

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

**BOR VE İYONLARININ SEVİYE YAPILARININ
TEORİK OLARAK İNCELENMESİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Osman AĞAR

Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK

Tez Danışmanı : Doç. Dr. Leyla ÖZDEMİR

Şubat 2011

T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**BOR VE İYONLARININ SEVİYE YAPILARININ
TEORİK OLARAK İNCELENMESİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Osman AĞAR

Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK

Bu tez 07/02/2011 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından Oybirliği ile kabul edilmiştir.


Doç. Dr. Leyla ÖZDEMİR

Jüri Başkanı


Prof. Dr. S. Zeki YILDIZ

Üye


Prof. Dr. İbrahim OKUR

Üye

ÖNSÖZ

Bu çalışmada nötral Bor ve iyonları (B I-V) için seçilen tek pariteli ve çift pariteli konfigürasyonlara ait enerji seviyeleri ve geçiş parametreleri (dalga boyları, ağırlıklı salıncı şiddetleri ve geçiş olasılıkları) hesaplandı. Bu hesaplamalar için çok konfigürasyonlu Hartree-Fock (Multiconfiguration Hartree-Fock-MCHF) yöntemi kullanıldı.

B I-V öz-uyarılmış seviyelerinin incelenmesi konusundaki çalışmamın seçimi, planlanması ve yürütülmesi süresince bilgi birikimi ve yardımlarını benden esirgemeyen ve öncülük eden çok değerli hocam Doç. Dr. Leyla ÖZDEMİR'e teşekkürlerimi sunarım.

Bu çalışmanın teorik hesaplamalarında özveri ile yardımcı olan hocalarım Araş. Gör. Güldem ÜRER ve Araş. Gör. Betül KARAÇOBAN'a teşekkür ederim

Hayatım boyunca maddi ve manevi olarak destekte bulunan, beni bugünlere getiren aileme teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ.....	ii
İÇİNDEKİLER.....	iii
SİMGELER VE KISALTMALAR LİSTESİ.....	v
TABLolar LİSTESİ.....	vi
ÖZET.....	viii
SUMMARY.....	ix
BÖLÜM 1.	
GİRİŞ.....	1
1.1. Doğal Bor'un (B I) Spektrum Çalışmaları.....	1
1.2. Be Benzeri Bor'un (B II) Spektrum Çalışmaları.....	3
1.3. Li Benzeri Bor'un (B III) Spektrum Çalışmaları.....	5
1.4. He Benzeri Bor'un (B IV) Spektrum Çalışmaları.....	6
1.5. H Benzeri Bor'un (B V) Spektrum Çalışmaları.....	7
BÖLÜM 2.	
ÇOK KONFIGÜRASYONLU HARTREE-FOCK YAKLAŞIKLIĞI ÇERÇEVESİNDE ATOMİK YAPI HESAPLAMALARI.....	9
2.1. Çok-Elektronlu Sistemler.....	9
2.1.1. Merkezi alan yaklaşımı.....	9
2.1.2. Elektron konfigürasyonu.....	12
2.1.3. Konfigürasyon hal fonksiyonları.....	13
2.1.4. LS terimleri.....	14
2.1.5. Çok konfigürasyon açılımları.....	15
2.1.6. Değişim yöntemi.....	15
2.1.7. Yaklaşık çözümler.....	17

2.1.8. Özdeğer problemi.....	18
2.2. Çok Konfigürasyonlu Hartree-Fock Dalga Fonksiyonları.....	19
2.2.1. Çok elektronlu atomlarda karşılıklı etkileşme.....	19
2.2.2. Genel teori.....	20
2.2.3. ψ_1 'in yapısı.....	23
2.2.4. Çiftli-karşılıklı etkileşme açılımları.....	24
2.2.5. Tüm ve kısıtlanmış aktif uzaylar.....	25
2.2.6. MCHF yöntemi.....	25
2.2.7. Ortogonal olmayan açılım.....	29
2.2.8. MCHF dalga fonksiyonlarının özellikleri.....	30
2.3. Breit-Pauli Relativistik Katkılar.....	33
2.3.1. Breit-Pauli Hamiltonyeni.....	33
2.3.2. Breit-Pauli dalga fonksiyonları.....	35
2.3.3. İnce yapı seviyeleri.....	36
2.4. Enerji Seviyeleri Arasındaki Geçişler.....	39
2.4.1. Geçişler ve geçiş özellikleri.....	39
2.4.2. Kesin ve yaklaşık seçim kuralları.....	41
BÖLÜM 3.	
SONUÇLAR VE ÖNERİLER.....	44
KAYNAKLAR.....	77
ÖZGEÇMİŞ.....	82

SİMGELER VE KISALTMALAR LİSTESİ

MCHF	: Çok konfigürasyonlu Hartree-Fock (Multiconfiguration Hartree-Fock)
CI	: Konfigürasyon Etkileşmesi (Configuration Interaction)
CSF	: Konfigürasyon Hal fonksiyonu (Configuration State Function)
NR	: Relativistik Olmayan (non-Relativistic)
RS	: Relativistik Kayma (Relativistic Shift)
MC	: Kütle Düzeltmesi (Mass Correction)
D1	: Bir-Cisim Darwin Terimi (One-Body Darwin Term)
D2	: İki-Cisim Darwin Terimi (Two-Body Darwin Term)
OO	: Yörünge-Yörünge Terimi (Orbit-Orbit Term)
SS	: Çekirdek Spin-Spin Terimi (Spin-Spin Term)
SO	: Çekirdek Spin-Yörünge Terimi (Spin-Orbit Term)
SSC	: Spin-Spin Terimi (Spin-Spin Contact Term)
SOO	: Spin-Diğer Yörünge Terimi (Spin-Other Orbit Term)
FS	: İnce Yapı (Fine Structure)
AS	: Aktif Set
CAS	: Tüm Aktif Uzay (Complete Active Space)
SD	: Tekli-İkili Durum (Single-Double Substitution)
GBT	: Genelleştirilmiş Brillouin Teoremi (Generalized Brillouin Theorem)

TABLolar LİSTESİ

Tablo 3.1.	B I-V için tek ve çift seviyelere ait konfigürasyonlar.....	45
Tablo 3.2.	B I için E (cm ⁻¹) enerji seviyeleri.....	46
Tablo 3.3.	B I'in bazı seviyeleri arasındaki E1, E2 ve M1 geçişlerine ait λ dalga boyları.....	47
Tablo 3.4.	B I'in bazı seviyeleri arasındaki E1, E2 ve M1 geçişlerine ait Aki geçiş olasılıkları.....	49
Tablo 3.5.	B I'in bazı seviyeleri arasındaki E1, E2 ve M1 geçişlerine ait gf ağırlıklı salıncı şiddeti.....	50
Tablo 3.6.	B II için E (cm ⁻¹) enerji seviyeleri.....	52
Tablo 3.7.	B II'nin bazı seviyeleri arasındaki E1, E2 ve M1 geçişlerine ait λ dalga boyları.....	54
Tablo 3.8.	B II'nin bazı seviyeleri arasındaki E1, E2 ve M1 geçişlerine ait Aki geçiş olasılıkları.....	56
Tablo 3.9.	B II'nin bazı seviyeleri arasındaki E1, E2 ve M1 geçişlerine ait gf ağırlıklı salıncı şiddetleri.....	58
Tablo 3.10.	B III için E (cm ⁻¹) enerji seviyeleri.....	60
Tablo 3.11.	B III'ün bazı seviyeleri arasındaki E1, E2 ve M1 geçişlerine ait λ dalgaboyları.....	61
Tablo 3.12.	B III'ün bazı seviyeleri arasınındaki E1, E2 ve M1 geçişlerine ait Aki geçiş olasılıkları.....	62
Tablo 3.13.	B III'ün bazı seviyeleri arasındaki E1, E2 ve M1 geçişlerine ait gf ağırlıklı salıncı şiddetleri.....	63
Tablo 3.14.	B IV için E (cm ⁻¹) enerji seviyeleri.....	65
Tablo 3.15.	B IV'ün bazı seviyeleri arasındaki E1, E2 ve M1 geçişlerine ait λ dalgaboyları.....	66
Tablo 3.16.	B IV'ün bazı seviyeleri arasındaki E1, E2 ve M1 geçişlerine ait	

	Aki geiş olasılıkları.....	67
Tablo 3.17.	B IV'ün bazı seviyeleri arasındaki E1, E2 ve M1 geişlerine ait gf ağırlıklı salınıcı şiddetleri.....	68
Tablo 3.18.	B V için E (cm ⁻¹) enerji seviyeleri.....	69
Tablo 3.19.	B V'in bazı seviyeleri arasındaki E1, E2 ve M1 geişlerine ait λ dalgaboyları.....	70
Tablo 3.20.	B V'in bazı seviyeleri arasındaki E1, E2 ve M1 geişlerine ait Aki geiş olasılıkları(s).....	72
Tablo 3.21.	B V'in bazı seviyeleri arasındaki E1, E2 ve M1 geişlerine ait gf ağırlıklı salınıcı şiddetleri.....	74

ÖZET

Anahtar kelimeler: MCHF yöntemi, enerji seviyeleri, Breit-Pauli relativistik düzeltmeler, dalga boyları, ağırlıklı salıncı şiddetleri, geçiş olasılıkları.

Bu çalışmada, atom ve iyonların yüksek duyarlıklı enerji seviyeleri hesaplamalarında kullanılan teorik yöntemlerden biri olan çok konfigürasyonlu Hartree-Fock (Multiconfiguration Hartree-Fock-MCHF) yaklaşıklığı kullanılarak Bor atomunun ve iyonlarının (B I-V) öz-uyarılmış seviyelerinin enerjileri ve bu seviyeler arasındaki geçişler için dalga boyları, ağırlıklı salıncı şiddetleri ve geçiş olasılıkları hesaplanmaktadır. Relativistik düzeltmeler için Breit-Pauli Hamiltoniyeni alınmaktadır. İlk bölümde; B I-V ile ilgili yapılmış çalışmalar, ikinci bölümde; çok elektronlu sistemler, çok konfigürasyonlu Hartree-Fock yöntemi, Breit-Pauli relativistik düzeltmeler ve enerji seviyeleri arasındaki geçişler hakkında özet bilgiler verilmektedir. Elde edilen sonuçlar diğer çalışmalar ile karşılaştırmalı olarak tablolar halinde son bölümde sunulmaktadır.

THEORETICAL INVESTIGATION OF LEVEL STRUCTURES FOR BORON AND ITS IONS

SUMMARY

Key Words: MCHF method, energy levels, Breit-Pauli relativistic corrections, wavelengths, weighted oscillator strengths, transition probabilities.

In this study, energy levels, wavelengths, weighted oscillator strengths and transition probabilities for Boron atom and its ions (B I-V) have been calculated using multiconfiguration Hartree-Fock approximation which is configuration interaction method. This method allows the highly accuracy calculations. In addition, Breit-Pauli Hamiltonian are taken for relativistic corrections. In the first chapter previous works on B I-V have been given. Second chapter deals with the concept of many electrons systems, multiconfiguration Hartree-Fock method, Breit-Pauli relativistic corrections and transition probabilities. In the last chapter results obtained have been compared with the other experiments and calculations.

BÖLÜM 1. GİRİŞ

1.1. Doğal Bor'un (B I) Spektrum Çalışmaları

Bor atomunun temel hal konfigürasyonu kapalı bir 2s alt tabakası ve 2p elektronundan ibarettir. Son yıllarda, astrofizikte Bor üzerine oldukça yoğun bir ilgi vardır. Bor, büyük patlama, nükleosentez modellerin testinde ve termonükleer füzyon araştırmasında önemli rol oynamaktadır. Ayrıca astrofizikte, enerji değerleri, geçiş olasılıkları, salınıcı şiddetleri, aşırı ince yapı ve izotop kaymaları gibi bazı spektroskopik özelliklerin iyi bilinmesi, yıldızlardaki Bor bolluğunu belirlemek için gereklidir.

Enerji, salınıcı şiddeti, geçiş olasılıkları ve ışıyım yarı ömürleri gibi spektroskopik parametreler, atomların ve iyonların uyarılmış hallerinin temel özellikleridir. Bunlar, kuantum elektronik, atom fiziği ve lazer spektroskopisi, plazma ve astrofizik alanlarında çok faydalıdır. Bu parametre değerlerinin güvenilirliği kullanılan hesap yöntemlerinin gücüne bağlıdır. Salınıcı şiddetleri ve geçiş olasılıkları atomik spektroskopi de en temel parametrelerdir. Bunların değerleri sıcaklık ve atomik konsantrasyon gibi çoğu kritik ölçümlerin doğruluğuna ve analizine yardımcı olacak geçişin seçimini etkiler. Bor elementinde böyle parametrelerin doğru belirlenmesi teorik ve deneysel çalışanlar için süregelen bir çalışma olmuştur.

Doğal borun uyarılmış seviyelerinin en basit serileri, dıştaki 2p elektronun uyarılmasıyla oluşur. Bu seviyelere ek olarak daha karmaşık konfigürasyonlar değerlik veya iç-tabaka elektronların uyarılması ile oluşturulabilir. Temel terimin ince-yapı aralığı, 2497 Å'da $2s^22p - 2s^23s$ ikilisinden Fowler [1] tarafından belirlendi. Bowen [2] $2s^23s^2S$, $2s^23d^2D$ ve $2s2p^2^2D$ seviyelerinden $2s^22p^2P^o$ temel

seviyelerine geçişleri belirledi. Bunlar ve diğer ilk gözlemler [3-5], Selwyn [6] tarafından devam ettirildi. Çizgi listesine, $2s^2ns \ ^2S$ ($n \leq 7$), $2s^2nd \ ^2D$ ($n \leq 6$) ve $2s2p^2 \ ^2S$ seviyelerinden temel seviyelere geçişleri ve dörtlü terimler arasındaki geçişler olarak tanımlanan üçlü çizgilerini de kattı. Bu çalışmada [6], Selwyn $2s^2ns$ ve nd serilerinden B I'in iyonlaşma limitini de belirledi. Sonraki yıllarda, B I spektrumunun analizi birçok çalışmalarla devam ettirildi. 1979'da Odintzova ve Striganov [7] o zamana kadar mevcut bilgilerin kaynağında B I'in enerji seviyelerini ve dalga boylarını derledi. 2007'de Kramida ve Ryabtsev [8] B I spektrumunun dalga boylarını, enerji seviyelerini ve ince yapı yarılmalarındaki referans verilerini genişlettiler. Çalışmalarında ayrı veri setleri, ^{11}B ve ^{10}B ve izotoplar için verildi.

