

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

**BAZI AKTİNİT ATOMLARININ ATOMİK YAPI
HESAPLAMALARI**

DOKTORA TEZİ

Güldem ÜRER

Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK

Tez Danışmanı : Doç. Dr. Leyla ÖZDEMİR

Mart 2011

T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

BAZI AKTİNİT ATOMLARININ ATOMİK YAPI
HESAPLAMALARI

DOKTORA TEZİ

Güldem ÜRER

Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK

Bu tez 04/03/2011 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından Oybirliği ile kabul edilmiştir.



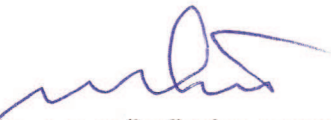
Doç. Dr. Kadir ESMER
Jüri Başkanı



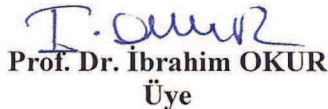
Doç. Dr. Leyla ÖZDEMİR
Üye



Doç. Dr. Erdoğan TARCAN
Üye



Doç. Dr. Mustafa KÜÇÜKİSLAMOĞLU
Üye



Prof. Dr. İbrahim OKUR
Üye

ÖNSÖZ

Bu çalışmada, bazı aktinit atomlarının ve iyonlarının seviye yapıları ve incelenen seviyeler arasındaki elektrik dipol, elektrik kuadropol ve manyetik dipol geçişlerine ait dalga boyları, salınıcı şiddetleri ve geçiş olasılıkları hesaplandı. Bu hesaplamalar için çok konfigürasyonlu Hartree-Fock (Multiconfiguration Hartree-Fock–MCHF) ve çok konfigürasyonlu Dirac-Fock (Multiconfiguration Dirac-Fock–MCDF) yöntemleri kullanıldı.

Çalışmalarım boyunca bana öncülük eden ve desteğini esirgemeyen değerli hocam Doç. Dr. Leyla ÖZDEMİR'e ve değerli arkadaşım Arş. Gör. Betül KARAÇOBAN'a teşekkür ederim.

Ayrıca bu güne kadar maddi ve manevi desteklerini veren anneme, babama, ablama, abime, sevgili yeğenlerim Ömer Buğra SÜREN'e ve Sarper SÜREN'e sonsuz teşekkürler.

Bu çalışma SAÜ Bilimsel Araştırma Projeleri Komisyonu tarafından desteklenmiştir (Proje no: 2008.50.02.003).

İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ.....	ii
İÇİNDEKİLER	iii
KISALTMALAR LİSTESİ.....	vi
ŞEKİLLER LİSTESİ	viii
TABLolar LİSTESİ.....	ix
ÖZET.....	xi
SUMMARY.....	xii
BÖLÜM 1.	
GİRİŞ.....	1
BÖLÜM 2.	
HESAPLAMA YÖNTEMLERİ.....	6
2.1. Genel Kavramlar.....	6
2.1.1. Çok elektronlu atomlar için relativistik olmayan Hamiltonyen.....	6
2.1.2. Dalga fonksiyonunun özellikleri.....	7
2.1.2.1. Normalleşme.....	7
2.1.2.2. Antisimetriklik.....	7
2.1.2.3. Açısal özellikler.....	8
2.1.2.4. Parite.....	9
2.1.3 Çok elektronlu atomlar.....	9
2.1.3.1. Merkezi alan yaklaşıklığı.....	11
2.1.3.2. Konfigürasyon hal fonksiyonları.....	14
2.1.3.3. <i>LS</i> terimleri.....	14
2.1.4. Değişim (Varyasyon) yöntemi.....	15

2.1.4.1. Matris özdeğer denklemi	16
2.1.5. Hartree-Fock yöntemi.....	18
2.2. Çok Konfigürasyonlu Hartree-Fock Yaklaşıklığı.....	19
2.2.1. Breit-Pauli Hamiltonyeni ve dalga fonksiyonu.....	23
2.2.2. İnce yapı seviyeleri.....	25
2.3. Çok Konfigürasyonlu Dirac-Fock Denklemi.....	27
2.3.1. Relativistik yörüngeler.....	27
2.3.2. Konfigürasyon hal fonksiyonları.....	29
2.3.3. Atomik hal fonksiyonları.....	30
2.3.4. Dirac-Coulomb Hamiltonyeni.....	31
2.3.5. Radyal fonksiyonların oluşturulması.....	34
2.3.6. Çekirdek etkisi.....	41
2.3.7. Tersinir elektromanyetik etkileşim.....	42
2.3.8. Işımalı düzeltmeler.....	43
2.3.9. Açısal katsayılar.....	44
2.4. Enerji Seviyeleri Arasındaki Geçişler.....	45
2.4.1. Işımalı geçişler için kesin ve yaklaşık seçim kuralları.....	49
2.5. Kullanılan Programların Yapısı.....	51
2.5.1. MCHF paketinin yapısı.....	51
2.5.2. GRASP programının yapısı.....	53

BÖLÜM 3.

HESAPLAMA SONUÇLARI.....	56
3.1. Ac I için Enerji ve Işımalı Geçiş Parametreleri Hesapları.....	58
3.1.1. Enerji seviyeleri hesapları.....	59
3.1.2. Işımalı geçiş parametrelerinin hesapları.....	66
3.2. Ac II için Enerji ve Işımalı Geçiş Parametreleri Hesapları.....	73
3.2.1. Enerji seviyeleri hesapları.....	73
3.2.2. Işımalı geçiş parametreleri hesapları.....	74
3.3. Ac III için Enerji ve Işımalı Geçiş Parametreleri Hesapları.....	83
3.3.1. Enerji seviyeleri hesapları.....	83
3.3.2. Işımalı geçiş parametreleri hesapları.....	86

3.4. Th IV için Enerji ve Işımalı Geçiş Parametreleri Hesapları.....	91
3.4.1. Enerji seviyeleri hesapları.....	91
3.4.2. Işımalı geçiş parametreleri hesapları.....	91
3.5. Pa I için Enerji Hesapları.....	97
3.6. Pa II için Enerji Hesapları.....	102
3.7. Pa III için Enerji Hesapları.....	104
3.8. Pa IV için Enerji ve Işımalı Geçiş Parametreleri Hesapları.....	106
3.8.1. Enerji seviyeleri hesapları.....	107
3.8.2. Işımalı geçiş parametreleri hesapları.....	107
3.9. Pa V için Enerji ve Işımalı Geçiş Parametreleri Hesapları.....	112
3.9.1. Enerji seviyeleri hesapları.....	112
3.9.2. Işımalı geçiş parametreleri hesapları.....	112
3.10. U V için Enerji ve Işımalı Geçiş Parametreleri Hesapları.....	114
3.10.1. Enerji seviyeleri hesapları.....	115
3.10.2. Işımalı geçiş parametreleri hesapları.....	118
3.11. U VI için Enerji ve Işımalı Geçiş Parametreleri Hesapları.....	120
3.11.1. Enerji seviyeleri hesapları.....	121
3.11.2. Işımalı geçiş parametreleri hesapları.....	121
3.12. Lr I için Enerji ve Işımalı Geçiş Parametreleri Hesapları.....	126
3.12.1. Enerji seviyeleri hesapları.....	126
3.12.2. Işımalı geçiş parametreleri hesapları.....	132
BÖLÜM 4.	
SONUÇ VE ÖNERİLER.....	135
KAYNAKLAR.....	137
ÖZGEÇMİŞ.....	148

KISALTMALAR LİSTESİ

(E)AL	: (Genişletilmiş) Ortalama Seviye ((Extended) Average Level)
ASF	: Atomik Hal Fonksiyonu (Atomic State Function)
CI	: Konfigürasyon Etkileşimi (Configuration Interaction)
CSF	: Konfigürasyon Hal Fonksiyonu (Configuration State Function)
D1	: Bir-Cisim Darwin (One-Body Darwin)
D2	: İki-Cisim Darwin (Two-Body Darwin)
FS	: İnce Yapı (Fine Structure)
GRASP	: Genel Amaçlı Relativistik Atomik Yapı Paketi (General-Purpose Relativistic Atomic Structure Program)
MC	: Kütle Düzeltmesi (Mass Correction)
MCHF	: Çok Konfigürasyonlu Hartree-Fock (Multiconfiguration Hartree-Fock)
MCDF	: Çok Konfigürasyonlu Dirac-Fock (Multiconfiguration Dirac-Fock)
MC-SCF	: Çok Konfigürasyonlu Öz Uyumlu Alan (Multiconfiguration-Self Consistent Field)
NIST	: National Institute of Standards and Technology's Web Site
NR	: Relativistik Olmayan (Non-Relativistic)
(E)OL	: (Genişletilmiş) En İyi Seviye ((Extended) Optimal Level)
OO	: Yörünge-Yörünge (Orbit-Orbit)
QED	: Kuantum Elektrodinamik (Quantum Electrodynamic)
RS	: Relativistik Kayma (Relativistic Shift)
SCF	: Öz Uyumlu Alan (Self Consistent Field)
SO	: Çekirdek Spin-Yörünge (Spin-Orbit)
SOO	: Spin-Diğer Yörünge (Spin-Other Orbit)
SS	: Spin-Spin
SSC	: Spin-Spin Temas (Spin-Spin Contact)

ŞEKİLLER LİSTESİ

Şekil 2.1.	MCHF atomik yapı paketinin özet gösterimi.....	52
Şekil 2.2.	GRASP programının özet gösterimi.....	55

TABLolar LİSTESİ

Tablo 1.1.	İncelenen aktinit atomları ve iyonları için mevcut çalışmalar.....	5
Tablo 3.1.	İncelenen aktinit atomları ve iyonlarının iyonlaşma enerjileri (cm^{-1}).....	57
Tablo 3.2.	Ac I'e ait hesaplamalar için kullanılan konfigürasyon takımları...	60
Tablo 3.3.	Ac I'in uyarılmış seviyelerinin enerjileri (cm^{-1}).....	61
Tablo 3.4.	Ac I'in E1 geçişlerine ait λ dalga boyları (Å), gf ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve A geçiş olasılıkları (sn^{-1}).....	67
Tablo 3.5.	Ac I'in E2 ve M1 geçişlerine ait λ dalga boyları (Å), gf ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve A geçiş olasılıkları (sn^{-1}).....	72
Tablo 3.6.	Ac II'ye ait hesaplamalarda kullanılan konfigürasyon takımları...	73
Tablo 3.7.	Ac II'nin uyarılmış seviyelerinin enerjileri (cm^{-1}).....	75
Tablo 3.8.	Ac II'nin E1 geçişlerine ait λ dalga boyları (Å), gf ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve A geçiş olasılıkları (sn^{-1}).....	79
Tablo 3.9.	Ac II'nin E2 ve M1 geçişlerine ait λ dalga boyları (Å), gf ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve A geçiş olasılıkları (sn^{-1}).....	81
Tablo 3.10.	Ac III'e ait hesaplar için kullanılan konfigürasyon takımları.....	84
Tablo 3.11.	Ac III'ün uyarılmış seviyelerinin enerjileri (cm^{-1}).....	85
Tablo 3.12.	Ac III'ün E1 geçişlerine ait λ dalga boyları (Å), gf ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve A geçiş olasılıkları (sn^{-1}).....	87
Tablo 3.13.	Ac III'ün E2 ve M1 geçişlerine ait λ dalga boyları (Å), gf ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve A geçiş olasılıkları (sn^{-1}).....	89
Tablo 3.14.	Th IV'ün uyarılmış seviyelerinin enerjileri (cm^{-1}).....	92
Tablo 3.15.	Th IV'ün E1 geçişlerine ait λ dalga boyları (Å), gf ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve A geçiş olasılıkları (sn^{-1}).....	93
Tablo 3.16.	Th IV'ün E2 ve M1 geçişlerine ait λ dalga boyları (Å), gf ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve A geçiş olasılıkları (sn^{-1}).....	96

Tablo 3.17.	Pa I'in uyarılmış seviyelerinin enerjileri (cm^{-1}).....	98
Tablo 3.18.	Pa II'nin uyarılmış enerjileri (cm^{-1}).....	103
Tablo 3.19.	Pa III'ün uyarılmış seviyelerinin enerjileri (cm^{-1}).....	105
Tablo 3.20.	Pa IV hesapları için kullanılan konfigürasyon takımları.....	107
Tablo 3.21.	Pa IV'ün uyarılmış seviyelerinin enerjileri (cm^{-1}).....	108
Tablo 3.22.	Pa IV'ün E1 geçişlerine ait λ dalga boyları (Å), <i>gf</i> ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve A geçiş olasılıkları (sn^{-1}).....	110
Tablo 3.23.	Pa IV'ün E2 ve M1 geçişlerine ait λ dalga boyları (Å), <i>gf</i> ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve A geçiş olasılıkları (sn^{-1}).....	111
Tablo 3.24.	Pa V'in uyarılmış seviye enerjileri (cm^{-1}).....	112
Tablo 3.25.	Pa V'in E1 geçişlerine ait λ dalga boyları (Å), <i>gf</i> ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve A geçiş olasılıkları (sn^{-1}).....	113
Tablo 3.26.	Pa V'in E2 ve M1 geçişlerine ait λ dalga boyları (Å), <i>gf</i> ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve A geçiş olasılıkları (sn^{-1}).....	114
Tablo 3.27.	U V'e ait hesaplamalarda için kullanılan konfigürasyon takımları	115
Tablo 3.28.	U V'in uyarılmış seviyelerinin enerjileri (cm^{-1}).....	116
Tablo 3.29.	U V'in E1 geçişlerine ait λ dalga boyları (Å), <i>gf</i> ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve A geçiş olasılıkları (sn^{-1}).....	119
Tablo 3.30.	U V'in E2 ve M1 geçişlerine ait λ dalga boyları (Å), <i>gf</i> ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve A geçiş olasılıkları (sn^{-1}).....	120
Tablo 3.31.	U VI'nın uyarılmış seviyelerinin enerjileri (cm^{-1}).....	122
Tablo 3.32.	U VI'nın E1 geçişlerine ait λ dalga boyları (Å), <i>gf</i> ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve A geçiş olasılıkları (sn^{-1}).....	123
Tablo 3.33.	U VI'nın E2 ve M1 geçişlerine ait λ dalga boyları (Å), <i>gf</i> ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve A geçiş olasılıkları (sn^{-1}).....	125
Tablo 3.34.	Lr I'e ait hesaplarda kullanılan konfigürasyon takımları.....	126
Tablo 3.35.	Lr I'in uyarılmış seviyelerinin enerjileri (cm^{-1}).....	127
Tablo 3.36.	Lr I'in E1 geçişlerine ait λ dalga boyları (Å), <i>gf</i> ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve A geçiş olasılıkları (sn^{-1}).....	133
Tablo 3.37.	Lr I'in E2 ve M1 geçişlerine ait λ dalga boyları (Å), <i>gf</i> ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve A geçiş olasılıkları (sn^{-1}).....	134

ÖZET

Anahtar kelimeler: MCHF yöntemi, MCDF yöntemi, Relativistik düzeltmeler, Dalga boyu, Salıncı şiddeti, Geçiş olasılığı

Bu çalışmada, nötral aktinyum, protaktinyum ve bazı iyonları ile üç kez iyonlaşmış toryumun, dört ve beş kez iyonlaşmış uranyumun ve nötral lavrensiyumun enerji seviyeleri, elektrik dipol, elektrik kuadrupol ve manyetik dipol geçiş parametreleri gibi atomik yapı hesaplamaları yapılmaktadır. Hesaplamalar, Breit-Pauli relativistik düzeltmeleri ve elektronların karşılıklı etkileşmelerini içeren çok konfigürasyonlu Hartree-Fock (MCHF+BP) ve tersinir foton etkileşimi (Breit) ile kuantum elektrodinamik katkıları içeren çok konfigürasyonlu Dirac-Fock (MCDF+B+QED) yöntemleri kullanılarak oluşturulmaktadır.

İlk bölümde; incelenen atom ve iyonlar ile ilgili yapılmış mevcut çalışmalar; ikinci bölümde, MCHF+BP ve MCDF+B+QED yöntemleri hakkında özet bilgiler verilmektedir. Dalga fonksiyonları ve bazı relativistik düzeltmeler, MCHF atomik yapı paketi ve GRASP programı kullanılarak hesaplanmaktadır. Elde edilen sonuçlar diğer deneysel ve teorik çalışmalar ile karşılaştırmalı olarak üçüncü bölümde sunulmaktadır.

ATOMIC STRUCTURE CALCULATIONS OF SOME ACTINIDE ATOMS

SUMMARY

Key Words: MCHF method, MCDF method, Relativistic corrections, Wavelength, Oscillator strength, Transition probability

In this study, atomic structure calculations such as energy levels, electric dipole, electric quadrupole and magnetic dipole transition parameters for neutral actinium, protactinium and some ions and three times ionized thorium, four and five times ionized uranium and neutral lawrencium have been made. These calculations have been performed using the multiconfiguration Hartree-Fock (MCHF) method including the Breit-Pauli relativistic effects and the multiconfiguration Dirac-Fock (MCDF) method including the transverse photon (Breit) and quantum electrodynamic (QED) contributions.

In the first chapter previous works on Ac, Pa and some ions of these, and Th IV, U V, U VI and Lr I have been given. The second chapter deals with the multiconfiguration Hartree-Fock and multiconfiguration Dirac-Fock methods. Wavefunctions and some relativistic corrections have been evaluated using the MCHF atomic structure and GRASP package. In the third chapter results obtained have been compared with other experimental and theoretical works.

BÖLÜM 1. GİRİŞ

Bu çalışmada, aktinitler olarak adlandırılan (Ac, Th, Pa, U, Np, Pu, Am, Cm, Bk, Cf, Es, Fm, Md, No ve Lr) ve atom numarası $Z=89-103$ aralığında bulunan bazı atom ve iyonlar için atomik yapı hesaplamaları yapıldı. Bu atomlar için zaman zaman çeşitli çalışmalarda nadir toprak elementleri tanımlaması kullanılmıştır. Nadir toprak ifadesi 4f (lantanit) ve 5f (aktinit) elementlerinin iki grubunu da içermektedir. Mevcut çalışmalara göre bu atomların yer kabuğundaki bollukları diğer bilinen atomlarınkı kadardır. Bundan dolayı nadir toprak tanımlaması çoğunlukla doğru değildir. Aktinitler başlığı altında yapılan bazı çalışmalarda Fr ($Z=87$), Ra ($Z=88$) ve Lr ($Z=103$)'de aktinit olarak ele alınırken, bazılarında Fm, Md ve No dahil edilmemiştir. Bu çalışmada aktinitlerden nötral Ac, Th, Pa, U ve Lr ve bazı iyonları için atomik yapı hesaplamaları yapıldı.

Aktinit atomları değişik teknoloji alanlarında önemlidirler. İncelenen aktinit atomlarının bilinen kullanım alanları şöyle özetlenebilir:

Aktinyum (Ac): Nötron kaynağı olarak ve termoelektrik enerji üretiminde kullanılır. Radyumdan yüz elli kat daha radyoaktiftir.

Toryum (Th): Nötron bombardımanına tutulduğunda nükleer bir yakıt olarak ^{233}U 'ya dönüşür. Bu yüzden dolayı bir enerji kaynağıdır. Güçlü alaşımların elde edilmesinde, amonyağın nitrik aside dönüştürülmesinde ve petrolün ayrıştırılmasında, taşınabilir gazlı lambalarda, tungsten tellerin ve yüksek sıcaklıklara dayanıklı laboratuvar kaplarının kaplanması, kızılötesi fotoelektrik hücrelerde, kaliteli fotoğraf merceklerinin ve bilimsel donanımların yapımında kullanılır. Yer kabuğunun %0,0007'lik kısmını oluşturmaktadır.

Protaktinyum (Pa): Doğada bulunmaz. Uranyum toryum ve plütinyumun fisyon çekirdek parçalanması ürünleri arasında yer alır.

Uranyum (U): Yüzyıllar boyu camlara renk verici olarak kullanılan uranyum, günümüzde nükleer santrallerde ve nükleer silahların yapımında kullanılmaktadır. Zırh kaplamalarında ve büyük hava taşıtlarının kanatlarında ağırlık olarak kullanılmaktadır.

Lavrensiyum (Lr): İsmi Amerikan Kimya Birliği tercihiyle hızlandırıcı mucidi Ernest O. Lawrence'ın onuruna konmuştur. Lw sembolü 1963'e kadar kullanılmış ancak bu 1967'de Lr olarak değiştirilmiştir. 1997 yılında Uluslararası Temel ve Uygulamalı Kimya Birliği (IUPAC) Cenevre'deki toplantısında ismini lavrensiyum sembolünü ise Lr olarak onaylamıştır. Lavrensiyum atomu kaliforniyum elementinden sentezlenir ve henüz teknolojiye bir kullanımı yoktur.

Aktinitlerin bazıları, taşınması kolay güç kaynakları olarak kullanılırlar. Sadece α ışınması yapan bu izotoplarda, α taneciklerini diğer atomlar tarafından kolaylıkla durdurulur. Durdurulan α taneciklerinin kinetik enerjisi ısıya dönüşür. Bu ısıdan elektrik üretilir. İzotopun α tanecikleri üretmesi düzenli ve çok uzun süreli olduğu için elektrik akımı da sürekli ve düzenli olur. Bu özellikleri nedeniyle aktinitlerin bazıları, kalp atışlarını düzenleyen küçük pillerde kullanılır.

Periyodik tablodaki son doğal atom uranyumdur. Uranyumdan sonraki atomlar yapay olup hızlandırıcılarda elde edilmektedir. Aktinit elementleri ve onları izleyen elementlerin tümü radyoaktif elementlerdir. Bunlar arasında doğada en çok bulunan aktinitler olan ^{232}Th ve ^{238}U izotoplarının yarı ömürleri uzundur ($1,4 \cdot 10^{10}$ ve $4,5 \cdot 10^3$ yıl) ve radyoaktiflikleri büyük ölçüde kimyasal özelliklerini etkilemez. Diğer elementlerin bileşiklerinde radyoaktiflikten gelen güçlükler vardır. Bu bileşikler suda çözüldüklerinde, radyoaktiflikleri nedeniyle suyu atomlarına ayrıştırırlar. Aktinitlerin en kararlı halleri +3 iyonlarıdır. Bu özellik, aktinitlerin ikinci yarısı için daha belirgindir. Aktinitlerin birinci yarısındaki elementler çok çeşitli değerlikler kazanmalarıyla lantanit ve diğer aktinitlerden ayrılırlar. Örneğin neptünyumun altı farklı değerliği vardır. Bu değerliklerden en kararlı olanı +4 ve +6'dır.

Aktinitler için dalga boyları, ışımali geçiş oranları ve bununla ilgili (salıncı şiddeti, dallanma kesirleri, ışımali yarı ömür nicelikleri, aşırı ince yapı ve izotop kayması gibi) spektroskopik verilerin kesin bilgisine ihtiyaç giderek artmaktadır. Son yıllarda geliştirilen geniş miktarda yüksek çözünürlüklü spektrumlar veya yüksek sinyal-gürültü uydu spektrumları, yere veya uzaya dayalı çalışmalardan elde edilmektedir. Güneşinkileri de içeren bu spektrumlar nadir toprak çizgilerini içerdikleri için astrofizikte çok önemlidir. Ayrıca atom fiziğinde önemli bir nicelik olan Rydberg serilerini (yüksek uyarılmış haller) aktinitler için gözlemek spektrumdaki konfigürasyon etkileşiminden dolayı güçtür. Bu durumda spektrumu doğru yorumlamak için çok miktarda veri ve dolayısıyla çok miktarda numune gerekmektedir. Yine birinci iyonlaşma potansiyeli bir elementin fiziksel temeli ve kimyasal özelliğidir. Bunun kesin olarak bilinmesi elementten elemente bağlanma enerjilerinde sistematik eğilimlerin tanımlanmasına ve atomik spektrumun yorumlanmasına yardım eder.

Bu çalışmada nötral, bir ve iki kez iyonlaşmış aktinyum (Ac I, Ac II, Ac III), üç kez iyonlaşmış toryum (Th IV), nötral bir, iki, üç ve dört kez iyonlaşmış protaktinyum (Pa I, Pa II, Pa III, Pa IV, Pa V), beş ve altı kez iyonlaşmış uranyum (U V, U VI) ve nötral lavrensiyumun (Lr I) Breit-Pauli relativistik düzeltmeleri içeren çok konfigürasyonlu Hartree-Fock (multiconfiguration Hartree-Fock–MCHF) [1] ve tersinir foton etkileşimi ve kuantum elektrodinamik katkıları içeren çok konfigürasyonlu Dirac-Fock (multiconfiguration Dirac-Fock–MCDF) yaklaşıklığı [2, 3] ile atomik özellikleri incelenmektedir. MCHF atomik yapı paketi [4] ve GRASP [3] kodu kullanılarak seviye enerjileri ve incelenen seviyeler arasındaki elektrik (E1) ve manyetik dipol (M1) ve elektrik kuadrupol (E2) geçişlerine ait ışımali parametreleri (dalga boyları, ağırlıklı salıncı şiddetleri ve geçiş olasılıkları) hesaplanmaktadır.

Aktinitlerle ilgili nitelikli teorik bilgi, Cowan [5] ve Judd [6] tarafından verilmektedir. Merkezi alan yaklaşıklığında atomik yapı hesaplarının temelleri daha önceleri Condon ve Shortley [7] tarafından detaylandırılmıştır. Birçok teorik çalışma genellikle Slater-Condon (veya parametrik) hesapları olarak adlandırılır. Bu yaklaşıklıkta konfigürasyonlar katkı teorisinin sıfıncı mertebesini sağlar ve elektronların elektrostatik ve manyetik etkileşimleri ile seviyelere yarırlar. Katkılı

Hamiltoniyenin matris elemanlarını içeren radyal integraller, deneysel ve teorik enerji arasındaki fark en küçük olacak şekilde parametreler seçilerek iyileştirilebilir.

Nötral ve tekli uyarılmış aktinitlerin düşük seviye konfigürasyonları çok sayıdaki seviye ile sonuçlanan birçok açık alt tabakalarla karakterize edilirler. 5f ve 6d elektronlarının bağlanma enerjileri çok yakındır ve konfigürasyonlar çakışır. Çok iyi teorik analizler için Hamiltonyen, birçok konfigürasyonun hallerini esas alarak hesaplanmalıdır. Bir çok durumda, bilgisayar kapasitesinin yetersiz olması nedeniyle bu gereklilik sağlanamamıştır ve aktinitlerde parametrik hesaplar, geçiş elementlerinde ve lantanitlerdeki kadar başarılı olamamıştır.

İncelenen aktinit atom ve iyonlarının seviye enerjileri, E1, E2 ve M1 geçişlerine ait ışınım parametreleri için çeşitli tüp ve lambalarla ve belirlenen bölgeler için yapılmış spektrum, deney ve gözlemler bulunmaktadır. Yapılan teorik hesaplamalarda ise Slater-Condon, çeşitli yoğunluk fonksiyonu, çok cisim katkı teorileri, en küçük kareler, relativistik çok parçacık katkı, relativistik etkin öz potansiyeli, ikinci mertebe katkı, katlı küme temel kuantum mekaniksel ve çeşitli Hartree-Fock, Dirac-Fock ve Dirac-Hartree-Fock yöntemleri, öz kutuplanma yaklaşıklığı ve basit küresel kabuk çözümleri kullanılmıştır. Yapılan deneysel ve teorik çalışmaların bazıları Sansonetti ve Martin'in [39] ve Morton'un [139] çalışmalarında ve NIST Atomic Spectra and Data Base [105] ve Energy Levels and Atomic Spectra of Actinides [106] sitelerinde derlenmiştir. Çalışmada incelenen atomlar ve iyonlar için seviye enerjileri ve ışınım parametrelerine ait şimdiye kadar yapılan teorik ve deneysel çalışmalara ait kaynaklar Tablo 1.1'de verilmektedir.

Tablo 1.1. İncelenen aktinit atomları ve iyonları için mevcut çalışmalar

Element	Z	Enerji Seviyeleri	İşım Parametreleri
Ac I	89	[19], [20], [29], [30], [32], [33], [34], [35], [36], [38], [39], [41], [44], [47], [48], [105], [106], [108], [109], [120], [121], [122], [129], [130]	[19], [20], [39], [40], [105], [106], [114], [123], [124], [129], [130]
Ac II		[19], [20], [29], [34], [35], [36], [39], [40], [41], [48], [51], [105], [106], [108], [109], [122], [134]	[19], [20], [39], [40], [49], [105], [106], [114], [123], [134]
Ac III		[19], [20], [34], [35], [36], [41], [48], [56], [57], [58], [106], [109], [135]	[19], [20], [49], [53], [54], [55], [56], [57], [58], [105], [106], [114], [135]
Th IV	90	[34], [36], [41], [48], [91], [106], [138]	[167], [106], [123], [139]
Pa I	91	[29], [30], [32], [33], [34], [36], [38], [39], [41], [44], [48], [64], [66], [106], [120], [121], [122]	[39], [167], [106], [114], [123]
Pa II		[29], [34], [36], [39], [41], [48], [51], [106]	[68], [105], [106], [114], [123]
Pa III		[34], [36], [41], [48], [105]	[25], [31], [34], [36], [41], [48], [106], [111]
Pa IV		[34], [36], [41], [48], [106], [136]	[25], [31], [34], [36], [41], [48], [68], [106], [111], [136]
Pa V		[36], [41], [56], [57], [69], [70], [171], [106]	[36], [41], [56], [57], [68], [69], [70], [71], [111]
U V	92	[34], [36], [41], [72], [73], [74], [75], [76], [77], [79], [81], [82], [85], [86], [88], [91], [93], [94], [106], [134]	[34], [36], [41], [68], [72], [73], [74], [75], [77], [79], [80], [82], [83], [84], [85], [86], [87], [89], [91], [92], [94], [106], [111], [136]
U VI	92	[36], [41], [56], [57], [71], [78], [85], [91], [95], [96], [106]	[36], [41], [55], [57], [68], [71], [83], [84], [85], [91], [95], [96], [106], [111]
Lr I	103	[33], [34], [36], [41], [48], [100], [101], [102], [103], [104], [120], [121], [131]	[21], [23], [41], [31], [33], [34], [36], [48], [97], [102], [103], [104], [112], [120], [121], [126], [131]

BÖLÜM 2. HESAPLAMA YÖNTEMLERİ

2.1. Genel Kavramlar

2.1.1. Çok elektronlu atomlar için relativistik olmayan Hamiltonyen

Kuantum mekaniğinde N -elektronlu atomun kararlı hali, $q_i=(r_i,\sigma_i)$, i . elektronun uzay ve spin koordinatları olmak üzere, $\psi(q_1,\dots,q_N)$ dalga fonksiyonuyla tanımlanır. Dalga fonksiyonunun uzaysal değişkenlere göre sürekli ve

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

şeklindeki dalga denkleminin bir çözümü olduğu kabul edilir. Burada H atomik sistemin Hamiltonyen işlemcisidir. Dalga denklemi bir özdeğer problemidir ve çözümleri yalnızca belirli E değerleri için vardır. Hamiltonyen işlemcisinin özdeğerleri olarak bilinen bu değerler sistemin toplam enerjisinin mümkün değerleridir.

Relativistik olmayan hesaplamalar için başlangıç noktası, Hamiltonyeni atomik birimlerde ($\hbar = h/2\pi = c = e = 1$),

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

ile verilen Schrödinger denklemidir. Burada Z atomun çekirdek yükü, r_i , i elektronunun çekirdekten uzaklığı ve r_{ij} , i ve j elektronları arasındaki uzaklıktır. (2.2) relativistik etkiler ihmal edildiğinde ve atomik çekirdeğin sonsuz kütleli bir nokta yük gibi davrandığı durumda geçerlidir.

2.1.2. Dalga fonksiyonunun özellikleri

2.1.2.1. Normalleşme

(2.2) Hamiltonyen işlemcisi kesikli ve sürekli spektrumun her ikisine de sahiptir. Kesikli spektruma ait dalga fonksiyonları veya özfonksiyonlar, karesi integrallenebilir halleri ve bağ hallerini gösterir. Çoğunlukla bu özfonksiyonların normalleşmiş oldukları kabul edilir:

$$\int_q |\psi(q_1, \dots, q_N)|^2 dq_1 \dots dq_N \equiv \langle \psi | \psi \rangle = 1 \quad (2.3)$$

Burada integral işareti, tüm uzay koordinatları üzerinden integral alma ve tüm spin koordinatları üzerinden toplam alma anlamındadır.

2.1.2.2. Antisimetriklilik

Elektronlar ayırt edilemez parçacıklar olduklarından Hamiltonyen işlemcisi, elektronların koordinat değişimlerinden bağımsız olmalıdır. $\psi(q_1, \dots, q_N)$, E özdeğerli H işlemcisinin bir özfonksiyonu ise,

$$\wp_{ij} \psi(q_1, \dots, q_i, \dots, q_j, \dots, q_N) = \psi(q_1, \dots, q_j, \dots, q_i, \dots, q_N) \quad (2.4)$$

olur. Burada \wp_{ij} , q_i ve q_j elektron koordinatlarını değiştiren işlemcidir. Genel özfonksiyonu, koordinatların yer değiştirmesine göre elde edilen fonksiyonların lineer birleşimidir. Bir atomik sistemin doğru tanımı, tamamen antisimetrik özfonksiyonların lineer birleşimiyle yapılır:

$$\frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\wp} (-1)^p \wp \psi(q_1, \dots, q_N) \quad (2.5)$$

Burada p permütasyonun paritesidir ve \wp toplamı, tüm $N!$ permütasyonları üzerindedir. Böylece A antisimetri işlemcisi,

$$A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\wp} (-1)^p \wp \quad (2.6)$$

olarak tanımlanır. Antisimetrik dalga fonksiyonu, aynı spinli iki elektronun uzayda aynı yeri işgal etmesi durumunda sıfırdır. Dalga fonksiyonu uzaysal değişkenlere göre sürekli olduğundan mutlak değeri, aynı spinli iki elektron birbirlerine yakın olduklarında küçük olur.

2.1.2.3. Açısal özellikler

Relativistik olmayan Hamiltonyen, $\mathbf{L} = \sum_{i=1}^N \mathbf{l}_i$ toplam yörünge açısal momentum işlemcisi ve $\mathbf{S} = \sum_{i=1}^N \mathbf{s}_i$ toplam spin açısal momentum işlemcisi ile sıra değiştirir:

$$[H, \mathbf{L}] = [H, \mathbf{S}] = 0 \quad (2.7)$$

Böylece H , L^2 , L_z , S^2 ve S_z aralarında sıra değiştiren işlemciler takımı olur ve tümü aynı özfonksiyonlara sahip olur:

$$\begin{aligned} H\psi(q_1, \dots, q_N) &= E\psi(q_1, \dots, q_N) \\ L^2\psi(q_1, \dots, q_N) &= L(L+1)\psi(q_1, \dots, q_N) \\ L_z\psi(q_1, \dots, q_N) &= M_L\psi(q_1, \dots, q_N) \\ S^2\psi(q_1, \dots, q_N) &= S(S+1)\psi(q_1, \dots, q_N) \\ S_z\psi(q_1, \dots, q_N) &= M_S\psi(q_1, \dots, q_N) \end{aligned} \quad (2.8)$$

Bu özfonksiyonlar, γ halin tam olarak belirlenmesi için gereken ek kuantum sayıları olmak üzere $\psi(\gamma L M_L S M_S; q_1, \dots, q_N)$ ile gösterilir.

2.1.2.4. Parite

Özfonksiyonlar L , M_L , S ve M_S açısai momentum kuantum sayilarına ek olarak, bunların pariteleriyle de gösterilir. Π parite işlemcisi

$$\Pi\psi(r_1, \sigma_1, \dots, r_N, \sigma_N) = \psi(-r_1, \sigma_1, \dots, -r_N, \sigma_N) \quad (2.9)$$

bağıntısıyla tanımlanır. Böylece $\Pi^2 = 1$ ve özdeğerinin ± 1 olduğu açıktır. Parite işlemcisi, Hamiltonyen ve açısai momentum işlemcisi ile sıra deęiştirir ve bundan dolayı atomik öz fonksiyonlar Π 'nin özfonksiyonları olarak da alınabilir. Parite işlemcisinin $+1$ ve -1 özdeğerlerine ait özfonksiyonlar sırasıyla çift ve tek pariteli olarak adlandırılırlar.

2.1.3. Çok elektronlu atomlar

Schrödinger denklemi yalnızca bir elektronlu sistemler için tam olarak çözülebilir. Çok elektronlu sistemler için yaklaşık yöntemlerin temeli, bir elektronlu sisteme ait sonuçların dikkate alınmasıyla gerçekleştirilir. Küresel koordinatlarda, genel $U(r)$ küresel potansiyeldeki tek bir elektron için Schrödinger denklemi

$$H\phi(r, \theta, \varphi, \sigma) = E\phi(r, \theta, \varphi, \sigma) \quad (2.10)$$

olarak yazılabilir. Burada Hamiltonyen

$$H = -\frac{1}{2}\nabla^2 + U(r) \equiv -\frac{1}{2}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial^2(rR(r))}{\partial r^2} - \frac{l^2}{r^2}\right) + U(r) \quad (2.11)$$

şeklindedir. Ze yüklü bir çekirdeğin Coulomb alanında hareket eden bir elektron için küresel potansiyeli $U(r) = -Z/r$ 'dir. (2.11) Hamiltonyeni, l ve s açısai momentum işlemcileri ile sıra deęiştirir. Böylece H , l^2 , l_z , s^2 ve s_z birbirleri ile sıra deęiştiren bir takım oluşturur ve özfonksiyonları

$$\phi(q) = R(r)Y_{l m_l}(\theta, \varphi)\chi_{m_s}(\sigma) = \frac{1}{r}P(r)Y_{l m_l}(\theta, \varphi)\chi_{m_s}(\sigma) \quad (2.12)$$

olarak yazılabilir. Burada $Y_{l m_l}(\theta, \varphi)$ küresel harmonikler, yörünge açısai momentum işlemcisinin, $\chi_{m_s}(\sigma)$ spin fonksiyonları ise spin açısai momentum işlemcisinin özfonksiyonlarıdır.

Küresel koordinatlarda, $r \rightarrow -r$ tersinirliđi $(r, \theta, \varphi) \rightarrow (r, \pi - \theta, \varphi + \pi)$ ile verilir. Küresel harmonikler de

$$Y_{l m_l}(\pi - \theta, \varphi + \pi) = (-1)^l Y_{l m_l}(\theta, \varphi) \quad (2.13)$$

ifadesini sağlar. Bu, bir-elektron özfonksiyonlarının, çift l için çift pariteye ve tek l için tek pariteye sahip olduğunu gösterir.

Radyal fonksiyonları belirlemek için

$$\phi(q) = \frac{1}{r}P(r)Y_{l m_l}(\theta, \varphi)\chi_{m_s}(\sigma) \quad (2.14)$$

fonsiyonu Schrödinger denkleminde yerine yazılır. (2.8) denklemini kullanarak, $P(r)$ için

$$\left(\frac{d}{dr^2} - 2U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} + 2E \right) P(r) = 0 \quad (2.15)$$

denklemini çözülür. $\phi(q)$ her yerde sonlu olduğu için $P(r)$, $P(0)=0$ sınır şartını sağlamalıdır.

Çok elektronlu sistemler için özfonksiyonların gerçek şekilleri bilinmemektedir. Relativistik olmayan Hamiltonyenin çözülebilir Schrödinger denkleminde yer deđiřtirmesi yaklaşık dalga fonksiyonlarının doğasının kavranmasını sağlar.

2.1.3.1. Merkezi alan yaklaşıklığı

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

$$H \approx H_0 = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} + V(r_i) \right) \quad (2.16)$$

Burada, $V(r_i)$ merkezi potansiyeli, elektronlar arası Coulomb itme etkilerini yaklaşık olarak kapsar. Yaklaşık Hamiltonyen H_0 , tam Hamiltonyen gibi, L^2 , L_z , S^2 ve S_z toplam açısal momentum işlemcileri ile sıra değiştirir ve daima H_0 'ın özfonksiyonları, bu işlemcilerin özfonksiyonları olarak seçilebilir.

$$H_0 \psi_0(q_1, \dots, q_N) = E_0 \psi_0(q_1, \dots, q_N) \quad (2.17)$$

olduğundan ve H_0 ayrıştırılabildiği için özdeğer ve özfonksiyonlar sırasıyla

$$E_0 = \sum_{i=1}^N E_i \quad (2.18)$$

ve

$$\psi_0(q_1, \dots, q_N) = \prod_{i=1}^N \phi(\alpha_i; q_i) \quad (2.19)$$

olarak yazılır. Böylece Schrödinger denklemi

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + U(r) \right] \phi(\alpha; q) = E \phi(\alpha; q) \quad (2.20)$$

olur. Burada $U(r)$ potansiyeli

$$U(r) = -\left(\frac{Z}{r}\right) + V(r) \quad (2.21)$$

şeklinde. $\phi(\alpha; q)$ ile gösterilen bireysel spin-yörüngeleri, bir-elektron denklemlerinin çözümleridir. $U(r)$ potansiyeli için E bir-elektron enerjisi, Coulomb halinin tersine n ve l 'ye bağlıdır. H_0 Hamiltonyeni elektron koordinatlarının yer değişiminden bağımsız olduğundan (2.19) çarpım fonksiyonundaki koordinatların yer değiştirmesiyle bir özfonksiyon elde edilir. Bu çarpım fonksiyonları birleştirilerek antisimetrik bir fonksiyon oluşturulur:

$$\Phi(q_1, \dots, q_N) = A \prod_{i=1}^N \phi(\alpha_i; q_i) \quad (2.22)$$

Bu fonksiyon

$$\Phi(q_1, \dots, q_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi(\alpha_1; q_1) & \phi(\alpha_1; q_2) & \dots & \phi(\alpha_1; q_N) \\ \phi(\alpha_2; q_1) & \phi(\alpha_2; q_2) & \dots & \phi(\alpha_2; q_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi(\alpha_N; q_1) & \phi(\alpha_N; q_2) & \dots & \phi(\alpha_N; q_N) \end{vmatrix} \quad (2.23)$$

ile verilen Slater determinantıdır. Bu gösterimde, toplam dalga fonksiyonu $\Phi(q_1, \dots, q_N)$ iki elektronun $\alpha = nlm_l m_s$ dört kuantum sayısı aynı olduğunda yok olur. Böylece atomun izinli hallerinde iki elektronun dört kuantum sayısı ve Pauli dışarlama ilkesi sağlanır. Determinant, $q_i = q_j$ ise, yani aynı spinli iki elektron aynı uzaysal koordinatlara sahipse sıfır olur. Slater determinantındaki her bir spin-yörüngesinin paritesi $(-1)^l$, Slater determinantının paritesi ise

$$\pi = (-1)^{l_1} (-1)^{l_2} \dots (-1)^{l_N} = (-1)^{\sum_i l_i} \quad (2.24)$$

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

H_0 merkezi alan Hamiltonyeninin özfonksiyonu Slater determinanı olarak yazılabilir. Karşılık gelen E_0 enerjisi determinanta görünen spin-yörüngemleri enerjilerinin toplamıdır.

Aynı değeri n ve l kuantum sayılı spin-yörüngemler aynı alt tabakaya aittir denir ve bunlara ‘özdeş spin-yörüngemleri’ denilir. Bir spin-yörüngemsinin enerjisi yalnızca n ve l kuantum sayılarına bağlıdır. E_0 enerjisi tam olarak elektron konfigürasyonu ile belirlenir. Genel bir elektron konfigürasyonu

$$(n_1 l_1)^{w_1} (n_2 l_2)^{w_2} \dots (n_m l_m)^{w_m}, \quad N = \sum_{a=1}^m w_a \quad (2.25)$$

ile verilir. Burada w_1, w_2, \dots farklı alt tabakalardaki spin-yörüngemlerin doluluk sayılarıdır ve karşılık gelen enerji de bir nl alt tabakasındaki spin-yörüngemlerinin enerjilerinin toplamıdır:

$$E_0 = \sum_{a=1}^m w_a E_{n_a l_a} \quad (2.26)$$

Pauli dışarlama ilkesine göre, her bir spin-yörüngemside yalnızca bir elektron olabileceğinden bir nl alt tabakasında en fazla $2(2l+1)$ elektron olabilir. Tam dolu bir alt tabakanın kapalı, kısmen dolu bir alt tabakanın da açık olduğu söylenir. (2.26)’ya göre bir konfigürasyonun enerjisi her bir alt tabakanın doluluk sayılarıyla verilir. Bir atom için en düşük enerjili taban konfigürasyonu, en düşük enerjiden itibaren alt tabakaları doldurarak elde edilir.

Konfigürasyon kavramı basit bir yoruma sahiptir. Hafif atomlarda deneysel enerji seviyeleri çoğunlukla yakın ayrılmış gruplar şeklindedir. Bir merkezi alan hesabı, uygun bir $V(r)$ potansiyeli kullanılarak yapıldığında, bu grupların her birinin ortalama enerjisinin belirli bir konfigürasyonun enerjisine karşılık geldiği bulunur. Konfigürasyonun belirlenmesi düzgün bir şekilde yapılırsa, bir gruptaki hallerin sayısı konfigürasyona karşılık gelen determinantların sayısına eşit olur.

2.1.3.2. Konfigürasyon hal fonksiyonları

Yaklaşık enerji seviyeleri ve tamamen relativistik olmayan Hamiltonyenin yaklaşık özfonksiyonları merkezi alan yaklaşıklığıyla elde edilebilir. Genellikle Slater determinantları biçimindeki 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 relativistik olmayan Hamiltonyenin gerçek özfonksiyonlarına daha iyi yaklaşır. Bu özfonksiyonlar ‘konfigürasyon hal fonksiyonları’ (Configuration State Functions-CSFs) olarak adlandırılır. Konfigürasyon hal fonksiyonları LS çiftlenim modelinde $\Phi(\gamma LM_L SM_S)$ veya $|\gamma LM_L SM_S\rangle$ ile gösterilir.

2.1.3.3. LS terimleri

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

$$-\sum_{i=1}^N V(r_i) + \sum_{i<j}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (2.27)$$

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

$$E = \langle \Phi(\gamma LM_L SM_S) | H | \Phi(\gamma LM_L SM_S) \rangle \quad (2.28)$$

şeklinde verilir. Beklenen değer M_L ve M_S ’den bağımsızdır ve her bir LS terimi $(2L+1)(2S+1)$ kez katlıdır (dejeneredir).

LS terimleri M_L ve M_S kuantum sayılarından bağımsız olduğundan katlılık çoğunlukla ihmal edilir. M_L ve M_S kuantum sayılarının önemli olmadığı durumlarda CSF'ler kısaca $\Phi(\mathcal{L}S)$ veya $\Phi(\gamma^{2S+1}L)$ olarak gösterilir. Burada L spektroskopik gösterimi ile verilir ve $2S+1$, terimin çokluğu olarak adlandırılır. L sembolünden sonra tek pariteli hallerde ‘o’ (o:odd), çift pariteli hallerde ‘e’ (e:even) üst indisleri kullanılır.

2.1.4. Değişim (Varyasyon) yöntemi

Schrödinger denklemini çözmek için değişim yöntemleri özdeğer problemlerinin yeniden formüle edilmesine bağlıdır. Enerji fonksiyonu

$$\mathcal{E}(\psi) = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (2.29)$$

sınır şartlarında ψ 'deki $\delta\psi$ değişimlerine göre birinci dereceden kararlıdır. Sınır şartlarına ek olarak, değişimin beklenen değeri integrallenebilir olmalıdır. İki problemin özdeş olduğunu göstermek için, \mathcal{E} 'nin $\delta\mathcal{E}$ değişimi

$$\mathcal{E}(\psi + \delta\psi) - \mathcal{E}(\psi) = \delta\mathcal{E} + O((\delta\psi)^2) \quad (2.30)$$

şeklinde dikkate alınır. (2.29) ifadesini kullanarak ve sadece $\delta\psi$ 'nin birinci dereceden terimlerinin $\langle \psi | \psi \rangle$ ile çarpımı alındığında

$$\delta\mathcal{E} \langle \psi | \psi \rangle = \langle \delta\psi | H - \mathcal{E}(\psi) | \psi \rangle + \langle \psi | H - \mathcal{E}(\psi) | \delta\psi \rangle = 2 \langle \delta\psi | H - \mathcal{E}(\psi) | \psi \rangle \quad (2.31)$$

elde edilir. (2.31), bağ halleri için H 'nin Hermityen oluşundan ileri gelir. $\mathcal{E}(\psi)$ kararlı ise $\delta\mathcal{E}$ değişimi sıfır olur ve

$$\langle \delta\psi | H - \mathcal{E}(\psi) | \psi \rangle = 0 \quad (2.32)$$

$$(H - \mathcal{E}(\psi))|\psi\rangle = 0 \quad (2.33)$$

elde edilir. Tersine, ψ , H 'nin bir özfonksiyonu ise, $\delta\mathcal{E} = 0$ ve $\mathcal{E}(\psi)$ normalleşme şartından dolayı karardır. (2.29) enerji fonksiyonu, normalleşmemiş ψ fonksiyonları içindir. Değişimleri, normalleşmiş fonksiyonlar uzayına kısıtlamak çoğu durumlarda uygundur:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \langle\psi + \delta\psi|\psi + \delta\psi\rangle = 1 \quad (2.34)$$

Bu değişim probleminin çözümü, ψ normalleşme zorunluluğu altında en iyileştirme (optimumlaştırma) problemi için bir çözüme, sınır şartlarını sağlayan ψ 'deki tüm $\delta\psi$ değişimlerine göre birinci dereceden kararlı olan

$$F(\psi) = \mathcal{E}(\psi) + \lambda\langle\psi|\psi\rangle \quad (2.35)$$

gibi bir fonksiyonu sağlayacak şekilde bir λ 'Lagrange çarpanı' ortaya çıkar.

2.1.4.1. Matris özdeğer denklemi

Basit fakat çok önemli değişim fonksiyonu

$$\Psi(\gamma LS) = \sum_{i=1}^M c_i \Phi(\gamma_i LS) \quad (2.36)$$

açılımıyla verilir. Bu ifadedeki $\Phi(\gamma_i LS)$ konfigürasyon hal fonksiyonlarının bilindiği kabul edilir ve yalnızca c_i katsayılarının belirlenmesi gerekir. CSF'ler çoğunlukla ortonormaldir. Normalleşme şartı da

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^M c_i^2 = 1 \quad (2.37)$$

şeklinde. Bu ifade (2.35)'te yerine yazılır ve katsayılardaki değişimlere göre kararlı fonksiyon aranır

$$\mathbf{H}\mathbf{c} = -\lambda\mathbf{c} \quad (2.38)$$

denklemini elde edilir. Burada \mathbf{H}

$$H_{ij} = \langle \Phi(\gamma_i LS) | H | \Phi(\gamma_j LS) \rangle \quad (2.39)$$

elemanlı Hamiltonyen matrisidir ve $\mathbf{c} = (c_1, \dots, c_M)^t$ açılım katsayılarının sütun vektörüdür. Yalnızca $-\lambda$, \mathbf{H} 'nin bir özdeğeri olduğunda normalleşmiş bir çözüm ortaya çıkar. Böylece kısıtlanmış değişim problemi bir matris özdeğer problemi verir. Hamiltonyen matrisi Hermityen olduğundan, özdeğer denkleminin karşılık gelen

$$-\lambda_1 \leq \dots \leq -\lambda_k \leq \dots \leq -\lambda_M \quad (2.40)$$

gerçek özdeğerle M tane

$$c_k = (c_{1k}, \dots, c_{Mk})^t, \quad c_k^t c_l = \delta_{kl} \quad (2.41)$$

ortonormal çözümlere sahiptir. Bu M çözümlerinin dışında, açılıma bağlı bir veya birkaç çözüm, gerçek dalga fonksiyonları için iyi yaklaşıklıklardır. Farklı çözümler için $\mathcal{E}(\Psi)$ değişim enerjileri, matris özdeğerlerini elde etmeye eşdeğerdir. Normalleşme kısıtlaması ile elde edilen Lagrange çarpanı çoğunlukla E ile gösterilir:

$$\mathcal{E}(\Psi) = E \quad (2.42)$$

Yaklaşık dalga fonksiyonlarının elde edildiği bu yöntem 'konfigürasyon etkileşme yöntemi' olarak adlandırılır.

2.1.5. Hartree-Fock yöntemi

Merkezi alan yaklaşıklığında her bir elektron aynı $(-Z/r)+V(r)$ potansiyelinde hareket ettiği için $V(r)$ 'nin seçimi önemlidir. Hartree, her 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 yöntemle çözülebileceğini önermiştir. Hartree dalga denkleminin çözümü, radyal fonksiyonların çarpımı olan küresel simetrik bir dalga fonksiyonunu verir. Fock, bu denklemlerin Pauli dışarlama ilkesini sağlamadığına dikkat çekmiştir. Basit sistemleri ele alarak, tek bir determinant ve değişim prensibini uygulayarak, 'değiş-tokuş terimleri' olarak adlandırılan antisimetriklikten ortaya çıkan bazı ek terimler hariç Hartree denklemlerine benzer denklemler türetmiştir.

Çok-elektronlu sistemler için değişim dalga fonksiyonu bir $\Psi = \Phi(\gamma LS)$ konfigürasyon hal fonksiyonu şeklinde seçilir. Radyal dalga fonksiyonları tanımlanmamıştır ve değişimlere göre kararlılık şartı Hartree-Fock denklemlerine götürür. Değişim fonksiyonu yerine,

$$\Psi(\gamma LS) = \sum_{i=1}^M c_i \Phi_i(\gamma_i LS) \quad (2.43)$$

çok konfigürasyonlu açılım seçilirse, radyal fonksiyonlardaki değişimlere göre kararlılık şartı Hartree-Fock denklemlerine benzer diferansiyel denklemler takımına götürür. Diferansiyel denklemler, karışım katsayılarının değişiminden ortaya çıkan matris özdeğer denklemiyle eşleşir ve iki problem eş zamanlı olarak çözülebilir. Değişim fonksiyonuna dayanan bu yöntem, 'çok konfigürasyonlu Hartree-Fock yöntemi' olarak bilinir.

2.2. Çok konfigürasyonlu Hartree-Fock yöntemi

Çok konfigürasyonlu Hartree-Fock yaklaşıklığı Fischer tarafından geliştirilen bir konfigürasyon etkileşim yöntemidir [1]. Bu yaklaşıklıkta MCHF Hamiltonyeni etkileşim terimlerinin relativistik olmayan enerjileri setinin en iyi radyal fonksiyonlarını elde etmek için kullanılır. Dalga fonksiyonu,

$$\Psi(\gamma LS) = \sum_{i=1}^M c_i \Phi(\gamma_i LS), \quad \sum_{i=1}^M c_i^2 = 1 \quad (2.44)$$

olarak verilir. Burada $\Phi(\gamma_i LS)$, γ_i ve c_i sırasıyla LS çiftlenimli konfigürasyon hal fonksiyonu, konfigürasyonları ve konfigürasyonların karışım katsayılarını ifade etmektedir. Bu fonksiyonlardan elde edilen relativistik olmayan enerji ifadesi,

$$\mathcal{E}(\gamma LS) = \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M c_i c_j \langle \Phi(\gamma_i LS) | H | \Phi(\gamma_j LS) \rangle = \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M c_i c_j H_{ij} = \sum_{i=1}^M c_i^2 H_{ii} + 2 \sum_{i>j}^M c_i c_j H_{ij} \quad (2.45)$$

şeklinde dir. $H_{ij} = H_{ji}$ olduğundan i ve j üzerinden toplam, köşegenlerle ve etkileşim matrisi olarak adlandırılan $\mathbf{H} = H_{ij}$ matrisinin en alt kısmıyla sınırlandırılabilir. $\mathbf{c} = (c_1, c_2, \dots, c_M)^t$ açılım katsayıları (veya karışım katsayıları) bir sütun vektörü olduğunda sistemin enerjisi

$$E = \mathbf{c}^t \mathbf{H} \mathbf{c} \quad (2.46)$$

olur. $(P(a;r), P(b;r), \dots)^t$ radyal fonksiyonlarının sütun vektörü \mathbf{P} ile gösterilir. Etkileşim matris elemanları radyal fonksiyonlara bağlı olduğundan enerji fonksiyonu hem \mathbf{P} 'ye hem \mathbf{c} 'ye bağlıdır.

Hamiltonyenin matris elemanları açısal momentum teorisinden

$$H_{ij} = \sum_{ab} w_{ab}^{ij} I(a,b) + \sum_{abcd;k} v_{abcd;k}^{ij} R^k(ab,cd) \quad (2.47)$$

şeklinde elde edilir. Buradaki ab veya $abcd$ toplamı her bir konfigürasyon halindeki doldurulmuş yörüngeler üzerindedir. $I(a,b)$ bir elektron integralleri ve $R^k(ab,cd)$ Slater integralleri olarak adlandırılırlar. (2.47), (2.45) enerji ifadesinde yerine yazılır ve toplamın sırası değiştirilirse

$$\mathcal{E}(\gamma LS) = \sum_{ab} w_{ab} I(a,b) + \sum_{abcd;k} v_{abcd;k} R^k(ab,cd) \quad (2.48)$$

elde edilir. Burada

$$w_{ab} = \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M c_i c_j w_{ab}^{ij} \quad \text{ve} \quad v_{abcd;k} = \sum_i \sum_j c_i c_j v_{abcd;k}^{ij} \quad (2.49)$$

dır. İntegraller üzerinden toplamı en aza indirmek için $I(a,b)$ ve $R^k(ab,cd)$ integrallerinin simetri özellikleri kullanılabilir. MCHF yönteminde $I(a,b)$ integrali için $a \leq b$ ve $R^k(ab,cd)$ integrali için de $a \leq b$, $a \leq c$ ve $b \leq d$ olduğu varsayılır.

Hartree-Fock denklemlerinin türetilmesindeki gibi, kararlılık ilkesi tüm kısıtlamalar için Lagrange çarpanlarını içeren bir fonksiyona uygulanmalıdır:

$$F(\mathbf{P}, \mathbf{c}) = \mathcal{E}(\gamma LS) + \sum_{a \leq b} \delta_{l_a l_b} \lambda_{ab} \langle a | b \rangle - E \sum_{i=1}^M c_i^2 \quad (2.50)$$

c_i 'deki değişimlere göre kararlılık şartlarının türetilmesinde, $\mathcal{E}(\gamma LS)$ için en uygun yol

$$\mathbf{Hc} = E\mathbf{c} \quad (2.51)$$

şeklinde esas denkleme götüren (2.45)'tir. Böylece, E Langrange çarpanı, sistemin

toplam enerjisini verir. $P(a; r)$ radyal fonksiyonlarındaki değişimlere göre kararlılık şartı gereği, değiştirilecek her radyal fonksiyon için bir tane olmak üzere bir denklemler sistemine götürür. $P(a; r)$, (2.50)'nin kararlılık şartına göre değiştirilecek radyal fonksiyon olarak kabul edilirse, şu sonuçlar elde edilir:

a) $w_{aa}I(a, a)$ 'nın değişimi

$$-w_{aa} \int_0^{\infty} \delta P(a; r) LP(a; r) dr \quad (2.52)$$

olur.

b) $\sum_{b;k} v_{abab;k} R^k(ab, ab)$ 'nin değişimi

$$2w_{aa} \int_0^{\infty} \delta P(a; r) \frac{1}{r} Y(a; r) P(a; r) dr \quad (2.53)$$

olarak ifade edilebilir.

c) Diğer tüm integrallerin değişimi

$$2w_{aa} \int_0^{\infty} \delta P(a; r) \frac{1}{r} X(a; r) dr \quad (2.54)$$

şekindedir. Bazı katkılar $I(a, b)$ köşegen dışı integrallerinden gelebilir. Slater integralleri, her bir konum için bir, iki ve üç kez ortaya çıkan radyal integrale sahip olabilir. Ortonormallik şartıyla bu değişimlerin toplamı

$$w_{aa} \int_0^{\infty} \delta P(a; r) Q(r) dr = 0 \quad (2.55)$$

şeklinde ifade edilebilir. $\delta P(a; r)$ tüm küçük değişimler için sıfır olma şartı, $Q(r) = 0$ şartına götürür:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} [Z - Y(nl; r)] - \frac{l(l+1)}{r^2} - \epsilon_{nl, nl} \right) P(nl; r) = \frac{2}{r} X(nl; r) + \sum_{n' \neq n} \epsilon_{nl, n'l} P(n'l; r) \quad (2.56)$$

Köşegen ve köşegen dışı enerji parametreleri

$$\epsilon_{nl, nl} = \frac{2\lambda_{nl, nl}}{w_{nl, nl}} \text{ ve } \epsilon_{nl, n'l} = \frac{\lambda_{nl, n'l}}{w_{nl, nl}} \quad (2.57)$$

şeklinde Lagrange çarpanlarıyla ilişkilidir. Bu tanımla, köşegen ve köşegen dışı enerji parametrelili matrisin simetrik olmadığına dikkat edilmelidir. Bununla birlikte

$$w_{nl, nl} \epsilon_{nl, n'l} = w_{n'l, n'l} \epsilon_{n'l, nl} \quad (2.58)$$

dir. Bu radyal denklemler sistemi, $w_{nl, nl}$ doluluk sayısının, tam sayı değil daha çok beklenen doluluk sayısı olması ve $X(nl; r)$ fonksiyonunun yalnızca bir konfigürasyon hali içindeki elektronların değiş tokuşundan değil aynı zamanda konfigürasyon halleri arasındaki etkileşimlerden de ortaya çıkması durumları hariç, Hartree-Fock denklemlerine benzer şekle sahiptir.

MCHF probleminin bir çözümü, esas denklemin ve değişim radyal denklemlerinin eş zamanlı çözümünü gerektirir. Değişim radyal denklemlerinin verildiği kabul edilirse sadece esas problemin çözülmeye ihtiyacı vardır. Bu problem bir 'konfigürasyon etkileşim (CI) problemi' olarak isimlendirilir. Herhangi bir radyal fonksiyon iyileştirilirse hesaplamaya, 'çok konfigürasyonlu Hartree-Fock (MCHF) hesabı' denir. Çözüm yine tekrarlamalı süreç olan çok konfigürasyonlu-öz uyumlu alan (multiconfiguration-self consistent field-MC-SCF) yöntemidir. Bu yöntem özet olarak şu adımlardan oluşur:

- a) Radyal fonksiyonlar oluşturulur.
- b) İstenilen öz çözüm için esas denklem çözülür.
- c) Radyal fonksiyonlar iyileştirilinceye ve istenilen öz çözüm için esas denklem çözülünceye kadar yakınsama işlemine devam edilir.

2.2.1. Breit-Pauli Hamiltonyeni ve dalga fonksiyonu

Birinci dereceden relativistik düzeltmeler için Breit-Pauli Hamiltonyeni alınabilir:

$$H_{BP} = H_{NR} + H_{RS} + H_{FS} \quad (2.59)$$

Burada, H_{NR} relativistik olmayan çok-elektron Hamiltonyeni, H_{RS} relativistik kayma ve H_{FS} ince yapı işlemcileridir. H_{RS} , L ve S ile sıra değiştirir. Relativistik kayma Hamiltonyeni, H_{MC} kütle düzeltmesi H_{D1} ve H_{D2} sırası ile bir- ve iki-cisim Darwin terimleri, H_{OO} yörünge-yörünge terimi ve H_{SSC} spin-spin temas teriminden oluşur:

$$H_{RS} = H_{MC} + H_{D1} + H_{D2} + H_{OO} + H_{SSC} \quad (2.60)$$

Buradaki her bir Hamiltonyen

$$H_{MC} = -\frac{\alpha^2}{8} \sum_{i=1}^N (\nabla_i^2)^\dagger \nabla_i^2 \quad (2.61)$$

$$H_{D1} = -\frac{\alpha^2 Z}{8} \sum_{i=1}^N (\nabla_i^2) \left(\frac{1}{r_i} \right) \quad (2.62)$$

$$H_{D2} = \frac{\alpha^2}{4} \sum_{i<j}^N (\nabla_i^2) \left(\frac{1}{r_{ij}} \right) \quad (2.63)$$

$$H_{oo} = -\frac{\alpha^2}{2} \sum_{i<j}^N \left[\frac{\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{p}_j}{r_{ij}} + \frac{\mathbf{r}_{ij} (\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{p}_i) \mathbf{p}_j}{r_{ij}^3} \right] \quad (2.64)$$

$$H_{SSC} = -\frac{8\pi\alpha^2}{3} \sum_{i<j}^N (\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j) \delta(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \quad (2.65)$$

ile verilir. H_{FS} işlemcisi, spin ve yörünge açısal momentumları arasındaki etkileşimi tanımlar. H_{FS} bir etkileşme terimi olduğu için L ve S ile sıra deęiřtirmezken, $\mathbf{J}=\mathbf{L}+\mathbf{S}$ toplam açısal momentumla sıra deęiřtirir. İnce yapı Hamiltonyeni

$$H_{FS} = H_{SO} + H_{SOO} + H_{SS} \quad (2.66)$$

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

$$H_{SO} = \frac{\alpha^2 Z}{2} \sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{r_i^3} \right) \mathbf{l}_i \cdot \mathbf{s}_i \quad (2.67)$$

$$H_{SOO} = -\frac{\alpha^2}{2} \sum_{i<j}^N \frac{\mathbf{r}_{ij} \times \mathbf{p}_i}{r_{ij}^3} (\mathbf{s}_i + 2\mathbf{s}_j) \quad (2.68)$$

$$H_{SS} = \alpha^2 \sum_{i<j}^N \frac{1}{r_{ij}^3} \left[\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - 3 \frac{(\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{s}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^2} \right] \quad (2.69)$$

Breit-Pauli Hamiltonyeni \mathbf{J} toplam açısal momentum işlemcisi ile sıra deęiřtirir ve karşılık gelen dalga fonksiyonu ise \mathbf{J}^2 ve J_z 'nin özfonksiyonları olmalıdır. Çok-konfigürasyon yaklaşımında, Breit-Pauli dalga fonksiyonları,

$$\Psi(\gamma JM_J) = \sum_{i=1}^M c_i \Phi(\gamma_i L_i S_i JM_J) \quad (2.70)$$

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

$$\Phi(\gamma LSJM_J) = \sum_{M_L M_S} \langle LM_L SM_S | LSJM_J \rangle \Phi(\gamma LM_L SM_S) \quad (2.71)$$

L ve S , farklı LS 'li konfigürasyon hal fonksiyonlarının iyi kuantum sayıları olmadığı için, farklı LS terimli CSF'ler (2.70)'te alınmalıdır.

