

T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

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

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Büşra ALPARSLAN

Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK

Tez Danışmanı : Yrd. Doç. Dr. Betül USTA

Haziran 2017

T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ


ÜÇ KEZ İYONLAŞMIŞ SERYUMUN (Ce IV) ATOMİK
YAPI HESAPLAMALARI


YÜKSEK LİSANS TEZİ

Büşra ALPARSLAN

Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK

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


Prof. Dr.
Seda SAĞDINÇ
Jüri Başkanı


Prof. Dr.
Leyla ÖZDEMİR
Üye


Yrd. Doç. Dr.
Betül USTA
Üye

BEYAN

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



Büşra ALPARSLAN

01.06.2017

TEŐEKKÜR

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

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

İÇİNDEKİLER

TEŞEKKÜR	i
İÇİNDEKİLER	ii
KISALTMALAR LİSTESİ	iv
ŞEKİLLER LİSTESİ	v
TABLolar LİSTESİ	vi
ÖZET	vii
SUMMARY	vii
BÖLÜM 1.	
GİRİŞ	1
BÖLÜM 2.	
HESAPLAMA YÖNTEMİ	4
2.1. Merkezi Alan Yaklaşıklığı ve Çarpım Dalga Fonksiyonları.....	4
2.2. Hartree-Fock (HF) Yaklaşıklığı	8
2.3.Çok Elektronlu Atomlarda Elektronların Karşılıklı Etkileşmesi	9
2.4. Relativistik Hartree-Fock (HFR) Yöntemi.....	10
2.4.1. Bir-elektron ve toplam bağlanma enerjileri.....	11
2.4.2. Enerji seviyelerinin Landé g-çarpanları.....	14
2.4.3. Relativistik düzeltmeler.....	16
2.5. Işımalı Geçişler.....	18
2.5.1. Elektrik dipol geçişleri.....	18
2.6. HFR ile Atomik Yapı Hesaplama Adımları.....	22

BÖLÜM 3.

TARTIŞMA VE SONUÇ	25
3.1. Ce IV'ün Bazı Seviyelerinin Enerjileri, Landé g-çarpanları ve Yarı Ömürleri.....	26
3.2. Ce IV'ün Elektrik Dipol Geçişleri için Dalga Boyları, Ağırlıklı Salıncı Şiddetleri ve Geçiş Olasılıkları.....	39
KAYNAKLAR.....	50
ÖZGEÇMİŞ.....	52

KISALTMALAR LİSTESİ

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

ŞEKİLLER LİSTESİ

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

TABLolar LİSTESİ

Tablo 3.1.	Ce IV'ün düşük seviyelerinin E enerjileri (cm^{-1}) ve Landé g- çarpanları.....	27
Tablo 3.2.	Ce IV'ün yüksek uyarılmış seviyelerinin E enerjileri (cm^{-1}) ve Landé g-çarpanları.....	29
Tablo 3.3.	Ce IV'ün $5p^65d$ ve $5p^66p$ seviyeleri için yarı ömürleri (ns).....	37
Tablo 3.4.	Ce IV'ün bazı uyarılmış seviyelerinin yarı ömürleri (ns)	37
Tablo 3.5.	Ce IV'ün elektrik dipol (E1) geçişleri için λ dalga boyları (Å), $\log(gf)$ logaritmik ağırlıklı salıncı şiddetleri ve gA_{ki} ağırlıklı geçiş olasılıkları (s^{-1}).....	42

ÖZET

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

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

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

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

SUMMARY

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

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

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

BÖLÜM 1. GİRİŞ

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

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

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

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

değerlik (valans) elektronuyla basit bir elektronik yapıya sahiptir. Ce IV'ün taban konfigürasyonu $[Cd]5p^64f$ ve uyarılmış halleri de $[Cd]5p^6nl$ şeklindedir.