Bor'daki Rydberg dizileri (yüksek seviyeler) konfigürasyon etkileşmeleri nedeniyle enerjide çok kuvvetli düzensizlikler gösterir. Ayrıca $1s^22s2p^2$ konfigürasyonu iyonlaşma enerjisi altında birkaç terim ortaya çıkarır (2S , 4P ve 2D). 2S ve 2D seviyelerinin varlığı, aynı simetrikli yakın çizgi seviyelerinin bir pertürbasyonuna neden olur. Bu, seviyelerin enerji pozisyonlarında düzensizlikler olarak gözlenebilir. Pertürbasyon, yarı ömür değerlerinin üzerine de kuvvetli bir etkiye sahip olabilir. Bir pertürbe olmamış dizilişte, yarı ömür değerleri baş kuantum sayısı ile düzenli bir şekilde artması beklenebilir.

Bor için kuvvetli pertürbasyonlar teoriksel çalışmaları zorlaştırmaktadır. Özellikle bu, $2s^s6s \ ^2S$ ve $2s^27s \ ^2S$ oranındaki $2s2p^2 \ ^2S$ 'nin konumunun doğru belirlenmesi gereken 2S serileri için doğrudur. s ve d dizilerindeki yarı ömür hesaplamaları ilk olarak MCHF yöntemini kullanarak yapılmıştır[9]. Öz-uyum alanındaki kararsızlıklardan dolayı, yalnızca $2s2p^2 \ ^2S$ pertübe altındaki $2s^2ns \ ^2S$ hedeflenmelidir.

Burada, B I'e ait yapılan çalışmada, her iki parite için iki farklı konfigürasyon seti seçerek karşılıklı etkileşmeler incelendi. Seçilen bu konfigürasyonlar Tablo 1'de A ve B olarak adlandırılmaktadır. Nötral Bor'un enerji seviyeleri ve dalga boyu, ağırlıklı salıncı şiddeti ve geçiş olasılığı gibi elektrik dipol (E1), elektrik kuadrupol (E2) ve manyetik dipol (M1) geçiş parametreleri hesaplanmaktadır.

1.2. Be Benzeri Bor'un (B II) Spektrum Çalışmaları

1970'lerden beri, Be-benzeri iyonların öz-uyarılmış halleri hem teorik [10-12] hem de deneysel [13-15] olarak oldukça ilgi çekmektedir. Be-benzeri iyonların yüksek-çizgi öz-uyarılmış beşli hali, iyi bilinen açısal momentum ve parite seçme kuralları nedeniyle kendiliğinden iyonlaşmasına karşı dengeli kalabilen yüksek yörünge, spin ve açısal momentum kuantum sayıları olan karmaşık bir dört elektronlu atomik sistemdir. Spektroskopi teknolojisindeki ilerlemeler, çok büyük tesir kesiti olan böyle beşli haller oluşturarak bu sistem için uyarılmış mekanizmaları çalışma imkanı sunar. Be-benzeri iyonların öz-uyarılmış hallerini içeren çalışmalar, elektronlar arasındaki karşılıklı etkileşimleri daha iyi anlamak, çok elektronlu atomların uyarılmış hal teorisinin gelişmesinde önemli rol oynar.

Deneysel olarak tanımlanmamış çizgilerin birkaçı için sorumlu olan Be'nin beşli halleri arasındaki geçişleri öneren Bruch ve diğerleri [10] ilk defa, Be'nin beşli halleri arasında gözlenen optik geçiş olasılığını incelediler. Daha sonra, Brunch, Schnider ve arkadaşları [13-15], Be-benzeri bor ve karbon için elektron-spektroskopi çalışmalarını devam ettirdi. Hafif iyon ve atomlardaki yüksek çokluklu birkaç yüksek-çizgi haller için geçiş oranlarının ve enerjilerinin hesaplanmasında, Beck ve Nicoladies [11] salıncı şiddeti için birinci derece teorisini kullanarak B^+ 'daki $1s2s2p^2 \ ^5P - 1s2p^3 \ ^5S^o$ geçişin dalga boyunu 131,00 nm'e yakın olduğunu buldular. Sonuçlar, Martinson ve diğerleri tarafından [16] 1970'te belirtilen deneysel bilgilerle ve sonradan Kernehan ve diğerleri tarafından [17] elde edilen verilerle tutarlıdır. B^+ 'daki $1s2s2p^2 \ ^5P - 1s2p^3 \ ^3S^o$ geçişi, Mannervik ve diğerleri tarafından [12] çok elektronlu Hartree-Fock (MCHF) hesaplamaları ile beraber deneysel çalışma ile düzeltildi. Deneysel dalga boyu ve yarı ömür ($132,392 \pm 0.007$ nm ve $0,65 \pm 0.01$ ns) önceki çalışmalardan beş kat duyarlıkla daha doğrudur[12]. Mannervik'in teorik sonuçları (131,16 nm ve 0,601 ns), Beck ve Nicoladies'in önceki teorik tahminleriyle [11] çok iyi uyumaktadır. Ancak deneysel değerlerine çok yakın değildi. Sonradan Brage ve Fischer [18] karşılıklı etkileşme ve relativistik etkileri dikkate alarak MCHF hesabı yaptılar. Böylece deneysel sonuçlarla çok iyi uyuşan geçiş dalga boyunu 132,31 nm olarak elde ettiler. Şimdiye kadarki bilgilere göre, Be-benzeri

sistem için yüksek-n öz-uyarılmış hallerine ait verilerin azlığının nedeni, deneylerdeki çözünürlüğün kısıtlanması ve teorik hesaplamalardaki sayısal uyumsuzluktur.

1980'li yıllardan sonraki otuz yıl içinde, bazı teorik yöntemler [19-22] Be-benzeri elektronik diziliş için öz-uyarılmış hallerin ince ve aşırı ince yapısını incelemek için kullanıldı. Yang ve Chung [23] Be-benzeri elektronik dizilişinin en düşük öz-uyarılmış haller için ince ve aşırı ince yapıya ait sonuçlarını elde ettiler. Gou ve Wang [24], çok elektronlu etkileşim dalga fonksiyonu ile değişim yöntemini Be-benzeri atomların yüksek çizgi öz-uyarılmış hallerine ($^5P(n)(n=1-7)$ $^5S^o(m)$ ($m=1-5$)) uyguladılar ve salıncı şiddeti, geçiş olasılıkları ve dalga boylarını deneylerle karşılaştırdılar. Oldukça yeni bir makalede [25] B II'nin tekli uyarılmış sistemdeki bazı geçişler ve enerji seviyeleri verildi. Bu çalışma, 1975'den beri daha çok $2s3s$ 1S teriminin sonunda belirlenmesi üzerinedir. Bu özel seviyenin enerjisi Weiss tarafından [26] 1973'de tahmin edilmişti. Ancak B II'nin diğer seviyelere göre bu seviyenin enerjisi deneysel teori ile uyumsuzdu. Yıllardan beri bu gizem değişik deneysel teknikler ve yeni teorik eklemelerle eş zamanlı olarak çalışılmaktadır.

Son zamanlarda, bazı B II geçişlerinin dikkate değer astrofiziksel öneme sahip olduğu bulundu. Örneğin, 1362 \AA 'daki B II rezonansı yıldızlarda bor bolluklarını belirlemek için kullanılmaktadır. Bu veriler, hafif elementlerin kozmik üretimi için değişik modelleri test etmede önemlidir. Ayrıca, bor termonükleer füzyon aletlerinde önemli bir materyaldir. Hafif bor elementi, füzyon reaktör duvarları için karşılaşılan materyal olarak kullanıldığından iyonları sıcak plazmaya girebilir ve buradan çizgi ışınması yayabilir.

Be-benzeri Bor için yapılan çalışmada, tek parite için $1s^22snp(n=2-5)$, $1s^22snf(n=2-5)$, $1s^22pns(n=3-4)$, $1s^22p3d$ ve çift parite için $1s^22s^2$, $1s^22p^2$, $1s^22sns(n=3-5)$, $1s^22snd(n=3-5)$, $1s^22s6s$, $1s^22p3p$ konfigürasyon setini (Tablo 1) alarak, bu seviyelere ait enerjiler ve bu seviyeler arasındaki elektrik dipol (E1), elektrik kuadrupol (E2) ve manyetik dipol (M1) geçişlerine ait parametreler hesaplanmaktadır. Çift paritede farklı durumlardaki p tabakasının ayrı olarak hesaplanması nedeni ile iki farklı konfigürasyon alındı. B II için hesaplama sonuçları ve diğer çalışmalarla karşılaştırma Tablo 6, 7, 8 ve 9'da verilmektedir.

1.3. Li Benzeri Bor'un (B III) Spektrum Çalışmaları

1924'te B III spektrumunda 2s, 3p, 2p, 3d, 4f ve 5g konfigürasyonların terimlerini bulan Milikan ve Bowen [4]'in çalışmalarına Ericson ve Edlén [27,28] devam ettiler ve onlara 4s, 5s, 3p, 4p, 5p, 4d, 5d, 6d, 5f, 6f, ve 5g konfigürasyonlarının terimlerini eklediler. Edlén [29] daha sonra doktora tezinde 1949'da Moore'nin derlemesindeki [30] dalga boyu listesini ve terim sistemini yayınladı. 1969'da Ölme [31] deneysel olarak B III'te 31 çizginin dalga boyunu ölçtü ve önemli $3s^2S - 3p^2P$ çizgilerini buldu ve $n=5$ ve $n=6$ 'ya kadar birçok seviye için daha kesin enerjilerini de elde ettiler. $1s^2nl^2L$ sistemindeki seviyeleri için ek bilgiler de sunuldu [10-13]. 1998'de Litzen ve Kling [32] Fourier dönüşüm spektroskopisini kullanarak ^{10}B ve ^{11}B izotoplarının $2s - 2p$ çizgilerini duyarlı olarak ölçtüler. Bu tekli uyarılmış çiftli sistemlerde enerji seviyelerinin çoğunun göreceli pozisyonları yaklaşık $0,2 \text{ cm}^{-1}$ doğrulukludur. Li-benzeri spektrumun yarı deneysel çalışmasında, Edlén [33] çeşitli geçişlerin dalga boylarını, aynı şekilde iyonlaşma sınırının değerini hesaplamayı sağladı.

B III'de $1s2lnl'$ tipli, öz uyarılmış halleri de vardır. Bunlar hem çiftli hem de dörtlü olabilir ve $1s^2^1S$ temel iyonlaşma enerjisinin üzerindedir. Dörtlülerin kendiliğinden iyonlaşmasının bozulması ve çiftlilerin bazıları için parite ve açıl momentumun korunması kurallarıyla kuvvetli bir şekilde yasaklanır. Böylece, bu seviyelerin radyoaktif bozunumları gözlenebilir. Böyle ilk gözlem [16], 1701 A° 'daki kuvvetli çizgi $1s2s2p^4P^\circ - 1s2p^2^4P$ geçişi olarak tanımlanmıştır. Mannervik'in [34] çalışmasında belirttiği gibi teorik ve deneysel verileri veren birçok çalışma özetlenmektedir. To ve diğerleri [35] bu dörtlülere ait ilk çalışmaları verdiler. Chung ve diğerleri [36] tarafından verilen yaygın konfigürasyon etkileşme hesaplamalarından sonra deneysel çalışmalar hızla gelişti. Öz-uyarılmış dörtlü seviyeler arasındaki 50 geçişten fazlası $300-610 \text{ A}^\circ$ bölgesinde tanımlandı. B III'deki öz-uyarılmış çiftlerden optik geçiş Knystautas ve Drauin [37] tarafından ilk kez rapor edildi. He-benzeri (B IV)'de $1s^2^1S-1s2p^1P^\circ$ rezonans çizgisine uydu olarak $62,21 \text{ A}^\circ$ 'da $1s^22p^2P^\circ-1s2p^2^2P^\circ$ çizgisi gözlemlenildi. Sonra, öz-uyarılmış çiftlilerden tekli uyarılmış seviyelere uydu geçişlerin spektrumu iki lazer-üreten plazma tekniğini kullanarak öz-uyarılmış B III'ün birkaç çizgisi Kennedy ve Carroll [38], Bruch ve

diğerleri [39] ve Janetti [40] tarafından yapılan çalışmalarla gösterilmiştir. Bruch ve diğerlerinin [39] dayandığı tüm bu hesaplama ve gözlemler B III'ün öz-uyarılmış çiftli sistemdeki 10 optik geçiş için belirlenmiştir.

Tyrén'in doktora tezi [41] vakumda gözlenen bor spektrumunun yüksek-kaliteli fotoğraflarını içerir. Bu fotoğrafların birinde, He-benzeri borun rezonans çizgilerine yakın iyi analiz edilmiş uydu yapı açık olarak görülür. Bu spektrumun kalitesi lazer-üreten plazma ile Kennedy ve Carroll [38] tarafından gözlenen spektrumundan daha iyidir. Tyrén [41], bu bölgede gözlenen uydu yapı tipi geçişin ilk gözlemlerinden bir tanesini verdi. Ancak ölçülmemiş dalga boyları bu çizgiler için verildi. Tyrén'in makalesindeki bu fotoğraf taratıldı ve dijital resimlere uygulanan özel bir yöntemle incelendi. Kramida ve diğerleri [42] iki kez iyonlaşmış borun Li-benzeri spektrumunun çalışmasını devam ettirdiler. Spektroskopik veriler, demet-folyo ve yüksek-çözünürlük kırılma spektroskopisi ile sağlandı. Yaklaşık 50 yeni geçiş gözlemlendi ve önceden bilinen çizgiler daha duyarlı bir şekilde tekrar ölçüldü.

Burada, B III'e ait yapılan çalışmada, tek parite için $1s^2 2p$, $1s^2 3p$, $1s^2 np(n=4-5)$, $1s^2 nf(n=4-5)$ ve çift parite için $1s^2 ns(n=2-5)$, $1s^2 nd(n=2-4)$, $1s^2 ns(n=6-7)$ konfigürasyon seti (Tablo 1) alınarak bu seviyelere ait enerjileri ve seviyeler arasındaki elektrik dipol (E1), elektrik kuadrupol (E2) ve manyetik dipol (M1) geçişlere ait dalga boyu, geçiş olasılığı ve ağırlıklı salınıcı şiddeti hesaplamaları yapıldı. B III için hesaplama sonuçları Tablo 10, 11, 12 ve 13'te verilmektedir.

