^67p$ | $^2P^o_{1/2}$ | A | 198761,50 | 198761,5[c] | 0,666 | – |
| | | B | 198173,30 | 197982,25[d] | 0,536 | |
| | | C | 197429,09 | | 0,540 | |
| | | D | 198168,10 | | 0,755 | |
| | $^2P^o_{3/2}$ | A | 201189,60 | 201189,59[c] | 1,334 | – |
| | | B | 201533,68 | 199939,75[d] | 1,362 | |
| | | C | 200716,00 | | 1,415 | |
| | | D | 201340,30 | | 1,335 | |
| $5p^67d$ | $^2D_{3/2}$ | A | 221661,00 | 221661[a] | 0,800 | – |
| | | B | 221623,44 | 221661,7[c] | 0,794 | |
| | | C | 221658,95 | 221857,18[d] | 0,794 | |
| | | D | 221660,00 | | 0,800 | |
| | $^2D_{5/2}$ | A | 221838,00 | 221838[a] | 1,200 | – |
| | | B | 221862,26 | 222579,25[c] | 1,199 | |
| | | C | 221852,27 | 222192,54[d] | 1,194 | |
| | | D | 221839,80 | | 1,200 | |
| $5p^68s$ | $^2S_{1/2}$ | A | 225128,00 | 225128[a] | 2,002 | – |
| | | B | 225128,11 | | 2,002 | |
| | | C | 225135,01 | | 2,002 | |
| | | D | 225128,00 | | 2,002 | |
| $5p^66f$ | $^2F^o_{5/2}$ | A | 225217,50 | 224759,74[d] | 0,857 | – |
| | | B | 225793,80 | | 0,857 | |
| | | C | 224795,60 | | 0,857 | |
| | | D | 225612,50 | | 0,857 | |
| | $^2F^o_{7/2}$ | A | 225293,40 | 224818,12[d] | 1,143 | – |
| | | B | 225912,60 | | 1,143 | |
| | | C | 224911,90 | | 1,143 | |
| | | D | 225746,60 | | 1,143 | |
| $5p^65g$ | $^2G_{7/2}$ | A | 225625,00 | 225625[a] | 0,889 | – |
| | | B | 225577,88 | | 0,889 | |
| | | C | 225635,35 | | 0,888 | |
| | | D | 225623,92 | | 0,889 | |
| | $^2G_{9/2}$ | A | 225625,00 | 225625[a] | 1,111 | – |
| | | B | 225669,37 | 227249,18[c] | 1,111 | |
| | | C | 225629,79 | | 1,111 | |
| | | D | 225621,78 | | 1,111 | |
| $5p^68d$ | $^2D_{3/2}$ | A | 247280,00 | 247279,6[c] | 0,800 | – |
| | | B | 247714,52 | | 0,800 | |
| | | C | 245558,76 | | 0,800 | |
| | | D | 247993,00 | | 0,800 | |
| | $^2D_{5/2}$ | A | 247504,00 | 247504,22[c] | 1,200 | – |
| | | B | 247807,11 | | 1,201 | |
| | | C | 245960,27 | | 1,201 | |
| | | D | 248731,80 | | 1,200 | |

Tablo 3.1. (Devamı)

| Seviyeler | | | E ($cm^{-1}$) | | *g*-çarpanı | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| **Konf.** | **Terim** | | **Bu çalışma** | **Diğer çalışmalar** | **Bu çalışma** | **Diğer çalışmalar** |
| $5p^6 6g$ | $^2G_{7/2}$ | A | 248199,00 | 248198,50[c] | 0,889 | – |
| | | B | 248927,01 | | 0,889 | |
| | | C | 247870,97 | | 0,889 | |
| | | D | 248945,30 | | 0,889 | |
| | $^2G_{9/2}$ | A | 248211,00 | 248211,12[c] | 1,111 | – |
| | | B | 249017,43 | | 1,111 | |
| | | C | 247939,67 | | 1,111 | |
| | | D | 249233,80 | | 1,111 | |

[a]NIST Atomik Spektrum Veritabanı [21], [b]Savukov ve arkadaşları [13], [c]Reader ve Wyart [14], [d]Migdalek ve Wyrozumska [11]

Tablo 3.2. Ce IV'ün yüksek uyarılmış seviyelerinin E enerjileri ($cm^{-1}$) ve Landé *g*-çarpanları

| Seviyeler | | | E ($cm^{-1}$) | *g*-çarpanı |
|---|---|---|---|---|
| **Konf.** | **Terim** | | **Bu çalışma** | **Bu çalışma** |
| $5p^6 8p$ | $^2P^o_{1/2}$ | A | 231878,50 | 0,666 |
| | | B | 231910,50 | 0,666 |
| | | C | 231901,40 | 0,666 |
| | | D | 230431,30 | 0,654 |
| | $^2P^o_{3/2}$ | A | 233766,90 | 1,334 |
| | | B | 232776,00 | 1,334 |
| | | C | 233771,70 | 1,334 |
| | | D | 232793,50 | 1,333 |
| $5p^6 7f$ | $^2F^o_{5/2}$ | A | 246665,30 | 0,857 |
| | | B | 247615,10 | 0,865 |
| | | C | 243294,80 | 0,969 |
| | | D | 246533,60 | 0,876 |
| | $^2F^o_{7/2}$ | A | 246709,90 | 1,143 |
| | | B | 248170,50 | 1,146 |
| | | C | 243354,09 | 1,142 |
| | | D | 247057,11 | 1,156 |
| $5p^6 9s$ | $^2S_{1/2}$ | A | 247179,70 | 2,002 |
| | | B | 247230,92 | 2,002 |
| | | C | 247186,29 | 2,002 |
| | | D | 247200,50 | 2,002 |
| $5p^6 9p$ | $^2P^o_{1/2}$ | A | 250649,50 | 0,666 |
| | | B | 250670,50 | 0,666 |
| | | C | 250656,20 | 0,665 |
| | | D | 250730,50 | 0,664 |
| | $^2P^o_{3/2}$ | A | 252176,60 | 1,334 |
| | | B | 250960,30 | 1,328 |
| | | C | 254073,90 | 1,305 |
| | | D | 252729,60 | 1,314 |
| $5p^6 8f$ | $^2F^o_{5/2}$ | A | 259556,70 | 0,857 |
| | | B | 261201,78 | 0,857 |
| | | C | 260333,70 | 0,859 |
| | | D | 259961,60 | 0,855 |
| | $^2F^o_{7/2}$ | A | 259585,10 | 1,143 |
| | | B | 260667,48 | 1,129 |
| | | C | 258579,60 | 1,158 |
| | | D | 262061,60 | 1,143 |

Tablo 3.2. (Devamı)

| Seviyeler | | | E ($cm^{-1}$) | *g*-çarpanı |
|---|---|---|---|---|
| **Konf.** | **Terim** | | **Bu çalışma** | **Bu çalışma** |
| $5p^6 9d$ | $^2D_{3/2}$ | A | 259614,60 | 0,800 |
| | | B | 259888,22 | 0,800 |
| | | C | 258671,57 | 0,800 |
| | | D | 259656,40 | 0,800 |
| | $^2D_{5/2}$ | A | 259712,10 | 1,200 |
| | | B | 260014,15 | 1,200 |
| | | C | 258794,82 | 1,200 |
| | | D | 259785,80 | 1,200 |
| $5p^6 10s$ | $^2S_{1/2}$ | A | 260284,40 | 2,002 |
| | | B | 260308,51 | 2,002 |
| | | C | 260283,80 | 2,002 |
| | | D | 260290,40 | 2,002 |
| $5p^6 7g$ | $^2G_{7/2}$ | A | 260922,20 | 0,889 |
| | | B | 261006,60 | 0,889 |
| | | C | 260971,29 | 0,889 |
| | | D | 260967,20 | 0,889 |
| | $^2G_{9/2}$ | A | 260923,10 | 1,111 |
| | | B | 261027,20 | 1,111 |
| | | C | 260984,84 | 1,111 |
| | | D | 260988,90 | 1,111 |
| $5p^6 10p$ | $^2P^o_{1/2}$ | A | 262127,10 | 0,666 |
| | | B | 262179,60 | 0,664 |
| | | C | 262179,50 | 0,661 |
| | | D | 262634,50 | 0,666 |
| | $^2P^o_{3/2}$ | A | 262465,60 | 1,334 |
| | | B | 262493,70 | 1,333 |
| | | C | 263494,80 | 1,332 |
| | | D | 262635,20 | 1,334 |
| $5p^6 9f$ | $^2F^o_{5/2}$ | A | 267919,60 | 0,857 |
| | | B | 268731,20 | 0,855 |
| | | C | 267869,40 | 0,828 |
| | | D | 267768,50 | 0,867 |
| | $^2F^o_{7/2}$ | A | 267938,70 | 1,143 |
| | | B | 268953,60 | 1,142 |
| | | C | 268360,21 | 1,143 |
| | | D | 267821,40 | 1,144 |
| $5p^6 10d$ | $^2D_{3/2}$ | A | 268326,30 | 0,800 |
| | | B | 268455,97 | 0,800 |
| | | C | 267327,29 | 0,800 |
| | | D | 268299,80 | 0,800 |
| | $^2D_{5/2}$ | A | 268391,10 | 1,200 |
| | | B | 268530,08 | 1,200 |
| | | C | 267403,18 | 1,200 |
| | | D | 268376,10 | 1,200 |
| $5p^6 11s$ | $^2S_{1/2}$ | A | 268754,70 | 2,002 |
| | | B | 268768,50 | 2,002 |
| $5p^6 8g$ | $^2G_{7/2}$ | A | 269473,20 | 0,889 |
| | | B | 269524,30 | 0,889 |
| | | C | 269501,54 | 0,889 |
| | | D | 269493,70 | 0,889 |

Tablo 3.2. (Devamı)

| Seviyeler | | | E ($cm^{-1}$) | *g*-çarpanı |
|---|---|---|---|---|
| **Konf.** | **Terim** | | **Bu çalışma** | **Bu çalışma** |
| | $^2G_{9/2}$ | A | 269473,90 | 1,111 |
| | | B | 269534,20 | 1,111 |
| | | C | 269507,66 | 1,111 |
| | | D | 269503,00 | 1,111 |
| $5p^6 11p$ | $^2P^o_{1/2}$ | A | 269675,10 | 0,666 |
| | | B | 269168,63 | 0,666 |
| | $^2P^o_{3/2}$ | A | 269905,60 | 1,334 |
| | | B | 269166,40 | 1,334 |
| $5p^6 10f$ | $^2F^o_{5/2}$ | A | 273650,20 | 0,857 |
| | | B | 274556,05 | 0,858 |
| | | C | 273575,89 | 0,848 |
| | | D | 273923,91 | 0,856 |
| | $^2F^o_{7/2}$ | A | 273663,70 | 1,143 |
| | | B | 274522,05 | 1,144 |
| | | C | 273582,91 | 1,146 |
| | | D | 274057,38 | 1,144 |
| $5p^6 11d$ | $^2D_{3/2}$ | A | 274250,40 | 0,800 |
| | | B | 274325,69 | 0,800 |
| | $^2D_{5/2}$ | A | 274295,70 | 1,200 |
| | | B | 274375,49 | 1,200 |
| $5p^6 12s$ | $^2S_{1/2}$ | A | 274541,50 | 2,002 |
| | | B | 274550,50 | 2,002 |
| $5p^6 12p$ | $^2P^o_{1/2}$ | A | 274903,10 | 0,666 |
| | | B | 274905,90 | 0,666 |
| | $^2P^o_{3/2}$ | A | 275067,00 | 1,334 |
| | | B | 275066,60 | 1,331 |
| $5p^6 9g$ | $^2G_{7/2}$ | A | 275330,00 | 0,889 |
| | | B | 275364,00 | 0,889 |
| | | C | 275348,34 | 0,889 |
| | | D | 275340,70 | 0,889 |
| | $^2G_{9/2}$ | A | 275330,40 | 1,111 |
| | | B | 275370,20 | 1,111 |
| | | C | 275351,86 | 1,111 |
| | | D | 275345,70 | 1,111 |
| $5p^6 11f$ | $^2F^o_{5/2}$ | A | 277753,30 | 0,857 |
| | | B | 277582,69 | 0,860 |
| | $^2F^o_{7/2}$ | A | 277763,10 | 1,143 |
| | | B | 277590,81 | 1,142 |
| $5p^6 12d$ | $^2D_{3/2}$ | A | 278470,80 | 0,800 |
| | | B | 278519,39 | 0,800 |
| | $^2D_{5/2}$ | A | 278503,70 | 1,200 |
| | | B | 278554,89 | 1,200 |
| $5p^6 13p$ | $^2P^o_{1/2}$ | A | 278671,00 | 0,666 |
| | | B | 278200,92 | 0,664 |
| | $^2P^o_{3/2}$ | A | 278791,90 | 1,334 |
| | | B | 278190,58 | 1,324 |
| $5p^6 13s$ | $^2S_{1/2}$ | A | 278674,10 | 2,002 |
| | | B | 278680,20 | 2,002 |
| $5p^6 10g$ | $^2G_{7/2}$ | A | 279517,50 | 0,889 |
| | | B | 279542,00 | 0,889 |
| | | C | 277530,50 | 0,889 |
| | | D | 279522,70 | 0,889 |