Üç kez iyonlaşmış seryumla ilgili mevcut çalışmalar nötral ya da diğer iyonlaşmış hallerine göre daha azdır. Ce IV'ün $6s-6p$ spektrumundaki sınıflandırılmış ilk çizgileri, Gibbs ve White tarafından verilmiştir [2]. Seryumun yoğunlaştırılmış kıvılcım spektrumu mor ötesi ışınlarda Badami tarafından incelenmiştir [3]. $5p^65d$ taban konfigürasyonu ile enerji seviyelerinin ilk seti Lang tarafından sunulmuştur [4]. Lang, Ce IV'ün $4f-5d$ çoklu geçişinin yerleştirilmesinde ve $5p^64f$ gibi taban konfigürasyonunun belirlenmesinde başarılı olmuştur [5]. Lang tarafından bulunan $6d^2D$ terimi çok büyük bir ince yapı yarılmasına sahiptir [6]. Ce IV'ün enerji seviyelerinin derlemesi Martin ve çalışma arkadaşları tarafından verilmiştir [7]. Migdalek ve Baylis iyonlaşma potansiyellerinde, öz kutuplaşması, gevşeme ve relativistik etkilerin önemini çalışmışlardır [8]. Daha sonra Ce IV'teki $6s-6p$ geçişleri için relativistik tek-konfigürasyonlu Hartree-Fock yöntemi ile salınıcı şiddetlerini rapor etmişlerdir [9]. Tek-konfigürasyonlu relativistik Hartree-Fock iyonlaşma potansiyelleri Migdalek ve Bojara tarafından öz polarizasyon için iki farklı yaklaşıklık kullanılarak elde edilmiştir [10]. Migdalek ve Wyrozumska relativistik model potansiyel yaklaşıklığının farklı çeşitleri ile $6s-6p$, $5d-6p$, $4f-5d$, $5d-5f$, $5d-6f$, $6p-6d$ ve $6p-7d$ geçişlerinin salınıcı şiddetlerini hesaplamışlardır. Bu yöntemler öz polarizasyonu içeren fakat değerlik-öz elektronlarının değiş tokuşunu içermeyen model potansiyelli, öz-polarizasyonlu ve yarı klasik değiş-tokuşlu model potansiyelli ve öz-polarizasyonlu ve deneysel olarak düzeltilmiş değiş-tokuşlu model potansiyelli yöntemleridir [11]. Zhang ve çalışma arkadaşları lazer spektroskopik teknikleri kullanarak Ce IV için ilk yarı ömür ölçümlerini rapor etmişlerdir [12]. Ce IV için enerjiler, geçiş olasılıkları ve elektron-dipol-momentini artırma faktörleri Savukov ve çalışma arkadaşları tarafından relativistik çok cisim katkı teorisi kullanılarak sunulmuştur [13]. Reader ve Wyart üç kez iyonlaşmış seryumun enerji seviyelerini ve dalga boyu ölçümlerini rapor etmişlerdir [14]. Zilitis, Ce IV'ün rezonans geçişleri için Dirac-Fock yöntemi ile salınıcı şiddetlerini hesaplamıştır [15]. Ayrıca, Glushkov içerisinde Ce IV'ünde bulunduğu Cs ve Rb benzeri iyonların salınıcı şiddetlerini sunmuştur [16].

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

BÖLÜM 2. HESAPLAMA YÖNTEMİ

2.1. Merkezi Alan Yaklaşıklığı ve Çarpım Dalga Fonksiyonları

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

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

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

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.

$$H_0 \psi_0(q_1, \dots, q_N) = E_0 \psi_0(q_1, \dots, q_N) \quad (2.2)$$

olduğundan ve H_0 ayrıştırılabildiği için özdeğer ve özfonksiyonlar sırasıyla

$$E_0 = \sum_{i=1}^N E_i \quad (2.3)$$

ve

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

olarak yazılır. Schrödinger denklemi de böylece

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

olur. Burada $U(r)$ potansiyeli

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

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

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

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

Bu fonksiyon

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

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

$$\pi = (-1)^{l_1} (-1)^{l_2} \dots (-1)^{l_N} = (-1)^{\sum l_i} \quad (2.9)$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

2.2. Hartree-Fock (HF) Yaklaşıklığı

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

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

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

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

göre deęişiklik gösterir. Radyal fonksiyon sadece (nl) kuantum sayılarına baęlı ise dalga fonksiyonu bir tekli Slater determinantı şeklindedir. Bu durumda yaklaşıklıęa ‘tekli-determinant Hartree-Fock (SDHF) yöntemi’ denir.

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

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

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

2.3. Çok Elektronlu Atomlarda Elektronların Karşılıklı Etkileşmesi

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

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

$$E^{Kor.} = E^{Gerçek} - E^{HF} \quad (2.14)$$

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

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

2.4. Relativistik Hartree-Fock (HFR) Yöntemi

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

$$H = -\sum_i \nabla_i^2 - \sum_i \frac{2Z}{r_i} + \sum_{i>j} \frac{2}{r_{ij}} + \sum_i \xi_i(r_i)(L_i \cdot S_i) \quad (2.15)$$

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

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

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

$$H\Psi^k = E^k\Psi^k \quad (2.17)$$

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

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

2.4.1. Bir-elektron ve toplam bağlanma enerjileri

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

$$\sum_{i=1}^N f_i \equiv \sum_i f(\mathbf{r}_i) \quad (2.18)$$

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

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

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

$$\langle \Psi | \sum_i \xi_i(\mathbf{l}_i \cdot \mathbf{s}_i) | \Psi \rangle = \sum_i \langle n_i l_i m_i m_{s_i} | \xi(\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}) | n_i l_i m_i m_{s_i} \rangle \quad (2.20)$$

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

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

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

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

olur. Tüm N elektronun konfigürasyon-ortalama toplam bağlanma enerjisi

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

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

şeklinde yazılabilir. Yani, i yörüngesindeki bir elektronun ortalama bir-elektron bağlanma enerjisi, kinetik enerji, çekirdek ile etkileşimden oluşan potansiyel enerji ve atomdaki diğer $N-1$ elektronla etkileşim enerjisinin toplamıdır. Atomun ortalama bağlanma enerjisi, tüm kinetik enerji ve tüm elektron-çekirdek enerjileri toplamı ve tüm elektron çiftleri üzerinden toplanan elektron-elektron Coulomb etkileşimlerinden oluşur. Elektron-elektron Coulomb etkileşimlerinden dolayı konfigürasyon-ortalama toplam bağlanma enerjisinin $(E_{ort.}) \sum E^i$ 'ye eşit olmadığı açıktır. (2.22)'deki terimler kısaca, kinetik enerji için