1.4. He Benzeri Bor'un (B IV) Spektrum Çalışmaları

B IV spektrumunun ilk çalışmaları Edlén [29] ve Tyrén [41] tarafından yapılmıştır. Robinson [43], teorik olarak çok az değiştirilmiş Hylleraas tipi formülü kullanarak $1s^2 - 1snp(n=2-5)$ rezonans serilerinin dalga boylarını gözlemledi. Edlén, $1s^2 1S$, $1s2s 3S$, $1s2p 3P^o$ in, aynı şekilde $1s2p$, $1s3p$, $1s4p$, $1s5p$ ve $1s6p 1P^o$ 'ın tekli terimlerin enerjilerinin verildiği Moore'un derlemesine [30] kendisinin yayınlanmamış çalışmasını ekler. Ayrıca, $1s^2 - 1snl$ 'ye ait ultraviyole çizgilerini Edlén [29], 2825 Å civarında $1s2s - 1s2p$ teklisini de tanımladı. Bu geçişe ait deneysel çalışmalar ve gözlemler Tyrén [41] ve Kennedy ve Carroll [38] tarafından verilmektedir. Tyrén'in

verilerinin detaylı yorumlanması Svesson [44] tarafından yapıldı. Geçişlerin birkaçını tekrar ölçtü ve $n \leq 5$ için $1s^2 \ ^1S_0 - 1snl \ ^1P_1^o$ serilerinin dalga boylarını belirledi. Aynı zamanlarda, Martinson ve diğerleri [15], deneysel olarak üçlü terimler arasında $1s3d - 1s4f$, $1s3d - 1s5f$ ve $1s3p - 1s4d$ geçişlerini tanımlayarak vakum UV bölgesinde bazı ilerlemeler yaptılar. Daha geniş araştırma sonucu, ışık kaynağı olarak plazma üreten lazer kullanan Eidelsberg tarafından [45] bildirildi. Yaklaşık 30 çizgi gözlemlendi ve $1s5g \ ^{1,3}G$ 'e kadar birkaç terim için enerjileri rapor etti. B IV'ün bazı ek çizgileri de gösterildi[46]. To'nun doktora çalışmasında [46], daha önce rapor edilmemiş B IV'ün bir kaç çizgi için ölçülmüş dalga boyları verilmektedir. Dinnean ve diğerleri [47], hızlı iyon demetli lazer uyarılmasını kullanarak ^{11}B izotopundaki $1s2s \ ^3S_1 - 1s2p \ ^3P_{1,2,3}^o$ ince yapı geçişlerinin dalga boylarını ölçtüler. $1s2p \ ^3P^o$ terimi, B IV spektrumunda gözlenen ince yapı çizgilerinden sadece biridir. $1snp \ ^3P^o$ terimlerinin ince-yapı yarılması, Accad ve diğerleri tarafından [48] yapılan çalışmada olduğu gibi $n=3$ için 15 cm^{-1} 'den $n=5$ için 3 cm^{-1} 'e hızlıca azaldığı belirtilmektedir. Bu diğer tekli terimlere göre daha da kısadır ve bu yüzden gözlenmesi çok zordur. B IV'ün öz-uyarılmış hallerine ek bilgi yüksek çözünürlük Auger-elektron spektroskopisi kullanarak Sakaue ve diğerleri tarafından [49] sağlanmıştır.

He-benzeri Bor ile ilgili çalışmada, tek parite için $1s2p, 1s3p, 1snp(n=4-6), 1snd(n=4-6)$ ve çift parite için $1s^2, 1s2s, 1sns(n=3-4), 1snd(n=3-4), 2p3p$ konfigürasyon seti (Tablo 1) alarak bu seviyelere ait enerjiler ve seviyeler arasındaki elektrik dipol (E1), elektrik kuadrupol (E2) ve manyetik dipol (M1) geçişlerine ait parametreler hesaplanmaktadır. B IV için hesaplama sonuçları ve diğer çalışmalarla karşılaştırma Tablo 14, 15, 16 ve 17'de verilmektedir.

1.5. H Benzeri Bor'un (B V) Spektrum Çalışmaları

Edlén [29], B V'de Lyman α çizgisini gözlemledi. Tyrén [50] atomik spektroskopiyi kullanarak bu serilerde bazı ek çizgiler gözledi. Ancak, atomik spektroskopisinin ilk günlerinde bile, hesaplanan hidrojenik dalga boylarının ölçülenlerden daha doğru olduğu geniş ölçüde kabul edildi. Bu yüzden, H-benzeri çizgileri ile bütün çizgilerinin dalga boyları saptanıldığından, kalibrasyon eğrilerini çizmek için referans çizgiler olarak daima kullanılmıştır. Ancak, ne Tyrén ne de Edlén bu

yaklaşık ölçülen dalga boylarına ait değerleri yayınlamadılar. Bu değerler sadece 750 \AA 'dan daha kısa çizgiler için T_0 'nun tezinde verildi[46]. Kramida ve diğerleri [51], deneysel olarak 1040 \AA 'ın üzerindeki dalga boylarını ölçmek için B I-III ve C I'den alınan referans çizgilerinden faydalandılar.

H-benzeri Bor çalışmasında tek parite için $2p$, $3p$, $np(n=4-6)$, $nf(n=4-6)$ ve çift parite için $1s$, $2s$, $ns(n=3-5)$, $nd(n=3-5)$, $6s$ konfigürasyon seti (Tablo 1) alarak seviyelere ait enerjiler ve seviyeler arası elektrik dipol (E1), elektrik kuadrupol (E2) ve manyetik dipol (M1) geçişleri için dalga boyu, ağırlıklı salıncı şiddetleri ve geçiş olasılıkları hesaplandı. B V için hesaplama sonuçları Tablo 18, 19, 20 ve 21'de verilmektedir.

BÖLÜM 2. ÇOK KONFIGÜRASYONLU HARTREE-FOCK YAKLAŞIKLIĞI ÇERÇEVESİNDE ATOMİK YAPI HESAPLAMALARI

2.1. Çok-Elektronlu Sistemler

Çok elektronlu sistemler için öz fonksiyonların gerçek yapısı bilinmemektedir. Onun yerine yaklaşık öz fonksiyonlar bulunmalıdır. Yaklaşık dalga fonksiyonlarının yapısını anlamayı sağlayan bir yöntem, Schrödinger denkleminin çözümlerinin H relativistik olmayan Hamiltonyen ile yer değiştirmesidir.

2.1.1. Merkezi alan yaklaşımı

Merkezi alan yaklaşığında, tam Hamiltonyen, ayrıştırılabilir H_0 Hamiltonyen ile yer değiştirilir. Böylece;

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

olur. Burada $V(r_i)$ merkezi potansiyel, elektronlar arasındaki Coloumb itmesinin etkilerine benzemektedir.

Tam Hamiltonyen'in yanı sıra H_0 yaklaşık Hamiltonyen, L^2 , L_z , S^2 ve S_z toplam açısal momentum operatörleri ile yer değiştirir ve H_0 'ın öz fonksiyonları bu operatörlerin özfonksiyonları olarak seçilebilir:

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

$$L^2\psi_0(q_1, \dots, q_N) = L(L+1)\psi_0(q_1, \dots, q_N) \quad (2.3)$$

$$L_z\psi_0(q_1, \dots, q_N) = M_L\psi_0(q_1, \dots, q_N) \quad (2.4)$$

$$S^2\psi_0(q_1, \dots, q_N) = S(S+1)\psi_0(q_1, \dots, q_N) \quad (2.5)$$

$$S_z\psi_0(q_1, \dots, q_N) = M_s\psi_0(q_1, \dots, q_N) \quad (2.6)$$

H_0 ayrıştırılabilir olduğundan özfonksiyonların özdeğerleri;

$$E_0 = \sum_{i=1}^N E_i \quad (2.7)$$

ve özfonksiyonları;

$$\psi_0(q_1, \dots, q_N) = \prod_{i=1}^N \phi(a_i; q_i) \quad (2.8)$$

olarak yazılabilir. Burada tek elektron spin-yörüngemileri;

$$U(r) = -\left(\frac{Z}{r}\right) + V(r) \quad (2.9)$$

olmak üzere

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + U(r) \right] \phi(a; q) = E\phi(a; q) \quad (2.10)$$

şeklindeki tek elektronlu denklemin çözümleridir. Tek elektron fonksiyonu veya spin yörüngemsi,

$$\phi(\alpha; q) = \frac{1}{r} P(nl; r) Y_{lm_l}(\theta, \varphi) X_{m_s}(\sigma) \quad (2.11)$$

olarak ifade edilir. Burada çözümler $\alpha = nlm_l m_s$ kuantum sayıları ile gösterilir. Coulomb görüşünün aksine genel potansiyeli $U(r)$ olan tek elektron enerjisi E hem n hem de l 'ye bağlıdır.

H_0 Hamiltonyeni elektron koordinatlarının yer değiştirmelerine göre değişmezdir ve bu yüzden (2.8) çarpım fonksiyonundaki koordinatların herhangi bir yer değişimi de bir özfonksiyonu verir. Değiştirilmiş çarpım fonksiyonların birleşmesi ile bir antisimetrik fonksiyon ve A antisimetrikleştirme işlemcisi olmak üzere;

$$\Phi(q_1, \dots, q_N) = A \prod_{i=1}^N \phi(\alpha_i; q_i) \quad (2.12)$$

şeklinde yazılabilir. Bu fonksiyon Slater determinanı olarak da adlandırılır:

$$\Phi(q_1, \dots, q_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi(\alpha_1; q_1) & \phi(\alpha_1; q_2) & \dots & \phi(\alpha_1; q_N) \\ \phi(\alpha_2; q_1) & \phi(\alpha_2; q_2) & \dots & \phi(\alpha_2; q_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \phi(\alpha_N; q_1) & \phi(\alpha_N; q_2) & \dots & \phi(\alpha_N; q_N) \end{vmatrix} \quad (2.13)$$

Bu gösterimde, iki elektronun $\alpha = nlm_l m_s$ dört kuantum sayıları aynı değerlere sahipse $\Phi(q_1, \dots, q_N)$ toplam dalga fonksiyonunun özdeş olarak yok olduğu görülür. Böylece, atomun izinli durumları için iki elektron aynı kuantum sayılarına sahip olamaz. Bu aslında Pauli (1925) tarafından ileri sürülen dışarlama ilkesidir. $q_i = q_j$ olduğunda yani aynı spinli iki elektron aynı uzay koordinatlarına sahip olduğunda determinantın yok olduğu da görülebilir.

Slater determinantının paritesini belirlemek için, paritesi $(-1)^l$ olan spin yörüngemsilerin her biri yazılır. Böylece Slater determinantı iyi tanımlanmış pariteye sahip olur. O halde;

$$\pi = (-1)^{l_1} (-1)^{l_2} \dots (-1)^{l_N} = (-1)^{\sum l_i} \quad (2.14)$$

olur. Burada paritenin çift veya tek olması, yörünge açısal momentum kuantum sayılarının toplamının tek veya çift olup olmadığına bağlıdır.

2.1.2. Elektron konfigürasyonu

Merkezi alan yaklaşığında H_0 Hamiltonyen'in bir özfonksiyonu olarak Slater determinantı yazılabilir. Karşılık gelen E_0 enerjisi (2.7) ile gösterildiği gibidir. Bu, Slater determinantında görülen spin yörüngemsilerin enerjilerinin toplamı ile verilir.

n ve l kuantum sayıları aynı olan spin yörüngemsilerin aynı tabakaya ait olduğu söylenebilir ve özdeş spin yörüngemsiler olarak adlandırılır. Bir spin yörüngemsinin enerjisi sadece n ve l bağlı olduğundan E_0 enerjisi tümüyle tabakalara göre spin yörüngemsi dağılımı olan elektron konfigürasyonu ile belirlenebilir.

Genel olarak elektron konfigürasyonu;

$$(n_1 l_1)^{w_1} (n_2 l_2)^{w_2} \dots (n_m l_m)^{w_m}, \quad N = \sum_{a=1}^m w_a \quad (2.15)$$

ile verilir. Burada w_1, w_2, \dots farklı tabakalardaki spin yörüngemsilerin doluluk sayılarıdır. Karşılık gelen enerji ise,

$$E_0 = \sum_{a=1}^m w_a E_{n_a l_a} \quad (2.16)$$

olarak yazılabilir. Burada E_{nl} , bir nl tabakasındaki spin yörüngemsilerin enerjisini gösterir. Çoğunlukla, elektron konfigürasyonları spektroskopik semboller aracılığı ile belirtilir.

Pauli dışarlama ilkesine göre, her spin yörüngemside sadece tek elektron olabilir ve böylece bir nl tabakasinda en fazla $2(2l+1)$ elektron olabilir. Tamamıyla dolu olan bir tabaka kapalı; bunun tersine kısmen dolu bir tabakanın da açık olduğu söylenir. Bir konfigürasyonun enerjisi her tabakanın doluluk sayıları ile verilir. Böylece, belirli bir atom için temel konfigürasyon E_{nl} en düşük enerjileri olan elektron alt tabakalarını doldurarak elde edilir. Bu en düşük enerjiler bir dizi kapalı alt tabakaları ve en fazla bir açık tabakayı verir.

Hafif atomlar için, deneysel enerji seviyeleri çoğunlukla yakın aralıklı gruplarda görülür. Bir merkezi alan hesaplaması uygun bir $V(r)$ potansiyeli kullanarak yapıldığında, bu grupların her birinin ortalama enerjisi belli bir konfigürasyonun enerjisi ile oldukça iyi uyumlu bulunur. Böylece gruplara konfigürasyon etiketleri vermek mümkündür. Ayrıca konfigürasyon belirlemesi uygun olarak yapılmışsa bir gruptaki hallerin sayısı karşılık gelen konfigürasyonun determinantlarının sayısına eşittir.

2.1.3. Konfigürasyon hal fonksiyonları

Merkezi alan yaklaşıklığında relativistik olmayan tam Hamiltonyen'in yaklaşık enerji seviyeleri ve öz fonksiyonları bulunabilir. Genelde, Slater determinantları biçimindeki bu yaklaşık özfonksiyonlar, toplam açısai momentum operatörlerinin özfonksiyonları değildir. Ancak, aynı elektron konfigürasyonuna ait olan determinantların lineer bir birleşimi ile (m_l ve m_s farklı olup n ve l kuantum sayıları aynı) açısai momentum operatörlerinin özfonksiyonları bulunabilir. Bu şekilde elde edilen fonksiyonlar, relativistik olmayan Hamiltonyenin tam özfonksiyonlarına yaklaşıklıkla bulunan Slater determinantlarından daha iyidir ve konfigürasyon hal fonksiyonları olarak adlandırılır. Konfigürasyon hal fonksiyonları, $\Phi(\gamma M_L S M_s)$ veya $|\gamma M_L S M_s\rangle$ ile gösterilir. Burada γ durumu tam olarak

belirtmek için gerekli olan tüm ek kuantum sayılarını ve elektron konfigürasyonunu gösterir.