CSF'lerden oluşturulan radyal fonksiyonlar bir ön MCHF çalışmasından alınır ve yalnızca açılım katsayıları iyileştirilir. Bu durumda \mathbf{H} ,

$$H_{ij} = \langle \gamma_i L_i S_i J M_J | H_{BP} | \gamma_j L_j S_j J M_J \rangle \quad (2.72)$$

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

2.2.2. İnce yapı seviyeleri

Çok elektronlu bir sistemde relativistik düzeltmeleri almak için dalga fonksiyonunun bir terimini içeren (2.70)'i incelemek yeterlidir:

$$E = E_{NR} + E_{RS} + E_{FS} \quad (2.73)$$

$$E_{NR} = \langle \gamma LSJM_J | H_{NR} | \gamma LSJM_J \rangle \quad (2.74)$$

Burada E_{NR} (2.74) şeklindeki relativistik olmayan enerjidir. E_{RS} ve E_{FS} sırasıyla, relativistik kaymadan ve ince yapı katkılarından elde edilen relativistik enerji düzeltmeleridir:

$$E_{RS} = \langle \gamma LSJM_J | H_{RS} | \gamma LSJM_J \rangle \quad (2.75)$$

$$E_{FS} = \langle \gamma LSJM_J | H_{FS} | \gamma LSJM_J \rangle \quad (2.76)$$

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

$$E_{FS} = E_{SO} + E_{SOO} + E_{SS} \quad (2.77)$$

şeklinindedir. Burada E_{SO} , E_{SOO} ve E_{SS} sırasıyla spin-yörünge, spin-diğer yörünge ve spin-spin etkileşme işlemcilerine karşılık gelen enerjilerdir. Bu enerjilerin hepsi J kuantum sayısına bağlıdır ve E_{NR} relativistik olmayan LS terim enerjisinin ince yapı seviyeleri yarılmasını verir. E_{SO} ve E_{SOO} 'nun her ikisi bir ranklı spin ve uzay işlemcilerinin çarpımıdır:

$$E_{SO} = \langle \gamma LSJM_J | H_{SO} | \gamma LSJM_J \rangle \propto J(J+1) - L(L+1) - S(S+1) \quad (2.78)$$

$$E_{SOO} = \langle \gamma LSJM_J | H_{SOO} | \gamma LSJM_J \rangle \propto J(J+1) - L(L+1) - S(S+1) \quad (2.79)$$

E_{SS} ise iki ranklı iki tensör işlemcisinin bir skaler çarpımıdır:

$$E_{SS} = \langle \gamma LSJM_J | H_{SS} | \gamma LSJM_J \rangle \propto \frac{3}{4} C(C+1) - L(L+1) - S(S+1) \quad (2.80)$$

$C = J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)$ olmak üzere 6j sembolleri kullanılarak ince yapı enerji seviyeleri daha açık ifadelerle yazılabilir:

$$E_{SO} = \{J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)\} \zeta_{SO}(\gamma LS) \quad (2.81)$$

$$E_{SOO} = \{J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)\} \zeta_{SOO}(\gamma LS) \quad (2.82)$$

ve

$$E_{SS} = \left\{ \frac{3}{4} C(C+1) - L(L+1) - S(S+1) \right\} \zeta_{SS}(\gamma LS) \quad (2.83)$$

Burada $\zeta_{SO}(\gamma LS)$, $\zeta_{SOO}(\gamma LS)$ ve $\zeta_{SS}(\gamma LS)$, J den bağımsız çarpanlardır. Spin-spin terimi ihmal edildiğinde, iki komşu ince yapı seviyeleri arasındaki enerji farkı elde edilir:

$$\Delta E_{FS} = 2\zeta J \quad (2.84)$$

$\zeta = \zeta_{SO}(\gamma LS) + \zeta_{SOO}(\gamma LS)$ ince yapı için Landé aralık kuralıdır.

2.3. Çok Konfigürasyonlu Dirac-Fock Yöntemi

2.3.1. Relativistik yörüngeler

Karmaşık atomlar için dalga fonksiyonları, büyük ölçüde küresel simetrik potansiyelli Dirac denkleminin çözümünden oluşur. Dirac Hamiltonyeni

$$H_D = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta c^2 + V(\mathbf{r}) \quad (2.85)$$

şeklinindedir. Burada \mathbf{r} elektronun konum vektörü, $V(\mathbf{r})$ elektronun potansiyel enerjisi, c ışık hızı ve $\mathbf{p} \equiv -i\nabla$ momentum işlemcisidir. $\boldsymbol{\alpha}$ ve β işlemcilerinin alışılmış gösterimi

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma}_i^p \\ \boldsymbol{\sigma}_i^p & 0 \end{pmatrix} \quad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad (2.86)$$

dir. Burada I , 2×2 'lik birim matris ve $\boldsymbol{\sigma}_i^p$ Pauli matrisleridir:

$$\sigma_x^p = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y^p = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z^p = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.87)$$

$|n\kappa m\rangle$ relativistik yörünge (Dirac yörüngesi), \hat{j}^2 ($\hat{j} = \hat{l} + \hat{s}$) ve \hat{j}_z açısal momentum işlemcilerinin ve $\hat{p} = \beta\hat{\pi}$ ($\hat{\pi}$ parite işlemcisi) relativistik parite işlemcisinin öz fonksiyonudur:

$$\hat{j}^2 |n\kappa m\rangle = j(j+1)|n\kappa m\rangle, \quad \hat{j}_z |n\kappa m\rangle = m|n\kappa m\rangle, \quad m = -j, \dots, j, \quad (2.88)$$

$$\hat{p} |n\kappa m\rangle = (-1)^l |n\kappa m\rangle \quad (2.89)$$

Bu ifadelerde, n baş kuantum sayısı ve κ relativistik açısal kuantum sayısıdır $\left(l = j \pm \frac{1}{2} \text{ için } \kappa = \pm(j + \frac{1}{2})\right)$. Böylece açısal momentum κ cinsinden $j = |\kappa| - \frac{1}{2}$ şeklinde verilir.

Aynı $(n\kappa)$, farklı m kuantum sayılarına sahip $2j+1$ 'den küçük ve eşit (aynı tabakadaki) yörüngelerin her birinin aynı radyal şekle sahip oldukları kabul edilir:

$$\langle \mathbf{r} | n\kappa m \rangle = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} P_{n\kappa}(r) & \chi_{\kappa m}(\mathbf{r}/r) \\ iQ_{n\kappa}(r) & \chi_{-\kappa m}(\mathbf{r}/r) \end{pmatrix}. \quad (2.90)$$

Burada $P_{n\kappa}(r)$ ve $Q_{n\kappa}(r)$, sırasıyla dalga fonksiyonunun büyük ve küçük bileşenleri $\chi_{\kappa m}(\mathbf{r}/r)$ fonksiyonları ise spinör küresel harmoniklerdir:

$$\chi_{\kappa m}(\mathbf{r}/r) = \sum_{\sigma=\pm\frac{1}{2}} \left\langle lm - \sigma \frac{1}{2} \sigma \left| l \frac{1}{2} jm \right\rangle Y_l^{m-\sigma}(\mathbf{r}/r) \phi^\sigma \quad (2.91)$$

Bunlar \hat{j}^2 , \hat{j}_z , \hat{l}^2 , \hat{s}^2 ve $\hat{\pi}$ 'nin öz fonksiyonlarıdır:

$$\begin{aligned}
\hat{j}^2 \chi_{\kappa m}(\mathbf{r}/r) &= j(j+1) \chi_{\kappa m}(\mathbf{r}/r), \\
\hat{j}_z \chi_{\kappa m}(\mathbf{r}/r) &= m \chi_{\kappa m}(\mathbf{r}/r), \\
\hat{l}^2 \chi_{\kappa m}(\mathbf{r}/r) &= l(l+1) \chi_{\kappa m}(\mathbf{r}/r), \\
\hat{s}^2 \chi_{\kappa m}(\mathbf{r}/r) &= \frac{3}{4} \chi_{\kappa m}(\mathbf{r}/r), \\
\hat{\pi} \chi_{\kappa m}(\mathbf{r}/r) &= (-1)^l \chi_{\kappa m}(\mathbf{r}/r),
\end{aligned} \tag{2.92}$$

(2.91)'de $\left\langle lm - \sigma \frac{1}{2} \sigma \left| l \frac{1}{2} jm \right\rangle$ Clebsch-Gordan katsayıları, $Y_l^{m-\sigma}(\mathbf{r}/r)$ küresel harmonik ve ϕ^σ temel spinör fonksiyonudur. Yörüngeler ortonormal takım şeklinde seçildiklerinde açısal momentum cebiri çok basittir.

$$\langle n_a \kappa_a m_a | n_b \kappa_b m_b \rangle = \delta_{ab}, \tag{2.93}$$

olduğundan

$$\begin{aligned}
N(ab) &= \begin{cases} 0, & a \neq b \text{ fakat } \kappa_a = \kappa_b \\ 1, & a = b \end{cases} \\
N(ab) &\equiv \int_0^\infty dr \left(P_{n_a \kappa_a}(r) P_{n_b \kappa_b}(r) + Q_{n_a \kappa_a}(r) Q_{n_b \kappa_b}(r) \right)
\end{aligned} \tag{2.94}$$

olduğunu kabul etmek gereklidir.

2.3.2. Konfigürasyon hal fonksiyonları

N -elektronlu bir sistemin bir $|\gamma P J M\rangle$ konfigürasyon hal fonksiyonu (CSF), \hat{P} parite işlemcisi ve \hat{J}^2 ve \hat{J}_z toplam açısal momentum işlemcilerinin normalize edilmiş öz fonksiyonlarını $(\langle \gamma P J M | \gamma P J M \rangle = 1)$ elde etmek için (2.90) yörüngelerinden oluşturulan N . dereceden Slater determinantının lineer birleşimi alınır:

$$\begin{aligned}
\hat{P}|\gamma PJM\rangle &= P|\gamma PJM\rangle \\
\hat{J}^2|\gamma PJM\rangle &= J(J+1)|\gamma PJM\rangle \\
\hat{J}_z|\gamma PJM\rangle &= M|\gamma PJM\rangle, \quad M = -J, \dots, J
\end{aligned} \tag{2.95}$$

γ , CSF'yi tam anlamıyla tanımlamak için gerekli yörünge doluluk sayısı, çiftlenim vs. gibi tüm bilgileri sunar. Bir CSF için standart çiftlenim şeması için, ilk olarak elektronlar yörünge doluluk sayıları $q(a) \leq 2j_a + 1$ olacak şekilde belirlenerek alt tabakalara atanırlar. Her a alt tabakası elektronları, a esas, v_a ile J_a , M_a açısal momentumunu verecek şekilde jj -çiftlenimlidirler:

$$|(J_a)^{q(a)} v_a J_a M_a\rangle. \tag{2.96}$$

Sonra, J_1 ve J_2 alt tabaka açısal momentumları, bir ara açısal momentum vermek için çiftlenirler; ve bu, bir J toplam açısal momentumunu vermek üzere tüm tabakalar çiftlenene kadar sürer. Alt tabakalar arasında elektronların yeniden dağılımı ve çiftlenim sırasının değişmesiyle şekillenen CSF'ler ortogonaldirler.

2.3.3. Atomik hal fonksiyonları

Atomik hal fonksiyonları (ASF) P , J ve M ortak değerlerine sahip CSF'lerin lineer bir kombinasyonudur:

$$|\Gamma PJM\rangle = \sum_{r=1}^{n_c} c_{r\Gamma} |\gamma_r PJM\rangle \tag{2.97}$$

Burada, $c_{r\Gamma}$ karışım katsayıları bir sütun vektörüne ($\mathbf{c}_\Gamma \equiv \{c_{r\Gamma}, r = 1, \dots, n_c\}$) katılabilir. $|\gamma_r PJM\rangle$ ($r = 1, \dots, n_c$) CSF temel setine göre atomik halin gösterimi $|\Gamma PJM\rangle$ şeklindedir.

$$(\mathbf{c}_\Gamma)^\dagger \mathbf{c}_\Gamma = \delta_{ij} \tag{2.98}$$

olması için ASF'ler ortonormal olarak seçilirler.

2.3.4. Dirac-Coulomb Hamiltonyeni

N -elektronlu atom veya iyonlarda tüm baskın etkileşimler Dirac-Coulomb Hamiltonyeninde alınır:

$$\hat{H}^{DC} = \sum_{i=1}^N \hat{H}_i + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \left| \hat{\mathbf{r}}_i - \hat{\mathbf{r}}_j \right|^{-1} \quad (2.99)$$

İlk terimdeki

$$\hat{H} = c \sum_{i=1}^3 \alpha_i \hat{p}_i + (\beta - 1)c^2 + V_{cek}(\hat{\mathbf{r}}), \quad (2.100)$$

elektronun kinetik enerjisi ve çekirdekle etkileşiminden ileri gelen bir cisim katkılarıdır. Çekirdek potansiyeli ($V_{cek}(\hat{\mathbf{r}})$), çekirdek hacim etkileri ihmal edildiğinde $-Z/r$ olan Coulomb şeklini alır. Elektronlar arası iki cisim Coulomb etkileşimleri (2.98)'deki ikinci terimin içindedir. Tersinir elektromanyetik etkileşimler ve ışımalı düzeltmelerden dolayı, (2.99) ve (2.100)'e yüksek dereceden değişiklikler (QED) katkı teorisi ile incelenir.

Temel CSF'lere göre, (2.99) Hamiltonyen matrisi tüm relativistik atomik yapı hesaplarında önemli bir rol oynar. (2.88)'deki atomik halin enerjisi

$$E_{\Gamma}^{DC} = \langle \Gamma P J M | \hat{H}^{DC} | \Gamma P J M \rangle \equiv (\mathbf{c}_{\Gamma}^{DC})^{\dagger} \mathbf{H}^{DC} \mathbf{c}_{\Gamma}^{DC}. \quad (2.101)$$

dir. \mathbf{H}^{DC} Hamiltonyeni ise

$$H_{rs}^{DC} = \langle \gamma_r P J M | \hat{H}^{DC} | \gamma_s P J M \rangle \quad (2.102)$$

şeklinde elemanlara sahip bir matristir. (2.98)'e karışım katsayılarındaki değişime

göre E_{Γ}^{DC} (2.101)'in kararlı olması gerekliliği, katsayılar için öz değer problemini vermektedir:

$$(\mathbf{H}^{DC} - E_{\Gamma}^{DC} \mathbf{I})c_{\Gamma}^{DC} = 0. \quad (2.103)$$

Burada \mathbf{I} , $n_c \times n_c$ boyutlu birim matristir.

(2.102) matris elemanları, açısal katsayılar ve radyal integraller cinsinden açıklanabilir. Bir cisim etkileşim integralleri

$$\begin{aligned} I(ab) = & \delta_{\kappa_a \kappa_a} \int_0^{\infty} dr \left[c(Q_{n_a \kappa_a}(r)P'_{n_b \kappa_b}(r) - P_{n_a \kappa_a}(r)Q'_{n_b \kappa_b}(r)) - 2c^2 Q_{n_a \kappa_a}(r)Q_{n_b \kappa_b}(r) \right. \\ & + \frac{cK_b}{r} (P_{n_a \kappa_a}(r)Q_{n_b \kappa_b}(r) + Q_{n_a \kappa_a}(r)P_{n_b \kappa_b}(r)) \\ & \left. + V_{nuc}(r)(P_{n_a \kappa_a}(r)P_{n_b \kappa_b}(r) + Q_{n_a \kappa_a}(r)Q_{n_b \kappa_b}(r)) \right] \end{aligned} \quad (2.104)$$

şekindedir. Burada $f' \equiv df/dr$ iki cisim etkileşimleri relativistik Slater integrallerini verir:

$$R^k(abcd) = \int_0^{\infty} dr \left[\left(P_{n_a \kappa_a}(r)P_{n_c \kappa_c}(r) + Q_{n_a \kappa_a}(r)Q_{n_c \kappa_c}(r) \right) \frac{1}{r} Y^k(bd; r) \right] \quad (2.105)$$

(2.105)'teki $Y^k(bd; r)$ relativistik Hartree Y -fonksiyonları

$$Y^k(ab; r) = r \int_0^{\infty} ds \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} \left(P_{n_a \kappa_a}(s)P_{n_b \kappa_b}(s) + Q_{n_a \kappa_a}(s)Q_{n_b \kappa_b}(s) \right). \quad (2.106)$$

şeklinde tanımlanır. Burada $r_{>}$, r ve s 'nin daha büyük olanını, $r_{<}$ de r ve s 'nin daha küçük olanını gösterir.

Hamiltonyen matrisine köşegen katkı

$$H_{rr}^{DC} = \sum_{a=1}^{n_w} \left(q_r(a)I(aa) + \sum_{b \geq a} \sum_{k=0,2,\dots}^{k_0} f_r^k(ab)F^k(ab) + \sum_{b > a} \sum_{k=k_1, k_1+2, \dots}^{k_2} g_r^k(ab)G^k(ab) \right) \quad (2.107)$$

olarak yazılabilir. Bu ifadedeki $F^k(ab)$ ve $G^k(ab)$ (2.104)'ün özel durumlarıdır:

$$F^k(ab) = R^k(abab), \quad G^k(ab) = R^k(abba); \quad (2.108)$$

$q_r(a)$ CSF'deki a yörüngesinin doluluk sayısıdır. k_0 , k_1 ve k_2 kısıtlamaları

$$\begin{aligned} k_0 &= (2j_a - 1)\delta_{ab}; \\ k_1 &= \begin{cases} |j_a - j_b|, & \kappa_a \kappa_b > 0 \\ |j_a - j_b| + 1, & \kappa_a \kappa_b < 0 \end{cases} \\ k_2 &= \begin{cases} j_a + j_b, & j_a + j_b - k_1 \text{ çift} \\ j_a + j_b - 1, & \text{diğer durumlarda} \end{cases} \end{aligned} \quad (2.109)$$

ile verilir. Açısal katsayılar $f_r^k(ab)$ ve $g_r^k(ab)$, $k=0$ için

$$f_r^0(aa) = \frac{1}{2}q_r(a)(q_r(a) - 1), \quad f_r^0(ab) = q_r(a)q_r(b), \quad (2.110)$$

şeklinde dirler. Bu durum $k < 0$ iken, $q_r(a) = 2j_a + 1$ veya $q_r(b) = 2j_b + 1$ olduğunda

$$f_r^k(ab) = -\frac{1}{2}(q_r(a)C(a, k, a))^2 \delta_{ab}, \quad g_r^k(ab) = -q_r(a)q_r(b)C^2(a, k, a) \quad (2.111)$$

şeklinde olur. Burada $C(a, k, a)$

$$C(a, k, a) = \begin{pmatrix} j_a & k & j_b \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (2.112)$$

ile verilir. Eğer $k > 0$ ve $q_r(a) < 2j_a + 1$ ve $q_r(b) < 2j_b + 1$ ise

$$f_r^k(ab) = V_{rr}^k(abab), \quad g_r^k(ab) = V_{rr}^k(abba) \quad (2.113)$$

olur. Köşegen dışı matris elemanları ($r \neq s$)

$$H_{rs}^{DC} = \sum_{abcd} \sum_k V_{rs}^k(abcd) R^k(abcd) + \sum_{ab} T_{rs}(ab) I(ab) \quad (2.114)$$

olarak elde edilirler.

2.3.5. Radyal fonksiyonların oluşturulması

Bir a alt tabakası için $P_{n_a \kappa_a}(r)$ ve $Q_{n_a \kappa_a}(r)$ radyal dalga fonksiyonları çifti, (2.94) ortonormalizasyon şartı ve

$$P_{n_a \kappa_a}(r=0) = 0, \quad Q_{n_a \kappa_a}(r=0) = 0, \quad P_{n_a \kappa_a}(r \rightarrow \infty) \rightarrow 0, \quad Q_{n_a \kappa_a}(r \rightarrow \infty) \rightarrow 0, \quad P'_{n_a \kappa_a}(r \rightarrow 0) > 0 \quad (2.115)$$

$\epsilon_a > 0$ 'lı sınır şartıyla bir çift Dirac denklemi çözümlenerek elde edilebilir:

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{dr} + \frac{\kappa_a}{r} \right) P_{n_a \kappa_a}(r) - \left(2c - \frac{\epsilon_a}{c} + \frac{Y_a(r)}{cr} \right) Q_{n_a \kappa_a}(r) &= -\frac{\chi_a^{(P)}(r)}{r}, \\ \left(\frac{d}{dr} - \frac{\kappa_a}{r} \right) Q_{n_a \kappa_a}(r) + \left(-\frac{\epsilon_a}{c} + \frac{Y_a(r)}{cr} \right) P_{n_a \kappa_a}(r) &= \frac{\chi_a^{(Q)}(r)}{r} \end{aligned} \quad (2.116)$$

Başlangıç noktası yakınında büyük ve küçük bileşen fonksiyonlarının asimtotik şekli ve aralarındaki ilişki, orjin yakınlıklarında homojen olmayan $\chi_a^{(P)}(r)$ ve $\chi_a^{(Q)}(r)$ terimlerini belirleyen $Y_a(r)$ potansiyel enerji fonksiyonu davranışına bağlıdır.

(2.115) sınır şartları ile birlikte (2.116) eşitlikleri $P_{n_a \kappa_a}(r)$ ve $Q_{n_a \kappa_a}(r)$ yörüngeleri ve ϵ_a ($a=1, \dots, n_w$) enerjileri için, $Y_a(r) = Y_{\kappa_a}(r)$ (yani aynı κ açısız kuantum sayılı yörüngeler aynı potansiyelde üretilir) ve $\chi_a^{(Q)}(r) \equiv 0$ olduğu durumlarda bir öz değer problemini verir. Bu genel yapının basit fakat önemli üç durumu şöyle belirtilebilir:

a) Coulomb merkezi alanında ($Y_{\kappa_a}(r) = Z$), çözümler analitik olarak elde edilebilir:

$$\begin{aligned}
\frac{P_{n\kappa}}{Q_{n\kappa}}(r) &= \mp \left(1 \pm \left(1 - \frac{\epsilon}{c^2} \right) \right)^{1/2} \xi \left(\frac{\rho}{N} \right)^\gamma e^{-\rho/2N} \\
&\quad \times (\mp n_\Gamma F(-n_\Gamma + 1, 2\gamma + 1; \rho/N) + (N - \kappa) F(-n_\Gamma, 2\gamma + 1; \rho/N)) \\
c^2 - \epsilon &= c^2 \frac{n_\Gamma + \gamma}{N} = c^2 \left(1 - \frac{\alpha^2 Z^2}{N^2} \right)^{1/2}, \quad N = ((n_\Gamma + \gamma)^2 + \alpha^2 Z^2)^{1/2}, \quad n_\Gamma = n - |\kappa|, \\
\gamma &= (\kappa^2 - \alpha^2 Z^2)^{1/2}, \quad \xi = \left(\frac{Z}{2N^2(N - \kappa)} \frac{\Gamma(2\gamma + n_\Gamma + 1)}{\{\Gamma(2\gamma + 1)\}^2 n_\Gamma!} \right), \quad \rho = 2Zr.
\end{aligned} \tag{2.117}$$

İlk eşitlikte üst işaret, $P_{n\kappa}(r)$ için ve alt işaret $Q_{n\kappa}(r)$ için uygulanır. Perdelenmiş Coulomb fonksiyonları, ele alınan sistemdeki Z gerçek atom numarası yerine $Z^{etk} = Z - \sigma$ kullanılarak elde edilir. Farklı σ_a perdeleme sayıları, farklı alt tabakalar için kullanılırsa (2.94) genelde sağlanamayacaktır. Bu tip örneklerde Gram-Schmidt ortogonalleşme yöntemi,

$$\begin{pmatrix} P_{n_a \kappa_a}(r) \\ Q_{n_a \kappa_a}(r) \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} P_{n_a \kappa_a}(r) \\ Q_{n_a \kappa_a}(r) \end{pmatrix} - \sum_{b < a} \delta_{n_b \kappa_b} N(ab) \begin{pmatrix} P_{n_b \kappa_b}(r) \\ Q_{n_b \kappa_b}(r) \end{pmatrix} \tag{2.118}$$

şeklinde, her bir çıkarım sonrasında fonksiyonların normalleşmesi suretiyle temel fonksiyonların ortonormal setini elde etmek için kullanılabilir.

b) Birçok durumda, yörüngeler relativistik olmayan Thomas-Fermi teorisine dayanan bir potansiyelde hesaplanır:

$$\begin{aligned}
Y_{\kappa_a}(r) &\rightarrow Y^{TF}(r) = Z_\infty - (rV_{\zeta ek}(r) + Z_\infty) \cdot f^2(x) \\
Z_\infty &= Z + 1 - \sum_{a=1}^{n_w} q_{ort}(a) \\
f(x) &= \frac{0,60112x^2 + 1,81061x + 1}{0,01793x^5 + 0,21465x^4 + 0,77112x^3 + 1,39515x^2 + 1,81061x + 1} \\
x &= \left[\frac{(Z - Z_\infty)^{1/3} r}{0,8853} \right]^{1/2}
\end{aligned} \tag{2.119}$$

Burada ortalama $q_{ort}(a)$ doluluk sayısı

$$q_{ort}(a) = \frac{\sum_{r=1}^{n_c} (2J_r + 1)q_r(a)}{\sum_{r=1}^{n_c} (2J_r + 1)} \quad (2.120)$$

alındığında perdelenmiş Coulomb fonksiyonlarından daha iyi tahmin edilir. Bu çekirdek alanın perdelenmesinin radyal değişiminin bir tahminini veren Thomas-Fermi potansiyeli nedeniyledir.

c) Yoğunluk fonksiyonu teorisine dayanan hesaplamalar, bir sonraki belirli değiş tokuş ve karşılıklı etkileşme etkilerinin tahminlerini içerdikleri için bir sonraki aşamada dikkate alınabilirler. $Y_{\kappa_a}(r)$ potansiyeli, $\rho(r)$ küresel olarak ortalama parçacık yoğunluğunun bir fonksiyonu da olan bir terim içerir:

$$Y_{\kappa_a}(r) \rightarrow Y_{\kappa_a}(r) - Y_{\kappa_a}^{xc}(\rho; r), \quad \rho(r) = \frac{1}{4\pi r^2} \sum_{a=1}^{n_w} q_{av} \left(P_{n_a \kappa_a}^2(r) + Q_{n_a \kappa_a}^2(r) \right) \quad (2.121)$$

Slater değiş-tokuş yaklaşıklığı, $Y_{\kappa_a}^{xc}(\rho(r); r) \approx Y^{Slx}(\rho; r)$ şeklinde oluşumunu da sağlar:

$$Y^{Slx}(\rho; r) = \frac{3}{2} \left(\frac{3}{\pi} \rho(r) \right)^{1/3} \quad (2.122)$$

a ve b durumları için (2.116) şeklinin aksine, $Y_{\kappa_a}(r)$ 'nin $P_{n_b \kappa_b}(r)$ ve $Q_{n_b \kappa_b}(r)$ ($b = 1, \dots, n_w$) bağıllığı, c durumunda (2.114)'ün lineer olmamasına neden olur. Bu sistemler öz uyumlu alan (SCF) yöntemi ile çözülür:

1. $Y_{\kappa_a}(r)$ potansiyeli tahmini bir $P_{n_b \kappa_b}^{tah}(r)$ ve $Q_{n_b \kappa_b}^{tah}(r)$ ($b = 1, \dots, n_w$) seti ile hesaplanır.
2. (2.121)'deki eşitlikler, $P_{n_b \kappa_b}^{yeni}(r)$ ve $Q_{n_b \kappa_b}^{yeni}(r)$ ($b = 1, \dots, n_w$) radyal fonksiyonların yeni bir setini elde etmek için bu potansiyel kullanılarak çözülür.
3. İyileştirilmiş bir tahmini radyal fonksiyon seti, $0 \leq \eta_b < 1$ durdurucu veya

hızlandırıcı çarpanlar olmak üzere

$$\begin{pmatrix} P_{n_b \kappa_b}^{tah}(r) \\ Q_{n_b \kappa_b}^{tah}(r) \end{pmatrix} \rightarrow (1 - \eta_b) \begin{pmatrix} P_{n_b \kappa_b}^{yeni}(r) \\ Q_{n_b \kappa_b}^{yeni}(r) \end{pmatrix} + \eta_b \begin{pmatrix} P_{n_b \kappa_b}^{tah}(r) \\ Q_{n_b \kappa_b}^{tah}(r) \end{pmatrix} \quad (2.123)$$

ifadelerinden elde edilir. Eğer iyileştirilmiş tahmini set, orijinal tahmini set ile belirli bir tolerans içinde uyum sağlarsa, yakınsaklık elde edilmiş olur. Aksi durumda 1-3 adımları tekrar yürütülür.

Aynı açılal kuantum sayısına sahip farklı yörüngeler, farklı potansiyelerde üretildiğinde, artık bir öz değer problemi olmayacaktır. (2.94) şartı

$$\chi_a^{(P)}(r) = \frac{r}{cq_{av}(a)} \sum_{b \neq a} \delta_{\kappa_a \kappa_b} \in_{ab} \begin{pmatrix} Q_{n_b \kappa_b} \\ P_{n_b \kappa_b} \end{pmatrix}(r) \quad (2.124)$$

şeklinde homojen olmayan terimleri belirtmekle ortaya çıkar. Ayrıca gerekli olan \in_{ab} Lagrange çarpanları,

$$\begin{aligned} \frac{\in_{ab}}{q_{av}(a)} &= \int_0^\infty \frac{dr}{r} (Y_a(r) + rV_{nuc}(r)) (P_{n_b \kappa_b}(r)P_{n_a \kappa_a}(r) + Q_{n_b \kappa_b}(r)Q_{n_a \kappa_a}(r)) - I(ab) \\ \frac{\in_{ab}}{q_{av}(b)} &= \int_0^\infty \frac{dr}{r} (Y_b(r) + rV_{nuc}(r)) (P_{n_b \kappa_b}(r)P_{n_a \kappa_a}(r) + Q_{n_b \kappa_b}(r)Q_{n_a \kappa_a}(r)) - I(ab) \end{aligned} \quad (2.125)$$

eşitliklerinin her birinden ya da bu ikisinin farkıyla ya da toplamıyla belirlenir.

SCF yöntemindeki 1. adımdaki homojen olmayan terimlerin (2.124) hesaplanması da gereklidir. (2.115)'in en genel şekli, denklemler bir değişim prensibinden türetildiğinde de ortaya çıkar. Bu tür eşitlikler, değişim ilkesinden çıkarıldığı zaman ortaya çıkar:

$$W^{CD} = \sum_{r,s=1}^{n_c} d_{rs} H_{rs}^{DC} + \sum_{a=1}^{n_w} \bar{q}(a) \in_a N(aa) + \sum_{a=1}^{n_w-1} \sum_{b=a+1}^{n_w} \delta_{\kappa_a \kappa_b} \in_{ab} N(ab) \quad (2.126)$$

Enerji fonksiyonu genelleştirilmiş ağırlıklarla birlikte

$$d_{rs} = \frac{\sum_{i=1}^{n_l} (2J_i + 1) c_{r\Gamma_i} c_{s\Gamma_i}}{\sum_{i=1}^{n_l} (2J_i + 1)} \quad (2.127)$$

şekindedir. Bu da basitçe

$$W^{DC} = \frac{\sum_{i=1}^{n_l} (2J_i + 1) E_{\Gamma_i}^{DC}}{\sum_{i=1}^{n_l} (2J_i + 1)} \quad (2.128)$$

ifadesine denktir. (2.94)'teki kısıtlamayı uygulamak için kullanılan ϵ_a ve ϵ_{ab} Lagrange çarpanları ile atomik seviyelerin belirli alt setleri üzerinden ağırlıklı bir toplamına eşdeğerdir. $\bar{q}(a)$ genelleştirilmiş doluluk sayıları, köşegen katsayılar cinsinden tanımlanır:

$$\bar{q}(a) = \sum_{r=1}^{n_c} d_{rr} q_r(a) \quad (2.129)$$

$P_{n_a \kappa_a}(r)$ ve $Q_{n_a \kappa_a}(r)$ fonksiyonlarındaki değişimlere göre W^{DC} 'nin kararlı olması gerekliliği,

$$Y_a(r) = -r V_{\check{c}ek}(r) \sum_k \left(\sum_{b=1}^{n_w} y^k(ab) Y^k(aa; r) - \sum_{b,d} y^k(abad) Y^k(bd; r) \right)$$

$$y^k(ab) = \left(\frac{1 + \delta_{ab}}{\bar{q}(a)} \right) \sum_{r=1}^{n_c} d_{rr} f_r^k(ab), \quad y^k(abad) = \left(\frac{1}{\bar{q}(a)} \right) \sum_{r,s} d_{rs} V_{rs}^k(abad) \quad (2.130)$$

şeklindeki $Y_a(r)$ doğrudan potansiyel ve

$$\chi_a \begin{pmatrix} P \\ Q \end{pmatrix} (r) = \chi_a \begin{pmatrix} P \\ Q \end{pmatrix} (r) + \frac{r}{c\bar{q}(a)} \sum_{b \neq a} \delta_{\kappa_a \kappa_b} \epsilon_{ab} \begin{pmatrix} Q_{n_b \kappa_b} \\ P_{n_b \kappa_b} \end{pmatrix} (r),$$

$$\begin{aligned}
c\chi_a^{\left(\begin{smallmatrix} P \\ Q \end{smallmatrix}\right)}(r) &= \sum_k \left(\sum_{b \neq a} x^k(ab) Y^k(ab; r) \begin{pmatrix} Q_{n_b, \kappa_b} \\ P_{n_b, \kappa_b} \end{pmatrix}(r) - \sum_{\substack{b, c, d \\ c \neq a}} x^k(abcd) Y^k(bd; r) \begin{pmatrix} Q_{n_c, \kappa_c} \\ P_{n_c, \kappa_c} \end{pmatrix}(r) \right), \\
x^k(ab) &= \frac{1}{\bar{q}(a)} \sum_{r=1}^{n_c} d_{rr} g_r^k(ab), \quad x^k(abcd) = \frac{1}{\bar{q}(a)} \sum_{r,s} d_{rs} V_{rs}^k(abcd)
\end{aligned} \tag{2.131}$$

homojen olmayan terimlerle (2.116)'daki gibi denklemleri ortaya çıkarır. $\chi_a^{\left(\begin{smallmatrix} P \\ Q \end{smallmatrix}\right)}(r)$ eşitliğinin ikinci terimi, (2.124)'ün sağ tarafına benzemektedir ve aynı zamanda (2.94)'ü ortaya çıkaran Lagrange çarpanlarının varlığından kaynaklanmaktadır. Lagrange çarpanları ya,

$$\begin{aligned}
\frac{\epsilon_{ab}}{\bar{q}(a)} &= c \int_0^\infty \frac{dr}{r} \left(P_{n_b, \kappa_b}(r) X_a^{(Q)}(r) - Q_{n_b, \kappa_b}(r) X_a^{(P)}(r) \right) \\
&\quad + \int_0^\infty \frac{dr}{r} \left(Y_a(r) + r V_{nuc}(r) \right) \left(P_{n_b, \kappa_b}(r) P_{n_a, \kappa_a}(r) + Q_{n_b, \kappa_b}(r) Q_{n_a, \kappa_a}(r) \right) - I(ab), \\
\frac{\epsilon_{ab}}{\bar{q}(b)} &= c \int_0^\infty \frac{dr}{r} \left(P_{n_a, \kappa_a}(r) X_b^{(Q)}(r) - Q_{n_a, \kappa_a}(r) X_b^{(P)}(r) \right) \\
&\quad + \int_0^\infty \frac{dr}{r} \left(Y_b(r) + r V_{nuc}(r) \right) \left(P_{n_b, \kappa_b}(r) P_{n_a, \kappa_a}(r) + Q_{n_b, \kappa_b}(r) Q_{n_a, \kappa_a}(r) \right) - I(ab),
\end{aligned} \tag{2.132}$$

denklemden ya da bunların farkından veya toplamından belirlenir.

Üçüncü seçenek, $n_L = 1$ olduğunda en iyi seviye (Optimal Level-OL) [8] şeklinde ve $n_L > 1$ olduğunda genişletilmiş iyi seviye (Extended Optimal Level-EOL) hesabını verir. n_L seçimindeki serbestlik, EOL hesaplamalarındaki enerji fonksiyonuna katkıda bulunan ASF'ler için, belirli durumlarda dikkate değer bir avantaj sağlayabilir. Optimizasyonun sadece, alınan n_L ASF'ler için uygulanmaktadır. Böylece yörüngeler, Hamiltonyen matris öz vektörleri tarafından üretilen diğer $(n_c - n_L)$ ASF'leri ile bağlantılı niceliklerin hesaplanmasındaki kaliteye aynı ölçüde sahip olamayacağı açıktır. (2.103) ve (2.116)'nın aynı anda çözümünün elde edilmesi, yukarıda anlatılan SCF yöntemine üç adım daha eklemek gereklidir:

a) d_{rs} katsayıları, $c_{\Gamma_i}^{tah}$ ($i=1, \dots, n_L$) karışım katsayıları vektörlerinin tahmini bir setinden hesaplanır.

b) (2.102) denklemi, $c_{\Gamma_i}^{yeni}$ ($i=1, \dots, n_L$) karışım katsayı vektörlerinin yeni bir tahmini setini hesaplamak için iyileştirmiş tahmini radyal fonksiyonlarla elde edilen Hamiltonyen kullanılarak çözülür.

c) Karışım katsayı vektörlerinin iyileştirilmiş bir tahmini seti

$$c_{\Gamma_i}^{tah} \rightarrow (1 - \xi_i) c_{\Gamma_i}^{yeni} + \xi_i c_{\Gamma_i}^{tah} \quad (2.133)$$

şeklinde elde edilir. Burada $0 \leq \xi_i < 1$ durdurucu veya hızlandırıcı faktörlerdir. Eğer geliştirilmiş tahmini set, orijinal tahmini set ile bir tolerans içerisinde uyuyorsa yakınsaklık elde edilmiş olur. Aksine a-c adımları tekrar uygulanır.

E/OL hesaplamaları için yakınsaklık, çoğunlukla zor elde edilir. Böyle durumlarda ortalama seviye (Average Level-AL) hesabı alternatif bir yöntem olarak izlenir. Ortalama seviye (AL) [8] işlemi, d_{rs} katsayılarını,

$$d_{rs} = \begin{cases} (2J_r + 1) / \sum_{t=1}^{n_c} (2J_t + 1), & r = s \\ 0, & \text{aksi taktirde} \end{cases} \quad (2.134)$$

elde etme gereğini ortadan kaldırır ($\bar{q}(a) \rightarrow q_{av}(a)$ olduğunda). Genişletilmiş ortalama seviye (Extended Average Level-EAL) hesabı, (2.133)'te $(2J_r + 1)$ AL durumundan farklıdır. Tekrarlamalı yöntemin a, b ve c adımları tekrar gereksiz hale gelir. E/AL seçeneklerinin amacı, CSF'lerin bir setinin ortalama enerjisi için en iyi olan bir dizi yörünge belirlemektir.

2.3.6. Çekirdek etkisi

Çekirdek hacim etkisinin yaklaşık iyileştirmeleri çekirdek dağılımının, küresel simetrik ($\rho_{\text{çek}}(r)$) olarak modellenmesiyle ve

$$-rV_{\text{çek}}(r) = 4\pi \left(\int_0^r \rho(s)s^2 ds + r \int_r^\infty \rho(s)s ds \right) \quad (2.135)$$

şeklinde hesaplanması ile elde edilebilir. Basit küresel top modeli,

$$\rho_{\text{çek}}(r) = \begin{cases} \rho_0, & r \leq r_{\text{çek}} \\ 0, & r > r_{\text{çek}} \end{cases} \quad (2.136)$$

şeklinde sadece $r_{\text{çek}}$ 'e bağlıdır.

$$\rho_{\text{çek}}(r) = \frac{\rho_0}{1 + e^{(r-c)/a}}, \quad a = t4 \ln 3 \quad (2.137)$$

şeklindeki iki-parametrelili Fermi dağılımında, c parametresi yarı-yük yarıçapıdır ($\rho_{\text{çek}}(r) = 0,5\rho_0$ için olan r değeri). Böylece bu çekirdek yarıçapının ölçümünü mümkün kılar. t , yüzey kalınlığı yani $\rho_{\text{çek}}(r)$ 'nin $0,9\rho_0$ 'dan $0,1\rho_0$ 'a düştüğü aralıktır.

v^2/c^2 'deki en düşük derece için enerji üzerine çekirdek sonlu-kütle etkileri ikiye ayrılır.

a) İndirgenmiş kütle düzeltmesi, elektronların bağımsız hareketlerinden kaynaklanır ve m_e elektron kütesinin, (atomik birimlerde 1'dir), μ indirgenmiş kütle ile yer değiştirmesi ile hesaplanır:

$$E_\Gamma \rightarrow \frac{\mu}{m_e} E_\Gamma, \quad \mu = \frac{m_e M_{\text{çek}}}{m_e + M_{\text{çek}}} \quad (2.138)$$

Burada $M_{çek}$, çekirdeğin kütlesidir.

b) Elektronların karşılıklı etkileşimleri nedeniyle ortaya çıkan düzeltmeler (takas ve kütle kutuplanma düzeltmesi) hesaplanmamaktadır.

2.3.7. Tersinir elektromanyetik etkileşim

Tek tersinir foton takasından dolayı 1 ve 2 olarak etiketlenen iki elektron arasındaki Coulomb etkileşimine en düşük dereceli düzeltme

$$\hat{H}^{Ters} = - \sum_{i,j=1}^3 \alpha_{1i} \alpha_{2j} \left(\delta_{ij} \frac{\cos(\omega R)}{R} + \frac{\partial^2}{\partial R_{1i} \partial R_{2j}} \frac{\cos(\omega R) - 1}{\omega^2 R} \right) \quad (2.139)$$

şeklinde. Burada $R = |r_1 - r_2|$ ve $\omega = |\epsilon_1 - \epsilon_2|/c$ 'dir. Uzun dalgaboyu limitinde, ($\omega \rightarrow 0$) bu, çok iyi bilinen Breit etkileşimine indirgenir. MCDF teorisine göre bu, matris elemanları katkıda bulunur [9, 10]:

$$H_{rs}^{Ters} = \sum_{abcd} \sum_{k\tau} V_{rs}^{k\tau}(abcd) S^{k\tau}(abcd), \quad \tau = 1, 2, 3, \dots, 6 \quad (2.140)$$

Burada altı tip $S^{kr}(abcd)$ radyal integrali oluşur bu integraller $\bar{R}^k(abcd; \omega)$ ve $\bar{S}^k(abcd)$ iki integralin birleşimiyle ifade edilebilir:

$$\begin{aligned} \bar{R}^k(abcd; \omega) &= \int_0^\infty dr \left[\rho_{bd}(r) \psi_k(\omega r) \frac{1}{r} \bar{Y}^k(ac; \phi_k; \omega; r) \right], \\ \bar{S}^k(abcd; \omega) &= \sum_1^k(abcd; \omega) - \sum_2^k(abcd; \omega), \\ \sum_1^k(abcd; \omega) &= \int_0^\infty dr \left[\rho_{bd}(r) \left(\frac{2k+1}{\omega r} \right)^2 \frac{1}{r} (\bar{Y}^{k-1}(ac; 1; 1; r) - \psi_{k+1}(\omega r) \bar{Y}^{k-1}(ac; \phi_{k-1}; \omega; r)) \right], \\ \sum_2^k(abcd; \omega) &= \int_0^\infty dr \left[\rho_{ac}(r) \left(\frac{\omega^2 r^2}{(2k+3)(2k-1)} \right) \psi_{k-1}(\omega r) \bar{Y}^{k+1}(bd; \phi_{k+1}; \omega; r) \right], \end{aligned}$$

$$\bar{Y}^k(ab; f; \omega; r) = \int_0^r ds \left[\rho_{ab}(s) \left(\frac{r}{s} \right)^k f(\omega s) \right], \quad (2.141)$$

$$\rho_{ab}(r) = P_{n_a \kappa_a}(r) Q_{n_b \kappa_b}(r), \quad \phi_k(z) = \frac{(2k+1)!!}{z^k} j_k(z), \quad \psi_k(z) = -\frac{z^{k+1}}{(2k-1)!!} y_k(z)$$

2.3.8. Işımalı düzeltmeler

Elektron-pozitron ve elektromanyetik alanlardaki akımlardan dolayı etkileşimlerin alınması, kuantum elektrodinamik (QED) ışımalı düzeltmeleri üretir. Basitçe öz enerji olarak bilinen, enerjiye baskın ışımalı düzeltme, bir elektronun, çekirdek ve diğer atomik elektronlardan kaynaklanan bir elektromanyetik alan ile etkileşimine en düşük dereceden bir değişikliklerle gerçekleşir. Yavaşça değişen $F_{n\kappa}(Z/c)$ fonksiyonu terimlerinde, hidrojen-benzeri sistemlerdeki öz enerji

$$E_{n\kappa}^{SE}(Z/c) = \frac{Z^4}{\pi c^3 n^3} F_{n\kappa}(Z/c) \quad (2.142)$$

şeklinde oluşur. Bu tek elektronlu sistemlerde 1s, 2s, 2p_{1/2} ve 2p_{3/2} durumları için $F_{n\kappa}(Z/c)$ tabloları, [10-12]'de verilmiştir. Öz enerjinin kabaca tahmini şu şekilde yapılır:

$$H_{rr}^{SE} = \sum_{a=1}^{n_w} q r(a) E_{n_a \kappa_a}^{SE}$$

$$E_{n_a \kappa_a}^{SE} = \frac{Z_a^{ek}}{\pi c^3 n^3} \begin{cases} F_{n_a \kappa_a}(Z_a^{ek}/c), & \text{1s, 2s, 2p}_{1/2} \text{ ve } 2p_{3/2} \text{ yörüngeleri için} \\ F_{2\kappa_a}(Z_a^{ek}/c), & \text{ns, np}_{1/2}, \text{ np}_{3/2} \text{ yörüngeleri için} \\ 0, & \text{aksi takdirde} \end{cases} \quad (2.143)$$

Elektron perdelemesi için kabaca doğru olan Z^{ek} 'in kullanımı, yörüngelerin neredeyse hidrojen benzeri olduğu durumlarda, iç tabakalar için aranan bir yoldur.

QED'ye dayalı hesaplamalar esas olarak Johnson ve çalışma arkadaşlarına aittir [13, 14]. Sayısal SCF potansiyelleri (Slater deęiş tokuş yaklaşımını kullanan relativistik teoriden (35)), Brown ve çalışma arkadaşları [15] tarafından küresel simetrik potansiyeller için kullanılan yöntemin genelleştirilmesinde yer almaktadır.

Önem sırasına göre bir sonraki düzeltme, vakum kutuplanma düzetmeleridir. En düşük derece için bu, sanal elektron-pozitron çiftleri tarafından perdeleme nedeniyle, çekirdek alanın kısa aralık deęişikliğidir. Sonlu çekirdek boyutunu dikkate alan ikinci ve dördüncü dereceden katkı potansiyellerinin ifadesi [16]'da bulunabilir. Bu potansiyellerden sadece

$$H_{rr}^{VP} = \sum_{a=1}^{n_w} q_r(a) \int_0^{\infty} dr V^{VP}(r) \left(P_{n_a \kappa_a}^2(r) + Q_{n_a \kappa_a}^2(r) \right) \quad (2.144)$$

şekli bu yöntemde kullanılmaktadır.

2.3.9. Açısal katsayılar

Coulomb etkileşimi için (2.113) ve (2.114)'teki $V_{rs}^k(abcd)$ konfigürasyon çiftlenim katsayıları

$$\sum (-1)^P S.R.C.X^k \quad (2.145)$$

ifadesine sahiptir. $(-1)^P S$ çarpanı, Pauli dışarlama ilkesinin uygulanmasından kaynaklanır ve tamamen $q_r(a)$ alt tabaka doluluk sayılarına bağlıdır. R , matris elemanında kutupsal açılar üzerinden integral alınırken ortaya çıkan bir açısal momentum yeniden çiftlenim katsayısını gösterir ve paylaşılan CSF'nin açısal momentum çiftlenim yapısı hakkında tüm bilgiyi içerir. C , kesirsel soyun dört tane bir-elektron katsayılarının çarpımıdır. X^k , ilgili radyal integralde gözüken yörünge işaretlemelerine ve k parametresine bağlı bir niceliktir. k parametresine bağlılık Legendre polinomları cinsinden $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^{-1}$ 'in standart açılımından ortaya çıkar.

Toplam, radyal matris elemanı etiketleri görünen aktif elektronlar için $|\gamma_r P J M\rangle$ CSF'ler $|\gamma_s P J M\rangle$ 'den silindiğinde katkıda bulunabilen tüm mümkün ana durumları kapsayana kadar devam eder.

$V_{rs}^k(abcd)$ katsayısının yapısı, daha karmaşık ifadelerle yalnızca yer değişiminde farklı olmak üzere, çok benzerdir. $\sum_i \hat{f}^k(\mathbf{r}_i)$ tip işlemciler, $|\gamma_r P J M\rangle$ ve $|\gamma_s P' J' M'\rangle$ şeklinde, matris elemanlarına sahiptir. Burada $\hat{f}^k(\mathbf{r})$, k ranklı indirgenmemiş tensör işlemcisidir. Bu işlemciler

$$\langle \gamma_r P J M | \sum_i \hat{f}^k(\mathbf{r}_i) | \gamma_s P' J' M' \rangle = \sum T_{rs}^k(ab) \left(n_a \kappa_a | \hat{f}^k(r) | n_b \kappa_b \right) (-1)^{J-M} \begin{pmatrix} J & k & J' \\ M & q & -M' \end{pmatrix} \quad (2.146)$$

olarak yazılır. Burada, $(n_a \kappa_a | \hat{f}^k(r) | n_b \kappa_b)$, a ve b yörüngeleri arasındaki bir radyal matris elemanıdır. (2.114)'teki $T_{rs}(ab)$ katsayıları, skaler işlemcilere uygun olarak, $k=0$ olmak üzere özel durumlardır.

2.4. Enerji Seviyeleri Arasındaki Geçişler

Bir atomun enerji seviyeleri genellikle yarı ömrü sonsuz kararlı haller olarak kabul edilir. Bir elektromanyetik alan varlığında bu durum değişebilir. Soğurulan foton, atomları ve iyonları daha yüksek seviyelere uyarır. Uyarılmış sistem manyetik alan yokluğunda kendiliğinden ışıma yapabilir.

İki hal arasındaki elektromanyetik geçiş, karşılık gelen fotonun açısal momentum ve paritesiyle belirlenir. k soğurulan veya yayınlanan fotonun açısal momentumu olmak üzere $\pi = (-1)^k$ pariteye sahipse geçişe 'elektrik çok-kutuplu (Ek) geçiş'; foton $\pi = (-1)^{k+1}$ pariteli ise geçişe 'manyetik çok-kutuplu (Mk) geçiş' denir. MCHF yönteminde birçok kutup, paritesi π ve rankı k olan $O_q^{\pi(k)}$ küresel tensör işlemcisi ile tanımlanır. Bu elektrik ve manyetik geçişler için sırasıyla,

$$E_q^{(k)} = \sum_{i=1}^N r^k(i) C_q^{(k)}(i) \quad (2.147)$$

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

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

$$MA_q^{(k)} = \sum_{i=1}^N r^{k-1}(i) \left[\mathbf{C}^{(k-1)}(i) \times \mathbf{I}^{(1)}(i) \right]_q^{(k)} \quad (2.148)$$

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

olarak tanımlanır. Bir $\gamma' J' M'$ üst seviye ve bir γJM alt seviye arasındaki geçişi tanımlamak için $I_q^{\pi k}$ geçiş integrali ve $s^{\pi k}$ bileşen şiddeti sırasıyla

$$I_q^{\pi k}(\gamma JM, \gamma' J' M') = \langle \gamma JM | O_q^{\pi(k)} | \gamma' J' M' \rangle \quad (2.149)$$

$$s^{\pi k}(\gamma JM, \gamma' J' M') = \sum_q \left| I_q^{\pi k}(\gamma JM, \gamma' J' M') \right|^2 \quad (2.150)$$

şeklinde tanımlanır. Yalnızca M kuantum sayılarında katlı olan seviyeli sistemlerle ilgilenildiğinde gözlenebilen nicelik böylece bu kuantum sayıları üzerinden bileşen şiddetlerinin toplamı olacağından çizgi şiddeti

$$S^{\pi k}(\gamma J, \gamma' J') = \sum_{M, M', q} \left| \langle \gamma JM | O_q^{\pi(k)} | \gamma' J' M' \rangle \right|^2 \quad (2.151)$$

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

$$S^{\pi k}(\gamma' J', \gamma J) = \left| \langle \gamma J \| \mathbf{O}^{\pi(k)} \| \gamma' J' \rangle \right|^2 \quad (2.152)$$

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

$$A^{\pi k}(\gamma' J', \gamma J) = 2C_k \left[\alpha(E_{\gamma' J'} - E_{\gamma J}) \right]^{2k+1} \frac{S^{\pi k}(\gamma' J', \gamma J)}{g_{J'}} \quad (2.153)$$

ile verilir. $g_{J'}$ üst seviyenin istatistiksel ağırlığı ve C_k

$$g_{J'} = 2J' + 1 \quad (2.154)$$

$$C_k = \frac{(2k+1)(k+1)}{k((2k+1)!!)^2} \quad (2.155)$$

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

$$f^{\pi k}(\gamma J, \gamma' J') = \frac{1}{\alpha} C_k \left[\alpha(E_{\gamma' J'} - E_{\gamma J}) \right]^{2k-1} \frac{S^{\pi k}(\gamma J, \gamma' J')}{g_J} \quad (2.156)$$

şeklindeir. Benzer bir ifade $\gamma' J'$ ile γJ yer değiştirmek suretiyle yayınlama şiddeti için de elde edilir. Bu durumda sadece işaret değişikliği yeterlidir. Burada önemli olan gf ağırlıklı salıncı şiddetidir. Ağırlıklı salıncı şiddeti

$$gf^{\pi k}(\gamma J, \gamma' J') = g_J f^{\pi k}(\gamma J, \gamma' J') \quad (2.157)$$

ile verilir.

MCDF yönteminde \bar{M}_{ab} elektrik ve manyetik geçişler, Grant [17] tarafından tanımlanan ışımalı geçiş integralleri cinsinden

$$\begin{aligned}
\bar{M}_{ab} &= \begin{cases} \bar{M}_{ab}^e + [L+1]/L]^{1/2} \bar{M}_{ab}^I, & \text{elektrik dipol geçişleri için} \\ \bar{M}_{ab}^m, & \text{manyetik multipol geçişleri için} \end{cases} \\
\bar{M}_{ab}^e &= -i \left[\left(\frac{L}{L+1} \right)^{1/2} [(\kappa_a - \kappa_b) I_{L+1}^+ + (L+1) I_{L+1}^-] - \left(\frac{L+1}{L} \right)^{1/2} [(\kappa_a - \kappa_b) I_{L-1}^+ - L I_{L-1}^-] \right], \\
\bar{M}_{ab}^I &= -i \left\{ [(\kappa_a - \kappa_b) I_{L+1}^+ + (L+1) I_{L+1}^-] + [(\kappa_a - \kappa_b) I_{L-1}^+ - L I_{L-1}^-] - (2L+1) J_L \right\}, \\
\bar{M}_{ab}^m &= -i^{L+1} \frac{(2L+1)}{[L(L+1)]^{1/2}} (\kappa_a + \kappa_b) I_L^+, \\
I_L^\pm &= \int_0^\infty dr j_L(\omega r / c) (P_{n_a \kappa_a}(r) Q_{n_b \kappa_b}(r) \pm Q_{n_a \kappa_a}(r) P_{n_b \kappa_b}(r)), \\
J_L &= \int_0^\infty dr j_L(\omega r / c) (P_{n_a \kappa_a}(r) P_{n_b \kappa_b}(r) \pm Q_{n_a \kappa_a}(r) Q_{n_b \kappa_b}(r))
\end{aligned} \tag{2.158}$$

şeklinde ifade edilir. $\hat{\mathbf{O}}_M^{(L)}$, L dereceli çok kutuplu ışınım alanı işlemcisi ile etkilenen bir ASF Γ_i 'den bir ASF Γ_j 'ye geçiş için salıncı şiddeti

$$\begin{aligned}
f_{i \rightarrow j} &= \frac{\pi c}{(2L+1)\omega^2} \left| \langle \Gamma_i P_i J_i | \hat{\mathbf{O}}^{(L)} | \Gamma_j P_j J_j \rangle \right|^2 \\
&= \frac{\pi c}{(2L+1)\omega^2} \sum_{r,s} c_{r\Gamma_i} c_{r\Gamma_j} \langle \gamma_r P_r J_r | \hat{\mathbf{O}}^{(L)} | \gamma_s P_s J_s \rangle \\
&= \frac{\pi c}{(2L+1)\omega^2} \sum_{a,b} d_{ab}^L(rs) \langle n_a \kappa_a | \hat{\mathbf{O}}^{(L)} | n_b \kappa_b \rangle
\end{aligned} \tag{2.159}$$

şeklinde tek elektronlu geçiş integrallerinin bir toplamıdır. Brink ve Satchler [18] tipi indirgenmiş matris elemanları kullanılarak

$$\langle n_a \kappa_a | \hat{\mathbf{O}}^{(L)} | n_b \kappa_b \rangle = \left(\frac{(2j_b+1)\omega}{\pi c} \right)^{1/2} (-1)^{j_a-1/2} \begin{pmatrix} j_a & L & j_b \\ 1 & 0 & -1 \\ 2 & & 2 \end{pmatrix} \bar{M}_{ab} \tag{2.160}$$

elde edilir.

Tekli çizgi özelliklerinin hiçbirinin ölçümü kolay olmadığından çoğu deneyler üst seviyenin yarı ömrünü verir. Bu durumda, tüm düşük seviyelere çok-kutuplu geçişler üzerinden toplam alınmalıdır. Böylece bir seviyenin yarı ömrü

$$\tau_i = \frac{1}{\sum_i A_{is}} \quad (2.161)$$

şeklinde olur.

2.4.1. Işımalı geçişler için kesin ve yaklaşık seçim kuralları

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

$$\mathbf{E}^{(k)} : \frac{\pi'}{\pi} = (-1)^k, \quad \mathbf{M}^{(k)} : \frac{\pi'}{\pi} = (-1)^{k-1} \quad (2.162)$$

olduğu görülür. Yani, E1 dipol işlemcisi farklı pariteli halleri, M1 manyetik dipol ve E2 elektrik kuadrupol işlemcileri ise aynı pariteli halleri dikkate alır.

Verilen bir ASF'ye ait bir açılımdaki tüm CSF'ler için ortak olan diğer bir özellik toplam J değeri içindir. Bunun için tüm çok-kutup işlemcileri

$$\Delta J = J - J' = 0, \pm 1, \dots, \pm k, \quad k \leq J + J' \quad (2.163)$$

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

CSF'lerin farklı açısal momentumları, geçiş katılıp katılmamalarına göre aktif veya pasif olarak sınıflandırılabilirler. Pasif momentumlar, aktifler (2.163)'teki kurala

göre oluşurken değişmeyecektir. Dikkate alınacak ilk kural, uzaysal ve spin uzayını temsil eden farklı işlemcilerin ranklarına bağlıdır. $\mathbf{E}^{(k)}$ işlemcisi spinden bağımsız ve spinler daima elektrik çok-kutup geçişler için pasiftir. Böylece spin için seçim kuralı,

$$\mathbf{E}^{(k)} : \Delta S = 0 \quad (2.164)$$

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

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

$$\mathbf{E}^{(k)} : \Delta L = 0, \pm 1, \dots, \pm k, \quad k \leq L + L' \quad (2.165)$$

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

$$\mathbf{MA}^{(k)} : \Delta S = 0, \Delta L = 0, \pm 1, \dots, \pm k, \quad k \leq L + L' \quad (2.166)$$

$$\mathbf{MB}^{(k)} : \Delta S = 0, \pm 1, \Delta L = 0, \pm 1, \dots, \pm(k-1), \quad k-1 \leq L + L' \quad (2.167)$$

şeklinde birleştirilebilir.

2.5. Kullanılan Programların Yapısı

2.5.1. MCHF paketinin yapısı

MCHF atomik yapı paketi [4] her biri hesabın belirli bir kısmını yapan bir grup (GENCL, NONH, HF, MCHF, CI, BREIT, MLTPOL ve LSTR/LSJTR) programdan

oluşmaktadır. Her program kendinden önce çalıştırılan program veya programların çıkış dosyalarını kullanarak kullanıcının istediği hesabı gerçekleştirir. Hesaplama adımları şöyle özetlenebilir:

1) İlk olarak konfigürasyon listesi oluşturulur. Bu liste, referans olarak verilen bir takım için oluşturulabileceği gibi, bu takıma ilave referans takımdan belirli yer değiştirmelerle de oluşturulabilir.

2) Relativistik olmayan Hamiltonyenin açısız integralleri hesaplanır. Slater integralleri ve kinetik integrallerin lineer birleşimi olarak relativistik olmayan Hamiltonyenin matris elemanlarını tanımlamak için gerekli olan açısız integraller hesaplanır. Verilen bir konfigürasyon hal listesindeki bir tabakada s , p ve d elektronlarının herhangi bir sayısı izinliken $l \geq 3$ 'lü tabaka için iki elektrondan ve iki boşluktan fazlası izinli değildir.

3) Oluşturulan integral listesi kullanılarak MCHF yaklaşıklığında relativistik olmayan radyal fonksiyonları ve açılım katsayıları hesaplanır. Bu aşamada önceden hesaplanmış bir Hartree-Fock hesabı başlangıç olarak kullanılabilir.

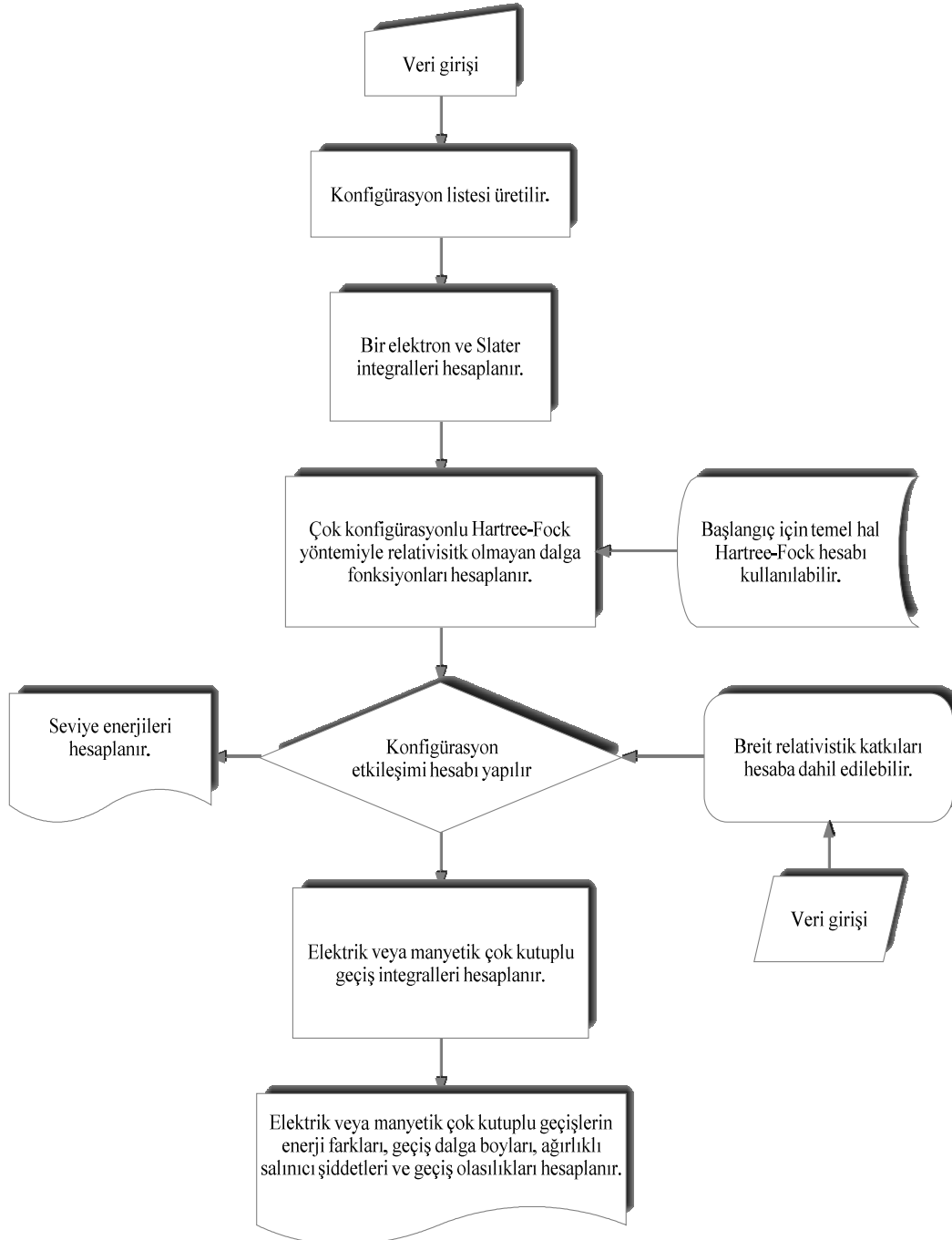
4) Breit-Pauli relativistik etkileri hesaba katılmak istenirse Breit-Pauli Hamiltonyenin matris elemanları için gerekli açısız integraller hesaplanır. Verilen bir konfigürasyon hal listesi için tüm matris elemanları veya seçilenleri hesaplanabilir. Yörüngelerin ortogonal olduğu kabul edilir. LSJ yaklaşıklığında, dalga fonksiyonu farklı LS terimli konfigürasyon hal fonksiyonlarına açılır.