Tablo 3.2. (Devamı)

| Seviyeler | | | E ($cm^{-1}$) | *g*-çarpanı |
|---|---|---|---|---|
| **Konf.** | **Terim** | | **Bu çalışma** | **Bu çalışma** |
| | $^2G_{9/2}$ | A | 279517,80 | 1,111 |
| | | B | 279545,70 | 1,111 |
| | | C | 279532,50 | 1,111 |
| | | D | 279526,70 | 1,111 |
| $5p^6 12f$ | $^2F^o_{5/2}$ | A | 280794,50 | 0,857 |
| | | B | 281309,40 | 0,857 |
| | $^2F^o_{7/2}$ | A | 280801,90 | 1,143 |
| | | B | 281389,93 | 1,143 |
| $5p^6 14p$ | $^2P^o_{1/2}$ | A | 281486,60 | 0,666 |
| | | B | 281494,30 | 0,666 |
| | $^2P^o_{3/2}$ | A | 281578,20 | 1,334 |
| | | B | 281586,90 | 1,334 |
| $5p^6 13d$ | $^2D_{3/2}$ | A | 281587,60 | 0,800 |
| | | B | 281621,29 | 0,800 |
| | $^2D_{5/2}$ | A | 281612,30 | 1,200 |
| | | B | 281647,60 | 1,200 |
| $5p^6 14s$ | $^2S_{1/2}$ | A | 281737,70 | 2,002 |
| | | B | 281742,00 | 2,002 |
| $5p^6 11g$ | $^2G_{7/2}$ | A | 282610,30 | 0,889 |
| | | B | 282628,20 | 0,889 |
| | $^2G_{9/2}$ | A | 282610,50 | 1,111 |
| | | B | 282630,70 | 1,111 |
| $5p^6 13f$ | $^2F^o_{5/2}$ | A | 283098,20 | 0,857 |
| | | B | 284172,40 | 0,857 |
| | $^2F^o_{7/2}$ | A | 283103,80 | 1,143 |
| | | B | 284201,60 | 1,143 |
| $5p^6 15p$ | $^2P^o_{1/2}$ | A | 283640,30 | 0,666 |
| | | B | 283644,40 | 0,666 |
| | $^2P^o_{3/2}$ | A | 283711,40 | 1,334 |
| | | B | 283716,20 | 1,334 |
| $5p^6 14d$ | $^2D_{3/2}$ | A | 283941,00 | 0,800 |
| | | B | 283965,20 | 0,800 |
| | $^2D_{5/2}$ | A | 283960,00 | 1,200 |
| | | B | 283985,50 | 1,200 |
| $5p^6 15s$ | $^2S_{1/2}$ | A | 284056,10 | 2,002 |
| | | B | 284059,30 | 2,002 |
| $5p^6 14f$ | $^2F^o_{5/2}$ | A | 284900,00 | 0,857 |
| | | B | 285948,70 | 0,857 |
| | $^2F^o_{7/2}$ | A | 284904,60 | 1,143 |
| | | B | 285965,40 | 1,143 |
| $5p^6 12g$ | $^2G_{7/2}$ | A | 284955,80 | 0,889 |
| | | B | 284247,30 | 0,889 |
| | $^2G_{9/2}$ | A | 284956,00 | 1,111 |
| | | B | 284249,00 | 1,111 |
| $5p^6 16p$ | $^2P^o_{1/2}$ | A | 285319,10 | 0,666 |
| | | B | 285322,00 | 0,666 |
| | $^2P^o_{3/2}$ | A | 285375,30 | 1,334 |
| | | B | 285378,60 | 1,334 |
| $5p^6 15d$ | $^2D_{3/2}$ | A | 285778,10 | 0,800 |
| | | B | 284797,00 | 0,800 |
| | $^2D_{5/2}$ | A | 285793,00 | 1,200 |
| | | B | 284812,90 | 1,200 |

Tablo 3.2. (Devamı)

| Seviyeler | | | E ($cm^{-1}$) | *g*-çarpanı |
|---|---|---|---|---|
| **Konf.** | **Terim** | | **Bu çalışma** | **Bu çalışma** |
| $5p^6 16s$ | $^2S_{1/2}$ | A | 285864,00 | 2,002 |
| | | B | 285866,50 | 2,002 |
| $5p^6 15f$ | $^2F^o_{5/2}$ | A | 286330,40 | 0,857 |
| | | B | 287364,60 | 0,857 |
| | $^2F^o_{7/2}$ | A | 286333,90 | 1,143 |
| | | B | 287376,00 | 1,143 |
| $5p^6 17p$ | $^2P^o_{3/2}$ | A | 286704,20 | 1,334 |
| | | B | 286706,50 | 1,334 |
| | $^2P^o_{1/2}$ | A | 286658,90 | 0,666 |
| | | B | 286661,00 | 0,666 |
| $5p^6 13g$ | $^2G_{7/2}$ | A | 286788,60 | 0,889 |
| | | B | 286409,74 | 0,889 |
| | $^2G_{9/2}$ | A | 286788,80 | 1,111 |
| | | B | 286410,66 | 1,111 |
| $5p^6 16d$ | $^2D_{3/2}$ | A | 287234,20 | 0,800 |
| | | B | 287248,70 | 0,800 |
| | $^2D_{5/2}$ | A | 287246,20 | 1,200 |
| | | B | 287261,10 | 1,200 |
| $5p^6 17s$ | $^2S_{1/2}$ | A | 287302,80 | 2,002 |
| | | B | 287304,80 | 2,002 |
| $5p^6 16f$ | $^2F^o_{5/2}$ | A | 287483,20 | 0,857 |
| | | B | 288508,90 | 0,857 |
| | $^2F^o_{7/2}$ | A | 287486,10 | 1,143 |
| | | B | 288517,10 | 1,143 |
| $5p^6 18p$ | $^2P^o_{1/2}$ | A | 287758,70 | 0,666 |
| | | B | 287760,40 | 0,666 |
| | $^2P^o_{3/2}$ | A | 287795,70 | 1,334 |
| | | B | 287797,60 | 1,334 |
| $5p^6 14g$ | $^2G_{7/2}$ | A | 288236,50 | 0,889 |
| | | B | 288358,00 | 0,889 |
| | $^2G_{9/2}$ | A | 288236,60 | 1,111 |
| | | B | 288358,70 | 1,111 |
| $5p^6 17d$ | $^2D_{3/2}$ | A | 288407,10 | 0,800 |
| | | B | 288418,50 | 0,800 |
| | $^2D_{5/2}$ | A | 288416,80 | 1,200 |
| | | B | 288428,60 | 1,200 |
| $5p^6 17f$ | $^2F^o_{5/2}$ | A | 288415,20 | 0,857 |
| | | B | 289435,30 | 0,857 |
| | $^2F^o_{7/2}$ | A | 288417,60 | 1,143 |
| | | B | 289441,40 | 1,143 |
| $5p^6 18s$ | $^2S_{1/2}$ | A | 288466,40 | 2,002 |
| | | B | 288468,00 | 2,002 |
| $5p^6 19p$ | $^2P^o_{1/2}$ | A | 288646,90 | 0,666 |
| | | B | 288648,20 | 0,666 |
| | $^2P^o_{3/2}$ | A | 288677,50 | 1,334 |
| | | B | 288678,90 | 1,334 |
| $5p^6 18f$ | $^2F^o_{5/2}$ | A | 289207,10 | 0,857 |
| | | B | 290223,00 | 0,857 |
| | $^2F^o_{7/2}$ | A | 289209,10 | 1,143 |
| | | B | 290228,00 | 1,143 |
| $5p^6 18d$ | $^2D_{3/2}$ | A | 289353,30 | 0,800 |
| | | B | 289362,40 | 0,800 |

Tablo 3.2. (Devamı)

| Seviyeler | | | E ($cm^{-1}$) | *g*-çarpanı |
|---|---|---|---|---|
| **Konf.** | **Terim** | | **Bu çalışma** | **Bu çalışma** |
| | $^2D_{5/2}$ | A | 289361,30 | 1,200 |
| | | B | 289370,90 | 1,200 |
| $5p^6 15g$ | $^2G_{7/2}$ | A | 289400,90 | 0,889 |
| | | B | 289157,42 | 0,889 |
| | $^2G_{9/2}$ | A | 289401,00 | 1,111 |
| | | B | 289157,98 | 1,111 |
| $5p^6 20p$ | $^2P^o_{1/2}$ | A | 289391,20 | 0,666 |
| | | B | 289392,30 | 0,666 |
| | $^2P^o_{3/2}$ | A | 289416,80 | 1,334 |
| | | B | 289418,00 | 1,334 |
| $5p^6 19s$ | $^2S_{1/2}$ | A | 289402,20 | 2,002 |
| | | B | 289403,50 | 2,002 |
| $5p^6 19f$ | $^2F^o_{5/2}$ | A | 289855,20 | 0,857 |
| | | B | 290868,20 | 0,857 |
| | $^2F^o_{7/2}$ | A | 289856,90 | 1,143 |
| | | B | 290872,30 | 1,143 |
| $5p^6 21p$ | $^2P^o_{1/2}$ | A | 290032,70 | 0,666 |
| | $^2P^o_{3/2}$ | A | 290054,30 | 1,334 |
| $5p^6 19d$ | $^2D_{3/2}$ | A | 290155,70 | 0,800 |
| | | B | 290163,40 | 0,800 |
| | $^2D_{5/2}$ | A | 290162,40 | 1,200 |
| | | B | 290170,20 | 1,200 |
| $5p^6 20s$ | $^2S_{1/2}$ | A | 290197,10 | 2,002 |
| | | B | 290198,20 | 2,002 |
| $5p^6 16g$ | $^2G_{7/2}$ | A | 290351,00 | 0,889 |
| | | B | 290807,70 | 0,889 |
| | $^2G_{9/2}$ | A | 290351,00 | 1,111 |
| | | B | 290808,60 | 1,111 |
| $5p^6 20f$ | $^2F^o_{5/2}$ | A | 290394,80 | 0,857 |
| | | B | 291405,70 | 0,857 |
| | $^2F^o_{7/2}$ | A | 290396,20 | 1,143 |
| | | B | 291409,20 | 1,143 |
| $5p^6 22p$ | $^2P^o_{1/2}$ | A | 290562,50 | 0,666 |
| | $^2P^o_{3/2}$ | A | 290581,00 | 1,334 |
| $5p^6 20d$ | $^2D_{3/2}$ | A | 290811,20 | 0,800 |
| | | B | 290817,80 | 0,800 |
| | $^2D_{5/2}$ | A | 290816,80 | 1,200 |
| | | B | 290823,50 | 1,200 |
| $5p^6 21s$ | $^2S_{1/2}$ | A | 290852,30 | 2,002 |
| $5p^6 21f$ | $^2F^o_{5/2}$ | A | 290866,30 | 0,857 |
| | $^2F^o_{7/2}$ | A | 290867,50 | 1,143 |
| $5p^6 23p$ | $^2P^o_{1/2}$ | A | 290998,30 | 0,666 |
| | $^2P^o_{3/2}$ | A | 291014,20 | 1,334 |
| $5p^6 17g$ | $^2G_{7/2}$ | A | 291151,70 | 0,889 |
| | | B | 291362,80 | 0,889 |
| | $^2G_{9/2}$ | A | 291151,70 | 1,111 |
| | | B | 291363,60 | 1,111 |
| $5p^6 22f$ | $^2F^o_{5/2}$ | A | 291295,00 | 0,857 |
| | $^2F^o_{7/2}$ | A | 291296,10 | 1,143 |
| $5p^6 21d$ | $^2D_{3/2}$ | A | 291357,20 | 0,800 |
| | $^2D_{5/2}$ | A | 291362,00 | 1,200 |
| $5p^6 22s$ | $^2S_{1/2}$ | A | 291391,50 | 2,002 |