2.1.4. LS terimleri

Merkezi alan yaklaşımında belirli bir konfigürasyona ait olan tüm Slater determinantları ve aynı şekilde bu determinantlardan oluşturulan konfigürasyon hal fonksiyonları da (CSFler) aynı enerji seviyesine karşılık gelir. Elektronun etkileşiminin merkezi olmayan kısmı olan;

$$-\sum_{i=1}^N V(r_i) + \sum_{i<j}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (2.17)$$

dikkate alındığında, toplam açısal momentum sayılarına bağlı olan farklı CSFler farklı enerjilere karşılık gelir. Bu enerji seviyeleri konfigürasyonun LS terimleri olarak adlandırılır ve farklı CSFlerin beklenen değerleri

$$E = \langle \Phi(\gamma L M_L S M_S) | H | \Phi(\gamma L M_L S M_S) \rangle \quad (2.18)$$

ile verilir. Yukarıdaki beklenen değer M_L ve M_S 'den bağımsızdır ve her LS terimi $(2L+1)(2S+1)$ kat dejeneredir.

LS terimleri M_L ve M_S kuantum sayılarından bağımsız olduğundan çoğunlukla ihmal edilir. M_L ve M_S kuantum sayılarının önemsiz olduğu durumlardaki CSFler $\Phi(\gamma LS)$ veya $\Phi(\gamma^{(2S+1)}L)$ açıkça belirtilecektir. Burada L;

$$\begin{array}{cccccccccc} 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & \dots \\ S & P & D & F & G & H & I & K & L & \dots \end{array} \quad (2.19)$$

şeklinde spektroskopik gösterim ile gösterilir ve $2S+1$ terimin çokluğudur.

2.1.5. Çok konfigürasyon açılımları

Birçok durumda, CSFler gerçek Hamiltonyen'in ψ gerçek özfonksiyonlarına iyi yaklaşımlardır. Ancak en iyi yaklaşımlar,

$$\psi(\gamma LS) = \sum_{i=1}^N c_i \Phi(\gamma_i LS) \quad (2.20)$$

şeklinde CSFlerin lineer bir birleşimi olarak elde edilebilir. O halde tam özfonksiyon genellikle açılımdaki baskın CSFler olacak şekilde sınıflandırılabilir. Yaklaşık özfonksiyonları sağlayan bu çok konfigürasyon yaklaşımındaki zorluk spin yörüngemsi için (2.10) eşitliğine giren uygun $U(r)$ 'nin merkezi alan potansiyeli seçimine götürür. Ancak değişim yöntemi spin yörüngemsi veya daha açık olarak spin yörüngemsi radyal kısımlarını belirlemek yerine getirilirse bu problem tamamen önlenir.

2.1.6. Değişim yöntemi

Schrödinger denklemini çözmek için değişim yöntemleri özdeğer probleminin yeni bir formülüne dayanır. Bağ halleri için Schrödinger denkleminin çözümü aşağıdaki enerji fonksiyonunda çıkan ψ sonuç fonksiyonlarına eşittir:

$$\varepsilon(\psi) = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (2.21)$$

Bu, sınır şartlarında ψ 'nin, $\delta\psi$ değişimine göre 1. dereceden kararlı enerjidir. Ayrıca sınırlı şartlarda değişime ek olarak süreklilik ve farklılık özelliklerine de sahip olmalıdır. İki problemin eşitliğini göstermek için, ε 'nin $\delta\varepsilon$ değişimi düşünülür. Bu tanımlama,

$$\varepsilon(\psi + \delta\psi) - \varepsilon(\psi) = \delta\varepsilon + O((\delta\varepsilon)^2) \quad (2.22)$$

ile verilir. (2.22) denklemini kullanarak, $\delta\mathcal{E}$ 'de sadece 1. dereceden terimleri tutarak ve $\langle\psi|\psi\rangle$ ile çarparak;

$$\delta\mathcal{E}\langle\psi|\psi\rangle = \langle\delta\psi|H - \mathcal{E}(\psi)|\psi\rangle + \langle\psi|H - \mathcal{E}(\psi)|\delta\psi\rangle \quad (2.23)$$

$$= 2\langle\delta\psi|H - \mathcal{E}(\psi)|\psi\rangle \quad (2.24)$$

elde edilir. H , bağ halleri için Hermityen'dir. $\mathcal{E}(\psi)$ sabitse, $\delta\mathcal{E}$ değişimi sıfırlanır ve böylece;

$$\langle\delta\psi|H - \mathcal{E}(\psi)|\psi\rangle = 0 \quad (2.25)$$

olur ve aynı şekilde

$$(H - \mathcal{E}(\psi))|\psi\rangle = 0 \quad (2.26)$$

olur. Diğer taraftan ψ , H 'nın bir özfonksiyonu ise; $\delta\mathcal{E} = 0$ olur ve $\mathcal{E}(\psi)$ normalizasyon sınırı altında sabittir.

(2.21) enerji fonksiyonu ψ normalize olmamış fonksiyonlar cinsinden tanımlanır. Birçok hallerde, normalize edilmiş fonksiyonların konumundaki değişimleri sınırlandırmak kullanışlıdır. Böylece

$$\langle\psi|\psi\rangle = \langle\psi + \delta\psi|\psi + \delta\psi\rangle = 1 \quad (2.27)$$

olur. Değişim probleminin çözümü, ilgili teoreme dayanır. ψ , normalizasyon kısıtlaması altındaki optimizasyon problemine bir çözümse,

$$F(\psi) = \mathcal{E}(\psi) + \lambda\langle\psi|\psi\rangle \quad (2.28)$$

gibi λ Lagrange çarpanı adı verilen bir fonksiyon ortaya çıkar. Bu fonksiyon sınırlı durumlara cevap veren ψ 'deki $\delta\psi$ tüm değişmelere göre 1. dereceden sabittir.

2.1.7. Yaklaşık çözümler

(2.28) değişim problemi tam olarak çözülemez ve yerine yaklaşık çözümler bulunmalıdır. İzlenen bir yol, $a = (a_1, \dots, a_N)$ olmak üzere bir takım parametrelere dayanan

$$\psi_v = \psi_v(a; q_1, \dots, q_N) \quad (2.29)$$

şeklindeki bir değişim fonksiyonu olmaktadır. O halde bu parametreler

$$F(a) = \varepsilon(\psi_v) + \lambda \langle \psi_v | \psi_v \rangle \quad (2.30)$$

gibi parametrelerin değişimlerine göre fonksiyonun kararlı durumundan belirlenir. Başlıca durumlar $\langle \psi_v | \psi_v \rangle = 1$ olan λ ile

$$\frac{\partial F(a_i)}{\partial a_i} = 0, \quad i = 1, \dots, n \quad (2.31)$$

dır. Bu, lineer olmasa da bilgisayarda çözülebilen sınırlı bir problemdir ve elde edilen ψ_v ve $\varepsilon(\psi_v)$ değişim fonksiyonu içeren fonksiyon uzayı içinde tam özfonksiyon ve özdeğerin en iyi tahminlerini gösterir. Açık olarak, değişim fonksiyonu tam özfonksiyon gibi açısız simetriye ve aynı pariteye sahip olmalıdır. Ayrıca, değişim fonksiyonu değişken olmalı ve tam özfonksiyonun uygun niteleyici özelliklerini içermelidir.

(2.27) normalizasyon sınırlamalarına ek olarak, çoğunlukla değişim parametreleri diğer birçok sınırlamalara bağlıdır. Bu kısıtlamalar genellikle

$$C_i(a) = 0 \quad i = 1, \dots, m \quad (2.32)$$

ile yazılır. Burada C_i kısıtlama fonksiyonları olarak adlandırılır. Bu durumlarda Lagrange çarpanları, sınırlamaların her biri için gösterilmelidir ve problem izinli değişimlere göre kararlı olan;

$$F(a) = \varepsilon(\psi_v) + \sum_{i=1}^m \lambda_i C_i(a) \quad (2.33)$$

şeklindeki fonksiyonun sonucu elde edilen parametreleri bulmaktır. Ayrıca, Lagrange çarpanları tüm sınırlamalara cevap veren kararlı çözüm gibi olmalıdır.

2.1.8. Özdeğer problemi

Basit ama çok önemli değişim fonksiyonu, (2.20) açılımı ile verilir. Burada CSFlerin ($\Phi(\gamma_i LS)$ lerin) bilindiği farzedilir ve sadece c_i katsayılarının belirlenmesi gerekir. Çoğu kez, CFSler ortonormaldir. Böylece normalizasyon durumu açık olarak

$$\langle \psi | \psi \rangle = \sum_{i=1}^M c_i^2 = 1 \quad (2.34)$$

olur. (2.28)'deki açılıma ek olarak ve fonksiyon katsayılarındaki değişimlere göre sabit olması gereği

$$Hc = -\lambda c \quad (2.35)$$

eşitliklerini sağlar. Burada H;

$$H_{ij} = \langle \Phi(\gamma_i LS) | H | \Phi(\gamma_j LS) \rangle \quad (2.36)$$

şeklinde elemanları olan Hamiltonyen matrisidir ve $c = (c_1, \dots, c_m)^t$, açılım katsayılarının sütun vektörüdür. $-\lambda$, H 'in bir özdeğeri olduğunda yalnızca normalize olmuş çözüm mevcuttur. Böylece sınırlandırılmış değişim problemi bir matris özdeğer problemine götürür. Hamiltonyen matrisi Hermityen olduğundan özdeğerler;

$$-\lambda_1 \leq \dots \leq -\lambda_k \dots \leq -\lambda_M \quad (2.37)$$

şeklinde gerçek özdeğerlere karşılık gelen

$$c_k = (c_{1k}, \dots, c_{Mk})^t, \quad c_k^t c_l = \delta_{kl} \quad (2.38)$$

tam olarak M ortonormal çözümleri vardır. M çözümleri dışında, bir veya birkaç açılıma dayanan tam dalga fonksiyonlarına karşılık gelen iyi yaklaşımlardır. Farklı çözümler için $\varepsilon(\psi)$ değişim enerjileri kolayca kanıtlandığı gibi $-\lambda$ birleşmiş matris özdeğerlerine eşittir. Bu yüzden (2.34) normalizasyon sınırlama ile birleşmiş Langrage çarpanı $\varepsilon(\psi) = E$ olan E ile gösterilir. Yaklaşık dalga fonksiyonları içeren yukarıdaki yöntem konfigürasyon etkileşme yöntemi olarak adlandırılır.

2.2. Çok Konfigürasyonlu Hartree-Fock Dalga Fonksiyonları

2.2.1. Çok elektronlu atomlarda karşılıklı etkileşme

Hartree-Fock yöntemi birçok atomik özellikleri oldukça iyi belirler. Fakat dikkatli analiz yapıldığında sistematik uyuşmazlıklar gözlenebilir. Elbette gözlem verileri, relativistik etkiler, sonlu kütle ve çekirdeğin hacmi gibi diğer etkileri de içerir. Fakat bunlar hafif atomlar için küçüktür. Böyle sistemler için farklılığın en büyük kaynağı Hartree-Fock çözümünün, Schrödinger denkleminin tam çözümüne bir yaklaşım olmasındandır. Tümüyle ihmal edilen, elektronların hareketindeki etkileşmedir. Her bir elektronun, diğer elektronlarla belirlenen alanda bağımsız olarak hareket ettiği farz edilir. Bu nedenle enerjideki hata 1955'de Löwdin tarafından karşılıklı etkileşme enerjisi olarak tanımlandı:

$$E^{karş.etk.} = E^{tam} - E^{HF} \quad (2.39)$$

Burada, E^{tam} ; birtakım varsayımlara dayanan Schrödinger denkleminin yine bir dizi kabullenimlere dayanan gerçek çözümü olup gözlenen enerji değildir.

2.2.2. Genel teori

$\rho = Zr$ şeklinde yeni bir değişken tanımlanırsa Hamiltonyen,

$$H = Z^2(H_0 + Z^{-1}V) \quad (2.40)$$

olur. Burada H_0 ,

$$H_0 = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{1}{\rho} \right) \quad (2.41)$$

ve

$$V = \sum_{i>j}^N \frac{1}{\rho_{ij}} \quad (2.42)$$

dır. Schrödinger denklemi de,

$$(H_0 + Z^{-1}V)\psi = (Z^{-2}E_1)\psi \quad (2.43)$$

olur. Uzunluk birimi ρ 'da dalga fonksiyonu

$$\psi = \psi_0 + Z^{-1}\psi_1 + Z^{-2}\psi_2 + \dots \quad (2.44)$$

ve enerji

$$E = Z^2(E_0 + Z^{-1}E_1 + Z^2E_2 + \dots) \quad (2.45)$$

olduğu farzedilirse, ψ_k ve E_k için denklemler elde etmek için (2.43)'deki açılımlar yerine yazılır:

$$(H_0 - E_0)\psi_0 = 0 \quad (2.46)$$

$$(H_0 - E_0)\psi_1 = (E_1 - V)\psi_0 \quad (2.47)$$

$$(H_0 - E_0)\psi_2 = (E_1 - V)\psi_1 + E_2\psi_0 \quad (2.48)$$

Birinci denklemin çözümleri hidrojen benzeri yörüngemsimlerin çarpımlarıdır.

$|(nl)vLS\rangle$, hidrojen benzeri yörüngemsilerin çarpımlarından oluşturulan konfigürasyon hal fonksiyonu olsun. Burada (nl) ; N kuantum sayılarının birtakımını $(n_1l_1, n_2l_2, \dots, n_Nl_N)$ ve v , farklı konfigürasyon durumlarını ayırt etmek için gereken çiftlenim modeli ve üstünlük kuantum sayısını gösterir. Böylece

$$H_0|(nl)vLS\rangle = E_0|(nl)vLS\rangle \quad (2.49)$$

ve

$$E_0 = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \frac{1}{n_i^2} \quad (2.50)$$

olur. E_0 , açısal momentum sayılarından bağımsız olduğu için farklı konfigürasyonların aynı E_0 'ı verebilmesi doğaldır. Yani E_0 dejeneredir. ψ_0 ,

dejenere durumlar için 1. dereceden pertürbasyon teorisine göre $|(nl')v'LS\rangle$ dejenere konfigürasyon hal fonksiyonlarının lineer birleşimidir. Katsayılar, etkileşme matrisinin öz vektörünün bileşenleridir ve E_1 karşılık gelen özdeğerdir. O halde,

$$\psi_0 = \sum_{l'v'} c_{(l')v'} |(nl')v'LS\rangle \quad (2.51)$$

dır. Sadece aynı π pariteli konfigürasyonlar etkileşir ve lineer birleşim aynı pariteli ve aynı baş kuantum sayılı set tüm CSFlar üzerindedir. Bu, 'kompleks' olarak tanımlanan $(n)\pi LS$ kuantum sayılarıyla gösterilen konfigürasyonların setidir.