5) Konfigürasyon etkileşimi hesabı yapılır. Hem relativistik olmayan hem de Breit-Pauli yaklaşıklığında bir etkileşim matrisinin özdeğer ve özvektörleri hesaplanır. Ayrıca, kütle polarizasyonu gradyant veya Slater integrali şeklinde kullanılarak elde edilebilir.

6) Ele alınan seviyeler arasındaki geçişler incelenmek istenirse öncelikle geçiş işlemcilerinin matris elemanları için gerekli açısız integraller hesaplanır. Geçiş matris elemanlarıyla birlikte aynı veya farklı pariteli haller arasında verilen dalga

fonksiyonlarıyla geçiş enerji farkı, dalga boyu, salıncı şiddeti ve geçiş olasılığı hesaplanır.

MCHF atomik yapı paketinin özet gösterimi Şekil 2.1'deki gibidir.



Şekil 2.1. MCHF atomik yapı paketinin özet gösterimi

2.5.2. GRASP programının yapısı

GRASP programı [3] her biri hesabın belirli bir kısmını yapan oniki (GRASP, DATAIN, DATNR, NJGRAF, MCP, CFP, MCT, MCBP, MCDF, SCF, BENA ve OSCL) alt modül programdan oluşmaktadır. Hesaplama adımları şöyle özetlenebilir:

1) Konfigürasyon listesi oluşturulur. Kullanıcı tarafından verilen konfigürasyon listesi ile *jj*-çiftlenimiyle tüm mümkün CSF'ler oluşturulur. Bu CSF'ler istenirse *LS*-çiftlemine dönüştürülebilir.

2)Relativistik Hamiltonyenin açısal integralleri hesaplanır.

3)Hamiltonyendeki bir ve iki elektron integralleri (açık tabakalar için $V_{rs}^k(abcd)$ ve $T_{rs}(ab)$) katsayıları hesaplanır. Bu katsayılar çekirdek yüküne bağlı olmadığı için benzer elektron dizilimine sahip atomlar için aynı katsayı dosyası kullanılabilir.

4) Radyal dalga fonksiyonları hesaplanır. Bu fonksiyonlar belirli model fonksiyonlardan (perdelenmiş Thomas-Fermi ve çekirdek Coulomb potansiyelleri) üretilir veya baz CSF süreçlerinden elde edilir. Aksi belirtilmedikçe çekirdek yükü iki parametrelidir (çekirdek RMS yarıçapı ve yüzey kalınlığı) Fermi yük dağılımı olarak alınır. Yörüngeler hesaplanırken daha önceden hesaplanmış bir dosyadan okutulabilir. Yeni hesap yapıyorsa yörüngelerin ilk tahminleri için Thomas-Fermi tipi dalga fonksiyonları kullanılır. Hesap gerçekleştirilemezse Coulomb tipi dalga fonksiyonları kullanılır. Thomas-Fermi ya da Coulomb dalga fonksiyonları kullanıldığında perdeleme sabiti belirtilmezse değer Slater kurallarına göre belirlenir. Relativistik olmayan yörüngeler kullanılmışsa, $j=1+1/2$ ve $j=1-1/2$ için perdeleme sabiti aynıdır. Her yörüngenin değiş-tokuş potansiyeli SCF sürecinde 0-1 aralığındaki bir değişkenle çarpılır. Çözüm elde edilemezse değiş-tokuş faktörü sonuç elde edilene kadar azaltılır. Potansiyeller iyileştirilmiş dalga fonksiyonunun önceki tahminleriyle değiş-tokuş potansiyelini değiştirerek, dalga fonksiyonundaki düğümler nedeniyle gerektiği yerde düzeltilerek ve bu potansiyelin kesrini potansiyele ekleyerek işler.

GRASP paketiyle üç çeşit MCDF hesabı yapmak mümkündür:

1) (E)AL, Ortalama veya genişletilmiş ortalama seviye ((Extended) Average Level) hesabı: Bazı sistemlerdeki (E)AL hesapları genellikle çok daha karmaşık hesaplamaların başlangıç noktası olarak kullanılır. Bir konfigürasyon etkileşme hesabı için yörüngelerin bir referans setini veya (E)OL hesaplamaları için başlangıç tahminlerini sağlamanın yanında atom veya iyonlar için Dirac-Fock ve ortalama konfigürasyon dalga fonksiyonları ve özelliklerini elde etmek için kullanılır. Tüm CSF'lerin ağırlıklı ortalama enerjileri iyileştirilir.

2) (E)OL, En iyi veya genişletilmiş en iyi seviye ((Extended) Optimal Level) hesabı: Küçük bir grubu için kesin bilgi elde etmek istendiğinde (E)OL yöntemi en iyi sonuçları verir. Hal veya küçük grup hallerin karşılıklı etkileşme enerjisi gerektiğinde muhtemelen kullanılacak en iyi yöntemdir. Kullanıcı tarafından belirlenen bir veya daha fazla ASF'nin enerjisi iyileştirilir.

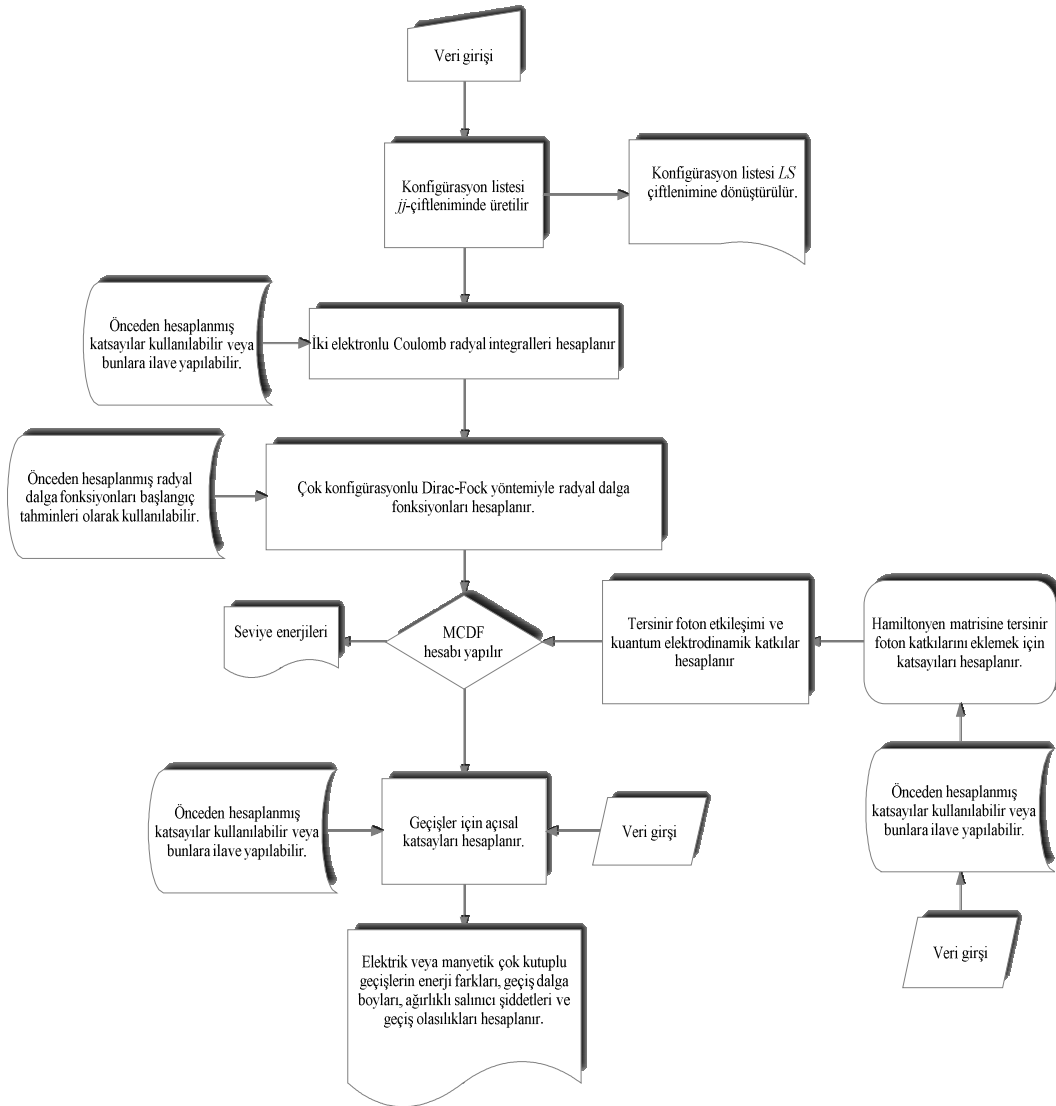
3) CI, Konfigürasyon etkileşimi (Configuration Interaction): (E)OL hesaplamaları, verilen CSF takımları ile yapılan CI hesaplamalarından daha fazla belirli durum karşılıklı etkileşme enerjisi vermesine rağmen, bu hesaplamalar SCF durumunda çok daha fazla zaman harcar ve yakınsaklık hatası vermeye çok daha yatkındır. Bu, özellikle optik spektrumda geçiş boyutlarının hesabındaki gibi, hallerin geniş grubunda bilgi gerektirdiği durumdur. Hamiltonyen iterasyona girmeden köşegenleştirilir.

Tersinir foton etkileşimi ve kuantum elektrodinamik etkiler hesaba katılacaksa öncelikle bu etkileşimler için kullanılacak radyal integral katsayıları hesaplanır. Tersinir etkileşim matrisi CSF bazında hesaplanır ve QED düzeltmelerinin tahminleri yapılır. QED düzeltmeleri eklenmeden önce Dirac-Coulomb ASF bazında tersinir etkileşim matrisi köşegenleştirilir; sonra düzeltmeler katkı olarak veya QED düzeltmeleriyle Hamiltonyenin yeniden köşegenleştirilmesiyle elde edilir.

Işımalı geçişler hesaplanmak istenirse, öncelikle gerekli bir parçacık küresel tensörlerin indirgenmiş matris elemanları hesaplanır. Sonrasında MCDF hesabı

sonucu veya bunların Breit ve QED katkılı ASF'lerinin seçilenleri arasındaki ışımalı geçiş özellikleri ve atomik hallerin ışımalı yarı ömürleri hesaplanır.

GRASP programının özet gösterimi Şekil 2.2'deki gibidir.



Şekil 2.1. GRASP programının özet gösterimi

BÖLÜM 3. HESAPLAMA SONUÇLARI

Ac I, Ac II, Ac III, Th IV, Pa I, Pa II, Pa III, Pa IV, Pa V, U V, U VI ve Lr I'in seviye yapıları MCHF [1] ve MCDF [2, 3] yöntemleriyle incelendi. İncelenen seviyeler arasındaki elektrik dipol (E1), elektrik kuadrupol (E2) ve manyetik dipol (M1) geçişleri hesaplandı. Her iki yöntemle yapılan hesaplamalarda karşılıklı elektron etkileşimleri ve değişik derecelerde relativistik düzeltmeler dikkate alındı.

MCHF yöntemi kullanılarak yapılan hesaplamalarda alınan konfigürasyonlar için dalga fonksiyonları, konfigürasyonların baskınlığını belirleyen karışım katsayıları ve relativistik olmayan enerjiler hesaplandı. Bir sonraki adımda Breit-Pauli relativistik etkileri dikkate alındı. Relativistik katkılarla beraber geçişlere ait dalga boyları, ağırlıklı salıncı şiddetleri ve geçiş olasılıkları incelendi. MCDF yöntemi kullanılarak yapılan hesaplamalarda ise seçilen konfigürasyonlar için dalga fonksiyonları, karışım katsayıları ve relativistik enerjiler elde edildi. Bu sonuçlara tersinir foton etkileşimi (Breit) ve kuantum elektrodinamik (QED) etkiler katıldı. Elde edilen enerji değerleriyle incelenen seviyeler arasındaki geçiş enerjileri, dalga boyları, salıncı şiddetleri, geçiş olasılıkları (hızı) gibi ışınım parametreleri elde edildi.

Yapılan hesaplamalar sonucunda elde edilen verilerin çokluğu nedeniyle sınırlı miktarda seviye enerjileri ve geçişlere ait ışınım parametreleri tablolarda verildi. Genellikle iyonlaşma enerjisi altında olan seviyeler dikkate alınacak şekilde bir kısıtlama yapıldı. Ulaşılabilir kaynaklarda yer alan iyonlaşma enerjileri Tablo 3.1'de sunulmaktadır. Işınım parametrelerinin verildiği tablolarda, enerjileri verilen seviyeler arasındaki geçişler dikkate alınmaktadır. Ancak karşılaştırma değerlerinin az olması durumunda iyonlaşma enerjisi üzerinde bir seviye ya da bu seviyeye ait ışınım parametresi varsa onlar da tablolara dahil edildi.

Tablo 3.1. İncelenen aktinit atomları ve iyonlarının iyonlaşma enerjileri (cm⁻¹)

Element	İyonlaşma Enerjileri
Ac I	5,08 ^{a1} ; 5,14 ^{a2} ; 5,07 ^{a3} ; 5,72 ^{a4} ; 5,29 ^{a5} ; 5,04 ^{a6} ; 5,06 ^{a7} ; 4,97 ^{a8} ; 5,31 ^{c1} ; 5,21 ^{c2} ; 5,17 ^d ; 5,21 ^{e1} ; 5,38 ^{e2} ; 41700 ^f ; 45849 ^g ; 45730 ^h ; 5,17 ⁱ¹ ; 5,13 ⁱ²
Ac II	11,56 ^{a1} ; 11,63 ^{a2} ; 11,45 ^{a3} ; 11,93 ^{a4} ; 11,49 ^{a6} ; 11,50 ^{a7} ; 11,54 ^{a8} ; 11,78 ^b ; 11,91 ^{c1} ; 11,90 ^{c2} ; 12,1 ^d ; 11,60 ^{i1, i2}
Ac III	17,43 ^{a1} ; 17,48 ^{a2} ; 17,28 ^{a3} ; 16,93 ^{a6} ; 17,24 ^{a7} ; 17,29 ^{a8} ; 17518 ^{c1} ; 17512 ^{c2} ; 0,609991 ^{k1} ; 0,640587 ^{k2} ; 17,39 ⁱ¹ ; 17,37 ⁱ²
Th IV	28,97 ^{a1} ; 29,04 ^{a2} ; 28,83 ^{a3} ; 27,93 ^{a6} ; 28,06 ^{a7} ; 27,78 ^{a8} ; 28,65 ^b ; 0,986371 ^{k1} ; 1,027822 ^{k2} ; 28,45 ⁱ¹ ; 28,21 ⁱ²
Pa I	5,53 ^{a1} ; 5,58 ^{a2, a5} ; 5,52 ^{a3} ; 6,13 ^{a4} ; 5,66 ^{a6} ; 5,89 ^b ; 5,96 ^{e1} ; 47500 ^f ; 51485 ^g ; 46466 ^h ; 5,81 ⁱ¹ ; 5,76 ⁱ²
Pa II	12,27 ^{a1} ; 12,32 ^{a2} ; 12,07 ^{a3} ; 12,39 ^{a4} ; 12,85 ^{a6} ; 12,75 ^{a7} ; 11,96 ^{i1, i2}
Pa III	18,15 ^{a1} ; 18,20 ^{a2} ; 18,05 ^{a3} ; 17,61 ^{a6} ; 17,67 ^{a7} ; 17,73 ⁱ¹ ; 18,65 ⁱ²
Pa IV	30,95 ^{a1} ; 31,03 ^{a2} ; 30,83 ^{a3} ; 32,26 ^{a6} ; 32,37 ^{a7} ; 32,12 ^{a8} ; 31,24 ⁱ¹ ; 30,91 ⁱ²
Pa V	1,585915 ^{k1} ; 1,628623 ^{k2}
U V	45,19 ^{j1} ; 4732 ^{j2}
U VI	62,20 ^{j1} ; 60,83 ^{j2} ; 2,250587 ^{k1} ; 2,294191 ^{k2}
Lr I	4,54 ^{a1} ; 4,62 ^{a2} ; 4,55 ^{a3} ; 5,28 ^{a6, a7} ; 4,78 ⁱ¹ ; 4,71 ⁱ²

^{a1-8} Liu ve çalışma arkadaşları [34] (eV biriminde),

^b Energy levels and atomic spectra of actinides [106] (eV biriminde) (Bu değerlere [34]'ten de ulaşılabilir),

^{c1, c2} Eliav ve çalışma arkadaşları [35] (eV biriminde),

^d Moore [35]'den ulaşılabilir (eV biriminde),

^{e1, e2} Roos ve çalışma arkadaşları [38] (eV biriminde),

^f Sugar [42, 43] (eV biriminde),

^g Köhler ve çalışma arkadaşları [45] (eV biriminde),

^h Rajnak ve Shore [46],

^{i1, i2} Cao ve Dolg [48] (eV biriminde),

^{j1, j2} Rashid ve çalışma arkadaşları [91] (eV biriminde)

^{k1, k2} Migdalek ve çalışma arkadaşları [56] (atomik birimlerde),

Enerji seviyeleri tablolarında enerjiler cm⁻¹ birimindedir. Bu tablolarda ilk sütun seviyeyi (konfigürasyon ve terimi) ikinci ve üçüncü sütun MCHF yöntemiyle hesaplanan relativistik olmayan enerjii (MCHF) ve relativistik enerjii (+BP) dördüncü ve beşinci sütun MCDF yöntemiyle hesaplanan relativistik enerjii (MCDF) ve bunun tersinir foton etkileşimi ve QED katkılarının hesaba dahil edilmiş halini (+B+QED), altıncı sütun ulaşılabilir kaynaklardaki diğer çalışmalardan derlenen karşılaştırma değerlerini, son sütun ise MCDF yöntemiyle yapılan hesaplamalarda elde edilen ilk iki konfigürasyon katkısını vermektedir. Seviye enerjileri tablolarında konfigürasyonlar düşük enerjiden itibaren artan şekilde, terimler öncelikle çokluğu büyükten küçüğe sonra toplam yörünge açısal momentumu büyükten küçüğe ve son olarak toplam açısal momentumu küçükten büyüğe doğru olacak şekilde sıralanmıştır.

Geçişlere ait tablolarındaki sütunlarda sırasıyla, geçişler MCHF ve MCDF yöntemleriyle elde edilen λ dalga boyları, gf ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve A geçiş olasılıkları sunulmaktadır. Mevcut kaynaklarda sunulan ışınım parametrelerine ait karşılaştırma değeri varsa bunlar hesaplanan değerin hemen yanında yer almaktadır. Işınım parametreleri MCHF yöntemiyle hesaplanırken Breit-Pauli etkileri, MCDF yöntemiyle hesaplanırken de tersinir foton etkileşimi ve QED katkıları dikkate alınmaktadır. Ayrıca her iki yöntemle sunulan parametreler (ağırlıklı salınıcı şiddeti ve geçiş olasılığı) uzunluk şeklinde verilmektedir.

Enerji ve ışınım parametreleri tablolarında yalnızca tek pariteli seviyeler üst indis “0” ile işaretlenmiştir. Çift parite için herhangi bir işaretleme kullanılmamıştır. Aynı zamanda tablolarındaki parantez içlerinde verilen değerler ($A \times 10^B = A(B)$) on’un kuvvetlerini, göstermektedir. Diğer çalışma değerleri üst indis şeklindeki harflerle işaretlenmiş ve kaynakları tablo altlarında belirtilmiştir. Diğer çalışmalardan alınan karşılaştırma değerleri bu çalışma sonucu ile elde edilenlerle aynı birimde olmadığı durumlarda bu değerler orijinal halleriyle sunulmakta ve birimleri tablo sonundaki kaynak gösteriminde belirtilmektedir.

3.1. Ac I için Enerji ve Işımalı Geçiş Parametreleri Hesapları

Ac I için yapılan ilk çalışmalar, düşük seviyeler arasındaki elektrik dipol geçişlerinin dalga boyları ve soğurma spektrumunun deneysel olarak gözlenmesidir [19, 20]. Bu çalışmalardan elde edilen sonuçlar Sansonetti ve Martin’in [39] nötral ve tekli uyarılmış ($Z=1-99$) atomlar için hazırladığı geniş çaplı bir derlemede de yer almaktadır. Sonraki mevcut çalışmalarda açık tabakalı d elementlerinin fiziksel özellikleriyle aktinidinkilerinin karşılaştırması, düşük seviyeler arasındaki enerji farkı iyileştirmeleri ve elektrik dipol kutuplaşmaları ile ilgili incelemeler yer almaktadır [21, 25]. Mevcut kaynaklarda nötral aktinyumun ilk elektronik yapı ve enerji hesaplamaları Mann ve Desclaux’a aittir [26, 27]. Sonraki senelerde Ac I’i içeren çalışmalarda Slater-Condon teorisi, genelleştirilmiş en küçük kareler ve relativistik çok parçacık katkı yöntemi, çeşitli yerel yoğunluk yaklaşıklıkları, yoğunluk fonksiyonu teorisi, basit küresel kabuk çözümleri, temel kuantum mekaniksel yöntemler, relativistik katlı küme, Dirac-Fock, relativistik etkin öz

potansiyeli, yarı deneysel Hartree-Fock ve ikinci merteye katkı yöntemleri kullanıldı [28-38, 40]. Nötral aktinyumun iyonlaşma enerjisi ise basit küresel kabuk çözümleri, rezonans iyonlaşma kütle spektroskopisi ve temel kuantum mekaniksel yöntemler ile hesaplandı [41-48].

3.1.1. Enerji seviyeleri hesapları

Nötral aktinyum, [Ra] özü dışında üç elektrona ve 5f tabakasını içermeyen $6d7s^2$ $^2D_{5/2}$ taban hal konfigürasyonuna sahiptir. Bu atom için yapılan hesaplama da, aktinitlerde önemi kesin olarak bilinen 5f ve yine önemli bir diğer tabaka olan 5g'nin seviye yapısına katkısını incelemek için üç aşamalı olarak gerçekleştirilmiştir. Her bir aşamada kullanılan konfigürasyon takımları Tablo 3.2'de verilmektedir. İlk aşamada 6d, 7s, 7p, 8s ve 8p tabakalarının değerlik-değerlik karşılıklı etkileşimine göre hazırlanmış A konfigürasyon takımı ele alınmıştır. İkinci aşamada A konfigürasyon takımına 5f yörüngesini içeren konfigürasyonlar (çift parite için $5f7s7p$, $5f7s7p$, $5f^26d$, $5f7p8s$ ve $5f8s8p$ tek parite için $5f6d7s$, $5f6d7s$, $5f7s^2$, $5f6d^2$ ve $5f7d^2$) ilave edilerek B konfigürasyon takımı oluşturuldu. Son aşamada ise B konfigürasyon takımına çift parite için $5g7s^2$, tek parite için $5g^27p$ ve $5g7s7p$ konfigürasyonları katılarak C konfigürasyon takımı elde edildi. Her bir konfigürasyon takımı için (MCHF) relativistik olmayan enerji ve relativistik enerji (+BP) hesabı yapılmış ve A, B ve C konfigürasyon takımlarıyla sırasıyla 102, 488 ve 940 seviye elde edildi. Bu çalışmada yalnızca C konfigürasyon takımıyla elde edilen sonuçlar Tablo 3.3'te sunulmaktadır. A, B ve C hesaplarına ait verilere [129]'dan da ulaşılabilir.

Sonuçlar değerlendirildiğinde relativistik hesabın, relativistik olmayan hesaba göre karşılaştırma değerleriyle çok daha uyumlu olduğu, eklenen 5f ve 5g konfigürasyonlarının özellikle düşük seviyeleri iyileştirdiği gözlenmiştir. Örneğin ilk uyarılmış $6d7s^2$ $^2D_{5/2}$ seviyesi A, B ve C çalışmalarında sırasıyla $3271,59 \text{ cm}^{-1}$, $2571,84 \text{ cm}^{-1}$ ve $2830,00 \text{ cm}^{-1}$ değerlerini almaktadır. Mevcut kaynaklarda bu seviyeye ait değer $18308-2338 \text{ cm}^{-1}$ aralığında değişmektedir. Bu iyileşme tek paritenin $6d7s(^3D)7p$ $^4F_{3/2}$ en düşük seviyesinde daha da iyi gözlenmektedir. Meggers [20] deneysel çalışmasında bu seviyeye ait enerji değerini $13712,90 \text{ cm}^{-1}$

Tablo 3.2. Ac I'e ait hesaplamalar için kullanılan konfigürasyon takımları

Çalışma	Cift Parite	Tek Parite
MCHF Yöntemi		
A	6dns ² , 6d ² ns, 6dnp ² , 7snp ² , np ² 8s (n=7, 8), 7s ² 8s, 7s8s ² , 6d ³ , 6d7s8s, 6d7p8p, 7s7p8p, 7p8s8p	6d7snp, 6d ² np, 7s ² np, np ³ , np8s ² (n=7, 8), 7s7p8s, 6d7p8s, 6d8s8p, 7s8s8p, 7p ² 8p, 7p8p ²
B	A+5f7snp (n=7, 8), 5f ² 6d, 5f7p8s, 5f8s8p	A+5f6dns (n=7, 8), 5f7s ² , 5fnd ² (n=6, 7)
C	B+5g7s ² , 5g6d7s, 5g6d ²	B+5g6d7p, 5g7s7p
MCDF Yöntemi		
	6d7s ² , 6d ² 7s, 7s ² 8s, 6d ³ , 7s7p ² , 6d ² 8s, 6d7p ²	7s ² 7p, 6d7s7p, 7s ² 8p, 6d ² 7p, 6d ² (³ F)8p

olarak Brewer [21] ise Meggers'in değerlerini kullanarak 13713 cm⁻¹ olarak hesaplamıştır. A hesabında bulunan relativistik enerji değeri 3715,46 cm⁻¹, 5f'li konfigürasyonların katılmasıyla 15166,06 cm⁻¹ (B hesabı) ve 5g'li konfigürasyonların katılmasıyla 14055,77 cm⁻¹ (C hesabı) şeklinde iyileşmiştir. Düşük seviyelerde görülen bu iyileşme üst seviyelere doğru gidildikçe azalmaktadır.

Nötral aktinyum için 6d, 7s, 7p ve 8s tabakalarını içeren konfigürasyon takımı (Tablo 3.2) kullanılarak MCDF yöntemiyle 246 seviye elde edildi, Bu seviyelerin tersinir foton etkileşimi ve kuantum elektrodinamik katkıları incelenerek sonuçlar Tablo 3.3'te sunulmaktadır. Meggers'in [20] deneysel değerleriyle MCDF hesabı farkı 6d7s² ve 6d²7s çift pariteli seviyeler için $\Delta E < 1000$ cm⁻¹ iken 6d7s7p tek pariteli seviyeler için $1500 < \Delta E < 4000$ cm⁻¹ aralığındadır. Diğer konfigürasyonlara ait mevcut çalışmalardaki tek karşılaştırma değeri Brewer'in [21] 6d³ ⁴F_{3/2} seviyesidir ve bu seviyede de 6s7s7p konfigürasyonunda uyum görülmektedir. MCDF yöntemiyle yapılan bu hesap 6s, 6p ve hem 6s hem de 6p özünden uyarılmaları içeren konfigürasyon takımlarıyla da gerçekleştirildiğinde, yalnızca değerlik elektronları karşılıklı etkileşimi göz önüne alınarak yapılan hesaptan daha iyi sonuçlar vermedi. Ayrıca burada sunulan hesaba 5f7s², 5f6d7s, 5f6d², 5f²7s ve 5f²6d konfigürasyonları ilave edildiğinde de daha iyi sonuçlar elde edilemedi. Örneğin 6d7s² ²D_{5/2}, 6d²(³F)7s ⁴F_{3/2} ve ⁴F_{5/2} seviyelerinin enerjileri sırasıyla 1320,60 cm⁻¹, 7694,72 cm⁻¹ ve 8054,85 cm⁻¹ olarak elde edildi. 5f'li konfigürasyon takımında ortaya çıkan bu uyumsuzluğun

Tablo 3.3. Ac I'in uyarılmış seviyelerinin enerjileri (cm⁻¹)

Seviye	MCHF		MCDF		Diğer Çalışmalar	Konfigürasyon Katkıları		
	MCHF	+BP	MCDF	+B+QED				
6d7s ²	² D _{3/2}	0,00	0,00	0,00	0,00 ^{a, b, c, d1, d2, e, f}	86,21 + 8,19	6d ² (¹ D)7s ² D _{3/2}	
	² D _{5/2}		2830,00	1365,95	1307,40	2231,43 ^a ; 0,274 ^{d1} ; 0,290 ^{d2} ; 0,277 ^e ; 0,27 ^f	84,97 + 9,69	6d ² (¹ D)7s ² D _{5/2}
7s ² 7p	² P _{1/2} ^o	13236,22	12686,36	3057,37	2950,95	9500 ^b ; 15270 ^c ; 14210 ^c ; 0,969 ^{d1} ; 0,984 ^{d2}	71,55 + 13,15	6d7s(³ D)7p ² P _{1/2} ^o
6d ² (³ F)7s	² P _{3/2} ^o		18484,11	8025,11	7872,22	1,573 ^{d1} ; 1,583 ^{d2}	56,84 + 19,16	7s ² 8p ² P _{3/2} ^o
	⁴ F _{3/2}	7365,84	7086,83	9555,91	9581,64	9217,28 ^a ; 9217 ^b ; 0,96 ^f ; 10000 ^g	98,28 + 1,18	6d ² (³ F)8s ⁴ F _{3/2}
	⁴ F _{5/2}		7987,41	9909,37	9912,72	9863,59 ^a ; 1,05 ^f	98,33 + 1,13	6d ² (³ F)8s ⁴ F _{5/2}
	⁴ F _{7/2}		9517,43	10422,23	10393,50	10906,02 ^a ; 1,20 ^f	98,64 + 1,05	6d ² (³ F)8s ⁴ F _{7/2}
	⁴ F _{9/2}		11129,04	11093,40	11025,17	12078,07 ^a ; 1,35 ^f	98,82 + 0,95	6d ² (³ F)8s ⁴ F _{9/2}
	² F _{5/2}	12625,41	12506,95	17976,86	17954,11	1,79 ^f	69,72 + 12,34	6d ² (¹ D)7s ² D _{5/2}
6d ² (³ P)7s	² F _{7/2}		14845,31	19327,09	19260,97	2,11 ^f	74,38 + 12,60	6d ² (¹ G)7s ² G _{7/2}
	⁴ P _{1/2}	13191,86	14229,97;	15301,22	15159,29	1,49 ^f	92,77 + 3,72	7s7p ² (³ P) ⁴ P _{1/2}
			15038,14					
	⁴ P _{3/2}		15018,67	15688,29	15665,05	1,62 ^f	96,44 + 1,49	7s7p ² (³ P) ⁴ P _{3/2}
	⁴ P _{5/2}		17583,20	15990,37	15959,70	1,60 ^f	91,69 + 4,75	6d ² (¹ D)7s ² D _{5/2}
	² P _{1/2}	–	–	19541,64	19525,29	–	67,79 + 25,25	6d ³ ² P _{1/2}
	² P _{3/2}		–	20232,33	20166,16	–	58,69 + 22,69	6d ³ ² P _{3/2}
	² G _{7/2}	14092,65	–	20548,00	20493,89	1,86 ^f	77,57 + 11,96	6d ² (³ F)7s ² F _{7/2}
	² G _{9/2}		16461,13	20303,83	20263,98	1,93 ^f	90,54 + 6,73	6d ³ ² G _{9/2}
	² D _{3/2}	13121,12	17083,49	18523,77	18501,81	1,76 ^f	67,38 + 11,02	6d ² (³ P)7s ² P _{3/2}
6d ² (¹ D)7s	² D _{5/2}		–	19348,32	19274,58	2,00 ^f	63,31 + 15,43	6d ² (³ F)7s ² F _{5/2}
	² S _{1/2}	25896,23	28680,34	34369,50	34307,19	–	43,01 + 29,17	6d ² (¹ S)7s ² S _{1/2}
6d ² (¹ S)7s	⁴ F _{3/2} ^o	15858,75	14055,77	10302,71	10211,25	13712,90 ^a ; 13713 ^b	80,48 + 10,67	6d7s(³ D)7p ² D _{3/2} ^o
	⁴ F _{5/2} ^o		15015,83;	11995,15	11889,42	14940,72 ^a	70,01 + 9,79	6d7s(³ D)7p ² D _{5/2} ^o
			17343,52					
6d7s(³ D)7p	⁴ F _{7/2} ^o		17872,90	14971,63	14810,80	17683,87 ^a	73,04 + 20,25	6d7s(³ D)7p ⁴ D _{7/2} ^o
	⁴ F _{9/2} ^o		20790,62	19253,34	19044,92	–	99,25 + 0,47	6d ² (³ F)7p ⁴ F _{9/2} ^o
	⁴ D _{1/2} ^o	16946,67	17456,62	15363,44	15244,33	17199,71 ^a	89,58 + 4,33	6d ² (¹ D)7s ² D _{5/2}
	⁴ D _{3/2} ^o		16283,76	15171,93	15161,22	19012,46 ^a	63,83 + 14,65	6d7s(³ D)7p ⁴ P _{3/2} ^o
	⁴ D _{5/2} ^o		18834,66	17241,66	17110,97	21195,87 ^a	22,49 + 21,09	6d7s(³ D)7p ⁴ F _{5/2} ^o
	⁴ D _{7/2} ^o		20417,88	18989,05	18810,85	23475,94 ^a	71,82 + 23,15	6d7s(³ D)7p ⁴ F _{7/2} ^o
	⁴ P _{1/2} ^o	18830,66	20995,00	19439,15	19295,62	22401,52 ^a	94,37 + 3,81	6d7s(³ D)7p ⁴ D _{1/2} ^o
	⁴ P _{3/2} ^o		21253,01	19491,66	19338,96	22801,10 ^a	77,48 + 14,36	6d7s(³ D)7p ⁴ D _{3/2} ^o

Tablo 3.3. Devam

Seviye	MCHF		MCDF		Diğer Çalışmalar	Konfigürasyon Katkıları			
	MCHF	+BP	MCDF	+B+QED					
6d7s(³ D)7p	⁴ P _{5/2} ^o		18572,74; 22359,34	14331,52	14178,58	23898,86 ^a	34,36 + 29,35	6d7s(³ D)7p	⁴ D _{5/2} ^o
	² F _{5/2} ^o	21555,89	23327,48	23226,01	23094,78	23916,84 ^a	39,38 + 15,90	6d7s(¹ D)7p	² D _{5/2} ^o
	² F _{7/2} ^o		24266,71	24381,91	24209,35	24969,30 ^a	70,33 + 12,42	6d7s(¹ D)7p	² F _{7/2} ^o
	³ D _{3/2} ^o	15732,63	–	21436,24	21309,40	17736,26 ^a	35,20 + 23,71	6d ² (³ F)7p	³ D _{3/2} ^o
	² D _{5/2} ^o		–	20720,97	20525,87	17950,71 ^a	44,51 + 27,42	6d7s(³ D)7p	⁴ P _{5/2} ^o
	² P _{1/2} ^o	27812,88	30390,51	29304,36	29151,28	25729,03 ^a	47,86 + 28,61	7s ² 8p	² P _{1/2} ^o
	² P _{3/2} ^o		–	31915,79	29556,69	27009,84 ^a	45,74 + 40,06	7s ² 8p	² P _{3/2} ^o
6d7s(¹ D)7p	² F _{5/2} ^o	34147,10	36309,08	18819,09	18683,00	26836,20 ^a	32,95 + 20,18	6d7s(³ D)7p	⁴ D _{5/2} ^o
	² F _{7/2} ^o		37915,44	22589,23	22426,14	28568,40 ^a	42,45 + 24,36	6d ² (¹ D)7p	² F _{7/2} ^o
	² D _{3/2} ^o	–	18024,81	17141,31	16997,24	26066,04 ^a	27,09 + 25,86	6d7s(³ D)7p	² D _{3/2} ^o
	² D _{5/2} ^o		–	24895,81	24714,52	26533,16 ^a	25,55 + 19,53	6d7s(³ D)7p	² F _{5/2} ^o
	² P _{1/2} ^o	22934,00	–	23430,18	23274,09	–	31,25 + 19,82	6d7s(³ D)7p	² P _{1/2} ^o
	² P _{3/2} ^o		–	23983,51	23816,07	30396,61 ^a	39,74 + 22,77	6d ² (¹ D)7p	² P _{3/2} ^o
6d ² (³ F)7p	⁴ G _{5/2} ^o	20729,52	21153,56	24216,57	24137,70	31494,68 ^a ; 31495 ^b ;	72,61 + 16,89	6d7s(³ D)7p	² F _{5/2} ^o
	⁴ G _{7/2} ^o		20665,59; 22918,53	25358,80	25257,62	32219,62 ^a	81,70 + 6,65	6d ² (³ F)8p	⁴ G _{7/2} ^o
	⁴ G _{9/2} ^o		23282,43	26855,25	26725,68	32867,39 ^a	84,50 + 9,53	6d ² (³ F)8p	⁴ G _{9/2} ^o
	⁴ G _{11/2} ^o		25682,95	28959,53	28781,13	33429,76 ^a	84,43 + 15,22	6d ² (³ F)8p	⁴ G _{11/2} ^o
	⁴ F _{3/2} ^o	23259,29	23816,27	28476,11	28302,38	–	89,56 + 2,91	6d ² (³ F)8p	⁴ F _{3/2} ^o
	⁴ F _{5/2} ^o		24408,46	28993,44	28891,08	–	88,29 + 3,58	6d ² (³ F)8p	⁴ F _{5/2} ^o
	⁴ F _{7/2} ^o		25257,28	29667,46	29626,96	–	83,82 + 4,26	6d ² (³ F)8p	⁴ F _{7/2} ^o
	⁴ F _{9/2} ^o		26143,18	30532,66	30383,50	–	75,48 + 7,45	6d ² (³ F)7p	² G _{9/2} ^o
	⁴ D _{1/2} ^o	26550,72	28209,45	31286,13	31189,58	–	73,86 + 19,21	6d ² (³ P)7p	⁴ D _{1/2} ^o
	⁴ D _{3/2} ^o		28254,50	31499,06	31389,92	–	78,87 + 4,58	6d7s(¹ D)7p	² D _{3/2} ^o
	⁴ D _{5/2} ^o		29123,49	32479,20	32354,07	–	33,12 + 22,59	6d ² (³ P)7p	⁴ D _{5/2} ^o
	⁴ D _{7/2} ^o		30118,61	32503,18	32355,41	–	46,30 + 27,58	6d ² (³ F)7p	² G _{7/2} ^o
	² G _{7/2} ^o	24656,86	26445,64	31965,29	31826,34	–	35,51 + 30,23	6d ² (³ F)7p	⁴ D _{7/2} ^o
	² G _{9/2} ^o		–	33216,28	33057,96	–	40,77 + 29,12	6d ² (¹ G)7p	² G _{9/2} ^o
	² F _{5/2} ^o	25658,12	27662,59	33114,96	32976,86	–	50,31 + 16,47	6d ² (³ P)7p	⁴ D _{5/2} ^o
	² F _{7/2} ^o		–	33821,53	33651,67	–	52,56 + 10,96	6d7s(¹ D)7p	² F _{7/2} ^o
	² D _{3/2} ^o	21319,70; 34648,19	21576,50; 36186,00	33541,50	33414,58	–	31,37 + 20,10	6d ² (³ P)7p	⁴ D _{3/2} ^o
	² D _{5/2} ^o		24694,72; 37893,21	39838,82	39654,81	–	24,71 + 21,34	6d ² (¹ D)7p	² D _{5/2} ^o

Tablo 3.3. Devam

Seviye	MCHF		MCDF		Diğer Çalışmalar	Konfigürasyon Katkıları				
	MCHF	+BP	MCDF	+B+QED						
6d ² (³ P)7p	⁴ D ^o _{1/2}	28294,92	27938,21	32143,06	32056,32	–	71,86 + 17,43	6d ² (³ F)7p	⁴ D ^o _{1/2}	
	⁴ D ^o _{3/2}		28931,90	31915,79	31816,32	–	56,58 + 13,40	6d ² (³ P)7p	² D ^o _{3/2}	
	⁴ D ^o _{5/2}		30056,72	34631,61	34478,46	–	46,81 + 15,73	6d ² (³ P)7p	² D ^o _{5/2}	
	⁴ D ^o _{7/2}		32101,57	35344,07	35192,19	–	85,07 + 11,33	6d ² (³ P)8p	⁴ D ^o _{7/2}	
	⁴ P ^o _{1/2}		29633,41	32227,43	35347,50	35216,23	–	76,31 + 12,93	6d ² (³ P)7p	² S ^o _{1/2}
	⁴ P ^o _{3/2}			31172,48	35130,57	35002,70	–	65,39 + 24,28	6d ² (³ P)7p	⁴ S ^o _{3/2}
	⁴ P ^o _{5/2}			31961,99;	36545,14	36397,64	–	81,79 + 6,84	6d ² (³ P)8p	⁴ P ^o _{5/2}
		33763,32								
	⁴ S ^o _{3/2}	28039,60	29224,27;	36272,04	36141,45	–	69,76 + 22,16	6d ² (³ P)7p	⁴ P ^o _{3/2}	
			30831,20							
	² D ^o _{3/2}	30156,34	31804,37	–	–	–	–	–	–	
	² D ^o _{5/2}		–	31633,09	31514,66	–	54,74 + 8,20	6d ² (³ F)7p	⁴ D ^o _{5/2}	
	² P ^o _{1/2}	32780,72	35877,25	–	–	–	–	–	–	
	² P ^o _{3/2}		35066,33	–	–	–	–	–	–	
² S ^o _{1/2}	27923,67	28897,75	30872,00	30775,52	–	70,86 + 17,01	6d ² (³ P)7p	⁴ P ^o _{1/2}		
6d ² (¹ G)7p	² H ^o _{9/2}	28451,07	–	37259,22	36996,70	–	74,86 + 20,44	6d ² (³ F)7p	² G ^o _{9/2}	
	² H ^o _{11/2}		32272,32	38868,26	38715,40	–	91,90 + 7,66	6d ² (¹ G)8p	² H ^o _{11/2}	
	² G ^o _{7/2}	34133,82	–	37480,81	37340,68	–	48,51 + 30,50	6d ² (³ F)7p	² G ^o _{7/2}	
	² G ^o _{9/2}		–	38540,12	38374,96	–	49,85 + 25,89	6d ² (³ F)7p	² G ^o _{9/2}	
	² F ^o _{5/2}	37274,64	39667,25	–	–	–	–	–	–	
	² F ^o _{7/2}		39634,64	–	–	–	–	–	–	
6d ² (¹ D)7p	² F ^o _{5/2}	18572,02	–	38042,80	37894,65	–	43,13 + 12,90	6d7s(¹ D)7p	² F ^o _{5/2}	
	² F ^o _{7/2}		–	40115,19	39936,69	–	30,22 + 12,47	6d ² (³ F)7p	² F ^o _{7/2}	
	² D ^o _{3/2}		40725,43	37474,12	37337,97	–	26,91 + 18,74	6d ² (³ F)7p	² D ^o _{3/2}	
	² P ^o _{1/2}	34726,66	25382,71;	39804,98	39641,27	–	36,98 + 32,22	6d ² (³ P)7p	² P ^o _{1/2}	
		36925,60								
6d ² (¹ S)7p	² P ^o _{3/2}		25101,80	39063,64	38921,18	–	27,37 + 26,28	6d ² (³ P)7p	² P ^o _{3/2}	
	² S ^o _{1/2}		–	21055,69	20859,05	–	78,88 + 6,14	6d ² (¹ S)8s	² S ^o _{1/2}	
	² G ^o _{7/2}		29725,56	–	–	–	–	–	–	
	² G ^o _{9/2}		27946,17	–	–	–	–	–	–	
6d ³	⁴ F _{3/2}	15168,78	12771,71;	28463,22	28293,43	24000 ^b	95,50 + 2,75	6d7p ² (³ P)	⁴ F _{3/2}	
			15059,87							
	⁴ F _{5/2}		14701,24;	28658,10	28683,17	–	97,72 + 1,64	6d7p ² (³ P)	⁴ F _{5/2}	
			15646,18							

Tablo 3.3. Devam

Seviye	MCHF		MCDF		Diğer Çalışmalar	Konfigürasyon Katkıları				
	MCHF	+BP	MCDF	+B+QED						
6d ³	⁴ F _{7/2}		16608,38; 17580,42	29128,67	29122,99	–	98,74 + 0,93	6d7p ² (³ P)	⁴ F _{7/2}	
				18662,57	29684,77	29504,19	–	98,58 + 0,62	6d ³	² G _{9/2}
	⁴ F _{9/2}					–	49,86 + 26,71	6d ² (¹ S)7s	² S _{1/2}	
	⁴ P _{1/2}	18798,87		20431,46	33772,16	33640,31	–	49,56 + 30,12	7s7p ² (³ P)	⁴ P _{3/2}
	⁴ P _{3/2}			20562,51	34266,72	34229,39	–	86,43 + 5,97	6d7p ² (³ P)	⁴ P _{5/2}
	⁴ P _{5/2}			23395,18;	37343,12	37319,90	–	86,37 + 11,61	6d ³	² G _{9/2}
	² H _{9/2}	23414,52		26575,48						
	² H _{11/2}			26348,52	37549,93	37530,78	–	100,00		
	² G _{7/2}	21467,97		22761,23	35567,24	35555,38	–	86,26 + 4,70	6d ² (¹ G)7s	² G _{7/2}
	² G _{9/2}			–	35939,31	35924,96	–	75,68 + 13,56	6d ³	² H _{9/2}
	² F _{5/2}	26694,60		26736,36; 30887,55	–	–	–	–	–	
	² F _{7/2}			28632,50	–	–	–	–	–	
	² F _{9/2}			–	–	–	–	–	–	
	² D _{3/2}	21601,58; 30199,85		22454,44; 33773,33	35735,12	35645,82	–	22,47 + 11,75	6d ³	² D _{3/2}
	² D _{5/2}			24592,67	37731,37	37630,34	–	45,31 + 12,81	6d ³	² D _{5/2}
² P _{1/2}	13499,40; 25325,96		25885,07	36779,87	36671,46	–	25,67 + 21,29	6d ² (³ P)8s	² P _{1/2}	
² P _{3/2}			27329,62; 28996,17	38606,40	38428,6	–	24,88 + 22,54	6d ² (³ P)8s	² P _{3/2}	
7s ² 8p	² P _{1/2}	47169,15	–	26204,58	26005,68	–	43,55 + 27,00	6d7s(¹ D)7p	² P _{1/2}	
	² P _{3/2}		–	25930,20	25726,95	–	30,93 + 27,50	7s ² 7p	² P _{3/2}	
7s7p ² (³ P)	⁴ P _{1/2}	55346,24	–	28463,22	28383,92	–	44,09 + 24,64	6d ² (¹ S)7s	² S _{1/2}	
	⁴ P _{3/2}		–	34602,68	34437,76	–	60,31 + 32,72	6d ³	⁴ P _{3/2}	
	⁴ P _{5/2}		44669,48	37189,49	37037,73	–	48,66 + 27,75	7s7p ² (¹ D)	² D _{5/2}	
	² P _{1/2}	64050,44	–	40849,97	40647,61	–	38,21 + 17,55	6d ² (³ P)8s	² P _{1/2}	
7s7p ² (¹ D)	² D _{3/2}	49107,41	–	39521,90	39348,78	–	29,79 + 12,85	6d ³	² D _{3/2}	
6d ² (³ F)8s	⁴ F _{3/2}	46613,18	45235,46	36837,38	36669,92	–	86,42 + 1,79	6d ³	² D _{3/2}	
	⁴ F _{5/2}		–	36615,31	36516,29	–	38,54 + 26,44	6d ² (³ F)8s	² F _{5/2}	
	⁴ F _{7/2}		–	37829,70	37685,63	–	72,02 + 19,78	6d ² (³ F)8s	² F _{7/2}	
	⁴ F _{9/2}		–	39165,68	38964,25	–	97,77 + 0,93	6d ² (³ F)7s	⁴ F _{9/2}	
	² F _{5/2}	49342,06	–	37945,83	37809,08	–	45,75 + 37,54	6d ² (³ F)8s	⁴ F _{5/2}	
	² F _{7/2}		–	39036,71	38872,75	–	50,95 + 26,46	6d ² (³ F)8s	⁴ F _{7/2}	

Tablo 3.3. Devam

Seviye	MCHF		MCDF		Diğer Çalışmalar	Konfigürasyon Katkıları			
	MCHF	+BP	MCDF	+B+QED					
6d ² (³ F)8p	⁴ G _{5/2} ^o	57411,16	–	40364,83	40259,34	–	81,63 + 4,39	6d ² (³ F)7p	⁴ G _{5/2} ^o
	⁴ G _{7/2} ^o	–	–	41372,29	41175,38	–	87,52 + 7,40	6d ² (³ F)7p	⁴ G _{7/2} ^o
	⁴ F _{3/2} ^o	59540,50	–	41429,67	41325,79	–	90,93 + 3,85	6d ² (³ F)7p	⁴ F _{3/2} ^o
	⁴ F _{5/2} ^o	–	–	41856,82	41732,99	–	67,26 + 7,09	6d ² (³ F)8p	² F _{5/2} ^o
	² F _{5/2} ^o	53429,89	–	42815,72	42662,08	–	24,24 + 22,56	6d ² (³ F)7p	² F _{5/2} ^o
	² D _{3/2} ^o	54296,37	–	41919,13	41773,30	–	38,33 + 22,28	6d ² (¹ D)7p	² D _{3/2} ^o
6d7p ² (³ P)	⁴ F _{3/2} ^o	42804,29	–	41326,93	41185,85	–	50,66 + 13,59	6d ³	² D _{3/2} ^o
	⁴ F _{5/2} ^o	–	33902,66	–	–	–	–	–	–

^a Meggers ve çalışma arkadaşları [20] (Bu değerlere [39, 105, 106]'den de ulaşılabilir.),

^b Brewer [21],

^c Vander Sluis ve Nugent [24],

^{d1, d2} Eliav [35] (eV biriminde),

^e Moore [109] (eV biriminde) (Bu değerlere [35]'ten de ulaşılabilir),

^f Roos ve çalışma arkadaşları [38] (eV biriminde),

^g NIST Atomic Spectra and Data Base [105]

özden uyarılmaların dikkate alınmasıyla giderilebileceği düşünülür; fakat bu tür hesaplamalarda SCF yürütme hatasıyla karşılaşıldı. MCDF yöntemiyle gerçekleştirilen hesaplama tüm seviyelerde karşılaştırma değerlerine aynı yakınlıktadır. Diğer yandan MCDF yöntemiyle yapılan hesap $6d7s^2 \ ^2D_{5/2}$, $7s^27p \ ^2P^o_{1/2}$ ve $^2P^o_{3/2}$ seviyeleri hariç MCHF yöntemiyle elde edilen sonuçlardan daha iyidir. Bu seviyelerde MCDF yönteminin birinci konfigürasyon katkıları çoğunlukla baskın değildir.

3.1.2. Işımalı geçiş parametrelerinin hesapları

Tablo 3.2’de verilen konfigürasyon takımlarıyla relativistik katkılar dikkate alınarak yapılan MCHF yöntemiyle yapılan A hesabıyla 3132, B hesabıyla 63552, C hesabıyla 70915 ve tersinir foton etkileşimi ve QED etkilerini içeren MCDF yöntemiyle 8771 bir E1 geçişi elde edildi. Bu çalışmalardan MCHF ile yapılan C hesabı ve MCDF hesabının elektrik dipol geçişlerine ait dalga boyları, ağırlıklı salıncı şiddetleri ve geçiş olasılıklarının bir kısmı mevcut kaynaklardaki verilerle beraber Tablo 3.4’te sunulmaktadır. Tablo 3.4’te sadece iyonlaşma potansiyeli altındaki seviyelere ait geçişlerin, geçiş olasılığı 10^7 sn^{-1} ’den büyük olanları verilmektedir. Ancak geçiş olasılığı daha düşük olmasına rağmen mevcut kaynaklarda karşılaştırma değeri olan geçişler de tabloya dahil edilmiştir. Hem MCHF hem de MCDF yöntemiyle elde edilen dalga boyu ve ağırlıklı salıncı şiddetleri mevcut çalışmalarla özellikle $6d7s^2 - 6d7s(^3D)7p$ geçişleri için uyumludur. Nötral aktinyum için ulaşılabilir kaynaklarda geçiş olasılığına ait karşılaştırma değeri ise bulunmamaktadır.

Ayrıca Ac I için incelenen seviyeler arasındaki E2 ve M1 geçişleri de hesaplandı. Yapılan hesaplamalarda MCHF yöntemi ile elde edilen A çalışmasıyla 36189 E2, ve 23172 M1, B çalışmasıyla 12925 E2, ve 71450 M1, C çalışmasıyla 32689 E2, ve 74796 M1 ve MCDF yöntemiyle 11896 E2, ve 8740 M1 geçişi elde edildi. Bu geçişlerin $A > 1 \text{ sn}^{-1}$ olanları Tablo 3.5’te sunulmaktadır. Mevcut kaynaklarda bu yasaklı geçişlere ait herhangi bir karşılaştırma değeri yoktur.

Tablo 3.4. Ac I'in E1 geçişlerine ait λ dalga boyları (Å), gf ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve A geçiş olasılıkları (sn^{-1})

Geçiş	λ			gf			A	
	MCHF	MCDF	Diğer Ç.	MCHF	MCDF	Diğer Ç.	MCHF	MCDF
6d7s ² ² D _{3/2} - 6d7s(³ D)7p ⁴ F _{3/2}	7192,28; 5816,62; 4503,01	9706,18	7290,40 ^{a,b}	5,84(-2); 2,62(-1); 9,17(-2)	-1,06	-1,18 ^c	1,18(6); 8,61(6); 5,03(6)	1,52(6)
6d7s ² ² D _{3/2} - 6d7s(³ D)7p ⁴ F _{5/2}	6727,73	8336,70	6691,27 ^{a,b}	1,19(-1)	1,73(-1)	-0,93 ^c	2,93(6)	2,77(6)
6d7s ² ² D _{3/2} - 6d7s(³ D)7p ⁴ D _{5/2}	5778,79	6559,81	–	7,44(-3)	3,58(-2)	-1,29 ^c	7,43(5)	2,78(6)
6d7s ² ² D _{3/2} - 6d7s(³ D)7p ⁴ D _{3/2}	6198,94	6535,42	5258,24 ^{a,b}	2,59(-3)	1,68(-1)	-0,41 ^c	1,12(5)	6,59(6)
6d7s ² ² D _{3/2} - 6d7s(³ D)7p ⁴ D _{5/2}	5352,55	5844,20	4716,58 ^{a,b}	8,73(-3)	3,85(-1)	-1,37 ^c	3,38(5)	1,25(7)
6d7s ² ² D _{3/2} - 6d7s(³ D)7p ⁴ P _{1/2}	–	5182,52	4462,73 ^{a,b}	–	8,98(-4)	-2,92 ^c	–	1,11(5)
6d7s ² ² D _{3/2} - 6d7s(³ D)7p ⁴ P _{3/2}	4739,11	–	4860,16 ^a ; 4384,53 ^b	9,72(-3)	–	-1,46 ^c	7,22(5)	–
6d7s ² ² D _{3/2} - 6d7s(³ D)7p ⁴ P _{5/2}	5428,60	4826,02	4183,12 ^{a,b}	1,19	–	-0,28 ^c	7,85(5)	0,30
6d7s ² ² D _{3/2} - 6d7s(³ D)7p ² F _{5/2}	4314,90	4329,98	4179,98 ^{a,b}	2,59(-1)	9,15(-1)	0,14 ^c	1,55(7)	5,42(7)
6d7s ² ² D _{3/2} - 6d7s(³ D)7p ² D _{3/2}	–	4692,76	3835,04 ^a	–	1,12	–	–	8,50(7)
6d7s ² ² D _{3/2} - 6d7s(³ D)7p ² D _{5/2}	–	4871,89	5636,60 ^a	–	6,78(-2)	–	–	3,18(6)
6d7s ² ² D _{3/2} - 6d7s(³ D)7p ² P _{1/2}	3307,04	3430,38	3885,56 ^{a,b}	5,56(-1)	4,30(-1)	0,15 ^c	1,69(8)	1,22(8)
6d7s ² ² D _{3/2} - 6d7s(³ D)7p ² P _{3/2}	–	3143,04	3701,30 ^a	–	3,39(-2)	–	–	5,72(6)
6d7s ² ² D _{3/2} - 6d7s(¹ D)7p ² F _{5/2}	2765,71	5352,45	4063,10 ^a	7,04(-1)	2,85(-1)	–	1,02(8)	1,10(7)
6d7s ² ² D _{3/2} - 6d7s(¹ D)7p ² P _{1/2}	–	4296,62	3885,58 ^b	–	8,29(-1)	–	–	1,49(8)
6d7s ² ² D _{3/2} - 6d7s(¹ D)7p ² P _{3/2}	–	4198,84	–	–	3,09(-1)	–	–	2,92(7)
6d7s ² ² D _{3/2} - 6d7s(¹ D)7p ² D _{3/2}	5595,08	5883,30	5569,26 ^a	9,67(-2)	1,53(-1)	–	5,15(6)	7,40(6)
6d7s ² ² D _{5/2} - 6d7s(³ D)7p ⁴ P _{5/2}	6413,97	5166,61	4613,90 ^a ; 4613,93 ^b	2,40(-1)	8,11(-2)	-1,24 ^c	6,51(6)	2,33(7)
6d7s ² ² D _{5/2} - 6d7s(³ D)7p ⁴ D _{5/2}	6308,08	6327,68	5271,56 ^a	2,44(-2)	3,65(-2)	–	6,83(5)	1,01(6)
6d7s ² ² D _{5/2} - 6d7s(³ D)7p ⁴ D _{7/2}	–	5713,16	4705,78 ^a	–	6,44(-3)	-1,56 ^c	–	1,64(5)
6d7s ² ² D _{5/2} - 6d7s(³ D)7p ⁴ F _{5/2}	8309,90	9449,98	7866,10 ^a	2,88(-2)	4,96(-2)	-1,24 ^c	6,64(5)	6,17(5)
6d7s ² ² D _{5/2} - 6d7s(³ D)7p ² F _{5/2}	4915,09	4589,81	4610,10 ^a	2,11(-1)	4,46(-1)	–	9,72(6)	2,35(7)
6d7s ² ² D _{5/2} - 6d7s(³ D)7p ² F _{7/2}	4698,20	4366,43	4396,71 ^{a,b}	2,12(-1)	7,89(-1)	-1,82 ^c	8,02(6)	3,45(7)
6d7s ² ² D _{5/2} - 6d7s(³ D)7p ² D _{3/2}	–	4999,49	4194,40 ^a	–	4,10(-1)	–	–	2,73(7)
6d7s ² ² D _{5/2} - 6d7s(³ D)7p ² D _{5/2}	–	5203,32	6359,86 ^{a,b}	–	5,69(-1)	–	–	2,34(7)
6d7s ² ² D _{5/2} - 6d7s(³ D)7p ² P _{3/2}	–	3277,72	4034,63 ^a	–	1,40(-2)	-0,15 ^c	–	2,17(6)
6d7s ² ² D _{5/2} - 6d7s(¹ D)7p ² F _{5/2}	3000,56	5755,19	–	8,34(-2)	3,82(-1)	0,51 ^c	1,03(7)	1,28(7)
6d7s ² ² D _{5/2} - 6d7s(¹ D)7p ² F _{7/2}	2862,59	4735,13	–	4,09(-1)	2,00	–	4,16(7)	7,47(7)
6d7s ² ² D _{5/2} - 6d7s(¹ D)7p ² D _{3/2}	6647,69	6373,55	4194,40 ^b	7,50(-3)	3,08(-2)	-0,72 ^c	2,83(5)	1,26(6)

Tablo 3.4. Devam

Geçiş	λ			gf			A	
	MCHF	MCDF	Diğer Ç.	MCHF	MCDF	Diğer Ç.	MCHF	MCDF
6d7s ² ² D _{5/2} - 6d7s(¹ D)7p ² D ^o _{5/2}	–	4272,20; 2607,73	–	–	9,42(-1); 1,29(-1)	–	–	2,12(7)
6d7s ² ² D _{5/2} - 6d7s(¹ D)7p ² P ^o _{3/2}	–	4442,73	–	–	1,06	–	–	8,97(7)
6d7s ² ² D _{5/2} - 6d ² (¹ D)7p ² F ^o _{5/2}	–	2733,19	–	–	6,79(-2)	–	–	1,01(7)
6d7s ² ² D _{3/2} - 6d ² (¹ D)7p ² D ^o _{3/2}	–	2678,23	–	–	1,03(-1)	–	–	2,39(7)
6d7s ² ² D _{3/2} - 6d ² (³ F)7p ⁴ G ^o _{5/2}	4761,55	4142,89	–	1,78(-1)	3,27(-1)	–	8,76(6)	2,11(7)
6d7s ² ² D _{3/2} - 6d ² (³ F)7p ² F ^o _{5/2}	3634,96; 4122,61	3032,42	–	1,39(-2); 1,08(-2)	1,80(-1)	–	1,17(6); 7,07(5)	2,18(7)
6d7s ² ² D _{5/2} - 6d ² (³ F)7p ² F ^o _{7/2}	–	3091,73	–	–	2,44(-1)	–	–	2,13(7)
6d7s ² ² D _{3/2} - 6d ² (³ F)7p ² D ^o _{3/2}	4667,55	2992,70	–	8,11(-1)	7,55(-2)	–	6,21(7)	1,40(7)
6d7s ² ² D _{5/2} - 6d ² (³ P)7p ² D ^o _{5/2}	–	3310,46	–	–	1,56(-1)	–	–	1,58(7)
6d7s ² ² D _{3/2} - 7s ² 8p ² P ^o _{1/2}	2117,03	3845,31	–	3,71(-2)	7,17(-2)	–	2,76(7)	1,61(7)
6d ² (³ F)7s ⁴ F _{7/2} - 6d7s(¹ D)7p ² F ^o _{7/2}	3540,32	8310,72	5344,74 ^a	7,22(-3)	7,58	–	4,80(5)	9,15(5)
6d ² (³ F)7s ⁴ F _{7/2} - 6d ² (³ F)7p ⁴ G ^o _{9/2}	7345,91	6085,30	4552,18 ^a	7,46(-1)	2,86	–	9,23(6)	5,16(7)
6d ² (³ F)7s ⁴ F _{9/2} - 6d ² (³ F)7p ⁴ G ^o _{11/2}	6943,51	5597,18	4682,16 ^a	1,12	4,74	–	1,29(7)	8,41(7)
6d ² (¹ G)7s ² G _{9/2} - 6d ² (³ F)7p ² G ^o _{9/2}	–	7816,17	–	–	1,94	–	–	2,12(7)
6d ² (¹ G)7s ² G _{9/2} - 6d ² (¹ G)7p ² G ^o _{9/2}	–	5521,51	–	–	2,00	–	–	4,37(7)
6d ² (¹ G)7s ² G _{9/2} - 6d ² (¹ G)7p ² H ^o _{11/2}	6386,02	5419,63	–	4,06(-1)	3,87	–	5,53(6)	7,33(7)
6d ² (¹ G)7s ² G _{9/2} - 6d ² (¹ D)7p ² F ^o _{7/2}	–	5083,18	–	–	5,43(-1)	–	–	1,75(7)
6d ² (¹ G)7s ² G _{7/2} - 6d ² (¹ G)7p ² H ^o _{9/2}	–	6044,54	–	–	2,85	–	–	5,20(7)
6d ² (¹ G)7s ² G _{7/2} - 6d ² (¹ G)7p ² G ^o _{7/2}	–	5935,84	–	–	1,36	–	–	3,24(7)
6d ² (¹ G)7s ² G _{7/2} - 6d ² (¹ D)7p ² F ^o _{7/2}	–	5143,29	–	–	3,56(-1)	–	–	1,12(7)
6d ² (¹ G)7s ² G _{7/2} - 6d ² (³ F)8p ² F ^o _{5/2}	–	4510,96	–	–	5,86(-1)	–	–	3,20(7)
6d ² (¹ D)7s ² D _{3/2} - 6d ² (¹ D)7p ² P ^o _{3/2}	12712,41	4897,31	–	9,67(-3)	7,13(-1)	–	9,97(4)	4,96(7)
6d ² (¹ D)7s ² D _{3/2} - 6d ² (¹ D)7p ² F ^o _{5/2}	–	5156,54	–	–	7,25(-1)	–	–	3,03(7)
6d ² (¹ D)7s ² D _{3/2} - 6d ² (¹ D)7p ² P ^o _{1/2}	5078,69; 12274,10	4730,48	–	3,16(-1); 7,02(-2)	2,57(-1)	–	4,08(7); 1,55(6)	3,83(7)
6d ² (¹ D)7s ² D _{3/2} - 6d ² (³ F)8p ² D ^o _{3/2}	–	4297,10	–	–	5,51(-1)	–	–	4,97(7)
6d ² (¹ D)7s ² D _{5/2} - 6d ² (¹ D)7p ² F ^o _{5/2}	–	5370,54	–	–	6,09(-1)	–	–	2,35(7)
6d ² (¹ D)7s ² D _{5/2} - 6d ² (¹ D)7p ² F ^o _{7/2}	–	4839,77	–	–	1,29	–	–	4,60(7)
6d ² (¹ D)7s ² D _{5/2} - 6d ² (¹ D)7p ² D ^o _{3/2}	–	5536,05	–	–	2,76(-1)	–	–	1,50(7)
6d ² (¹ D)7s ² D _{5/2} - 6d ² (¹ D)7p ² P ^o _{3/2}	–	5089,93	–	–	5,98(-1)	–	–	3,84(7)
6d ² (¹ D)7s ² D _{5/2} - 6d7s(¹ D)7p ² D ^o _{5/2}	–	4906,71	–	–	5,60(-1)	–	–	2,58(7)
6d ² (¹ D)7s ² D _{5/2} - 6d ² (³ F)8p ² D ^o _{3/2}	–	4444,69	–	–	1,66(-1)	–	–	1,40(7)