Tablo 3.2. (Devamı)

| Seviyeler | | | E ($cm^{-1}$) | *g*-çarpanı |
|---|---|---|---|---|
| **Konf.** | **Terim** | | **Bu çalışma** | **Bu çalışma** |
| $5p^6 24p$ | $^2P^o_{1/2}$ | A | 291388,80 | 0,666 |
| | $^2P^o_{3/2}$ | A | 291402,60 | 1,334 |
| $5p^6 23f$ | $^2F^o_{5/2}$ | A | 291641,90 | 0,857 |
| | $^2F^o_{7/2}$ | A | 291642,80 | 1,143 |
| $5p^6 25p$ | $^2P^o_{1/2}$ | A | 291710,30 | 0,666 |
| | $^2P^o_{3/2}$ | A | 291722,30 | 1,334 |
| $5p^6 18g$ | $^2G_{7/2}$ | A | 291803,20 | 0,889 |
| | | B | 291850,10 | 0,889 |
| | $^2G_{9/2}$ | A | 291803,20 | 1,111 |
| | | B | 291850,90 | 1,111 |
| $5p^6 23s$ | $^2S_{1/2}$ | A | 291855,10 | 2,002 |
| $5p^6 22d$ | $^2D_{3/2}$ | A | 291835,50 | 0,800 |
| | $^2D_{5/2}$ | A | 291839,50 | 1,200 |
| $5p^6 24f$ | $^2F^o_{5/2}$ | A | 291982,20 | 0,857 |
| | $^2F^o_{7/2}$ | A | 291983,00 | 1,143 |
| $5p^6 26p$ | $^2P^o_{1/2}$ | A | 292021,00 | 0,666 |
| | $^2P^o_{3/2}$ | A | 292031,50 | 1,334 |
| $5p^6 25f$ | $^2F^o_{5/2}$ | A | 292220,00 | 0,857 |
| | $^2F^o_{7/2}$ | A | 292220,70 | 1,143 |
| $5p^6 23d$ | $^2D_{3/2}$ | A | 292267,90 | 0,800 |
| | $^2D_{5/2}$ | A | 292271,40 | 1,200 |
| $5p^6 19g$ | $^2G_{7/2}$ | A | 292359,00 | 0,889 |
| | | B | 292361,33 | 0,889 |
| | $^2G_{9/2}$ | A | 292359,00 | 1,111 |
| | | B | 292361,59 | 1,111 |
| $5p^6 27p$ | $^2P^o_{1/2}$ | A | 292320,40 | 0,666 |
| | $^2P^o_{3/2}$ | A | 292329,70 | 1,334 |
| $5p^6 24s$ | $^2S_{1/2}$ | A | 292281,90 | 2,002 |
| $5p^6 26f$ | $^2F^o_{5/2}$ | A | 292435,70 | 0,857 |
| | $^2F^o_{7/2}$ | A | 292436,40 | 1,143 |
| $5p^6 28p$ | $^2P^o_{1/2}$ | A | 292509,50 | 0,666 |
| | $^2P^o_{3/2}$ | A | 292517,70 | 1,334 |
| $5p^6 25s$ | $^2S_{1/2}$ | A | 292629,10 | 2,002 |
| $5p^6 24d$ | $^2D_{3/2}$ | A | 292619,40 | 0,800 |
| | $^2D_{5/2}$ | A | 292622,40 | 1,200 |
| $5p^6 29p$ | $^2P^o_{1/2}$ | A | 292703,10 | 0,666 |
| | $^2P^o_{3/2}$ | A | 292710,40 | 1,334 |
| $5p^6 27f$ | $^2F^o_{5/2}$ | A | 292696,40 | 0,857 |
| | $^2F^o_{7/2}$ | A | 292696,90 | 1,143 |
| $5p^6 28f$ | $^2F^o_{5/2}$ | A | 292887,50 | 0,857 |
| | $^2F^o_{7/2}$ | A | 292888,00 | 1,143 |
| $5p^6 20g$ | $^2G_{7/2}$ | A | 292846,90 | 0,889 |
| | | B | 292848,90 | 0,889 |
| | $^2G_{9/2}$ | A | 292846,90 | 1,111 |
| | | B | 292849,13 | 1,111 |
| $5p^6 25d$ | $^2D_{3/2}$ | A | 292962,00 | 0,800 |
| | $^2D_{5/2}$ | A | 292964,70 | 1,200 |
| $5p^6 30p$ | $^2P^o_{1/2}$ | A | 292949,60 | 0,666 |
| | $^2P^o_{3/2}$ | A | 292956,20 | 1,334 |
| $5p^6 26s$ | $^2S_{1/2}$ | A | 292976,20 | 2,002 |
| $5p^6 29f$ | $^2F^o_{5/2}$ | A | 292985,90 | 0,857 |
| | $^2F^o_{7/2}$ | A | 292986,40 | 1,143 |

Tablo 3.2. (Devamı)

| Seviyeler | | | E ($cm^{-1}$) | *g*-çarpanı |
|---|---|---|---|---|
| **Konf.** | **Terim** | | **Bu çalışma** | **Bu çalışma** |
| $5p^6 30f$ | $^2F^o_{5/2}$ | A | 293105,80 | 0,857 |
| | $^2F^o_{7/2}$ | A | 293106,20 | 1,143 |
| $5p^6 27s$ | $^2S_{1/2}$ | A | 293226,10 | 2,002 |
| $5p^6 26d$ | $^2D_{3/2}$ | A | 293198,40 | 0,800 |
| | $^2D_{5/2}$ | A | 293200,70 | 1,200 |
| $5p^6 21g$ | $^2G_{7/2}$ | A | 293276,80 | 0,889 |
| | $^2G_{9/2}$ | A | 293276,80 | 1,111 |
| $5p^6 27d$ | $^2D_{3/2}$ | A | 293421,70 | 0,800 |
| | $^2D_{5/2}$ | A | 293423,80 | 1,200 |
| $5p^6 28s$ | $^2S_{1/2}$ | A | 293432,70 | 2,002 |
| $5p^6 28d$ | $^2D_{3/2}$ | A | 293685,00 | 0,800 |
| | $^2D_{5/2}$ | A | 293686,80 | 1,200 |
| $5p^6 22g$ | $^2G_{7/2}$ | A | 293625,70 | 0,889 |
| | $^2G_{9/2}$ | A | 293625,70 | 1,111 |
| $5p^6 29s$ | $^2S_{1/2}$ | A | 293692,10 | 2,002 |
| $5p^6 29d$ | $^2D_{3/2}$ | A | 293869,30 | 0,800 |
| | $^2D_{5/2}$ | A | 293871,00 | 1,200 |
| $5p^6 30s$ | $^2S_{1/2}$ | A | 293900,20 | 2,002 |
| $5p^6 30d$ | $^2D_{3/2}$ | A | 293966,80 | 0,800 |
| | $^2D_{5/2}$ | A | 293968,30 | 1,200 |
| $5p^6 23g$ | $^2G_{7/2}$ | A | 293954,50 | 0,889 |
| | $^2G_{9/2}$ | A | 293954,50 | 1,111 |
| $5p^6 24g$ | $^2G_{7/2}$ | A | 294181,80 | 0,889 |
| | $^2G_{9/2}$ | A | 294181,80 | 1,111 |
| $5p^6 25g$ | $^2G_{7/2}$ | A | 294426,10 | 0,889 |
| | $^2G_{9/2}$ | A | 294426,10 | 1,111 |
| $5p^6 26g$ | $^2G_{7/2}$ | A | 294684,30 | 0,889 |
| | $^2G_{9/2}$ | A | 294684,30 | 1,111 |
| $5p^6 27g$ | $^2G_{7/2}$ | A | 294845,70 | 0,889 |
| | $^2G_{9/2}$ | A | 294845,70 | 1,111 |
| $5p^6 28g$ | $^2G_{7/2}$ | A | 294955,20 | 0,889 |
| | $^2G_{9/2}$ | A | 294955,20 | 1,111 |
| $5p^6 29g$ | $^2G_{7/2}$ | A | 295119,70 | 0,889 |
| | $^2G_{9/2}$ | A | 295119,70 | 1,111 |
| $5p^6 30g$ | $^2G_{7/2}$ | A | 295336,30 | 0,889 |
| | $^2G_{9/2}$ | A | 295336,30 | 1,111 |

Ce IV'ün uyarılmış seviyeleri için yarı ömürleri (ns) Tablo 3.3. ve Tablo 3.4.'te verilmektedir. Uyarılmış seviyelerinin yarı ömürleri, bu seviyelerden daha düşük seviyelere olan tüm mümkün elektrik dipol geçişler üzerinden (2.60) formülüne göre hesaplandı. Ce IV'ün $5p^6 5d$ ve $5p^6 6p$ seviyeleri için hesaplanan yarı ömürler mevcut olan deneysel ve teorik sonuçlarla Tablo 3.3.'te karşılaştırılmıştır. Bu tablodan görüleceği üzere B hesaplamasından elde edilen yarı ömürler diğer çalışmalarla daha uyumludur. Ayrıca Ce IV'teki $5p^6 nf$ (n = 5 − 30), $5p^6 np$ (n = 7 − 30), $5p^6 nd$ (n = 6−30), $5p^6 ng$ (n = 5−30) ve $5p^6 ns$ (n = 7 − 30) konfigürasyonları için yarı ömürler ilk kez bu çalışma ile Tablo 3.4.'te verilmektedir [18].

Tablo 3.3. Ce IV'ün $5p^65d$ ve $5p^66p$ seviyelerinin yarı ömürleri (ns)

| Seviyeler | | Yarı ömürler (ns) | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Konf. | Terim | Bu çalışma | | | | Diğer çalışmalar | |
| | | A | B | C | D | Deneysel | Teorik |
| $5p^65d$ | $^2D_{3/2}$ | 9,64 | 20,52 | 19,33 | 15,26 | 30 $(1^{\beta}+1^{\theta})^a$ | 30,5[a] |
| | | | | | | | 1,98[a] |
| | | | | | | | 25,5[a] |
| | | | | | | | 24,0[a] |
| | | | | | | | 29,3[b] |
| | $^2D_{5/2}$ | 9,44 | 20,03 | 18,90 | 14,95 | 30 $(1,4^{\beta}+1,6^{\theta})^a$ | 30,0[a] |
| | | | | | | | 1,93[a] |
| | | | | | | | 23,8[a] |
| | | | | | | | 22,9[a] |
| | | | | | | | 28,3[b] |
| $5p^66p$ | $^2P^o_{1/2}$ | 0,58 | 0,60 | 0,67 | 0,63 | – | 0,614[c] |
| | | | | | | | 0,854[c] |
| | $^2P^o_{3/2}$ | 0,49 | 0,51 | 0,57 | 0,54 | – | 0,506[c] |
| | | | | | | | 0,681[c] |

[a]Zhang ve arkadaşları [12, β:istatiksel hata; θ: tahmini sistematik hata], [b] Reader ve Wyart [14], [c]Zilitis [15]