ψ_1 , 1. dereceden düzeltme, ψ_0 'a dik olan (2.47)'nin bir çözümüdür ve kompleks dışında H_0 'a ait olan $|\gamma_v LS\rangle$ normalize edilmiş ara konfigürasyon hal fonksiyonlarının lineer bir birleşimi olarak açılabilir:

$$\psi_1 = \sum_v \frac{|\gamma_v LS\rangle \langle \gamma_v LS | V | \psi_0 \rangle}{E_0 - E_{\gamma_v LS}} \quad (2.52)$$

Burada \sum , hem aynı durumlar üzerinden toplamı hem de sürekli durumlar üzerinden integrali gösterir. Denklemden, $E_{\gamma_v LS} = \langle \gamma_v LS | V | \psi_0 \rangle$ ve komplekse karşılık gelen $E_{\gamma_v LS} = E_0$ olan durumlar ihmal edilir:

$$E_2 = \langle \psi_0 | V | \psi_1 \rangle = \sum_v \frac{\langle \gamma_v LS | V | \psi_0 \rangle^2}{E_0 - E_{\gamma_v LS}} \quad (2.53)$$

1. dereceden düzeltme de üçüncü dereceden enerji düzeltmesinin tam bağıntısını belirler:

$$E_3 = \langle \psi_1 | V - E_1 | \psi_1 \rangle \quad (2.54)$$

Bu ifadelerden ψ_1 'in yapısının son derece önemli olduğu açıktır.

2.2.3. ψ_1 'in yapısı

0. dereceden dalga fonksiyonu ψ_0 , genel anlamda çok elektronlu sistemi tanımlar. Fakat birçok atomik özellikler için 1. dereceden düzeltme önemli olabilir. (2.51), (2.52)'de yerine yazılırsa ve toplamın sırası değiştirilirse;

$$\psi_1 = \sum_{l'v'} c_{(l')v'} \sum_v \frac{|\gamma_v LS\rangle \langle \gamma_v LS | V | (nl')v' LS\rangle}{E_0 - E_{\gamma_v LS}} \quad (2.55)$$

olur. Başka bir deyişle, karışım katsayısı $c_{(l')v'}$, $|(nl')v' LS\rangle$ ile etkileşen ara konfigürasyon hal fonksiyonları üzerinden toplamdaki önemli bir faktördür. Sonuç olarak, genelde 1. dereceden düzeltmelerin lineer bir birleşimi olarak 1. dereceden düzeltme dikkate alınabilir. Böylece sadece dejenere olmayan durumları çalışmak yeterlidir.

$\gamma LS = (nl)vLS$ olduğu $\psi_0 = |\gamma LS\rangle$ alınsın. Buna göre γLS ile etkileşen durumlar iki tiptir: Tek elektronla farklı (S) olanlar ve iki elektronla (D) farklı olanlar.

Bu tipler, bir baş kuantum sayısı ile γLS 'den farklıdır; fakat spin ve yörünge açısız çiftlenimi aynı kalır. Bu konfigürasyon halleri 'radyal karşılıklı etkileşme'nin parçasıdır. Baş kuantum sayısının yanı sıra çiftlenimleri de farklıdır. Değişen sadece 'spinlerin çiftlenimi'dir. Bu durum da spin kutuplaşmasının parçasıdır.

Tamamıyla bir elektronun açısız momentumun da farklı olanlar ve konfigürasyon durumunun yörünge açısız momentum çiftleniminin de bir değişikliği gösterir ve bu da 'yörünge kutuplaşmasını' gösterir.

İki elektronu farklı olan CSFler üzerinden toplamlar da sınıflandırılabilir. $(nl)vLS$ 'deki dolu yörüngeler $(a,b,c\dots)$ ve (ν,ν',\dots) de dolmamış veya sanal yörüngeler olsun. $ab \rightarrow \nu\nu'$ çiftli yer değiştirme farklı karşılıklı etkileşmelerine göre sınıflandırılabilen ψ_1 'e ait açılımda bir CSF'yi üretebilir:

– ab , dış elektronlara ait yörüngeler ise; yer değiştirme dış veya değerlik karşılıklı etkileşmeyi gösterir.

– a , bir öz yörüngesi fakat b , bir dış yörünge ise; etki özün kutuplaşmasını gösterir ve öz-değerlik karşılıklı etkileşmesi olarak adlandırılır.

– Yörüngelerin her ikisi de özden ise; yer değiştirme öz-öz karşılıklı etkileşmesidir.

2.2.4. Çiftli-karşılıklı etkileşme açılımları

Z'ye bağlı pertürbasyon teorisi çoğu atomik sistemler için uygun değildir. Ancak ilk yaklaşımı nasıl iyileştirilebileceğini göstermek için çok faydalı bir yol olabilir. Dikkat, kesin bir pertürbasyon parametresi üzerine değil daha çok ψ_0 'ın yapısı ve ψ_1 üzerine olan düzeltmedir. Bazı durumlarda, doğal seçim $\psi = \Phi^{HF}(\mathcal{L}S)$ olabilir. Böylece ψ_1 ; ψ_0 'la etkileşen CSFler üzerinden bir toplam olmalıdır. Çünkü Coloumb operatörü, iki elektronlu bir operatör olduğu için, ψ_1 'deki CSFler, ikiden fazla elektronla Hartree-Fock konfigürasyonundan farklı olamaz.

ψ_1 'i tanımlayan (2.51)'deki toplamlar, sürekli durumlar üzerinden integrallerle sonsuz toplamlar içerir. Bağlı durumlar için değişim yöntemlerinde sürekli fonksiyonları almaya gerek yoktur. Fakat teoride bile bağ yörüngelerinin sayısı sınırsız olabilir. Pratikte, ASF'deki CSFleri belirleyen orbitallerin seti sınırlı olacaktır. Bu set, yörüngelerin *Aktif Seti*(AS) olarak tanımlanır. Gerçekte SD yer değiştirmelerle üretilen konfigürasyonların hepsi referans olarak verilen CSF ile etkileşmeyecektir.

Z'ye bağlı pertürbasyon teorisi 0. dereceden dalga fonksiyonunun her zaman tek bir CSF alamadığı gerçeğini hatırlatır. Gerçekte, her ne kadar kompleksliğin belirli

üyelerinin önemli olmadığı bazı doğal atomlar için basit bir test olarak gösterilse de kompleksliğin diğer üyeleri ihmal edilmemelidir. Komplekste olmayan CSFler son derece önemli olabilir. Her hangi bir durumda, ψ_0 CSFlerin bir seti üzerinden açıldığında bir ‘çoklu referans seti’ oluşur ve 1. dereceden düzeltme çoklu referans seti olan SD yer değiştirmelerinden elde edilen sette bulunur. Çiftlenim bilgisi göz ardı edildiğinde, bazı CSFlerin ψ_0 ile etkileşmediği ortaya çıkacaktır.

2.2.5. Tüm ve kısıtlanmış aktif uzaylar

Genelde üretilecek CSFler için bir kural ve verilmiş yörüngelerin aktif bir seti için CSFlerin bir seti oluşturulur. Bu set, dalga fonksiyonunun açılımı için bir temel oluşturur. Kural tüm mümkün CSFleri ürettiğinde elde edilen uzay ‘tüm aktif uzay (CAS)’ olarak adlandırılır. CAS, çoğunlukla tüm konfigürasyonlara kapalı bir tabakanın setine ait tanımlanır. Bu tabakaların yörüngelerinin aktif olmadığı söylenebilir. Çoğunlukla, CSFlerin önemli bir seti farklı kurallar uygulanarak elde edilen setlerin bir araya getirilmesi ile elde edilebilir. CSFler belirlendiğinde MCHF yöntemi uygulanabilir.

2.2.6. MCHF yöntemi

MCHF yönteminde, dalga fonksiyonu, ortonormal konfigürasyon hal fonksiyonlarının lineer bir birleşimi olarak alınır. Böylece dalga fonksiyonu (2.20)’deki gibidir. Enerji ifadesi de,

$$\varepsilon_{\gamma LS} = \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M c_i c_j \langle \Phi_{\gamma_i LS} | H | \Phi_{\gamma_j LS} \rangle \quad (2.56)$$

$$= \sum_{i=1}^M c_i^2 H_{ii} + 2 \sum_{j=1}^M c_i c_j H_{ij} \quad (2.57)$$

olur. Burada,

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

dır. $H_{ii} = H_{ij}$ olduğundan, i, j üzerinden toplam köşegenlere sınırlandırılabilir ve etkileşme matrisi olarak tanımlanan H matrisinin en alt kısmıdır. $c = (c_1, c_2, \dots, c_M)^t$ şeklinde açılım katsayılarının bir sütun vektörü olsun. Sistemin enerjisi,

$$E = c^t H c \quad (2.58)$$

olur. $P, [P_{(a;r)}, P_{(b,c)}, \dots]^t$ şeklinde radyal fonksiyonların sütun vektörü olmak üzere etkileşme matris elemanları radyal fonksiyonlara bağlı olduğundan enerji fonksiyonu P ve c 'ye bağlı olacaktır.

MCHF denklemlerinin türetilmesinde, enerji indirgenmelidir ve radyal fonksiyonlar ve c cinsinden ifade edilir. Hamiltonyen matris elemanlarının elde edilmesi için açısal momentum teorisinden,

$$H_{ij} = \sum_{ab} w_{ab}^{ij} I(a,b) + \sum_{abcd;k} v_{abcd}^{ij} R^k(ab, cd) \quad (2.59)$$

yazılır. Burada ab veya $abcd$, her konfigürasyon durumunda dolu yörüngeler üzerindedir. Bu, enerji ifadesinde yerine yazılırsa,

$$\varepsilon_{\gamma LS} = \sum_{ab} w_{ab} I(a,b) + \sum_{abcd;k} v_{abcd;k} R^k(ab, cd) \quad (2.60)$$

elde edilir. Burada

$$w_{ab} = \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M c_i c_j w_{ab}^{ij}$$

ve

$$v_{abcd;k} = \sum_i \sum_j c_i c_j v_{abcd;k}^{ij} \quad (2.61)$$

dir. Bu şekilde enerji, integrallerinin bir listesi ve bunların karışım katsayılarına bağlı olan enerjiye katkısı olarak ifade edilir. İntegraller üzerinden toplamı minimumlaştırmak için hem $I_{(a,b)}$ hem de $R^k_{(ab,cd)}$ integrallerinin simetri özelliklerini almak kullanışlıdır.

Hatree-Fock denklemlerinin türetilmesindeki gibi, kararlılık şartı tüm kısıtlamalar için Lagrange çarpanlarını içeren bir fonksiyona uygulanabilir. Böylece,

$$F(P, c) = \varepsilon_{\mathcal{L}S} + \sum_{a \leq b} \delta_{l_a l_b} \lambda_{ab} \langle a | b \rangle - E \sum_{i=1}^M c_i^2 \quad (2.62)$$

c_i 'deki değişimlere göre sağlanan kararlı durumlarda $\varepsilon_{\mathcal{L}S}$ için en uygun şekil köklü denkleme yönlendiren $Hc = Ec$ 'dir. Böylece Lagrange çarpanı E sistemin toplam enerjisidir. Radyal fonksiyonlardaki değişime gelince kararlı bir durum koşulu, farklı olan her radyal fonksiyon için denklemlerin bir tanesine yönlendirilir.

$P_{(a;r)}$ radyal bir fonksiyon olsun. Buna göre;

1-) $w_{aa} I_{(a,a)}$ 'nın değişimi,

$$-w_{aa} \int_0^{\infty} \delta P(a;r) LP(a;r) dr \quad (2.63)$$

olur.

2-) $\sum_{b;k} v_{abab;k} R^k(ab, ab)$ ' in deęişimi,

$$2w_{aa} \int_0^{\infty} \delta P_{(a;r)} \frac{1}{r} Y_{(a;r)} P_{(a;r)} dr \quad (2.64)$$

olarak ifade edilebilir.

3-) Benzer olarak, dięer tüm integrallerin deęişimi $2w_{aa} \int_0^{\infty} \delta P_{(a;r)} \frac{1}{r} X_{(a;r)} dr$ şeklinde açıklanabilir.

Ortonormallik kısıtlamaları ile deęişimlerin toplamı da

$$w_{aa} \int_0^{\infty} \delta P(a;r) Q(a;r) dr = 0 \quad (2.65)$$

şeklinde açıklanabilir. $\delta P_{(a;r)}$ küçük deęişimler için sıfır olma koşulu $Q_{(a;r)} = 0$ veya

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} [Z - Y(nl;r)] - \frac{l(l+1)}{r^2} - \varepsilon_{nl,nl} \right) P(nl;r) = \frac{2}{r} X(nl;r) + \sum_{n' \neq n} \varepsilon_{nl,n'l} P(n'l;r) \quad (2.66)$$

durumuna götürür. Burada a ile ilişkili orbital kuantum sayıları gösterilir ve nl olarak kabul edilir. Köşegen ve köşegen dışı enerji parametreleri Langrage çarpanları ile ilişkilidir:

$$\varepsilon_{nl,nl} = \frac{2\lambda_{nl,nl}}{w_{nl,nl}} \quad \varepsilon_{nl,n'l} = \frac{\lambda_{nl,n'l}}{w_{nl,nl}} \quad (2.67)$$

Bu tanımda köşegen ve köşegen dışı enerji parametrelerinin matrisi simetrik değildir. Ancak;

$$w_{nl,nl}\mathcal{E}_{nl,n'l} = w_{n'l',n'l}\mathcal{E}_{n'l,nl} \quad (2.68)$$

dır. Bu radyal denklemler sistemi aşağıdaki durumlar hariç HF denklemlerine benzer şekillere sahiptir:

- Doluluk sayıları $w_{nl,nl}$ tamsayı değildir; daha çok ‘beklenen’ doluluk sayısıdır.
- $X(nl;r)$ fonksiyonu, sadece bir konfigürasyon hali içindeki elektronların değişiminden değil aynı zamanda konfigürasyon halleri arasındaki etkileşimlerden de kaynaklanır.

2.2.7. Ortogonal olmayan açılım

Buraya kadar olan tartışmada radyal fonksiyonların yalnızca ortonormal olduğu kabul edilmişti. Matris elemanlarının oluşturulması, yörüngeler ortonormal olmadığında komplekstir. İlgili enerji ifadesini korumak ve genelleştirmiş öz değer probleminden kaçınmak için, aşağıdaki kısıtlamalar uygulanır:

- 1-) Her CSF içindeki yörüngeler ortogonaldır.
- 2-) İzleyici elektronları içeren $\Phi_{\gamma_i LS}$ 'de en fazla iki alt tabaka vardır. Alt tabakanın yörüngeleri tüm $i, j \leq M$ için $\Phi(\gamma_j LS)$ yörüngelerine ortogonal değildir.
- 3-) Ortogonal olmayan yörüngeli izleyici elektronlar aynı l değerine sahipse $\Phi_{\gamma_i LS}$ ve $\Phi_{\gamma_j LS}$ her birinde böyle en fazla iki elektron vardır.

$$4-) \left\langle \Phi_{(\gamma_i LS)} \left| \Phi_{(\gamma_j LS)} \right. \right\rangle = \delta_{ij}$$

dir. İzleyici terimi etkileşmede doğrudan alınmayan elektronları göstermek için kullanılır. (3) sınırlamasının amacı, ortogonal olmayan izleyici elektronların davranışındaki soy toplamaları gereksinimden kaçınmaktır.