Tablo 3.4. Devam

Geçiş	λ			gf			A				
	MCHF	MCDF	Diğer Ç.	MCHF	MCDF	Diğer Ç.	MCHF	MCDF			
$6d^2(^3F)7p$	$^4G^o_{5/2}$	$6d^2(^3F)8s$	$^4F_{5/2}$	–	7978,45	–	–	–	1,13(7)		
$6d^2(^3F)7s$	$^4F_{3/2}$	$6d^2(^3F)7p$	$^4G^o_{5/2}$	7186,62	6869,98	–	2,19(-1)	1,32	–	4,72(6)	3,12(7)
$6d^2(^3F)7s$	$^4F_{3/2}$	$6d^2(^3F)7p$	$^4F^o_{3/2}$	6032,29	5318,50	–	2,94(-1)	1,30	–	1,34(7)	7,68(7)
$6d^2(^3F)7s$	$^4F_{3/2}$	$6d^2(^3F)7p$	$^4F^o_{5/2}$	5824,23	5178,81	–	7,33(-2)	5,34(-1)	–	2,40(6)	2,21(7)
$6d^2(^3F)7s$	$^4F_{3/2}$	$6d^2(^3F)7p$	$^4D^o_{1/2}$	4768,57	4627,92	–	4,84(-1)	8,52(-1)	–	7,10(7)	1,32(8)
$6d^2(^3F)7s$	$^4F_{3/2}$	$6d^2(^3F)7p$	$^4D^o_{3/2}$	4609,76	4585,41	–	1,23(-1)	6,31(-1)	–	9,72(6)	5,01(7)
$6d^2(^3F)7s$	$^4F_{3/2}$	$6d^2(^3P)7p$	$^4D^o_{1/2}$	4831,06	16654,95	–	1,66(-1)	2,51(-1)	–	2,38(7)	4,24(7)
$6d^2(^3F)7s$	$^4F_{5/2}$	$6d^2(^3F)7p$	$^4G^o_{7/2}$	6766,29;	6516,82	–	1,59(-1);	1,91	–	2,89(6);	3,76(7)
				7983,27			3,49(-1)			4,57(6)	
$6d^2(^3F)7s$	$^4F_{5/2}$	$6d^2(^3F)7p$	$^4F^o_{3/2}$	6378,82	5413,83	–	2,68(-3)	5,39(-1)	–	1,10(5)	3,07(7)
$6d^2(^3F)7s$	$^4F_{5/2}$	$6d^2(^3F)7p$	$^4F^o_{5/2}$	6146,63	5269,15	–	1,74(-1)	1,38	–	5,13(6)	5,55(7)
$6d^2(^3F)7s$	$^4F_{5/2}$	$6d^2(^3F)7p$	$^4F^o_{7/2}$	5841,84	5104,25	–	1,18(-1)	9,51(-1)	–	2,90(6)	3,04(7)
$6d^2(^3F)7s$	$^4F_{5/2}$	$6d^2(^3F)7p$	$^4D^o_{3/2}$	4971,39;	4656,09	–	8,32(-1);	1,38	–	5,61(7);	1,06(8)
				4809,43			3,18(-1)			2,29(7)	
$6d^2(^3F)7s$	$^4F_{5/2}$	$6d^2(^3F)7p$	$^4D^o_{5/2}$	4562,60	4456,05	–	5,30(-2)	2,17(-1)	–	2,83(6)	1,21(7)
$6d^2(^3F)7s$	$^4F_{5/2}$	$6d^2(^3F)7p$	$^2D^o_{3/2}$	3565,49;	4254,98	–	2,39(-3);	1,41(-1)	–	3,13(5);	1,30(7)
				7442,08			3,18(-1)			9,59(6)	
$6d^2(^3F)7s$	$^4F_{5/2}$	$6d^2(^3P)7p$	$^2D^o_{5/2}$	–	4629,21	–	–	7,06(-1)	–	–	3,66(7)
$6d^2(^3F)7s$	$^4F_{7/2}$	$6d^2(^3F)7p$	$^4G^o_{7/2}$	7547,67;	6727,60	–	2,67(-2);	6,53(-1)	–	3,91(5);	1,20(7)
				9094,06			1,77(-1)			1,78(6)	
$6d^2(^3F)7s$	$^4F_{7/2}$	$6d^2(^3F)7p$	$^4G^o_{9/2}$	7345,91	6122,87	–	7,46(-1)	2,86	–	9,23(6)	5,09(7)
$6d^2(^3F)7s$	$^4F_{7/2}$	$6d^2(^3F)7p$	$^4F^o_{5/2}$	6784,69	5406,11	–	2,64(-1)	8,61(-1)	–	6,39(6)	3,27(7)
$6d^2(^3F)7s$	$^4F_{7/2}$	$6d^2(^3F)7p$	$^4F^o_{7/2}$	6415,24	5232,67	–	2,70(-1)	2,23	–	5,48(6)	6,80(7)
$6d^2(^3F)7s$	$^4F_{7/2}$	$6d^2(^3F)7p$	$^4F^o_{9/2}$	6070,26	5002,50	–	1,76(-1)	1,00	–	3,18(6)	2,67(7)
$6d^2(^3F)7s$	$^4F_{7/2}$	$6d^2(^3F)7p$	$^4D^o_{5/2}$	4905,01;	4553,61	–	2,11(-1);	7,38(-1)	–	9,75(6);	3,95(7)
				5140,31			1,55			6,55(7)	
$6d^2(^3F)7s$	$^4F_{7/2}$	$6d^2(^3F)7p$	$^4D^o_{7/2}$	4890,17	4553,33	–	2,60(-1)	8,28(-1)	–	9,09(6)	3,33(7)
$6d^2(^3F)7s$	$^4F_{7/2}$	$6d^2(^3P)7p$	$^2D^o_{5/2}$	6655,44	4734,58	–	1,16(-1)	1,46	–	2,91(6)	7,28(7)
$6d^2(^3F)7s$	$^4F_{9/2}$	$6d^2(^3F)7p$	$^4G^o_{9/2}$	8332,35	6369,21	–	2,26(-1)	8,04(-1)	–	2,17(6)	1,32(7)
$6d^2(^3F)7s$	$^2F_{5/2}$	$6d^2(^3F)7p$	$^4D^o_{5/2}$	6073,65	6944,46	–	2,16(-2)	6,82(-1)	–	6,51(5)	1,57(7)
$6d^2(^3F)7s$	$^2F_{5/2}$	$6d^2(^3F)7p$	$^4D^o_{7/2}$	5727,48	6943,81	–	3,53(-3)	7,01(-1)	–	8,99(4)	1,21(7)
$6d^2(^3F)7s$	$^2F_{5/2}$	$6d^2(^3F)7p$	$^2G^o_{7/2}$	7253,36	7208,64	–	6,57(-2)	7,76(-1)	–	1,04(6)	1,24(7)
$6d^2(^3F)7s$	$^2F_{5/2}$	$6d^2(^3F)7p$	$^2F^o_{5/2}$	6665,04	6656,56	–	2,00(-1)	1,40	–	5,01(6)	3,51(7)
$6d^2(^3F)7s$	$^2F_{5/2}$	$6d^2(^3F)7p$	$^2D^o_{3/2}$	11213,82	6468,10	–	7,09(-2)	7,14(-1)	–	9,40(5)	2,84(7)

Tablo 3.4. Devam

Geçiş				λ			gf			A	
				MCHF	MCDF	Diğer Ç.	MCHF	MCDF	Diğer Ç.	MCHF	MCDF
$6d^2(^3F)7s$	$^2F_{5/2}$	-	$6d^2(^1G)7p$	$^2G^o_{7/2}$	-	5158,20	-	8,05(-1)	-	2,52(7)	
$6d^2(^3F)7s$	$^2F_{5/2}$	-	$6d^2(^1D)7p$	$^2D^o_{3/2}$	-	5158,93	-	8,52(-1)	-	5,34(7)	
$6d^2(^3F)7s$	$^2F_{7/2}$	-	$6d^2(^3F)7p$	$^4D^o_{5/2}$	7079,05	6571,38	-	3,87(-2)	8,90(-1)	8,59(5)	
$6d^2(^3F)7s$	$^2F_{7/2}$	-	$6d^2(^3F)7p$	$^2G^o_{9/2}$	-	7247,95	-	1,64	-	2,08(7)	
$6d^2(^3F)7s$	$^2F_{7/2}$	-	$6d^2(^3F)7p$	$^2F^o_{7/2}$	-	6948,93	-	3,16	-	5,46(7)	
$6d^2(^3F)7s$	$^2F_{7/2}$	-	$6d7s(^1D)7p$	$^2D^o_{5/2}$	-	4903,44	-	7,24(-1)	-	3,35(7)	
$6d^2(^3P)7s$	$^4P_{1/2}$	-	$6d^2(^3F)7p$	$^2D^o_{3/2}$	13899,42	5478,44	-	2,53(-2)	2,08(-1)	2,18(5)	
$6d^2(^3P)7s$	$^4P_{1/2}$	-	$6d^2(^3P)7p$	$^4D^o_{1/2}$	3598,90	16654,95	-	8,57(-2)	4,63(-1)	2,20(7)	
$6d^2(^3P)7s$	$^4P_{1/2}$	-	$6d^2(^3P)7p$	$^4P^o_{1/2}$	3117,65	4986,28	-	4,40(-3)	1,89(-1)	1,51(6)	
$6d^2(^3P)7s$	$^4P_{1/2}$	-	$6d^2(^3P)7p$	$^4P^o_{3/2}$	5955,74	5039,94	-	1,51(-1)	4,19(-1)	7,10(6)	
$6d^2(^3P)7s$	$^4P_{1/2}$	-	$6d^2(^3P)7p$	$^4S^o_{3/2}$	6079,30	4766,39	-	4,78(-3)	9,07(-1)	2,15(5)	
$6d^2(^3P)7s$	$^4P_{3/2}$	-	$6d^2(^3F)7p$	$^4D^o_{5/2}$	7167,00	5315,35	-	3,73(-3)	1,02	8,08(4)	
$6d^2(^3P)7s$	$^4P_{3/2}$	-	$6d^2(^3F)7p$	$^2D^o_{3/2}$	4758,43	5633,95	-	1,15(-2)	3,08(-1)	8,51(5)	
$6d^2(^3P)7s$	$^4P_{3/2}$	-	$6d^2(^3P)7p$	$^4D^o_{1/2}$	7832,35	16654,95	-	1,43(-2)	1,35(-1)	7,77(5)	
$6d^2(^3P)7s$	$^4P_{3/2}$	-	$6d^2(^3P)7p$	$^4D^o_{3/2}$	7266,78	6191,46	-	1,78(-1)	5,85(-1)	5,64(6)	
$6d^2(^3P)7s$	$^4P_{3/2}$	-	$6d^2(^3P)7p$	$^4P^o_{1/2}$	5862,77	5114,77	-	3,43(-2)	5,91(-1)	3,32(6)	
$6d^2(^3P)7s$	$^4P_{3/2}$	-	$6d^2(^3P)7p$	$^4P^o_{5/2}$	5448,06	4823,32	-	4,15(-3)	1,33	1,55(5)	
$6d^2(^3P)7s$	$^4P_{3/2}$	-	$6d^2(^3P)7p$	$^4S^o_{3/2}$	6385,47; 7115,60	4883,66	-	4,99(-2); 7,09(-2)	7,48(-1)	2,04(6); 2,33(6)	
$6d^2(^3P)7s$	$^4P_{3/2}$	-	$6d^2(^3P)7p$	$^2S^o_{1/2}$	7284,86	6617,92	-	2,19(-1)	1,43(-1)	1,38(7)	
$6d^2(^3P)7s$	$^4P_{5/2}$	-	$6d^2(^3F)7p$	$^4D^o_{5/2}$	4325,92; 8780,93	6099,65; 5399,93	-	1,83(-2); 7,79(-3)	5,87(-1); 2,79(-1)	1,08(6); 1,12(5)	
$6d^2(^3P)7s$	$^4P_{5/2}$	-	$6d^2(^3P)7p$	$^4P^o_{3/2}$	3547,29	5251,27	-	1,35(-1)	1,35	1,79(7)	
$6d^2(^3P)7s$	$^4P_{5/2}$	-	$6d^2(^3P)7p$	$^4P^o_{5/2}$	6239,02	4892,86	-	2,25(-1)	1,49	6,43(6)	
$6d^2(^3P)7s$	$^4P_{5/2}$	-	$6d^2(^3P)7p$	$^4D^o_{7/2}$	6960,69	5199,53	-	2,10(-1)	3,29	3,62(6)	
$6d^2(^3P)7s$	$^2P_{1/2}$	-	$6d^2(^3P)7p$	$^2S^o_{1/2}$	-	8888,70	-	-	2,55(-1)	-	
$6d^2(^3P)7s$	$^2P_{1/2}$	-	$6d^2(^1D)7p$	$^2P^o_{1/2}$	-	4971,17	-	-	1,35(-1)	-	
$6d^2(^3P)7s$	$^2P_{1/2}$	-	$6d^2(^3F)8p$	$^2D^o_{3/2}$	-	4494,78	-	-	2,38(-1)	-	
$6d^2(^3P)7s$	$^2P_{3/2}$	-	$6d^2(^3P)7p$	$^2S^o_{1/2}$	-	9425,64	-	-	3,80(-1)	-	
$6d^2(^3P)7s$	$^2P_{3/2}$	-	$6d^2(^1D)7p$	$^2P^o_{1/2}$	-	5134,75	-	-	3,82(-1)	-	
$6d^2(^3P)7s$	$^2P_{3/2}$	-	$6d7s(^1D)7p$	$^2D^o_{5/2}$	-	5131,19	-	-	3,89(-1)	-	
$6d7s(^3D)7p$	$^4P^o_{3/2}$	-	$7s7p^2(^3P)$	$^4P_{5/2}$	-	5663,24	-	-	3,25(-1)	-	
$6d7s(^3D)7p$	$^2D^o_{3/2}$	-	$7s7p^2(^3P)$	$^2P_{1/2}$	-	5171,10	-	-	4,54(-1)	-	
$6d7s(^1D)7p$	$^2P^o_{1/2}$	-	$7s7p^2(^1D)$	$^2D_{3/2}$	-	6220,96	-	-	3,73(-1)	-	

Tablo 3.4. Devam

Geçiş	λ			gf			A	
	MCHF	MCDF	Diğer Ç.	MCHF	MCDF	Diğer Ç.	MCHF	MCDF
6d7s(¹ D)7p	² P _{1/2} ^o - 7s7p ² (³ P)	² P _{1/2}	–	–	3,92(-1)	–	–	3,95(7)
7s ² 7p	² P _{1/2} ^o - 6d ² (¹ S)7p	² S _{1/2} ^o	–	–	1,96(-1)	–	–	2,10(7)
7s ² 7p	² P _{1/2} ^o - 6d ² (¹ S)7s	² S _{1/2}	–	–	3,83(-2)	–	–	1,25(7)
7s ² 7p	² P _{1/2} ^o - 6d7p ² (³ P)	⁴ F _{3/2}	–	–	2,53(-1)	–	–	6,17(7)
7s ² 7p	² P _{1/2} ^o - 6d ³	⁴ F _{3/2}	39596,27	3944,55	–	2,40(-3)	1,37(-1)	2,56(3)
7s ² 7p	² P _{1/2} ^o - 6d ³	² D _{3/2}	10080,59	3058,58	–	2,39(-3)	9,45(-2)	3,92(4)
7s ² 7p	² P _{1/2} ^o - 6d ³	² P _{3/2}	6758,93	2818,67	–	7,79(-3)	3,09(-1)	2,84(5)
7s ² 7p	² P _{1/2} ^o - 7s7p ² (³ P)	² P _{1/2}	2131,11	2652,75	–	9,19(-1)	5,67(-1)	6,75(8)
7s ² 7p	² P _{1/2} ^o - 7s7p ² (¹ D)	² D _{3/2}	2201,82	2747,41	–	9,68(-1)	4,07(-1)	3,33(8)
7s ² 7p	² P _{3/2} ^o - 6d ² (¹ S)7p	² S _{1/2} ^o	–	7700,10	–	–	5,80(-1)	–
7s ² 7p	² P _{3/2} ^o - 6d ³	⁴ P _{3/2}	–	3880,76	–	–	1,09(-1)	–
7s ² 7p	² P _{3/2} ^o - 6d ³	² D _{5/2}	11898,78	3472,49	–	3,51(-3)	1,94(-1)	2,76(4)
7s ² 7p	² P _{3/2} ^o - 6d ³	² P _{3/2}	11114,21	3272,63	–	1,46(-3)	2,02(-1)	1,97(4)
7s ² 7p	² P _{3/2} ^o - 7s7p ² (³ P)	⁴ P _{5/2}	3796,89	3433,53	–	6,36(-3)	3,67(-1)	4,90(5)
7s ² 7p	² P _{3/2} ^o - 7s7p ² (¹ D)	² D _{3/2}	–	3176,96	–	–	9,75(-2)	–
7s ² 7p	² P _{3/2} ^o - 7s7p ² (³ P)	² P _{1/2}	2431,55	3051,06	–	4,19(-1)	2,37(-1)	2,36(8)

^a Meggers [19],

^b Sansonetti ve Martin [39],

^c Quinet ve çalışma arkadaşları [40] (log gf değeri)

Tablo 3.5. Ac I'in E2 ve M1 geçişlerine ait λ dalga boyları (Å), gf ağırlıklı salıncı şiddetleri ve A geçiş olasılıkları (sn^{-1})

Geçiş	λ		gf		A				
	MCHF	MCDF	MCHF	MCDF	MCHF	MCDF			
E2 geçişi									
$7s^2 6d$	$^2D_{3/2}$	$6d^3$	$^2F_{5/2}$	3740,23	2266,35	2,33(-8)	1,08(-6)	1,85	2,35(2)
$7s^2 6d$	$^2D_{3/2}$	$6d^2(^1D)8s$	$^2D_{3/2}$	–	2258,15	–	4,40(-7)	–	1,43(2)
M1 geçişi									
$7s^2 6d$	$^2D_{3/2}$	$7s7p^2(^3P)$	$^2P_{1/2}$	1971,36	2460,16	2,27(-11)	2,25(-9)	1,95(-2)	1,24
$7s^2 6d$	$^2D_{3/2}$	$6d7p^2(^3P)$	$^4F_{5/2}$	2949,62	2385,93	4,91(-9)	5,17(-9)	6,28(-1)	1,01
$7s^2 6d$	$^2D_{3/2}$	$6d^2(^1D)8s$	$^2D_{3/2}$	–	2312,28	–	8,95(-9)	–	2,79
$7s^2 6d$	$^2D_{3/2}$	$6d^2(^3P)8s$	$^4P_{5/2}$	1833,97	2306,39	3,82(-8)	8,74(-9)	1,26(1)	1,82
$7s^2 6d$	$^2D_{3/2}$	$6d^2(^3P)8s$	$^4P_{3/2}$	–	2296,75	–	3,81(-9)	–	1,20
$7s^2 6d$	$^2D_{3/2}$	$6d7p^2(^3P)$	$^4D_{1/2}$	–	2293,65	–	5,73(-9)	–	3,63
$7s^2 7p$	$^2P^o_{1/2}$	$7s^2 7p$	$^2P^o_{3/2}$	17248,07	20319,96	5,92(-8)	2,74(-7)	3,31(-1)	1,10
$7s^2 7p$	$^2P^o_{1/2}$	$6d7s(^3D)7p$	$^4P^o_{1/2}$	–	6118,20	–	1,15(-8)	–	1,02
$6d7s(^3D)7p$	$^4F^o_{3/2}$	$6d7s(^3D)7p$	$^4D^o_{5/2}$	–	14493,33	–	1,94(-7)	–	1,02
$6d^2(^1D)7s$	$^2D_{3/2}$	$6d7p^2(^3P)$	$^4D_{1/2}$	–	3984,57	–	7,17(-9)	–	1,50
$6d^3$	$^4F_{3/2}$	$6d^2(^3F)7p$	$^2D^o_{3/2}$	–	19526,87	–	5,97(-7)	–	2,61
$6d^3$	$^4F_{3/2}$	$6d^2(^1D)8p$	$^2D^o_{3/2}$	–	7418,47	–	2,12(-7)	–	6,44
$6d^3$	$^4F_{3/2}$	$6d^2(^3F)8p$	$^4D^o_{1/2}$	–	7112,78	–	9,11(-8)	–	6,00
$6d^3$	$^4F_{3/2}$	$6d^2(^3F)8p$	$^4D^o_{3/2}$	–	6908,10	–	2,27(-7)	–	7,94
$6d^3$	$^4F_{3/2}$	$6d^2(^3P)7p$	$^2D^o_{3/2}$	–	6005,25	–	2,21(-7)	–	1,02(1)
$6d^3$	$^4F_{3/2}$	$6d^2(^3P)7p$	$^2P^o_{3/2}$	–	5939,61	–	1,77(-6)	–	8,36(1)
$6d^3$	$^4F_{9/2}$	$6d7p^2(^3P)$	$^4F_{3/2}$	–	8560,42	–	6,28(-7)	–	7,15
$6d^2(^3F)7p$	$^4F^o_{3/2}$	$7s7p^2(^3P)$	$^4P_{3/2}$	–	16298,88	–	1,64(-7)	–	1,03
$6d7s(^3D)7p$	$^2P^o_{3/2}$	$6d^2(^3P)7p$	$^2S^o_{3/2}$	–	15186,58	–	2,16(-7)	–	1,56
$6d7s(^3D)7p$	$^2P^o_{3/2}$	$6d^2(^1D)7p$	$^2D^o_{3/2}$	–	12851,36	–	4,29(-6)	–	4,33(1)
$6d7s(^3D)7p$	$^2P^o_{3/2}$	$6d^2(^1D)7p$	$^2P^o_{3/2}$	–	10678,64	–	2,57(-6)	–	3,76(1)
$6d7s(^3D)7p$	$^2P^o_{3/2}$	$6d^2(^3P)7p$	$^2P^o_{1/2}$	21386,63	9916,12	6,73(-9)	3,46(-7)	2,45(-2)	1,17(1)
$6d7s(^3D)7p$	$^2P^o_{3/2}$	$6d^2(^3F)7p$	$^2D^o_{5/2}$	–	9902,83	–	2,04(-7)	–	2,31
$6d7s(^3D)7p$	$^2P^o_{3/2}$	$6d^2(^3P)7p$	$^2D^o_{3/2}$	–	6498,22	–	4,51(-8)	–	1,78
$6d^3$	$^4P_{3/2}$	$6d^3$	$^2F_{5/2}$	15860,70	9538,94	1,49(-8)	8,65(-8)	6,62(-2)	1,05

3.2. Ac II için Enerji ve Işımalı Geçiş Parametreleri Hesapları

Bir kez iyonlaşmış aktinyumun enerji seviyeleri katlı-küme [34], lantanit ve aktinitlerin gaz iyonlarının elektronik konfigürasyonlarının tahmini için tanımlanan bir yöntemle [50], relativistik yerel spin yoğunluk fonksiyoneli ile dipol salıncı [49] ve yarı deneysel Hartree-Fock yöntemiyle [40] iyonlaşma potansiyeli [41] incelendi. Ayrıca atomik elektron bağlanma enerjilerindeki fiziksel ve kimyasal kaymaları Sevier [51] tarafından ele alındı.

3.2.1. Enerji seviyeleri hesapları

Bir kez iyonlaşmış aktinyum iyonunun MCHF hesabı sırasında gerçekleştirilen tekrarlamalı süreç sırasında yakınsama elde edilemediği için MCHF yöntemiyle herhangi bir hesaplama gerçekleştirilememiştir.

Relativistik ve öz kutuplanma etkilerinin düşük iyonlaşma dereceleri için katkısı oldukça büyüktür. Bu sebeple hesaplamalarda dikkate alınması gerekmektedir. Ayrıca kapalı özden uyarımların da hesaplamaları çoğunlukla iyileştirdiği bilinmektedir. Bu sebeple bir kez iyonlaşmış aktinyum için hesaplamalar çeşitli konfigürasyon takımlarıyla gerçekleştirilmiştir. A çalışmasında, yalnızca değerlik elektronları arasındaki karşılıklı etkileşimler dikkate alınmıştır. B çalışmasında 6p özünden, C çalışmasında 6s özünden ve D çalışmasında ise hem 6s hem de 6p özünden uyarımlar dikkate alınmaktadır. Kullanılan konfigürasyon takımları Tablo 3.6'da verilmektedir. 6s ve 6p'den daha iç tabakalardan yapılan uyarımların dikkate alındığı çalışmalar da denenmiş ancak bu hesaplamalarda MCDF hesabı sırasındaki tekrarlamalı süreçte yakınsama elde edilememiştir.

Tablo 3.6. Ac II'ye ait hesaplamalarda kullanılan konfigürasyon takımları

Hesap	Çift Parite	Tek Parite
A	$7s^2, 6d7s, 6d^2, 7s8s$	$7s7p, 6d7p, 5f7s, 5f6d$
B	$A + 5f6p^57s^2$	$A + 6p^56d^27s, 6p^56d7s^2$
C	$A + 6s6d^27s, 6s6d7s^2$	$A + 5f6s7s^2$
D	$A + 5f6p^57s^2, 6s6d^27s, 6s6d7s^2$	$A + 6p^56d^27s, 6p^56d7s^2, 5f6s7s^2$

Ac II için yapılan A, B, C ve D hesaplamalarında sırasıyla 56, 170, 96 ve 210 seviye incelenmiştir. Bu seviyelere ait sonuçlar Tablo 3.7’de sunulmaktadır. Elde edilen sonuçlar diğer çalışma sonuçlarıyla karşılaştırıldığında özellikle $6d7s$ ve $6d^2$ seviyelerinde uyum görülmektedir. Genel olarak bakıldığında bir kez iyonlaşmış aktinyum için A hesabı, mevcut kaynaklardaki deney sonuçlarına daha yakın iken B ve C çalışma sonuçları hesap sonuçlarıyla daha uyumludur. Örneğin ilk uyarılmış seviye olan $6d7s \ ^3D_1$ seviyesinin enerjisi Meggers ve çalışma arkadaşları tarafından $4739,63 \text{ cm}^{-1}$ [20,105], Moore tarafından $4742,50 \text{ cm}^{-1}$ (0,588 eV) [109] olarak ölçülmüş, bu çalışmada MCDF enerjisi A konfigürasyon takımıyla $4444,13 \text{ cm}^{-1}$, B ve C konfigürasyon takımlarıyla $5102,29 \text{ cm}^{-1}$ ve $5014,23 \text{ cm}^{-1}$ olarak hesaplanmıştır. Eliav ve çalışma arkadaşlarının yaptığı Dirac-Coulomb ve Dirac-Coulomb-Breit hesabı sonuçlarında ise bu seviyenin enerjisi $5113,51 \text{ cm}^{-1}$ ve $5024,79 \text{ cm}^{-1}$ (0,634 eV ve 0,623 eV) [35] olarak tespit edilmiştir. Düşük seviyelerdeki bu uyum yüksek seviyelere doğru gidildikçe bir miktar azalmasına rağmen, $7s8s \ ^1S_0$ seviyesi için bulunan $53177,24 \text{ cm}^{-1}$ (A çalışması) değeri $53374,01 \text{ cm}^{-1}$ deneysel değeri [105] ile oldukça uyumludur.

3.2.2. Işımalı geçiş parametreleri hesapları

MCDF hesabıyla bir kez iyonlaşmış aktinyum için 3.2.1 kısmında bahsi geçen A, B, C ve D hesaplarından sırasıyla; 316, 2079, 1207 ve 9366 elektrik dipol (E1), 647, 7637, 1676 ve 4994 elektrik kuadrupol (E2) ve 452, 5457, 1199 ve 6640 manyetik dipol (M1) geçişi elde edildi. Genel olarak, A çalışmasının enerji değerleri diğer çalışmalara göre daha uyumlu olduğu için yalnızca bu çalışmaya ait E1 geçiş verileri Tablo 3.8’de sunulmaktadır. Verilerin çokluğu nedeniyle bu tabloda yalnızca iyonlaşma potansiyeli altındaki seviyeler arasında yapılan geçişlerin $A > 10^7 \text{ sn}^{-1}$ olanları ve tabloda yer alan büyüklüklerden herhangi birinde karşılaştırma değeri olan geçişlere yer verildi. Ac II’nin dalga boyu karşılaştırmalarına bakıldığında, enerjileri mevcut kaynaklarla uyumlu olan $6d7s - 7d7p$ geçişlerinin dalga boylarının da uyumlu olduğu görülmektedir. Örneğin $6d7s \ ^3D_3 - 7d7p \ ^3D_3$ geçişi dalga boyu Meggers’in [19] deneysel değeriyle karşılaştırıldığında aradaki fark $\Delta\lambda = 61 \text{ \AA}$ kadardır. Ağırlıklı salınıcı şiddeti için ulaşılabilir kaynaklarda Quinet ve çalışma arkadaşlarının [40], [105]’ten aldıkları deneysel dalga boyları ile yaptıkları hesaplar

Tablo 3.7. Ac II'nin uyarılmış seviyelerinin enerjileri (cm⁻¹)

Seviye	MCDF	+B+QED	Diğer Ç.	Konfigürasyon Katkıları
7s ² 1S ₀	A	0,00	0,00	92,81 + 6,93 6d ² 1S ₀
	B	0,00	0,00	94,81 + 5,17 6d ² 1S ₀
	C	0,00	0,00	94,60 + 5,33 6d ² 1S ₀
	D	0,00	0,00	95,16 + 4,79 6d ² 1S ₀
6d7s 3D ₁	A	4444,13	4474,98	4739,63 ^{a,e} ; 100,00
	B	5102,29	5179,34	0,634 ^{b1} ; 99,91 + 0,09 5f6p ⁵ 7s ² 3D ₁
	C	5014,23	5083,74	0,623 ^{b2} ; 99,98 + 0,02 6s6d ² 7s 3D ₁
	D	5287,04	5365,84	0,588 ^c ; 99,89 + 0,09 5f6p ⁵ 7s ² 3D ₁
3D ₂	A	4992,36	5008,60	4740 ^d ; 5267,16 ^{a,e} ; 94,05 + 4,59 6d7s 1D ₂
	B	5635,64	5693,72	0,702 ^{b1} ; 95,52 + 3,59 6d7s 1D ₂
	C	5527,75	5578,36	0,690 ^{b2} ; 95,29 + 3,78 6d7s 1D ₂
	D	5814,05	5872,89	0,653 ^c ; 95,73 + 3,45 6d7s 1D ₂
3D ₃	A	6391,20	6352,19	7426,52 ^{a,e} ; 100,00
	B	6898,74	6892,74	0,976 ^{b1} ; 99,95 + 0,04 5f6p ⁵ 7s ² 3D ₃
	C	6779,40	6766,29	0,960 ^{b2} ; 99,97 + 0,02 6s6d ² 7s 3D ₃
	D	7051,92	7046,30	0,921 ^c ; 99,93 + 0,04 5f6p ⁵ 7s ² 3D ₃
1D ₂	A	8636,00	8623,12	9087,54 ^{a,e} ; 61,13 + 31,44 6d ² 1D ₂
	B	9705,74	9731,72	1,194 ^{b1} ; 68,69 + 26,43 6d ² 1D ₂
	C	9463,59	9475,54	1,176 ^{b2} ; 67,14 + 27,55 6d ² 1D ₂
	D	9976,70	9996,40	1,127 ^c ; 70,36 + 25,06 6d ² 1D ₂
6d ² 3F ₂	A	13260,36	13309,02	13236,46 ^{a,e} ; 97,97 + 1,97 6d7s 1D ₂
	B	15733,06	15854,17	1,727 ^{b1} ; 99,06 + 0,86 6d7s 1D ₂
	C	14995,46	15076,38	1,704 ^{b2} ; 98,88 + 1,04 6d7s 1D ₂
	D	16208,78	16308,41	1,641 ^c ; 99,09 + 0,75 6d7s 1D ₂
3F ₃	A	14308,08	14316,67	13236 ^d ; 14949,21 ^{a,e} ; 100,00
	B	16654,41	16723,87	1,944 ^{b1} ; 100,00
	C	15943,61	15974,76	1,916 ^{b2} ; 99,98 + 0,02 6s6d ² 7s 3F ₃
	D	17118,19	17165,92	1,853 ^c ; 99,95 + 0,04 6s6d ² 7s 3F ₃
3F ₄	A	15678,73	15636,74	16756,90 ^{a,e} ; 99,04 + 0,96 6d ² 1G ₄
	B	17847,84	17855,35	2,177 ^{b1} ; 99,44 + 0,56 6d ² 1G ₄
	C	17172,60	17143,34	2,147 ^{b2} ; 99,38 + 0,60 6d ² 1G ₄
	D	18291,09	18276,98	2,078 ^c ; 99,43 + 0,52 6d ² 1G ₄
3P ₀	A	19935,39	19969,76	17737,10 ^{a,e} ; 99,17 + 0,70 6d ² 1S ₀
	B	22852,12	22950,29	2,312 ^{b1} ; 99,46 + 0,50 6d ² 1S ₀
	C	22093,78	22153,35	2,289 ^{b2} ; 99,40 + 0,53 6d ² 1S ₀
	D	23381,31	23457,41	2,199 ^c ; 99,43 + 0,48 6d ² 1S ₀
3P ₁	A	20366,75	20376,45	19015,32 ^{a,e} ; 100,00
	B	23179,13	23249,95	2,471 ^{b1} ; 100,00
	C	22440,79	22473,29	2,444 ^{b2} ; 99,98 + 0,02 6s6d ² 7s 3P ₁
	D	23698,94	23748,05	2,358 ^c ; 99,95 + 0,04 6s6d ² 7s 3P ₁
3P ₂	A	20915,01	20905,91	22199,45 ^{a,e} ; 96,50 + 1,86 6d7s 1D ₂
	B	23622,51	23672,48	2,922 ^{b1} ; 96,42 + 2,14 6d ² 1D ₂
	C	22903,98	22915,33	2,893 ^{b2} ; 96,48 + 2,00 6d ² 1D ₂
	D	24123,91	24152,69	2,752 ^c ; 96,10 + 2,43 6d ² 1D ₂
1G ₄	A	22821,76	22810,17	20848,23 ^{a,e} ; 99,04 + 0,96 6d ² 3F ₄
	B	25752,53	25799,63	2,714 ^{b1} ; 99,44 + 0,56 6d ² 3F ₄
	C	25069,85	25079,21	2,685 ^{b2} ; 99,39 + 0,60 6d ² 3F ₄
	D	26342,76	26368,71	2,585 ^c ; 99,45 + 0,52 6d ² 3F ₄
1D ₂	A	25654,96	25630,48	19203,02 ^{a,e} ; 65,62 + 30,44 6d7s 1D ₂
	B	27729,77	27755,14	2,509 ^{b1} ; 70,56 + 25,42 6d7s 1D ₂
	C	27186,00	27166,99	2,484 ^{b2} ; 69,50 + 26,54 6d7s 1D ₂
	D	28053,57	28047,69	2,381 ^c ; 71,66 + 23,97 6d7s 1D ₂
1S ₀	A	37011,20	36972,75	3,889 ^{b1} ; 88,52 + 7,06 7s ² 1S ₀
	B	39802,21	39795,81	3,684 ^{b2} ; 83,68 + 11,46 7s8s 1S ₀
	C	39218,33	39177,95	85,07 + 9,88 7s8s 1S ₀
	D	40309,85	40280,04	82,88 + 12,66 7s8s 1S ₀
7s7p 3P ₀	A	16873,86	16815,19	20956,40 ^{a,e} ; 96,61 + 3,37 6d7p 3P ₀
	B	15659,67	15575,40	20956 ^d ; 98,24 + 1,37 6d7p 3P ₀
	C	16491,10	16397,16	97,68 + 2,29 6d7p 3P ₀
	D	15636,30	15546,24	98,32 + 1,30 6d7p 3P ₀

Tablo 3.7. Devam

Seviye		MCDF	+B+QED	Diğer Ç.	Konfigürasyon Katkıları		
7s7p	$^3P^o_1$	A	18256,29	18194,39	22180,52 ^{a,e}	83,44 + 6,70	7s7p $^1P^o_1$
		B	17115,75	17029,26		85,11 + 7,77	7s7p $^1P^o_1$
		C	17960,55	17863,72		85,65 + 6,40	7s7p $^1P^o_1$
		D	17106,49	17014,48		85,54 + 7,62	7s7p $^1P^o_1$
$^3P^o_2$	A	23965,15	23855,52	26446,96 ^a ,	82,94 + 8,35	6d7p $^3F^o_2$	
	B	23019,83	22917,68	31878,87 ^e	61,05 + 22,23	6d7p $^3F^o_2$	
	C	23721,96	23646,94		48,35 + 38,61	7s7p $^3P^o_2$	
	D	23041,21	22910,94		83,69 + 7,04	6d7p $^3F^o_2$	
$^1P^o_1$	A	26634,71	26569,76	33388,61 ^e	33,59 + 29,81	6d7p $^1P^o_1$	
	B	25300,92	25226,58		31,42 + 31,09	6d7p $^1P^o_1$	
	C	26232,34	26145,68		32,50 + 29,75	6d7p $^1P^o_1$	
	D	25385,42	25309,39		32,04 + 31,58	6d7p $^1P^o_1$	
6d7p	$^3F^o_2$	A	23315,96	23304,22	28201,11 ^a ,	65,31 + 16,15	6d7p $^1D^o_2$
		B	23328,80	23289,57	26447 ^d ,	47,69 + 34,63	7s7p $^3P^o_2$
		C	23437,51	23338,66	26446,96 ^e	45,84 + 34,29	6d7p $^3F^o_2$
		D	23479,27	23465,81		62,71 + 17,74	6d7p $^1D^o_2$
$^3F^o_3$	A	26961,62	26895,88	31174,6 ^e	77,06 + 11,04	5f 7s $^3F^o_3$	
	B	26872,13	26798,07		75,89 + 10,20	6d7p $^3D^o_3$	
	C	27042,51	26946,11		76,12 + 8,73	5f 7s $^3F^o_3$	
	D	27071,60	26998,08		76,36 + 10,49	6d7p $^3D^o_3$	
$^3F^o_4$	A	31312,44	31191,22	39119,02 ^{b,e}	82,15 + 17,59	5f7s $^3F^o_4$	
	B	31380,47	31253,94		88,04 + 11,74	5f7s $^3F^o_4$	
	C	31404,90	31252,83		86,13 + 13,73	5f7s $^3F^o_4$	
	D	31554,89	31428,16		88,92 + 10,86	5f7s $^3F^o_4$	
$^3D^o_1$	A	31003,00	30921,82	33388,61 ^a ,	70,30 + 17,93	7s7p $^1P^o_1$	
	B	29379,38	29292,73	29250,4 ^e	70,53 + 19,33	7s7p $^1P^o_1$	
	C	30297,35	30190,95		70,33 + 19,13	7s7p $^1P^o_1$	
	D	29463,04	29379,02		71,58 + 18,81	7s7p $^1P^o_1$	
$^3D^o_2$	A	31597,44	31525,47	33304,96 ^{a,e}	71,39 + 14,34	6d7p $^1D^o_2$	
	B	30383,89	30314,56		62,72 + 20,78	6d7p $^1D^o_2$	
	C	30949,29	30858,22		68,87 + 17,69	6d7p $^1D^o_2$	
	D	30497,07	30431,19		62,53 + 20,94	6d7p $^1D^o_2$	
$^3D^o_3$	A	34699,11	34580,03	36144,35 ^a ,	69,17 + 14,62	6d7p $^1F^o_3$	
	B	33840,70	33740,55	36972,94 ^e	45,57 + 34,42	6d7p $^1F^o_3$	
	C	34093,16	33947,35		60,35 + 25,06	6d7p $^1F^o_3$	
	D	31662,23	31606,57		47,05 + 25,00	6d7p $^1F^o_3$	
$^3P^o_0$	A	35134,03	35066,52	36780,01 ^e	91,17 + 5,79	5f6d $^3P^o_0$	
	B	33920,93	33856,77		95,79 + 2,51	5f6d $^3P^o_0$	
	C	34632,04	34546,66		94,72 + 3,16	5f6d $^3P^o_0$	
	D	34084,84	33989,40		96,21 + 2,14	5f6d $^3P^o_0$	
$^3P^o_1$	A	35131,66	35052,35	36855,50 ^e	85,50 + 5,68	5f6d $^3P^o_1$	
	B	33891,97	33812,70		89,51 + 4,35	6d7p $^3D^o_1$	
	C	34649,89	34547,98		89,40 + 3,17	5f6d $^3P^o_1$	
	D	34021,83	33945,82		90,05 + 4,27	6d7p $^3D^o_1$	
$^3P^o_2$	A	35583,69	35458,07	38371,64 ^e	68,95 + 11,21	6d7p $^3D^o_2$	
	B	34348,35	34214,69		74,00 + 11,47	6d7p $^1D^o_2$	
	C	35033,81	34878,70		73,79 + 11,60	6d7p $^1D^o_2$	
	D	34461,96	34330,53		74,72 + 11,37	6d7p $^1D^o_2$	
$^1F^o_3$	A	31844,54	31810,73	41937,05 ^e	41,76 + 25,82	5f7s $^1F^o_3$	
	B	31453,87	31403,18		41,78 + 27,95	6d7p $^1D^o_3$	
	C	31580,05	31512,78		39,09 + 29,28	6d7p $^3D^o_3$	
	D	34052,86	33992,62		40,34 + 39,41	6d7p $^3D^o_3$	
$^1D^o_2$	A	29203,44	29117,45	31878,87 ^a ,	55,96 + 14,29	6d7p $^3P^o_2$	
	B	27896,27	27799,82	35397,12 ^e	43,54 + 22,17	6d7p $^3D^o_2$	
	C	28803,69	28686,70		51,46 + 16,75	6d7p $^3D^o_2$	
	D	28027,18	27931,83		43,27 + 22,89	6d7p $^3D^o_2$	
$^1P^o_1$	A	46979,59	46898,43	44199,94 ^e	39,94 + 35,19	7s7p $^1P^o_1$	
	B	45604,15	45496,80		51,65 + 35,18	6d7p $^1P^o_1$	
	C	46222,77	46103,79		47,30 + 37,43	7s7p $^1P^o_1$	
	D	45846,88	45737,68		53,06 + 35,55	7s7p $^1P^o_1$	
5f7s	$^3F^o_2$	A	42006,44	42099,66	28201 ^d	73,39 + 18,41	5f6d $^3F^o_2$
		B	41823,90	41959,21		86,48 + 5,72	6d7p $^3F^o_2$
		C	44065,35	44150,11		79,90 + 12,68	5f6d $^3F^o_2$
		D	42467,56	42603,11		87,53 + 5,47	6d7p $^3F^o_2$

Tablo 3.7. Devam

Seviye		MCDF	+B+QED	Diğer Ç.	Konfigürasyon Katkıları		
5f7s	$^3F^o_3$	A	42713,86	42762,99	–	70,71 + 18,68	5f6d $^3F^o_3$
		B	42465,71	42556,55		83,61 + 7,17	6d7p $^3F^o_3$
		C	44579,13	44622,27		77,81 + 12,54	5f6d $^3F^o_3$
		D	43098,73	43190,76		84,63 + 6,78	6d7p $^3F^o_3$
$^3F^o_4$	A	43737,66	43730,28	32965,55 ^a	63,52 + 21,29	5f6d $^3F^o_4$	
	B	43534,46	43549,07		81,76 + 10,09	6d7p $^3F^o_4$	
	C	45422,47	45397,92		74,98 + 13,78	5f6d $^3F^o_4$	
	D	44172,56	44186,45		83,35 + 9,45	6d7p $^3F^o_4$	
$^1F^o_3$	A	48406,78	48415,05	29881,09 ^a ,	42,24 + 28,71	5f6d $^1F^o_3$	
	B	48334,76	48362,28	36144,35 ^e	56,91 + 25,29	6d7p $^1F^o_3$	
	C	49924,94	49923,14		55,23 + 21,21	6d7p $^1F^o_3$	
	D	48803,23	48831,37		59,81 + 24,61	6d7p $^1F^o_3$	
5f6d	$^3H^o_4$	A	44522,48	44665,39	39807,14 ^{b,e}	81,66 + 16,00	5f6d $^1G^o_4$
		B	50232,96	50455,37	38907 ^d	58,28 + 41,17	5f6d $^1G^o_4$
		C	47753,52	47910,36		74,52 + 25,08	5f6d $^1G^o_4$
		D	52777,72	52948,36		51,42 + 47,58	5f6d $^1G^o_4$
$^3H^o_5$	A	45803,01	45866,17	40916,41 ^e	99,98 + 0,02	5f6d $^3G^o_5$	
	B	51318,98	51458,92		99,97 + 0,02	5f6d $^3G^o_5$	
	C	48822,64	48890,31		99,97 + 0,02	5f6d $^3G^o_5$	
	D	53107,26	53273,58		99,98 + 0,01	5f6d $^3G^o_5$	
$^3H^o_6$	A	47107,48	47084,67	–	100,00		
	B	52251,62	52292,89		99,98 + 0,02	6p ⁵ 6d ² 7s $^3H^o_6$	
	C	49854,82	49828,39		100,00		
	D	53997,52	54061,70		99,98 + 0,02	6p ⁵ 6d ² 7s $^3H^o_6$	
$^3G^o_3$	A	56544,58	56669,21	45807,06 ^e	99,49 + 0,18	5f7s $^1F^o_3$	
	B	62197,45	62407,34		99,26 + 0,32	5f6d $^1F^o_3$	
	C	60157,08	60292,65		99,61 + 0,21	5f6d $^1F^o_3$	
	D	63816,24	64054,88		99,28 + 0,32	5f6d $^1F^o_3$	
$^3G^o_4$	A	57295,38	57359,63	47427,67 ^e	99,89 + 0,08	5f6d $^3F^o_4$	
	B	62670,59	62808,72		99,53 + 0,27	6p ⁵ 6d7s $^3G^o_4$	
	C	60708,78	60777,51		99,90 + 0,07	5f6d $^3F^o_4$	
	D	64265,91	64430,18		99,54 + 0,28	6p ⁵ 6d ² 7s $^3G^o_4$	
$^3G^o_5$	A	58260,26	58253,62	49151,54 ^e	99,87 + 0,10	5f6d $^1H^o_5$	
	B	63291,33	63346,63		99,49 + 0,42	6p ⁵ 6d7s $^3G^o_5$	
	C	61434,28	61425,15		99,93 + 0,04	5f6d $^1H^o_5$	
	D	64859,75	64938,16		99,48 + 0,43	6p ⁵ 6d ² 7s $^3G^o_5$	
$^3F^o_2$	A	48943,09	49063,47	41578,57 ^e	76,59 + 14,45	5f7s $^3F^o_2$	
	B	53787,83	53990,34		91,96 + 4,10	5f7s $^3F^o_2$	
	C	51876,97	51737,00		84,13 + 10,33	5f7s $^3F^o_2$	
	D	55430,90	55660,74		93,08 + 3,44	5f7s $^3F^o_2$	
$^3F^o_3$	A	49668,88	49726,18	43275,85 ^e	75,55 + 15,24	5f7s $^3F^o_3$	
	B	54229,44	54366,73		93,50 + 4,51	5f7s $^3F^o_3$	
	C	51844,80	51971,33		84,74 + 10,85	5f7s $^3F^o_3$	
	D	55847,99	56011,22		94,56 + 3,78	5f7s $^3F^o_3$	
$^3F^o_4$	A	50471,11	50460,23	45040,30 ^e	77,90 + 14,95	5f7s $^3F^o_4$	
	B	54789,74	54848,97		91,90 + 4,69	5f7s $^3F^o_4$	
	C	52909,04	52899,91		85,04 + 10,50	5f7s $^3F^o_4$	
	D	56385,79	56468,42		93,01 + 3,95	5f7s $^3F^o_4$	
$^3D^o_1$	A	59110,14	59201,84	48518,41 ^e	95,71 + 3,92	6d7p $^3D^o_1$	
	B	64545,78	64717,48		97,73 + 1,76	6d7p $^3D^o_1$	
	C	62457,14	62554,89		97,51 + 2,36	6d7p $^3D^o_1$	
	D	66149,04	66348,62		97,79 + 1,47	6d7p $^3D^o_1$	
$^3D^o_2$	A	59402,40	59458,99	49479,05 ^e	95,60 + 4,01	6d7p $^3D^o_2$	
	B	64712,01	64846,32		97,75 + 1,74	6d7p $^3D^o_2$	
	C	62622,44	62686,48		97,30 + 2,38	6d7p $^3D^o_2$	
	D	66324,84	66485,49		97,84 + 1,44	6d7p $^3D^o_2$	
$^3D^o_3$	A	59811,34	59829,86	50059,70 ^e	95,36 + 4,16	6d7p $^3D^o_3$	
	B	64961,86	65053,14		97,54 + 1,74	6d7p $^3D^o_3$	
	C	62884,95	62908,16		97,25 + 2,40	6d7p $^3D^o_3$	
	D	66588,26	66704,51		97,84 + 1,44	6d7p $^3D^o_3$	
$^3P^o_0$	A	59925,37	59999,67	49780,60 ^e	94,19 + 5,47	6d7p $^3P^o_0$	
	B	65490,15	65643,72		97,29 + 2,40	6d7p $^3P^o_0$	
	C	63207,29	63285,23		96,81 + 3,00	6d7p $^3P^o_0$	
	D	67169,02	67350,90		97,66 + 2,05	6d7p $^3P^o_0$	

Tablo 3.7. Devam

Seviye	MCDF	+B+QED	Diğer Ç.	Konfigürasyon Katkıları				
5f6d	$^3P^o_1$	A	60076,31	60137,82	50235,60 ^e	93,41 + 5,82	6d7p	$^3P^o_1$
		B	65590,01	65728,93		96,75 + 2,60	6d7p	$^3P^o_1$
		C	63286,30	63351,87		96,35 + 3,30	6d7p	$^3P^o_1$
		D	67293,87	67460,11		96,92 + 2,23	6d7p	$^3P^o_1$
	$^3P^o_2$	A	60361,78	60383,00	51257,51 ^e	92,79 + 6,37	6d7p	$^3P^o_2$
		B	65753,00	65851,09		96,40 + 2,93	6d7p	$^3P^o_2$
		C	63400,64	63430,56		95,60 + 3,78	6d7p	$^3P^o_2$
		D	67501,90	67625,75		96,66 + 2,53	6d7p	$^3P^o_2$
	$^1H^o_5$	A	70639,06	70685,36	-	99,90 + 0,10	5f6d	$^3G^o_5$
		B	77185,56	77302,56		99,41 + 0,48	6p ⁵ 6d7s	$^1H^o_5$
		C	74924,79	74974,67		99,95 + 0,04	5f6d	$^3G^o_5$
		D	78928,12	79070,51		99,39 + 0,49	6p ⁵ 6d ² 7s	$^1H^o_5$
	$^1G^o_4$	A	45972,47	46014,06	41627,79 ^e	79,47 + 17,56	5f6d	$^3H^o_4$
		B	51062,28	51197,19		57,08 + 41,68	5f6d	$^3H^o_4$
		C	48791,63	48841,82		73,03 + 25,43	5f6d	$^3H^o_4$
		D	51993,97	52235,83		50,78 + 48,54	5f6d	$^3H^o_4$
	$^1F^o_3$	A	66546,86	66563,79	53255,3 ^e	68,26 + 15,96	5f7s	$^1F^o_3$
		B	69983,51	70079,18		84,37 + 8,52	5f7s	$^1F^o_3$
		C	68658,08	68683,24		77,63 + 12,82	5f7s	$^1F^o_3$
		D	71220,89	71341,77		86,82 + 7,28	5f7s	$^1F^o_3$
$^1D^o_2$	A	52388,62	52426,71	44705,33 ^e	92,20 + 4,48	5f6d	$^3F^o_2$	
	B	57590,82	57704,19		96,05 + 2,29	5f6d	$^3F^o_2$	
	C	55362,10	55404,03		95,34 + 2,84	5f6d	$^3F^o_2$	
	D	59255,73	59395,45		96,46 + 2,05	5f6d	$^3F^o_2$	
$^1P^o_1$	A	74479,77	74491,87	56152,2 ^e	76,60 + 15,12	6d7p	$^1P^o_1$	
	B	78387,63	78487,17		89,72 + 6,74	6d7p	$^1P^o_1$	
	C	76456,00	76484,36		86,41 + 8,83	6d7p	$^1P^o_1$	
	D	79798,20	79925,87		91,46 + 5,61	6d7p	$^1P^o_1$	
7s8s	3S_1	A	48267,83	48114,01	51680,55 ^e	100,00		
		B	46780,38	46609,21		100,00		
		C	47022,59	46836,98		100,00		
		D	46667,34	46492,67		100,00		
1S_0	A	53177,24	53031,00	53374,01 ^e	96,14 + 3,85	6d ²	1S_0	
	B	51794,52	51676,70		88,51 + 10,66	6d ²	1S_0	
	C	52337,31	52399,83		90,06 + 9,06	6d ²	1S_0	
	D	51752,20	51626,56		87,31 + 11,82	6d ²	1S_0	

^a Meggers ve açılışma arkadaşları [20] (Bu değerlere [39, 105, 106]'dan de ulaşılabilir.),

^{b1, b2} Eliav [35] (eV biriminde),

^c Moore [109] (eV biriminde) (Bu değerlere [106]'dan de ulaşılabilir.),

^d Brewer [50], ^e NIST atomic data base [105]

vardır. Bu değerlerde genel olarak iyi bir uyum elde edilememesine karşın, 6d7s 1D_2 - 6d7p $^3P^o_2$ geçişinde olduğu gibi yakın değerler mevcuttur. Bu geçişin A çalışmasında elde edilen -0,20 logaritmik ağırlıklı salıncı şiddeti -0,24 karşılaştırma değeriyle oldukça uyumludur. E2 ve M1 geçişlerine ait veriler Tablo 3.9'da sunulmaktadır. E1 geçişlerinin A geçiş olasılıkları ve yasaklı geçişlerin herhangi bir ışınım parametresine ait bilinen karşılaştırma değeri mevcut değildir.

Tablo 3.8. Ac II'nin E1 geçişlerine ait λ dalga boyları (Å), gf ağırlıklı salıncı şiddetleri ve A geçiş olasılıkları (sn^{-1})

Geçiş				λ		gf		A	
				+B+QED	Diğer Ç.	+B+QED	Diğer Ç.	+B+QED	
7s ²	¹ S ₀	-	6d7p	³ D ₁ ^o	3233,96	2994,17 ^a	5,90(-1)	-0,19 ^b	1,25(8)
7s ²	¹ S ₀	-	6d7p	¹ P ₁ ^o	2132,26	-	1,51	-	7,43(8)
7s ²	¹ S ₀	-	7s7p	¹ P ₁ ^o	3763,67	-	9,39(-1)	-0,21 ^b	1,47(8)
7s ²	¹ S ₀	-	7s7p	³ P ₁ ^o	5496,19	4507,20 ^{a, c}	1,57(-1)	-1,04 ^b	1,15(7)
6d7s	³ D ₁	-	6d7p	³ D ₁ ^o	3781,17	3489,53 ^a	6,99(-1)	-	1,08(8)
6d7s	³ D ₁	-	6d7p	³ P ₀ ^o	3268,87	3120,16 ^a	7,01(-1)	-	4,37(8)
6d7s	³ D ₁	-	6d7p	³ P ₁ ^o	3270,39	3112,83 ^a	8,30(-1)	-0,31 ^b	1,72(8)
6d7s	³ D ₁	-	6d7p	¹ D ₂ ^o	4058,03	-	2,35(-2)	0,14 ^b	1,90(6)
6d7s	³ D ₁	-	5f7s	³ F ₂ ^o	2657,83	-	2,45	-	4,64(8)
6d7s	³ D ₁	-	5f6d	³ F ₂ ^o	2242,73	-	8,02(-1)	-	2,12(8)
6d7s	³ D ₁	-	5f6d	³ P ₀ ^o	1801,00	-	8,34(-2)	-	1,71(8)
6d7s	³ D ₁	-	7s7p	³ P ₀ ^o	8103,59	-	1,56(-1)	-0,85 ^b	1,58(7)
6d7s	³ D ₁	-	7s7p	³ P ₁ ^o	7288,94	-	1,40(-1)	-0,93 ^b	5,87(6)
6d7s	³ D ₁	-	7s7p	³ P ₂ ^o	5159,81	-	2,59(-2)	-1,66 ^b	1,30(6)
6d7s	³ D ₁	-	7s7p	¹ P ₁ ^o	5465,78	-	2,31(-1)	-0,21 ^b	1,03(7)
6d7s	³ D ₂	-	6d7p	³ D ₁ ^o	3859,03	-	3,67(-1)	-0,46 ^b	5,48(7)
6d7s	³ D ₂	-	6d7p	³ D ₂ ^o	3771,18	3565,59 ^{a, c}	1,00	-0,19 ^b	9,44(7)
6d7s	³ D ₂	-	6d7p	³ D ₃ ^o	3381,64	-	3,46(-1)	0,29 ^b	2,88(7)
6d7s	³ D ₂	-	6d7p	³ P ₁ ^o	3328,47	3164,81 ^a	1,14	-0,13 ^b	2,30(8)
6d7s	³ D ₂	-	6d7p	³ P ₂ ^o	3284,12	-	8,51(-1)	-	1,05(8)
6d7s	³ D ₂	-	6d7p	¹ D ₂ ^o	4147,85	-	2,32(-2)	-0,23 ^b	1,79(6)
6d7s	³ D ₂	-	5f7s	³ F ₃ ^o	2648,69	4061,60 ^a	3,81	-	5,17(8)
6d7s	³ D ₂	-	5f7s	¹ F ₃ ^o	2303,80	-	3,70(-1)	-0,47 ^b	6,65(7)
6d7s	³ D ₂	-	5f6d	³ F ₃ ^o	2236,25	2630,19 ^a	9,69(-1)	-	1,84(8)
6d7s	³ D ₂	-	5f6d	³ P ₁ ^o	1813,92	-	2,06(-1)	-	1,39(8)
6d7s	³ D ₂	-	7s7p	³ P ₁ ^o	7583,91	5910,85 ^{a, c}	2,58(-1)	-0,60 ^b	9,99(6)
6d7s	³ D ₂	-	7s7p	³ P ₂ ^o	5305,90	-	3,49(-1)	-1,14 ^b	1,65(7)
6d7s	³ D ₂	-	7s7p	¹ P ₁ ^o	4568,86	-	4,04(-1)	-0,91 ^b	4,17(7)
6d7s	³ D ₃	-	6d7p	³ F ₂ ^o	5898,99	-	8,05(-2)	-3,07 ^b	3,08(6)
6d7s	³ D ₃	-	6d7p	³ F ₃ ^o	4867,67	-	5,14(-1)	-0,49 ^b	2,06(7)
6d7s	³ D ₃	-	6d7p	³ D ₃ ^o	3542,60	3481,16 ^a	2,02	-1,17 ^b	1,53(8)
6d7s	³ D ₃	-	6d7p	³ P ₂ ^o	3435,73	3230,59 ^a	1,63	0,10 ^b	1,84(8)
6d7s	³ D ₃	-	6d7p	¹ D ₂ ^o	4392,65	4088,44 ^{a, c}	1,07	-	7,45(7)
6d7s	³ D ₃	-	5f7s	³ F ₄ ^o	2675,36	3914,47 ^a	5,70	-0,93 ^b	5,91(8)
6d7s	³ D ₃	-	5f6d	³ F ₄ ^o	2267,16	2657,81 ^a	2,00	-	2,88(8)
6d7s	³ D ₃	-	5f6d	³ P ₂ ^o	1850,79	-	4,14(-1)	-	1,61(8)
6d7s	³ D ₃	-	5f6d	¹ F ₃ ^o	1660,80	-	1,52(-3)	0,30 ^b	5,26(5)
6d7s	³ D ₃	-	7s7p	³ P ₂ ^o	5713,19	-	4,48(-1)	-1,02 ^b	1,83(7)
6d7s	¹ D ₂	-	6d7p	³ P ₂ ^o	3726,48	-	6,23(-1)	-0,24 ^b	5,98(7)
6d7s	¹ D ₂	-	6d7p	¹ P ₁ ^o	2612,65	-	1,31	-0,07 ^b	4,26(8)
6d7s	¹ D ₂	-	6d7p	¹ F ₃ ^o	4312,64	-	1,44(-2)	0,19 ^b	7,41(5)
6d7s	¹ D ₂	-	6d7p	¹ D ₂ ^o	4879,39	4386,41 ^{a, c}	1,51	-0,76 ^b	8,51(7)
6d7s	¹ D ₂	-	5f7s	¹ F ₃ ^o	2513,07	4807,83 ^a	4,75	-	7,16(8)
6d7s	¹ D ₂	-	5f6d	¹ D ₂ ^o	2282,91	2806,76 ^a	1,16	-	2,99(8)
6d7s	¹ D ₂	-	5f6d	¹ P ₁ ^o	1518,17	-	1,50(-1)	-	1,45(8)
6d7s	¹ D ₂	-	7s7p	³ P ₂ ^o	6564,95	-	2,50(-3)	-0,08 ^b	7,74(4)
6d ²	³ F ₂	-	5f6d	³ G ₃ ^o	2306,26	3069,36 ^a	4,64	-0,17 ^b	8,31(8)
6d ²	³ F ₂	-	5f6d	³ F ₂ ^o	2796,85	-	1,16	-	1,99(8)
6d ²	³ F ₂	-	5f6d	³ D ₁ ^o	2178,99	2833,47 ^a	4,28(-1)	-	2,00(8)
6d ²	³ F ₂	-	6d7p	³ D ₁ ^o	5677,68	-	7,15(-1)	-0,58 ^b	4,93(7)
6d ²	³ F ₃	-	5f6d	³ G ₄ ^o	2323,26	3078,07 ^a	6,31	-	8,66(8)
6d ²	³ F ₃	-	5f6d	³ F ₃ ^o	2824,09	-	1,52	-	1,82(8)
6d ²	³ F ₃	-	5f6d	³ D ₂ ^o	2215,21	-	6,44(-1)	-	1,75(8)
6d ²	³ F ₄	-	5f6d	³ G ₅ ^o	2346,48	3086,04 ^a	8,54	-	9,41(8)
6d ²	³ F ₄	-	5f6d	³ F ₄ ^o	2871,62	-	2,30	-	2,06(8)
6d ²	³ F ₄	-	5f6d	³ D ₃ ^o	2262,79	-	9,72(-1)	-	1,80(8)
6d ²	³ F ₄	-	5f7s	³ F ₄ ^o	3559,53	-	1,86(-2)	-0,50 ^b	1,09(6)
6d ²	³ P ₀	-	5f6d	³ D ₁ ^o	2548,93	-	8,21(-1)	-	2,81(8)
6d ²	³ P ₀	-	5f6d	³ P ₁ ^o	2489,54	-	7,38(-1)	-	2,65(8)

Tablo 3.8. Devam

Geçiş				λ		gf		A	
				+B+QED	Diğer Ç.	+B+QED	Diğer Ç.	+B+QED	
6d ²	³ P ₁	-	5f6d	³ D ₁ ^o	2575,63	-	7,00(-1)	-	2,34(8)
6d ²	³ P ₁	-	5f6d	³ D ₂ ^o	2558,68	-	2,08	-	4,25(8)
6d ²	³ P ₁	-	5f6d	³ P ₀ ^o	2523,77	-	6,06(-1)	-	6,35(8)
6d ²	³ P ₁	-	5f6d	³ P ₁ ^o	2515,00	-	3,91(-1)	-	1,37(8)
6d ²	³ P ₁	-	5f6d	³ P ₂ ^o	2499,59	-	8,89(-1)	-	1,89(8)
6d ²	³ P ₂	-	5f6d	³ D ₂ ^o	2593,82	-	5,75(-1)	-	1,14(8)
6d ²	³ P ₂	-	5f6d	³ D ₃ ^o	2569,11	-	3,86	-	5,57(8)
6d ²	³ P ₂	-	5f6d	³ P ₁ ^o	2548,94	-	7,44(-1)	-	2,54(8)
6d ²	³ P ₂	-	5f6d	³ P ₂ ^o	2533,11	-	2,34	-	4,87(8)
6d ²	¹ G ₄	-	5f6d	¹ F ₃ ^o	2285,52	-	1,92	-	3,50(8)
6d ²	¹ G ₄	-	5f6d	¹ H ₅ ^o	2088,76	-	1,11(1)	-	1,55(9)
6d ²	¹ D ₂	-	6d7p	¹ P ₁ ^o	4701,91	-	1,21	-	1,21(8)
6d ²	¹ D ₂	-	5f6d	¹ F ₃ ^o	2442,99	-	6,02	-	9,61(8)
6d ²	¹ D ₂	-	5f6d	¹ P ₁ ^o	2046,60	-	1,87	-	9,93(8)
6d ²	¹ S ₀	-	5f6d	¹ P ₁ ^o	2665,30	-	2,03	-	6,37(8)
7s7p	³ P ₁ ^o	-	7s8s	³ S ₁	3342,28	-	7,52(-1)	-	1,49(8)
7s7p	¹ P ₁ ^o	-	7s8s	¹ S ₀	3779,11	-	4,41(-1)	-	2,06(8)