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

elektron-çekirdek etkileşme enerjisi için

$$E_n^i \equiv \langle i | -2Z/r | i \rangle = \int_0^\infty (-2Z/r) |P_i(r)|^2 dr \quad (2.26)$$

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

$$E^{ij} = F^0(ij) - \frac{1}{2} \sum_k \binom{l_i \quad k \quad l_j}{0 \quad 0 \quad 0}^2 G^k(ij) \quad (2.27)$$

ve özdeş elektronlar için

$$E^{ii} = F^0(ii) - \frac{(2l_i+1)}{(4l_i+1)} \sum_{k>0} \binom{l_i \quad k \quad l_i}{0 \quad 0 \quad 0}^2 F^k(ii) \quad (2.28)$$

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

$$R^k(\alpha, \beta; \alpha', \beta') = \int_0^\infty \int_0^\infty P(\alpha; r) P(\alpha'; r) U^k(r, s) P(\beta; s) P(\beta'; s) dr ds \quad (2.29)$$

Burada

$$\begin{aligned} U^k(r, s) &= \frac{s^k}{r^{k+1}}, \quad r \geq s \\ &= \frac{r^k}{s^{k+1}}, \quad r < s \end{aligned} \quad (2.30)$$

şeklindedir. Bu durumda

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

ve

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

dir.

2.4.2. Enerji seviyelerinin Landé g-çarpanları

Zeeman etkisi, dış manyetik alan ile atomun manyetik momenti arasındaki

$$H_m = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} \quad (2.33)$$

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

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

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

$$\Delta E(\gamma JM) = \langle \gamma JM | H_m | \gamma JM \rangle = \mu_B B \langle \gamma JM | L_z + g_S S_z | \gamma JM \rangle \quad (2.35)$$

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

şeklinindedir. CSF'ler arasındaki matris elemanları da

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

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

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

Bu ifade dikkate alındığında enerji yarılmaları

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

olur.

2.4.3. Relativistik düzeltmeler

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

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

Burada kütle-hız ve Darwin katkıları

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

ve

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

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

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

ve

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

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

$$\kappa = \begin{cases} l_i, & j = l_i - 1/2 \\ -l_i - 1, & j = l_i + 1/2 \end{cases} \quad (2.45)$$

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

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

ve buradan da j 'den bağımsız radyal dalga fonksiyonu için

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

diferansiyel denklemi elde edilir. Bu sonucun kütle-hız ve Darwin işlemcilerinin relativistik olmayan diferansiyel denkleme eklendiğinde basitçe elde edildiği görülebilir. Yalnızca fark $[]^{-1}$ 'li terimin bulunmasıdır. Bu spin-yörünge terimidir. Buradaki ek, $r=0$ 'da r^{-3} yerine r^{-2} Darwin terimindeki tekilleri barındırdığı için önemlidir. Spin-yörünge terimini (2.47)'den çıkararak kütle bağımsız radyal

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

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

(2.48) ile karşılaştırma yapıldığında (2.47)'nin sol parantez içindeki çarpan yalnızca V^i 'de P_i 'yi değil onun yanında ε_i 'yi de içerdiğini gösterir. Ancak relativistik terimlerin etkileri küçüktür ve SCF iterasyonuna yakınsamada problem oluşturmaz. HF denklemlerine iki relativistik terimin eklenmesi de 'HFR yöntemi' olarak adlandırılır.

2.5. Işımalı Geçişler

2.5.1. Elektrik dipol geçişleri

Bu yöntemde elektrik dipol momenti üç değişik şekilde incelenmektedir:

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

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

ve

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

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

(2.50) ve (2.51)'deki işlemciler sırasıyla klasik momentum ve kuvvettir. Bu üç alternatif, uzunluk, hız ve ivme şekilleri olarak adlandırılır. Gerçek dalga fonksiyonları kullanıldığında hepsi eşittir fakat yaklaşık dalga fonksiyonları kullanıldığında genellikle oldukça farklı sonuçlar verirler. İvme ve hız şekilleri yaklaşık fonksiyonların türevlerini içerir. Özellikle ivme şekli integrallenen küçük r değerine doğru yoğunlaştığı için kötü sonuçlar verir. Hız şekli, iyi değişim dalga fonksiyonları kullanıldığında ve $|E' - E|$ geçiş enerjisi küçük olmadığı zaman çok iyi sonuçlar verir. Uzunluk şekli büyük r değerleri için doğru sonuç verir. Ancak, bu HF radyal fonksiyonlar kullanıldığında bir dezavantaj sağlar. Uzunluk şekli hesapsal olarak en basittir ve genellikle bu şekil hesaplarda kullanılır.

Elektrik dipol çizgi şiddeti

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

olarak bilinir. Burada

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

$-ea_0$ biriminde ölçülen atomun klasik dipol momentidir.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

veya

$$gf = \frac{8\pi^2 mca_0^2 \sigma}{3h} S \quad (2.58)$$

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

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

olur.

j seviyesindeki hallerin herhangi birinde atomun doğal yarı ömrü

$$\tau_j = \frac{1}{\sum_i A_{ji}} \quad (2.60)$$

ile verilir.