Tablo 3.4. Ce IV'ün bazı uyarılmış seviyelerinin yarı ömürleri (ns)

| Seviyeler | | Yarı ömürler (ns) | | | | Seviyeler | | Yarı ömürler (ns) | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Konf. | Terim | Bu çalışma | | | | Konf. | Terim | Bu çalışma | | | |
| | | A | B | C | D | | | A | B | C | D |
| $5p^66d$ | $^2D_{5/2}$ | 0,72 | 1,05 | 1,40 | 1,50 | $5p^610s$ | $^2S_{1/2}$ | 1,98 | 1,87 | 1,90 | 1,88 |
| | $^2D_{3/2}$ | 0,53 | 0,83 | 0,78 | 0,73 | $5p^67g$ | $^2G_{7/2}$ | 1,45 | 0,77 | 0,61 | 1,04 |
| $5p^67s$ | $^2S_{1/2}$ | 0,67 | 0,96 | 0,65 | 0,95 | | $^2G_{9/2}$ | 1,43 | 0,72 | 0,55 | 1,00 |
| $5p^65f$ | $^2F^o_{5/2}$ | 0,16 | 0,16 | 0,16 | 0,16 | $5p^610p$ | $^2P^o_{1/2}$ | 5,35 | 4,83 | 3,67 | 4,51 |
| | $^2F^o_{7/2}$ | 0,16 | 0,17 | 0,17 | 0,19 | | $^2P^o_{3/2}$ | 5,33 | 4,98 | 3,54 | 4,73 |
| $5p^67p$ | $^2P^o_{1/2}$ | 1,14 | 2,00 | 1,76 | 1,33 | $5p^69f$ | $^2F^o_{5/2}$ | 1,07 | 1,03 | 1,06 | 0,95 |
| | $^2P^o_{3/2}$ | 0,96 | 1,06 | 1,27 | 1,06 | | $^2F^o_{7/2}$ | 1,09 | 1,08 | 1,15 | 1,27 |
| $5p^67d$ | $^2D_{3/2}$ | 1,42 | 0,12 | 0,38 | 0,34 | $5p^610d$ | $^2D_{3/2}$ | 5,18 | 1,36 | 1,13 | 3,13 |
| | $^2D_{5/2}$ | 1,67 | 0,20 | 0,61 | 0,49 | | $^2D_{5/2}$ | 5,67 | 1,29 | 1,06 | 3,19 |
| $5p^68s$ | $^2S_{1/2}$ | 0,95 | 0,98 | 0,87 | 0,91 | $5p^611s$ | $^2S_{1/2}$ | 2,66 | 2,605 | – | – |
| $5p^66f$ | $^2F^o_{5/2}$ | 0,28 | 0,28 | 0,30 | 0,29 | $5p^68g$ | $^2G_{7/2}$ | 2,01 | 1,19 | 1,01 | 1,58 |
| | $^2F^o_{7/2}$ | 0,29 | 0,25 | 0,31 | 0,30 | | $^2G_{9/2}$ | 2,04 | 1,12 | 0,95 | 1,64 |
| $5p^65g$ | $^2G_{7/2}$ | 0,63 | 0,15 | 0,75 | 0,64 | $5p^611p$ | $^2P^o_{1/2}$ | 7,75 | 7,29 | – | – |
| | $^2G_{9/2}$ | 0,64 | 0,34 | 0,75 | 0,71 | | $^2P^o_{3/2}$ | 7,78 | 7,36 | – | – |
| $5p^68d$ | $^2D_{3/2}$ | 1,94 | 0,18 | 0,05 | 0,46 | $5p^610f$ | $^2F^o_{5/2}$ | 1,521 | 1,44 | 1,40 | 1,00 |
| | $^2D_{5/2}$ | 2,26 | 0,14 | 0,03 | 0,45 | | $^2F^o_{7/2}$ | 1,545 | 1,52 | 1,80 | 0,83 |
| $5p^66g$ | $^2G_{7/2}$ | 0,94 | 0,42 | 0,27 | 0,58 | $5p^611d$ | $^2D_{3/2}$ | 7,20 | 2,19 | – | – |
| | $^2G_{9/2}$ | 0,96 | 0,35 | 0,19 | 0,53 | | $^2D_{5/2}$ | 7,73 | 2,11 | – | – |
| $5p^68p$ | $^2P^o_{1/2}$ | 2,05 | 1,94 | 1,87 | 2,18 | $5p^612s$ | $^2S_{1/2}$ | 3,54 | 3,26 | – | – |
| | $^2P^o_{3/2}$ | 1,80 | 1,90 | 1,72 | 1,98 | $5p^612p$ | $^2P^o_{1/2}$ | 10,75 | 9,57 | – | – |
| $5p^67f$ | $^2F^o_{5/2}$ | 0,46 | 0,45 | 0,59 | 0,54 | | $^2P^o_{3/2}$ | 10,85 | 8,85 | – | – |
| | $^2F^o_{7/2}$ | 0,47 | 0,46 | 0,61 | 0,53 | $5p^69g$ | $^2G_{7/2}$ | 2,70 | 1,67 | 1,49 | 2,21 |
| $5p^69s$ | $^2S_{1/2}$ | 1,37 | 1,33 | 1,25 | 1,23 | | $^2G_{9/2}$ | 2,74 | 1,60 | 1,40 | 2,21 |
| $5p^69p$ | $^2P^o_{1/2}$ | 3,57 | 2,31 | 2,83 | 3,48 | $5p^611f$ | $^2F^o_{5/2}$ | 2,08 | 1,42 | – | – |
| | $^2P^o_{3/2}$ | 3,28 | 2,59 | 1,65 | 2,39 | | $^2F^o_{7/2}$ | 2,11 | 2,11 | – | – |
| $5p^68f$ | $^2F^o_{5/2}$ | 0,73 | 0,65 | 0,65 | 0,74 | $5p^612d$ | $^2D_{3/2}$ | 9,51 | 3,30 | – | – |
| | $^2F^o_{7/2}$ | 0,74 | 0,65 | 0,84 | 0,70 | | $^2D_{5/2}$ | 10,10 | 3,22 | – | – |
| $5p^69d$ | $^2D_{3/2}$ | 3,55 | 0,66 | 0,46 | 1,59 | $5p^613p$ | $^2P^o_{1/2}$ | 14,42 | 11,00 | – | – |
| | $^2D_{5/2}$ | 4,18 | 0,60 | 0,41 | 1,64 | | $^2P^o_{3/2}$ | 14,60 | 5,98 | – | – |

Tablo 3.4. (Devamı)

| Seviyeler | | Yarı ömürler (ns) | | | | Seviyeler | | Yarı ömürler (ns) | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Konf. | Terim | Bu çalışma | | | | Konf. | Terim | Bu çalışma | | | |
| | | A | B | C | D | | | A | B | C | D |
| $5p^6 13s$ | $^2S_{1/2}$ | 4,61 | 4,47 | – | – | $5p^6 18f$ | $^2F^o_{5/2}$ | 10,11 | 8,10 | – | – |
| $5p^6 10g$ | $^2G_{7/2}$ | 3,50 | 2,22 | 1,97 | 2,86 | | $^2F^o_{7/2}$ | 10,25 | 8,25 | – | – |
| | $^2G_{9/2}$ | 3,54 | 2,15 | 1,74 | 2,83 | $5p^6 18d$ | $^2D_{3/2}$ | 20,25 | 13,06 | – | – |
| $5p^6 12f$ | $^2F^o_{5/2}$ | 2,76 | 2,28 | – | – | | $^2D_{5/2}$ | 20,81 | 13,06 | – | – |
| | $^2F^o_{7/2}$ | 2,80 | 1,82 | – | – | $5p^6 15g$ | $^2G_{7/2}$ | 6,67 | 7,10 | – | – |
| $5p^6 14p$ | $^2P^o_{1/2}$ | 18,84 | 15,60 | – | – | | $^2G_{9/2}$ | 6,73 | 6,90 | – | – |
| | $^2P^o_{3/2}$ | 19,09 | 16,00 | – | – | $5p^6 20p$ | $^2P^o_{1/2}$ | 65,55 | 9,18 | – | – |
| $5p^6 13d$ | $^2D_{3/2}$ | 11,99 | 4,36 | – | – | | $^2P^o_{3/2}$ | 66,50 | 9,30 | – | – |
| | $^2D_{5/2}$ | 12,64 | 4,26 | – | – | $5p^6 19s$ | $^2S_{1/2}$ | 12,19 | 12,02 | – | – |
| $5p^6 14s$ | $^2S_{1/2}$ | 5,82 | 5,20 | – | – | $5p^6 19f$ | $^2F^o_{5/2}$ | 12,00 | 6,94 | – | – |
| $5p^6 11g$ | $^2G_{7/2}$ | 4,35 | 2,80 | – | – | | $^2F^o_{7/2}$ | 12,17 | 7,13 | – | – |
| | $^2G_{9/2}$ | 4,40 | 2,72 | – | – | $5p^6 21p$ | $^2P^o_{3/2}$ | 78,46 | – | – | – |
| $5p^6 13f$ | $^2F^o_{5/2}$ | 3,57 | 3,31 | – | – | | $^2P^o_{1/2}$ | 77,34 | – | – | – |
| | $^2F^o_{7/2}$ | 3,63 | 3,26 | – | – | $5p^6 19d$ | $^2D_{3/2}$ | 19,47 | 14,29 | – | – |
| $5p^6 15p$ | $^2P^o_{1/2}$ | 24,09 | 19,30 | – | – | | $^2D_{5/2}$ | 19,91 | 14,35 | – | – |
| | $^2P^o_{3/2}$ | 24,42 | 19,70 | – | – | $5p^6 20s$ | $^2S_{1/2}$ | 12,57 | 12,41 | – | – |
| $5p^6 14d$ | $^2D_{3/2}$ | 14,57 | 6,09 | – | – | $5p^6 16g$ | $^2G_{7/2}$ | 6,59 | 6,81 | – | – |
| | $^2D_{5/2}$ | 15,28 | 6,01 | – | – | | $^2G_{9/2}$ | 6,64 | 6,69 | – | – |
| $5p^6 15s$ | $^2S_{1/2}$ | 7,18 | 6,93 | – | – | $5p^6 20f$ | $^2F^o_{5/2}$ | 14,11 | 4,30 | – | |
| $5p^6 14f$ | $^2F^o_{5/2}$ | 4,54 | 4,10 | – | – | | $^2F^o_{7/2}$ | 14,31 | 4,42 | – | – |
| | $^2F^o_{7/2}$ | 4,60 | 4,09 | – | – | $5p^6 22p$ | $^2P^o_{3/2}$ | 91,84 | – | – | – |
| $5p^6 12g$ | $^2G_{7/2}$ | 5,19 | 3,83 | – | – | | $^2P^o_{1/2}$ | 90,53 | – | – | – |
| | $^2G_{9/2}$ | 5,25 | 3,70 | – | – | $5p^6 20d$ | $^2D_{3/2}$ | 18,56 | 13,18 | – | – |
| $5p^6 16p$ | $^2P^o_{1/2}$ | 30,27 | 21,20 | – | – | | $^2D_{5/2}$ | 18,92 | 13,25 | – | – |
| | $^2P^o_{3/2}$ | 30,69 | 21,60 | – | – | $5p^6 21s$ | $^2S_{1/2}$ | 12,82 | – | – | – |
| $5p^6 15d$ | $^2D_{3/2}$ | 16,89 | 8,44 | – | – | $5p^6 21f$ | $^2F^o_{5/2}$ | 16,44 | – | – | – |
| | $^2D_{5/2}$ | 17,62 | 8,27 | – | – | | $^2F^o_{7/2}$ | 16,68 | – | – | – |
| $5p^6 16s$ | $^2S_{1/2}$ | 8,60 | 8,40 | – | – | $5p^6 23p$ | $^2P^o_{1/2}$ | 105,2 | – | – | – |
| $5p^6 15f$ | $^2F^o_{5/2}$ | 5,66 | 5,15 | – | – | | $^2P^o_{3/2}$ | 106,7 | – | – | – |
| | $^2F^o_{7/2}$ | 5,74 | 5,18 | – | – | $5p^6 17g$ | $^2G_{7/2}$ | 6,23 | 8,35 | – | – |
| $5p^6 17p$ | $^2P^o_{1/2}$ | 37,4 | 23,80 | – | – | | $^2G_{9/2}$ | 6,27 | 8,19 | – | – |
| | $^2P^o_{3/2}$ | 37,96 | 24,30 | – | – | $5p^6 22f$ | $^2F^o_{5/2}$ | 19,01 | – | – | – |
| $5p^6 13g$ | $^2G_{7/2}$ | 5,90 | 4,82 | – | – | | $^2F^o_{7/2}$ | 19,28 | – | – | – |
| | $^2G_{9/2}$ | 5,97 | 4,67 | – | – | $5p^6 21d$ | $^2D_{3/2}$ | 17,41 | – | – | – |
| $5p^6 16d$ | $^2D_{3/2}$ | 18,67 | 9,53 | – | – | | $^2D_{5/2}$ | 17,68 | – | – | – |
| | $^2D_{5/2}$ | 19,37 | 9,48 | – | – | $5p^6 22s$ | $^2S_{1/2}$ | 13,02 | – | – | – |
| $5p^6 17s$ | $^2S_{1/2}$ | 9,94 | 9,76 | – | – | $5p^6 24p$ | $^2P^o_{3/2}$ | 123,10 | – | – | – |
| $5p^6 16f$ | $^2F^o_{7/2}$ | 7,06 | 6,28 | – | – | | $^2P^o_{1/2}$ | 121,30 | – | – | – |
| | $^2F^o_{5/2}$ | 6,955 | 6,23 | – | – | $5p^6 23f$ | $^2F^o_{7/2}$ | 22,16 | – | – | – |
| $5p^6 18p$ | $^2P^o_{1/2}$ | 45,64 | 23,90 | – | – | | $^2F^o_{5/2}$ | 21,85 | – | – | – |
| | $^2P^o_{3/2}$ | 46,29 | 24,40 | – | – | $5p^6 25p$ | $^2P^o_{1/2}$ | 139,10 | – | – | – |
| $5p^6 14g$ | $^2G_{7/2}$ | 6,42 | 5,61 | – | – | | $^2P^o_{3/2}$ | 141,10 | – | – | – |
| | $^2G_{9/2}$ | 6,49 | 5,48 | – | – | $5p^6 18g$ | $^2G_{7/2}$ | 5,77 | 10,01 | – | – |
| $5p^6 17d$ | $^2D_{3/2}$ | 19,73 | 11,30 | – | – | | $^2G_{9/2}$ | 5,80 | 9,80 | – | – |
| | $^2D_{5/2}$ | 20,37 | 11,27 | – | – | $5p^6 22d$ | $^2D_{3/2}$ | 15,47 | – | – | – |
| $5p^6 17f$ | $^2F^o_{5/2}$ | 8,44 | 7,35 | – | – | | $^2D_{5/2}$ | 15,67 | – | – | – |
| | $^2F^o_{7/2}$ | 8,56 | 7,44 | – | – | $5p^6 23s$ | $^2S_{1/2}$ | 12,47 | – | – | – |
| $5p^6 18s$ | $^2S_{1/2}$ | 11,11 | 10,94 | – | – | $5p^6 24f$ | $^2F^o_{5/2}$ | 24,91 | – | – | – |
| $5p^6 19p$ | $^2P^o_{3/2}$ | 55,80 | 20,40 | – | – | | $^2F^o_{7/2}$ | 25,26 | – | – | – |
| | $^2P^o_{1/2}$ | 55,01 | 20,00 | – | – | $5p^6 26p$ | $^2P^o_{1/2}$ | 158,20 | – | – | – |