^a Meggers [19] (Bu değerlere [39, 167, 168] kaynağından da ulaşılabilir),

^b Quinet ve çalışma arkadaşları (log gf değeri) [40],

^c Meggers ve çalışma arkadaşları [20] (Bu değerlere [39, 105, 106] kaynağından da ulaşılabilir)

Tablo 3.9. Ac II'nin E2 ve M1 geçişlerine ait λ dalga boyları (Å), gf ağırlıklı salıncı şiddetleri ve A geçiş olasılıkları (sn^{-1})

Geçiş		λ	gf	A	
E2 Geçişleri					
6d7s	$^3D_1 - 7s8s$	3S_1	2291,52	3,28(-7)	1,38(2)
6d7s	$^3D_2 - 6d^2$	1S_0	3128,50	1,72(-8)	1,17(1)
6d7s	$^3D_2 - 7s8s$	3S_1	2319,89	5,40(-7)	2,23(2)
6d7s	$^3D_2 - 7s8s$	1S_0	2082,36	1,08(-8)	1,66(1)
6d7s	$^3D_3 - 6d^2$	1D_2	5187,18	6,78(-7)	2,63(2)
6d7s	$^3D_3 - 7s8s$	3S_1	2394,53	8,76(-7)	3,39(2)
6d7s	$^1D_2 - 6d^2$	1S_0	3527,38	4,73(-7)	2,54(2)
6d7s	$^1D_2 - 7s8s$	3S_1	2532,22	3,69(-8)	1,28(1)
6d7s	$^1D_2 - 7s8s$	1S_0	2251,85	2,38(-7)	3,13(2)
6d ²	$^3F_2 - 7s8s$	1S_0	2517,49	1,76(-8)	1,85(1)
7s7p	$^3P_0^o - 5f7s$	$^3F_2^o$	3954,99	1,24(-7)	1,05(1)
7s7p	$^3P_1^o - 6d7p$	$^1P_1^o$	3483,83	9,88(-8)	1,81(1)
7s7p	$^3P_1^o - 5f6d$	$^3F_2^o$	3239,48	1,00(-7)	1,27(1)
6d7p	$^3F_2^o - 5f6d$	$^3H_4^o$	4681,39	1,10(-6)	3,74(1)
6d7p	$^3F_2^o - 5f6d$	$^3G_3^o$	2997,15	2,85(-7)	3,02(1)
7s7p	$^3P_2^o - 5f6d$	$^3P_0^o$	2766,69	2,18(-8)	1,90(1)
7s7p	$^3P_2^o - 5f6d$	$^3P_1^o$	2756,16	3,95(-8)	1,15(1)
7s7p	$^1P_1^o - 6d7p$	$^1P_1^o$	4919,16	2,36(-7)	2,16(1)
7s7p	$^1P_1^o - 5f6d$	$^3G_3^o$	3322,32	1,17(-7)	1,01(1)
7s7p	$^1P_1^o - 5f6d$	$^3D_1^o$	3064,46	5,45(-8)	1,29(1)
7s7p	$^1P_1^o - 5f6d$	$^3P_1^o$	2979,02	6,80(-8)	1,70(1)
7s7p	$^1P_1^o - 5f6d$	$^1P_1^o$	2086,71	9,23(-8)	4,71(1)
6d7p	$^3F_3^o - 5f6d$	$^3H_5^o$	5271,39	1,20(-6)	2,63(1)
6d7p	$^3F_3^o - 5f6d$	$^3G_4^o$	3282,58	4,08(-7)	2,80(1)
6d7p	$^1D_2^o - 5f6d$	$^1D_2^o$	4290,14	3,27(-7)	2,37(1)
6d7p	$^1D_2^o - 5f6d$	$^3D_1^o$	3323,98	9,73(-8)	1,95(1)
6d7p	$^1D_2^o - 5f6d$	$^3D_2^o$	3295,81	9,53(-8)	1,17(1)
6d7p	$^1D_2^o - 5f6d$	$^3P_0^o$	3238,10	8,06(-8)	5,12(1)
6d7p	$^1D_2^o - 5f6d$	$^3P_1^o$	3223,68	1,04(-7)	2,23(1)
6d7p	$^1D_2^o - 5f6d$	$^1F_3^o$	2670,48	1,86(-7)	2,48(1)
6d7p	$^1D_2^o - 5f6d$	$^1P_1^o$	2203,88	3,90(-8)	1,78(1)
6d7p	$^3D_1^o - 5f6d$	$^3G_3^o$	3883,88	3,52(-7)	2,22(1)
6d7p	$^3D_1^o - 5f6d$	$^3D_1^o$	3536,06	7,31(-8)	1,30(1)
6d7p	$^3D_1^o - 5f6d$	$^3P_1^o$	3422,78	1,51(-7)	2,87(1)
6d7p	$^3F_4^o - 5f6d$	$^3H_6^o$	6291,90	1,25(-6)	1,62(1)
6d7p	$^3F_4^o - 5f6d$	$^3G_5^o$	3695,16	3,22(-7)	1,43(1)
6d7p	$^3D_2^o - 5f6d$	$^3G_4^o$	3870,84	6,07(-7)	3,00(1)
6d7p	$^3D_2^o - 5f6d$	$^3D_1^o$	3613,19	9,62(-8)	1,63(1)
6d7p	$^3D_2^o - 5f6d$	$^3D_2^o$	3579,92	1,53(-7)	1,59(1)
6d7p	$^3D_2^o - 5f6d$	$^3P_0^o$	3511,95	1,06(-7)	5,74(1)
6d7p	$^1F_3^o - 5f6d$	$^3G_5^o$	3781,73	3,19(-7)	1,35(1)
6d7p	$^1F_3^o - 5f6d$	$^1H_5^o$	2572,37	6,27(-7)	5,75(1)
6d7p	$^1F_3^o - 5f6d$	$^1P_1^o$	2342,95	1,08(-7)	4,41(1)
6d7p	$^3D_3^o - 5f6d$	$^3G_5^o$	4224,11	6,74(-7)	2,29(1)
6d7p	$^3D_3^o - 5f6d$	$^3D_3^o$	3960,42	1,77(-7)	1,07(1)
6d7p	$^3D_3^o - 5f6d$	$^3P_2^o$	3875,52	1,54(-7)	1,37(1)
6d7p	$^3D_3^o - 5f6d$	$^1H_5^o$	2769,67	2,13(-7)	1,69(1)
6d7p	$^3D_3^o - 5f6d$	$^1P_1^o$	2505,52	4,05(-8)	1,43(1)
6d7p	$^3P_1^o - 5f6d$	$^3D_1^o$	4140,87	1,78(-7)	2,31(1)
6d7p	$^3P_1^o - 5f6d$	$^3D_3^o$	4035,91	3,21(-7)	1,88(1)
6d7p	$^3P_1^o - 5f6d$	$^3P_1^o$	3986,37	8,45(-8)	1,18(1)
6d7p	$^3P_1^o - 5f6d$	$^3P_2^o$	3947,78	4,06(-7)	3,48(1)
6d7p	$^3P_0^o - 5f6d$	$^3D_2^o$	4099,62	2,08(-7)	1,65(1)
6d7p	$^3P_0^o - 5f6d$	$^3P_2^o$	3949,99	1,75(-7)	1,50(1)
6d7p	$^3P_2^o - 5f6d$	$^3D_2^o$	4166,50	1,71(-7)	1,32(1)
6d7p	$^3P_2^o - 5f6d$	$^3D_3^o$	4103,10	5,91(-7)	3,34(1)
6d7p	$^3P_2^o - 5f6d$	$^3P_0^o$	4074,71	4,84(-8)	1,94(1)
6d7p	$^3P_2^o - 5f6d$	$^3P_1^o$	4051,90	1,81(-7)	2,45(1)
6d7p	$^3P_2^o - 5f6d$	$^3P_2^o$	4012,04	3,47(-7)	2,88(1)
6d7p	$^1P_1^o - 5f6d$	$^1F_3^o$	5085,08	3,73(-7)	1,37(1)

Tablo 3.9. Devam

Geçiş				λ	gf	A	
6d7p	$^1P_1^o$	-	5f6d	$^1P_1^o$	3624,04	8,72(-7)	1,47(2)
5f7s	$^1F_3^o$	-	5f6d	$^1F_3^o$	5510,02	4,23(-7)	1,32(1)
5f7s	$^1F_3^o$	-	5f6d	$^1H_3^o$	4490,28	9,97(-7)	3,00(1)
5f7s	$^1F_3^o$	-	5f6d	$^1P_1^o$	3834,82	3,69(-7)	5,58(1)
5f6d	$^1D_2^o$	-	5f6d	$^1P_1^o$	4532,03	9,52(-8)	1,03(1)
M1 Geçişleri							
7s7p	$^3P_0^o$	-	5f6d	$^1P_1^o$	1733,80	1,59(-10)	1,17(-1)
6d7p	$^1D_2^o$	-	5f6d	$^1P_1^o$	2203,88	4,53(-10)	2,07(-1)
6d7p	$^3F_2^o$	-	5f6d	$^1F_3^o$	2311,62	2,41(-9)	4,29(-1)
6d7p	$^3D_2^o$	-	5f6d	$^1P_1^o$	2327,39	6,51(-10)	2,67(-1)
6d ²	$^3P_1^o$	-	7s8s	1S_0	3062,35	2,01(-10)	1,43(-1)
7s7p	$^3P_0^o$	-	6d7p	$^1P_1^o$	3324,10	2,24(-9)	4,52(-1)
6d7p	$^3D_0^o$	-	5f6d	$^3P_0^o$	3422,78	8,84(-10)	1,67(-1)
6d7p	$^3D_0^o$	-	5f6d	$^3P_0^o$	3439,04	4,62(-10)	2,60(-1)
7s7p	$^3P_1^o$	-	6d7p	$^1P_1^o$	3483,83	1,96(-9)	3,59(-1)
6d7p	$^3F_2^o$	-	5f7s	$^1F_3^o$	3982,34	2,44(-9)	1,47(-1)
5f7s	$^3F_2^o$	-	5f6d	$^1F_3^o$	4087,61	3,21(-9)	1,83(-1)
5f7s	$^3F_4^o$	-	5f6d	$^1F_3^o$	4379,52	2,54(-9)	1,26(-1)
6d7s	$^3D_1^o$	-	6d ²	1D_2	4726,90	2,65(-9)	1,58(-1)
6d7p	$^3F_2^o$	-	5f7s	$^3F_3^o$	5139,07	8,81(-9)	3,18(-1)
6d7s	$^3D_3^o$	-	6d ²	1D_2	5187,18	2,79(-9)	1,38(-1)
6d7p	$^1D_2^o$	-	6d7p	$^1P_1^o$	5623,98	1,67(-8)	1,17
5f6d	$^3F_2^o$	-	5f6d	$^1F_3^o$	5714,18	4,57(-9)	1,33(-1)
6d7p	$^3F_4^o$	-	5f7s	$^1F_3^o$	5805,91	3,70(-9)	1,04(-1)
7s7p	$^3P_0^o$	-	6d7p	$^3P_0^o$	5926,93	2,92(-9)	5,54(-1)
7s7p	$^3P_1^o$	-	6d7p	$^3P_1^o$	5931,91	5,81(-9)	3,67(-1)
6d7p	$^3F_3^o$	-	5f7s	$^3F_4^o$	5940,21	1,76(-8)	3,69(-1)
6d ²	$^3P_1^o$	-	6d ²	1S_0	6025,43	9,99(-9)	1,83
5f6d	$^3F_4^o$	-	5f6d	$^1F_3^o$	6209,80	5,20(-9)	1,28(-1)
6d7p	$^3D_1^o$	-	6d7p	$^1P_1^o$	6259,14	6,90(-9)	3,91(-1)
6d7p	$^3D_2^o$	-	6d7p	$^1P_1^o$	6504,92	3,17(-8)	1,66
7s7p	$^3P_0^o$	-	6d7p	$^3D_1^o$	7088,86	7,35(-9)	3,25(-1)
6d7p	$^3D_3^o$	-	5f7s	$^1F_3^o$	7228,03	8,05(-9)	1,46(-1)
7s7p	$^3P_1^o$	-	6d7p	$^3D_2^o$	7501,27	5,42(-9)	1,28(-1)
6d ²	$^3F_2^o$	-	6d ²	1D_2	8115,92	8,16(-9)	1,65(-1)
6d7s	$^1D_2^o$	-	6d ²	$^3P_2^o$	8141,47	5,47(-9)	1,10(-1)
6d7p	$^3F_2^o$	-	6d7p	$^3P_2^o$	8227,84	1,49(-8)	2,95(-1)
6d7p	$^3P_1^o$	-	6d7p	$^1P_1^o$	8441,61	1,20(-8)	3,76(-1)
6d7p	$^3P_0^o$	-	6d7p	$^1P_1^o$	8451,72	1,17(-8)	3,66(-1)
6d7p	$^3F_2^o$	-	6d7p	$^3P_1^o$	8511,99	1,63(-8)	5,01(-1)
6d7p	$^3F_4^o$	-	5f7s	$^3F_3^o$	8641,72	8,52(-9)	1,08(-1)
6d ²	$^3F_3^o$	-	6d ²	1D_2	8838,75	1,52(-8)	2,61(-1)
7s7p	$^3P_1^o$	-	6d7p	$^1D_2^o$	9154,94	9,26(-9)	1,47(-1)
7s7p	$^3P_2^o$	-	6d7p	$^3D_3^o$	9324,43	9,34(-9)	1,02(-1)
6d7p	$^1F_3^o$	-	5f7s	$^3F_2^o$	9719,18	8,78(-9)	1,24(-1)
7s7p	$^3P_0^o$	-	7s7p	$^1P_1^o$	10251,60	8,34(-8)	1,76
6d7p	$^3F_3^o$	-	6d7p	$^3P_2^o$	11679,25	2,32(-8)	2,27(-1)
6d7p	$^3F_2^o$	-	6d7p	$^1F_3^o$	11755,70	1,18(-7)	8,14(-1)
7s7p	$^1P_1^o$	-	6d7p	$^3P_0^o$	11769,18	2,48(-8)	1,19
6d ²	$^3F_3^o$	-	6d ²	1G_4	11773,71	2,00(-8)	1,07(-1)
7s7p	$^1P_1^o$	-	6d7p	$^3P_1^o$	11788,84	3,63(-8)	5,81(-1)
7s7p	$^3P_1^o$	-	7s7p	$^1P_1^o$	11939,77	5,77(-8)	9,00(-1)
6d7p	$^3F_2^o$	-	6d7p	$^3D_2^o$	12163,60	7,61(-8)	6,86(-1)
6d7p	$^3F_3^o$	-	6d7p	$^3D_3^o$	13013,79	9,58(-8)	5,39(-1)
6d ²	$^3F_4^o$	-	6d ²	1G_4	13940,34	2,85(-8)	1,08(-1)
7s7p	$^3P_2^o$	-	6d7p	$^3D_1^o$	14151,68	4,03(-8)	4,48(-1)
6d7p	$^1D_2^o$	-	6d7p	$^3P_2^o$	15771,32	2,27(-7)	1,21
6d7p	$^1D_2^o$	-	6d7p	$^3P_1^o$	16849,47	5,98(-8)	4,68(-1)
6d7p	$^3F_2^o$	-	6d7p	$^1D_2^o$	17202,14	3,65(-8)	1,64(-1)
7s7p	$^3P_0^o$	-	7s7p	$^3P_2^o$	17664,32	4,35(-7)	1,86
6d7p	$^1D_2^o$	-	6d7p	$^3D_3^o$	18306,35	6,21(-8)	1,76(-1)
7s7p	$^3P_2^o$	-	6d7p	$^1D_2^o$	19004,44	5,17(-8)	1,91(-1)
7s7p	$^3P_1^o$	-	6d7p	$^3F_2^o$	19570,12	5,05(-8)	1,76(-1)

Tablo 3.9. Devam

Geçiş				λ	gf	A	
7s7p	$^1P_1^o$	-	6d7p	$^3D_2^o$	20178,75	1,58(-7)	5,18(-1)
6d ²	3P_2	-	6d ²	1D_2	21165,94	4,30(-8)	1,28(-1)
6d7p	$^3D_1^o$	-	6d7p	$^3P_2^o$	22044,64	4,21(-8)	1,15(-1)
7s7p	$^1P_1^o$	-	6d7p	$^3D_1^o$	22977,62	3,98(-8)	1,67(-1)
6d7p	$^3F_3^o$	-	6d7p	$^3F_4^o$	23281,01	1,01(-6)	1,38
6d7p	$^3F_2^o$	-	6d7p	$^3F_3^o$	27842,30	6,19(-7)	7,61(-1)
6d7p	$^3D_2^o$	-	6d7p	$^3D_3^o$	32737,86	3,29(-7)	2,92(-1)
6d7p	$^1F_3^o$	-	6d7p	$^3D_3^o$	36110,19	1,69(-7)	1,23(-1)

3.3. Ac III için Enerji ve Işımalı Geçiş Parametreleri Hesapları

İki kez iyonlaşmış aktinyum, mevcut kaynaklarda hemen hemen-relativistik yerel spin yoğunluk fonksiyoneli hesaplamaları, relativistik model-potansiyel relativistik Hartree-Fock ve Dirac-Fock yöntemleri, Dirac-Fock, öz kutuplanma yaklaşıklığı ve relativistik çok cisim pertürbasyon teorisi ile incelenmiştir [52-57]. Katlı küme yöntemi, basit küresel kabuk çözümleri ve lantanit ve aktinitlerin gaz iyonlarının elektronik konfigürasyonlarının tahmini için kullanılan yöntemler Ac III için de kullanılmıştır [35, 41, 50].

3.3.1. Enerji seviyeleri hesapları

Bu iyon için sadece MCDF yöntemiyle çalışıldı. Ac III öz dışındaki bir elektronuyla değerlik elektronları arasındaki karşılıklı etkileşmesinin küçük, öz-değerlik karşılıklı etkileşmelerinin ise büyük olması beklenir. Çokça iyonlaşmış lantanit ve aktinitler gibi ağır elementlerin atomik yapı hesaplamalarında, değerlik elektronları ve öz-değerlik elektronları karşılıklı etkileşmelerini beraber dikkate almak gerekir. Bu nedenle Ac III için, Ac II için yapılan MCDF hesaplarında olduğu gibi değerlik elektronları ve öz-değerlik elektronları karşılıklı etkileşmelerini göz önüne alan dört çeşit hesaplama yapıldı. Bu hesaplamalarda kullanılan konfigürasyon takımları Tablo 3.10'da verilmektedir.

A, B, C ve D çalışmalarında seçilen konfigürasyon takımlarıyla sırasıyla 7, 123, 56 ve 132 seviye elde edilmiştir. Bu enerji seviyelerinin iyonlaşma limiti altında olanları Tablo 3.11'de verilmektedir. Elde edilen sonuçlar 5f seviyesi hariç mevcut çalışmalarla uyumludur. Genel olarak bakıldığında A çalışması karşılaştırma

değerleriyle diğer hesaplara göre daha uyumludur. Ancak $6d \ ^2D_{3/2}$ ve $5f \ ^2F_{5/2}$ seviyesinde B çalışması ve $7p \ ^2P_{1/2}$ seviyesinde D çalışması diğer çalışmalara göre karşılaştırma değerlerine daha yakın sonuçlar vermiştir. Mevcut kaynaklarda Ac III için yalnızca $6d \ ^2D_{3/2, 5/2}$ seviyeleri için deneysel karşılaştırma değeri bulunabilmiştir. $6d \ ^2D_{3/2}$ seviyesi için B çalışmasına elde edilen sonuç karşılaştırma değerleriyle uyumluyken bu değer $798,48 \text{ cm}^{-1}$ ($0,0099 \text{ eV}$) deneysel değerine uzak kalmasına rağmen, $1266,28 \text{ cm}^{-1}$, $1169,49 \text{ cm}^{-1}$ ($0,157, 0,145 \text{ eV}$) şeklindeki Eliav ve çalışma arkadaşlarının Dirac-Coulomb hesap sonuçlarına oldukça yakındır. $6d \ ^2D_{5/2}$ seviyesinde ulaşılabilir kaynaklardaki değerler $6d \ ^2D_{3/2}$ seviyesine göre birbirine yaklaşmıştır. A hesabı sonucu olan $4064,74 \text{ cm}^{-1}$ 'in karşılaştırma değerleri arasındaki fark $20 < \Delta E < 680 \text{ cm}^{-1}$ kadardır. Tersinir foton ve QED etkileri, hesapları olumlu yönde etkilemezken bu seviyede Eliav ve çalışma arkadaşlarının çok cisim hesapları (4041 cm^{-1}) [57] arasındaki fark $\Delta E = 1,72 \text{ cm}^{-1}$ 'dir.

Tablo 3.10. Ac III'e ait hesaplar için kullanılan konfigürasyon takımları

Hesap	Çift Parite	Tek Parite
A	7s, 6d	5f, 7p
B	A	A+6p ⁵ 7s ² , 6p ⁵ 6d ² , 6p ⁵ 5f ²
C	A+6s7s ² , 6s6d ² , 6s7p ² , 6s5f ²	A
D	C	A+6s ² 6p ⁵ 7s ² , 6s ² 6p ⁵ 7p ² , 6s ² 6p ⁵ 5f ²

Tablo 3.11. Ac III'ün uyarılmış seviyelerinin enerjileri (cm⁻¹)

Seviye	MCDF	+B+QED	Diğer Çalışmalar	Konfigurasyon Katkıları		
7s ² S _{1/2}	A	0,00	0,00 ^{a, b1, b2, c, d, e}	100,00		
	B	0,00		100,00		
	C	0,00		99,97 + 0,02 6s6d ² ² S _{1/2}		
	D	0,00		99,97 + 0,02 6s6p ⁶ 7s ² ² S _{1/2}		
6d ² D _{3/2}	A	1519,88	801,0 ^{a, d} ; 0,157 ^{b1} ; 0,145 ^{b2} ; 0,099 ^c ; 825 ^e	100,00		
	B	1108,64		100,00		
	C	1941,16		99,96 + 0,03 6s6d ² ² D _{3/2}		
	D	457,53		99,99 + 0,01 6s6p ⁶ 5f ² ² D _{3/2}		
	² D _{5/2}	A		4064,74	4203,9 ^a ; 0,588 ^{b1} ; 0,569 ^{b2} ; 0,521 ^c ; 4041 ^e	100,00
		B		3674,53		100,00
		C		4419,93		99,96 + 0,03 6s6d ² ² D _{5/2}
		D		3090,48		99,99 + 0,01 6s6p ⁶ 5f ² ² D _{5/2}
7p ² P ^o _{1/2}	A	28284,56	29465,9 ^a ; 29466 ^d ; 29303 ^e	100,00		
	B	27882,17		97,82 + 1,30 6p ⁵ 6d ² ² F ^o _{5/2}		
	C	33480,04		100,00		
	D	29194,20		99,44 + 0,30 6s ² 6p ⁵ 7p ² ² P ^o _{5/2}		
	² P ^o _{3/2}	A		35933,73	38063,0 ^a ; 37816 ^e	100,00
		B		30130,42		98,15 + 0,82 6p ⁵ 6d ² ² F ^o _{7/2}
		C		35265,28		100,00
		D		31152,24		99,46 + 0,25 6s ² 6p ⁵ 5f ² ² F ^o _{7/2}
	5f ² F ^o _{5/2}	A		32926,88	23454,5 ^a ; 23455 ^d ; 24018 ^e	100,00
		B		27020,54		99,50 + 0,22 6p ⁵ 6d ² ² P ^o _{1/2}
		C		29292,85		100,00
		D		28047,03		99,41 + 0,30 6s ² 6p ⁵ 7p ² ² P ^o _{1/2}
² F ^o _{7/2}		A	34747,91	26080,2 ^a ; 26420 ^e		100,00
		B	35101,56			99,71 + 0,09 6p ⁵ 6d ² ² P ^o _{3/2}
		C	36806,53			100,00
		D	35449,09			99,30 + 0,32 6s ² 6p ⁵ 7p ² ² P ^o _{3/2}

^a Brewer [21] (Bu değerlere [168] kaynağından da ulaşılabilir),

^{b1, b2} Eliav ve çalışma arkadaşları [109] (eV biriminde) (Bu değerlere [35] kaynağından da ulaşılabilir),

^c Moore [109]'da (eV biriminde),

^d Brewer [50],

^e Safronova ve çalışma arkadaşları [57]

3.3.2. Işımalı geçiş parametreleri hesapları

Tablo 3.10'da verilen konfigürasyon takımlarıyla 8 (A çalışması), 174 (B çalışması), 111 (C çalışması) ve 3226 (D çalışması) elektrik dipol geçişi elde edildi. Tablo 3.12'de A çalışmasında elde edilen geçişlerin ve bu geçişlerin B, C ve D çalışmalarında elde edilen ışımaya parametreleri sunulmaktadır. Işıma parametreleri için iki karşılaştırma değeri vardır. Bunlardan ilki 3.1 ve 3.2 kısımlarında da bahsi geçen Meggers'in deneyi [19] ve ikincisi de Biémont ve çalışma arkadaşlarına [55] ait çalışmadır. Biémont ve çalışma arkadaşlarının, Meggers'in deney sonuçlarına uydurma yaparak elde ettikleri sonuçlar Meggers'in sonuçlarına yakın görünmektedir. Diğer çalışmalardaki dalga boyları bu çalışmada elde edilen en iyi sonuçlarla karşılaştırıldığında $\Delta\lambda$, 7s-7p geçişleri için 21, 90 Å (C çalışması) 6d-7p geçişleri için 135 Å (C çalışması), 137, 175 Å (D çalışması) ve 6d-5f geçişleri için 678, 790 Å (B çalışması) ve 1367 Å'dur (D çalışması). Elde edilen diğer geçiş parametreleri *gf*-değerleri ve A geçiş olasılığı mevcut kaynaklardaki karşılaştırma değerleriyle uyumludur.

Seçilen konfigürasyon takımlarıyla 8 (A çalışması), 4671 (B çalışması), 877 (C çalışması) ve 1521 (D çalışması) elektrik kuadrupol (E2), 5(A çalışması), 3155 (B çalışması), 626 (C çalışması) ve 2232 (D çalışması) manyetik dipol (M1) geçişleri elde edilmiştir. Bu geçişlere ait A, B, C ve D çalışmalarından elde edilen ışımaya parametreleri Tablo 3.13'te verilmektedir. Ac III'ün yasaklı geçişlerine ait ulaşılabilir tek kaynak Safronova ve çalışma arkadaşlarının [57] çok cisim hesabıdır. 7s $^2S_{1/2}$ - 6d $^2D_{3/2}$ E1 ve M2 geçişinin dalga boyu A çalışmasında elde edilenin yaklaşık iki katı, D çalışması sonucunun ise yaklaşık yarısıdır. Geçiş olasılığına bakıldığında en uyumlu çalışma E1 geçişi için B, M1 geçişi için D çalışmasıdır.

Tablo 3.12. Ac III'ün E1 geçişlerine ait λ dalga boyları (Å), gf ağırlıklı salıncı şiddetleri ve A geçiş olasılıkları (sn^{-1})

Geçiş		λ			gf			A			
		MCDF	+B+QED	Diğer Ç.	MCDF	+B+QED	Diğer Ç.	MCDF	+B+QED	Diğer Ç.	
7s $^2S_{1/2}$	- 7p $^2P^o_{1/2}$	A	3535,49	3539,56	3392,780 ^{a, b}	8,94(-1)	8,93(-1)	-0,21 ^b ;	2,38(8)	2,37(8)	3,59(8) ^b
		B	3700,88	3713,32		7,63(-1)	7,61(-1)	4,45(-1) ^{e1} ;	1,85(8)	1,84(8)	3,91(8) ^f
		C	3413,80	3410,13		8,45(-1)	8,46(-1)	3,10(-1) ^{e2}	2,41(8)	2,42(8)	
		D	3565,43	3545,52		7,78(-1)	7,83(-1)	6,75(-1) ^f	2,04(8)	2,07(8)	
7s $^2S_{1/2}$	- 7p $^2P^o_{3/2}$	A	2782,90	2792,51	2626,44 ^{a, b}	2,13	2,12	0,20 ^b ;	4,59(8)	4,54(8)	1,55(9) ^b ;
		B	2848,87	2863,85		1,78	1,77	1,69 ^c ;	3,67(8)	3,61(8)	1,63(9) ^c ;
		C	2716,90	2724,58		2,01	2,00	1,6 ^c , 1,38 ^d ;	4,54(8)	4,50(8)	1,55(9) ^c
		D	2820,94	2817,73		1,82	1,82	1,07 ^{e1} ;	3,81(8)	3,82(8)	1,63(9) ^f
6d $^2D_{3/2}$	- 5f $^2F^o_{5/2}$	A	3184,00	3170,61	4413,09 ^a ;	1,05	1,06	8,00(-1) ^{e2} ;	1,16(8)	1,17(8)	2,35(8) ^b ;
		B	3735,03	3726,74	4413,089 ^b	5,77(-1)	5,77(-1)	1,69 ^f	4,60(7)	4,62(7)	1,10(8) ^c ;
		C	3170,68	3161,20		9,34(-1)	9,37(-1)	-0,16 ^b ;	1,03(8)	1,04(8)	2,34(8) ^c
		D	3479,87	3463,79		9,10(-1)	9,14(-1)	0,322 ^c ;	8,35(7)	8,47(7)	1,10(8) ^f
6d $^2D_{3/2}$	- 7p $^2P^o_{1/2}$	A	3736,26	3749,41	3487,59 ^a ;	7,40(-1)	7,38(-1)	0,69 ^c ;	1,77(8)	1,75(8)	2,78(8) ^b ;
		B	3859,23	3880,57	3487,589 ^b	5,06(-1)	5,03(-1)	1,00(-1) ^{e2} ;	1,13(8)	1,11(8)	3,24(8) ^c ;
		C	3656,08	3662,77		6,23(-1)	6,22(-1)	3,22(-1) ^f	1,55(8)	1,54(8)	2,75(8) ^c
		D	3624,56	3601,30		7,59(-1)	7,65(-1)	1,27(-2) ^{e1} ;	1,92(8)	1,96(8)	3,24(8) ^f
6d $^2D_{3/2}$	- 7p $^2P^o_{3/2}$	A	2905,80	2921,51	2682,90 ^a ;	1,49(-1)	1,48(-1)	1,45(-1) ^{e2} ;	2,95(7)	2,91(7)	1,22(8) ^b ;
		B	2941,78	2962,32	2682,902 ^b	1,08(-1)	1,07(-1)	5,91(-1) ^f	2,08(7)	2,03(7)	1,19(8);
		C	2868,17	2883,48		1,19(-1)	1,19(-1)	-0,88 ^b ;	2,43(7)	2,39(7)	1,23(8) ^c
		D	2857,83	2852,84		1,53(-1)	1,53(-1)	0,129 ^{c, d} ;	3,12(7)	3,14(7)	1,19(8) ^f
						0,13 ^c ;					
						3,80(-2) ^{e1} ;					
						3,30(-2) ^{e2} ;					
						1,29(-1) ^f					

Tablo 3.12. Devam

Geçiş		λ			gf			A		
		MCDF	+B+QED	Diğer Ç.	MCDF	+B+QED	Diğer Ç.	MCDF	+B+QED	Diğer Ç.
6d $^2D_{5/2}$ - 5f $^2F^o_{5/2}$	A	3464,74	3438,60	5193,21 ^a ;	6,93(-2)	6,98(-2)	-1,38 ^b ;	6,41(6)	6,56(6)	1,03(7) ^b ;
	B	4130,92	4103,87	5193,197 ^b	3,89(-2)	3,91(-2)	0,0202 ^c ;	2,53(6)	2,58(6)	4,99(6) ^c ;
	C	3441,14	3417,64		6,12(-2)	6,16(-2)	0,042 ^c ;	5,75(6)	5,87(6)	1,03(6) ^c ;
	D	3830,87	3798,43		5,87(-2)	5,92(-2)	9,89(-3) ^{e1} ;	4,44(6)	4,56(6)	4,99(6) ^f
						4,40(-3) ^{e2} ;				
						2,02(-2) ^f				
6d $^2D_{5/2}$ - 5f $^2F^o_{7/2}$	A	3259,11	3249,32	4569,87 ^a ;	1,57	1,57	-0,02 ^b ;	1,23(8)	1,24(8)	3,02(8) ^b ;
	B	3779,87	3774,78	4569,876 ^b	9,43(-1)	9,43(-1)	0,504 ^c ;	5,50(7)	5,52(7)	1,61(8) ^c ;
	C	3241,97	3235,10		1,38	1,39	0,95 ^c ;	1,10(8)	1,10(8)	3,02(8) ^c ;
	D	3563,56	3551,80		1,34	1,35	2,31(-1) ^{e1} ;	8,84(7)	8,93(7)	1,61(8) ^f
						1,04(-1) ^{e2} ;				
						5,04(-1) ^f				
6d $^2D_{5/2}$ - 7p $^2P^o_{3/2}$	A	3137,84	3147,55	2952,55 ^a	1,41	1,41	0,03 ^b ;	2,39(8)	2,37(8)	8,23(8) ^b ;
	B	3181,97	3195,76	2952,553 ^b	1,01	1,01	1,22 ^c ; 1,1 ^c ;	1,67(8)	1,65(8)	9,30(8) ^c ;
	C	3087,69	3095,34		1,16	1,15	2,40(-1) ^{e1} ;	2,03(8)	2,01(8)	8,23(8) ^c
	D	3090,36	3076,03		1,44	1,45	2,05(-1) ^{e2} ;	2,52(8)	2,55(8)	9,30(8) ^f
						1,22 ^f				

^a Meggers [19] (Bu değerlere [105] kaynağından da ulaşılabilir),

^b Biémont ve çalışma arkadaşları [55] (log (gf) ve gA değeri),

^c Safronova ve çalışma arkadaşları [57] (gA değeri),

^d Głushkov ve çalışma arkadaşları [53, 54],

^{e1, e2} Migdalek ve Proszkiewicz [56]

Tablo 3.13. Ac III'ün E2 ve M1 geçişlerine ait λ dalga boyları (Å), gf ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve A geçiş olasılıkları (sn^{-1})

Seviye				λ			gf			A			
				MCDF	+B+QED	Diğer Ç.	MCDF	+B+QED	MCDF	+B+QED	Diğer Ç.		
E2 Geçişleri													
7s	$^2S_{1/2}$	-	6d	$^2D_{3/2}$	A	65794,55	63242,45	124844 ^a	6,20(-11)	6,98(-11)	2,38(-5)	2,91(-5)	1,053(-6) ^a
					B	90200,20	86156,68		1,96(-11)	2,25(-11)	4,02(-6)	5,05(-6)	
					C	51515,45	49439,68		1,00(-10)	1,13(-10)	6,29(-5)	7,73(-5)	
					D	218564,56	228939,90		1,55(-12)	1,35(-12)	5,43(-8)	4,30(-8)	
7s	$^2S_{1/2}$	-	6d	$^2D_{5/2}$	A	24601,79	24756,87	23787,4 ^a	1,95(-9)	1,91(-9)	3,58(-3)	3,47(-3)	3,696(-3) ^a
					B	27214,36	27574,77		1,18(-9)	1,14(-9)	1,78(-3)	1,66(-3)	
					C	22624,77	22746,55		1,96(-9)	1,93(-9)	4,27(-3)	4,16(-3)	
					D	32357,34	33554,69		7,86(-10)	7,05(-10)	8,35(-4)	6,96(-4)	
6d	$^2D_{3/2}$	-	6d	$^2D_{5/2}$	A	39294,87	40682,38	-	9,90(-11)	8,92(-11)	7,12(-5)	5,99(-5)	-
					B	38972,90	40554,34		8,50(-11)	7,54(-11)	6,22(-5)	5,10(-5)	
					C	40342,60	42130,02		7,04(-11)	6,18(-11)	4,81(-5)	3,87(-5)	
					D	37980,09	39317,25		1,06(-10)	9,62(-11)	8,22(-5)	6,92(-5)	
7p	$^2P^o_{1/2}$	-	5f	$^2F^o_{5/2}$	A	21540,98	20539,08	-	1,20(-9)	1,38(-9)	2,87(-3)	3,65(-3)	-
					B	116058,83	94009,91		7,36(-12)	1,38(-11)	6,07(-7)	1,74(-6)	
					C	23882,34	23085,10		6,40(-10)	7,09(-10)	1,24(-3)	1,48(-3)	
					D	87170,98	90715,79		1,44(-11)	1,27(-11)	2,10(-6)	1,72(-6)	
7p	$^2P^o_{1/2}$	-	7p	$^2P^o_{3/2}$	A	13073,32	13231,13	-	3,45(-8)	3,33(-8)	3,37(-1)	3,17(-1)	-
					B	12374,67	12518,93		4,02(-8)	3,88(-8)	4,37(-1)	4,13(-1)	
					C	13309,05	13552,85		2,37(-8)	2,24(-8)	2,23(-1)	2,03(-1)	
					D	13509,76	13726,78		2,26(-8)	2,15(-8)	2,06(-1)	1,90(-1)	
5f	$^2F^o_{5/2}$	-	5f	$^2F^o_{7/2}$	A	54913,99	59029,10	-	7,73(-12)	6,22(-12)	2,13(-6)	1,49(-6)	-
					B	44479,09	47072,92		1,09(-11)	9,24(-12)	4,62(-6)	3,47(-6)	
					C	56014,94	60569,50		5,87(-12)	4,65(-12)	1,56(-6)	1,05(-6)	
					D	51071,69	54702,40		5,96(-12)	4,84(-12)	1,90(-6)	1,35(-6)	
5f	$^2F^o_{5/2}$	-	7p	$^2P^o_{3/2}$	A	33257,41	37186,24	-	8,71(-11)	6,23(-11)	1,31(-4)	7,51(-5)	-
					B	13851,58	14442,13		1,15(-9)	1,01(-9)	1,00(-2)	8,14(-3)	
					C	30061,71	32822,15		8,43(-11)	6,47(-11)	1,55(-4)	1,00(-4)	
					D	15987,50	16174,20		6,29(-10)	6,08(-10)	4,10(-3)	3,87(-3)	
5f	$^2F^o_{7/2}$	-	7p	$^2P^o_{3/2}$	A	84329,90	100493,77	-	3,69(-11)	2,18(-11)	8,66(-6)	3,60(-6)	-
					B	20116,10	20834,11		2,59(-9)	2,33(-9)	1,06(-2)	8,96(-3)	
					C	64882,32	71647,28		5,81(-11)	4,32(-11)	2,30(-5)	1,40(-5)	
					D	23272,84	22964,15		1,39(-9)	1,45(-9)	4,29(-3)	4,59(-3)	

Tablo 3.13. Devam

Seviye				λ			gf			A			
				MCDF	+B+QED	Diğer Ç.	MCDF	+B+QED	MCDF	+B+QED	Diğer Ç.		
M1 Geçişleri													
7s	$^2S_{1/2}$	-	6d	$^2D_{3/2}$	A	65794,55	63242,45	124844 ^a	1,29(-17)	1,34(-17)	4,97(-12)	5,59(-12)	4,354(-13) ^a
					B	90200,20	86156,68		1,44(-17)	1,51(-17)	2,96(-12)	3,40(-12)	
					C	51515,45	49439,68		2,10(-17)	2,19(-17)	1,32(-11)	1,49(-11)	
					D	218564,56	228939,90		4,14(-18)	3,95(-18)	1,44(-13)	1,25(-13)	
6d	$^2D_{3/2}$	-	6d	$^2D_{5/2}$	A	39294,87	40682,38	-	2,46(-7)	2,37(-7)	1,77(-1)	1,59(-1)	-
					B	38972,90	40554,34		2,48(-7)	2,38(-7)	1,81(-1)	1,61(-1)	
					C	40342,60	42130,02		2,39(-7)	2,29(-7)	1,63(-1)	1,43(-1)	
					D	37980,09	39317,25		2,54(-7)	2,46(-7)	1,96(-1)	1,76(-1)	
7p	$^2P^o_{1/2}$	-	7p	$^2P^o_{3/2}$	A	13073,32	13231,13	-	3,96(-7)	3,91(-7)	3,86	3,73	-
					B	12374,67	12518,93		4,18(-7)	4,13(-7)	4,55	4,39	
					C	13309,05	13552,85		3,86(-7)	3,79(-7)	3,63	3,44	
					D	13509,76	13726,78		3,82(-7)	3,76(-7)	3,49	3,33	
5f	$^2F^o_{5/2}$	-	5f	$^2F^o_{7/2}$	A	54913,99	59029,10	-	2,52(-7)	2,34(-7)	6,97(-2)	5,61(-2)	-
					B	44479,09	47072,92		3,10(-7)	2,93(-7)	1,30(-1)	1,10(-1)	
					C	56014,94	60569,50		2,47(-7)	2,28(-7)	6,56(-2)	5,19(-2)	
					D	51071,69	54702,40		2,71(-7)	2,53(-7)	8,66(-2)	7,05(-2)	
5f	$^2F^o_{5/2}$	-	7p	$^2P^o_{3/2}$	A	33257,41	37186,24	-	6,75(-18)	6,04(-18)	1,01(-11)	7,28(-12)	-
					B	13851,58	14442,13		2,68(-15)	2,58(-15)	2,33(-8)	2,06(-8)	
					C	30061,71	32822,15		1,04(-17)	9,61(-18)	1,93(-11)	1,48(-11)	
					D	15987,50	16174,20		5,67(-15)	5,57(-15)	3,70(-8)	3,55(-8)	

^a Safronova ve çalışma arkadaşları [57]

3.4. Th IV için Enerji ve Işımalı Geçiş Parametreleri Hesapları

Dört kez iyonlaşmış toryum iyonu genel spektrum ve kırmızı altı kıvılcım spektrum incelemeleri, seviye şeması genişletme, iyonlaşma limiti ve kıvılcım iyonlaşma limiti spektroskopisi ile L-Rydberg seviyeleri bağlanma enerjisi ölçümü için çalışmalar gerçekleştirildi [58-60, 62]. Bu iyonun bazı seviyeleri için iyonlaşma enerjileri relativistik pertürbasyon yöntemiyle de incelendi [61]. Ayrıca Th IV için diğer bazı hesaplamalara [22, 41, 50] kaynaklarından ulaşılabilir.

3.4.1 Enerji seviyeleri hesabı

Th IV'ün seviye yapısını incelemek için MCHF yöntemiyle yapılan hesaplamada 5f, 5g, 6d, 7s, 7p, 8s ve 8p yörüngeleri dikkate alınmıştır. Seçilen konfigürasyon takımı ile 12 enerji seviyesi elde edilmiştir. MCDF yönteminde ise 5f, 6d, 7s, 7p ve 8s tabakaları ele alınmıştır. Her iki yöntemle elde edilen sonuçlar Tablo 3.14'te mevcut kaynaklarla karşılaştırılmaktadır.

7s, 7p, 8s ve 8p seviyeleri için karşılaştırma değerinin yaklaşık iki katı olan MCHF sonuçları, 6d seviyesinde karşılaştırma değerlerine MCDF hesabı sonuçlarından daha yakındır. 6d seviyeleri için mevcut kaynaklarla pek uyumlu olmayan MCDF sonuçları birinci uyarılmış hal olan $5f \ ^2F_{7/2}^o$ seviyesi ile uyumludur. Mevcut kaynaklarla MCDF hesabı arasındaki 10000 cm^{-1} 'lik fark yüksek seviyelere gidildikçe yaklaşık olarak aynı kalmıştır.

3.4.2. Işımalı geçiş parametreleri hesapları

3.7.1 kısmında bahsedilen konfigürasyon takımları ile MCHF yöntemiyle 20 E1, 19 E2 ve 6 M1, MCDF yöntemiyle 10 E1, 10 E2 ve 7 M1 geçiş elde edilmiştir. E1 geçişlerine ait ışınma parametreleri Tablo 3.15'te E2 ve M1 geçişlerine ait ışınma parametreleri de Tablo 3.16'da sunulmaktadır.

Tablo 3.14. Th IV'ün uyarılmış seviyelerinin enerjileri (cm⁻¹)

Seviye	MCHF		MCDF		Diğer Çalışmalar	Konfigürasyon Katkıları
	MCHF	+BP	MCDF	+B+QED		
5f	² F _{5/2} ^o	0,00	0,00	0,00	0,00 ^{a, b, c}	100,00
	² F _{7/2} ^o		6274,20	3710,29	4136 ^b ; 4325,38 ^c	100,00
6d	² D _{3/2}	1777,18	2077,78	511,24	9193 ^a ; 8304 ^b ; 9192,84 ^c	100,00
	² D _{5/2}		8006,68	4965,83	13377 ^b 14485,97 ^c	100,00
7s	² S _{1/2}	202994,80	206852,75	13890,30	23130 ^a ; 22229 ^b ; 23130 ^c	100,00
7p	² P _{1/2} ^o	251335,78	254814,91	50111,53	60239 ^a ; 59213 ^b ; 60238,9 ^c	100,00
	² P _{3/2} ^o		254973,50	61890,45	71932 ^b ; 73055,6 ^c	100,00
5g	² G _{7/2}	163991,31	167849,52	–	–	–
	² G _{9/2}		167848,94	–	–	–
8s	² S _{1/2}	224078,80	227936,73	106650,86	119621,2 ^c	100,00
8p	² P _{1/2} ^o	259632,16	263153,59	–	134517,5 ^c	–
	² P _{3/2} ^o		263249,94	–	139868,7 ^c	–

^a Brewer [50],

^b Safronova ve çalışma arkadaşları [57],

^c Klinkenberg ve Lang [59]

Tablo 3.15. Th IV'ün E1 geçişlerine ait λ dalga boyları (Å), gf ağırlıklı salıncı şiddetleri ve A geçiş olasılıkları (sn^{-1})

Seviye				λ			gf			A			
				MCHF	MCDF	Diğer Ç.	MCHF	MCDF	Diğer Ç.	MCHF	MCDF	Diğer Ç.	
5f	$^2F^{\circ}_{5/2}$	-	6d	$^2D_{3/2}$	53628,75	420442,22	10877,55 ^a ; 10874,567 ^d	1,80(-2)	3,89(-3)	1,13(-1) ^{b1} ; 5,80(-3) ^{b2} ; 6,53(-2) ^c ; -0,85 ^d	1,04(4)	3,67(1)	3,68(6) ^c ; 7,93(6) ^d
5f	$^2F^{\circ}_{5/2}$	-	6d	$^2D_{5/2}$	12831,09	21890,73	6903,05 ^a ; 6901,151 ^d	5,37(-3)	5,15(-3)	1,27(-3) ^{b1} ; 7,31(-3) ^{b2} ; 7,45(-3) ^c ; -1,80 ^d	3,62(4)	1,19(4)	1,04(6) ^c ; 2,22(6) ^d
6d	$^2D_{3/2}$	-	7p	$^2P^{\circ}_{1/2}$	395,33	2021,15	1959,023 ^d	3,30(-2)	8,98(-1)	0,129 ^a ; 2,28(-1) ^{b1} ; 1,76(-1) ^{b2} ; 6,98(-1) ^c ; -0,22 ^d	7,06(8)	7,33(8)	1,21(9) ^c ; 1,04(9) ^d
6d	$^2D_{3/2}$	-	7p	$^2P^{\circ}_{3/2}$	395,09	1636,24	1565,86 ^d	6,46(-3)	1,63(-1)	0,129 ^a ; 4,24(-2) ^{b1} ; 3,69(-2) ^{b2} ; 1,40(-1) ^c ; -0,82 ^d	6,90(7)	1,01(8)	3,80(8) ^c ; 4,08(8) ^d
5f	$^2F^{\circ}_{7/2}$	-	6d	$^2D_{5/2}$	65816,62	95070,07	9841,54 ^a ; 9838,843 ^d	2,09(-2)	2,54(-2)	1,30(-2) ^{b1} ; 8,81(-3) ^{b2} ; 1,14(-1) ^c ; -0,65 ^d	5,37(3)	3,12(3)	7,83(6) ^c ; 1,53(7) ^d
6d	$^2D_{5/2}$	-	7p	$^2P^{\circ}_{3/2}$	404,56	1761,02	1707,372 ^d	5,68(-2)	1,58	0,129 ^a ; 2,73(-1) ^{b1} ; 2,33(-1) ^{b2} ; 1,35 ^c ; 0,99 ^d	5,78(8)	8,51(8)	3,09(9) ^c ; 2,83 ^d
7s	$^2S_{1/2}$	-	7p	$^2P^{\circ}_{1/2}$	2075,75	2762,06	2694,81 ^a ; 2494,012 ^d	2,65(1)	9,00(-1)	1,48 ^a ; 4,48(-1) ^{b1} ; 3,02(-1) ^{b2} ; 6,60(-1) ^c ; -0,22 ^d	2,05(10)	3,93(8)	6,06(8) ^c ; 5,55(8) ^d

Tablo 3.15. Devam

Seviye				λ			gf			A			
				MCHF	MCDF	Diğer Ç.	MCHF	MCDF	Diğer Ç.	MCHF	MCDF	Diğer Ç.	
7s	$^2S_{1/2}$	-	7p	$^2P_{3/2}$	2068,94	2090,14	2003,00 ^a ; 2002,350 ^d	5,50(1)	2,23	1,48 ^a ; 1,12 ^{b1} ; 8,17(-1) ^{b2} ; 1,72 ^c ; 0,21 ^d	2,14(10)	8,53(8)	2,86(9) ^c ; 2,70(9) ^d
7p	$^2P_{1/2}$	-	8s	$^2S_{1/2}$	3691,23	1775,75	1683,998 ^d	4,28	4,27(-1)	0,27 ^a ; 2,13(-1) ^{b1} ; 2,28(-1) ^{b2} ; -0,16 ^d	1,04(9)	4,52(8)	1,62(9) ^d
7p	$^2P_{3/2}$	-	8s	$^2S_{1/2}$	3669,74	2238,37	2146,827 ^d	8,18	1,28	0,27 ^a ; 3,20(-1) ^{b1} ; 3,21(-1) ^{b2} ; 0,03 ^d	1,01(9)	8,54(8)	1,56(9) ^d
5f	$^2F_{7/2}$	-	5g	$^2G_{9/2}$	619,72	-	-	1,62(-1)	-	-	2,82(8)	-	-
5f	$^2F_{7/2}$	-	5g	$^2G_{7/2}$	619,73	-	-	4,64(-3)	-	-	1,00(7)	-	-
5f	$^2F_{5/2}$	-	5g	$^2G_{7/2}$	596,53	-	-	1,30(-1)	-	-	3,05(8)	-	-
6d	$^2D_{5/2}$	-	8p	$^2P_{3/2}$	391,46	-	797,546 ^d	4,06(-2)	-	-1,30 ^d	4,42(8)	-	5,29(8) ^d
6d	$^2D_{3/2}$	-	8p	$^2P_{3/2}$	382,58	-	765,242 ^d	4,62(-3)	-	-2,23 ^d	5,26(7)	-	6,66(7) ^d
6d	$^2D_{3/2}$	-	8p	$^2P_{1/2}$	382,72	-	979,937 ^d	2,22(-2)	-	-1,55 ^d	5,07(8)	-	2,94(8) ^d
7s	$^2S_{1/2}$	-	8p	$^2P_{3/2}$	1766,46	-	856,603 ^d	8,25(1)	-	-2,35 ^d	4,41(10)	-	4,10(7) ^d
8s	$^2S_{1/2}$	-	8p	$^2P_{3/2}$	2814,82	-	4937,064 ^d	3,37(1)	-	1,93 ^a ; 0,41 ^d	7,10(9)	-	7,06(8) ^d
7s	$^2S_{1/2}$	-	8p	$^2P_{1/2}$	1769,47	-	897,781 ^d	-	-	-2,67 ^d	-	-	1,78(7) ^d
8s	$^2S_{1/2}$	-	8p	$^2P_{1/2}$	2822,47	-	6711,854 ^d	-	-	1,93 ^a ; -0,02 ^d	-	-	1,40(8) ^d

^a Glushkov ve çalışma arkadaşları [34, 35],^{b1, b2} Migdalek ve Proszkiewicz [56],^c Safronova ve çalışma arkadaşları [57] (gf ve gA değerleri),^d Biémont ve çalışma arkadaşları [55] ($\log gf$, gA)

Energileri karşılaştırma değerlerine daha yakın olan MCDF yöntemi ile elde edilen ışınım parametreleri MCHF'ye göre elde edilene göre daha uyumludur. $6d \ ^2D_{5/2} - 7p \ ^2P_{3/2}$ geçişinin MCDF yöntemiyle hesaplanan $1761,02 \text{ \AA}$ dalga boyu Biémont ve çalışma arkadaşlarının [55] hesapladığı $1707,372 \text{ \AA}$ dalga boyuyla oldukça uyumludur. Ancak bu uyumun 5f seviyelerine ait geçişlerde çoğunlukla görülmemektedir. Dalga boylarındaki uyum ağırlıklı salınıcı şiddeti ve geçiş olasılığı parametrelerinde de görülmektedir.

Th IV iyonunun Tablo 3.16'da sunulan E2 ve M1 geçişlerine ait ışınım parametreleri için mevcut kaynaklarda bulunan karşılaştırma değerleri ile oldukça uyumludur. Bu geçişlere ait ağırlıklı salınıcı şiddeti için karşılaştırma değeri bulunamamıştır.

Tablo 3.16. Th IV'ün E2 ve M1 geçişlerine ait λ dalga boyları (Å), gf ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve A geçiş olasılıkları (sn^{-1})

Geçiş	λ			gf			A		
	MCHF	MCDF	Diğer Ç.	MCHF	MCDF	MCHF	MCDF	Diğer Ç.	
E2 geçişleri									
5f $^2F^o_{5/2}$ - 5f $^2F^o_{7/2}$	15938,29	28439,09	23119,6 ^a	4,79(-11)	1,59(-11)	1,57(-4)	1,64(-5)	2,487(-5) ^a	
5f $^2F^o_{5/2}$ - 7p $^2P^o_{1/2}$	392,44	2011,48	-	5,97(-8)	2,28(-7)	1,29(3)	1,88(2)	3,59(2) ^{b1} ; 5,43(2) ^{b2}	
5f $^2F^o_{5/2}$ - 7p $^2P^o_{3/2}$	392,20	1629,90	-	1,66(-8)	9,21(-8)	1,80(2)	5,78(1)	1,35(2) ^{b1} ; 1,58(2) ^{b2}	
6d $^2D_{3/2}$ - 6d $^2D_{5/2}$	16866,54	23093,10	-	6,03(-10)	2,71(-10)	2,35(-3)	5,66(-4)	-	
6d $^2D_{3/2}$ - 7s $^2S_{1/2}$	488,34	7534,73	-	1,35(-8)	2,22(-8)	1,89(2)	1,30	1,74 ^{b1} ; 1,70 ^{b2}	
6d $^2D_{3/2}$ - 8s $^2S_{1/2}$	442,75	945,26	-	3,73(-7)	4,58(-7)	6,35(3)	1,71(3)	-	
5f $^2F^o_{7/2}$ - 7p $^2P^o_{3/2}$	402,09	1728,99	-	9,28(-8)	5,38(-7)	9,58(2)	3,00(2)	5,95(2) ^{b1} ; 3,76(2) ^{b2}	
6d $^2D_{5/2}$ - 7s $^2S_{1/2}$	502,90	11183,71	-	1,85(-8)	1,12(-8)	2,44(2)	3,01(-1)	2,39(-1) ^{b1} ; 2,60(-1) ^{b2}	
6d $^2D_{5/2}$ - 8s $^2S_{1/2}$	454,69	985,60	-	5,17(-7)	8,95(-7)	8,34(3)	3,07(3)	-	
7p $^2P^o_{1/2}$ - 7p $^2P^o_{3/2}$	630548,95	8591,99	-	7,49(-11)	6,77(-8)	3,14(-7)	1,53	2,17(1) ^{b1} ; 2,07(1) ^{b2}	
6d $^2D_{5/2}$ - 5g $^2G_{9/2}$	625,61	-	-	5,24(-5)	-	8,93(4)	-	-	
6d $^2D_{5/2}$ - 5g $^2G_{7/2}$	625,62	-	-	4,19(-6)	-	8,93(3)	-	-	
6d $^2D_{3/2}$ - 5g $^2G_{7/2}$	603,24	-	-	4,20(-5)	-	9,64(4)	-	-	
5f $^2F_{7/2}$ - 8p $^2P_{3/2}$	389,14	-	-	7,17(-8)	-	7,89(2)	-	-	
5f $^2F_{5/2}$ - 8p $^2P_{3/2}$	379,87	-	-	1,28(-8)	-	1,48(2)	-	-	
5f $^2F_{5/2}$ - 8p $^2P_{1/2}$	380,01	-	-	4,33(-8)	-	1,00(3)	-	-	
7p $^2P_{3/2}$ - 8p $^2P_{1/2}$	12224,80	-	-	2,25(-6)	-	5,03(1)	-	-	
7p $^2P_{1/2}$ - 8p $^2P_{3/2}$	11855,32	-	-	2,06(-6)	-	2,45(1)	-	-	
8p $^2P_{1/2}$ - 8p $^2P_{3/2}$	1037892,19	-	-	4,77(-11)	-	7,39(-8)	-	-	
M1 geçişleri									
5f $^2F^o_{5/2}$ - 5f $^2F^o_{7/2}$	15938,29	28439,09	23119,6 ^a	8,69(-7)	4,86(-7)	2,85	5,02(-1)	9,352(-1) ^a ; 9,40(-1) ^{b1} ; 9,39(-1) ^{b2}	
5f $^2F^o_{5/2}$ - 7p $^2P^o_{3/2}$	-	1629,90	-	-	2,64(-16)	-	1,66(-7)	-	
6d $^2D_{3/2}$ - 6d $^2D_{5/2}$	16866,54	23093,10	-	5,75(-7)	4,18(-7)	2,24	8,73(-1)	1,61 ^{b1} ; 1,60 ^{b2}	
6d $^2D_{3/2}$ - 7s $^2S_{1/2}$	-	7534,73	-	-	2,11(-16)	-	1,24(-8)	-	
6d $^2D_{3/2}$ - 8s $^2S_{1/2}$	-	945,26	-	-	9,74(-16)	-	3,63(-6)	-	
7s $^2S_{1/2}$ - 8s $^2S_{1/2}$	-	1080,86	-	-	6,30(-14)	-	1,80(-4)	-	
7p $^2P^o_{1/2}$ - 7p $^2P^o_{3/2}$	630548,95	8591,99	-	8,54(-9)	6,00(-7)	3,58(-5)	1,35(1)	2,17(1) ^{b1} ; 2,07(1) ^{b2}	
7p $^2P^o_{3/2}$ - 8p $^2P^o_{1/2}$	12224,80	-	-	9,76(-11)	-	2,17(-3)	-	-	
7p $^2P^o_{1/2}$ - 8p $^2P^o_{3/2}$	11855,32	-	-	1,00(-10)	-	1,19(-3)	-	-	
8p $^2P^o_{1/2}$ - 8p $^2P^o_{3/2}$	1037892,19	-	-	5,19(-9)	-	8,03(-6)	-	-	

^a Safronova ve çalışma arkadaşları [57].

^{b1}, ^{b2} Biémont ve çalışma arkadaşları [55]

3.5. Pa I için Enerji Hesapları

Bazı aktinit atomlarının düşük seviyelerinin geçiş enerjileri Judd [63] tarafından hesaplandı. Nötral protaktinyum spektrumu, Giacchetti [64] ve Richards ve çalışma arkadaşları [65] tarafından deneysel olarak incelendi. Blaise ve çalışma arkadaşları [66] nötral protaktinyumun düşük çift konfigürasyonlarını Slater-Condon yöntemini kullanarak yorumladılar. Ayrıca nötral protaktinyum önceki kısımlarda bahsi geçen çeşitli çalışmalarda da ele alınmıştır [21-23, 25-28, 30, 32, 33, 36, 38, 41-44, 47, 53].

Nötral protaktinyum için MCHF yöntemiyle yalnızca taban hal konfigürasyonu ile hesaplama gerçekleştirilebilmiştir. Taban hal konfigürasyonu ile birlikte bir veya birden fazla konfigürasyon dikkate alındığında MCHF hesabı sırasındaki tekrarlamalı süreçte sonuç elde edilememiştir. Yalnızca taban hal konfigürasyonu için yapılan hesaplamada, Breit-Pauli relativistik katkıları dikkate alınmadığında taban hal konfigürasyonu $5f^2(^3H)6d7s^2\ ^2H$ olarak bulunmuştur. Relativistik katkılar dikkate alınarak yapılan hesaplamada 93 seviye elde edilmiştir.

MCDF yöntemiyle yapılan hesaplamalarda da benzer sorunlar oluşmuştur. MCDF yöntemiyle yapılan hesaplamalarda $5f^26d7s^2$ taban hal konfigürasyonunun yanına $5f$ tabakasında iki elektronu olan başka konfigürasyon ilave edilememiş ve bir elektron bulunan konfigürasyonlardan ise bir tane eklenebilmiştir. Taban hal konfigürasyonu yanına tek pariteli en düşük hal $5f6d^27s^2$ ya da bu ikisinin yanına $6d^27s^28s$, $6d^27s^28p$, $6d^27s^29s$, $6d^27s^29p$ konfigürasyonları eklendiğinde $6d^27s^25f\ ^4H_{7/2}$ seviyesi taban hal olarak bulunmuştur. $5f^26d7s^2$ konfigürasyonuna $6d^27s^27p$ eklendiğinde taban hal $6d^27s^27p\ ^4K_{11/2}$ olarak çıkmıştır. $6d7s^25f^2$, $6d^5$, $6d^47s$, $6d^37s^2$ konfigürasyon takımı ile hesaplama yapıldığında taban hal doğru tahmin edilmesine rağmen sonuçlar yalnızca $5f6d^27s^2$ için yapılan çalışmadan daha iyi değildir. Yalnızca taban hal konfigürasyonu için yapılan hesaplamada 104 seviye elde edilmiştir. Her iki yöntemle elde edilen sonuçlar Tablo 3.17’de sunulmaktadır.

MCDF hesabında karşılaştırma değerleriyle en uyumlu seviye $5f^2(^3H)6d7s^2\ ^2H_{9/2}$ ve $^4K_{17/2}$ ’dir. Bu seviyelerin hesaplanan değerleri $3466,17\text{ cm}^{-1}$ ve $10578,42\text{ cm}^{-1}$ iken karşılaştırma değerleri $3323,860\text{ cm}^{-1}$ [64], $10646,46\text{ cm}^{-1}$ (1,32 eV) [38]’dir.