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

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

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

$$\Delta J = J - J' = 0, \pm 1, \dots, \pm k, \quad k \leq J + J' \quad (2.62)$$

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

CSF'lerin farklı açısal momentumları geçiş katılıp katılmamalarına göre aktif veya pasif olarak sınıflandırılabilirler. Pasif momentumlar, aktifler (2.62)'deki kurala göre oluşurken değişmeyecektir. Dikkate alınacak ilk kural, uzaysal ve spin uzayını temsil eden farklı işlemcilerin ranklarına bağlıdır. $\mathbf{E}^{(k)}$ işlemcisinin spinden bağımsız olduğu ve spinlerin daima elektrik çok-kutup geçişleri için pasif olduğu açıktır. Böylece spin için seçim kuralı,

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

olarak verilebilir.

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

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

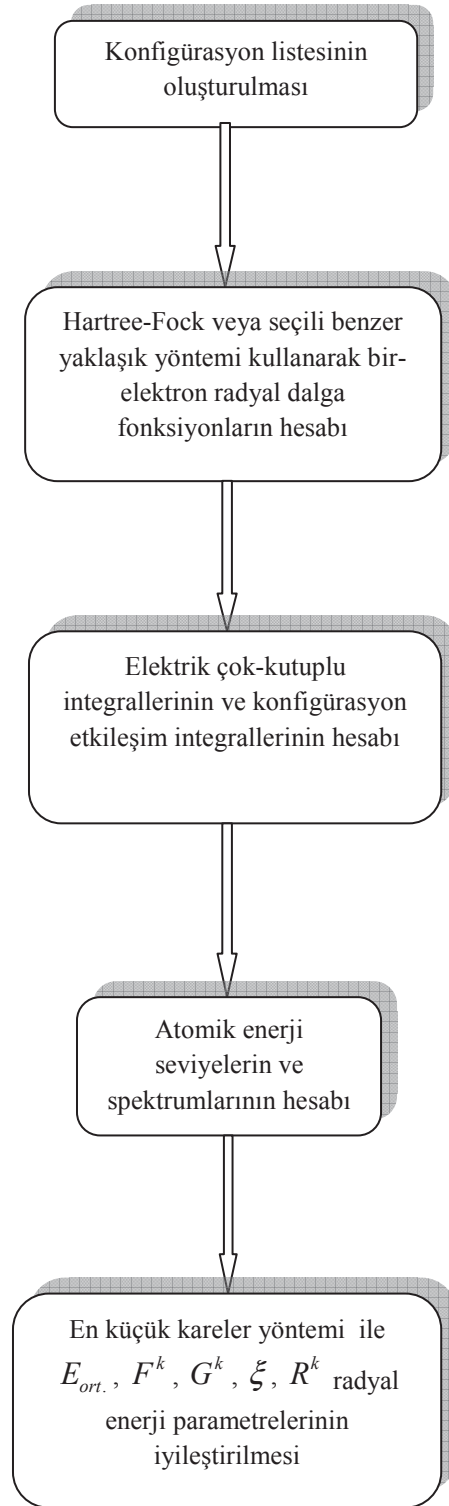
olarak tayin eder.

2.6. HFR ile Atomik Yapı Hesaplama Adımları

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

1. Hartree-Fock veya herhangi bir yaklaşık yöntemi kullanarak özel elektron konfigürasyonlarının herhangi bir sayısının her biri için bir-elektron (bağlı veya serbest) radyal dalga fonksiyonları hesaplanır. Her konfigürasyon için çıkış dosyası konfigürasyonun ortalama enerjisini ($E_{ort.}$) ve bu konfigürasyonun enerji düzeylerini hesaplamakta gerekli olan radyal Coulomb (F^k ve G^k) ve spin-yörünge integrallerini içerir.
2. Konfigürasyonların her bir çiftleri arasındaki elektrik dipol ($E1$) radyal integralleri ve etkileşme konfigürasyonlarının her bir çifti arasındaki konfigürasyon-etkileşme Coulomb integrallerini (R^k) hesaplamak için gerekli dalga fonksiyonları kullanılır. Hesaplanan veriler atomik spektrumların hesaplanmasında kullanılır.
3. Özdeğer (enerji seviyeleri) ve özvektörleri hesaplamak için her bir matris köşegenleştirilerek J toplam açıl momentumun olası her değeri için enerji matrisi kurulur.

4. $E1$ ışıklı spektrumu için dalga boyları, salınıcı şiddetleri, geçiş olasılıkları ve yarı ömürler hesaplanır.
5. Daha yüksek doğrulukta sonuçlar istenildiğinde, tekrarlamalı bir yöntemle deneysel enerji seviyelerine en-küçük kareler yöntemi ile bir uydurulmasını yaparak $E_{ort.}$, F^k , G^k , ξ ve R^k çeşitli radyal enerji parametreleri değiştirilir. En küçük kareler uydurma parametrelerinin sonuçları atomik enerji seviyelerinin ve spektrumlarının hesaplanmasında tekrar kullanılabilir