Yukarıdaki açılımlarla, radyal integraller O^1 integralleri olarak adlandırılan $\langle a_1|a_2 \rangle^{p_1}$ şeklinde üst üste gelme integrali ve O^2 , $\langle a_1|a_2 \rangle^{p_1} \langle b_1|b_2 \rangle^{p_2}$ üst üste gelme integralleri ile çarpılabilir. a_1 , a_2 , b_1 ve b_2 dolu yörüngelerdir. Enerji ifadesindeki üst üste gelme integralleri ile radyal denklemin türetilmesi oldukça karışıktır fakat belli başlı teoriler aynıdır.

MCHF probleminin çözümü köklü denklemin değişim yöntemi ile radyal denklemlerin aynı anda çözümünü gerektirir. Böyle elde edilen radyal denklemler verildiğinde, yalnızca köklü denklemin çözülmesine ihtiyaç vardır ve problem konfigürasyon etkileşmesi (CI) problemi olarak adlandırılır. Herhangi bir radyal fonksiyonun en uygun hale getirilmesi, MCHF hesabı olarak adlandırılır. İteratif yöntem kısaca şöyle tanımlanır:

- 1-) Radyal fonksiyonlar bulunur.
- 2-) İstenilen öz çözümler için köklü problem çözülür.
- 3-) Yakınsayana kadar;
 - a-) Radyal fonksiyonlar belirlenir.
 - b-) İstenilen öz çözümler için köklü problem çözülür.

2.2.8. MCHF dalga fonksiyonlarının özellikleri

MCHF dalga fonksiyonu HF dalga fonksiyonu ile benzer birçok özelliğe sahiptir. HF yaklaşımında köşegen enerji parametresi, tekli dolu yörünge durumunda bir

elektronun bağlanma enerjisi ile doğrudan ilişkilidir. Bir alt tabaka çoklu dolu olduğunda, enerji parametresi alt tabakanın bağlanmasıyla ilişkilidir. Yine de kendi etkileşimleri için bazı düzeltmelerin alınmasına ihtiyaç duyulur. MCHF’de bir konfigürasyonda tekli dolu yörüngenin köşegen enerjisinin, bağlanma enerjisiyle ilişkili olduğu gösterilebilir. Fakat çoğunlukla bir yörünge birçok konfigürasyonda görülebilir ve köşegen enerji parametresi artık anlamlı parametre değildir.

Çoğunlukla, yörüngeler spektroskopik olarak adlandırılır. Bu Hartree-Fock yöntemindeki duruma benzerdir. Köşegen enerjisi, bağlanma enerjisi ile yakından ilişkilidir. Aksi takdirde, yörünge ‘karşılıklı etkileşme yörüngesi’ olarak adlandırılır. Karşılıklı etkileşme yörüngesinin köşegen enerji parametresi büyüktür. Bu, yörünge büzülme etkisidir. Bu şekilde temel konfigürasyonların spektroskopik yörüngelerle dolu olan uzay bölgesindeki dalga fonksiyonu düzeltilsin diye yörünge değme etkisine sahiptir.

MCHF dalga fonksiyonu, $P(nl;r) \rightarrow P(nl;r) + \epsilon P(n'l;r)$ şeklindeki radyal fonksiyonların pertürbasyonuna göre kararlıdır. ψ ’nin pertürbasyonu (birinci derece) $F(nl \rightarrow n'l)$ orantılı bir fonksiyon olarak ilişkilendirilirse, kararlık şartı ile;

$$\langle \psi^{MCHF} | H | F_{(nl \rightarrow n'l)} \rangle = 0$$

elde edilir. $F_{(nl \rightarrow n'l)}$ bir CSF olursa; CSF, MCHF yaklaşımında alınır. Bu, Brillouin teoreminin(GBT) genelleştirilmesidir. GBT tüm mertebeler için sağlandığında, pertürbasyon tüm mertebeleri içerir ve dalga fonksiyonu değişmeyecektir.

Ortonormal radyal baz alındığında, enerji temelin dönmesine göre kararlı olmalıdır. Bu dalga fonksiyonu böyle bir dönmede invaryant(değişmez) olsun diye tekli bir konfigürasyon durum olayına görülür. Bu çözüm, sıfır olmayan köşegen enerji parametrelerine sahip olmasıyla karakterize edilebilirdi. Aktif uzay dalga fonksiyonu açılımında radyal şartın bir dönmesi tüm aktif uzay içinde uygun olur ve karışım katsayıları değişecekse, dalga fonksiyonu ve enerji değişmeyecektir. Böylece MCHF

dalga fonksiyonu tekli değildir. Serbestlik derecesi, belirli bir açılım katsayısı sıfır olan çözüm seçilmesiyle kaldırılabilir. O halde, GBT ile; rotasyonel bir pertürbasyon etkisi enerjinin açılımında tüm mertebelere sıfır olduğu gösterilmiş olabilir. MCHF problemi için tek bir çözüm elde etmek ve Brillouin teoremine güvenmek için bir CSF elde etme tekniği, GBT yaklaşımı olarak bilinir. MCHF programı ancak HF olayındaki gibi ilgili Lagrange çarpanını sıfıra ayarlayacaktır.

Çoğu durumlarda, dalga fonksiyonunun baskın bileşeni, HF yörüngelerine benzer spektroskopik yörüngelere sahiptir. Sonuç olarak, bu yörüngeler için radyal denklemi çözmeden sayısal teknikler, geçerli radyal fonksiyonu gerektirir. MCHF programı ilk CSF'nin spektroskopik olduğu kabul eder. Sonrasında kabul edilebilir olması gerekmez ve her hangi bir şekilde olmasına izin verilir. Kabul edilebilirliği kontrol edilmeksizin 1 adımı kullanılarak sağlanabilirler. Böylece, genel olarak açılım katsayıları güncellendikten sonra sırası ile bütün radyal fonksiyonlar tekrar güncellenir ise en iyi yakınsama sağlanabilir.

Açılım katsayısı güncellenmesi için kullanılan yöntem, ilk bileşen için özvektör bulma işlemleri en büyük katkı sağlayanlardan bir tanesidir. Bu, CSF için radyal fonksiyonlardır.

Normalize edilmiş c vektörünün bilindiği kabul edilsin. Bu durumda H ve c ,

$$H = \begin{bmatrix} H_{11} & H_1^t \\ H_1 & H' \end{bmatrix} \left(\frac{1}{c} \right) c = \begin{bmatrix} 1 \\ c' \end{bmatrix}$$

şeklinde ayrıştırıldığında E yakınsayana kadar aşağıdaki işlemler yapılır:

1-) $E = c' H c$ 'i hesaplanır.

2-) c' için $H_1 + H' c' = E c'$ çözülür.

3-) $(\alpha = \frac{1}{\sqrt{1 + c'^t c}})$ olarak $c = \alpha \begin{bmatrix} 1 \\ c' \end{bmatrix}$ kurulur.

2.3. Breit-Pauli Relativistik Katkılar

2.3.1. Breit-Pauli Hamiltonyeni

Breit-Pauli Hamiltonyeni,

$$H_{BP} = H_{NR} + H_{RS} + H_{FS} \quad (2.69)$$

olarak yazılır. Burada H_{NR} relativistik olmayan çok elektronlu Hamiltonyen'dir. Relativistik kayma operatörü H_{RS} , \mathbf{L} ve \mathbf{S} ile sıra değiştirir. Bu operatör,

$$H_{RS} = H_{MC} + H_{D1} + H_{D2} + H_{OO} + H_{SSC} \quad (2.70)$$

ile ifade edilir. Burada H_{MC} kütle düzeltme terimi olup,

$$H_{MC} = -\frac{\alpha^2}{8} \sum_{i=1}^N (\nabla_i^2)^t \nabla_i^2 \quad (2.71)$$

şeklinde yazılır. H_{D1} ve H_{D2} tek ve iki cisim Darwin terimleridir ve

$$H_{D1} = -\frac{\alpha^2 Z}{8} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 \left(\frac{1}{r_i} \right) \quad (2.72)$$

$$H_{D2} = -\frac{\alpha^2}{4} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 \left(\frac{1}{r_{ij}} \right) \quad (2.73)$$

ile verilir. H_{SSC} spin-spin etkileşme terimi olup

$$H_{SSC} = -\frac{8\pi\alpha^2}{3} \sum_{i<j}^N (s_i \cdot s_j) \delta(r_i, r_j) \quad (2.74)$$

ile ifade edilir. Son olarak da H_{OO} , yörünge-yörünge terimidir ve

$$H_{OO} = -\frac{\alpha^2}{2} \sum_{i<j}^N \left[\frac{p_i \cdot p_j}{r_{ij}} + \frac{r_{ij} (r_{ij} \cdot p_i) p_j}{r_{ij}^3} \right] \quad (2.75)$$

şeklinde yazılır. İnce yapı operatörü H_{FS} spin ve elektronların açısal yörünge momentumu arasındaki etkileşmeleri tanımlar ve sadece \mathbf{L} ve \mathbf{S} değil $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ toplam açısal momentumunu da değiştirir. İnce yapı operatörü üç terimden oluşur:

$$H_{FS} = H_{SO} + H_{SOO} + H_{SS} \quad (2.76)$$

Burada H_{SO} , çekirdek spin-yörünge terimidir ve

$$H_{SO} = \frac{\alpha^2 Z}{2} \sum_{i=1}^N \frac{1}{r_i^3} l_i \cdot s_i \quad (2.77)$$

olarak yazılır. H_{SOO} , spin-diğer yörünge terimi olup

$$H_{SOO} = -\frac{\alpha^2}{2} \sum_{i<j}^N \frac{r_{ij} \times p_i}{r_{ij}^3} (s_i + 2s_j) \quad (2.78)$$

ile ifade edilir. H_{SS} , spin-spin terimidir ve

$$H_{SS} = \alpha^2 \sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}^3} \left[s_i \cdot s_j - 3 \frac{(s_i \cdot r_{ij})(s_j \cdot r_{ij})}{r_{ij}^2} \right] \quad (2.79)$$

şeklinde yazılır.

2.3.2. Breit-Pauli dalga fonksiyonları

Breit-Pauli Hamiltonyeni, \mathbf{J} toplam açısal momentum operatörü ile sıra değiştirir. Böylece karşılık gelen dalga fonksiyonları \mathbf{J}^2 ve \mathbf{J}_z 'nin özfonksiyonları olmalıdır. Çok konfigürasyon yaklaşımında, Breit-Pauli dalga fonksiyonları

$$\psi(\gamma JM_j) = \sum_{i=1}^M c_i \Phi(\gamma_i L_i S_i JM_j) \quad (2.80)$$

şeklinde elde edilir. Burada $\Phi(\gamma LSJM_J)$ LSJ çiftlenmiş CSF'lerdir. Yani,

$$\Phi(\gamma LSJM_J) = \sum_{M_L M_S} \langle LM_L SM_S | LSJM_J \rangle \Phi(\gamma LM_L SM_S) \quad (2.81)$$

şeklinindedir. Ne \mathbf{L} ne de \mathbf{S} iyi kuantum sayıları olmadığından farklı LS 'li CSFlerin (2.79) açılımına dahil edilmesi gerekir ve farklı LS terimlerin bir karışımı elde edilir. Bu durumda, dalga fonksiyonu ara çiftlenimde verilmektedir.

CSFleri oluşturan radyal fonksiyonlar önceki relativistik olmayan MCHF gösteriminden alınır ve sadece açılım katsayıları iyileştirilir. Daha önce tanımlandığı gibi,

$$Hc = Ec \quad (2.82)$$

matris özdeğer problemi elde edilir. Burada H ,

$$H_{ij} = \langle \gamma_i L_i S_i J M_J | H_{BP} | \gamma_j L_j S_j J M_J \rangle \quad (2.83)$$

matris elemanlı Hamiltonyen matrisidir.

Böylece Breit-Pauli Hamiltonyen'inin özdeğer ve özfonksiyon problemi her \mathbf{J} değeri için köşegen bir matris ve CSFlerin çiftlenmiş LSJ arasındaki matris elemanlarının ölçümünü düşürür.

Breit-Pauli Hamiltonyeni, relativistik olmayan Hamiltonyen'e 1. dereceden pertürbasyon düzeltmesidir.

2.3.3. İnce yapı seviyeleri

Çok elektronlu bir sistem için relativistik enerji düzeltmelerinin doğasındaki bazı anlamları kavramak için sadece bir terim içeren (2.80) açılımındaki basit durum incelendiğinde açılım için

$$E = E_{NR} + E_{RS} + E_{FS} \quad (2.84)$$

değeri elde edilir. Burada,

$$E_{NR} = \langle \mathcal{L} S J M_J | H_{NR} | \mathcal{L} S J M_J \rangle \quad (2.85)$$

relativistik olmayan sıradan enerjidir ve

$$E_{RS} = \langle \mathcal{L} S J M_J | H_{RS} | \mathcal{L} S J M_J \rangle \quad (2.86)$$

ve

$$E_{FS} = \langle \mathcal{L} S J M_J | H_{FS} | \mathcal{L} S J M_J \rangle \quad (2.87)$$

sırasıyla relativistik kayma ve ince yapı katkılarından gelen relativistik enerji düzeltmeleridir.

Relativistik kayma operatörleri tüm \mathbf{L} ve \mathbf{S} ler ile sıra değiştirir ve böylece E_{RS} \mathbf{J} 'den (ve M_J) bağımsızdır ve E_{NR} relativistik olmayan LS terim enerjisinin kaymasını gösterir. İnce yapı enerjisi;

$$E_{FS} = E_{SO} + E_{SOO} + E_{SS} \quad (2.88)$$

olarak yazılır. Burada E_{SO} , E_{SOO} ve E_{SS} sırası ile spin-yörünge, spin-diğer yörünge ve spin-spin operatörlerine karşılık gelen enerjilerdir. Bütün bu enerjiler \mathbf{J} kuantum sayısına dayanır ve ince yapı seviyelerindeki relativistik olmayan E_{NR} terim enerjisinin LS yarılmasını etkiler. Açısal momentumun toplam kurallarını kullanarak, belirli \mathbf{L} ve \mathbf{S} değerlerine karşılık gelen mümkün \mathbf{J} değerleri

$$|L-S|, |L-S|+1, \dots, L+S-1, L+S \quad (2.89)$$

dir. Terimdeki seviyelerin sayısı $\mathbf{L} \leq \mathbf{S}$ ise $2\mathbf{S}+1$ ve $\mathbf{L} < \mathbf{S}$ ise $2\mathbf{L}+1$ çokluğu ile verilir.