Tablo 3.17. Pa I'in uyarılmış seviyelerinin enerjileri (cm⁻¹)

Seviye	MCHF+BP	MCDF		Diğer Çalışmalar	Konfigürasyon Katkıları	
		MCDF	+B+QED			
6d7s ² 5f ² (³ H)	⁴ K _{11/2}	0,00	0,00	0,00 ^{a, b}	73,95 + 11,23	6d7s ² 5f ² (¹ G) ² I _{11/2}
	⁴ K _{13/2}	5175,24	3505,63	0,38 ^a ; 3711,620 ^b	91,27 + 4,80	6d7s ² 5f ² (¹ G) ² I _{15/2}
	⁴ K _{15/2}	10504,90	7059,96	0,82 ^a	99,17 + 0,37	6d7s ² 5f ² (³ H) ² K _{15/2}
	⁴ K _{17/2}	15620,83	10578,42	1,32 ^a	99,27 + 0,73	6d7s ² 5f ² (¹ I) ² L _{17/2}
	⁴ I _{9/2}	901,36	2357,93	0,13 ^a ; 825,420 ^b	48,91 + 39,68	6d7s ² 5f ² (³ H) ² H _{9/2}
	⁴ I _{11/2}	4714,01; 6529,50	5575,17	0,45 ^a ; 4121,440 ^b	85,93 + 9,98	6d7s ² 5f ² (³ H) ² H _{11/2}
	⁴ I _{13/2}	9691,74	8156,58	0,83 ^a ; 7383,300 ^b	75,59 + 12,13	6d7s ² 5f ² (³ H) ² I _{15/2}
	⁴ I _{15/2}	14337,87	11364,44	1,28 ^a ; 7512,680 ^b	93,79 + 3,09	6d7s ² 5f ² (¹ I) ² K _{15/2}
	⁴ G _{5/2}	3006,32	12309,52	0,37 ^a ; 1618,330 ^b	29,79 + 21,98	6d7s ² 5f ² (³ F) ⁴ P _{5/2}
	⁴ G _{7/2}	6129,34; 14711,21	14332,44	0,57 ^a ; 4713,870 ^b	32,70 + 25,68	6d7s ² 5f ² (³ F) ⁴ G _{7/2}
	⁴ G _{9/2}	10730,38	15622,10	0,84 ^a ; 6149,810 ^b	20,20 + 18,17	6d7s ² 5f ² (³ F) ⁴ G _{9/2}
	⁴ G _{11/2}	17611,57	19650,91	1,17 ^a	36,85 + 39,52	6d7s ² 5f ² (³ F) ⁴ G _{11/2}
	⁴ H _{7/2}	4340,43	10822,54	0,43 ^a ; 2966,520 ^b	42,15 + 29,10	6d7s ² 5f ² (³ F) ⁴ H _{7/2}
	⁴ H _{9/2}	8864,20	13636,18	0,69 ^a ; 3323,860 ^b	50,51 + 35,54	6d7s ² 5f ² (³ F) ⁴ H _{9/2}
	⁴ H _{11/2}	13076,22	16184,09	1,01 ^a ; 4576,020 ^b	46,45 + 32,84	6d7s ² 5f ² (³ F) ⁴ H _{11/2}
	⁴ H _{13/2}	17420,59	18200,72	1,40 ^a	56,61 + 35,54	6d7s ² 5f ² (³ F) ⁴ H _{15/2}
	⁴ F _{3/2}	9975,39	11950,49	–	44,12 + 28,52	6d7s ² 5f ² (³ F) ⁴ P _{5/2}
	⁴ F _{5/2}	18619,73; 12700,12	12904,33	5938,640 ^b	35,99 + 13,70	6d7s ² 5f ² (³ F) ⁴ P _{5/2}
	⁴ F _{7/2}	17249,50	15118,42	7658,770 ^b	33,31 + 22,58	6d7s ² 5f ² (³ F) ⁴ F _{7/2}
	⁴ F _{9/2}	21474,10; 20264,29	19513,15	–	66,62 + 18,10	6d7s ² 5f ² (¹ G) ² G _{9/2}
	² K _{13/2}	15678,02	15062,36	–	63,68 + 28,13	6d7s ² 5f ² (¹ I) ² K _{15/2}
	² K _{15/2}	21947,31	18929,52	–	55,09 + 35,99	6d7s ² 5f ² (¹ I) ² K _{15/2}
	² I _{11/2}	11468,10	8346,56	–	24,16 + 18,46	6d7s ² 5f ² (¹ G) ² I _{11/2}
	² I _{13/2}	–	9128,19	–	21,57 + 30,96	6d7s ² 5f ² (¹ G) ² I _{15/2}
	² H _{9/2}	3718,33	3466,17	–	21,64 + 41,86	6d7s ² 5f ² (³ H) ⁴ I _{9/2}
	² H _{11/2}	–	3938,73	–	17,02 + 19,26	6d7s ² 5f ² (³ H) ⁴ K _{11/2}
	² G _{7/2}	11586,77	12167,52	–	31,19 + 14,43	6d7s ² 5f ² (³ H) ² F _{7/2}
	² G _{9/2}	–	17867,50	–	27,88 + 19,73	6d7s ² 5f ² (¹ D) ² G _{9/2}
	² F _{5/2}	8511,59	15470,49	–	21,55 + 40,65	6d7s ² 5f ² (³ F) ⁴ F _{5/2}
	² F _{7/2}	24120,53	21098,08	–	25,82 + 24,51	6d7s ² 5f ² (³ H) ² F _{7/2}

Tablo 3.17. Devam

Seviye	MCHF+BP	MCDF		Diğer Çalışmalar	Konfigürasyon Katkıları				
		MCDF	+B+QED						
6d7s ² 5f ² (³ F)	⁴ H _{7/2}	7968,62	4624,21	4578,22	5149,455 ^b	42,19 + 31,65	6d7s ² 5f ² (³ H)	⁴ H _{7/2}	
	⁴ H _{9/2}	11783,66	7165,28	6979,95	7383,300 ^b	46,96 + 32,19	6d7s ² 5f ² (³ H)	⁴ H _{9/2}	
	⁴ H _{11/2}	14450,70; 15682,64	9941,57	9618,16	-	52,98 + 38,16	6d7s ² 5f ² (³ H)	⁴ H _{11/2}	
	⁴ H _{13/2}	18418,89	13165,00	12686,61	-	43,18 + 34,30	6d7s ² 5f ² (³ H)	⁴ H _{15/2}	
	⁴ G _{5/2}	10876,13	3041,40	3007,22	-	42,14 + 35,96	6d7s ² 5f ² (³ H)	⁴ G _{5/2}	
	⁴ G _{7/2}	14144,91	5282,67	5135,64	-	37,97 + 36,84	6d7s ² 5f ² (³ H)	⁴ G _{7/2}	
	⁴ G _{9/2}	17988,04	8070,76	7769,58	6708,560 ^b	41,47 + 34,07	6d7s ² 5f ² (³ H)	⁴ G _{9/2}	
	⁴ G _{11/2}	23447,94	11191,34	10734,68	-	37,31 + 27,52	6d7s ² 5f ² (³ H)	² H _{11/2}	
	⁴ P _{1/2}	11873,42	10228,91	10163,70	-	60,40 + 19,12	6d7s ² 5f ² (³ F)	² P _{1/2}	
	⁴ P _{3/2}	11685,00	10961,27	10838,31	-	34,15 + 18,70	6d7s ² 5f ² (³ H)	⁴ F _{5/2}	
	⁴ P _{5/2}	14872,68	12653,13	12510,56	-	24,75 + 19,39	6d7s ² 5f ² (³ H)	⁴ G _{5/2}	
	⁴ F _{3/2}	14254,85	16528,77	16357,16	-	60,18 + 12,50	6d7s ² 5f ² (³ H)	⁴ F _{5/2}	
	⁴ F _{5/2}	15398,63	18756,98	18420,36	-	26,62 + 23,33	6d7s ² 5f ² (³ H)	⁴ F _{5/2}	
	⁴ F _{7/2}	20295,18	16206,06	15929,70	-	25,63 + 18,01	6d7s ² 5f ² (³ H)	⁴ F _{7/2}	
	⁴ F _{9/2}	16860,07; 24977,71; 26195,78	16740,65	16448,34	-	24,71 + 24,25	6d7s ² 5f ² (³ H)	⁴ G _{9/2}	
	⁴ D _{1/2}	17924,39	16696,16	16425,89	-	56,79 + 34,62	6d7s ² 5f ² (³ F)	² P _{1/2}	
	⁴ D _{3/2}	14620,85	15099,66	14937,08	-	61,82 + 13,72	6d7s ² 5f ² (³ F)	⁴ F _{5/2}	
	⁴ D _{5/2}	16709,07	16364,88	16149,01	-	75,01 + 09,02	6d7s ² 5f ² (¹ G)	² F _{5/2}	
	⁴ D _{7/2}	16974,02	17422,44	17185,62	-	53,96 + 12,19	6d7s ² 5f ² (³ H)	⁴ F _{7/2}	
	² H _{9/2}	22499,96	23113,08	22807,56	-	23,91 + 19,12	6d7s ² 5f ² (¹ G)	² G _{9/2}	
	² H _{11/2}	26947,28	25467,09	25071,82	-	31,45 + 37,51	6d7s ² 5f ² (¹ I)	² H _{11/2}	
	² G _{7/2}	29077,18	18765,27	18425,50	-	45,60 + 14,62	6d7s ² 5f ² (³ H)	² F _{7/2}	
	² G _{9/2}	-	22393,84	21953,80	-	52,04 + 13,75	6d7s ² 5f ² (³ F)	⁴ F _{9/2}	
	² F _{5/2}	21611,81	8458,49	8322,86	-	22,82 + 14,00	6d7s ² 5f ² (³ H)	² F _{5/2}	
	² F _{7/2}	-	25974,25	25513,56	-	20,06 + 22,85	6d7s ² 5f ² (¹ G)	² F _{7/2}	
	² D _{3/2}	17685,03	13815,15	13580,17	-	38,65 + 17,42	6d7s ² 5f ² (³ F)	⁴ P _{5/2}	
	² D _{5/2}	-	17171,14	16793,33	-	31,85 + 20,75	6d7s ² 5f ² (³ F)	⁴ F _{5/2}	
	² P _{1/2}	9287,25	12246,94	12170,19	-	34,44 + 33,36	6d7s ² 5f ² (³ F)	⁴ D _{1/2}	
	² P _{3/2}	18266,22	16927,32	16663,79	-	43,74 + 15,55	6d7s ² 5f ² (¹ G)	² D _{5/2}	
	6d7s ² 5f ² (³ P)	⁴ F _{3/2}	27072,45; 291411,56	24934,08	24821,70	-	84,70 + 5,46	6d7s ² 5f ² (¹ D)	² D _{5/2}
		⁴ F _{5/2}	30368,49	25415,07	25248,34	-	47,04 + 20,43	6d7s ² 5f ² (¹ D)	² F _{5/2}

Tablo 3.17. Devam

Seviye	MCHF+BP	MCDF		Diğer Çalışmalar	Konfigürasyon Katkıları					
		MCDF	+B+QED							
6d7s ² 5f ² (³ P)	⁴ F _{7/2}	33624,56	27281,94	27021,78	-	70,41	+ 5,10	6d7s ² 5f ² (³ F)	² G _{7/2}	
	⁴ F _{9/2}	30553,74; 37760,67	28563,92	28258,62	-	55,67	+ 23,62	6d7s ² 5f ² (³ F)	² G _{9/2}	
	⁴ D _{1/2}	31069,79; 34749,05	28601,95	28403,88	-	37,25	+ 30,96	6d7s ² 5f ² (³ P)	⁴ P _{1/2}	
	⁴ D _{3/2}	31167,32; 35924,21	28470,74	28290,29	-	52,63	+ 28,09	6d7s ² 5f ² (³ P)	⁴ P _{5/2}	
	⁴ D _{5/2}	34033,06	29338,63	29064,26	-	51,22	+ 12,92	6d7s ² 5f ² (¹ D)	² D _{5/2}	
	⁴ D _{7/2}	39313,75	32683,52	32218,69	-	47,43	+ 30,56	6d7s ² 5f ² (¹ D)	² F _{7/2}	
	⁴ P _{1/2}	-	32249,62	31899,13	-	37,53	+ 31,67	6d7s ² 5f ² (³ P)	² P _{1/2}	
	⁴ P _{3/2}	-	31563,38	31214,56	-	23,69	+ 39,59	6d7s ² 5f ² (¹ D)	² D _{5/2}	
	⁴ P _{5/2}	31438,60	30258,34	30005,79	-	62,72	+ 14,65	6d7s ² 5f ² (³ P)	⁴ D _{5/2}	
	² F _{5/2}	40967,34	41136,44	40883,68	-	55,43	+ 14,82	6d7s ² 5f ² (¹ D)	² F _{5/2}	
	² F _{7/2}	41910,89	41286,91	40964,78	-	63,38	+ 15,41	6d7s ² 5f ² (³ F)	² F _{7/2}	
	² P _{1/2}	35948,85	29550,61	29243,39	-	31,35	+ 41,54	6d7s ² 5f ² (³ P)	⁴ D _{1/2}	
	² P _{3/2}	26108,86	34272,33	33859,91	-	27,41	+ 31,52	6d7s ² 5f ² (¹ D)	² P _{5/2}	
	² D _{3/2}	45522,06	41735,43	41454,45	-	66,19	+ 22,80	6d7s ² 5f ² (¹ S)	² D _{5/2}	
	² D _{5/2}	47041,71	43988,30	43612,88	-	72,26	+ 09,86	6d7s ² 5f ² (¹ S)	² D _{5/2}	
	6d7s ² 5f ² (¹ I)	² L _{15/2}	33004,30	28184,15	27872,53	-	96,34	+ 2,52	6d7s ² 5f ² (¹ I)	² K _{15/2}
		² L _{17/2}	35422,74	29588,41	29219,21	-	99,27	+ 0,73	6d7s ² 5f ² (³ H)	⁴ K _{17/2}
		² K _{13/2}	34056,81	33226,36	32872,72	-	57,86	+ 27,91	6d7s ² 5f ² (³ H)	² K _{15/2}
		² K _{15/2}	34209,16	34403,24	34032,22	-	58,39	+ 41,00	6d7s ² 5f ² (³ H)	² K _{15/2}
		² I _{11/2}	29966,73	27149,44	26847,07	-	79,64	+ 10,59	6d7s ² 5f ² (³ H)	² I _{11/2}
² I _{13/2}		29798,67	28214,89	27890,36	-	57,38	+ 18,64	6d7s ² 5f ² (³ H)	² I _{15/2}	
² H _{9/2}		34635,92	31720,08	31360,33	-	33,93	+ 26,00	6d7s ² 5f ² (³ P)	⁴ F _{9/2}	
² H _{11/2}		34613,67	33536,57	33197,05	-	55,56	+ 28,08	6d7s ² 5f ² (³ F)	² H _{11/2}	
² G _{7/2}		43051,64	39643,81	39289,34	-	92,99	+ 2,91	6d7s ² 5f ² (³ F)	² G _{7/2}	
² G _{9/2}		41492,52	39285,50	38947,73	-	82,62	+ 6,03	6d7s ² 5f ² (³ F)	² G _{9/2}	
6d7s ² 5f ² (¹ G)		² I _{11/2}	20236,98	20454,38	20210,87	-	42,27	+ 21,67	6d7s ² 5f ² (³ H)	² I _{11/2}
		² I _{13/2}	12452,08; 25369,16	22768,78	22383,57	-	40,80	+ 31,24	6d7s ² 5f ² (¹ I)	² I _{15/2}
	² H _{9/2}	12576,10	11474,87	11300,84	-	43,65	+ 12,05	6d7s ² 5f ² (¹ G)	² G _{9/2}	
	² H _{11/2}	-	14826,86	14493,23	-	43,48	+ 19,51	6d7s ² 5f ² (³ H)	⁴ G _{11/2}	
	² G _{7/2}	15376,42; 21872,79	20361,72	20078,69	-	23,50	+ 15,87	6d7s ² 5f ² (³ F)	⁴ D _{7/2}	

Tablo 3.17. Devam

Seviye	MCHF+BP	MCDF		Diğer Çalışmalar	Konfigurasyon Katkıları		
		MCDF	+B+QED				
6d7s ² 5f ² (¹ G)	² G _{9/2}	-	24052,68	23698,29	-	29,95 + 17,10 6d7s ² 5f ² (¹ D) ² G _{9/2}	
	² F _{5/2}	24262,24	22310,04	22013,85	-	49,61 + 20,86 6d7s ² 5f ² (³ F) ² F _{5/2}	
	² F _{7/2}	-	11359,49	11135,52	-	26,80 + 25,29 6d7s ² 5f ² (³ F) ² F _{7/2}	
	² D _{3/2}	-	23141,07	22725,47	-	37,91 + 17,08 6d7s ² 5f ² (³ F) ² P _{5/2}	
	² D _{5/2}	228713,54	20943,28	20601,99	-	52,18 + 17,45 6d7s ² 5f ² (³ F) ² D _{5/2}	
	6d7s ² 5f ² (¹ D)	² G _{7/2}	28707,95	30857,25	30571,74	-	41,79 + 30,84 6d7s ² 5f ² (³ F) ² G _{7/2}
		² G _{9/2}	-	34087,03	33698,49	-	16,89 + 30,59 6d7s ² 5f ² (¹ I) ² H _{9/2}
		² F _{5/2}	27279,66	27113,55	26906,18	-	20,43 + 41,38 6d7s ² 5f ² (³ P) ⁴ F _{5/2}
		² F _{7/2}	31794,46	28936,10	28647,63	-	18,66 + 45,30 6d7s ² 5f ² (³ P) ⁴ D _{7/2}
		² D _{3/2}	-	27612,54	27444,69	-	25,65 + 21,19 6d7s ² 5f ² (³ P) ⁴ D _{5/2}
² D _{5/2}		38385,48	34048,74	33598,99	-	54,12 + 19,68 6d7s ² 5f ² (³ P) ⁴ P _{5/2}	
² P _{1/2}		29272,34	26061,09	25700,10	-	44,70 + 17,94 6d7s ² 5f ² (³ P) ⁴ D _{1/2}	
² P _{3/2}		25842,45; 37592,92	22812,06	22518,56	-	35,90 + 34,32 6d7s ² 5f ² (³ P) ² P _{5/2}	
² S _{1/2}		25169,43	21919,76	21639,12	-	68,87 + 13,00 6d7s ² 5f ² (³ P) ² P _{1/2}	
6d7s ² 5f ² (¹ S)		² D _{3/2}	63680,33	57007,06	56672,20	-	73,03 + 20,86 6d7s ² 5f ² (³ P) ² D _{5/2}
	² D _{5/2}	65213,39	56545,95	56222,97	-	86,34 + 7,25 6d7s ² 5f ² (³ P) ² D _{5/2}	

^a Roos ve çalışma arkadaşları [38] (eV biriminde),

^b Giacchetti [64]

Yüksek uyarılmış seviyelere doğru gidildikçe elde edilen sonuçlarla karşılaştırma değerleri arasındaki uyum azalmaktadır. MCHF hesaplamalarına ait sonuçlar ise daha iyi değildir. Ancak $5f^2(^3H)6d7s^2\ ^4G_{5/2}$ ve $^4H_{7/2}$ seviyeleri için karşılaştırma değerleri bir birinden iki kat (ya da yarısı) kadar farklıdır. Bu seviyelerde MCDF enerjisi yüksek olan değere yakınsarken MCHF enerjisi düşük olan değere yakınsamaktadır. Bu uyumsuzlukların tam olarak yorumlanabilmesi için daha fazla deneysel ve teorik çalışmalara ait karşılaştırma değerlerine ihtiyaç vardır.

3.6. Pa II için Enerji Hesapları

Pa II'nin 25 düşük çift 164 yüksek enerji seviyesi arasındaki 656 çizgisi Giacchetti [67] tarafından sınıflandırıldı. Bir kez iyonlaşmış protaktinyum, Carlson ve çalışma arkadaşlarının [41] iyonlaşma potansiyellerini hesapladığı, Sevier'in [51] atomik bağlanma enerjilerini incelediği ve Brewer'in [50] elektronik konfigürasyon enerjilerini ele aldığı çalışmalarda da yer almaktadır.

Bir kez iyonlaşmış protaktinyum için her iki yöntemle yapılan hesaplamalarda, nötral protaktinyum hesaplamalarında karşılaşılan problemlerle karşılaşmıştır. Pa II MCHF hesabında çift parite ve tek pariteden oluşan konfigürasyon takımı kullanıldığında taban hal $5f6d^27s\ ^5H_3$ olarak çıkmaktadır. Yalnızca taban hal konfigürasyonu için hesap yapıldığında taban hal mevcut çalışmalarla aynı bulunmuştur. Taban hal konfigürasyonu ile beraber alınan çift pariteli konfigürasyonlarla yapılan hesap sonuçlarında sistematik bir iyileşme görülmemiştir. Bu sebeple yalnızca taban hal konfigürasyonu için yapılan hesaplama Tablo 3.18'de verilmektedir.

Mevcut kaynaklarda çift ve tek paritenin en düşük halleri olan $5f^27s^2$ ve $6d^25f7s$ için hesaplama yapıldığında taban hal $5f^26d^27s\ ^5H_3$ olarak bulunmaktadır. Doğru taban halini bulmak için iki konfigürasyon ile beraber 5f, 6d, 7s, 7p ve 8s tabakalarını içeren konfigürasyonlar eklendiğinde ya MCDF hesabındaki tekrarlamalı süreç gerçekleştirilememiş; ya da hesap yapılabilen takımlarda taban hal $5f^26d^27s\ ^5H_3$ olarak çıkmıştır. Taban hal konfigürasyonu yanına çift pariteli düşük haller eklendiğinde ise karşılaştırma değerlerinden uzaklaşmaktadır. Yalnızca $5f^27s^2$ için

Tablo 3.18. Pa II'nin uyarılmış enerjileri (cm⁻¹)

Seviye	MCHF		MCDF		Diğer Ç.	Konfigürasyon Katkıları				
	MCHF	+B	MCDF	+B+QED						
5f ² 7s ²										
³ H ₄	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00 ^a	92,65	+	6,96	5f ² 7s ²	¹ G ₄
³ H ₅		6060,50	4151,24	3931,73	4 447,575 ^a	100,00				
³ H ₆		11542,57	8124,68	–	8 332,110 ^a	98,55	+	1,45	5f ² 7s ²	¹ I ₆
³ F ₂	4331,13	5975,46	5227,72	5196,66	3 150,950 ^a	94,01	+	5,86	5f ² 7s ²	¹ D ₂
³ F ₃		10393,67	8091,48	–	6 391,940 ^a	100,00				
³ F ₄		17503,65	13109,87	12672,40	–	56,50	+	41,78	5f ² 7s ²	¹ G ₄
³ P ₀	20211,93	23727,41	21155,85	21077,80	–	97,09	+	2,91	5f ² 7s ²	¹ S ₀
³ P ₁		26286,14	22539,72	22357,91	–	100,00				
³ P ₂		30672,83	25245,16	24870,77	–	80,24	+	19,18	5f ² 7s ²	¹ D ₂
¹ I ₆	18762,28	26212,33	22038,91	21752,20	–	98,55	+	1,45	5f ² 7s ²	³ H ₆
¹ G ₄	5213,28	10212,16	7983,44	–	6 779,400 ^a	50,92	+	43,08	5f ² 7s ²	³ F ₄
¹ D ₂	15503,56	21569,55	18345,44	18158,06	–	74,96	+	19,63	5f ² 7s ²	³ P ₂
¹ S ₀	46232,21	54848,19	47411,34	47137,37	–	97,09	+	2,91	5f ² 7s ²	³ P ₀

^a Giacchetti [67] (Bu değerlere [106] ve [39]'dan da ulaşılabilir)

yapılan hesapta $5f^27s^2 \ ^3F_2$ (3150,950 cm^{-1} [106]) ve 3H_5 (4447,575 cm^{-1} [106]) seviyeleri için hesaplanan değerler 5227,72 cm^{-1} ve 4151,24 cm^{-1} iken $5f^27s^2$ ve $6d^27s^2$ durumunda 6492,03 cm^{-1} ve 4013,63 cm^{-1} $5f^27s^2$, $6d^27s^2$ ve $6d^37s$ durumundaysa 5442,40 cm^{-1} ve 3818,93 cm^{-1} olmaktadır.

3.7. Pa III için Enerji Hesapları

İki kez iyonlaşmış protaktinyum, üçüncü bölümün çeşitli kesimlerinde bahsi geçen çeşitli çalışmalarda [34, 41, 48, 49, 50] incelenmiştir. Ancak Pa III'ün taban hali için tartışmalı bir durum söz konusudur. Pa III'ün taban hali Brewer'in [50] çalışmasında $5f^26d \ ^4I_{11/2}$ olarak belirlenmiş ancak bu durumun Hund kurallarına aykırı olduğu da belirtilmiştir. Liu ve çalışma arkadaşları [34] ise Pa III'ün taban halinin $5f^26d$ olduğunu belirtmişler, fakat teriminden bahsetmemişlerdir. Cao ve Dolg [48] tarafından ise taban hal $5f^26d \ ^4H_{11/2}$ olarak bulunmuştur.

MCDF hesabında yalnızca $5f^26d$ konfigürasyonu; $5f^26d$ ve $5f6d^2$; $5f^26d$, $5f^27s$ ve $5f6d^2$; $5f^26d$, $5f^27s$, $5f6d^2$ ve $6d^27s$; $5f^26d$, $5f^27s$, $5f6d^2$, $6d^27s$, $5f6d7s$ ve $5f7s^2$ konfigürasyon takımları kullanıldığında taban hal $5f^26d \ ^4K_{11/2}$ olarak bulunmuştur. 5f, 6d, 7s, 7p, 8s, 5g ve 8p tabakalarını içeren konfigürasyon takımlarıyla hesaplama gerçekleştirilememiştir. Taban hal, diğer çalışmalardan farklı olarak elde edildiği için mevcut kaynaklarla karşılaştırma yapılamamıştır. Nötral ve bir kez iyonlaşmış protaktinyuma ait hesaplamalarda diğer çalışmalarla en uyumlu durum yalnızca taban hal konfigürasyonu için yapılan hesaplama olduğu için, Pa III iyonu için de yalnızca taban hal konfigürasyonuna ait sonuçlar Tablo 3.19'da sunulmuştur.

Tablo 3.19. Pa III'ün uyarılmış seviyelerinin enerjileri (cm⁻¹)

Seviye	MCDF	+B+QED	Konfigürasyon Katkıları						
5f ² (³ H)6d	⁴ K _{11/2}	0,00	0,00	71,86	+	11,89	5f ² (¹ G)6d	² I _{11/2}	
	⁴ K _{17/2}	11825,41	11303,21	99,35	+	0,65	5f ² (¹ D)6d	² L _{17/2}	
	⁴ K _{13/2}	4029,50	3849,70	91,50	+	4,55	5f ² (¹ G)6d	² I _{13/2}	
	⁴ K _{15/2}	7967,46	7609,91	99,78	+	0,16	5f ² (¹ D)6d	² L _{15/2}	
	⁴ I _{11/2}	6306,89	6122,11	93,04	+	3,84	5f ² (³ H)6d	² H _{11/2}	
	⁴ I _{9/2}	2575,29	2492,19	43,48	+	42,18	5f ² (³ H)6d	² H _{9/2}	
	⁴ I _{13/2}	9396,71	9079,86	87,00	+	6,13	5f ² (³ H)6d	² I _{13/2}	
	⁴ I _{15/2}	12552,96	12096,13	92,94	+	3,63	5f ² (³ F)6d	⁴ H _{7/2}	
	⁴ H _{13/2}	20395,28	19973,04	58,29	+	35,16	5f ² (³ H)6d	² G _{9/2}	
	⁴ H _{11/2}	18044,24	17703,43	52,49	+	34,43	5f ² (³ H)6d	⁴ F _{9/2}	
	⁴ H _{9/2}	15345,62	15137,27	56,26	+	34,22	5f ² (³ F)6d	⁴ F _{3/2}	
	⁴ H _{7/2}	12550,10	12466,71	41,02	+	31,52	5f ² (³ H)6d	² H _{11/2}	
	⁴ G _{5/2}	14420,91	14338,47	40,43	+	29,46	5f ² (³ F)6d	⁴ P _{3/2}	
	⁴ G _{7/2}	15951,60	15761,78	32,64	+	24,08	5f ² (³ F)6d	⁴ H _{9/2}	
	⁴ G _{9/2}	18935,95	18624,43	30,40	+	25,61	5f ² (³ F)6d	² P _{1/2}	
	⁴ G _{11/2}	21981,73	21500,68	38,10	+	37,27	5f ² (¹ G)6d	² G _{9/2}	
	⁴ F _{3/2}	13921,46	13772,01	38,00	+	15,09	5f ² (³ H)6d	² F _{7/2}	
	⁴ F _{5/2}	14860,20	14720,44	31,70	+	13,76	5f ² (³ H)6d	⁴ H _{13/2}	
	⁴ F _{5/2}	21087,37	20778,19	32,06	+	31,41	5f ² (³ H)6d	² F _{7/2}	
	⁴ F _{7/2}	23549,31	23109,88	25,72	+	25,23	5f ² (³ P)6d	² P _{1/2}	
	⁴ F _{7/2}	18123,71	17848,73	15,54	+	15,06	5f ² (³ F)6d	⁴ H _{11/2}	
	⁴ F _{7/2}	17105,94	16873,95	30,66	+	21,64	5f ² (³ F)6d	² P _{3/2}	
	⁴ F _{9/2}	21807,14	21355,22	59,27	+	22,05	5f ² (³ F)6d	⁴ F _{5/2}	
	² K _{13/2}	16695,33	16442,19	56,14	+	36,30	5f ² (³ H)6d	⁴ G _{11/2}	
	² K _{15/2}	20550,65	20127,77	48,38	+	40,80	5f ² (³ F)6d	⁴ H _{13/2}	
	² I _{11/2}	8990,24	8622,49	22,72	+	20,22	5f ² (¹ G)6d	² I _{11/2}	
	² H _{9/2}	4178,99	4064,39	46,86	+	16,06	5f ² (³ H)6d	² H _{9/2}	
	² H _{11/2}	4297,65	4098,65	23,05	+	21,01	5f ² (³ H)6d	⁴ K _{11/2}	
	² G _{7/2}	13811,09	13641,96	34,88	+	13,15	5f ² (³ F)6d	⁴ D _{1/2}	
	² G _{9/2}	26984,93	26601,43	36,91	+	14,57	5f ² (¹ G)6d	² D _{3/2}	
	² F _{5/2}	17571,30	17255,72	21,59	+	13,71	5f ² (³ H)6d	² G _{9/2}	
	5f ² (³ F)6d	⁴ H _{7/2}	5005,98	4956,99	43,85	+	27,16	5f ² (³ H)6d	⁴ H _{7/2}
		⁴ H _{9/2}	7861,67	7663,79	48,64	+	29,83	5f ² (³ H)6d	⁴ H _{9/2}
		⁴ H _{11/2}	11000,81	10658,62	55,64	+	35,41	5f ² (³ H)6d	⁴ H _{11/2}
		⁴ H _{13/2}	14527,89	14028,26	46,52	+	32,20	5f ² (³ F)6d	⁴ G _{5/2}
		⁴ G _{5/2}	3206,47	3173,85	44,45	+	30,90	5f ² (³ H)6d	⁴ G _{5/2}
		⁴ G _{7/2}	5843,23	5682,31	41,39	+	31,32	5f ² (³ H)6d	⁴ G _{7/2}
		⁴ G _{9/2}	8893,46	8577,16	43,63	+	29,57	5f ² (³ H)6d	⁴ G _{9/2}
		⁴ G _{11/2}	12284,67	11832,61	39,51	+	25,32	5f ² (³ F)6d	² D _{3/2}
		⁴ F _{3/2}	18754,80	18582,12	58,43	+	18,53	5f ² (³ F)6d	² D _{5/2}
		⁴ F _{5/2}	17468,95	17231,66	44,37	+	19,49	5f ² (³ F)6d	⁴ F _{7/2}
		⁴ F _{7/2}	21027,26	20664,77	47,03	+	13,99	5f ² (¹ D)6d	² K _{15/2}
		⁴ F _{9/2}	24962,41	24498,16	57,61	+	10,05	5f ² (³ F)6d	² F _{5/2}
		⁴ D _{1/2}	18881,97	18598,24	56,26	+	32,88	5f ² (³ F)6d	⁴ P _{5/2}
		⁴ D _{3/2}	16998,77	16798,59	64,79	+	14,76	5f ² (¹ D)6d	² K _{13/2}
		⁴ D _{5/2}	18286,20	18001,58	68,53	+	10,90	5f ² (¹ G)6d	² G _{7/2}
⁴ D _{7/2}		22657,00	22388,32	21,34	+	20,07	5f ² (³ F)6d	⁴ G _{11/2}	
⁴ D _{7/2}		19594,34	19320,84	50,84	+	11,24	5f ² (³ F)6d	⁴ D _{3/2}	
⁴ P _{1/2}		11233,04	11174,06	51,91	+	22,76	5f ² (³ F)6d	² P _{1/2}	
⁴ P _{3/2}		12128,25	11801,63	49,49	+	19,12	5f ² (¹ G)6d	² F _{7/2}	
⁴ P _{5/2}		13494,10	13210,62	50,47	+	10,67	5f ² (¹ G)6d	² G _{9/2}	
² H _{11/2}		28620,38	28183,70	1821	+	15,03	5f ² (³ P)6d	⁴ F _{7/2}	
² G _{7/2}		34428,61	34133,67	38,72	+	36,40	5f ² (³ P)6d	⁴ P _{3/2}	
² F _{5/2}		9289,34	9128,05	20,91	+	10,98	5f ² (³ F)6d	² D _{5/2}	
² F _{7/2}		12128,25	11964,36	34,10	+	20,85	5f ² (¹ G)6d	² F _{7/2}	
² D _{3/2}		15131,81	14927,98	31,41	+	20,35	5f ² (¹ G)6d	² F _{5/2}	
² D _{5/2}		18788,79	18416,84	19,25	+	19,11	5f ² (³ H)6d	⁴ F _{3/2}	
² P _{1/2}		13745,80	13644,47	30,72	+	29,21	5f ² (³ F)6d	² F _{5/2}	
² P _{3/2}		18969,71	18711,21	37,67	+	13,53	5f ² (³ F)6d	⁴ G _{9/2}	
5f ² (³ P)6d		⁴ D _{1/2}	30497,66	30265,27	43,17	+	25,69	5f ² (³ P)6d	⁴ P _{3/2}
		⁴ D _{3/2}	30471,85	30274,48	60,77	+	20,86	5f ² (¹ D)6d	² K _{15/2}
		⁴ D _{5/2}	29624,23	29418,25	29,70	+	21,63	5f ² (³ H)6d	² I _{11/2}
		⁴ D _{5/2}	31982,28	31675,75	51,43	+	18,27	5f ² (³ P)6d	⁴ D _{1/2}

Tablo 3.19. Devam

Seviye	MCDF	+B+QED	Konfigürasyon Katkıları						
5f ² (³ P)6d	⁴ D _{7/2}	32064,43	31754,24	60,29	+	13,91	5f ² (¹ D)6d	² F _{5/2}	
	⁴ F _{3/2}	26319,11	26164,73	63,92	+	8,38	5f ² (³ F)6d	² H _{9/2}	
	⁴ F _{5/2}	27486,88	27290,63	64,67	+	7,58	5f ² (¹ D)6d	² G _{9/2}	
	⁴ F _{7/2}	29519,20	29202,98	61,11	+	11,45	5f ² (¹ G)6d	² F _{7/2}	
	⁴ F _{9/2}	31245,74	30895,71	65,30	+	20,00	5f ² (³ H)6d	² I _{13/2}	
	⁴ P _{1/2}	31327,55	31037,35	34,42	+	31,46	5f ² (³ F)6d	² G _{9/2}	
	⁴ P _{3/2}	29769,80	29592,79	21,52	+	20,86	5f ² (¹ D)6d	² F _{5/2}	
	⁴ P _{5/2}	32946,62	32684,68	68,73	+	9,85	5f ² (³ H)6d	⁴ K _{17/2}	
	² F _{5/2}	45908,07	45642,72	53,62	+	13,69	5f ² (¹ S)6d	² D _{3/2}	
	² F _{7/2}	45963,37	45633,55	60,64	+	17,93	5f ² (³ F)6d	² F _{5/2}	
	² D _{3/2}	45240,58	44966,38	58,30	+	32,04	5f ² (³ F)6d	² G _{7/2}	
	² D _{5/2}	48294,33	47894,77	64,71	+	15,43	5f ² (³ F)6d	² F _{7/2}	
	² P _{1/2}	34935,13	34586,81	38,65	+	27,36	5f ² (¹ D)6d	² G _{7/2}	
	² P _{3/2}	37647,13	37266,40	25,29	+	20,61	5f ² (³ P)6d	² P _{3/2}	
	5f ² (¹ D)6d	² G _{9/2}	19614,58	19228,89	20,26	+	18,82	5f ² (³ H)6d	⁴ F _{7/2}
		² F _{7/2}	35827,78	35343,91	37,24	+	33,90	5f ² (¹ D)6d	² G _{9/2}
		² D _{3/2}	34066,04	33716,32	43,44	+	27,08	5f ² (³ F)6d	⁴ P _{5/2}
		² D _{5/2}	37176,02	36721,39	59,37	+	15,22	5f ² (³ H)6d	² K _{13/2}
		² P _{1/2}	27816,38	27437,13	35,66	+	22,31	5f ² (¹ G)6d	² F _{5/2}
		² P _{3/2}	37549,94	37117,29	30,84	+	27,09	5f ² (³ F)6d	² H _{11/2}
² P _{3/2}		24384,81	24114,99	45,10	+	30,86	5f ² (³ F)6d	⁴ F _{7/2}	
² S _{1/2}		23079,68	22788,20	64,70	+	13,86	5f ² (³ F)6d	² D _{5/2}	
5f ² (¹ G)6d		² I _{11/2}	22690,38	22426,46	35,02	+	27,39	5f ² (³ H)6d	² G _{7/2}
		² I _{13/2}	9812,75	9452,75	33,90	+	28,71	5f ² (³ H)6d	² I _{13/2}
	² H _{9/2}	12752,25	12571,51	44,63	+	13,43	5f ² (¹ D)6d	² K _{15/2}	
	² H _{11/2}	16579,64	16233,61	46,25	+	18,02	5f ² (³ F)6d	⁴ G _{7/2}	
	² F _{5/2}	24831,90	24539,52	40,85	+	17,82	5f ² (³ P)6d	² P _{3/2}	
	² D _{3/2}	25705,16	25284,67	40,39	+	20,44	5f ² (¹ G)6d	² I _{13/2}	
	² D _{5/2}	22995,28	22663,64	54,18	+	19,03	5f ² (¹ D)6d	² I _{11/2}	
	5f ² (¹ I)6d	² L _{15/2}	29994,58	29670,35	95,85	+	2,27	5f ² (³ P)6d	⁴ D _{3/2}
		² L _{17/2}	32229,81	31839,83	99,35	+	0,65	5f ² (³ H)6d	² F _{7/2}
		² K _{13/2}	37091,85	36724,03	50,68	+	33,92	5f ² (³ P)6d	⁴ D _{7/2}
² K _{15/2}		38486,26	38099,13	53,28	+	46,58	5f ² (³ F)6d	² H _{9/2}	
² I _{11/2}		29560,01	29256,49	67,47	+	16,38	5f ² (¹ G)6d	² F _{7/2}	
² I _{13/2}		25180,25	24787,44	44,11	+	35,85	5f ² (³ H)6d	⁴ F _{9/2}	
² I _{13/2}		31048,77	30714,98	42,95	+	25,68	5f ² (³ P)6d	⁴ P _{1/2}	
² H _{9/2}		25913,59	25606,54	25,98	+	25,74	5f ² (³ P)6d	⁴ F _{3/2}	
² H _{9/2}		35001,84	34661,43	31,05	+	25,01	5f ² (³ P)6d	⁴ P _{1/2}	
² H _{11/2}		37353,65	37000,05	46,51	+	33,93	5f ² (³ P)6d	⁴ P _{5/2}	
² H _{11/2}	27876,60	27472,76	43,20	+	24,12	5f ² (¹ D)6d	² S _{1/2}		
² G _{9/2}	43476,78	43115,15	76,01	+	8,03	5f ² (³ H)6d	² K _{15/2}		
² G _{7/2}	44243,59	43873,86	91,84	+	3,69	5f ² (³ F)6d	² G _{9/2}		
5f ² (¹ S)6d	² D _{3/2}	60956,78	60604,82	63,13	+	29,44	5f ² (³ P)6d	² D _{5/2}	
	² D _{5/2}	60653,80	60323,72	80,09	+	12,09	5f ² (¹ S)6d	² D _{5/2}	

3.8. Pa IV için Enerji ve Işımalı Geçiş Parametreleri

Varga ve çalışma arkadaşları [68] aktinitlerin kristal alan ve serbest iyon spektrumu tahmin ve yorumunu yaptılar. Axe [69] protaktinyumun oktahedral olarak birleşmiş Pa IV halinin elektronik yapısını inceledi. Young ve çalışma arkadaşları [70] sıvı LiF-BeF₂-ThF₄'teki Pa IV'ün f-d ve f-f geçişlerinin spektrumunu incelediler. Pa IV'ü içeren diğer çalışmalar için çalışmalar [34, 36, 41, 48, 49, 50]'de de mevcuttur.

3.8.1 Enerji seviyeleri hesapları

[Ra] kapalı özü dışında iki elektronu bulunan Pa IV'ün taban hal konfigürasyonu $5f^2$ 'dir. Mevcut kaynaklarda yalnızca taban hal konfigürasyonuna ait seviyeler için karşılaştırma değeri bulunabilmiştir. MCHF ve MCDF yöntemlerinin her ikisiyle 6d, 7s, 7p, 8s, 5g, 7d, 8p, 9s ve 9p yörüngelerini dikkate alan konfigürasyon takımlarıyla çalışmalar yapıldı ve mevcut karşılaştırma değerleriyle en uyumlu takım Tablo 3.20'de verilmektedir. Bu verilen konfigürasyon takımlarıyla MCHF yönteminde 381 MCDF yönteminde elli iki seviye incelenmiştir. Elde edilen enerji seviyeleri Tablo 3.21'de verilmektedir.

MCDF yöntemiyle elde edilen enerji seviyeleri düşük seviyelerde karşılaştırma değerleriyle uyumludur. Bu uyum yüksek seviyelere gidildiğinde bozulmaktadır. Ancak $6d^2 \ ^3F_2$ seviyesi için elde edilen değeri, $45804,80 \text{ cm}^{-1}$ Brewer'in [50] termodinamik ve spektroskopik verileri birleştirerek elde ettiği 45000 cm^{-1} sonucuyla uyumlu olduğu görülmektedir. MCHF yöntemiyle elde edilen sonuçların çoğu ise karşılaştırma değerlerinden uzaktır. Yalnızca $5f^2 \ ^1G_4$ ve $5f6d \ ^3H^0_4$ seviyeleri için MCDF yönteminden daha iyi sonuç vermiştir.

Tablo 3.20. Pa IV hesapları için kullanılan konfigürasyon takımları

Yöntem	Çift Parite	Tek Parite
MCHF	$5f^2, 5f7p, 6d^2, 6d7s, 7s^2, 7p^2, 5g6d, 5g7s, 6d7d, 7s7d, 6d8s, 7s8s, 5f8p, 5g^2, 5g7d, 7p8p, 7d^2, 5g8s, 8s7d, 8s^2, 8p^2, 6d9s, 7s9s, 5g9s, 7d9s, 8s9s, 5f9p, 7p9p, 8p9p, 9s^2, 9p^2$	$5f6d, 5f7s, 7s7p, 7s8p, 7s9p, 5f6d, 6d7p, 5f7d, 6d8p, 6d9p, 5f5g, 5f8s, 7p7d, 5g7p, 7p8s, 8s8p, 8s9p$
MCDF	$5f^2, 6d^2, 7s^2, 7p^2$	$5f6d, 5f7s$

3.8.2. Işımalı geçiş parametreleri hesapları

İncelenen seviyeler arasında MCHF yöntemiyle 1640 E1, 38520 E2 ve 20386 M1 geçişleri, MCDF yöntemiyle 279 E1, 419 E2 ve 258 M1 geçişleri elde edilmiştir. E1 geçişlerinin $A > 10^7 \text{ sn}^{-1}$, E2 ve M1 geçişlerinin ise $A > 10 \text{ sn}^{-1}$ olanları sırasıyla Tablo 3.22 ve 23'te verilmektedir. Mevcut kaynaklarda Pa IV'ün E1, E2 ve M1 geçişlerine ait herhangi bir ışınım parametresi için karşılaştırma değeri bulunamamıştır.

Tablo 3.21. Pa IV'ün uyarılmış seviyelerinin enerjileri (cm⁻¹)

Seviye	MCHF		MCDF		Diğer Ç.	Konfigürasyon Katkıları		
	MCHF	MCHF+BP	MCDF	+B+QED				
5f ²	³ H ₄	0,00	0,00	0,00	0,00 ^{a, b}	91,68 + 7,75 5f ² ¹ G ₄		
	³ H ₅		6210,85	3976,11	4195 ^a	100,00		
	³ H ₆		11683,03	7776,79	7356,17	7907 ^a	98,83 + 1,17 5f ² ¹ I ₆	
	³ F ₂	3633,71	4875,80	4430,64	4383,27	2878 ^a	91,33 + 6,17 5f ² ¹ D ₂	
	³ F ₃		9688,50	7440,63	7044,51	6097 ^a	61,10 + 35,71 5f6d ¹ G ₄	
	³ F ₄		16817,49	12138,99	11679,54	6573 ^a	55,92 + 40,75 5f ² ¹ G ₄	
	³ P ₀	17970,09	21092,47	18534,09	18405,52	11512 ^a	87,57 + 7,57 6d ² ³ P ₀	
	³ P ₁		24174,54	20245,51	20005,30	13124 ^a	92,85 + 7,15 6d ² ³ P ₁	
	³ P ₂		26148,89; 29455,00	23091,13	22661,78	16516 ^a	73,50 + 19,73 5f ² ¹ D ₂	
	¹ I ₆	18349,65	25963,03	22529,54	22236,35	15558 ^a	98,83 + 1,17 5f ² ³ H ₆	
	¹ G ₄	4195,97	9097,50	7245,36	7025,25	11513 ^a	49,91 + 42,02 5f ² ³ F ₄	
	¹ D ₂	13357,42	19133,57	16434,91	16200,52	11267 ^a	68,78 + 19,65 5f ² ³ P ₂	
	¹ S ₀	38733,27	46920,70	39583,57	39137,51	30274 ^a	74,34 + 19,71 6d ² ¹ S ₀	
	5f6d	³ H ^o ₄		20478,05	7287,73	7066,02	20000 ^b	98,16 + 1,84 6d ² ³ F ₃
		³ H ^o ₅		28130,62	13543,72	12975,39	-	99,88 + 0,08 5f6d ¹ H ₅
		³ H ^o ₆		35064,62	18853,04	18091,03	-	100,00
		³ G ^o ₃		23476,15	15626,13	15219,75	-	87,27 + 7,21 5f6d ¹ F ₃
		³ G ^o ₄		29826,11	19841,54	19253,78	-	94,65 + 3,34 5f6d ³ F ₄
		³ G ^o ₅		34493,39	23647,35	22937,30	-	97,84 + 2,13 5f6d ¹ H ₅
³ F ^o ₂			20905,74	9175,74	8780,830	-	82,82 + 15,19 5f6d ¹ D ₂	
³ F ^o ₃			26269,11	12846,95	12305,50	-	92,61 + 3,33 5f6d ³ G ₃	
³ F ^o ₄			32831,73	17436,79	16701,51	-	77,45 + 14,61 5f6d ¹ G ₄	
³ D ^o ₁			28925,64	20509,42	20072,95	-	92,25 + 5,20 5f6d ¹ P ₁	
³ D ^o ₂			34523,12	23358,29	22757,72	-	88,91 + 6,50 5f6d ¹ D ₂	
³ D ^o ₃			32970,04	26986,97	26318,50	-	41,25 + 23,42 5f7s ¹ F ₃	
			39644,98					
³ P ^o ₀			35707,97	25534,70	25023,94	-	100,00	
³ P ^o ₁			35120,37	25402,78	24899,76	-	90,20 + 5,28 5f6d ¹ P ₁	
³ P ^o ₂			40722,55	28367,26	27681,41	-	87,90 + 8,20 5f6d ¹ D ₂	
¹ H ^o ₅			43339,41	36091,02	35461,21	-	97,79 + 2,11 5f6d ³ G ₅	
¹ G ^o ₄			25400,07	11673,04	11117,78	-	47,77 + 37,70 5f6d ³ H ₄	
¹ F ^o ₃			-	22744,27	22172,32	-	41,16 + 45,40 5f6d ³ D ₃	
¹ D ^o ₂			29588,93	17961,14	17391,01	-	70,10 + 14,82 5f6d ³ F ₂	
¹ P ^o ₁		47545,66	38287,21	37591,48	-	89,52 + 7,24 5f6d ³ P ₁		

Tablo 3.21. Devam

Seviye	MCHF		MCDF		Diğer Ç.	Konfigürasyon Katkıları
	MCHF	MCHF+BP	MCDF	+B+QED		
5f7s	$^3F^o_2$	146531,94	27402,63	26870,36	37000 ^b	96,11 + 2,15 5f6d 3P_2
	$^3F^o_3$	148527,53	28997,60	28370,54	–	59,59 + 23,44 5f6d 1F_3
	$^3F^o_4$	155914,66	33116,17	32345,87	–	98,01 + 1,95 5f6d 3F_4
	$^1F^o_3$	155548,27	34980,36	34227,13	–	67,28 + 20,69 5f7s 3F_3
6d ²	3F_2	158004,72	153166,98	45804,80	45000 ^b	91,49 + 5,82 6d ² 1D_2
	3F_3		162528,19	50175,60	–	98,16 + 1,84 5f ² 3F_3
	3F_4		169093,12	54196,13	–	91,26 + 7,15 6d ² 1G_4
	3P_0	168508,05	167367,06	58501,64	–	89,06 + 6,41 5f ² 3P_0
	3P_1		172978,89	60300,62	–	92,75 + 7,14 5f ² 3P_1
	3P_2		183490,45	65006,28	–	58,77 + 34,10 6d ² 1D_2
	1G_4	171596,11	180753,38	63193,27	–	91,25 + 7,16 6d ² 3F_4
	1D_2	165944,72	169605,59	58410,11	–	54,67 + 34,26 6d ² 3P_2
	1S_0	196224,91	207514,97	82911,85	–	54,38 + 28,35 7s ² 1S_0
7s ²	1S_0	177263,22	187788,34	99645,54	–	67,89 + 22,51 6d ² 1S_0
7p ²	3P_0	298547,62	58429,35	179654,75	–	87,70 + 10,50 7p ² 1S_0
	3P_1		203888,03	188715,02	–	99,89 + 0,11 6d ² 3P_1
	3P_2		365082,19; 979055,62	192406,73	–	56,20 + 43,68 7p ² 1D_2
	1D_2	305466,12	208002,92	206415,51	–	56,19 + 43,72 7p ² 3P_2
	1S_0	321585,88	377531,81; 992598,62	219800,68	–	85,02 + 11,79 7p ² 3P_0

^a Energy levels and atomic spectra of actinides [106],^b Brewer [50]

Tablo 3.22. Pa IV'ün E1 geçişlerine ait λ dalga boyları (Å), gf ağırlıklı salıncı şiddetleri ve A geçiş olasılıkları (sn^{-1})

Geçiş	λ		gf		A	
	MCHF	MCDF	MCHF	MCDF	MCHF	MCDF
5f ² ³ F ₃ - 5f6d ³ F ₃ ^o	6185,57	2165,91	1,27(-1)	6,34(-2)	3,18(6)	1,00(7)
5f ² ³ F ₃ - 5f6d ³ G ₃ ^o	7540,62	1812,19	4,60(-4)	1,34(-1)	7,72(3)	3,02(7)
5f ² ³ H ₆ - 5f6d ³ G ₅ ^o	4441,14	6418,01	7,84(-1)	7,31(-1)	2,41(7)	1,07(7)
5f6d ³ F ₂ ^o - 6d ² ³ F ₂	6497,91	2758,31	8,50(-2)	3,13(-1)	2,68(6)	5,49(7)
5f6d ¹ G ₄ ^o - 6d ² ³ F ₄	693,69	2375,48	7,15(-1)	1,62(-1)	1,10(9)	2,12(7)
5f6d ¹ G ₄ ^o - 6d ² ¹ G ₄	641,78	1956,62	3,90(-2)	1,40(-1)	7,03(7)	2,72(7)
5f6d ³ F ₃ ^o - 6d ² ³ F ₂	785,47	3055,36	4,46(-3)	1,21(-1)	9,64(6)	1,73(7)
5f6d ³ F ₃ ^o - 6d ² ³ F ₃	731,67	2704,84	9,40(-1)	3,14(-1)	1,67(9)	4,09(7)
5f6d ³ G ₃ ^o - 6d ² ³ F ₂	767,95	3354,00	1,53	6,46(-1)	3,47(9)	7,67(7)
5f6d ³ G ₃ ^o - 6d ² ³ F ₃	716,44	2936,30	1,40(-2)	1,42(-1)	2,60(7)	1,57(7)
5f6d ³ F ₄ ^o - 6d ² ³ F ₃	768,93	3069,87	4,82(-3)	1,39(-1)	7,77(6)	1,40(7)
5f6d ³ F ₄ ^o - 6d ² ³ F ₄	731,98	2738,75	9,85(-1)	2,72(-1)	1,36(9)	2,69(7)
5f6d ³ F ₄ ^o - 6d ² ¹ G ₄	674,42	2196,61	3,09(-1)	1,75(-1)	5,04(8)	2,68(7)
6d ² ¹ D ₂ - 5f6d ¹ D ₂ ^o	712,90	2489,76	4,49(-1)	4,77(-1)	1,17(9)	1,02(8)
6d ² ³ P ₂ - 5f6d ¹ D ₂ ^o	648,69	2145,63	2,91(-3)	4,02(-2)	9,25(6)	1,16(7)
5f6d ³ G ₄ ^o - 6d ² ³ F ₃	750,82	3330,84	1,74	8,87(-1)	2,95(9)	7,62(7)
5f6d ³ G ₄ ^o - 6d ² ³ F ₄	715,55	2944,58	3,49(-2)	1,21(-1)	5,06(7)	1,04(7)
5f6d ³ D ₁ ^o - 6d ² ³ P ₀	720,61	2654,93	4,11(-1)	2,46(-1)	5,28(9)	2,33(8)
5f6d ³ D ₁ ^o - 6d ² ³ P ₁	692,60	2539,89	1,47(-1)	1,06(-1)	6,81(8)	3,66(7)
5f6d ³ D ₁ ^o - 7p ² ³ P ₀	3351,89	629,96	5,84(-6)	2,66(-3)	3,46(3)	4,48(7)
5f6d ³ D ₃ ^o - 6d ² ³ F ₃	769,61	2826,21	1,08(-4)	7,67(-1)	1,73(5)	1,28(8)
5f6d ³ D ₃ ^o - 6d ² ¹ G ₄	674,94	590,98	1,60(-4)	3,95(-3)	2,60(5)	1,51(7)
5f6d ³ D ₂ ^o - 6d ² ³ P ₁	720,22	2725,76	6,82(-1)	4,95(-1)	2,92(9)	1,48(8)
5f6d ³ D ₂ ^o - 6d ² ³ P ₂	669,53	2424,85	4,01(-1)	9,66(-2)	1,19(9)	2,19(7)
5f6d ³ D ₂ ^o - 7p ² ³ P ₁	589,08	606,272	2,11(-3)	2,34(-3)	1,35(7)	1,42(7)
5f6d ³ G ₅ ^o - 6d ² ³ F ₄	741,33	3302,82	5,96(-1)	1,29	8,03(8)	8,78(7)
5f6d ³ P ₁ ^o - 6d ² ¹ D ₂	742,96	3062,25	1,76(-2)	7,94(-2)	4,27(7)	1,13(7)
5f6d ³ P ₁ ^o - 6d ² ³ P ₀	755,53	3045,16	5,82(-2)	6,44(-2)	6,80(8)	4,63(7)
5f6d ³ P ₁ ^o - 6d ² ³ P ₁	724,80	2894,78	2,23(-1)	1,28(-1)	9,44(8)	3,41(7)
5f6d ³ P ₁ ^o - 6d ² ³ P ₂	673,48	2557,70	1,72(-2)	7,60(-2)	5,08(7)	1,54(7)
5f6d ³ P ₁ ^o - 6d ² ¹ S ₀	579,69	1751,09	3,11(-2)	7,31(-3)	6,17(8)	1,59(7)
5f6d ³ P ₁ ^o - 7s ² ¹ S ₀	654,54	1356,25	1,04(-3)	4,64(-3)	1,62(7)	1,68(7)
5f6d ³ P ₁ ^o - 7p ² ³ P ₀	4269,78	649,72	3,46(-5)	1,19(-3)	1,26(4)	1,88(7)
5f6d ³ P ₁ ^o - 7p ² ¹ S ₀	291,95	516,225	1,50(-4)	4,12(-4)	1,17(7)	1,03(7)
5f6d ³ P ₀ ^o - 6d ² ³ P ₁	728,03	2905,22	1,61(-1)	1,17(-1)	6,78(8)	3,08(7)
5f6d ¹ F ₃ ^o - 6d ² ³ P ₂	-	2654,00	-	5,37(-1)	-	1,01(8)
5f6d ³ P ₂ ^o - 6d ² ³ P ₁	755,14	3148,29	7,87(-2)	7,30(-2)	3,07(8)	1,63(7)
5f6d ³ P ₂ ^o - 6d ² ³ P ₂	699,61	2753,61	1,02	4,44(-1)	2,80(9)	7,82(7)
5f7s ³ F ₃ ^o - 6d ² ³ P ₂	634,38	2806,87	8,34(-2)	2,30(-1)	2,76(8)	3,89(7)
5f6d ¹ H ₅ ^o - 6d ² ¹ G ₄	727,45	3736,23	4,16	1,30	5,83(9)	6,92(7)
5f6d ¹ P ₁ ^o - 6d ² ¹ S ₀	625,15	2251,46	5,02(-1)	3,14(-1)	8,57(9)	4,13(8)
5f6d ¹ P ₁ ^o - 7s ² ¹ S ₀	713,09	1638,25	5,76(-2)	1,60(-1)	7,56(8)	3,99(8)
5f6d ¹ P ₁ ^o - 7p ² ³ P ₀	9194,59	708,11	1,21(-3)	4,11(-3)	9,58(4)	5,47(7)
5f6d ¹ P ₁ ^o - 7p ² ¹ S ₀	303,05	552,41	1,26(-4)	1,30(-2)	9,17(6)	2,84(8)

Tablo 3.23. Pa IV'ün E2 ve M1 geçişlerine ait λ dalga boyları (Å), gf ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve A geçiş olasılıkları (sn^{-1})

Geçiş	λ		gf		A		
	MCHF	MCDF	MCHF	MCDF	MCHF	MCDF	
E2 Geçişleri							
$5f^2 \ ^1G_4 - 6d^2 \ ^1G_4$	–	1811,56	–	4,87(-8)	–	1,10(1)	
$5f^2 \ ^1D_2 - 7s^2 \ ^1S_0$	592,93	1213,12	7,48(-10)	3,58(-9)	1,41(1)	1,62(1)	
$5f^2 \ ^1D_2 - 7p^2 \ ^3P_0$	2544,80	614,96	7,51(-9)	7,49(-10)	7,74	1,32(1)	
$5f^2 \ ^1D_2 - 7p^2 \ ^1S_0$	279,02	494,03	3,50(-13)	1,49(-9)	2,99(-2)	4,09(1)	
$5f^2 \ ^1S_0 - 7p^2 \ ^3P_2$	314,31	656,84	2,99(-8)	8,47(-9)	4,03(2)	2,61(1)	
$6d^2 \ ^3F_2 - 7s^2 \ ^1S_0$	445,70	1865,77	3,02(-9)	8,00(-9)	1,01(2)	1,53(1)	
$6d^2 \ ^3F_2 - 7p^2 \ ^3P_0$	1055,55	747,51	6,38(-9)	1,02(-8)	7,64	1,22(2)	
$6d^2 \ ^3F_2 - 7p^2 \ ^3P_1$	1971,57	700,94	5,85(-10)	1,41(-8)	3,34(-1)	6,39(1)	
$6d^2 \ ^3F_2 - 7p^2 \ ^3P_2$	–	683,31	–	1,72(-8)	–	4,91(1)	
$6d^2 \ ^3F_2 - 7p^2 \ ^1D_2$	–	624,33	–	1,37(-8)	–	4,70(1)	
$6d^2 \ ^3F_2 - 7p^2 \ ^1S_0$	445,70	576,10	3,02(-9)	3,04(-8)	1,01(2)	6,11(2)	
$6d^2 \ ^3F_3 - 7p^2 \ ^3P_1$	2417,80	722,41	8,92(-10)	2,09(-8)	3,39(-1)	8,90(1)	
$6d^2 \ ^3F_3 - 7p^2 \ ^3P_2$	493,70	703,70	3,20(-9)	5,72(-9)	1,75(1)	1,54(1)	
$6d^2 \ ^3F_3 - 7p^2 \ ^1D_2$	2199,02	641,31	3,39(-10)	3,98(-9)	9,36(-2)	1,29(1)	
$6d^2 \ ^3F_4 - 7p^2 \ ^3P_2$	510,23	723,76	9,93(-8)	2,89(-8)	5,08(2)	7,36(1)	
$6d^2 \ ^1D_2 - 7s^2 \ ^1S_0$	5499,72	2434,47	4,77(-9)	3,26(-8)	1,05	3,67(1)	
$6d^2 \ ^1D_2 - 7p^2 \ ^3P_0$	899,47	824,70	1,31(-8)	3,46(-9)	2,16(1)	3,39(1)	
$6d^2 \ ^1D_2 - 7p^2 \ ^3P_1$	2916,94	768,37	2,41(-10)	6,72(-9)	6,31(-2)	2,53(1)	
$6d^2 \ ^1D_2 - 7p^2 \ ^3P_2$	–	747,24	–	8,80(-8)	–	2,10(2)	
$6d^2 \ ^1D_2 - 7p^2 \ ^1D_2$	–	677,27	–	2,86(-7)	–	8,33(2)	
$6d^2 \ ^1D_2 - 7p^2 \ ^1S_0$	480,94	620,89	9,07(-9)	1,75(-8)	2,61(2)	3,03(2)	
$6d^2 \ ^3P_0 - 7p^2 \ ^3P_2$	505,78	748,26	1,10(-9)	7,20(-8)	5,78	1,71(2)	
$6d^2 \ ^3P_0 - 7p^2 \ ^1D_2$	2460,88	678,11	1,66(-9)	6,41(-9)	3,66(-1)	1,85(1)	
$6d^2 \ ^3P_1 - 7p^2 \ ^3P_1$	–	779,69	–	1,07(-8)	–	3,93(1)	
$6d^2 \ ^3P_1 - 7p^2 \ ^3P_2$	520,55	757,94	2,12(-7)	2,01(-8)	1,04(3)	4,67(1)	
$6d^2 \ ^3P_1 - 7p^2 \ ^1D_2$	2855,18	686,05	3,62(-10)	2,17(-8)	5,93(-2)	6,15(1)	
$6d^2 \ ^3P_2 - 7p^2 \ ^3P_0$	799,61	870,97	7,46(-8)	2,41(-9)	1,55(2)	2,12(1)	
$6d^2 \ ^3P_2 - 7p^2 \ ^3P_1$	4902,54	808,38	6,08(-11)	5,80(-9)	5,63(-3)	1,97(1)	
$6d^2 \ ^3P_2 - 7p^2 \ ^3P_2$	–	785,03	–	7,64(-8)	–	1,65(2)	
$6d^2 \ ^3P_2 - 7p^2 \ ^1D_2$	–	708,16	–	5,26(-8)	–	1,40(2)	
$6d^2 \ ^3P_2 - 7p^2 \ ^1S_0$	515,35	646,76	2,30(-7)	8,06(-9)	5,79(3)	1,28(2)	
$6d^2 \ ^1S_0 - 7p^2 \ ^3P_2$	634,65	914,29	2,22(-7)	1,45(-8)	7,38(2)	2,32(1)	
$7s^2 \ ^1S_0 - 7p^2 \ ^3P_2$	564,04	1078,18	5,33(-7)	1,57(-6)	2,23(3)	1,81(3)	
$7s^2 \ ^1S_0 - 7p^2 \ ^1D_2$	4946,92	938,31	3,01(-10)	1,42(-7)	1,64(-2)	2,15(2)	
$7p^2 \ ^3P_2 - 7p^2 \ ^1S_0$	7383,89	3671,92	1,88(-8)	4,96(-7)	2,30	2,45(2)	
M1 Geçişleri							
$5f^2 \ ^3P_1 - 5f^2 \ ^1S_0$	4396,34	5226,78	1,46(-7)	7,03(-8)	5,06(1)	1,71(1)	
$6d^2 \ ^3P_1 - 6d^2 \ ^1S_0$	2895,52	4432,16	2,06(-7)	4,71(-8)	1,64(2)	1,60(1)	
$6d^2 \ ^3P_1 - 7s^2 \ ^1S_0$	6752,44	2551,84	4,19(-8)	1,93(-8)	6,13	1,97(1)	
$7s^2 \ ^1S_0 - 7p^2 \ ^3P_1$	6211,30	1122,73	2,35(-8)	2,52(-8)	1,35	4,45(1)	
$7p^2 \ ^3P_0 - 7p^2 \ ^3P_1$	687,48	11249,48	6,43(-6)	5,99(-7)	3,02(4)	1,05(1)	
$7p^2 \ ^3P_1 - 7p^2 \ ^1D_2$	24301,99	5712,17	1,44(-7)	7,19(-7)	3,25(-1)	2,94(1)	
$7p^2 \ ^3P_1 - 7p^2 \ ^1S_0$	575,89	3234,77	3,75(-6)	2,75(-7)	7,55(4)	1,75(2)	
$7p^2 \ ^3P_2 - 7p^2 \ ^1D_2$	–	7232,70	–	9,84(-7)	–	2,51(1)	

3.9. Pa V için Enerji ve Işımalı Geçiş Parametreleri Hesapları

Dört kez iyonlaşmış protaktinyum daha önceki bölümlerde bahsi geçen [37, 41, 52, 56 71] kaynaklarında incelenmiştir. Mevcut kaynaklarda bu çalışma dahilinde incelenmeyen bir kaç seviye ve E1 geçişlerine ait ağırlıklı salıncı şiddetleri vardır.

3.9.1 Enerji seviyeleri hesabı

Pa V'in bu çalışmada incelenen seviyelerine ait bilgi mevcut kaynaklarda bulunmadığı için bu iyon için hesaplama Pa I, II ve IV iyonları için en iyi sonucu veren tabakalar ve 3.14 kesiminde ele alınacak olan Pa V ile benzer yapıya sahip U VI iyonu hesaplamaları dikkate alınarak gerçekleştirildi. MCHF yöntemi için 5f, 6d, 7s, 7p, 8s, 5g, 8p konfigürasyonları MCDF yönteminde 5f, 6d, 7s, 7p ve 8s konfigürasyonlarıyla hesaplama yapıldı. Seçilen konfigürasyon takımlarıyla MCHF yönteminde 12 ve MCDF yönteminde 8 enerji seviyesi elde edilmiştir. Her iki yöntemle elde edilen sonuçlar Tablo 3.24'te yer almaktadır.

3.9.2. Işımalı geçiş parametreleri hesapları

3.13.1 kesiminde belirtilen konfigürasyon takımları kullanılarak yapılan hesaplamada MCHF yöntemiyle 20 E1, 23 E2 ve 7 M1 geçişi ve MCDF yöntemiyle 10 E1, 10 E2 ve 7 M1 geçişi elde edilmiştir. İzinli geçişlere ait veriler Tablo 3.25'te yasaklı geçişlere ait verilerse Tablo 3.26'da sunulmaktadır.