Tablo 3.4. (Devamı)

| Seviyeler | | Yarı ömürler (ns) | | | | Seviyeler | | Yarı ömürler (ns) | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Konf. | Terim | Bu çalışma | | | | Konf. | Terim | Bu çalışma | | | |
| | | A | B | C | D | | | A | B | C | D |
| $5p^6 26p$ | $^2P^o_{3/2}$ | 160,60 | – | – | – | $5p^6 27s$ | $^2S_{1/2}$ | 8,11 | – | – | – |
| $5p^6 25f$ | $^2F^o_{5/2}$ | 28,33 | – | – | – | $5p^6 26d$ | $^2D_{3/2}$ | 9,03 | – | – | – |
| | $^2F^o_{7/2}$ | 28,74 | – | – | – | | $^2D_{5/2}$ | 9,09 | – | – | – |
| $5p^6 23d$ | $^2D_{3/2}$ | 13,18 | – | – | – | $5p^6 21g$ | $^2G_{7/2}$ | 3,86 | – | – | – |
| | $^2D_{5/2}$ | 13,32 | – | – | – | | $^2G_{9/2}$ | 3,87 | – | – | – |
| $5p^6 24s$ | $^2S_{1/2}$ | 10,99 | – | – | – | $5p^6 27d$ | $^2D_{3/2}$ | 7,91 | – | – | – |
| $5p^6 19g$ | $^2G_{7/2}$ | 5,13 | 11,05 | – | – | | $^2D_{5/2}$ | 7,95 | – | – | – |
| | $^2G_{9/2}$ | 5,15 | 10,85 | – | – | $5p^6 28s$ | $^2S_{1/2}$ | 7,57 | – | – | – |
| $5p^6 27p$ | $^2P^o_{1/2}$ | 178,90 | – | – | – | $5p^6 28d$ | $^2D_{3/2}$ | 3,36 | – | – | – |
| | $^2P^o_{3/2}$ | 181,50 | – | – | – | | $^2D_{5/2}$ | 3,37 | – | – | – |
| $5p^6 26f$ | $^2F^o_{7/2}$ | 32,50 | – | – | – | $5p^6 22g$ | $^2G_{7/2}$ | 6,21 | – | – | – |
| | $^2F^o_{5/2}$ | 32,04 | – | – | – | | $^2G_{9/2}$ | 6,24 | – | – | – |
| $5p^6 28p$ | $^2P^o_{1/2}$ | 202,10 | – | – | – | $5p^6 29s$ | $^2S_{1/2}$ | 5,57 | – | – | – |
| | $^2P^o_{3/2}$ | 205,10 | – | – | – | $5p^6 29d$ | $^2D_{3/2}$ | 5,72 | – | – | – |
| $5p^6 25s$ | $^2S_{1/2}$ | 9,89 | – | – | – | | $^2D_{5/2}$ | 5,74 | – | – | – |
| $5p^6 24d$ | $^2D_{3/2}$ | 11,50 | – | – | – | $5p^6 30d$ | $^2D_{3/2}$ | 2,93 | – | – | – |
| | $^2D_{5/2}$ | 11,61 | – | – | – | | $^2D_{5/2}$ | 2,94 | – | – | – |
| $5p^6 29p$ | $^2P^o_{1/2}$ | 226,80 | – | – | – | $5p^6 23g$ | $^2G_{7/2}$ | 6,92 | – | – | – |
| | $^2P^o_{3/2}$ | 230,20 | – | – | – | | $^2G_{9/2}$ | 6,93 | – | – | – |
| $5p^6 27f$ | $^2F^o_{5/2}$ | 35,91 | – | – | – | $5p^6 24g$ | $^2G_{7/2}$ | 2,61 | – | – | – |
| | $^2F^o_{7/2}$ | 36,42 | – | – | – | | $^2G_{9/2}$ | 2,62 | – | – | – |
| $5p^6 28f$ | $^2F^o_{7/2}$ | 40,75 | – | – | – | $5p^6 25g$ | $^2G_{7/2}$ | 2,18 | – | – | – |
| | $^2F^o_{5/2}$ | 40,18 | – | – | – | | $^2G_{9/2}$ | 2,18 | – | – | – |
| $5p^6 20g$ | $^2G_{7/2}$ | 4,45 | 10,93 | – | – | $5p^6 26g$ | $^2G_{7/2}$ | 1,86 | – | – | – |
| | $^2G_{9/2}$ | 4,46 | 10,99 | – | – | | $^2G_{9/2}$ | 1,87 | – | – | – |
| $5p^6 25d$ | $^2D_{3/2}$ | 9,55 | – | – | – | $5p^6 27g$ | $^2G_{7/2}$ | 1,70 | – | – | – |
| | $^2D_{5/2}$ | 9,62 | – | – | – | | $^2G_{9/2}$ | 1,71 | – | – | – |
| $5p^6 30p$ | $^2P^o_{3/2}$ | 256,20 | – | – | – | $5p^6 28g$ | $^2G_{7/2}$ | 1,49 | – | – | – |
| | $^2P^o_{1/2}$ | 252,50 | – | – | – | | $^2G_{9/2}$ | 1,49 | – | – | – |
| $5p^6 26s$ | $^2S_{1/2}$ | 8,11 | – | – | – | $5p^6 29g$ | $^2G_{7/2}$ | 1,23 | – | – | – |
| $5p^6 29f$ | $^2F^o_{7/2}$ | 45,61 | – | – | – | | $^2G_{9/2}$ | 1,23 | – | – | – |
| | $^2F^o_{5/2}$ | 44,97 | – | – | – | $5p^6 30g$ | $^2G_{7/2}$ | 6,58 | – | – | – |
| $5p^6 30f$ | $^2F^o_{7/2}$ | 50,75 | – | – | – | | $^2G_{9/2}$ | 6,59 | – | – | – |
| | $^2F^o_{5/2}$ | 50,05 | – | – | – | | | | | | |

## 3.2. Ce IV'ün Elektrik Dipol Geçişleri için Dalga Boyları, Ağırlıklı Salınıcı Şiddetleri ve Geçiş Olasılıkları

HFR yöntemiyle CeIV'ün elektrik dipol geçişleri için ışıma parametreleri (dalga boyları, salınıcı şiddetleri ve geçiş olasılıkları) hesaplandı. A, B, C ve D hesaplamaları için tek ve çift parite seviyeleri arasında sırasıyla 7272, 21449, 22622 ve 30710 mümkün elektrik dipol (E1) geçişleri elde edildi. Elektrik dipol geçişleri için hesaplanan değerler çok fazla olduğundan sonuçların sadece bir bölümü Tablo

3.5. verildi. Elde edilen tüm geçişler [18] çalışmasında verildi. Tablo 3.5.'te diğer hesaplama yöntemleri ve deney sonuçları ile elde edilen mevcut çalışmalarla karşılaştırma yapıldı. Bu tabloda çeşitli konfigürasyon seviyeleri için hesaplamalar A, B, C ve D ile gösterilmektedir. Diğer karşılaştırma değerleri, tabloların altında küçük harfle yazılmıştır. Yalnızca tablolardaki tek parite durumları "$^{o}$" üst indis ile gösterildi ve parantez içindeki sayılar 10'un kuvvetlerini temsil etmektedir.

Tablo 3.5.'te $5p^6 6p$ – $5p^6 6s$, $5p^6 6p$ – $5p^6 5d$, $5p^6 6d$ – $5p^6 6p$, $5p^6 7d$ – $5p^6 6p$, $5p^6 5d$ – $5p^6 4f$, $5p^6 5f$ – $5p^6 5d$, $5p^6 6f$ – $5p^6 5d$, $5p^6 7p$ – $5p^6 6s$, $5p^6 7p$ – $5p^6 5d$, $5p^6 6d$ – $5p^6 4f$, $5p^6 7s$ – $5p^6 6p$, $5p^6 7d$ – $5p^6 5f$, $5p^6 5g$ – $5p^6 4f$, $5p^6 5g$ – $5p^6 5f$, $5p^6 7d$ – $5p^6 5f$, $5p^6 8d$ – $5p^6 4f$, $5p^6 8d$ – $5p^6 7p$, $5p^6 6g$ – $5p^6 4f$, $5p^6 6g$ – $5p^6 5f$ ve $5p^6 8s$ – $5p^6 6p$ elektrik dipol (E1) geçişleri için elektrik dipol (E1) geçişleri için λ dalga boyları (Å), log(*gf*) logaritmik ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve $A_{ki}$ geçiş olasılıkları ($s^{-1}$) sunulmuştur. Bu geçişler için karşılaştırma değerleri literatürde mevcuttur. Bu nedenle Tablo 3.5.'te diğer hesaplama yöntemleri ve deneyler sonuçları ile elde edilen mevcut çalışmalarla karşılaştırma yapıldı. Elde edilen sonuçlar, bazı geçişler hariç olmak üzere diğer çalışmalarla uyumludur. Bazı geçişler için uyum geçiş olasılıklarında ve salınıcı şiddetlerinde az olmasına rağmen, dalga boylarında iyidir. Bu tablodan görüleceği üzere hesaplamalardan elde edilen salınıcı şiddetleri bazı geçişler hariç diğer çalışmalarla uyumludur. Elde edilen sonuçların doğruluğunu göstermek için $\log gf_{(\text{bu çalışma})}$/ $\log gf_{(\text{diğer çalışmalar})}$ oran ortalaması hesapladı. $5p^6 6p\ ^2P^o_{3/2}$ – $5p^6 5d\ ^2D_{5/2}$, $5p^6 5g$ – $5p^6 4f$, $5p^6 7d$ – $5p^6 4f$, $5p^6 8d$ – $5p^6 4f$ ve $5p^6 6g\ ^2G_{7/2}$ – $5p^6 5f\ ^2F^o_{5/2}$ geçişleri hariç, elde edilen sonuçlar ile diğer çalışma [14] arasındaki oran ortalaması, 1,08 (A hesabı), 0,94 (B hesabı), 0,99 (C hesabı) ve 1,10 (D hesabı) olarak bulunmuştur. Geçiş olasılıkları için literatürde sadece iki çalışma [13,14] mevcuttur. Ayrıca, $5p^6 7p$ – $5p^6 6s$, $5p^6 5g$ – $5p^6 4f$, $5p^6 7d$ – $5p^6 4f$, $5p^6 8d$ – $5p^6 4f$ ve $5p^6 6g\ ^2G_{9/2}$ – $5p^6 5f\ ^2F^o_{7/2}$ geçişleri dışında, $gA_{ki(\text{bu çalışma})}$ / $gA_{ki[14]}$ oran ortalaması 1,19 (A hesabı) 1,13 (B hesabı), 1,15 (C hesabı) ve 1,19 (D hesabı) olarak hesaplanmıştır. B ve C hesaplamaları ile elde edilen geçiş sonuçları diğer çalışmalarla daha uyumludur.