Şekil 2.1. HFR ile atomik yapı hesap adımları

BÖLÜM 3. TARTIŞMA VE SONUÇ

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

Ce IV'ün taban seviyesi $[Xe] 4f^2 F^0_{5/2}$ dir. Hesaplamalar için A, B, C ve D olarak isimlendirilen dört konfigürasyon seti seçildi. Bu konfigürasyon setleri değerlik elektronun üst seviye uyarılmalarına ve öz-değerlik elektronları arasındaki karşılıklı etkileşmelere göre seçilmiştir. A hesabında $[Xe]$ özü dışında nf ($n = 4-30$), np ($n = 6-30$), nd ($n = 5-30$), ng ($n = 5-30$) ve ns ($n = 6-30$) konfigürasyonları, B hesabında $[Cd]$ özü dışında $5p^6nf$ ($n = 4-20$), $5p^6np$ ($n = 6-20$), $5p^54f^2$, $5p^54f6p$, $5p^6nd$ ($n=5-20$), $5p^6ng$ ($n = 5-20$) ve $5p^6ns$ ($n = 6-20$), $5p^54f5d$ ve $5p^54f6s$ konfigürasyonları, C hesabında $[Cd]$ özü dışında $5p^6nf$ ($n = 4 - 10$), $5p^6np$ ($n = 6-10$), $5p^54f^2$, $5p^56p^2$, $5p^54f6p$, $5p^6nd$ ($n = 5-10$), $5p^6ng$ ($n = 5-10$), $5p^6ns$ ($n = 6 - 10$), $5p^54f5d$, $5p^56s6p$, $5p^55d6p$ ve $5p^54f6s$ konfigürasyonları ve D hesabında ise $[Cd]$ özü dışında $5p^6nf$ ($n = 4 - 10$), $5p^6np$ ($n = 6 - 10$), $5p^54f^2$, $5p^56p^2$, $5p^54f6p$, $5p^6nd$ ($n = 5-10$), $5p^6ng$ ($n = 5-10$), $5p^6ns$ ($n = 6 - 10$), $5p^54f5d$, $5p^54f6s$, $5p^54f6d$ ve $5p^55d6p$ konfigürasyonları alınarak hesaplamalar yapıldı.

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

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

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

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

Tablo 3.1.'de $5p^64f$ ($n = 4-6$), $5p^6np$ ($n = 6, 7$), $5p^6nd$ ($n = 5-8$) ve $5p^6ns$ ($n = 6-8$) $5p^6ng$ ($n = 5, 6$) seviyeleri için deneysel [21] ve teorik [11, 13, 14] sonuçları olduğundan sadece bu seviyeler için karşılaştırma yapılmıştır. Enerji sonuçlarının çoğu diğer çalışmalarla iyi bir uyum içindedir. Elde edilen sonuçların doğruluğunu göstermek için yüzde farklar (hata) $[(E_b - E_d)/E_d] \times 100$ hesaplandı. Burada E_b , bu çalışmayı, E_d , diğer çalışmaları göstermektedir. Elde edilen sonuçlar ile diğer deneysel çalışmalardaki [21] sonuçlar arasındaki yüzde fark, $5p^65f \ ^2F^o_{7/2}$ ve $5p^66d$ seviyeleri dışında %0,00–0,02 aralığındadır. A, B, C ve D hesaplamaları için diğer teorik sonuçlar arasındaki yüzde farklar, [13] ile %1,28–4,57 ve [14] ile %0,00–0,71 aralığında olduğu görülmektedir. [11] çalışma ile olan yüzde farklar ise A, B, C ve D hesaplamaları için sırasıyla %0,00–1,35, %0,00–1,33, %0,00–1,64 ve %0,00–1,07 aralığındadır. $5p^66d$ uyarılmış seviyeleri için uyum azdır. $5p^66s$ ve $5p^66p$ seviyeleri dışında, Landé g -çarpanları sonuçları ilk kez bu çalışma ile rapor edilmiştir [18]. Landé g -çarpanlarının astrofizik gibi birçok bilimsel alanda önemi iyi bilinmektedir.

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

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

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

Tablo 3.1. (Devamı)

Seviyeler		E (cm ⁻¹)		g-çarpanı		
Konf.	Terim	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	
	² F _{7/2} ^o	A	184746,00	184746 ^a	1,143	–
		B	185580,42	184744,88 ^c	1,141	
		C	184744,80	183436,98 ^d	1,143	
		D	184774,00		1,162	
5p ⁶ 7p	² P _{1/2} ^o	A	198761,50	198761,5 ^c	0,666	–
		B	198173,30	197982,25 ^d	0,536	
		C	197429,09		0,540	
		D	198168,10		0,755	
	² P _{3/2} ^o	A	201189,60	201189,59 ^c	1,334	–
		B	201533,68	199939,75 ^d	1,362	
		C	200716,00		1,415	
		D	201340,30		1,335	
5p ⁶ 7d	² D _{3/2}	A	221661,00	221661 ^a	0,800	–
		B	221623,44	221661,7 ^c	0,794	
		C	221658,95	221857,18 ^d	0,794	
		D	221660,00		0,800	
	² D _{5/2}	A	221838,00	221838 ^a	1,200	–
		B	221862,26	222579,25 ^c	1,199	
		C	221852,27	222192,54 ^d	1,194	
		D	221839,80		1,200	
5p ⁶ 8s	² S _{1/2}	A	225128,00	225128 ^a	2,002	–
		B	225128,11		2,002	
		C	225135,01		2,002	
		D	225128,00		2,002	
5p ⁶ 6f	² F _{5/2} ^o	A	225217,50	224759,74 ^d	0,857	–
		B	225793,80		0,857	
		C	224795,60		0,857	
		D	225612,50		0,857	
	² F _{7/2} ^o	A	225293,40	224818,12 ^d	1,143	–
		B	225912,60		1,143	
		C	224911,90		1,143	
		D	225746,60		1,143	
5p ⁶ 5g	² G _{7/2}	A	225625,00	225625 ^a	0,889	–
		B	225577,88		0,889	
		C	225635,35		0,888	
		D	225623,92		0,889	
	² G _{9/2}	A	225625,00	225625 ^a	1,111	–
		B	225669,37	227249,18 ^c	1,111	
		C	225629,79		1,111	
		D	225621,78		1,111	
5p ⁶ 8d	² D _{3/2}	A	247280,00	247279,6 ^c	0,800	–
		B	247714,52		0,800	
		C	245558,76		0,800	
		D	247993,00		0,800	
	² D _{5/2}	A	247504,00	247504,22 ^c	1,200	–
		B	247807,11		1,201	
		C	245960,27		1,201	
		D	248731,80		1,200	