Spin-yörünge ve spin-diğer yörünge rankı bir olan spin ve uzaysal tensör operatörlerinin çarpımlarıdır. Bu nedenle formül;

$$E_{SO} = \langle yLSJM_J | H_{SO} | yLSJM_J \rangle \alpha(-1)^{L+S+J} \begin{Bmatrix} L & L & 1 \\ S & S & J \end{Bmatrix} \quad (2.90)$$

$$E_{SOO} = \langle yLSJM_J | H_{SOO} | yLSJM_J \rangle \alpha(-1)^{L+S+J} \begin{Bmatrix} L & L & 1 \\ S & S & J \end{Bmatrix} \quad (2.91)$$

ile verilir. Spin-spin, rankı iki olan iki tensör operatörün sayısal bir çarpımıdır ve Wigner-Eckart teoreminden

$$E_{SS} = \langle yLSJM_J | H_{SS} | yLSJM_J \rangle \alpha (-1)^{L+S+J} \left\{ \begin{matrix} L & L & 1 \\ S & S & J \end{matrix} \right\} \quad (2.92)$$

şeklinde elde edilir. Şimdi, $6-j$ sembolleri için belli ifadeler kullanarak,

$$(-1)^{L+S+J} \left\{ \begin{matrix} L & L & 1 \\ S & S & J \end{matrix} \right\} \alpha J(J+1) - L(L+1) - S(S+1) \quad (2.93)$$

$$(-1)^{L+S+J} \left\{ \begin{matrix} L & L & 2 \\ S & S & J \end{matrix} \right\} \alpha \frac{3}{4} C(C+1) - L(L+1) - S(S+1) \quad (2.94)$$

yazılır. Burada $C = J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)$ 'dir.

Spin-spin terimleri ihmal edildiğinde \mathbf{J} ve $\mathbf{J}-1$ iki komşu ince yapı seviyeleri arasındaki enerji farkının,

$$\Delta E_{FS} = 2\xi J \quad (2.95)$$

olduğunu görmek kolaydır. Burada $\xi = \xi_{SO} + \xi_{SOO}(yLS)$ olur. Bu ince yapı için Lande aralık kuralı olarak adlandırılır. ξ pozitif ve ince yapı enerjisi \mathbf{J} artıyor ise o halde ince yapının normal olduğu söylenir. ξ negatif ise ters olduğu söylenir.

Çoğunlukla spin-spin terimi önemli bir şekilde katkı sağlar ve ihmal edilemez. Bu durumda Lande aralık kuralı bozulur ve ince yapı düzensiz bir davranış gösterir. Bu aynı toplam \mathbf{J} 'yi farklı \mathbf{L} ve \mathbf{S} 'li CFSler, (2.80) açılımına dahil edildiğinde de olabilir.

2.4. Enerji Seviyeleri Arasındaki Geçişler

2.4.1. Geçişler ve geçiş özellikleri

Bir atomik sistemin enerji seviyeleri genellikle yarı ömrü sonsuz olan haller olarak kabul edilir. Bir elektromanyetik alan varlığında bu durum değişebilir. Soğurulan foton, atomu veya iyonu yüksek seviyelere uyarır, uyarılmış iyon elektromanyetik alan yokluğunda kendiliğinden yayma ile bozunur.

İki hal arasındaki elektromanyetik geçiş, açısal momentum ve fotona eşlik eden parite ile tanımlanır. Soğurulan veya yayımlanan fotonun paritesi $\pi=(-1)^k$ (k açısal momentum) ise geçişe elektrik çok-kutuplu (E_k) geçiş, paritesi ise $\pi=(-1)^{k+1}$ manyetik çok-kutuplu (M_k) geçiş denir. Her geçiş paritesi π ve rankı k olan $O_q^{\pi(k)}$ küresel tensör işlemcisi ile tanımlanır. Bu, elektrik ve manyetik geçişler için sırasıyla,

$$E_q^{(k)} = \sum_{i=1}^N r^k(i) C_q^{(k)}(i) \quad (2.96)$$

$$M_q^{(k)} = \alpha \sqrt{k(2k-1)} \left[\frac{1}{k} MA_q^{(k)} + \frac{1}{2} g_s MB_q^{(k)} \right] \quad (2.97)$$

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

$$MA_q^{(k)} = \sum_{i=1}^N r^{k-1}(i) \left[C^{(k-1)}(i) \times l^{(1)}(i) \right]_q^{(k)} \quad (2.98)$$

$$MB_q^{(k)} = \sum_{i=1}^N r^{k-1}(i) \left[C^{(k-1)}(i) \times s^{(1)}(i) \right]_q^{(k)} \quad (2.99)$$

şeklinde tanımlanır.

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

$$I_q^{\pi k}(\gamma JM, \gamma' J' M') = \langle \gamma JM | O_q^{\pi(k)} | \gamma' J' M' \rangle \quad (2.100)$$

ve bileşen şiddeti $S^{\pi k}$

$$S^{\pi k}(\gamma JM, \gamma' J' M') = \sum_q \left| I_q^{\pi k}(\gamma JM, \gamma' J' M') \right|^2 \quad (2.101)$$

şeklinde tanımlanır. Çizgi şiddeti ise

$$S^{\pi k}(\gamma JM, \gamma' J' M') = \sum_{M, M', q} \left| \langle \gamma JM | O_q^{\pi(k)} | \gamma' J' M' \rangle \right|^2 \quad (2.102)$$

dir. Çizgi şiddeti indirgenmiş matris elemanlarının karesidir:

$$S^{\pi k}(\gamma J, \gamma' J') = \sum_{M, M', q} \left| \langle \gamma J || O_q^{\pi(k)} || \gamma' J' \rangle \right|^2. \quad (2.103)$$

Bir üst seviyeden bir alt seviyeye yayımlama için geçiş oranı (veya olasılığı)

$$A^{\pi k}(\gamma' J', \gamma J) = 2C_k \left[\alpha(E_{\gamma' J'} - E_{\gamma J}) \right]^{2k+1} \frac{S^{\pi k}(\gamma' J', \gamma J)}{g_{J'}} \quad (2.104)$$

ile verilir. Burada $g_{J'}$ üst seviyenin istatistiksel ağırlığıdır:

$$g_{J'} = 2J' + 1 \quad (2.105)$$

ve C_k ,

$$C_k = \frac{(2k+1)(k+1)}{k((2k+1)!!)^2} \quad (2.106)$$

şeklinde tanımlanır. Ağırlıklı salınıcı şiddeti soğurma ya da yaymadaki geçişi temsil eder. Düşük haldeki bir atom foton soğurarak üst seviyeye uyarıldığında salınıcı şiddeti

$$f^{\pi k}(\gamma J, \gamma' J') = \frac{1}{\alpha} c_k [\alpha(E_{\gamma' J'} - E_{\gamma J})]^{2k-1} \frac{S^{\pi k}(\gamma J, \gamma' J')}{g_J} \quad (2.107)$$

dir. Yayma salınıcı şiddeti de benzer ifadeye sahiptir (işareti hariç). Esas olan ağırlıklı salınıcı şiddeti veya gf-değeridir. Ağırlıklı salınıcı şiddeti

$$gf^{\pi k}(\gamma J, \gamma' J') = g_J f^{\pi k}(\gamma J, \gamma' J') \quad (2.108)$$

ile verilir.

Çoğu deneyler ölçümlerin kolaylığından dolayı üst seviyenin yarı ömrünü verir. Bu durumda, tüm düşük seviyelere göre çok kutuplu geçişler üzerinden toplam alınmalıdır. $\gamma' J'$ seviyesinin yarı ömrü

$$\tau_{\gamma' J'} = \frac{1}{\sum_{\pi k, \gamma J} A^{\pi k}(\gamma' J', \gamma J)} \quad (2.109)$$

dir.

2.4.2. Kesin ve yaklaşık seçim kuralları

Kesin seçim kuralları tüm konfigürasyon hal fonksiyonları için uygulanır. Bir atomik hal fonksiyonu açılımındaki tüm konfigürasyon hal fonksiyonları aynı paritelidir.

Manyetik dipol işlemcileri $(-1)^{k-1}$, elektrik dipol işlemcileri $(-1)^k$ paritelidirler. İki halin paritesi π ve π' ile gösterilirse;

$$E^{(k)}; \frac{\pi'}{\pi} = (-1)^k \quad (2.110)$$

$$M^{(k)}; \frac{\pi'}{\pi} = (-1)^{k-1} \quad (2.111)$$

şeklinde. Bir atomik hal fonksiyonu açılımındaki CSFlerin diğer bir özelliği toplam J ile ilgilidir:

$$\Delta J = J - J' = 0, \pm 1, \dots, \pm k \quad k \leq J + J' \quad (2.112)$$

$J = J' = 0$ ise izinli değildir.

CSFlerin açısal momentumları aktif veya pasif olarak sınıflandırılabilir. Pasif momentumlar, aktifler (2.105)'deki kurala göre oluşurken değişmeyecektir. Dikkate alınacak ilk kural, uzaysal ve uzayını temsil eden farklı işlemcilerin ranklarına bağlıdır. Spin için $E^{(k)}$ işlemcisinin spininden bağımsızdır ve spinler daima elektrik çok-kutuplu geçişler için pasiftir. Seçim kuralı,

$$E^{(k)}: \quad \Delta S = 0 \quad (2.113)$$

olarak özetlenebilir. Aynı seçim kuralı $MA_q^{(k)}$ işlemcisi için geçerlidir.

Uzaysal açısal momentumlarına ait seçim kurallarını elde etmek için, $E^{(k)}$ işlemcisine karşılık gelen tensörün rankının k olmasına dikkat edilmelidir ve seçim kuralı

$$E^{(k)}: \quad \Delta L = 0, \pm 1, \dots, k \quad k \leq L + L' \quad (2.114)$$

dür. Uzay tensörü $MA^{(k)}$, k ranklı ve $MB^{(k)}$, $k-1$ ranklı ise uzay ve spin momentumları için seçim kuralları;

$$MA^{(k)}: \quad \Delta S = 0 \quad \Delta L = 0, \pm 1, \dots, k \quad k \leq L + L' \quad (2.115)$$

$$MB^{(k)}: \quad \Delta S = 0, \pm 1 \quad \Delta L = 0, \pm 1, \dots, (k-1) \quad k-1 \leq L + L' \quad (2.116)$$

şeklindedir.

BÖLÜM 3. SONUÇLAR VE ÖNERİLER

Bu çalışmanın amacı, Bor atomu ve iyonlarının (B I-V) enerji seviyelerini, elektrik dipol, elektrik kuadropol ve manyetik dipol geçiş parametrelerini elde etmektir. Bu veriler astrofizikte önemlidir. Bor ve iyonları için şimdiye kadar bu tür verileri veren çeşitli hesap ve deney sonuçları mevcuttur. Bu çalışmada nötral Bor ve iyonları için atomik yapı hesaplamaları Fischer'in geliştirdiği konfigürasyon etkileşme yöntemlerinden biri olan çok konfigürasyon Hartree-Fock yönteminin [9,54-56] kullanıldığı çok konfigürasyonlu Hartree-Fock paketi [52] ile yapılmaktadır. Hesaplamalarda çok elektronlu sistemler için karşılıklı etkileşme ve Breit-Pauli Hamiltoniyeni çerçevesinde relativistik etkiler de dikkate alındı. Bu çalışmada elde edilen sonuçlar, çoğu NIST [53]'den olmak üzere daha önce yayınlanmış diğer çalışma sonuçları ile karşılaştırılarak tablolarda verildi.

B I ile ilgili hesaplamalarda, karşılıklı etkileşmelerin incelenmesi için iki farklı konfigürasyon seti seçildi. Hesaplama için alınan konfigürasyonlar Tablo 1'de verilmektedir. Tablo 2 düşük çizgi seviyelerine ait enerjiler içermektedir. Kısalık için dolu olan $1s^2$ tabakası tabloda yazılmadı. Elde edilen iki hesaplama sonucu A ve B olarak isimlendirildi. A konfigürasyon setindeki $2s2p^2 \ ^2D$ ile $2s^24p \ ^2P^o$ seviyeleri kıyaslanan değerlere yakın çıkarken $2s2p^2 \ ^4P$ seviyesi B konfigürasyon setindeki sonuca göre daha düşük değerdedir. $2p^3$ iyonlaşma limitinin üzerinde olsa da, temel hal dalga fonksiyonuna bu seviyenin katkısının olduğu bilinmektedir. Bu katkı %3.5 olarak bulundu. Karşılaştırma değerlerinin çoğu NIST [53]'den alınan değerlerdir. Tablo 3, 4 ve 5'de düşük çizgi seviyeleri arasındaki E1, E2 ve M1 geçişleri için sırasıyla dalga boyları, geçiş olasılıkları ve ağırlıklı salınıcı şiddetleri verilmektedir. Beş elektrona sahip olan atomik borun hafif olmasına rağmen hesaplamalarda relativistik düzeltmeler dikkate alındı. Bu çalışmanın amacı atomik borun düşük çizgi seviyelerine ait verileri güncelleştirmek, bu seviyeler ve elektrik ve manyetik

Tablo 3.1 B I-V için tek ve çift pariteli seviyelere ait konfigürasyonlar

Seviyeler	Konfigürasyonlar	
	A	B
Nötral Bor (B I)		
Tek parite	$1s^2 2s^2 np(n=2-5),$ $1s^2 2s 2p ns(n=3-5),$ $1s^2 2s 2p nd(n=3-4), 2s^2 4f$	$1s^2 2s^2 np(n=2-5), 1s^2 2s 2p ns(3-5), 2p^3,$ $1s^2 2s 2p nd(n=3-4)$
Çift parite	$1s^2 2s 2p^2, 1s^2 2s^2 nd(n=3-4),$ $1s^2 2s ns^2(n=3-4),$ $1s^2 2s np^2(n=3-4), 1s^2 3d^3$	$1s^2 2s 2p^2, 2s^2 ns(n=3-4), 1s^2 2s^2 nd(n=3-4),$ $2s ns^2(n=3-4), 1s^2 2s nd^2(n=3-4),$ $2s np^2(n=3-4), 1s^2 2s 2p 3p$
Be-Benzeri Bor (B II)		
Tek parite	$1s^2 2s nl(n=2-5, l=1,3)$ $1s^2 2p ns(n=3-4), 1s^2 2p 3d$	$1s^2 2s nl(n=2-5, l=1,3)$ $1s^2 2p ns(n=3-4), 1s^2 2p 3d$
Çift parite	$1s^2 2s^2, 1s^2 2p^2, 1s^2 2s nl(n=3-5, l=0,2), 1s^2 2s 6s, 1s^2 2p 3p$	$1s^2 2s^2, 1s^2 2p(1)^2, 1s^2 2s nl(n=3-5, l=0,2),$ $1s^2 2s 6s, 1s^2 2p(2) 3p$
Li-Benzeri Bor (B III)		
Tek parite	$1s^2 2p, 1s^2 3p, 1s^2 nl(n=4-5, l=1,3)$	
Çift parite	$1s^2 nl(n=2-5, l=0,2), 1s^2 ns(n=6-7)$	
He-Benzeri Bor (B IV)		
Tek parite	$1s 2p, 1s 3p, 1s nl(n=4-6, l=1,3)$	
Çift Parite	$1s(2)^2, 1s(1) 2s,$ $1s(1) nl(n=3-4, l=0,2), 2p 3p$	
H-Benzeri Bor (B V)		
Tek parite	$2p, 3p, nl(n=4-6, l=1,3)$	
Çift parite	$1s, 2s, nl(n=3-5, l=0,2), 6s$	