Bu hesaplamalar öz-değerlik elektronları arasındaki karşılıklı etkileşmeleri içermektedir. HFR hesaplamalarından elde edilen bu sonuçlar, özden uyarılmaları ($5p^6$) içeren konfigürasyonlar eklenerek geliştirilebilir. Ancak bu durum, bazı

program kısıtlamaları veya yakınsama sorunları ortaya çıkarır. Elektronları arasındaki karşılıklı etkileşme etkileri ve relativistik etkiler ağır elementlerin spektrumlarında önemli rol oynamaktadır. Ce IV gibi ağır atomların ışınımsal atomik özelliklerin yapı hesaplamasında ve doğru tahmininde kompleks konfigürasyon etkileşimi ve göreceli etkiler aynı anda ele alınmalıdır. Migdalek ve Bojara [10] teori ve deney arasındaki uyuşmanın geliştirilmesinde relativistik etkilerin ve öz kutuplaşmanın önemli bir rolü olduğunu göstermiştirler. Bu nedenle hesaplamalar iyonik öz etkilerinin polarizasyonu hesaba katmak için geliştirilen HFR yöntemi kullanılarak geliştirilebilir.

Tablo 3.5. Ce IV'ün elektrik dipol (E1) geçişleri için λ dalga boyları (Å), log(g*f*) logaritmik ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve $gA_{ki}$ ağırlıklı geçiş olasılıkları ($s^{-1}$)

| Geçişler | | | | | λ (Å) | | log(g*f*) | | $gA_{ki}$ ($s^{-1}$) | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Üst Seviye | | Alt Seviye | | | Bu çalışma | Diğer çalışmalar | Bu çalışma | Diğer çalışmalar | Bu çalışma | Diğer çalışmalar |
| $5p^66p$ | $^2P^o_{1/2}$ | $5p^66s$ | $^2S_{1/2}$ | A | 2779,090 | 2779,075[a] | -0,066 | -0,12[a] | 7,41(8) | 6,50(8)[a] |
| | | | | B | 2779,098 | 2785[b] | -0,069 | -0,200[b] | 7,37(8) | 5,44(8)[b] |
| | | | | C | 2779,789 | 2778,24[c] | -0,136 | -0,113[d1] | 6,32(8) | |
| | | | | D | 2779,113 | | -0,106 | -0,184[d2] | 6,77(8) | |
| | | | | | | | | -0,201[d3] | | |
| | | | | | | | | -0,074[e] | | |
| $5p^66p$ | $^2P^o_{3/2}$ | $5p^66s$ | $^2S_{1/2}$ | A | 2457,606 | 2457,600[a] | 0,288 | 0,23[a] | 2,14(9) | 1,88(9)[a] |
| | | | | B | 2457,615 | 2465[b] | 0,286 | 0,155[b] | 2,13(9) | 1,58(9)[b] |
| | | | | C | 2457,950 | 2456,85[c] | 0,219 | 0,199[d1] | 1,83(9) | |
| | | | | D | 2457,620 | | 0,249 | 0,173[d2] | 1,96(9) | |
| | | | | | | | | 0,153[d3] | | |
| | | | | | | | | 0,275[e] | | |
| $5p^66p$ | $^2P^o_{1/2}$ | $5p^65d$ | $^2D_{3/2}$ | A | 1372,721 | 1372,719[a] | -0,116 | -0,23[a] | 2,71(9) | 2,10(9)[a] |
| | | | | B | 1372,716 | 1371[b] | -0,137 | -0,202[b] | 2,58(9) | 2,22(9)[b] |
| | | | | C | 1372,734 | 1372,72[c] | -0,180 | -0,178[d1] | 2,33(9) | |
| | | | | D | 1372,723 | | -0,154 | -0,185[d2] | 2,48(9) | |
| | | | | | | | | -0,199[d3] | | |
| | | | | | | | | -0,095[e] | | |
| $5p^66p$ | $^2P^o_{3/2}$ | $5p^65d$ | $^2D_{3/2}$ | A | 1289,408 | 1289,408[a] | -0,788 | -0,90[a] | 6,54(8) | 5,07(8)[a] |
| | | | | B | 1289,404 | 1289[b] | -0,809 | -0,915[b] | 6,23(8) | 4,88(8)[b] |
| | | | | C | 1289,363 | 1289,41[c] | -0,853 | -0,862[d1] | 5,63(8) | |
| | | | | D | 1289,408 | | -0,826 | -0,891[d2] | 5,99(8) | |
| | | | | | | | | -0,912[d3] | | |
| | | | | | | | | -0,807[e] | | |
| $5p^66p$ | $^2P^o_{3/2}$ | $5p^65d$ | $^2D_{5/2}$ | A | 1332,161 | 1332,157[a] | 0,152 | 0,04[a] | 5,34(9) | 4,11(9)[a] |
| | | | | B | 1332,161 | 1334[b] | 0,131 | 0,055[b] | 5,08(9) | 4,24(9)[b] |
| | | | | C | 1332,112 | 1332,16[c] | 0,086 | 0,094[d1] | 4,58(9) | |
| | | | | D | 1332,169 | | 0,114 | 0,068[d2] | 4,89(9) | |
| | | | | | | | | 0,055[d3] | | |

Tablo 3.5. (Devamı)

| Geçişler | | | | | λ (Å) | | log(g*f*) | | $gA_{ki}$ ($s^{-1}$) | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Üst Seviye | | Alt Seviye | | | Bu çalışma | Diğer çalışmalar | Bu çalışma | Diğer çalışmalar | Bu çalışma | Diğer çalışmalar |
| | | | | | | | | 0,145[e] | | |
| $5p^6 6d$ | $^2D_{3/2}$ | $5p^6 6p$ | $^2P^o_{1/2}$ | A | 1775,316 | 1775,304[a] | 0,473 | 0,17[a] | 6,27(9) | 3,10(9)[a] |
| | | | | B | 1776,124 | 1775,30[c] | 0,233 | 0,359[d1] | 3,61(9) | |
| | | | | C | 1786,200 | | 0,269 | 0,359[d1] | 3,88(9) | |
| | | | | D | 1790,670 | | 0,343 | 0,353[d3] | 4,58(9) | |
| $5p^6 6d$ | $^2D_{3/2}$ | $5p^6 6p$ | $^2P^o_{3/2}$ | A | 1937,196 | 1937,185[a] | -0,264 | -0,57[a] | 9,68(8) | 4,76(8)[a] |
| | | | | B | 1938,156 | 1937,21[c] | -0,504 | -0,322[d1] | 5,56(8) | |
| | | | | C | 1950,290 | | -0,474 | -0,329[d2] | 5,88(8) | |
| | | | | D | 1955,495 | | -0,391 | -0,341[d3] | 7,08(8) | |
| $5p^6 6d$ | $^2D_{5/2}$ | $5p^6 6p$ | $^2P^o_{3/2}$ | A | 2003,767 | 2003,726[a] | 0,675 | 0,33[a] | 7,87(9) | 3,56(9)[a] |
| | | | | B | 2007,112 | 2003,11[c] | 0,366 | 0,630[d1] | 3,84(9) | |
| | | | | C | 1944,599 | | 0,224 | 0,624[d2] | 2,,95(9) | |
| | | | | D | 2004,270 | | 0,277 | 0,615[d3] | 3,14(9) | |
| $5p^6 7d$ | $^2D_{3/2}$ | $5p^6 6p$ | $^2P^o_{1/2}$ | A | 1009,326 | 1009,31[c] | -0,799 | -0,811[d1] | 1,04(9) | – |
| | | | | B | 1009,709 | | -0,970 | -0,929[d2] | 7,01(8) | |
| | | | | C | 1009,340 | | -1,182 | -1,111[d3] | 4,31(8) | |
| | | | | D | 1009,335 | | -1,011 | | 6,38(8) | |
| $5p^6 7d$ | $^2D_{3/2}$ | $5p^6 6p$ | $^2P^o_{3/2}$ | A | 1059,670 | 1059,64[c] | -1,519 | -1,633[d1] | 1,80(8) | – |
| | | | | B | 1060,091 | | -1,687 | -1,781[d2] | 1,22(8) | |
| | | | | C | 1059,723 | | -1,880 | -2,009[d3] | 7,82(7) | |
| | | | | D | 1059,681 | | -1,728 | | 1,11(8) | |
| $5p^6 7d$ | $^2D_{5/2}$ | $5p^6 6p$ | $^2P^o_{3/2}$ | A | 1057,686 | 1057,67[c] | -0,564 | -0,638[d1] | 1,63(9) | – |
| | | | | B | 1057,414 | | -0,691 | -0,776[d2] | 1,21(9) | |
| | | | | C | 1057,557 | | -0,933 | -0,988[d3] | 6,97(8) | |
| | | | | D | 1057,666 | | -0,756 | | 1,04(9) | |
| $5p^6 5d$ | $^2D_{3/2}$ | $5p^6 4f$ | $^2F^o_{5/2}$ | A | 2010,576 | 2010,562[a] | -0,599 | -1,08[a] | 4,15(8) | 1,37(8)[a] |
| | | | | B | 2010,583 | 2102[b] | -0,928 | -0,683[b] | 1,95(8) | 3,42(8)[b] |
| | | | | C | 2010,567 | 2009,94[c] | -0,902 | 0,088[d1] | 2,07(8) | |
| | | | | D | 2010,573 | | -0,799 | -1,020[d2] | 2,62(8) | |
| | | | | | | | | -0,994[d3] | | |