Tablo 3.1. (Devamı)

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

^aNIST Atomik Spektrum Veritabanı [21], ^bSavukov ve arkadaşları [13], ^cReader ve Wyart [14], ^dMigdalek ve Wyrozumska [11]

Tablo 3.2. Ce IV'ün yüksek uyarılmış seviyelerinin E enerjileri (cm⁻¹) ve Landé g-çarpmanları

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

Tablo 3.2. (Devamı)

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

Tablo 3.2. (Devamı)

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

Tablo 3.2. (Devamı)

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

Tablo 3.2. (Devamı)

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

Tablo 3.2. (Devamı)

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

Tablo 3.2. (Devamı)

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

Tablo 3.2. (Devamı)

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

Ce IV'ün uyarılmış seviyeleri için yarı ömürleri (ns) Tablo 3.3. ve Tablo 3.4.'te verilmektedir. Uyarılmış seviyelerinin yarı ömürleri, bu seviyelerden daha düşük seviyelere olan tüm mümkün elektrik dipol geçişler üzerinden (2.60) formülüne göre hesaplandı. Ce IV'ün 5p⁶5d ve 5p⁶6p seviyeleri için hesaplanan yarı ömürler mevcut olan deneysel ve teorik sonuçlarla Tablo 3.3.'te karşılaştırılmıştır. Bu tablodan görüleceği üzere B hesaplamasından elde edilen yarı ömürler diğer çalışmalarla daha uyumludur. Ayrıca Ce IV'teki 5p⁶nf (n = 5 – 30), 5p⁶np (n = 7 – 30), 5p⁶nd (n = 6–30), 5p⁶ng (n = 5–30) ve 5p⁶ns (n = 7 – 30) konfigürasyonları için yarı ömürler ilk kez bu çalışma ile Tablo 3.4.'te verilmektedir [18].

Tablo 3.3. Ce IV'ün 5p⁶5d ve 5p⁶6p seviyelerinin yarı ömürleri (ns)

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

^aZhang ve arkadaşları [12, β: istatistiksel hata; θ: tahmini sistematik hata], ^bReader ve Wyart [14], ^cZilitis [15]