Tablo 3.24. Pa V'in uyarılmış seviye enerjileri (cm^{-1})

Seviye	MCHF		MCDF		Konfigürasyon Katkıları
	MCHF	+BP	MCDF	+B+QED	
5f	$^2F_{5/2}^o$	0,00	0,00	0,00	100,00
	$^2F_{7/2}^o$		7940,16	5185,56	100,00
6d	$^2D_{3/2}$	42743,64	42341,65	39822,91	39456,00
	$^2D_{5/2}$		50155,96	46340,17	45810,91
7s	$^2S_{1/2}$	321601,53	325888,12	70549,78	70032,25
7p	$^2P_{1/2}^o$	371529,97	376013,50	113900,06	114414,25
	$^2P_{3/2}^o$		376093,97	130150,24	130858,16
8s	$^2S_{1/2}$	352391,53	356678,12	191543,50	192366,53
8p	$^2P_{1/2}^o$	385816,62	390327,06	–	–
	$^2P_{3/2}^o$		390367,34	–	–
5g	$^2G_{7/2}$	260117,28	264403,12	–	–
	$^2G_{9/2}$		264404,50	–	–

Tablo 3.25. Pa V'in E1 geçişlerine ait λ dalga boyları (Å), gf ağırlıklı salımcı şiddetleri ve A geçiş olasılıkları (sn^{-1})

Geçiş	λ		gf			A	
	MCHF	MCDF	MCHF	MCDF	Diğer Ç.	MCHF	MCDF
6d $^2D_{3/2}$ - 5f $^2F^o_{5/2}$	2357,09	2534,46	2,23	4,15(-1)	7,08(-2) ^{a1} ; 3,21(-2) ^{a2}	8,64(7)	1,07(8)
6d $^2D_{5/2}$ - 5f $^2F^o_{5/2}$	1990,47	2182,88	1,59(-1)	3,26(-2)	5,49(-3) ^{a1} ; 2,72(-3) ^{a2}	6,83(6)	7,61(6)
6d $^2D_{5/2}$ - 5f $^2F^o_{7/2}$	2364,10	2461,51	3,19	6,20(-1)	7,86(-2) ^{a1} ; 3,90(-2) ^{a2}	8,15(7)	1,13(8)
7p $^2P^o_{1/2}$ - 6d $^2D_{3/2}$	299,77	1343,29	7,18(-2)	9,93(-1)	2,54(-1) ^{a1} ; 1,95(-1) ^{a2}	2,70(9)	1,83(9)
7p $^2P^o_{3/2}$ - 6d $^2D_{3/2}$	299,70	1102,60	1,43(-2)	1,69(-1)	4,44(-2) ^{a1} ; 3,91(-2) ^{a2}	2,69(8)	2,32(8)
7p $^2P^o_{3/2}$ - 6d $^2D_{5/2}$	306,89	1185,68	1,28(-1)	1,66	2,90(-1) ^{a1} ; 2,49(-1) ^{a2}	2,25(9)	1,97(9)
7p $^2P^o_{1/2}$ - 7s $^2S_{1/2}$	1998,33	2279,57	8,13(1)	8,97(-1)	4,47(-1) ^{a1} ; 3,18(-1) ^{a2}	1,03(10)	5,75(8)
7p $^2P^o_{3/2}$ - 7s $^2S_{1/2}$	1995,12	1663,39	1,64(2)	2,31	1,16 ^{a1} ; 8,83(-1) ^{a2}	1,05(10)	1,39(9)
8s $^2S_{1/2}$ - 7p $^2P^o_{1/2}$	5194,31	1287,93	4,89(1)	4,26(-1)	2,13(-1) ^{a1} ; 2,27(-1) ^{a2}	3,53(8)	8,58(8)
8s $^2S_{1/2}$ - 7p $^2P^o_{3/2}$	5172,68	1628,84	9,69(1)	1,33	3,32(-1) ^{a1} ; 3,33(-1) ^{a2}	3,54(8)	1,67(9)
6d $^2D_{5/2}$ - 8p $^2P^o_{3/2}$	294,01	-	4,45(-2)	-	-	8,88(8)	-
6d $^2D_{3/2}$ - 8p $^2P^o_{3/2}$	287,40	-	4,95(-3)	-	-	1,05(8)	-
6d $^2D_{3/2}$ - 8p $^2P^o_{1/2}$	287,44	-	2,44(-2)	-	-	1,04(9)	-
7s $^2S_{1/2}$ - 8p $^2P^o_{3/2}$	1552,90	-	3,79(2)	-	-	5,13(10)	-
7s $^2S_{1/2}$ - 8p $^2P^o_{1/2}$	1553,87	-	1,90(2)	-	-	5,15(10)	-
8s $^2S_{1/2}$ - 8p $^2P^o_{3/2}$	2975,69	-	1,70(2)	-	-	3,27(9)	-
8s $^2S_{1/2}$ - 8p $^2P^o_{1/2}$	2979,26	-	8,46(1)	-	-	3,24(9)	-
5g $^2G_{9/2}$ - 5f $^2F^o_{7/2}$	389,79	-	3,82(-1)	-	-	1,30(9)	-
5g $^2G_{7/2}$ - 5f $^2F^o_{7/2}$	389,79	-	1,09(-2)	-	-	4,66(7)	-
5g $^2G_{7/2}$ - 5f $^2F^o_{5/2}$	378,09	-	2,94(-1)	-	-	1,38(9)	-

^{a1, a2} Migdalek ve Proszkiewicz [37]

Tablo 3.26. Pa V'in E2 ve M1 geçişlerine ait λ dalga boyları (Å), gf ağırlıklı salıncı şiddetleri ve A geçiş olasılıkları (sn^{-1})

Geçiş	λ		gf		A		
	MCHF	MCDF	MCHF	MCDF	MCHF	MCDF	
E2 Geçişleri							
5f $^2F^o_{7/2}$ - 5f $^2F^o_{5/2}$	12594,21	19284,29	7,67(-1)	2,80(-11)	3,38(-4)	6,28(-5)	
7p $^2P^o_{1/2}$ - 5f $^2F^o_{5/2}$	265,95	877,96	1,68(-2)	8,75(-7)	7,09(3)	3,78(3)	
7p $^2P^o_{3/2}$ - 5f $^2F^o_{5/2}$	265,89	768,34	4,79(-3)	2,38(-7)	1,01(3)	6,73(2)	
7p $^2P^o_{3/2}$ - 5f $^2F^o_{7/2}$	271,63	800,22	2,87(-2)	1,48(-6)	5,44(3)	3,86(3)	
6d $^2D_{5/2}$ - 6d $^2D_{3/2}$	12797,03	15735,86	9,31(-10)	5,59(-10)	6,32(-3)	2,51(-3)	
7s $^2S_{1/2}$ - 6d $^2D_{3/2}$	352,68	3270,51	8,28(-8)	1,69(-7)	2,22(3)	5,27(1)	
8s $^2S_{1/2}$ - 6d $^2D_{3/2}$	318,13	657,51	1,98(-6)	4,56(-7)	6,52(4)	3,51(3)	
7s $^2S_{1/2}$ - 6d $^2D_{5/2}$	362,67	4128,59	1,14(-7)	1,40(-7)	2,89(3)	2,75(1)	
8s $^2S_{1/2}$ - 6d $^2D_{5/2}$	326,24	686,18	2,75(-6)	9,76(-7)	8,63(4)	6,91(3)	
7p $^2P^o_{3/2}$ - 7p $^2P^o_{1/2}$	1242493	6153,77	3,58(4)	1,16(-7)	3,38(-9)	5,14	
5f $^2F^o_{5/2}$ - 8p $^2P^o_{3/2}$	256,17	-	1,67(-3)	-	4,26(2)	-	
5f $^2F^o_{5/2}$ - 8p $^2P^o_{1/2}$	256,20	-	5,80(-3)	-	2,94(3)	-	
7p $^2P^o_{3/2}$ - 5f $^2F^o_{7/2}$	271,63	-	2,87(-2)	-	5,44(3)	-	
8p $^2P^o_{3/2}$ - 5f $^2F^o_{7/2}$	261,49	-	1,00(-2)	-	2,30(3)	-	
7p $^2P^o_{3/2}$ - 8p $^2P^o_{1/2}$	7025,89	-	5,30(3)	-	1,73(2)	-	
8p $^2P^o_{3/2}$ - 7p $^2P^o_{1/2}$	6966,77	-	4,97(3)	-	8,48(1)	-	
8p $^2P^o_{1/2}$ - 7p $^2P^o_{3/2}$	7025,89	-	5,30(3)	-	1,73(2)	-	
8p $^2P^o_{1/2}$ - 8p $^2P^o_{3/2}$	2481805	-	1,48(5)	-	4,40(-10)	-	
5g $^2G_{7/2}$ - 5g $^2G_{9/2}$	72208328	-	8,40(-20)	-	1,07(-20)	-	
6d $^2D_{5/2}$ - 5g $^2G_{9/2}$	466,75	-	1,09(-4)	-	3,35(5)	-	
6d $^2D_{3/2}$ - 5g $^2G_{7/2}$	450,33	-	8,79(-5)	-	3,61(5)	-	
6d $^2D_{5/2}$ - 5g $^2G_{7/2}$	466,75	-	8,77(-6)	-	3,35(4)	-	
6d $^2D_{3/2}$ - 6d $^2D_{5/2}$	12797,03	-	9,31(-10)	-	6,32(-3)	-	
M2 Geçişleri							
5f $^2F^o_{7/2}$ - 5f $^2F^o_{5/2}$	12594,21	19284,29	1,10(-6)	7,18(-7)	5,78	1,61	
7p $^2P^o_{3/2}$ - 5f $^2F^o_{5/2}$	-	768,34	-	1,07(-15)	-	3,02(-6)	
6d $^2D_{5/2}$ - 6d $^2D_{3/2}$	12797,03	15735,86	7,58(-7)	6,14(-7)	5,14	2,75	
7s $^2S_{1/2}$ - 6d $^2D_{3/2}$	-	3270,51	-	7,64(-16)	-	2,38(-7)	
8s $^2S_{1/2}$ - 6d $^2D_{3/2}$	-	657,51	-	2,28(-15)	-	1,76(-5)	
8s $^2S_{1/2}$ - 7s $^2S_{1/2}$	-	822,96	-	1,40(-13)	-	6,93(-4)	
7p $^2P^o_{3/2}$ - 7p $^2P^o_{1/2}$	1242493	6153,77	4,33(-9)	8,34(-7)	4,68(-6)	3,67(1)	
7p $^2P^o_{3/2}$ - 8p $^2P^o_{1/2}$	7025,89	-	1,21(-11)	-	8,22(-4)	-	
7p $^2P^o_{1/2}$ - 8p $^2P^o_{3/2}$	6966,77	-	1,22(-11)	-	4,21(-4)	-	
8p $^2P^o_{1/2}$ - 8p $^2P^o_{3/2}$	2481805	-	2,17(-9)	-	5,88(-7)	-	
5g $^2G_{7/2}$ - 5g $^2G_{9/2}$	72208328	-	2,48(-10)	-	3,18(-11)	-	

3.10. U V için Enerji ve Işımalı Geçiş Parametreleri Hesapları

U V iyonunun 2000-8 μ , DClO_4 çözeltisindeki uranyum iyonlarının 0,2-2,6 μ , UCl_4 kristalinin 4000-25000 Å aralığı, paramanyetik rezonans, oktahedral koordinatlardaki ve Cs ve UV hekzafloridin soğurma spektrumu, 1,8-5,5 μ bölgesindeki yayma spektrumu deneysel olarak incelendi [72-74, 76, 78, 81, 86, 90]. Bazı tuzların $5f \rightarrow 6f$ geçişlerinin elektron transferi, U V tuz komplekslerinin kovalent etkileri, oktahedral kristal alandaki enerji seviyeleri, lazer ışığı ve etanol sülfürik asitteki foton uyarılmaları, D_{2d} kristal alanındaki iyon hesaplamaları, $5f^2$ 'deki spine bağlı etkiler, 1S_0 seviyesi ve $5f^2$ konfigürasyonunun paramanyetik analizi, enerji seviyelerinin

Chebyshev-serileri lantanit ve aktinit atomlarının analizi için bir paramanyetik model üretimi için de teorik çalışmalar gerçekleştirildi [75, 77, 79, 80, 82-84, 87-89, 90-92]. Ayrıca U V'in iyonlaşma potansiyeli termokimyasal süreçle hesaplandı [85]. $5f^2$ öz uyarılmaları katlı küme, f-f spektrumları konfigürasyon etkileşimli çok konfigürasyonlu Hartree-Fock ve Dirac-Fock yöntemiyle çeşitli konfigürasyon takımlarına göre gerçekleştirildi [93, 94].

3.10.1 Enerji seviyeleri hesapları

Tablo 3.27'de verilen konfigürasyon takımlarıyla MCHF yönteminde 374 ve MCDF yönteminde 52 seviye elde edilmiştir. Elde edilen seviyelere ait enerji değerleri Tablo 3.28'de mevcut kaynaklardaki deneysel ve hesaplanan değerlerle karşılaştırılmaktadır.

Genel olarak, hem MCHF hem de MCDF yöntemiyle hesaplanan enerji seviyeleri karşılaştırma değerleriyle uyumludur. MCHF yöntemi sonuçları $5f^2$ enerji seviyeleri karşılaştırma değerlerine MCDF yöntemi sonuçlarına göre daha uzaktır. Ancak $5f6d$ seviyelerinde deneysel sonuçlarla çok iyi uyum gösterdiği değerler vardır. Örneğin $5f6d \ ^3H_4$ $|\Delta E|=E_{MCDF}-E_{[86]}=277 \text{ cm}^{-1}$ 'dir. Bu seviye için ikinci mevcut kaynaklardaki tek hesaplama temel kuantum mekaniksel yöntemler kullanılarak yapılmıştır. Bu değerle hesaplanan arasındaki fark $|\Delta E|=204 \text{ cm}^{-1}$ 'dir. $5f6d \ ^3G_{3,4}$, $^3F_{2,3}$, 3D_1 seviyeleri de hem deney hem de temel kuantum mekaniksel yöntemlerle yapılan hesapla çok uyumludur. MCDF yöntemi sonuçları MCHF yöntemi sonuçlarına göre diğer çalışmalarla daha uyumludur. $5f^2$, $5f6d$, $5f7s$, $6d^2$ yüksek seviyelerine doğru azalmakla birlikte yüksek seviyelerde oldukça iyi yakınsama söz konusudur.

Tablo 3.27. U V'e ait hesaplamalarda için kullanılan konfigürasyon takımları

Yöntem	Çift Parite	Tek Parite
MCHF	$5f^2, 5g^2, 6d^2, 7s^2, 7p^2, 7d^2, 8s^2, 8p^2, 9s^2, 5f7p, 5f8p, 5f9p, 5g6d, 5g7s, 5g7d, 5g8s, 5g9s, 6d8s, 6d7s, 6d8s, 6d7d, 7s8s, 7s9s, 7p8p, 7p9p, 7d8s, 7d9s, 8p9p$	$5f5g, 5f6d, 5f7s, 5f7d, 5f8s, 5g7p, 6d7p, 6d8p, 6d9p, 7s7p, 7s8p, 7s9p, 7p7d, 7p8s, 8s8p, 8s9p$
MCDF	$5f^2, 6d^2, 7s^2, 7p^2$	$5f6d, 5f7s$

Tablo 3.28. U V'in uyarılmış seviyelerinin enerjileri (cm⁻¹)

Seviye	MCHF		MCDF		Diğer Çalışmalar	Kofgürasyon Katkıları	
	MCHF	+BP	MCDF	+B+QED			
5f ²	³ H ₄	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00 ^{a, b, c} ; 24 ^{a2} ; 6,9 ^d	91,10 + 8,35 5f ² ¹ G ₄ 100,00
		³ H ₅	7801,64	5539,99	5258,02	6136,88 ^{a1} ; 6140 ^{a2} ; 6029 ^b ; 6145,0 ^c ; 6128,3 ^d ; 5998 ^f ; 5576 ^g	
	³ H ₆		14618,09	10709,35	10192,59	11513,58 ^{a1} ; 11479 ^{a2} ; 11354 ^b ; 11508,1 ^c ; 11516,6 ^d ; 11382 ^f ; 10538 ^g	98,09 + 1,91 5f ² ¹ I ₆
	³ F ₂	4221,93	6156,12	5976,90	5943,54	4160,65 ^{a1} ; 4153 ^{a2} ; 4090 ^b ; 4156,7 ^c ; 4158,1 ^d ; 4111 ^f ; 3975 ^g	92,33 + 7,23 5f ² ¹ D ₂
	³ F ₃		12023,46	9928,31	9668,35	8983,53 ^{a1} ; 8995 ^{a2} ; 8848 ^b ; 8986,3 ^c ; 8986,5 ^d ; 8801 ^f ; 8243 ^g	99,82 + 0,18 6d ² ³ F ₃
	³ F ₄		20936,00	16541,82	15983,06	9433,76 ^{a1} ; 9451 ^{a2} ; 9399 ^b ; 9436,8 ^c ; 9428,3 ^d ; 9474 ^f ; 8569 ^g	56,63 + 41,31 5f ² ¹ G ₄
	³ P ₀	20549,46	24616,68	24124,97	24038,15	17128,16 ^{a1} ; 17107 ^{a2} ; 17460 ^b ; 17128,2 ^c ; 17129,1 ^d ; 17249 ^f ; 16741 ^g	94,98 + 4,20 5f ² ¹ S ₀
	³ P ₁		28361,85	26288,51	26053,70	19818,58 ^{a1} ; 19817 ^{a2} ; 20016 ^b ; 19819,0 ^c ; 19817,9 ^d ; 19785 ^f ; 19143 ^g	99,32 + 0,68 6d ² ³ P ₁
	³ P ₂		34213,14	30161,58	29670,94	24652,91 ^{a1} ; 24700 ^{a2} ; 24648 ^b ; 24651,4 ^c ; 24652,4 ^d ; 24658 ^f ; 23343 ^g	75,94 + 22,62 5f ² ¹ D ₂
	¹ I ₆	20696,23	30348,92	26803,60	26430,18	22276,05 ^{a1} ; 22281 ^{a2} ; 22319 ^b ; 22276,4 ^c ; 22275,8 ^d ; 23433 ^f ; 22076 ^g	98,09 + 1,91 5f ² ³ H ₆
	¹ G ₄	5107,64	11783,81	9807,47	9544,31	16655,73 ^{a1} ; 16640 ^{a2} ; 16544 ^b ; 16653,8 ^c ; 16659 ^d ; 16634 ^f ; 15095 ^g	50,12 + 42,66 5f ² ³ F ₄
	¹ D ₂	15545,38	23330,40	21509,87	21268,57	16465,30 ^{a1} ; 16438 ^{a2} ; 16407 ^b ; 16467,1 ^c ; 16456,2 ^d ; 16601 ^f ; 15616 ^g	69,59 + 23,20 5f ² ³ P ₂
	¹ S ₀	45445,48	56966,13	54131,71	53745,18	43613,58 ^a ; 46059 ^b ; 45153,6 ^c ; 43613,5 ^d ; 46230 ^f ; 43488 ^g	93,12 + 4,33 5f ² ³ P ₀
5f6d	³ H ₄ ^o	62499,50	59460,55	48757,79	48274,75	59183,36 ^{a1} ; 59256 ^{a2}	61,96 + 34,56 5f6d ¹ G ₄ ^o
	³ H ₅ ^o		69860,95	57052,64	56350,50	67606,40 ^{a1} ; 67609 ^{a2}	99,78 + 0,18 5f6d ³ G ₅ ^o
	³ H ₆ ^o		79090,79	64291,99	63349,41	75272,66 ^{a1} ; 75228 ^{a2}	100,00
	³ G ₃ ^o	63143,68	62282,43	54832,85	54276,45	63052,78 ^{a1} ; 63047 ^{a2}	45,77 + 45,34 5f6d ³ F ₃ ^o
	³ G ₄ ^o		70527,82	61035,02	60273,92	69700,18 ^{a1} ; 69720 ^{a2}	67,46 + 26,53 5f6d ³ F ₄ ^o
	³ G ₅ ^o		76823,62	66794,74	65930,85	75008,57 ^{a1} ; 74996 ^{a2}	95,55 + 4,32 5f6d ¹ H ₅ ^o
	³ F ₂ ^o	60209,46	59824,92	50245,14	49770,57	59639,66 ^{a1} ; 59582 ^{a2}	78,90 + 19,20 5f6d ¹ D ₂ ^o
	³ F ₃ ^o		67625,34	56653,82	56047,63	67032,57 ^{a1} ; 67055 ^{a2}	53,28 + 43,30 5f6d ³ G ₃ ^o
	³ F ₄ ^o		76165,95	62749,23	61877,82	73844,70 ^{a1} ; 73853 ^{a2}	52,70 + 32,25 5f6d ³ G ₄ ^o
	³ D ₁ ^o		69350,11	61965,88	61446,49	68053,98 ^{a1} ; 68035 ^{a2}	87,66 + 7,97 5f6d ¹ P ₁ ^o

Tablo 3.28. Devam

Seviye	MCHF		MCDF		Diğer Çalışmalar	Kofgürasyon Katkıları	
	MCHF	+BP	MCDF	+B+QED			
5f6d	$^3D^o_2$		76293,12	66125,03	65380,63	72689,11 ^{a1} ; 72715 ^{a2}	82,57 + 8,58 5f6d $^1D^o_2$
	$^3D^o_3$	67257,82	74323,11; 83702,79	65343,31	64641,87	72773,13 ^{a1} ; 72741 ^{a2}	51,63 + 39,72 5f6d $^1F^o_3$
	$^3P^o_0$	72392,69	79129,46	69278,37	68647,78	75207,79 ^{a1} ; 75183 ^{a2}	100,00
	$^3P^o_1$		78132,25	68816,23	68198,19	74740,33 ^{a1} ; 74754 ^{a2}	85,21 + 8,08 5f6d $^3D^o_1$
	$^3P^o_2$		84968,75	73018,23	72154,54	79219,37 ^{a1} ; 79235 ^{a2}	84,19 + 12,15 5f6d $^1D^o_2$
	$^1H^o_5$	76710,53	86991,23	79241,24	78450,51	83416,15 ^{a1} ; 83417 ^{a2}	95,64 + 4,28 5f6d $^3G^o_5$
	$^1G^o_4$	57334,23	66582,59	54507,09	53820,82	65538,11 ^{a1} ; 65502 ^{a2}	46,48 + 36,39 5f6d $^3H^o_4$
	$^1F^o_3$	67774,87	–	72517,96	71589,87	80997,23 ^{a1} ; 81011 ^{a2}	47,92 + 47,31 5f6d $^3D^o_3$
	$^1D^o_2$	63442,90	71749,25	61162,59	60471,67	69277,42 ^{a1} ; 69309 ^{a2}	60,04 + 19,69 5f6d $^3F^o_2$
	$^1P^o_1$	79367,59	93060,84	83378,17	82500,27	88914,24 ^{a1} ; 88918 ^{a2}	85,31 + 10,43 5f6d $^3P^o_1$
5f7s	$^3F^o_2$	208591,41	211597,23	85322,76	84661,59	94069,53 ^{a1} ; 94085 ^{a2}	99,50 + 0,47 5f6d $^3F^o_2$
	$^3F^o_3$		212584,33	86075,78	85407,32	94614,33 ^{a1} ; 94598 ^{a2}	68,95 + 29,96 5f7s $^1F^o_3$
	$^3F^o_4$		221831,61	92741,88	91784,06	101611,74 ^{a1} ; 101603 ^{a2}	99,47 + 0,52 5f6d $^3F^o_4$
	$^1F^o_3$	209872,25	222062,64	93989,88	93038,68	102407,49 ^{a1} ; 102416 ^{a2}	68,40 + 30,56 5f7s $^3F^o_3$
6d ²	3F_2	274677,94	267584,56	128885,93	127931,29	137608,14 ^{a1} ; 137667 ^{a2}	89,94 + 9,27 6d ² 1D_2
	3F_3		280270,97	135302,76	134182,60	145207,84 ^{a1} ; 145200 ^{a2}	99,82 + 0,18 5f ² 3F_3
	3F_4		288587,84	140603,06	139394,73	151303,77 ^{a1} ; 151227 ^{a2}	87,86 + 11,96 6d ² 1G_4
	3P_0	286108,25	283360,88	141248,29	140259,85	147608 ^{a2}	92,36 + 6,50 6d ² 1S_0
	3P_1		291713,16	144813,23	143701,63	152859 ^{a2}	99,27 + 0,68 5f ² 3P_1
	3P_2		289233,78	151957,14	150665,18	152992 ^{a2}	56,20 + 40,99 6d ² 1D_2
			305516,62				
	1G_4	289900,81	302123,19	150497,69	149280,66	159721,20 ^{a1} ; 159669 ^{a2}	87,81 + 11,97 6d ² 3F_4
	1D_2	284742,00	–	143028,38	141925,45	163980 ^{a2}	49,12 + 42,59 6d ² 3P_2
	1S_0	314821,31	328809,41	170544,04	169325,60	175883 ^{a2}	87,46 + 6,80 6d ² 3P_0
7s ²	3338183,00	3346964,00	217584,68	216253,37	–	93,59 + 3,14 7p ² 1S_0	
7p ²	3P_0	767717,62	640978,44	316156,81	315134,30	–	84,88 + 13,65 7p ² 1S_0
	3P_1		730443,81	329600,30	328342,28	–	99,95 + 0,05 6d ² 3P_1
7p ²	3P_2		952317,19	333808,56	332540,54	–	51,87 + 48,08 7p ² 1D_2
	1D_2	775906,31	–	352543,35	351027,04	–	51,86 + 48,10 7p ² 3P_2
	1S_0	916149,19	961162,81	366388,66	364893,33	–	83,03 + 14,77 7p ² 3P_0

^{a1, a2} Wyart ve çalışma arkadaşları [86], ^b Eliav ve çalışma arkadaşları [93], ^c Goldschmidt [87], ^d Van Deurzen ve çalışma arkadaşları [88], ^e Seth ve çalışma arkadaşları [94],

^g Seth [94]'te

Örneğin, $6d^2\ ^3P_0$ seviyesinin hesaplanan değeri $141248,29\text{ cm}^{-1}$ iken temel kuantum mekaniksel yöntemlerle hesaplanan değeri 147608 cm^{-1} 'dir. Benzer uyum $6d^2\ ^3P_{0,1,2}$, 1G_4 ve 1S_0 seviyelerinde de mevcuttur. $7s^2$ ve $7p^2$ seviyeleri için mevcut kaynaklarda karşılaştırma değeri bulunamamıştır.

3.10.2. Işımalı geçiş parametreleri hesapları

3.14.1 kısmında bahsi geçen seviyeler arasında MCHF yöntemiyle 15891 E1, 18204 E2 ve 10926 M1 geçişleri ve MCDF yöntemiyle 209 E1, 419 E2 ve 258 M1 geçişleri elde edilmiştir. Sonuçlar Tablo 3.29'da sunulmaktadır. E1 geçişleri için her iki yöntemle elde edilen dalga boyları mevcut kaynaklardaki diğer çalışma sonuçları ile uyumludur. Bir çok geçiş için Wyart ve çalışma arkadaşlarının [86] deneysel sonuçlarıyla karşılaştırma yapıldığında fark $\Delta\lambda\sim 200\text{ \AA}$ kadardır. U V iyonunun diğer ışımaya parametrelerine ait karşılaştırma değerleri bulunamamıştır.

U V E2 ve M1 geçişleri için $A>10\text{ sn}^{-1}$ olanları Tablo 3.30'da verilmektedir. Mevcut kaynaklarla E2 ve M1 geçişlerinin ışımaya parametrelerine ait karşılaştırma değeri bulunamadığı için, enerji seviyeleri diğer çalışmalarla uyumlu olan geçişlere ait verilerin doğru olduğu söylenebilir.

Tablo 3.29. U V'in E1 geçişlerine ait λ dalga boyları (Å), gf ağırlıklı salıncı şiddetleri ve A geçiş olasılıkları (sn^{-1})

Geçiş			λ			gf		A		
			MCHF	MCDF	Diğer Ç.	MCHF	MCDF	MCHF	MCDF	
$5f^2$	3H_4	- $5f6d$	$^3G^o_3$	1605,11	1842,41	1585,976 ^a	9,51(-1)	5,42(-1)	3,52(8)	1,52(8)
$5f^2$	3H_4	- $5f6d$	$^3F^o_3$	1478,33	1784,19	1491,809 ^a	4,79(-2)	5,69(-1)	2,09(7)	1,70(8)
$5f^2$	3H_5	- $5f6d$	$^3F^o_4$	1462,36	1766,16	1476,933 ^a	4,19(-2)	5,37(-1)	1,45(7)	1,27(8)
$5f^2$	3H_6	- $5f6d$	$^3G^o_5$	1809,58	1794,09	1574,928 ^a	6,40(-3)	1,78	1,18(6)	3,36(8)
$5f^2$	3F_2	- $5f6d$	$^3D^o_1$	1581,97	1801,70	1565,110 ^a ;	2,43(-1)	2,73(-1)	2,16(8)	1,86(8)
$5f^2$	3F_3	- $5f6d$	$^3D^o_2$	1555,50	1794,93	1569,723 ^a	2,18(-1)	3,52(-1)	1,20(8)	1,46(8)
$5f^2$	3F_4	- $5f6d$	$^1F^o_3$	-	1798,34	1397,358 ^a	-	7,74(-1)	-	2,28(8)
$5f^2$	1G_4	- $5f6d$	$^3D^o_3$	1598,52	1814,96	-	6,86(-1)	7,69(-1)	2,55(8)	2,22(8)
$5f^2$	1I_6	- $5f6d$	$^1H^o_5$	1764,89	1922,32	1635,593 ^a	1,66	2,03	3,24(8)	3,33(8)
$5f6d$	$^3H^o_2$	- $6d^2$	3F_2	-	1279,41	-	-	3,82(-1)	-	3,11(8)
$5f6d$	$^3G^o_3$	- $6d^2$	3F_2	487,13	1357,68	-	1,81	8,11(-1)	1,02(10)	5,87(8)
$5f6d$	$^3G^o_5$	- $6d^2$	3F_4	472,26	1361,21	-	3,08	2,07	1,02(10)	8,30(8)
$5f6d$	$^3F^o_3$	- $6d^2$	3F_2	500,15	1391,13	-	5,22(-3)	4,19(-1)	2,78(7)	2,89(8)
$5f6d$	$^3F^o_3$	- $6d^2$	3F_3	470,31	1279,83	-	8,26(-1)	5,02(-1)	3,56(9)	2,92(8)
$5f6d$	$^3F^o_4$	- $6d^2$	3F_3	489,99	1383,03	-	5,18(-3)	4,01(-1)	2,05(7)	1,99(8)
$5f6d$	$^3F^o_4$	- $6d^2$	3F_4	470,80	1290,04	-	3,54(-1)	4,19(-1)	1,18(9)	1,86(8)
$5f6d$	$^3F^o_4$	- $6d^2$	1G_4	442,60	1144,12	-	6,66(-1)	2,52(-1)	2,52(9)	1,43(8)
$5f6d$	$^3D^o_1$	- $6d^2$	3P_0	467,31	1268,82	-	4,79(-1)	3,21(-1)	1,46(10)	1,33(9)
$5f6d$	$^3D^o_1$	- $6d^2$	3P_1	449,75	1215,72	-	1,39(-1)	1,16(-1)	1,53(9)	1,74(8)
$5f6d$	$^3D^o_2$	- $6d^2$	3P_1	464,25	1276,79	-	7,91(-1)	6,28(-1)	8,16(9)	8,56(8)
$5f6d$	$^3D^o_3$	- $6d^2$	1D_2	-	1293,93	-	-	1,10	-	8,78(8)
$5f6d$	$^3P^o_0$	- $6d^2$	3P_1	470,44	1332,37	3211,75 ^b	1,78(-1)	1,27(-1)	1,79(9)	1,59(8)
$5f6d$	$^3P^o_1$	- $6d^2$	3P_0	487,31	1387,70	-	4,62(-2)	5,31(-2)	1,29(9)	1,83(8)
$5f6d$	$^3P^o_1$	- $6d^2$	3P_1	468,25	1324,44	-	2,62(-1)	1,63(-1)	2,66(9)	2,07(8)
$5f6d$	$^3P^o_2$	- $6d^2$	3P_2	489,60	1273,71	-	6,02(-2)	5,15(-1)	3,35(8)	4,23(8)
$5f6d$	$^1H^o_5$	- $6d^2$	1G_4	464,87	1411,82	-	3,37	2,310	1,15(10)	8,60(8)
$5f6d$	$^1G^o_4$	- $6d^2$	3F_4	450,48	1168,58	-	5,11(-1)	2,27(-1)	1,86(9)	1,23(8)
$5f6d$	$^1D^o_2$	- $6d^2$	1D_2	-	1227,69	-	-	5,01(-1)	-	4,43(8)
$5f6d$	$^1F^o_3$	- $6d^2$	3P_2	-	1264,61	-	-	1,09	-	9,12(8)
$5f6d$	$^1P^o_1$	- $6d^2$	1S_0	424,21	1151,73	4090,411 ^b	5,76(-1)	4,33(-1)	2,13(10)	2,18(9)
$5f6d$	$^1P^o_1$	- $7s^2$	1S_0	30,59	747,64	-	1,97(-6)	2,06(-2)	1,40(7)	2,46(8)
$5f6d$	$^1P^o_1$	- $7p^2$	1S_0	115,20	354,11	-	3,20(-5)	5,49(-3)	1,61(7)	2,92(8)

^a Wyart ve çalışma arkadaşları [86],

^b Van Deurzen ve çalışma arkadaşları [88]

Tablo 3.30. U V'in E2 ve M1 geçişlerine ait λ dalga boyları (\AA), gf ağırlıklı salıncı şiddetleri ve A geçiş olasılıkları (sn^{-1})

Geçiş	λ		gf		A	
	MCHF	MCDF	MCHF	MCDF	MCHF	MCDF
E2 Geçişleri						
$5f^2 \ ^1D_2 - 7p^2 \ ^3P_0$	161,90	340,29	1,04(-9)	2,77(-9)	2,67(2)	1,60(2)
$5f^2 \ ^1D_2 - 7p^2 \ ^1D_2$	-	303,25	-	1,24(-8)	-	1,80(2)
$5f^2 \ ^1D_2 - 7p^2 \ ^1S_0$	106,63	291,01	5,04(-9)	4,74(-9)	2,95(3)	3,73(2)
$5f^2 \ ^1S_0 - 7p^2 \ ^3P_2$	111,69	358,68	1,10(-7)	2,01(-8)	1,17(4)	2,09(2)
$6d^2 \ ^3F_2 - 7p^2 \ ^3P_0$	267,81	534,17	4,05(-9)	1,06(-8)	3,77(2)	2,48(2)
$6d^2 \ ^3F_2 - 7p^2 \ ^3P_1$	216,05	498,97	2,40(-9)	1,30(-8)	1,14(2)	1,16(2)
$6d^2 \ ^3F_2 - 7p^2 \ ^3P_2$	-	488,73	-	2,31(-8)	-	1,29(2)
$6d^2 \ ^3F_2 - 7p^2 \ ^1D_2$	-	448,23	-	1,92(-8)	-	1,27(2)
$6d^2 \ ^3F_2 - 7p^2 \ ^1S_0$	144,18	422,00	6,90(-9)	2,54(-8)	2,21(3)	9,54(2)
$6d^2 \ ^3F_3 - 7p^2 \ ^3P_1$	222,14	515,04	4,36(-9)	1,81(-8)	1,96(2)	1,52(2)
$6d^2 \ ^3F_4 - 7p^2 \ ^3P_2$	150,66	517,74	8,23(-9)	2,74(-8)	4,83(2)	1,36(2)
$6d^2 \ ^3P_0 - 7p^2 \ ^3P_2$	149,49	520,07	7,46(-9)	1,10(-7)	4,45(2)	5,47(2)
$6d^2 \ ^1D_2 - 7p^2 \ ^3P_1$	-	524,61	-	7,95(-8)	-	3,85(2)
$6d^2 \ ^1D_2 - 7p^2 \ ^3P_2$	-	478,23	-	2,23(-7)	-	1,30(3)
$6d^2 \ ^1D_2 - 7p^2 \ ^1D_2$	-	448,49	-	9,62(-9)	-	3,19(2)
$6d^2 \ ^3P_1 - 7p^2 \ ^3P_2$	151,38	482,33	4,42(-9)	2,06(-8)	2,57(2)	1,18(2)
$6d^2 \ ^3P_2 - 7p^2 \ ^3P_2$	-	549,82	-	8,46(-8)	-	3,73(2)
$6d^2 \ ^3P_2 - 7p^2 \ ^1S_0$	148,83;	466,79	3,02(-8);	8,05(-9)	9,09(3);	2,46(2)
	152,52		3,27(-8)		9,38(3)	
$6d^2 \ ^1S_0 - 7p^2 \ ^3P_2$	160,38	612,68	3,29(-7)	1,52(-7)	1,70(4)	5,41(2)
$7s^2 \ ^1S_0 - 7p^2 \ ^3P_2$	41,76	859,94	3,20(-7)	1,54(-6)	1,22(6)	2,78(3)
$7s^2 \ ^1S_0 - 7p^2 \ ^1D_2$	-	741,98	-	9,12(-8)	-	2,21(2)
$7p^2 \ ^3P_2 - 7p^2 \ ^1S_0$	11305,02	3090,92	1,59(-8)	5,31(-7)	8,30(-1)	3,71(2)
M1 Geçişleri						
$5f^2 \ ^3P_1 - 5f^2 \ ^1S_0$	3495,98	3611,21	1,78(-7)	8,89(-8)	9,74(1)	4,55(1)
$5f6d \ ^3D_2 - 5f6d \ ^1P_1$	5963,84	5841,24	3,15(-7)	1,96(-7)	1,96(1)	1,27(1)
$6d^2 \ ^3P_1 - 6d^2 \ ^1S_0$	2695,69	3902,59	3,55(-7)	1,36(-7)	3,26(2)	5,96(1)
$6d^2 \ ^3P_1 - 7s^2 \ ^1S_0$	149,38	1378,32	2,99(-11)	3,67(-9)	8,96	1,28(1)
$6d^2 \ ^1S_0 - 7p^2 \ ^3P_1$	248,98	628,86	6,85(-10)	2,05(-9)	2,45(1)	1,15(1)
$7s^2 \ ^1S_0 - 7p^2 \ ^3P_1$	248,98	892,14	6,85(-10)	2,26(-8)	2,45(1)	6,33(1)
$7p^2 \ ^3P_0 - 7p^2 \ ^3P_1$	1117,75	7571,18	4,70(-6)	8,58(-7)	8,37(3)	3,32(1)
$7p^2 \ ^3P_1 - 7p^2 \ ^1D_2$	-	4408,24	-	1,02(-6)	-	7,04(1)
$7p^2 \ ^3P_1 - 7p^2 \ ^1S_0$	433,43	2735,89	9,27(-8)	4,07(-7)	3,29(3)	3,63(2)
$7p^2 \ ^3P_2 - 7p^2 \ ^1D_2$	-	5409,35	-	1,33(-6)	-	6,06(1)

3.11. U VI için Enerji ve Işımalı Geçiş Parametreleri Hesapları

Beş kez iyonlaşmış uranyumun iyonlaşma potansiyeli basit küresel kabuk çözümlerine dayanan bir yöntemle, salıncı şiddetleri model potansiyel yöntemle hesaplanmıştır [41, 53, 54]. Ayrıca 800-1930 \AA ve 80-115 nm spektrum aralığı deneysel olarak incelenmiştir [95, 96].

3.11.1 Enerji seviyeleri hesapları

MCHF yöntemiyle U VI'ya ait hesaplamalar için 5f, 6d, 7s, 7p, 8s, 5g ve 8p MCDF yöntemi hesaplamaları için 5f, 6d, 7s, 7p, 8s konfigürasyonları seçilmiştir. Elde edilen veriler Tablo 3.31'de sunulmaktadır. Kapalı öz dışında bir elektronu bulunan U VI iyonu. MCDF sonuçları ise özellikle $5f^2F^o_{7/2}$ ($\Delta E_{[96]}=225 \text{ cm}^{-1}$, $\Delta E_{\text{Deney}}=430,97 \text{ cm}^{-1}$), $7p^2P^o_{1/2}$ ($\Delta E_{[96]}=245 \text{ cm}^{-1}$, $\Delta E_{\text{Deney}}=7951,03 \text{ cm}^{-1}$), $7p^2P^o_{3/2}$ ($\Delta E_{[96]}=30 \text{ cm}^{-1}$, $\Delta E_{\text{Deney}}=8846,81 \text{ cm}^{-1}$) ile uyumludur. Yapılan hesaplamalar Church ve çalışma arkadaşları [96] tarafından verilen deney sonuçlarıyla yüksek enerji seviyeleri için uyumludur. MCHF yöntemiyle elde edilen sonuçlar 5f, 6d, seviyeleri ile uyumlu olmasına rağmen 7p, 8s ve 8p seviyeleri hem MCDF sonuçlarıyla hem de diğer çalışma sonuçlarıyla iyi uyumlu değildir. MCHF yöntemiyle ele alınan 5g yörüngesi için ise bir karşılaştırma değeri mevcut değildir.

3.11.2. Işımalı geçiş parametreleri hesapları

MCHF yöntemiyle incelenen 12 seviye arasında 20 E1, 21 E2 ve 7 M1 geçişi MCDF yöntemiyle incelenen 8 seviye arasında 10 E1, 10 E2 ve yedi M1 geçişi elde edilmiştir. Bu geçişlerin ışımaya parametreleri E1 geçişleri için Tablo 3.32'de ve E2 ve M1 geçiş verileri Tablo 3.33'te sunulmaktadır.

5f-6d geçişi için Biémont ve çalışma arkadaşlarının çalışması [55] arasındaki dalga boyu farkı $\Delta\lambda_{\text{MCHF}}\sim 45 \text{ \AA}$ ve $\Delta\lambda_{\text{MCDF}}\sim 93 \text{ \AA}$ 'dur. 7p-6d geçişlerine ait dalga boyu [55] ile karşılaştırıldığında, MCHF hesabı uyumlu değil iken MCDF hesabı farkı $\Delta\lambda_{\text{MCDF}}\sim 11 \text{ \AA}$ 'dur. 7p-7s geçişleri için MCHF hesabındaki uyum bozulurken $\Delta\lambda_{\text{MCDF}}\sim 25 \text{ \AA}$ 'dur. Diğer geçişlere ait karşılaştırma değeri mevcut değildir. Dalga boylarında elde edilen bu uyum diğer ışımaya parametrelerinde de görülmektedir.

U VI'nın E2 ve M1 geçişlerinde yalnızca $5f^2F^o_{5/2}-5f^2F^o_{7/2}$ geçişlerinin dalga boyu ve geçiş olasılığına ait karşılaştırma değeri mevcuttur. Bu geçiş için $\Delta\lambda_{\text{MCHF}}\sim 2800 \text{ \AA}$, $\Delta\lambda_{\text{MCDF}}\sim 1400 \text{ \AA}$ 'dur. E2 geçişinin geçiş olasılığı MCHF hesabıyla oldukça uyumlu

Tablo 3.31. U VI'nın uyarılmış seviyelerinin enerjileri (cm⁻¹)

Seviye	MCHF		MCDF		Diğer Çalışmalar	Konfigürasyon Katkıları
	MCHF	+BP	MCDF	+B+QED		
5f ² F _{5/2} ^o	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00 ^{a, b, c, d, e}	100,00
5f ² F _{7/2} ^o		9670,42	7177,63	6870,28	7481 ^a ; 7609 ^b ; 7402 ^c ; 7608,6 ^d 7608,6 ^e	100,00
6d ² D _{3/2}	87747,52	87416,47	83991,32	83545,09	90593 ^a ; 91000 ^b ; 85872,3 ^c ; 90999,6 ^d ; 90999,6 ^e	100,00
6d ² D _{5/2}		97255,85	92726,99	92078,95	99841 ^a ; 100510 ^b ; 94531,9 ^c ; 100510,5 ^d ; 100510,5 ^e	100,00
7s ² S _{1/2}	449143,72	454716,28	134062,26	133422,52	141103 ^a ; 141447 ^b ; 125381,6 ^c ; 141447,5 ^d ; 141447,5 ^e	100,00
7p ² P _{1/2} ^o	500523,09	505165,47	185389,17	184775,48	191989 ^a ; 193340 ^b ; 185634,4 ^c ; 193340,2 ^d ; 193340,2 ^e	100,00
7p ² P _{3/2} ^o		506482,25	207038,99	206173,43	211747 ^a ; 215886 ^b ; 207068,8 ^c ; 215885,8 ^d ; 215885,8 ^e	100,00
8s ² S _{1/2}	484027,12	489599,72	286622,29	285611,27	286125,8 ^c ; 298360,0 ^d	100,00
5g ² G _{7/2}	360050,19	365621,16	-	-	-	-
5g ² G _{9/2}		365624,03	-	-	-	-
8p ² P _{1/2} ^o	522282,28	527529,88	-	-	308738,6 ^c	-
8p ² P _{3/2} ^o		527956,00	-	-	318554,9 ^c ; 336128,0 ^d	-

^a Safronova ve çalışma arkadaşları [57],

^b Energy levels and atomic spectra of actinides [106],

^{c, d} Church ve çalışma arkadaşları [96],

^e Kaufman ve Radziemski [95],

Tablo 3.32. U VI'nın E1 geçişlerine ait λ dalga boyları (Å), gf ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve A geçiş olasılıkları (sn^{-1})

Geçiş				λ			gf			A		
				MCHF	MCDF	Diğer Ç.	MCHF	MCDF	Diğer Ç.	MCHF	MCDF	Diğer Ç.
5f	$^2F^o_{5/2}$	-	6d $^2D_{3/2}$	1142,32	1196,95	1098,906 ^{b3} ; 1098,903 ^g	4,48(-1)	7,17(-1)	0,66 ^{b1} ; 0,68 ^{b2} ; 0,18 ^{b3} ; 1,05(-1) ^{c1} ; 4,86(-1) ^{c2} ; 2,75(-1) ^d	5,72(8)	8,35(8)	3,65(9) ^{b3} ; 1,52(9) ^d
5f	$^2F^o_{5/2}$	-	6d $^2D_{5/2}$	1026,90	1086,02	994,921 ^{b3} ; 994,923 ^g	3,56(-2)	5,34(-2)	0,05 ^{b1, b2} ; -1,28 ^{b3} ; 7,69(-3) ^{c1} ; 3,85(-3) ^{c2} ; 2,18(-2) ^d	3,75(7)	5,03(7)	3,51(8) ^{b3} ; 1,47(8) ^d
5f	$^2F^o_{7/2}$	-	6d $^2D_{5/2}$	1140,12	1173,58	1076,404 ^{b3} ; 1076,407 ^g	6,41(-1)	1,03	0,96 ^{b1} ; 0,99 ^{b2} ; 0,02 ^{b3} ; 1,15(-1) ^{c1} ; 5,73(-2) ^{c2} ; 4,26(-1) ^d	5,48(8)	8,37(8)	5,55(9) ^{b3} ; 2,26(9) ^d
7p	$^2P^o_{1/2}$	-	6d $^2D_{3/2}$	239,45	987,84	977,129 ^{b3} ; 977,130 ^g	7,34(-2)	9,46(-1)	0,94 ^{b1} ; 1,10 ^{b2} ; -0,16 ^{b3} ; 2,72(-1) ^{c1} ; 2,08(-1) ^{c2} ; 7,58(-1) ^d	4,26(9)	3,23(9)	4,87(9) ^{b3} ; 5,29(9) ^d
7p	$^2P^o_{3/2}$	-	6d $^2D_{3/2}$	238,70	815,47	800,729 ^{b3} ; 800727 ^g	1,42(-2)	1,60(-1)	0,23 ^{b1} ; 0,18 ^{b2} ; -0,77 ^{b3} ; 4,45(-2) ^{c1} ; 4,05(-22) ^c ; 9,34(-2) ^d	4,16(8)	4,02(8)	1,77(9) ^{b3} ; 9,72(8) ^d
7p	$^2P^o_{1/2}$	-	7s $^2S_{1/2}$	1987,11	1947,30	1927,053 ^{b3} ; 1927,048 ^g	7,77	8,09(-1)	1,71 ^a ; 0,88 ^{b1} ; 0,91 ^{b2} ; 4,45(-1) ^c ; 2,87(-1) ^c ; 6,05(-1) ^d	6,56(9)	7,12(8)	1,03(9) ^{b3} ; 1,09(9) ^d

Tablo 3.32. Devam

Geçiş				λ			gf			A		
				MCHF	MCDF	Diğer Ç.	MCHF	MCDF	Diğer Ç.	MCHF	MCDF	Diğer Ç.
7s	$^2S_{1/2}$	-	7p $^2P^o_{3/2}$	1936,44	1374,55	1343,394 ^{b3} ; 1343,397 ^g	1,77(1)	2,27	2,53 ^{b1} ; 2,47 ^{b2} ; 1,19 ^c ; 8,37(-1) ^c ; 1,14 ^d	7,88(9)	2,00(9)	6,08(9) ^{b3} ; 4,21(9) ^d
8s	$^2S_{1/2}$	-	7p $^2P^o_{1/2}$	6476,27	991,71	952,2 ^f	1,61	4,05(-1)	0,32 ^a ; 2,12(-1) ^c ; 2,35(-1) ^c	1,28(8)	1,37(9)	-
8s	$^2S_{1/2}$	-	7p $^2P^o_{3/2}$	5967,38	1258,84	-	3,18	1,31	0,32 ^a ; 3,42(-1) ^c ; 3,44(-1) ^c	1,49(8)	2,75(9)	-
5f	$^2F_{7/2}$	-	5g $^2G_{9/2}$	280,84	-	-	4,94(-1)	-	-	4,18(9)	-	-
5f	$^2F_{7/2}$	-	5g $^2G_{7/2}$	280,84	-	-	1,41(-2)	-	-	1,49(8)	-	-
5f	$^2F_{5/2}$	-	5g $^2G_{7/2}$	273,41	-	-	3,92(-1)	-	-	4,37(9)	-	-
6d	$^2D_{5/2}$	-	8p $^2P_{3/2}$	232,25	-	848,0 ^f	3,66(-2)	-	-	1,13(9)	-	-
6d	$^2D_{3/2}$	-	8p $^2P_{3/2}$	227,06	-	815,9 ^f	4,16(-3)	-	-	1,34(8)	-	-
6d	$^2D_{3/2}$	-	8p $^2P_{1/2}$	227,28	-	848,0 ^f	1,81(-2)	-	-	1,17(9)	-	-
7s	$^2S_{1/2}$	-	8p $^2P_{3/2}$	1367,71	-	-	5,63(1)	-	-	5,02(10)	-	-
7s	$^2S_{1/2}$	-	8p $^2P_{1/2}$	1375,73	-	-	2,92(1)	-	-	5,15(10)	-	-
8s	$^2S_{1/2}$	-	8p $^2P_{3/2}$	2615,64	-	-	1,54(1)	-	2,13 ^a	3,77(9)	-	-
8s	$^2S_{1/2}$	-	8p $^2P_{1/2}$	2645,12	-	-	7,29	-	2,13 ^a	3,47(9)	-	-

^a Glushkov ve çalışma arkadaşları [53, 54],

^{b1, b2, b3} Biémont ve çalışma arkadaşları [55] (log gf , gA),

^c Migdalek ve Proszkiewicz [56],

^d Safronova ve çalışma arkadaşları [57] (gA),

^e Sen ve Puri [52] (f -değeri),

^f Church ve çalışma arkadaşları [96],

^g Kaufman ve Radziemski [95]

Tablo 3.33. U VI'nın E2 ve M1 geçişlerine ait λ dalga boyları (Å), gf ağırlıklı salıncı şiddetleri ve A geçiş olasılıkları (sn^{-1})

Geçiş	λ			gf		A		
	MCHF	MCDF	Diğer Ç.	MCHF	MCDF	MCHF	MCDF	Diğer Ç.
E2 Geçişleri								
5f $^2F^{\circ}_{5/2}$ - 5f $^2F^{\circ}_{7/2}$	10340,81	14555,43	13143,0 ^a	8,46(-11)	4,33(-11)	6,60(-4)	1,70	1,227(-4) ^a
5f $^2F^{\circ}_{5/2}$ - 7p $^2P^{\circ}_{1/2}$	197,95	541,19	-	1,55(-7)	1,59(-6)	1,32(4)	1,82(4)	-
5f $^2F^{\circ}_{5/2}$ - 7p $^2P^{\circ}_{3/2}$	197,44	485,02	-	4,33(-8)	3,50(-7)	1,85(3)	2,48(3)	-
5f $^2F^{\circ}_{7/2}$ - 7p $^2P^{\circ}_{3/2}$	201,28	501,74	-	2,45(-7)	2,25(-6)	1,01(4)	1,49(4)	-
6d $^2D_{3/2}$ - 6d $^2D_{5/2}$	10163,24	11718,03	-	1,34(-9)	9,60(-10)	1,45(-2)	7,77	-
6d $^2D_{3/2}$ - 7s $^2S_{1/2}$	272,26	2004,91	-	2,66(-7)	4,99(-7)	1,19(4)	4,14(2)	-
6d $^2D_{3/2}$ - 8s $^2S_{1/2}$	248,64	494,88	-	3,62(-6)	4,26(-7)	1,95(5)	5,80(3)	-
6d $^2D_{5/2}$ - 7s $^2S_{1/2}$	279,75	2418,75	-	3,68(-7)	4,78(-7)	1,57(4)	2,72(2)	-
8s $^2S_{1/2}$ - 6d $^2D_{5/2}$	254,88	516,70	-	5,05(-6)	1,00(-6)	2,59(5)	1,25(4)	-
7p $^2P^{\circ}_{1/2}$ - 7p $^2P^{\circ}_{3/2}$	75941,77	4673,34	-	6,11(-9)	1,82(-7)	1,76(-3)	1,39(1)	-
5g $^2G_{7/2}$ - 5g $^2G_{9/2}$	34596404,80	-	-	3,68(-19)	-	2,05(-19)	-	-
6d $^2D_{5/2}$ - 5g $^2G_{9/2}$	372,62	-	-	1,88(-4)	-	9,07(5)	-	-
6d $^2D_{5/2}$ - 5g $^2G_{7/2}$	372,63	-	-	1,51(-5)	-	9,07(4)	-	-
6d $^2D_{3/2}$ - 5g $^2G_{7/2}$	359,45	-	-	1,51(-4)	-	9,77(5)	-	-
6d $^2D_{5/2}$ - 5g $^2G_{9/2}$	372,62	-	-	1,88(-4)	-	9,07(5)	-	-
5f $^2F^{\circ}_{7/2}$ - 8p $^2P^{\circ}_{3/2}$	192,94	-	-	7,79(-8)	-	3,49(3)	-	-
5f $^2F^{\circ}_{5/2}$ - 8p $^2P^{\circ}_{3/2}$	189,41	-	-	1,37(-8)	-	6,38(2)	-	-
5f $^2F^{\circ}_{5/2}$ - 8p $^2P^{\circ}_{1/2}$	189,56	-	-	4,18(-8)	-	3,88(3)	-	-
7p $^2P^{\circ}_{3/2}$ - 8p $^2P^{\circ}_{1/2}$	4751,13	-	-	3,91(-6)	-	5,78(2)	-	-
7p $^2P^{\circ}_{1/2}$ - 8p $^2P^{\circ}_{3/2}$	4387,78	-	-	2,63(-6)	-	2,28(2)	-	-
8p $^2P^{\circ}_{1/2}$ - 8p $^2P^{\circ}_{3/2}$	234668,47	-	-	9,57(-10)	-	2,90(-5)	-	-
M1 Geçişleri								
5f $^2F^{\circ}_{5/2}$ - 5f $^2F^{\circ}_{7/2}$	10340,81	14555,43	13143,0 ^a	1,34(-6)	9,51(-7)	1,04(1)	3,74	5,089 ^a
7p $^2P^{\circ}_{3/2}$ - 5f $^2F^{\circ}_{5/2}$	-	485,02	-	-	2,86(-15)	-	2,03(-5)	-
6d $^2D_{3/2}$ - 6d $^2D_{5/2}$	1063,24	11718,03	-	9,54(-7)	8,25(-7)	1,02(1)	6,67	-
7s $^2S_{1/2}$ - 6d $^2D_{3/2}$	-	2004,91	-	-	1,77(-15)	-	1,47(-6)	-
8s $^2S_{1/2}$ - 6d $^2D_{3/2}$	-	494,88	-	-	4,47(-15)	-	6,09(-5)	-
8s $^2S_{1/2}$ - 7s $^2S_{1/2}$	-	657,07	-	-	2,72(-13)	-	2,10(-3)	-
7p $^2P^{\circ}_{1/2}$ - 7p $^2P^{\circ}_{3/2}$	75941,77	4673,34	-	7,09(-8)	1,09(-6)	2,05(-2)	8,35(1)	-
5g $^2G_{7/2}$ - 5g $^2G_{9/2}$	4,44444	-	-	5,19(-10)	-	2,89(-10)	-	-
7p $^2P^{\circ}_{3/2}$ - 8p $^2P^{\circ}_{1/2}$	1,55786(-3)	-	-	1,32(-9)	-	1,95(-1)	-	-
7p $^2P^{\circ}_{1/2}$ - 8p $^2P^{\circ}_{3/2}$	1,55786(-3)	-	-	1,43(-9)	-	1,24(-1)	-	-
8p $^2P^{\circ}_{1/2}$ - 8p $^2P^{\circ}_{3/2}$	1,33178	-	-	2,29(-8)	-	6,94(-4)	-	-

^a Safronova ve çalışma arkadaşları [57]

iken, M1 geçişinde MCDF geçişi daha uyumludur. U VI iyonunun ağırlıklı salıncı şiddeti parametresi için mevcut kaynaklarda karşılaştırma değeri bulunamamıştır.

3.12. Lr I için Enerji ve İşmalı Geçiş Parametreleri Hesapları

Nötral lavrensiyum için, öz uyumlu relativistik Dirac-Fock, çok konfigürasyonlu Dirac-Hartree-Fock ve relativistik Fock uzayı, katlı küme ve ara Hamiltonyen katlı küme yöntemleriyle yapılmış çalışmalar mevcuttur [98-104]. Ayrıca Bölüm 3.1'deki [21-23, 25, 27, 28, 36, 41, 44] çalışmalar ve Lotz'un [97] bağlanma enerjileri hakkındaki çalışmasına bakılabilir.

3.12.1. Enerji seviyeleri hesapları

Nötral lavrensiyum, kapalı $[Rn]5f^{14}$ kapalı özü dışında üç elektronuyla nötral aktinyumun yapısına benzemektedir. Ancak taban hal konfigürasyonları farklıdır. Lr I ile ilgili ilk çalışmalarda taban hal konfigürasyonu $6d7s^2\ ^2D_{3/2}$ olarak bulunmuş ancak son yıllarda yapılan çalışmalarda gerçek taban halinin $7s^27p\ ^2P_{1/2}$ olduğu belirtilmiştir. Lr I'in MCHF ve MCDF yöntemleriyle yapılan incelemelerinde kullanılan konfigürasyon takımları Tablo 3.34'te verilmektedir. MCDF yöntemiyle yapılan hesaplamada Ac II ve Ac III iyonlarındaki gibi dört takım kullanıldı. Elde edilen enerji seviyeleri, Tablo 3.35'te sunulmaktadır.