Tablo 3.5. (Devamı)

| Geçişler | | | | | λ (Å) | | log(g*f*) | | $gA_{ki}$ ($s^{-1}$) | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Üst Seviye | | Alt Seviye | | | Bu çalışma | Diğer çalışmalar | Bu çalışma | Diğer çalışmalar | Bu çalışma | Diğer çalışmalar |
| $5p^65d$ | $^2D_{5/2}$ | $5p^64f$ | $^2F^o_{5/2}$ | A | 1914,755 | 1914,740[a] | -1,724 | -2,19[a] | 3,43(7) | 1,16(7)[a] |
| | | | | B | 1914,755 | 1994[b] | -2,043 | -1,824[b] | 1,65(7) | 2,47(7)[b] |
| | | | | C | 1914,749 | 1914,75[c] | -2,020 | -1,066[d1] | 1,74(7) | |
| | | | | D | 1914,737 | | -1,919 | -2,125[d2] | 2,19(7) | |
| | | | | | | | | -2,118[d3] | | |
| $5p^65d$ | $^2D_{5/2}$ | $5p^64f$ | $^2F^o_{7/2}$ | A | 2001,079 | 2001,046[a] | -0,443 | -0,92[a] | 6,01(8) | 2,00(8)[a] |
| | | | | B | 2001,083 | 2086[b] | -0,770 | -0,518[b] | 2,83(8) | 5,05(8)[b] |
| | | | | C | 2001,080 | 2000,42[c] | -0,744 | 0,249[d1] | 3,00(8) | |
| | | | | D | 2001,066 | | -0,643 | -0,844[d2] | 3,79(8) | |
| | | | | | | | | -0,827[d3] | | |
| $5p^65f$ | $^2F^o_{5/2}$ | $5p^65d$ | $^2D_{3/2}$ | A | 741,795 | 741,808[a] | 0,470 | 0,30[a] | 3,58(10) | 2,43(10)[a] |
| | | | | B | 741,794 | 741,79[c] | 0,454 | 0,106[d1] | 3,45(10) | |
| | | | | C | 741,789 | | 0,458 | 0,349[d2] | 3,48(10) | |
| | | | | D | 741,793 | | 0,463 | 0,348[d3] | 3,52(10) | |
| $5p^65f$ | $^2F^o_{5/2}$ | $5p^65d$ | $^2D_{5/2}$ | A | 755,748 | 755,760[a] | -0,684 | -0,85[a] | 2,42(9) | 1,65(9)[a] |
| | | | | B | 755,749 | 755,75[c] | -0,701 | -1,020[d1] | 2,33(9) | |
| | | | | C | 755,742 | | -0,697 | -0,784[d2] | 2,35(9) | |
| | | | | D | 755,749 | | -0,691 | -0,785[d3] | 2,38(9) | |
| $5p^65f$ | $^2F^o_{7/2}$ | $5p^65d$ | $^2D_{5/2}$ | A | 754,603 | 754,608[a] | 0,618 | 0,46[a] | 4,86(10) | 3,14(10)[a] |
| | | | | B | 749,881 | 754,60[c] | 0,605 | 0,267[d1] | 4,78(10) | |
| | | | | C | 754,610 | | 0,607 | 0,514[d2] | 4,74(10) | |
| | | | | D | 754,446 | | 0,554 | 0,514[d3] | 4,19(10) | |
| $5p^66f$ | $^2F^o_{5/2}$ | $5p^65d$ | $^2D_{3/2}$ | A | 569,864 | – | -0,085 | -0,333[d1] | 1,69(10) | – |
| | | | | B | 567,998 | | -0,091 | -0,315[d2] | 1,68(10) | |
| | | | | C | 571,237 | | -0,112 | -0,360[d3] | 1,58(10) | |
| | | | | D | 568,584 | | -0,104 | | 1,62(10) | |
| $5p^66f$ | $^2F^o_{5/2}$ | $5p^65d$ | $^2D_{5/2}$ | A | 578,063 | – | -1,238 | -1,473[d1] | 1,15(9) | – |
| | | | | B | 576,144 | | -1,244 | -1,457[d2] | 1,15(9) | |
| | | | | C | 579,476 | | -1,265 | -1,506[d3] | 1,08(9) | |
| | | | | D | 576,747 | | -1,256 | | 1,11(9) | |

Tablo 3.5. (Devamı)

| Geçişler | | | | | λ (Å) | | log(g*f*) | | $gA_{ki}$ ($s^{-1}$) | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Üst Seviye | | Alt Seviye | | | Bu çalışma | Diğer çalışmalar | Bu çalışma | Diğer çalışmalar | Bu çalışma | Diğer çalışmalar |
| $5p^6 6f$ | $^2F^o_{7/2}$ | $5p^6 5d$ | $^2D_{5/2}$ | A | 577,809 | – | 0,060 | -0,176[d1] | 2,31(10) | – |
| | | | | B | 575,749 | | 0,058 | -0,154[d2] | 2,30(10) | |
| | | | | C | 579,086 | | 0,040 | -0,205[d3] | 2,18(10) | |
| | | | | D | 576,302 | | 0,047 | | 2,24(10) | |
| $5p^6 7p$ | $^2P^o_{1/2}$ | $5p^6 6s$ | $^2S_{1/2}$ | A | 891,587 | 891,587[a] | -3,718 | -4,65[a] | 1,61(6) | 1,88(5)[a] |
| | | | | B | 896,289 | | -3,522 | | 2,50(6) | |
| | | | | C | 902,375 | | -3,866 | | 1,11(6) | |
| | | | | D | 896,331 | | -4,341 | | 3,78(5) | |
| $5p^6 7p$ | $^2P^o_{1/2}$ | $5p^6 5d$ | $^2D_{3/2}$ | A | 671,031 | 671,033[a] | -1,068 | -1,25[a] | 1,27(9) | 8,28(8)[a] |
| | | | | B | 673,687 | | -1,313 | | 7,15(8) | |
| | | | | C | 677,084 | | -1,224 | | 8,68(8) | |
| | | | | D | 673,713 | | -1,131 | | 1,09(9) | |
| $5p^6 7p$ | $^2P^o_{3/2}$ | $5p^6 5d$ | $^2D_{5/2}$ | A | 671,305 | 671,304[a] | -0,813 | -1,11[a] | 2,28(9) | 1,15(9)[a] |
| | | | | B | 669,757 | | -0,840 | | 2,15(9) | |
| | | | | C | 673,446 | | -0,881 | | 1,94(9) | |
| | | | | D | 670,628 | | -0,845 | | 2,12(9) | |
| $5p^6 6d$ | $^2D_{5/2}$ | $5p^6 4f$ | $^2F^o_{5/2}$ | A | 564,340 | 564,338[a] | -2,933 | -2,24[a] | 2,44(7) | 1,21(8)[a] |
| | | | | B | 564,605 | | -1,988 | | 2,15(8) | |
| | | | | C | 559,536 | | -1,414 | | 8,21(8) | |
| | | | | D | 564,380 | | -1,953 | | 2,33(8) | |
| $5p^6 6d$ | $^2D_{5/2}$ | $5p^6 4f$ | $^2F^o_{7/2}$ | A | 571,608 | 571,605[a] | -1,638 | -1,09[a] | 4,70(8) | 1,67(9)[a] |
| | | | | B | 571,880 | 571,59[c] | -1,097 | | 1,63(9) | |
| | | | | C | 566,680 | | -1,617 | | 5,02(8) | |
| | | | | D | 571,649 | | -1,548 | | 5,77(8) | |
| $5p^6 6d$ | $^2D_{3/2}$ | $5p^6 4f$ | $^2F^o_{5/2}$ | A | 558,930 | 558,932[a] | -1,783 | -1,30[a] | 3,52(8) | 1,07(9)[a] |
| | | | | B | 559,011 | 558,92[c] | -1,538 | | 6,18(8) | |
| | | | | C | 560,006 | | -1,536 | | 6,19(8) | |
| | | | | D | 560,444 | | -2,139 | | 1,54(8) | |
| $5p^6 7s$ | $^2S_{1/2}$ | $5p^6 6p$ | $^2P^o_{1/2}$ | A | 1641,578 | 1641,591[a] | -0,329 | -0,36[a] | 1,16(9) | 1,07(9)[a] |
| | | | | B | 1640,498 | 1641,58[c] | -0,487 | | 8,07(8) | |

Tablo 3.5. (Devamı)

| Geçişler | | | | | λ (Å) | | log(g*f*) | | $gA_{ki}$ ($s^{-1}$) | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Üst Seviye | | Alt Seviye | | | Bu çalışma | Diğer çalışmalar | Bu çalışma | Diğer çalışmalar | Bu çalışma | Diğer çalışmalar |
| | | | | C | 1640,775 | | -0,315 | | 1,20(9) | |
| | | | | D | 1641,311 | | -0,479 | | 8,22(8) | |
| $5p^67s$ | $^2S_{1/2}$ | $5p^66p$ | $^2P^o_{3/2}$ | A | 1779,043 | 1779,060[a] | -0,063 | -0,10[a] | 1,82(9) | 1,67(9)[a] |
| | | | | B | 1777,774 | 1779,03[c] | -0,218 | | 1,28(9) | |
| | | | | C | 1778,206 | | -0,050 | | 1,88(9) | |
| | | | | D | 1778,732 | | -0,216 | | 1,28(9) | |
| $5p^67d$ | $^2D_{5/2}$ | $5p^65f$ | $^2F^o_{7/2}$ | A | 2695,999 | 2643,099[a] | -0,688 | -0,69[a] | 1,88(8) | 1,96(8)[a] |
| | | | | B | 2756,198 | 2695,21[c] | -0,621 | | 2,10(8) | |
| | | | | C | 2694,875 | | -0,681 | | 1,91(8) | |
| | | | | D | 2697,903 | | -0,690 | | 1,87(8) | |
| $5p^67d$ | $^2D_{3//2}$ | $5p^65f$ | $^2F^o_{5/2}$ | A | 2694,26 | 2693,44[c] | -0,843 | – | 1,32(8) | – |
| | | | | B | 2696,98 | | -0,751 | | 1,62(8) | |
| | | | | C | 2694,49 | | -0,810 | | 1,42(8) | |
| | | | | D | 2694,36 | | -0,809 | | 1,42(8) | |
| $5p^65g$ | $^2G_{7/2}$ | $5p^64f$ | $^2F^o_{5/2}$ | A | 443,213 | 440,975[a] | -1,142 | 0,26[a] | 2,45(9) | 6,22(10)[a] |
| | | | | B | 443306 | 443,11[c] | 0,103 | | 4,30(10) | |
| | | | | C | 443,192 | | -1,593 | | 8,68(8) | |
| | | | | D | 443,215 | | -1,149 | | 2,412(9) | |
| $5p^65g$ | $^2G_{7/2}$ | $5p^64f$ | $^2F^o_{7/2}$ | A | 447,684 | 445,398[a] | -2,578 | -0,12[a] | 8,80(7) | 2,58(10)[a] |
| | | | | B | 447,778 | 447,58[c] | -2,415 | | 1,28(8) | |
| | | | | C | 447,663 | | -3,270 | | 1,79(7) | |
| | | | | D | 447,686 | | -3,307 | | 1,64(7) | |
| $5p^65g$ | $^2G_{9/2}$ | $5p^64f$ | $^2F^o_{7/2}$ | A | 447,683 | 444,453[a] | -1,034 | 1,07[a] | 3,08(9) | 3,92(11)[a] |
| | | | | B | 447,595 | | -0,268 | | 1,79(10) | |
| | | | | C | 447,674 | | -1,417 | | 1,27(9) | |
| | | | | D | 447,690 | | -1,305 | | 1,65(9) | |
| $5p^65g$ | $^2G_{7/2}$ | $5p^65f$ | $^2F^o_{5/2}$ | A | 2434,281 | 2368,060[a] | 0,942 | 0,83[a] | 9,86(9) | 8,07(9)[a] |
| | | | | B | 2437,070 | 2434,24[c] | 0,898 | | 8,87(9) | |
| | | | | C | 2433,738 | | 0,921 | | 9,38(9) | |
| | | | | D | 2434,363 | | 0,931 | | 9,59(9) | |