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

Seviyeler		Yarı ömürler (ns)				Seviyeler		Yarı ömürler (ns)			
Konf.	Terim	Bu çalışma				Konf.	Terim	Bu çalışma			
		A	B	C	D			A	B	C	D
5p ⁶ 6d	² D _{5/2}	0,72	1,05	1,40	1,50	5p ⁶ 10s	² S _{1/2}	1,98	1,87	1,90	1,88
	² D _{3/2}	0,53	0,83	0,78	0,73	5p ⁶ 7g	² G _{7/2}	1,45	0,77	0,61	1,04
5p ⁶ 7s	² S _{1/2}	0,67	0,96	0,65	0,95		² G _{9/2}	1,43	0,72	0,55	1,00
5p ⁶ 5f	² F _{5/2}	0,16	0,16	0,16	0,16	5p ⁶ 10p	² P _{1/2}	5,35	4,83	3,67	4,51
	² F _{7/2}	0,16	0,17	0,17	0,19		² P _{3/2}	5,33	4,98	3,54	4,73
5p ⁶ 7p	² P _{1/2}	1,14	2,00	1,76	1,33	5p ⁶ 9f	² F _{5/2}	1,07	1,03	1,06	0,95
	² P _{3/2}	0,96	1,06	1,27	1,06		² F _{7/2}	1,09	1,08	1,15	1,27
5p ⁶ 7d	² D _{3/2}	1,42	0,12	0,38	0,34	5p ⁶ 10d	² D _{3/2}	5,18	1,36	1,13	3,13
	² D _{5/2}	1,67	0,20	0,61	0,49		² D _{5/2}	5,67	1,29	1,06	3,19
5p ⁶ 8s	² S _{1/2}	0,95	0,98	0,87	0,91	5p ⁶ 11s	² S _{1/2}	2,66	2,605	-	-
5p ⁶ 6f	² F _{5/2}	0,28	0,28	0,30	0,29	5p ⁶ 8g	² G _{7/2}	2,01	1,19	1,01	1,58
	² F _{7/2}	0,29	0,25	0,31	0,30		² G _{9/2}	2,04	1,12	0,95	1,64
5p ⁶ 5g	² G _{7/2}	0,63	0,15	0,75	0,64	5p ⁶ 11p	² P _{1/2}	7,75	7,29	-	-
	² G _{9/2}	0,64	0,34	0,75	0,71		² P _{3/2}	7,78	7,36	-	-
5p ⁶ 8d	² D _{3/2}	1,94	0,18	0,05	0,46	5p ⁶ 10f	² F _{5/2}	1,521	1,44	1,40	1,00
	² D _{5/2}	2,26	0,14	0,03	0,45		² F _{7/2}	1,545	1,52	1,80	0,83
5p ⁶ 6g	² G _{7/2}	0,94	0,42	0,27	0,58	5p ⁶ 11d	² D _{3/2}	7,20	2,19	-	-
	² G _{9/2}	0,96	0,35	0,19	0,53		² D _{5/2}	7,73	2,11	-	-
5p ⁶ 8p	² P _{1/2}	2,05	1,94	1,87	2,18	5p ⁶ 12s	² S _{1/2}	3,54	3,26	-	-
	² P _{3/2}	1,80	1,90	1,72	1,98	5p ⁶ 12p	² P _{1/2}	10,75	9,57	-	-
5p ⁶ 7f	² F _{5/2}	0,46	0,45	0,59	0,54		² P _{3/2}	10,85	8,85	-	-
	² F _{7/2}	0,47	0,46	0,61	0,53	5p ⁶ 9g	² G _{7/2}	2,70	1,67	1,49	2,21
5p ⁶ 9s	² S _{1/2}	1,37	1,33	1,25	1,23		² G _{9/2}	2,74	1,60	1,40	2,21
	² P _{1/2}	3,57	2,31	2,83	3,48	5p ⁶ 11f	² F _{5/2}	2,08	1,42	-	-
5p ⁶ 9p	² P _{3/2}	3,28	2,59	1,65	2,39		² F _{7/2}	2,11	2,11	-	-
	² F _{5/2}	0,73	0,65	0,65	0,74	5p ⁶ 12d	² D _{3/2}	9,51	3,30	-	-
5p ⁶ 8f	² F _{7/2}	0,74	0,65	0,84	0,70		² D _{5/2}	10,10	3,22	-	-
	² D _{3/2}	3,55	0,66	0,46	1,59	5p ⁶ 13p	² P _{1/2}	14,42	11,00	-	-
5p ⁶ 9d	² D _{5/2}	4,18	0,60	0,41	1,64		² P _{3/2}	14,60	5,98	-	-

Tablo 3.4. (Devamı)

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

Tablo 3.4. (Devamı)

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

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

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

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

Tablo 3.5.'te $5p^66p - 5p^66s$, $5p^66p - 5p^65d$, $5p^66d - 5p^66p$, $5p^67d - 5p^66p$, $5p^65d - 5p^64f$, $5p^65f - 5p^65d$, $5p^66f - 5p^65d$, $5p^67p - 5p^66s$, $5p^67p - 5p^65d$, $5p^66d - 5p^64f$, $5p^67s - 5p^66p$, $5p^67d - 5p^65f$, $5p^65g - 5p^64f$, $5p^65g - 5p^65f$, $5p^67d - 5p^65f$, $5p^68d - 5p^64f$, $5p^68d - 5p^67p$, $5p^66g - 5p^64f$, $5p^66g - 5p^65f$ ve $5p^68s - 5p^66p$ elektrik dipol (E1) geçişleri için elektrik dipol (E1) geçişleri için λ dalga boyları (Å), $\log(gf)$ logaritmik ağırlıklı salınıcı şiddetleri ve A_{ki} geçiş olasılıkları (s^{-1}) sunulmuştur. Bu geçişler için karşılaştırma değerleri literatürde mevcuttur. Bu nedenle Tablo 3.5.'te diğer hesaplama yöntemleri ve deneyler sonuçları ile elde edilen mevcut çalışmalarla karşılaştırma yapıldı. Elde edilen sonuçlar, bazı geçişler hariç olmak üzere diğer çalışmalarla uyumludur. Bazı geçişler için uyum geçiş olasılıklarında ve salınıcı şiddetlerinde az olmasına rağmen, dalga boylarında iyidir. Bu tablodan görüleceği üzere hesaplamalardan elde edilen salınıcı şiddetleri bazı geçişler hariç diğer çalışmalarla uyumludur. Elde edilen sonuçların doğruluğunu göstermek için $\log gf_{(bu\ çalışmada)} / \log gf_{(diğer\ çalışmalar)}$ oran ortalaması hesapladı. $5p^66p - 2P^o_{3/2} - 5p^65d - 2D_{5/2}$, $5p^65g - 5p^64f$, $5p^67d - 5p^64f$, $5p^68d - 5p^64f$ ve $5p^66g - 2G_{7/2} - 5p^65f - 2F^o_{5/2}$ geçişleri hariç, elde edilen sonuçlar ile diğer çalışma [14] arasındaki oran ortalaması, 1,08 (A hesabı), 0,94 (B hesabı), 0,99 (C hesabı) ve 1,10 (D hesabı) olarak bulunmuştur. Geçiş olasılıkları için literatürde sadece iki çalışma [13,14] mevcuttur. Ayrıca, $5p^67p - 5p^66s$, $5p^65g - 5p^64f$, $5p^67d - 5p^64f$, $5p^68d - 5p^64f$ ve $5p^66g - 2G_{9/2} - 5p^65f - 2F^o_{7/2}$ geçişleri dışında, $gA_{ki(bu\ çalışmada)} / gA_{ki[14]}$ oran ortalaması 1,19 (A hesabı) 1,13 (B hesabı), 1,15 (C hesabı) ve 1,19 (D hesabı) olarak hesaplanmıştır. B ve C hesaplamaları ile elde edilen geçiş sonuçları diğer çalışmalarla daha uyumludur.