Tablo 3.34. Lr I'e ait hesaplarda kullanılan konfigürasyon takımları

Çalışma	Tek Parite	Çift Parite
MCHF Yöntemi		
	$7s^27p, 6d^27p, 6d7s7p, 6d7p8s, 7s^27p,$ $7s7p8s, 7p8s^2, 7s^26f, 6d^26f, 6d7s6f,$ $7p^26f, 8s^26f, 5g6d7p, 5g7s7p, 5g7p8s$	$6d7s^2, 6d^27s, 6d^3, 6d^28s, 6d8s^2, 6d7s8s,$ $6d7p^2, 7s7p^2, 7s^28s, 7s8s^2, 7p^28s, 5g6d^2,$ $5g6d7s, 6d7p6f, 5g7p^2, 7s7p6f$
MCDF Yöntemi		
A	$7s^27p, 6d7s7p, 7p^3$	$6d7s^2, 7s7p^2, 6d^27s, 6d7p^2, 6d^3$
B	$A+6p^57s^27p^2, 6p^56d^27s^2$	$A+6p^56d7s^27p$
C	$A+6s6d7s^27p$	$A+6s7s^27p^2, 6s6d^27s^2, 6s7p^4, 6s6d^4$
D	$A+6p^57s^27p^2, 6p^56d^27s^2, 6s6d7s^27p$	$A+6p^56d7s^27p, 6s7s^27p^2, 6s6d^27s^2, 6s7p^4,$ $6s6d^4$

Tablo 3.35. Lr I'in uyarılmış seviyelerinin enerjileri (cm⁻¹)

Seviye		MCHF		MCDF		Diğer Çalışmalar	Konfigürasyon Katkıları		
		MCHF	+BP	MCDF	+B+QED				
7s ² 7p	² P _{1/2} ^o	0,00	0,00	A	0,00	0,00 ^{a, b, c, d, e, f, g}	88,11 + 8,10	6d7s(³ D)7p	² P _{1/2} ^o
				B	0,00		88,84 + 7,32	6d7s(³ D)7p	² P _{1/2} ^o
				C	0,00		88,48 + 7,81	6d7s(³ D)7p	² P _{1/2} ^o
				D	0,00		88,32 + 7,70	6d7s(³ D)7p	² P _{1/2} ^o
7s ² 7p	² P _{3/2} ^o	0,00	5012,62	A	8436,20	7900 ^d ; 8138 ^e ; 5014,75 ^g	88,16 + 7,00	6d7s(³ D)7p	² P _{3/2} ^o
				B	8088,92		88,92 + 6,16	6d7s(³ D)7p	² P _{3/2} ^o
				C	7869,82		88,71 + 6,46	6d7s(³ D)7p	² P _{3/2} ^o
				D	7890,15		88,22 + 6,55	6d7s(³ D)7p	² P _{3/2} ^o
6d7s ²	² D _{3/2}	1267,74	1108,25	A	5908,43	8000 ^a ; 3840 ^b ; 2300 ^b ; 41734,3 ^c ; 3653,84 ^c ; 1388 ^{d, h} ; 1263 ^{d, h} ; 1500 ^d ; 1436 ^f ; 1408 ^f ; 1331 ^e ; 1965,57 ^g ; 1127 ^h ; 1953 ^h ; 1339 ^h ; 1298 ^h	90,47 + 2,63	6d7p ² (¹ S)	² D _{3/2}
				B	9029,06		89,17 + 2,94	7s7p ² (¹ D)	² D _{3/2}
				C	8896,72		89,10 + 3,32	7s7p ² (¹ D)	² D _{3/2}
				D	8794,50		88,45 + 3,58	7s7p ² (¹ D)	² D _{3/2}
	² D _{5/2}	1267,74	6764,87	A	8091,75	7410 ^b ; 5236 ^d ; 5262 ^d ; 3900 ^d ; 5106 ^f ; 5082 ^f ; 4187 ^e ; 7622,19 ^g	90,91 + 2,84	6d ² (¹ D)7s	² D _{5/2}
				B	10935,62		90,00 + 2,83	6d ² (¹ D)7s	² D _{5/2}
				C	10499,41		90,00 + 2,89	7s7p ² (¹ D)	² D _{5/2}
				D	10713,44		89,44 + 3,11	7s7p ² (¹ D)	² D _{5/2}
7s7p ² (³ P)	⁴ P _{1/2}	41161,16	39918,74	A	24508,93	29000 ^a ; 20053 ^e ; 40776,04 ^g	70,00 + 16,67	6d ² (³ P)7s	⁴ P _{1/2}
				B	23642,03		79,04 + 8,28	7s7p ² (¹ S)	² S _{1/2}
				C	23708,75		79,69 + 8,93	6d ² (³ P)7s	⁴ P _{1/2}
				D	23087,12		80,61 + 8,18	6d ² (³ P)7s	⁴ P _{1/2}
	⁴ P _{3/2}	41161,16	43519,54	A	29162,19	8413 ^f ; 8389 ^f ; 2831,2 ^e	68,00 + 27,77	6d ² (³ P)7s	⁴ P _{3/2}
				B	28378,61		84,19 + 12,00	6d ² (³ P)7s	⁴ P _{3/2}
				C	28219,87		83,76 + 12,75	6d ² (³ P)7s	⁴ P _{3/2}
				D	27444,32		85,67 + 10,87	6d ² (³ P)7s	⁴ P _{3/2}
⁴ P _{5/2}	41161,16	47010,09	A	32000,23	-	39,10 + 30,94	6d ² (³ P)7s	⁴ P _{5/2}	
			B	31989,26		60,00 + 16,64	7s7p ² (¹ D)	² D _{5/2}	
			C	31941,48		61,22 + 14,95	6d ² (³ P)7s	⁴ P _{5/2}	
			D	31183,04		65,16 + 13,95	7s7p ² (¹ D)	² D _{5/2}	
² P _{1/2}	-	-	A	41876,92	-	23,47 + 21,68	6d ² (³ P)7s	⁴ P _{1/2}	
			B	39864,71		52,30 + 15,13	7s7p ² (¹ S)	² S _{1/2}	
			C	40587,14		45,79 + 18,37	7s7p ² (¹ S)	² S _{1/2}	
			D	40160,84		49,81 + 17,73	7s7p ² (¹ S)	² S _{1/2}	

Tablo 3.35. Devam

Seviye	MCHF		MCDF		Diğer Çalışmalar	Konfigurasyon Katkıları	
	MCHF	+BP	MCDF	+B+QED			
7s7p ² (¹ D)	² D _{3/2}	–	–	B 36662,43 C 36807,62 D 36635,36	36526,21 36689,58 36512,25	–	52,19 + 30,53 6d ² (¹ D)7s ² D _{3/2} 50,25 + 34,63 6d ² (¹ D)7s ² D _{3/2} 45,28 + 24,21 6d ² (¹ D)7s ² D _{3/2}
6d7s(³ D)7p	² D _{5/2}	12914,78	56470,14	D 39697,78	39545,71	–	36,76 + 34,26 6d ² (¹ D)7s ² D _{5/2}
	⁴ F _{3/2} ^o		11037,93	–	–	27500 ^a ; 2088 ^c ; 11088,02 ^g	–
	⁴ F _{5/2} ^o		12715,46	–	–	23155 ^c ; 12764,79 ^g	–
	⁴ F _{7/2} ^o		16021,39	A 21995,03 B 23166,57 C 23108,48 D 23959,23	22039,14 23191,81 23136,05 24007,87	27276 ^c ; 16062,03 ^g	81,65 + 6,68 6d7s(³ D)7p ² D _{5/2} ^o 82,02 + 6,73 6d7s(³ D)7p ² D _{5/2} ^o 83,49 + 5,79 6d7s(³ D)7p ² D _{5/2} ^o 82,99 + 6,29 6d7s(³ D)7p ² D _{5/2} ^o
	⁴ F _{9/2} ^o	19739,84	A 26060,91 B 26904,22 C 26748,55 D 27552,10	26009,36 26824,04 26667,89 27491,11	32775 ^c ; 19782,05 ^g	88,89 + 8,55 6d7s(³ D)7p ⁴ D _{7/2} ^o 88,30 + 9,43 6d7s(³ D)7p ⁴ D _{7/2} ^o 89,00 + 8,94 6d7s(³ D)7p ⁴ D _{7/2} ^o 89,55 + 8,44 6d7s(³ D)7p ⁴ D _{7/2} ^o	
			A 31167,98 B 31603,64 C 31384,49 D 32000,03	31025,01 31421,07 31198,49 31824,27	27904 ^c ; 16923,26 ^g	99,61 + 0,38 6d ² (³ F)7p ⁴ F _{9/2} ^o 99,68 + 0,30 6d ² (³ F)7p ⁴ F _{9/2} ^o 99,67 + 0,32 6d ² (³ F)7p ⁴ F _{9/2} ^o 99,61 + 0,36 6d ² (³ F)7p ⁴ F _{9/2} ^o	
			A 28192,76 B 29114,82 C 29098,03 D 30251,89	28229,38 29130,16 29118,76 30285,32		91,86 + 4,35 6d7s(³ D)7p ⁴ P _{1/2} ^o 92,98 + 3,85 6d7s(³ D)7p ⁴ P _{1/2} ^o 93,29 + 3,72 6d7s(³ D)7p ⁴ P _{1/2} ^o 93,33 + 3,60 6d7s(³ D)7p ⁴ P _{1/2} ^o	
			A 28012,12 B 28704,93 C 28771,22 D 29635,28	27996,62 28655,68 28721,07 29588,98		28973 ^c ; 17620,87 ^g	59,45 + 20,90 6d7s(³ D)7p ⁴ P _{3/2} ^o 56,10 + 18,39 6d7s(³ D)7p ⁴ P _{3/2} ^o 56,48 + 18,54 6d7s(³ D)7p ⁴ P _{3/2} ^o 44,12 + 19,80 6d7s(³ D)7p ² D _{3/2} ^o
	A 33813,46 B 34377,06 C 34289,05 D 35204,17	33731,97 34249,35 34154,84 35078,90	30614 ^c ; 19412,04 ^g	49,84 + 25,52 6d7s(³ D)7p ⁴ P _{5/2} ^o 55,00 + 24,28 6d7s(³ D)7p ⁴ P _{5/2} ^o 55,77 + 24,30 6d7s(³ D)7p ⁴ P _{5/2} ^o 57,66 + 25,54 6d7s(³ D)7p ⁴ P _{5/2} ^o			
	⁴ D _{5/2} ^o	16798,50	16955,98	A 32986,80 B 33341,17 C 33277,02 D 34119,08	32891,96 33207,90 33143,70 33993,21	33051 ^c ; 21778,27 ^g	86,65 + 9,37 6d7s(³ D)7p ⁴ F _{7/2} ^o 86,70 + 10,22 6d7s(³ D)7p ⁴ F _{7/2} ^o 87,35 + 9,61 6d7s(³ D)7p ⁴ F _{7/2} ^o 87,97 + 9,07 6d7s(³ D)7p ⁴ F _{7/2} ^o

Tablo 3.35. Devam

Seviye		MCHF		MCDF		Diğer Çalışmalar	Konfigürasyon Katkıları				
		MCHF	+BP	MCDF	+B+QED						
6d7s(³ D)7p	⁴ P _{1/2} ^o	18214,89	21184,15	A	32904,24	32888,54	32712 ^e ; 21176,29 ^g	93,68	+ 4,73	6d7s(³ D)7p	⁴ D _{1/2} ^o
				B	33806,84	33763,57		94,53	+ 4,16	6d7s(³ D)7p	⁴ D _{1/2} ^o
				C	33670,83	33633,29		94,69	+ 3,99	6d7s(³ D)7p	⁴ D _{1/2} ^o
				D	34819,31	34782,99		94,72	+ 3,83	6d7s(³ D)7p	⁴ D _{1/2} ^o
	⁴ P _{3/2} ^o	21672,40	A	33134,83	33095,01	33112 ^e ; 21661,72 ^g	75,03	+ 17,69	6d7s(³ D)7p	⁴ D _{3/2} ^o	
			B	33901,08	33829,92		78,46	+ 15,54	6d7s(³ D)7p	⁴ D _{3/2} ^o	
			C	33770,85	33703,54		78,34	+ 15,67	6d7s(³ D)7p	⁴ D _{3/2} ^o	
			D	34849,54	34785,47		79,96	+ 14,95	6d7s(³ D)7p	⁴ D _{3/2} ^o	
	⁴ P _{5/2} ^o	22700,88; 24331,28	A	26791,59	26754,47	27794 ^e ; 33977 ^e ; 22724,93 ^g	37,65	+ 23,19	6d7s(³ D)7p	² D _{5/2} ^o	
			B	27496,04	27430,88		36,17	+ 24,27	6d7s(³ D)7p	² D _{5/2} ^o	
			C	27523,01	27458,41		36,75	+ 23,85	6d7s(³ D)7p	² D _{5/2} ^o	
			D	28352,83	28313,08		33,42	+ 25,56	6d7s(³ D)7p	² D _{5/2} ^o	
	² F _{3/2} ^o	27986,41	–	A	19478,12	19559,33	–	86,19	+ 7,63	6d7s(³ D)7p	² D _{3/2} ^o
			B	20772,66	20841,95	85,83		+ 8,00	6d7s(³ D)7p	² D _{3/2} ^o	
			C	20731,54	20807,55	86,49		+ 7,26	6d7s(³ D)7p	² D _{3/2} ^o	
			D	21621,62	21719,49	86,19		+ 7,55	6d7s(³ D)7p	² D _{3/2} ^o	
	² F _{5/2} ^o	30251,15; 32962,93	–	–	–	29903,03 ^g ; 32745,15 ^g	–	–	–	–	
			² F _{7/2} ^o	31798,45	–		–	31222,25 ^g	–	–	–
² D _{3/2} ^o	14902,47	18592,34; 27681,22	A	39973,41	39968,35	18655,72 ^g ; 27710,47 ^g	37,62	+ 24,11	6d7s(¹ D)7p	² D _{3/2} ^o	
			B	40573,01	40532,83		35,28	+ 27,05	6d7s(¹ D)7p	² D _{3/2} ^o	
			C	41012,00	40977,74		36,63	+ 24,32	6d7s(¹ D)7p	² D _{3/2} ^o	
			D	31064,81	31037,99		36,43	+ 23,46	6d7s(³ D)7p	⁴ D _{3/2} ^o	
² D _{5/2} ^o	17457,86	–	–	–	17526,52 ^g	–	–	–	–		
		² P _{1/2} ^o	36201,02	–		–	35695,18 ^g	–	–	–	
		² P _{3/2} ^o	37642,45	–		–	37271,83 ^g	–	–	–	
		–	–	–		–	–	–	–	–	
6d7s(¹ D)7p	² D _{3/2} ^o	26837,67	–	A	29548,03	29521,90	29435 ^e	30,69	+ 29,03	6d7s(³ D)7p	² D _{3/2} ^o
			B	30400,24	30349,45	28,33		+ 26,78	6d7s(³ D)7p	² D _{3/2} ^o	
			C	30215,30	30164,73	28,27		+ 27,63	6d7s(³ D)7p	² D _{3/2} ^o	
			D	42042,20	42015,32	36,45		+ 24,88	6d7s(³ D)7p	² D _{3/2} ^o	
	² D _{5/2} ^o	–	A	30475,38	30448,86	–	49,78	+ 15,03	6d7s(³ D)7p	⁴ D _{5/2} ^o	
			B	31217,42	31160,75		49,07	+ 14,82	6d7s(³ D)7p	⁴ D _{5/2} ^o	
			C	31104,67	31049,21		49,97	+ 15,42	6d7s(³ D)7p	⁴ D _{5/2} ^o	
			D	31937,74	31887,92		50,29	+ 15,09	6d7s(³ D)7p	⁴ D _{5/2} ^o	

Tablo 3.35. Devam

Seviye	MCHF		MCDF		Diğer Çalışmalar	Konfigürasyon Katkıları					
	MCHF	+BP	MCDF	+B+QED							
6d7s(¹ D)7p	² F _{5/2} ^o	22790,02	-	A	36723,88	36671,38	24374,77 ^g	51,76 + 17,53	6d7s(³ D)7p	² D _{5/2} ^o	
				B	37344,96	37267,13		56,65 + 15,89	6d7s(³ D)7p	² D _{5/2} ^o	
				C	37679,55	37606,67		61,31 + 13,63	6d7s(³ D)7p	² D _{5/2} ^o	
				D	38535,38	38479,15		62,51 + 11,98	6d7s(³ D)7p	² D _{5/2} ^o	
	² F _{7/2} ^o	33155,25	28167,31	A	41674,18	41570,56	28228,08 ^g	76,04 + 12,11	6d ² (¹ D)7p	² F _{7/2} ^o	
				B	42185,00	42030,55		72,24 + 12,09	6d ² (¹ D)7p	² F _{7/2} ^o	
				C	42294,37	42139,98		77,75 + 11,90	6d ² (¹ D)7p	² F _{7/2} ^o	
	² P _{1/2} ^o	12829,64	10448,41	-	-	-	31465,00 ^g	-	-	-	
	² P _{3/2} ^o			30624,77	-	-	30596,60 ^g	-	-	-	
	6d ² (³ F)7s	⁴ F _{3/2}	12829,64	10448,41	A	30674,39	30913,17	34000 ^a ; 31872 ^c ; 11305,76 ^g	98,45 + 1,03	6d ² (¹ D)7s	² D _{3/2}
					B	35327,00	35559,68		99,34 + 0,47	6d ² (¹ D)7s	² D _{3/2}
					C	35175,36	35415,76		99,51 + 0,35	6d ² (¹ D)7s	² D _{3/2}
D					36549,35	36770,05	82,34 + 8,45		7s7p ² (¹ D)	² D _{3/2}	
⁴ F _{5/2}		12196,37	A	31130,50	31321,43	31915 ^e ; 33103 ^e ; 13053,69 ^g	95,17 + 1,62	6d ² (¹ D)7s	² D _{5/2}		
			B	35582,23	35763,15		99,68 + 0,13	6d ² (¹ D)7s	² D _{5/2}		
			C	35380,12	35566,25		99,79 + 0,10	6d ² (¹ D)7s	² D _{5/2}		
			D	36765,90	36923,68		99,64 + 0,14	6d ² (¹ D)7s	² D _{5/2}		
⁴ F _{7/2}		15737,10	A	31872,27	31998,37	16594,15 ^g	99,64 + 0,28	6d ² (³ F)7s	² F _{7/2}		
			B	35987,87	36098,96		99,79 + 0,13	6d ² (³ F)7s	² F _{7/2}		
			C	35715,49	35828,31		99,84 + 0,12	6d ² (³ F)7s	² F _{7/2}		
			D	37105,69	37193,66		99,78 + 0,14	6d ² (³ F)7s	² F _{7/2}		
⁴ F _{9/2}	19128,70	A	32836,10	32884,04	19980,55 ^g	99,63 + 0,36	6d ² (¹ G)7s	² G _{9/2}			
		B	36595,88	36619,72		99,84 + 0,11	6d ² (¹ G)7s	² G _{9/2}			
		C	36249,54	36269,35		99,91 + 0,08	6d ² (¹ G)7s	² G _{9/2}			
		D	37633,85	37634,41		99,85 + 0,09	6d ² (¹ G)7s	² G _{9/2}			
6d ² (³ P)7s	² F _{5/2}	18820,50	18793,87	A	40574,96	40683,25	19651,20 ^g	77,52 + 11,36	6d7p ² (¹ D)	² D _{5/2}	
				-	-	24321,04 ^g		-	-		
	² F _{7/2}	19414,06; 24172,54	19187,95	A	39344,49	39381,27	20045,28 ^g	60,04 + 12,20	7s7p ² (¹ S)	² S _{1/2}	
				-	-	-		-	-		
	⁴ P _{3/2}	21370,19	A	41083,75	41127,44	22227,52 ^g	70,38 + 27,50	7s7p ² (³ P)	⁴ P _{3/2}		
	⁴ P _{5/2}		-	-	22576,02 ^g	-	-				
	² P _{1/2}		25629,62	-	-	26486,92 ^g	-	-			
	² P _{3/2}		30043,35	-	-	30900,68 ^g	-	-			

Tablo 3.35. Devam

Seviye	MCHF		MCDF			Diğer Çalışmalar	Konfigürasyon Katkıları		
	MCHF	+BP	MCDF	+B+QED					
6d ² (¹ G)7s	² G _{7/2}	23245,41	28125,53	A	41762,05	41861,76	28940,77 ^g	49,77 + 37,93	6d ² (¹ G)7s ² G _{7/2}
	² G _{9/2}		27433,85		–	–	34807 ^e ; 28233,35 ^g	–	
6d ² (¹ D)7s	² D _{3/2}	20248,59	23056,58	A	35790,00	35774,82	23913,89 ^g	53,04 + 32,20	7s7p ² (¹ D) ² D _{3/2}
	² D _{5/2}		27805,94	A	37834,87	37824,63	34402 ^e ; 28663,27 ^g	43,76 + 26,89	6d ² (³ P)7s ⁴ P _{5/2}
				B	40021,47	39880,43		34,07 + 31,56	6d7s(³ D)7p ² F _{3/2} ^o
				C	39753,29	39624,30		38,13 + 30,39	7s7p ² (¹ D) ² D _{5/2}

^a Brewer [21],^b Vander Sluis ve Nugent [24],^c Wijensundera ve çalışma arkadaşları [100],^d Eliav ve çalışma arkadaşları [101],^e Fritzsche ve çalışma arkadaşları [103],^f Borschevsky ve çalışma arkadaşları [104],^g Ürer ve Özdemir [131],^h Zou ve Fischer [102]

3.12.2. Işımalı geiş parametrelerinin hesapları

İzinli ışımaya parametreleri Tablo 3.36’da sunulmaktadır. Mevcut kaynaklarla yapılan karşılaştırmada özellikle düşük seviyelerde uyum görülmektedir. E1 geişleri için mevcut kaynaklarda kısıtlı karşılaştırma değeri vardır. Karşılaştırma değeri olan tüm geişlerde MCDF yöntemiyle hesaplanan ışımaya parametreleri diğer çalışmalarla uyumludur. MCHF çalışması ise MCDF’den biraz daha uzaktır. MCDF yöntemiyle elde edilen E2 ve M1 geişlerinin $A > 1 \text{ sn}^{-1}$ olanları için ışımaya parametreleri Tablo 3.37’de sunulmaktadır. E2 ve M1 geişleri için herhangi bir karşılaştırma değeri bulunamamıştır.

Tablo 3.36. Lr I'in E1 geçişlerine ait λ dalga boyları (Å), gf ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve A geçiş olasılıkları (sn^{-1})

Geçiş	λ			gf			A					
	MCHF	MCDF	Diğer Ç.	MCHF	MCDF	Diğer Ç.	MCHF	MCDF	Diğer Ç.			
$7s^27p$	$^2P^o_{1/2}$	$-6d7s^2$	$^2D_{3/2}$	65936,52	16454,07	–	8,73(-3)	8,43(-2)	1,62(-2) ^b	3,34(3)	5,19(5)	–
$7s^27p$	$^2P^o_{1/2}$	$-7s7p^2(^3P)$	$^4P_{1/2}$	5103,00	4090,45	3616,2 ^a	1,02(-4)	3,07(-2)	–	1,30(4)	6,13(6)	2,7(6) ^a
$7s^27p$	$^2P^o_{1/2}$	$-7s7p^2(^3P)$	$^4P_{3/2}$	2276,46	3441,45	–	2,48(-2)	1,52(-2)	2,10(-2) ^b	8,01(6)	2,14(6)	–
$7s^27p$	$^2P^o_{1/2}$	$-6d^2(^3F)7s$	$^4F_{3/2}$	9210,85	3234,86	3151,8 ^a	2,07(-3)	1,77(-2)	–	4,07(4)	2,82(6)	8,6(6) ^a
$7s^27p$	$^2P^o_{1/2}$	$-6d^2(^1D)7s$	$^2D_{3/2}$	4261,68	2795,26	2911,3 ^a	3,43(-2)	8,25(-1)	–	3,15(6)	1,76(8)	2,2(8) ^a
$6d7s^2$	$^2D_{3/2}$	$-6d7s(^3D)7p$	$^4F^o_{5/2}$	8929,49	6265,02	–	5,08(-2)	5,50(-2)	–	7,08(5)	1,55(6)	–
$6d7s^2$	$^2D_{3/2}$	$-6d7s(^3D)7p$	$^4P^o_{5/2}$	4720,48	4836,30	–	4,46(-1)	9,39(-2)	–	2,22(7)	4,46(6)	–
$6d7s^2$	$^2D_{3/2}$	$-6d7s(^3D)7p$	$^4D^o_{3/2}$	6203,97	4562,23	–	2,78(-3)	1,73(-1)	–	1,20(5)	1,39(7)	–
$6d7s^2$	$^2D_{3/2}$	$-6d7s(^3D)7p$	$^4D^o_{1/2}$	6476,95	4514,29	–	3,41(-3)	1,24(-2)	–	2,71(5)	2,04(6)	–
$6d7s^2$	$^2D_{3/2}$	$-6d7s(^1D)7p$	$^2D^o_{3/2}$	–	4265,41	–	–	2,48(-1)	–	–	2,28(7)	–
$6d7s^2$	$^2D_{3/2}$	$-6d7s(^1D)7p$	$^2D^o_{5/2}$	–	4103,17	–	–	1,28(-1)	–	–	8,51(6)	–
$6d7s^2$	$^2D_{3/2}$	$-6d7s(^3D)7p$	$^4P^o_{3/2}$	4961,35	3701,30	–	7,45(-3)	1,41(-2)	–	5,05(5)	1,72(6)	–
$6d7s^2$	$^2D_{3/2}$	$-6d7s(^3D)7p$	$^4D^o_{5/2}$	5581,87	3616,05	–	9,99(-4)	2,60(-1)	–	3,56(4)	2,21(7)	–
$6d7s^2$	$^2D_{3/2}$	$-6d7s(^1D)7p$	$^2F^o_{5/2}$	–	3268,62	–	–	1,00	–	–	1,04(8)	–
$6d7s^2$	$^2D_{5/2}$	$-6d7s(^3D)7p$	$^4F^o_{5/2}$	18043,24	7194,38	–	2,23(-2)	4,16(-2)	–	7,62(4)	8,93(5)	–
$6d7s^2$	$^2D_{5/2}$	$-6d7s(^3D)7p$	$^4F^o_{7/2}$	11301,77	5595,99	–	2,16(-2)	2,96(-2)	–	1,41(5)	7,89(5)	–
$6d7s^2$	$^2D_{5/2}$	$-6d7s(^3D)7p$	$^4P^o_{5/2}$	5828,17	5371,99	–	2,61(-1)	2,55(-1)	–	8,55(6)	9,83(6)	–
$6d7s^2$	$^2D_{5/2}$	$-6d7s(^3D)7p$	$^4D^o_{3/2}$	9558,31	5035,95	–	1,54(-3)	1,46(-2)	–	2,82(4)	9,66(5)	–
$6d7s^2$	$^2D_{5/2}$	$-6d7s(^1D)7p$	$^2D^o_{5/2}$	8157,58	4482,40	–	5,25(-3)	4,03(-2)	–	8,78(4)	2,23(6)	–
$6d7s^2$	$^2D_{5/2}$	$-6d7s(^3D)7p$	$^4D^o_{7/2}$	6826,16	4039,98	–	6,02(-3)	3,53(-3)	–	1,07(5)	1,80(5)	–
$6d7s^2$	$^2D_{5/2}$	$-6d7s(^1D)7p$	$^2F^o_{5/2}$	–	3504,84	–	–	9,85(-1)	–	–	8,91(7)	–
$7s^27p$	$^2P^o_{3/2}$	$-7s7p^2(^3P)$	$^4P_{3/2}$	–	4826,65	–	–	1,22(-2)	–	–	8,76(5)	–
$7s^27p$	$^2P^o_{3/2}$	$-6d^2(^3F)7s$	$^4F_{3/2}$	17111,14	4429,87	–	3,16(-4)	1,67(-3)	–	1,80(3)	1,42(5)	–
$7s^27p$	$^2P^o_{3/2}$	$-6d^2(^1D)7s$	$^2D_{5/2}$	4310,03	3391,50	–	4,36(-2)	3,82(-1)	–	2,61(6)	3,69(7)	–
$6d7s(^3D)7p$	$^2F^o_{3/2}$	$-6d^2(^3F)7s$	$^4F_{3/2}$	–	8807,59	–	–	2,95(-1)	–	–	6,34(6)	–
$6d7s(^3D)7p$	$^4F^o_{5/2}$	$-6d^2(^3F)7s$	$^4F_{3/2}$	53801,10	11268,84	–	4,94(-3)	6,08(-2)	–	1,90(3)	7,99(5)	–
$6d7s(^3D)7p$	$^4F^o_{5/2}$	$-6d^2(^1D)7s$	$^2D_{3/2}$	29154,55	7280,313	–	1,05(-3)	1,63(-2)	–	1,03(3)	5,15(5)	–
$7s7p^2(^3P)$	$^4P_{1/2}$	$-6d7s(^3D)7p$	$^4D^o_{3/2}$	4406,88	28173,45	–	5,04(-1)	5,48(-2)	–	8,67(7)	1,15(5)	–
$7s7p^2(^3P)$	$^4P_{1/2}$	$-6d7s(^3D)7p$	$^4D^o_{1/2}$	4278,79	26439,61	–	4,55(-1)	5,83(-2)	–	8,28(7)	2,78(5)	–
$6d7s(^3D)7p$	$^4F^o_{7/2}$	$-7s7p^2(^3P)$	$^4P_{5/2}$	3185,01	16697,24	–	9,50(-2)	3,41(-1)	–	1,04(7)	1,02(6)	–
$6d7s(^3D)7p$	$^4F^o_{7/2}$	$-6d^2(^1D)7s$	$^2D_{5/2}$	8201,49	8463,62	–	4,34(-5)	7,04(-3)	–	7,18(2)	1,09(5)	–
$6d7s(^3D)7p$	$^4P^o_{5/2}$	$-7s7p^2(^3P)$	$^4P_{5/2}$	4045,71	19069,76	–	4,34(-1)	6,20(-2)	–	2,95(7)	1,42(5)	–
$6d7s(^3D)7p$	$^4P^o_{5/2}$	$-6d^2(^1D)7s$	$^2D_{3/2}$	130880,19	11086,04	–	2,84(-3)	9,31(-3)	–	2,77(2)	1,26(5)	–
$6d7s(^3D)7p$	$^4D^o_{3/2}$	$-6d^2(^1D)7s$	$^2D_{5/2}$	9452,71	10175,00	–	8,72(-3)	3,02(-2)	–	1,08(5)	3,24(5)	–

^a Borschevsky ve çalışma arkadaşları [104], ^b Zou ve Fischeher [102]

Tablo 3.37. Lr I'in E2 ve M1 geçişlerine ait λ dalga boyları (Å), gf ağırlıklı salıncı şiddetleri ve A geçiş olasılıkları (sn^{-1})

Geçiş				λ	gf	A	
E2 geçişleri							
$7s^27p$	$2P^o_{1/2}$	-	$6d7s(^3D)7p$	$4F^o_{5/2}$	4537,38	1,88(-8)	1,01
$7s^27p$	$2P^o_{1/2}$	-	$6d7s(^3D)7p$	$4P^o_{5/2}$	3737,69	1,54(-7)	1,23(1)
$7s^27p$	$2P^o_{1/2}$	-	$6d7s(^3D)7p$	$4P^o_{3/2}$	3571,85	1,97(-8)	2,58
$7s^27p$	$2P^o_{1/2}$	-	$6d7s(^1D)7p$	$2D^o_{3/2}$	3387,31	5,82(-7)	8,46(1)
$7s^27p$	$2P^o_{1/2}$	-	$6d7s(^1D)7p$	$2D^o_{5/2}$	3284,19	3,74(-7)	3,85(1)
$7s^27p$	$2P^o_{1/2}$	-	$6d7s(^3D)7p$	$4P^o_{3/2}$	3021,60	7,04(-8)	1,28(1)
$7s^27p$	$2P^o_{1/2}$	-	$6d7s(^3D)7p$	$4D^o_{5/2}$	2964,54	4,03(-7)	5,10(1)
$7s^27p$	$2P^o_{1/2}$	-	$6d7s(^1D)7p$	$2F^o_{5/2}$	2726,92	9,78(-7)	1,46(2)
$7s^27p$	$2P^o_{1/2}$	-	$6d7s(^3D)7p$	$2D^o_{3/2}$	2501,97	1,08(-6)	2,89(2)
$6d7s^2$	$2D_{3/2}$	-	$7s7p(^3P)$	$4P_{3/2}$	4351,62	1,28(-8)	1,13
$6d7s^2$	$2D_{3/2}$	-	$6d^2(^3F)7s$	$4F_{7/2}$	3864,60	5,04(-8)	3,75
$6d7s^2$	$2D_{3/2}$	-	$6d^2(^1D)7s$	$2D_{3/2}$	3367,30	6,37(-7)	9,36(1)
$6d7s^2$	$2D_{3/2}$	-	$6d^2(^1D)7s$	$2D_{5/2}$	3149,89	6,92(-7)	7,75(1)
$6d7s^2$	$2D_{3/2}$	-	$6d^2(^3P)7s$	$4P_{1/2}$	3002,66	1,52(-7)	5,65(1)
$6d7s^2$	$2D_{5/2}$	-	$6d^2(^3F)7s$	$4F_{7/2}$	4199,22	7,86(-8)	4,96
$6d7s^2$	$2D_{5/2}$	-	$6d^2(^1D)7s$	$2D_{3/2}$	3618,54	1,22(-7)	1,55(1)
$6d7s^2$	$2D_{5/2}$	-	$6d^2(^1D)7s$	$2D_{5/2}$	3368,68	4,81(-7)	4,71(1)
$6d7s^2$	$2D_{5/2}$	-	$6d^2(^3P)7s$	$4P_{1/2}$	3200,83	1,88(-8)	6,13
$7s^27p$	$2P^o_{3/2}$	-	$6d7s(^3D)7p$	$4P^o_{5/2}$	5430,26	6,33(-8)	2,38
$7s^27p$	$2P^o_{3/2}$	-	$6d7s(^3D)7p$	$4P^o_{3/2}$	5087,12	3,95(-8)	2,54
$7s^27p$	$2P^o_{3/2}$	-	$6d7s(^1D)7p$	$2D^o_{3/2}$	4720,82	5,63(-8)	4,21
$7s^27p$	$2P^o_{3/2}$	-	$6d7s(^1D)7p$	$2D^o_{5/2}$	4522,90	9,18(-8)	4,99
$7s^27p$	$2P^o_{3/2}$	-	$6d7s(^1D)7p$	$2F^o_{5/2}$	3529,55	5,06(-7)	4,52(1)
$7s^27p$	$2P^o_{3/2}$	-	$6d7s(^3D)7p$	$2D^o_{3/2}$	3161,63	1,10(-8)	1,84
$6d7s(^3D)7p$	$2F^o_{3/2}$	-	$6d7s(^3D)7p$	$4P^o_{1/2}$	7502,31	1,57(-7)	9,31
$6d7s(^3D)7p$	$2F^o_{3/2}$	-	$6d7s(^3D)7p$	$4P^o_{3/2}$	7387,87	1,28(-7)	3,92
$6d7s(^3D)7p$	$4F^o_{5/2}$	-	$6d7s(^3D)7p$	$4P^o_{3/2}$	9044,97	1,20(-7)	2,46
$6d7s(^3D)7p$	$4F^o_{5/2}$	-	$6d7s(^3D)7p$	$4D^o_{5/2}$	8552,25	6,62(-8)	1,00
M1 geçişleri							
$7s^27p$	$2P^o_{1/2}$	-	$7s^27p$	$2P^o_{3/2}$	11991,60	4,18(-7)	4,84
$7s^27p$	$2P^o_{1/2}$	-	$6d7s(^3D)7p$	$4P^o_{3/2}$	3571,85	8,74(-9)	1,14
$7s^27p$	$2P^o_{1/2}$	-	$6d7s(^3D)7p$	$4P^o_{1/2}$	3040,57	5,94(-9)	2,14
$6d7s(^3D)7p$	$2F^o_{3/2}$	-	$6d7s(^1D)7p$	$2D^o_{3/2}$	10037,57	1,42(-7)	2,35
$6d7s(^3D)7p$	$2F^o_{3/2}$	-	$6d7s(^1D)7p$	$2D^o_{5/2}$	9183,12	1,17(-7)	1,55
$6d7s(^3D)7p$	$2F^o_{3/2}$	-	$6d7s(^1D)7p$	$2F^o_{5/2}$	5843,83	3,55(-8)	1,15
$6d7s(^3D)7p$	$4F^o_{5/2}$	-	$6d7s(^3D)7p$	$4F^o_{7/2}$	25187,55	1,67(-6)	2,19
$7s7p^2(^3P)$	$4P_{1/2}$	-	$7s7p^2(^3P)$	$4P_{3/2}$	21690,73	4,94(-7)	1,75
$7s7p^2(^3P)$	$4P_{1/2}$	-	$6d^2(^3P)7s$	$4P_{1/2}$	6696,09	3,62(-8)	2,69
$6d7s(^3D)7p$	$2F^o_{5/2}$	-	$6d^2(^3F)7s$	$4F^o_{5/2}$	19937,58	1,73(-6)	2,91
$6d7s(^3D)7p$	$4F^o_{7/2}$	-	$6d7s(^3D)7p$	$4D^o_{5/2}$	14331,77	3,62(-7)	1,96
$7s7p^2(^3P)$	$4P_{3/2}$	-	$6d^2(^1D)7s$	$2D_{5/2}$	11406,16	1,23(-7)	1,05
$7s7p^2(^3P)$	$4P_{3/2}$	-	$6d^2(^3P)7s$	$4P_{1/2}$	9686,33	1,11(-7)	3,97
$6d^2(^3F)7s$	$4F_{7/2}$	-	$6d^2(^1D)7s$	$2D_{5/2}$	17032,06	3,31(-7)	1,27

BÖLÜM 4. SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu çalışmada aktinitler olarak adlandırılan atomlardan aktinyum, protaktinyum ve bazı iyonları ile üç kez iyonlaşmış toryum, dört ve beş kez iyonlaşmış uranyum ve nötral lavrensiyumun seviye yapıları ve bu seviyeler arasındaki elektrik dipol (E1), elektrik kuadrupol (E2) ve manyetik dipol (M1) geçişlerine ait ışınım parametreleri çok konfigürasyonlu Hartree-Fock [1] ve çok konfigürasyonlu Dirac-Fock [2, 3] yöntemleriyle incelendi. Elde edilen sonuçlar 3. bölümde tablolar halinde verildi ve mevcut kaynaklarla karşılaştırılarak yorumlandılar.

Atomik yapı hesaplamalarında özellikle büyük atomlar için elektronların karşılıklı etkileşimini ve relativistik etkileri beraber dikkate almak gerekir. Bu nedenle hesaplamalarda değerlik elektronlarının karşılıklı etkileşimi yanında, MCHF yönteminde Breit-Pauli relativistik etkileri, MCDF yönteminde tersinir foton etkileşimi (Breit) ve kuantum elektrodinamik (QED) katkıları dikkate alınmıştır. Çalışılan atom ve iyonlar için 5f, 5g, 6d, 7s, 7p, 7d, 8s, 8p, 9s ve 9p tabakalarındaki elektronların karşılıklı etkileşimi göz önüne alınarak çalışmalar gerçekleştirilmiştir. Bazı MCHF hesaplamaları hariç, büyük baş kuantum sayılı (8p, 9s ve 9p) ve 5g ve 7d tabakalarını içeren konfigürasyon takımlarıyla hesaplama gerçekleştirilememiştir. Yapılan hesaplamalardan mevcut kaynaklarla en uyumlu olanları sunulmuştur. Çalışılan iyonlar için değerlik karşılıklı etkileşimi yanında 6s, 6p ve hem 6s hem de 6p yörüngelerinde uyarmalar dikkate alınmış ancak verilerin çokluğu nedeniyle yalnızca Ac II, Ac III ve Lr I iyonlarının MCDF hesaplamaları [130, 132–136] için elde edilen veriler sunulmuştur. MCHF yöntemiyle yapılan hesaplamalarda [129, 131, 132] Breit-Pauli katkıları seviye yapılarını önemli derecede iyileştirmiştir. MCDF yöntemiyle yapılan hesaplamalarda ise Breit ve QED katkıları sonuçları çok etkilememiştir. Benzer hesaplamalar Pa IV ve U V için de yapılmıştır.

MCHF yöntemiyle yapılan hesaplamalarda sonuçlar kapalı öz dışında elektron sayısı

fazla olan atom veya iyondan az olana doğru gidildikçe ve 5f ve 5g tabakalarını içeren konfigürasyonlar katıldıkça iyileşmiştir. MCDF relativistik bir yöntem olması sebebiyle MCHF yöntemine göre daha iyi sonuçlar vermiştir ve kapalı özü dışındaki elektron sayısı değişimi, iyileşmeyi MCHF yöntemindeki kadar etkilememiştir. Ancak MCDF hesaplamalarının elde edildiği GRASP programının [3] kullanılan sürümüyle 5f tabakasını içeren konfigürasyonlardan sınırlı sayıda hesaba katılabilmektedir. 5g tabakasını içeren konfigürasyonlar kullanıldığında beklenen doğrultuda hesaplamalar yapılamamaktadır. Ayrıca yüksek seviyelere gidildikçe MCHF yöntemi ile elde edilen sonuçlar karşılaştırma değerlerinden uzaklaşmaktadır. MCDF yöntemi ile elde edilen sonuçlarla karşılaştırma değerleri arasındaki fark MCHF yöntemindeki kadar büyük değildir.

MCHF atomik yapı paketi [4] ve GRASP programında [3] 5f tabakasında ikiden fazla elektron bulunduran konfigürasyonlar kullanılamamaktadır. Ayrıca sonuçları sunulan hesaplamalar haricindeki denemelerde konfigürasyon sayısı artırıldığında özellikle 5f ve 5g tabakasını içeren konfigürasyonlar ilave edildiğinde öz uyumlu alan süreçlerinde yürütme hatalarıyla karşılaşmaktadır. 5f tabakasında ikiden fazla elektron bulunmasına izin veren MCHF ve MCDF yöntemlerine dayanan programların yeni sürümleri [137] ve [138] kullanıldığında bu sorunların giderileceği ve sonuçların mevcut kaynaklardaki çalışma sonuçlarıyla daha uyumlu olacağı düşünülmektedir. Bu programların yeni sürümleri üzerinde kısmen çalışma yapılmış fakat mevcut sistemle hesaplamalar sonuçlandırılmamıştır. Bu şekilde aktinitler serisinin taban halinde 5f tabakasında ikiden fazla elektron bulunduran Np, Pu, Am, Cm ve bu atomların aktinitlerin sol yarısındaki simetrisi olan Bk, Cf, Es, Fm, Md, No atomları için de hesaplamalar gerçekleştirilebilecektir. Böylece aktinit atomları için çok daha genel yorumlamalar gerçekleştirilebilecektir.

Enerji ve geçiş parametreleri birçok uygulama için temel niceliklerdir. Ancak aktinitler için mevcut kaynaklarda özellikle deneysel karşılaştırma değerleri çok azdır. Bu çalışmada ele alınan aktinit atomları için elde edilen veriler, radyo aktifliğinden ve kısa yarı ömürlerinden dolayı deneysel çalışmaları henüz zor olan ve teorik açıdan da bazı atomik hesaplamaları çoğunlukla yapılamayan aktinit atomlarına ait gelecekteki çalışmalara yardımcı olacağı açıktır.

KAYNAKLAR

- [1] FISCHER, C.F., BRAGE, T., JÖNSSON, R., Computational atomic structure: An MCHF approach, Institute of Physics Publishing, Bristol and Philadelphia, USA, 1997.
- [2] GRANT, I.P., Relativistic quantum theory of atoms and molecules, Springer, New York, USA, 2007.
- [3] DYALL, K.G., GRANT, I.P., JOHNSON, C.T., PARPIA, F.A., PLUMMER, E.P., Grasp: a general-purpose relativistic atomic structure program, Computer Physics Communications, 55, 425–456, 1989.
- [4] FISCHER, C.F., The MCHF atomic-structure package, Computer Physics Communications, 64, 369–398, 1991.
- [5] COWAN, R.D., The theory of atomic structure and spectra, University of California Press, Berkeley, USA, 1981.
- [6] JUDD, B.R., Operator techniques in atomic spectroscopy, McGraw-Hill Book Company, New York, USA, 1963.
- [7] CONDON, E.U., SHORTLEY, G.H., The theory of atomic spectra, Cambridge University Press, Cambridge, USA, 1935.
- [8] GRANT, I.P., MAYERS, D.F., PYPHER, N.C., Studies in multiconfiguration Dirac-Fock theory I. The low-lying spectrum of Hf III, J. Phys. B: At. Mol. Phys. 9, 2777–2796, 1976.
- [9] MANN, J.B., JOHNSON, Breit interaction in multielectron atoms, Phys. Rev. A, 4, 41–51, 1971.
- [10] MOHR, P.J., Self energy radiative corrections in hydrogen-like systems, Ann. Phys., 88, 26–51, 1974.
- [11] MOHR, P.J., Lamb shift in a strong Coulomb potential, Phys. Rev. Lett., 34, 1050–1052, 1975.
- [12] MOHR, P.J., Self-energy of the $n=2$ states in a strong Coulomb field, Phys. Rev. A., 26, 2338–2354, 1983.

- [13] CHENG, K.-T., JOHNSON, W.R., Self-energy corrections to the K-electron binding in heavy and superheavy atoms, *Phys. Rev. A*, 14, 1943–1948, 1976.
- [14] DESIDERIO, A.M., JOHNSON, W.R., Lamb shift binding energies of K electrons in heavy atoms, *Phys. Rev. A*, 3, 1267–1275, 1971.
- [15] BROWN GE., LANGER, JS., SCHAEFER, GW., Lamb shift of a tightly bound electron I. method, *Proc. Roy. Soc. A*, 251, 92–104, 1959.
- [16] FULLERTON, L.W., RINKER, G.A. Jr., Accurate and efficient methods for the evaluation of vacuum-polarization potentials of order $Z\alpha$ and $Z\alpha^2$, *Phys. Rev. A*, 13, 1283–1287, 1976.
- [17] GRANT, I.P., Gauge invariance and relativistic radiative transitions, *J. Phys. B Atom. Molec. Phys.*, 7, 1458–1475, 1974.
- [18] BRINK, D.M., SATCHLER, G.R., *Angular momentum*, Oxford University Press, Oxford, England, 1968.
- [19] MEGGERS, W.F., The spectrochemistry of actinium, *Spectrochim. Acta*, 10, 195–200, 1957.
- [20] MEGGERS, W.F., FRED, M., TOMKINS, F.S., Emission spectra of actinium, *J. Res. Natl. Bur. Stand.*, 58, 297–315, 1957.
- [21] BREWER, L., Energies of the electronic configurations of the lanthanide and actinide neutral atoms, *J. Opt. Soc. Am.*, 61, 1101–1111, 1971.
- [22] CUNNINGHAM, B.B., Coordination chemistry and physical properties of transplutonium actinide compounds, *Pure and Applied Chemistry*, 27, 43–60, 1971.
- [23] NUGENT, L.J., VANDER SLUIS, K.L., Theoretical treatment of the energy differences between $f^q d^1 s^2$ and $f^{q+1} s^2$ electron configurations for lanthanide and actinide atomic vapors, *J. Opt. Soc. Am.*, 61, 1112–1115, 1971.
- [24] VANDER SLUIS, K.L., NUGENT, L.J., Relative energies of the lowest levels of the $f^q p s^2$, $f^q d s^2$, and $f^{q+1} s^2$ electron configurations of the lanthanide and actinide neutral atoms, *Phys. Rev. A*, 6, 86–94, 1972.
- [25] SAXENA, K.M.S., FRAGA, S., Electric dipole polarizabilities of lanthanides and actinides, *J. Chem. Phys.*, 57, 1800–1802, 1972.
- [26] MANN, J.B., SCF Hartree-Fock results for elements with two open shells and for the elements francium to nobelium, *At. Data Nucl. Data Tables*, 12, 1–86, 1973.

- [27] DESCLAUX, J.P., Relativistic Dirac-Fock expectation values for atoms with $Z=1$ to $Z=120$, *At. Data Nucl. Data Tables*, 12, 311–406, 1973.
- [28] BLAISE, J., WYART, J.-F., CONWAY, J.G., WORDEN, E.F., Generalized parametric study of $5f^N$ and $5f^N7s$ configurations, *Phys. Scr.*, 22, 224–230, 1980.
- [29] VOKHMIN, V.G., IONOVA, G.V., Computation of energies of electronic transitions in actinide atoms and ions, *Zh. Fiz. Khim.*, 65, 425–430, 1991.
- [30] LINDGREN, I., Relativistic many-body and QED calculations on atomic systems, *Int. J. Quantum Chem.*, 57, 683–695, 1996.
- [31] KULAGIN, N.A., The $5f^N$ -configuration of actinides: N- ve Z-dependences, *Optics and Spectroscopy*, 82, 194–199, 1997.
- [32] KOTOCHIGOVA, S., LEVINE, Z.H., SHIRLEY, E.L., STILES, M.D., CLARK, C.W., Local-density-functional calculations of the energy of atoms, *Phys. Rev. A*, 55, 191–199, 1997.
- [33] TONG, X.-M., CHU, S.-I., Relativistic density-functional theory with the optimized effective potential and self-interaction correction: Application to atomic structure calculations $Z=52$ –106, *Phys. Rev. A*, 57, 885–863, 1998.
- [34] LIU, W., KÜCHLE, W., DOLG, M., *Ab initio* pseudopotential and density-functional all-electron study of ionization and excitation energies of actinide atoms, *Phys. Rev. A*, 58, 1103–1110, 1998.
- [35] ELIAV, E., SHMULYIAN, S., KALDOR, U., ISHIKAWA, Y., Transition energies of lanthanum, actinium, and eka-actinium (element 121), *J. Chem. Phys.*, 109, 3954–3958, 1998.
- [36] RODRIGUES, G.C., INDELICATO, P., SANTOS, J.P., PATTÉ, P., PARENTE, F., Systematic calculation of total atomic energies of the ground state configurations, *At. Data Nucl. Data Tables*, 86, 117–233, 2004.
- [37] PETROV, A.N., MOSYAGIN, N.S., TITOV, A.V., TUPITSYN, I.I., Accounting for the Breit interaction in relativistic effective core potential calculations of actinides, *J. Phys. B, At. Mol. Opt. Phys.*, 37, 4621–4637, 2004.
- [38] ROOS, B.O., LINDH, R., MALMQVIST, P.-Å., VERYAZOV, V., WIDMARK, P.-O., New relativistic ANO basis sets for actinide atoms, *Chem. Phys. Lett.*, 409, 295–299, 2005.
- [39] SANSONETTI, J.E., MARTIN, W.C., Handbook of basic atomic spectroscopic data, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 34, 1559–2259, 2005.

- [40] QUINET, P., ARGANTE, C., FIVET, V., TERRANOVA, C., YUSHCHENKO, A.V., BIÉMONT, É., Atomic data for radioactive elements Ra I, Ra II, Ac I and Ac II and application to their detection in HD101065 and HD 465, *Astron. Astrophys.* 474, 307–314, 2007.
- [41] CARLSON, T.A., NESTOR, C.W., WASSERMAN, N. Jr., MCDOWELL, J.D., Calculated ionization potentials for multiply charged ions, *At. Data Nucl. Data Tables*, 2, 63–99, 1970.
- [42] SUGAR, J., Ionization energies of the neutral actinides, *J. Chem. Phys.*, 59, 788–791, 1973.
- [43] SUGAR, J., Revised ionization energies of the neutral actinides, *J. Chem. Phys.*, 60, 4103, 1974.
- [44] MARTIN, W.C., HAGAN, L., READER, J., SUGAR, J., Ground levels and ionization potentials for lanthanide and actinide atoms and ions, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 3, 771–780, 1974.
- [45] KÖHLER, S., DEIBENBERGER, R., EBERHARDT, K., ERDMANN, N., HERRMANN, G., HUBER, G., KRATZ, J.V., NUNNEMANN, M., PASSLER, G., RAO, P.M., RIEGEL, J., TRAUTMANN, N., WENDT, K., Determination of the first ionization potential of actinide elements by resonance ionization mass spectroscopy, *Spectrochim. Acta B*, 52, 717–726, 1997.
- [46] RAJNAK, K., SHORE, B.W., Regularities in *s*-electron binding energies in $l^N s^M$ configurations, *J. Opt. Soc. Am.*, 68, 360–367, 1978.
- [47] WALDEK, A., ERDMANN, N., GRÜNING, C., HUBER, G., KUNZ, P., KRATZ, J.V., LASSEN, J., PASSLER, G., TRAUTMANN, N., RIMS measurements for the determination of the first ionization potential of the actinides actinium up to einsteinium, *AIP Conf. Proc.*, 584, 219–224, 2001.
- [48] CAO, X.Y., DOLG, M., Theoretical prediction of the second to fourth actinide ionization potentials, *Mol. Phys.*, 101, 961–969, 2003.
- [49] SEN, K.D., PURI, A., Relativistic local density functional calculations of dipole oscillator strengths in alkaline earth isoelectronic series, *Chem. Phys. Lett.*, 156, 505–508, 1989.
- [50] BREWER, L., Energies of the electronic configurations of the singly, doubly, and triply ionized lanthanides and actinides, *J. Opt. Soc. Am.*, 61, 1666–1682, 1971.
- [51] SEVIER, K.D., Atomic electron binding energies, *At. Data Nucl. Data Tables*, 24, 323–371, 1979.

- [52] SEN K.D., PURI, A., Quasi-relativistic local-spin density functional calculations of dipole oscillator strengths in alkali isoelectronic series, *Phys. Lett. A*, 137, 128–131, 1989.
- [53] GLUSHKOV, A.V., Relativistic calculation and extrapolation of oscillator strengths in franciumlike ions by a model-potential method, *Opt. Spectrosc.*, 70, 555–557, 1991.
- [54] GLUSHKOV, A.V., BUTENKO, Y.V., SERBOV, N.G., AMBROSOV, S.V., ORLOVA, V.E., ORLOV, S.V., BALAN, A.K., DORMOSTUCHENKO, G.M., Calculation of the oscillator strengths in Fr-like multiply charged ions, *J. Appl. Spectrosc.*, 63, 28–30, 1996.
- [55] BIÉMONT, É., FIVET, V., QUINET, P., Relativistic Hartree-Fock and Dirac-Fock atomic structure calculations in Fr-like ions Ra^+ , Ac^{2+} , Th^{3+} and U^{5+} , *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 37, 4193–4204, 2004.
- [56] MIGDALEK, J., GLOWACZ-PROSZKIEWICZ, A., Dirac-Fock+core-polarization' calculations of E1 transitions in the francium isoelectronic sequence, *J. Phys. B: Mol. Opt. Phys.*, 40, 4143–4154, 2007.
- [57] SAFRONOVA, U.I., JOHNSON, W.R., SAFRONOVA, M.S., Excitation energies, polarizabilities, multipole transition rates, and lifetimes of ions along the francium isoelectronic sequence, *Phys. Rev. A*, 76, 042504, 2007.
- [58] LANG, R.J., The spectrum of trebly ionized thorium, *Can. J. Research., Sect. A*, 14, 43–47, 1936.
- [59] KLINKENBERG, P.F.A., LANG, R.J., The spectrum of trebly ionized thorium, Th IV, *Physica*, XV(8-9), 774–778, 1949.
- [60] KLINKENBERG, P.F.A., Spectral structure of trebly ionized thorium, Th IV, *Physica C*, 151, 552–567, 1988.
- [61] SAFRONOVA, U.I., JOHNSON, W.R., SAFRONOVA, M.S., Excitation energies, polarizabilities, multipole transition rates, and lifetimes in Th IV, *Phys. Rev. A*, 76, 042504, 2006.
- [62] HANNI, M.E., KEELE, A., LUNDEEN, S.R., FEHRENBACH, C.W., Polarizability of Rn-like Th^{4+} from spectroscopy of high-L Rydberg levels of Th^{3+} , *Phys. Rev. A*, 82, 022512, 2010.
- [63] JUDD, B.R., Low-lying levels in certain actinide atoms, *Phys. Rev.*, 125, 613–625, 1962.
- [64] GIACCHETTI, A., First spectrum of protactinium, *J. Opt. Soc. Am.*, 56, 653–657, 1966.

- [65] RICHARDS, E.W.T., STEPHEN, I., WISE, H.S., A survey of the first spectrum of protactinium, *Spectrochim. Acta*, Part B, 23B, 635–642, 1968.
- [66] BLAISE, J., GINIBRE, A., WYART, J.F., Interpretation of the low even configurations of neutral protactinium (Pa I), *Z. Phys. A*, 321, 61–63, 1985.
- [67] GIACCHETTI, A., Preliminary report on the second spectrum of protactinium (Pa II), *J. Opt. Soc. Am.*, 57, 728–733, 1967.
- [68] VARGA, L.P., BROWN, J.D., REISFELD, M.J., COWAN, R.D., Prediction and interpretation of free-ion and crystal-field spectra of the actinides. The intermediate crystal-field diagram for $5f^2$ Np^{5+} in octahedral CsNpF_6 , *J. Chem. Phys.*, 52, 4233–4241, 1970.
- [69] AXE, J.D., The electronic structure of octahedrally coordinated protactinium (IV), Univ. California Radiation Lab. Report, 9293, 68, 1960.
- [70] YOUNG, J.P., BAMBERGER, C.E., ROSS, R.G., Spectral studies of f-d and f-f transitions of Pa(IV) in molten $\text{LiF}-\text{BeF}_2-\text{ThF}_4$, *J. Inorg. Nucl. Chem.*, 36, 2630–2632, 1974.
- [71] EDELSTEIN, N., BROWN, D., WHITTAKER, B., Covalency effects on the ligand field splittings of octahedral $5f^1$ compounds, *Inorg. Chem.*, 13, 563–567, 1974.
- [72] CONWAY, J.G., Absorption spectrum of UF_4 and the energy levels of uranium V, *J. Chem. Phys.*, 31, 1002–1004, 1959.
- [73] COHEN, D., CARNALL, W.T., Absorption spectra of uranium (III) and uranium (IV) in DClO_4 solution, *J. Phys. Chem.*, 64, 1933–1936, 1960.
- [74] TITLE, R.S., SOROKIN, P.P., STEVENSON, M.J., PETTIT, G.D., SCARDEFIELD, J.E., LANKARD, J.R., Optical spectra and paramagnetic resonance of U^{4+} ions in alkaline earth fluoride lattices, *Phys. Rev.*, 128, 62–66, 1962.
- [75] RYAN, J.L., JORGENSEN, C.K., Electron transfer and $5f \rightarrow 6f$ transitions in uranium(IV), neptunium(IV), plutonium(IV) hexahalides, *Mol. Phys.*, 7, 17–29, 1963.
- [76] PAPPALARDOR, R., JORGENSEN, C.K., Absorption spectra of uranium(IV) in octahedral coordination, *Helv. Phys. Acta*, 37, 79–103 (1964)
- [77] SATTEN, R.A., SCHREIBER, C.L., WONG, E.Y., Energy levels of U^{4+} in an octahedral crystalline field, *J. Chem. Phys.*, 42, 162–171, 1965.
- [78] REISFELD, M.J., CROSBY, G.A., Analysis of the absorption spectrum of cesium uranium(V) hexafluoride, *Inorg. Chem.*, 4, 65–70, 1965.

- [79] JOHNSTON, D.R., SATTEN, R.A., SCHREIBER, C.L., WONG, E.Y., Covalency effects in U^{4+} halide complexes, *J. Chem. Phys.*, 44, 3141–3143, 1966.
- [80] BELL, J.T., BUXTON, S.R., Photoreduction of the uranyl ion with laser light and ethanol-I. Quantum yields and medium effects, *J. Inorg. Nucl. Chem.*, 36, 1575–1579, 1974.
- [81] HECHT, H.G., GRUBER, J.B., Interpretation of the absorption spectrum of single crystal UCl_4 , *J. Chem. Phys.*, 60, 4872–4879, 1974; *Düzelme*: 63, 2773–2774, 1975.
- [82] MACKEY, D.J., RUNCIMAN, W.A., VANCE, E.R., Crystal-field calculations for energy levels of U^{4+} in $ZrSiO_4$, *Phys. Rev. B*, 11, 211–218, 1975.
- [83] DESCLAUX, J.P., FREEMAN, A.J., Dirac-Fock studies of some electronic properties of actinide ions, *J. J. Magn. Magn. Mater.*, 8, 119–129, 1978.
- [84] PYPEN N.C., GRANT, I.P., Studies in multiconfiguration Dirac-Fock theory, *J. Chem. Soc., Faraday Trans.*, 2 74, 1885–1900, 1978.
- [85] THAKUR, L., THAKUR, A.K., Ionization potentials of uranium, neptunium and plutonium, *Indian J. Pure Appl. Phys.*, 17, 538–540, 1979.
- [86] WYART, J.F., KAUFMAN, V., SUGAR, J., Analysis of the spectrum of four-times-ionized uranium (U^5), *Phys. Scr.*, 22, 389–396, 1980.
- [87] GOLDSCHMIDT, Z.B., Spin-dependent interactions in $U V 5f^2$, *Phys. Rev. A*, 27, 740–753, 1983.
- [88] VAN DEURZEN, C.H.H., RAJNAK, K., CONWAY, J.G., Uranium five ($U V$), the 1S_0 level, and a parametric analysis of the $5f^2$ configuration, *J. Opt. Soc. Am. B*, 1, 45–47, 1984.
- [89] CROSSWHITE, H.M., CROSSWHITE, H., Parametric model for f-shell configurations. I. The effective-operator hamiltonian, *J. Opt. Soc. Am. B*, 1, 246–254, 1984.
- [90] CONWAY, J.G., WORDEN, E.F., BRAULT, J.W., HUBBART, R.P., WAGNER, J.J., Uranium spectrum between 1.8 and 5.5 microns emitted from a hollow cathode, *At. Data Nucl. Data Tables*, 31, 299–358, 1984.
- [91] RASHID, K., SAADI, M.Z., YASIN, M., Dirac-Fock total energies, ionization energies, and orbital energies for uranium ions $U I$ to $U XCII$, *At. Data Nucl. Data Tables*, 40, 365–378, 1988.
- [92] RAHMAN, H.U., Chebyshev-series representation for the energy levels of U^{4+} , *Nuovo Cimento, D*, 17, 1189–1196, 1995.

- [93] ELIAV, E., KALDOR U., ISHIKAWA, Y., Relativistic coupled-cluster method: Intrashell excitations in the f^2 Shells of Pr^{+3} and U^{+4} , Phys. Rev. A, 51, 225–230, 1995.
- [94] SETH, M., DYALL, K.G., SHERPARD, R., WAGNER, A., The calculation of f-f spectra of lanthanide and actinide ions by the MCDF-CI method, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 34, 2383–2406, 2001.
- [95] KAUFMAN, V., RADZIEMSKI, L.J. Jr., The sixth spectrum of uranium (U VI), J. Opt. Soc. Am., 66, 599–600, 1976.
- [96] CHURCH, D.A., DRUETTA, M., DUNFORD, R., LIU, C.-J., FISCHER, C.F., IDREES, M., UMAR, V.M., Collision spectroscopy of low-energy-beam U^{5+} ions, J. Opt. Soc. Am. B, 9, 2159–2162, 1992.
- [97] LOTZ, W., Electron binding energies in free atoms, J. Opt. Soc. Am., 60, 206–210, 1970.
- [98] NUGENT, L.J., VANDER SLUIS, K.L., FRICKE, B., MANN, J.B., Electronic configuration in the ground state of atomic lawrencium, Phys. Rev. A, 9, 2270–2272, 1974.
- [99] DESCLAUX, J.-P., FRICKE, B., Relativistic prediction of the ground state of atomic lawrencium, J. Phys., 41, 943–946, 1980.
- [100] WIJESUNDERA, W.P., VOSKO, S.H., PARPIA, F.A., Relativistic and correlation effects in the ground state of atomic lawrencium, Phys. Rev. A, 51, 278–282, 1995.
- [101] ELIAV, E., KALDOR, U., ISHIKAWA, Y., Transition energies of ytterbium, lutetium, and lawrencium by the relativistic coupled-cluster method, Phys. Rev. A, 52, 291–296, 1995.
- [102] ZOU, Y., FISCHER, C.F., Resonance transition energies and oscillator strengths in lutetium and lawrencium, Phys. Rev. Lett., 88, 183001, 2002.
- [103] FRITZSCHE, S., DONG, C.Z., KOIKE, F., UVAROV, A., The low-lying level structure of atomic lawrencium ($Z=103$): Energies and absorption rates, Eur. Phys. J. D, 45, 107–113, 2007.
- [104] BORSHEVSKY, A., ELIAV, E., VILKAS, M.J., ISHIKAWA, Y., KALDOR, U., Transition energies of atomic lawrencium, Eur. Phys. J. D, 45, 115–119, 2007.
- [105] NIST atomic spectra and database,
<http://www.nist.gov/pml/data/asd.cfm>, Şubat 2011.
- [106] Energy levels and atomic spectra of actinides,
<http://www.lac.u-psud.fr/Database/Contents.html>, Şubat 2011.

- [107] CORLISS, C.H., BOZMAN, W.R., Experimental transition probabilities for spectral lines of seventy elements, *Nat. Bur. Stand.*, 53, 1962.
- [108] MOORE, C.E., Ionization potentials and ionization limits derived from the analysis of optical spectra, *Nat. Stand. Ref. Data Ser.*, 34, 22, 1970.
- [109] MOORE, C.E., Atomic energy levels as derived from the analysis of optical spectra—Molybdenum through lanthanum and hafnium through actinium, *Nat. Bur. Stand.*, 245, 1971.
- [110] MOORE, C.E., A multiplet table of astrophysical interest, revised edition, part I. Table of multiplets, part II. finding list of all lines in the table of multiplets, *Nat. Stand. Ref. Data Ser.*, 40, 261, 1972.
- [111] BAND I.M., TRZHASKOVSKAYA, M.B., Eigenvalues, electronic charge densities in the vicinity of the nuclei and expectation values in self-consistent potentials for free atoms and ions, $64 \leq Z \leq 94$, *Konstantinov Inst. Nucl. Phys. Acad. Sci. USSR Report* 92, 51, 1974.
- [112] FRAGA, S., Electronic structure of the transactinides with $6d^N 7s^2$, $7p^N$, and $8s^N$ Configurations, *An. Fis.*, 70, 249–252, 1974.
- [113] MEGGERS, W.F., CORLISS, C.H., SCRIBNER, B.F., Tables of spectral-line intensities, part I—Arranged by elements, part II—Arranged by wavelengths, *Natl. Bur. Stand. Monograph* 145, *Nat. Bur. Stand.*, 600, 1975.
- [114] READER, J., CORLISS, C.H., WIESE, W.L., MARTIN, G.A., Wavelengths and transition probabilities for atoms and atomic ions, part. I. wavelengths, part II. transition probabilities, *Nat. Stand. Ref. Data Ser.*, 68, 415, 1980.
- [115] FRIEDEL, J., Lanthanides and actinides. A historical perspective, *J. J. Magn. Mater.*, 63–64, 1–8, 1987.
- [116] GURTOVENKO, E.A., KOSTIK, R.I., Fraunhofer spectra and the system of solar oscillator strengths, *Naukova Dumka*, 198, 1989.
- [117] JOHANSSON, B., Structural and electronic relationship between the lanthanide and actinide elements, *Hyperfine Interactions*, 128, 41–66, 2000.
- [118] JOHANSSON B., LI, S., The actinides—a beautiful ending of the periodic table, *Journal of Alloys and Compounds*, 444–445, 202–206 2007.
- [119] GAIGALAS, G., GAIDAMAUSKAS, E., RUDZIKAS, Z., MAGNANI, N., CACIUFFO, R., The role of atomic correlations in the theoretical study of minor actinide ions, *Journal of Nuclear Materials*, 385, 66–67, 2009.
- [120] MARTIN, W.C., WIESE, W.L., Atomic spectroscopy, Editör DRAKE, G.W.F., Springer, USA, 2006.

- [121] MARTIN W.C., WIESE, W.L., Atomic spectroscopy, Editör Drake, G.W.F., AIP Press, USA, 1996.
- [122] RADZIG A.A., SMIRNOV, B.M., Reference data on atoms, molecules, and ions, Springer, USA, 1985.
- [123] READER, J., CORLISS, C.H., Line spectra of the elements, Editör Lide, D.R., CRC Press, USA, 2005.
- [124] HARRISON, G.R., M.I.T wavelength tables, MIT Press, USA, 429, 1969.
- [125] MOORE, C.E., A multiplet table of astrophysical interest. Revised edition. part I – Table of multiplets, Contrib. Princeton Univ. Obs., 20(1), 1–110, 1945.
- [126] MOORE, C.E., A multiplet table of astrophysical interest. Revised edition. part II – Finding list of all lines in the table of multiplets, Contrib. Princeton Univ. Obs., 20(2), 1–96, 1945.
- [127] CARLSON, T.A., LU, C.C., TUCKER, T.C., NESTOR, V.W., MALIK, F.B., Eigenvalues, radial expectation values and potentials for free atoms from $Z=2$ to 126 as calculated from relativistic Hartree-Fock Slater atomic wave functions, Oak Ridge National Lab. Report 4614, 267, 1970.
- [128] HUGHES, D.S., ECKART, C., The effect of the motion of the nucleus on the spectra of Lr I and Lr II, Physical Review, 36, 694–698, 1930.
- [129] ÖZDEMİR, L., ÜRER, G., Electric dipole transition parameters for low-lying levels for neutral actinium, Acta Phys. Pol. A, 118, 563–569, 2010.
- [130] ÜRER, G., ÖZDEMİR, L., Energy levels and electric dipole transitions for neutral actinium ($Z = 89$), Arab. J. Sci. Eng. A-Sci. (kabul edildi) 2010.
- [131] ÜRER, G., ÖZDEMİR, L., KARAÇOBAN, B., Valence correlation and relativistic effects for low-lying levels in neutral lawrencium, Balkan Physics Letters, 18, 181051, 383–386, 2010.
- [132] KARAÇOBAN, B., ÖZDEMİR, L., ÜRER, G., Multiconfiguration atomic structure calculations: MCHF and MCDF, Balkan Physics Letters, 18, 181053, 393–398, 2010.
- [133] ÜRER, G., ÖZDEMİR, L., KARAÇOBAN, B., The level structure of atomic lawrencium ($Z=103$): A MCDF study, Türk Fizik Derneği 27. Uluslararası Fizik Kongresi, İstanbul-TÜRKİYE, 502, 2010.
- [134] ÜRER, G., ÖZDEMİR, L., The level structure of singly ionized actinium, Romanian Journal of Physics, (incelemede), 2010.

- [135] ÜRER, G., ÖZDEMİR, L., Excitation energies and E1, E2, and M1 transition parameters for Ac III, Chinese Journal of Phys. (Kabul edildi), 2010.
- [136] ÜRER, G., ÖZDEMİR, L., Energies and electric dipole transitions for low-lying levels of Pa IV and U V, Acta Phys. Pol. A, (incelemede), 2011.
- [137] FISCHER, C.F., TACHIEV, G., GAIGALAS, G., GODEFROID, M.R., An MCHF atomic-structure package for large-scale calculations, Comput. Phys. Comm., 176, 559–579, 2007.
- [138] JÖNSSON, P., HE, X., FISCHER F.C., GRANT, I.P., The grasp2K relativistic atomic structure package, Comput. Phys. Comm. 177, 597–622, 2007.
- [139] MORTON, D.C., Atomic data resonance absorption lines II. Wavelengths longward of the Lyman limit for heavy elements, Astron. Astrophys., Suppl. Ser., 130, 403–436, 2000; Düzeltme: 132, 411, 2001.

ÖZGEÇMİŞ

Güldem ÜRER, 17.10.1980'de Adapazarı'nda doğdu. İlk, orta ve lise eğitimini Adapazarı'nda tamamladı. 1998 yılında başladığı Sakarya Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümündeki lisans öğrenimini 2002 yılında bitirdi. 2004 yılında Sakarya Üniversitesinde Araştırma Görevlisi olarak çalışmaya başladı. 2005 yılında Sakarya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim dalındaki yüksek lisans öğrenimini tamamladı. Aynı yıl, yine bu enstitüde doktora öğrenimine başladı. Halen aynı üniversitedeki doktora öğrenimine ve görevine devam etmektedir.