Tablo 3.5. (Devamı)

| Geçişler | | | | | λ (Å) | | log(g*f*) | | $gA_{ki}$ ($s^{-1}$) | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Üst Seviye | | Alt Seviye | | | Bu çalışma | Diğer çalışmalar | Bu çalışma | Diğer çalışmalar | Bu çalışma | Diğer çalışmalar |
| $5p^65g$ | $^2G_{7/2}$ | $5p^65f$ | $^2F^o_{7/2}$ | A | 2446,244 | 2379,435[a] | -0,491 | -0,62[a] | 3,60(8) | 2,82(8)[a] |
| | | | | B | 2500,159 | 2446,24[c] | -0,539 | | 3,09(8) | |
| | | | | C | 2445,555 | | -0,506 | | 3,48(8) | |
| | | | | D | 2447,985 | | -0,557 | | 3,08(8) | |
| $5p^65g$ | $^2G_{9/2}$ | $5p^65f$ | $^2F^o_{7/2}$ | A | 2446244 | 2352,703[a] | 1,053 | 0,71[a] | 1,26(10) | 6,16(9)[a] |
| | | | | B | 2494,453 | | 1,027 | | 1,14(10) | |
| | | | | C | 2445,885 | | 1,032 | | 1,20(10) | |
| | | | | D | 2448,113 | | 0,982 | | 1,07(10) | |
| $5p^67d$ | $^2D_{3/2}$ | $5p^64f$ | $^2F^o_{5/2}$ | A | 451,1394 | 451,138[a] | -2,190 | 0,49[a] | 2,11(8) | 1,01(11)[a] |
| | | | | B | 451,2156 | | -0,009 | | 3,21(10) | |
| | | | | C | 451,1432 | | -0,584 | | 8,54(9) | |
| | | | | D | 451,1413 | | -0,532 | | 9,64(9) | |
| $5p^67d$ | $^2D_{5/2}$ | $5p^64f$ | $^2F^o_{5/2}$ | A | 450,7794 | 449,280[a] | -3,336 | -0,17[a] | 1,513(7) | 2,25(10)[a] |
| | | | | B | 450,7299 | | -0,877 | | 4,356(9) | |
| | | | | C | 450,7502 | | -1,088 | | 2,682(9) | |
| | | | | D | 450,7756 | | -1,411 | | 1,274(9) | |
| $5p^67d$ | $^2D_{5/2}$ | $5p^64f$ | $^2F^o_{7/2}$ | A | 455,4044 | 453,874[a] | -2,040 | 0,35[a] | 2,935(8) | 7,27(10)[a] |
| | | | | B | 455,3541 | | -0,145 | | 2,303(10) | |
| | | | | C | 455,3750 | | -0,831 | | 4,750(9) | |
| | | | | D | 455,4009 | | -0,588 | | 8,297(9) | |
| $5p^68d$ | $^2D_{3/2}$ | $5p^64f$ | $^2F^o_{5/2}$ | A | 404,400 | 404,405[a] | -2,466 | -0,85[a] | 1,40(8) | 5,75(9)[a] |
| | | | | B | 403,690 | | -0,319 | | 1,96(10) | |
| | | | | C | 407,,234 | | 0,281 | | 7,68(10) | |
| | | | | D | 403,237 | | -0,799 | | 6,52(9) | |
| $5p^68d$ | $^2D_{5/2}$ | $5p^64f$ | $^2F^o_{7/2}$ | A | 407,745 | 407,743[a] | -2,315 | -0,65[a] | 1,94(8) | 9,01(9)[a] |
| | | | | B | 407,242 | | -0,033 | | 3,73(10) | |
| | | | | C | 410,328 | | 0,656 | | 1,80(11) | |
| | | | | D | 405,714 | | -0,606 | | 1,00(10) | |
| $5p^68d$ | $^2D_{3/2}$ | $5p^67p$ | $^2P^o_{1/2}$ | A | 2114,540 | 2061,089[a] | -0,656 | -0,70[a] | 3,29(8) | 3,11(8)[a] |
| | | | | B | 2018,520 | | -0,816 | | 2,50(8) | |

Tablo 3.5. (Devamı)

| Geçişler | | | | | λ (Å) | | log(g*f*) | | $gA_{ki}$ ($s^{-1}$) | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Üst Seviye | | Alt Seviye | | | Bu çalışma | Diğer çalışmalar | Bu çalışma | Diğer çalışmalar | Bu çalışma | Diğer çalışmalar |
| | | | | C | 2077,720 | | -0,756 | | 2,71(8) | |
| | | | | D | 2007,030 | | -0,696 | | 3,33(8) | |
| $5p^6 8d$ | $^2D_{5/2}$ | $5p^6 7p$ | $^2P^o_{3/2}$ | A | 2159,153 | 2159,145[a] | -0,410 | -0,49[a] | 5,57(8) | 4,58(8)[a] |
| | | | | B | 2161,068 | | -0,405 | | 5,63(8) | |
| | | | | C | 2210,224 | | -0,492 | | 4,40(8) | |
| | | | | D | 2110,084 | | -0,435 | | 5,51(8) | |
| $5p^6 6g$ | $^2G_{7/2}$ | $5p^6 4f$ | $^2F^o_{5/2}$ | A | 402,903 | 402,904[a] | -1,223 | -0,76[a] | 2,46(9) | 7,13(9)[a] |
| | | | | B | 401,724 | | -0,515 | | 1,26(10) | |
| | | | | C | 403,435 | | -0,254 | | 2,29(10) | |
| | | | | D | 401,695 | | -0,749 | | 7,37(9) | |
| $5p^6 6g$ | $^2G_{9/2}$ | $5p^6 4f$ | $^2F^o_{7/2}$ | A | 406,573 | 406,570[a] | -1,114 | -0,57[a] | 3,10(9) | 1,08(10)[a] |
| | | | | B | 405,245 | | -0,284 | | 2,11(10) | |
| | | | | C | 407,022 | | 0,062 | | 4,65(10) | |
| | | | | D | 404,890 | | -0,562 | | 1,12(10) | |
| $5p^6 6g$ | $^2G_{7/2}$ | $5p^6 5f$ | $^2F^o_{5/2}$ | A | 1570,997 | 1570,956[a] | -0,024 | 0,08[a] | 2,55(9) | 3,25(9)[a] |
| | | | | B | 1553,226 | 1572,62[c] | -0,012 | | 2,69(9) | |
| | | | | C | 1579,158 | | -0,018 | | 2,57(9) | |
| | | | | D | 1552,798 | | -0,012 | | 2,69(9) | |
| $5p^6 6g$ | $^2G_{7/2}$ | $5p^6 5f$ | $^2F^o_{7/2}$ | A | 1575,971 | 1577,60[c] | -1,457 | – | 9,37(7) | – |
| | | | | B | 1578,614 | | -1,455 | | 9,39(7) | |
| | | | | C | 1584,125 | | -1,474 | | 8,93(7) | |
| | | | | D | 1558,329 | | -1,510 | | 8,48(7) | |
| $5p^6 6g$ | $^2G_{9/2}$ | $5p^6 5f$ | $^2F^o_{7/2}$ | A | 1575,669 | 1575,641[a] | 0,087 | 0,19[a] | 3,28(9) | 4,12(9)[a] |
| | | | | B | 1576,369 | | 0,095 | | 3,34(9) | |
| | | | | C | 1582,407 | | 0,092 | | 3,29(9) | |
| | | | | D | 1551,354 | | 0,038 | | 3,03(9) | |
| $5p^6 8s$ | $^2S_{1/2}$ | $5p^6 6p$ | $^2P^o_{1/2}$ | A | 975,200 | 975,20[c] | -1,168 | – | 4,76(8) | – |
| | | | | B | 975,200 | | -1,175 | | 4,69(8) | |
| | | | | C | 975,128 | | -1,120 | | 5,32(8) | |
| | | | | D | 975,200 | | -1,139 | | 5,09(8) | |

Tablo 3.5. (Devamı)

| Geçişler | | | | | λ (Å) | | log(g*f*) | | $gA_{ki}$ ($s^{-1}$) | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Üst Seviye | | Alt Seviye | | | Bu çalışma | Diğer çalışmalar | Bu çalışma | Diğer çalışmalar | Bu çalışma | Diğer çalışmalar |
| $5p^6 8s$ | $^2S_{1/2}$ | $5p^6 6p$ | $^2P^o_{3/2}$ | A | 1022,119 | 1022,12[c] | -0,888 | – | 8,27(8) | – |
| | | | | B | 1022,117 | | -0,895 | | 8,13(8) | |
| | | | | C | 1022,074 | | -0,839 | | 9,25(8) | |
| | | | | D | 1022,118 | | -0,859 | | 8,84(8) | |

[a]Reader ve Wyart [14], [b]Savukov ve arkadaşları [13, *f* ve $A_{ki}$'den çevrildi], [c]Lang [6], [d]Migdalek ve Wyrozumska [11, *f*'den çevrildi], [e]Zilitis [15, *f*'den çevrildi]

# KAYNAKLAR


[1] Biémont, E., Quinet, P., Recent advances in the study of lanthanide atoms and ions. Phys. Scr., T105: 38−54, 2003.

[2] Gibbs, R.C., White, H.E., Relations between doublets of stripped atoms in five periods of the periodic table. Phys. Rev. 33: 157−162, 1929.

[3] Badami, J.S., The spectrum of trebly-ionized cerium (Ce IV). Proc. Phys. Soc. 43: 53−58, 1931.

[4] Lang, R.J., The spectrum of trebly ionized cerium. Can. J. Res., Sect. A 13: 1−4 (1935).

[5] Lang, R.J., The F terms of Ce IV. Phys. Rev. 49: 552−552, 1936.

[6] Lang, R.J., The spectrum of trebly ionized cerium. Can. J. Res., Sect. A 14: 127−130, 1936.

[7] Martin, W.C., Zalubas, R., Hagan, L., Atomic Energy Levels-The Rare-Earth Elements (NSRDS-NBS) 60, 91, 1978.

[8] Migdalek, J., Baylis, W.E., Valence-core electron exchange interaction and the collapse of 4f and 5d orbitals in the cesium isoelectronic sequence. Phys. Rev. A, 30: 1603−1609, 1984.

[9] Migdalek, J., Baylis, W.E., Relativistic Hartree-Fock oscillator strengths for the lowest s → p transitions in the first few members of the Rb I and Cs I isoelectronic sequences, with allowance for core polarization. J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, 22: 127−134, 1979.

[10] Migdalek, J., Bojara, A., Relativistic effects, core polarisation and relaxation in ionisation potentials along Rb and Cs isoelectronic sequences. J. Phys. B: At. Mol. Phys. 17: 1943−1951, 1984.

[11] Migdalek, J., Wyrozumska, M., Relativistic oscillator strengths for the Cs isoelectronic sequence and collapse of f and d orbitals. J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, 37: 581−589, 1987.

[12] Zhang, Z.G., Svanberg, S., Quinet, P., Palmeri, P., Biémont, E., Time – resolved laser spectroscopy of multiply ionized atoms: natural radiative lifetimes in Ce IV, Phys. Rev. Lett. 87: 273001−4, 2001.

[13] Savukov, I.M., Johnson, W.R., Safronova, U.I., Safronova, M.S., Energies, transition rates, and electron electric-dipole-moment enhancement factors for Ce IV and Pr V. Phys. Rev. A, 67: 042504−5, 2003.

[14] Reader, J., Wyart, J.F., Observation of inner – shell – excited configurations in triply ionized cerium $Ce^{3+}$, Phys. Rev. A 80: 042517−12, 2009.

[15] Zilitis, V.A., Oscillator strengths and lifetimes calculated by the Dirac-Fock method for the levels of ions of the cesium isoelectronic sequence. Opt. Spectrosc. 117: 513–515, 2014.

[16] Glushkov, A.V., Oscillator strengths of Cs and Rb-like ions J. Appl. Spectrosc. 56: 5–9, 1992.

[17] Cowan, R.D., The Theory of Atomic Structure and Spectra, University of California Press, 1981.

[18] Karaçoban Usta, B., Alparslan, B., Lifetimes, oscillator strengths and transition probabilities for Ce IV, Can. J. Phys. (basımda, doi:10.1139/cjp-2017-0161)

[19] http://www.tcd.ie/Physics/People/Cormac.McGuinness/Cowan/, Erişim Tarihi: 26.04.2017.

[20] Fischer, C.F., Brage, T., Jönsson, P., Computational Atomic Structure-an MCHF Approach, IOP, Bristol 1997.

[21] http://physics.nist.gov/asd, Erişim Tarihi: 26.04.2017.

# ÖZGEÇMİŞ

Büşra ALPARSLAN, 17.02.1989'da Sakarya'da doğdu. İlk, orta ve lise eğitimini Sakarya'da tamamladı. 2006 yılında Sapanca Şehit Albay Güner Ekici Yabancı Dil Ağırlıklı Lisesi'nden mezun oldu. 2008 yılında başladığı Sakarya Üniversitesi Fizik Bölümü'nü 2012 yılında bölüm ikincisi olarak bitirdi. 2012 yılında Sakarya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Bölümü'nde yüksek lisans eğitimine başladı ve halen yüksek lisans eğitimine devam etmektedir.