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

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

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

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

Tablo 3.5. (Devamı)

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

Tablo 3.5. (Devamı)

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

Tablo 3.5. (Devamı)

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

Tablo 3.5. (Devamı)

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

Tablo 3.5. (Devamı)

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

Tablo 3.5. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)		$\log(gf)$		gA_{ki} (s ⁻¹)		
Üst Seviye		Alt Seviye		Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	
5p ⁶ 8s	² S _{1/2}	5p ⁶ 6p	² P _{3/2} ^o	A	1022,119	1022,12 ^c	-0,888	–	8,27(8)	–
				B	1022,117		-0,895		8,13(8)	
				C	1022,074		-0,839		9,25(8)	
				D	1022,118		-0,859		8,84(8)	

^aReader ve Wyart [14], ^bSavukov ve arkadaşları [13, f ve A_{ki} 'den çevrildi], ^cLang [6], ^dMigdalek ve Wyrozumska [11, f 'den çevrildi], ^eZilitis [15, f 'den çevrildi]

KAYNAKLAR

- [1] Biémont, E., Quinet, P., Recent advances in the study of lanthanide atoms and ions. *Phys. Scr.*, T105: 38–54, 2003.
- [2] Gibbs, R.C., White, H.E., Relations between doublets of stripped atoms in five periods of the periodic table. *Phys. Rev.* 33: 157–162, 1929.
- [3] Badami, J.S., The spectrum of trebly-ionized cerium (Ce IV). *Proc. Phys. Soc.* 43: 53–58, 1931.
- [4] Lang, R.J., The spectrum of trebly ionized cerium. *Can. J. Res., Sect. A* 13: 1–4 (1935).
- [5] Lang, R.J., The F terms of Ce IV. *Phys. Rev.* 49: 552–552, 1936.
- [6] Lang, R.J., The spectrum of trebly ionized cerium. *Can. J. Res., Sect. A* 14: 127–130, 1936.
- [7] Martin, W.C., Zalubas, R., Hagan, L., Atomic Energy Levels-The Rare-Earth Elements (NSRDS-NBS) 60, 91, 1978.
- [8] Migdalek, J., Baylis, W.E., Valence-core electron exchange interaction and the collapse of 4f and 5d orbitals in the cesium isoelectronic sequence. *Phys. Rev. A*, 30: 1603–1609, 1984.
- [9] Migdalek, J., Baylis, W.E., Relativistic Hartree-Fock oscillator strengths for the lowest $s \rightarrow p$ transitions in the first few members of the Rb I and Cs I isoelectronic sequences, with allowance for core polarization. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 22: 127–134, 1979.
- [10] Migdalek, J., Bojara, A., Relativistic effects, core polarisation and relaxation in ionisation potentials along Rb and Cs isoelectronic sequences. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 17: 1943–1951, 1984.
- [11] Migdalek, J., Wyrozumska, M., Relativistic oscillator strengths for the Cs isoelectronic sequence and collapse of f and d orbitals. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 37: 581–589, 1987.

- [12] Zhang, Z.G., Svanberg, S., Quinet, P., Palmeri, P., Biémont, E., Time – resolved laser spectroscopy of multiply ionized atoms: natural radiative lifetimes in Ce IV, *Phys. Rev. Lett.* 87: 273001–4, 2001.
- [13] Savukov, I.M., Johnson, W.R., Safronova, U.I., Safronova, M.S., Energies, transition rates, and electron electric-dipole-moment enhancement factors for Ce IV and Pr V. *Phys. Rev. A*, 67: 042504–5, 2003.
- [14] Reader, J., Wyart, J.F., Observation of inner – shell – excited configurations in triply ionized cerium Ce^{3+} , *Phys. Rev. A* 80: 042517–12, 2009.
- [15] Zilitis, V.A., Oscillator strengths and lifetimes calculated by the Dirac-Fock method for the levels of ions of the cesium isoelectronic sequence. *Opt. Spectrosc.* 117: 513–515, 2014.
- [16] Glushkov, A.V., Oscillator strengths of Cs and Rb-like ions *J. Appl. Spectrosc.* 56: 5–9, 1992.
- [17] Cowan, R.D., *The Theory of Atomic Structure and Spectra*, University of California Press, 1981.
- [18] Karaçoban Usta, B., Alparslan, B., Lifetimes, oscillator strengths and transition probabilities for Ce IV, *Can. J. Phys.* (basımda, doi:10.1139/cjp-2017-0161)
- [19] <http://www.tcd.ie/Physics/People/Cormac.McGuinness/Cowan/>, Eriřim Tarihi: 26.04.2017.
- [20] Fischer, C.F., Brage, T., Jönsson, P., *Computational Atomic Structure-an MCHF Approach*, IOP, Bristol 1997.
- [21] <http://physics.nist.gov/asd>, Eriřim Tarihi: 26.04.2017.

ÖZGEÇMİŞ

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