Tablo 3.2. B I için E (cm⁻¹) enerji seviyeleri

Seviyeler			E (cm ⁻¹)	
Konf.	Terim	J	E MCHF+BP	E diğer çalışmalar
2s ² 2p	2P ^o	1/2	0,00 ^{A,B}	0,00 ^{a1,a2,b,c}
		3/2	15,302 ^A ; 15,585 ^B	14,900 ^{a1} ; 15,289 ^{a2} ; 15,254 ^c
2s2p ²	4P	1/2	24489,266 ^A ; 27797,000 ^B	26507,7 ^{a1} ; 22235,769 ^{a2} ; 28870,0 ^c
		3/2	24493,943 ^A ; 27801,822 ^B	26513,0 ^{a1} ; 22248,985 ^{a2} ; 28875,0 ^c
		5/2	24499,119 ^A ; 27807,263 ^B	26521,8 ^{a1} ; 22268,393 ^{a2} ; 28881,3 ^c
2s ² 3s	2S	1/2	49086,872 ^A ; 59053,325 ^B	48074,7 ^{a1} ; 33857,824 ^{a2} ; 26888,450 ^b ; 40039,650 ^c
		3/2	48581,502 ^A ; 49753,446 ^B	51204,7 ^{a1} ; 42046,486 ^{a2} ; 47856,93 ^c
2s2p ²	2D	5/2	48579,325 ^A ; 49751,710 ^B	51204,7 ^{a1} ; 42051,802 ^{a2} ; 47857,24 ^c
		1/2	54501,994 ^A	56823,4 ^{a1} ; 45344,872 ^{a2} ; 18316,283 ^b ; 48611,817 ^c
2s ² 3p	2P ^o	3/2	54504,160 ^A	56825,1 ^{a1} ; 45346,548 ^{a2} ; 18314,500 ^b ; 48613,600 ^c
		3/2	134821,897 ^A ; 123086,134 ^B	62656,3 ^{a1} ; 55913,577 ^{a2} ; 54767,633 ^c
2s ² 3d	2D	5/2	134822,823 ^A ; 123087,758 ^B	62656,4 ^{a1} ; 55919,383 ^{a2} ; 54767,804 ^c
		1/2	66501,002 ^A ; 147963,026 ^B	63169,2 ^{a1} ; 11917,916 ^b ; 55010,181 ^c
2s ² 4s	2S	1/2	56521,891 ^B	66007,8 ^{a1} ; 9141,724 ^b ; 57786,376 ^c
2s ² 4p	2P ^o	3/2	56523,286 ^B	66008,4 ^{a1} ; 9141,086 ^b ; 57787,014 ^c
		5/2	–	68165,5 ^{a1} ; 6897,073 ^b ; 60031,027 ^c
2s ² 4f	2F ^o	7/2	90868,330 ^A	68165,5 ^{a1} ; 6897,073 ^b ; 60031,02 ^c
		1/2	–	68449,5 ^{a1} ; 6781,650 ^b ; 60146,45 ^c
2s ² 5s	2S	1/2	60323,898 ^A ; 63118,613 ^B	65154,9 ^{a1} ; 56816,091 ^{a2} ; 63560,64 ^c
2s2p ²	2S	1/2	80736,379 ^A ; 83024,360 ^B	78059,9 ^{a1} ; 73792,898 ^{a2} ; 72522,87 ^c
		3/2	80744,845 ^A ; 83032,612 ^B	78070,5 ^{a1} ; 73813,102 ^{a2} ; 72534,52 ^c
2p ³	4S ^o	1/2	126498,799 ^B	95814,2 ^{a1} ; 97103,7 ^c
		3/2	147330,510 ^B	108566,2 ^{a1} ; 99800,0 ^c
		5/2	147337,143 ^B	108566,2 ^{a1} ; 99800,0 ^c
	2P ^o	1/2	161224,544 ^B	122015 ^{a1} ; 111100,0 ^c
		3/2	161210,873 ^B	122015,6 ^{a1} ; 111200,0 ^c

^{a1,a2}Ref. [60,61], ^bRef. [1], ^cRef.[53]

Tablo 3.3. B I'in bazı seviyeleri arasındaki E1, E2 ve M1 geçişlerine ait $\lambda(A^\circ)$ dalga boyları

Alt Seviye		Üst Seviye			$\lambda(A^\circ)$		
Konf.	Terim	J	Konf.	Terim	J	λ_{MCHF}	λ diğer çalışmalar
E1 Geçişleri							
2s ² 2p	² P ^o	1/2	2s2p ²	² P	3/2	1238,53 ^A ; 1204,41 ^B	1280,8936 ^{a1} ; 1355,066 ^{a2} ; 1378,654 ^b
2s ² 2p	² P ^o	1/2	2s2p ²	² P	1/2	1238,66 ^A ; 1204,53 ^B	1281,0675 ^{a1} ; 1355,377 ^{a2} ; 1378,875 ^b
2s ² 2p	² P ^o	3/2	2s2p ²	² P	3/2	1238,77 ^A ; 1204,63 ^B	1281,1381 ^{a1} ; 1355,347 ^{a2} ; 1378,944 ^b
2s ² 2p	² P ^o	3/2	2s2p ²	² P	1/2	1238,90 ^A ; 1204,76 ^B	1281,3121 ^{a1} ; 1355,658 ^{a2} ; 1379,166 ^b
2s ² 2p	² P ^o	1/2	2s2p ²	² S	1/2	1657,80 ^A ; 1584,40 ^B	1534,8053 ^{a1} ; 1760,501 ^{a2} ; 1573,301 ^b
2s ² 2p	² P ^o	3/2	2s2p ²	² S	1/2	1658,22 ^A ; 1584,79 ^B	1535,1564 ^{a1} ; 1760,975 ^{a2} ; 1573,679 ^b
2s ² 2p	² P ^o	1/2	2s2p ²	² D	3/2	2058,50 ^A ; 2010,01 ^B	1952,9461 ^{a1} ; 2378,320 ^{a2} ; 2088,8885 ^b
2s ² 2p	² P ^o	3/2	2s2p ²	² D	5/2	2059,24 ^A ; 2010,71 ^B	1953,5143 ^{a1} ; 2378,884 ^{a2} ; 2089,57004 ^b
2s ² 2p	² P ^o	3/2	2s2p ²	² D	3/2	2059,15 ^A ; 2010,64 ^B	1953,5146 ^{a1} ; 2379,185 ^{a2} ; 2089,55615 ^b
2s ² 2p	² P ^o	1/2	2s ² 3s	² S	1/2	2037,31 ^A ; 1693,48 ^B	2080,0981 ^{a1} ; 2953,527 ^{a2} ; 2496,77687 ^b
2s ² 2p	² P ^o	3/2	2s ² 3s	² S	1/2	2037,94 ^A ; 1693,93 ^B	2080,7430 ^{a1} ; 2954,861 ^{a2} ; 2497,7224 ^b
2s ² 3p	² P ^o	1/2	2s ² 5s	² S	1/2	–	8601,3103 ^{a1} ; 8667,223 ^b
2s ² 3p	² P ^o	3/2	2s ² 5s	² S	1/2	–	8602,5364 ^{a1} ; 8668,570 ^b
2s ² 3s	² S	1/2	2s ² 3p	² P ^o	3/2	–	11428,0958 ^{a1} ; 8704,187 ^{a2} ; 11663,223 ^b
2s ² 3s	² S	1/2	2s ² 3p	² P ^o	1/2	–	11430,2603 ^{a1} ; 8705,456 ^{a2} ; 11665,648 ^b
2s ² 3p	² P ^o	1/2	2s ² 4s	² S	1/2	–	15758,3431 ^{a1} ; 20313,742 ^{a2} ; 15628,983 ^b
2s ² 3p	² P ^o	3/2	2s ² 4s	² S	1/2	–	15762,4589 ^{a1} ; 20320,657 ^{a2} ; 15633,339 ^b
2s ² 3p	² P ^o	1/2	2s ² 3d	² D	3/2	1245,09 ^A	17144,0327 ^{a1} ; 9471,663 ^{a2} ; 16244,768 ^b
2s ² 3p	² P ^o	3/2	2s ² 3d	² D	5/2	1245,10 ^A	17148,6921 ^{a1} ; 9468,621 ^{a2} ; 16249,087 ^b
2s ² 3p	² P ^o	3/2	2s ² 3d	² D	3/2	1245,12 ^A	17148,9043 ^{a1} ; 9473,166 ^{a2} ; 16249,475 ^b
2s ² 2p	² P ^o	1/2	2s ² 3d	² D	3/2	741,76 ^A , 812,48 ^B	1596,0088 ^{a1} ; 1788,823 ^{a2} ; 1825,89390 ^b
2s ² 2p	² P ^o	3/2	2s ² 3d	² D	5/2	741,84 ^A , 812,57 ^B	1596,3866 ^{a1} ; 1789,150 ^{a2} ; 1826,39952 ^b
2s ² 2p	² P ^o	3/2	2s ² 3d	² D	3/2	741,84 ^A , 812,58 ^B	1596,3884 ^{a1} ; 1789,312 ^{a2} ; 1826,40371 ^b
E2 Geçişleri							
2s ² 2p	² P ^o	1/2	2s ² 2p	² P ^o	3/2	6535517,23 ^A ; 6416790,05 ^B	6541500 ^b
2s2p ²	⁴ P	1/2	2s2p ²	⁴ P	5/2	9744573,60 ^A ; 10150507,05 ^B	9120000 ^b
2s2p ²	⁴ P	3/2	2s2p ²	⁴ P	5/2	18380647,90 ^A ; 19323844,84 ^B	15800000 ^b
2s2p ²	⁴ P	1/2	2s2p ²	⁴ P	3/2	20739929,97 ^A ; 21382274,11 ^B	21600000 ^b

Tablo 3.3.'ün devamı

Alt Seviye			Üst Seviye			$\lambda(A^\circ)$	
Konf.	Terim	J	Konf.	Terim	J	λ_{MCHF}	λ diğer çalışmalar
M1 Geçişleri							
$2s^2 2p$	$^2P^\circ$	1/2	$2s^2 2p$	$^2P^\circ$	3/2	6535517,23 ^A ; 6416790,05 ^B	6541500 ^b
$2s2p^2$	4P	3/2	$2s2p^2$	4P	5/2	18380647,90 ^A ; 19323844,84 ^B	15800000 ^b
$2s2p^2$	4P	1/2	$2s2p^2$	4P	3/2	20739929,97 ^A ; 21382274,11 ^B	21600000 ^b

^{a1,a2} Ref. [60,61], ^b Ref. [53]

Tablo 3.4. B I'in bazı seviyeleri arasındaki E1, E2 ve M1 geçişlerine ait Aki geçiş olasılıkları

Alt Seviye			Üst Seviye			Aki(s ⁻¹)	
Konf.	Terim	J	Konf.	Terim	J	Aki _{MCHF}	Aki _{diğer çalışmalar}
E1 Geçişleri							
2s ² 2p	² P ^o	1/2	2s2p ²	² P	3/2	2,56(8) ^A ; 6,78(8) ^B	4,67(8) ^{a1} ; 5,353(8) ^{a2} ; 3,42(8) ^b
2s ² 2p	² P ^o	1/2	2s2p ²	² P	1/2	2,62(9) ^A ; 2,71(9) ^B	1,87(9) ^{a1} ; 2,141(9) ^{a2} ; 1,37(9) ^b
2s ² 2p	² P ^o	3/2	2s2p ²	² P	3/2	3,28(9) ^A ; 3,39(9) ^B	2,33(9) ^{a1} ; 2,679(9) ^{a2} ; 1,71(9) ^b
2s ² 2p	² P ^o	3/2	2s2p ²	² P	1/2	1,31(9) ^A ; 1,36(9) ^B	9,35(8) ^{a1} ; 1,072(9) ^{a2} ; 6,84(8) ^b
2s ² 2p	² P ^o	1/2	2s2p ²	² S	1/2	6,90(7) ^A ; 1,20(8) ^B	3,02(8) ^{a1} ; 2,257(8) ^{a2} ; 4,42(7) ^b
2s ² 2p	² P ^o	3/2	2s2p ²	² S	1/2	1,21(8) ^A ; 2,39(8) ^B	6,01(8) ^{a1} ; 4,487(8) ^{a2} ; 8,84(7) ^b
2s ² 2p	² P ^o	1/2	2s2p ²	² D	3/2	1,47(8) ^A ; 7,35(7) ^B	1,15(8) ^{a1} ; 1,529(6) ^{a2} ; 3,61(7) ^b
2s ² 2p	² P ^o	3/2	2s2p ²	² D	5/2	1,77(8) ^A ; 8,81(7) ^B	1,38(8) ^{a1} ; 1,776(6) ^{a2} ; 4,33(7) ^b
2s ² 2p	² P ^o	3/2	2s2p ²	² D	3/2	2,94(7) ^A ; 1,46(7) ^B	2,29(7) ^{a1} ; 2,938(5) ^{a2} ; 7,16(6) ^b
2s ² 2p	² P ^o	1/2	2s ² 3s	² S	1/2	9,31(7) ^A ; 1,82(6) ^B	1,30(8) ^{a1} ; 7,858(7) ^{a2} ; 8,40(7) ^b
2s ² 2p	² P ^o	3/2	2s ² 3s	² S	1/2	1,86(8) ^A ; 3,66(6) ^B	2,59(8) ^{a1} ; 1,570(8) ^{a2} ; 1,68(8) ^b
2s ² 3p	² P ^o	1/2	2s ² 5s	² S	1/2	–	1,95(6) ^{a1} ; 1,84(6) ^b
2s ² 3p	² P ^o	3/2	2s ² 5s	² S	1/2	–	3,90(6) ^{a1} ; 3,67(6) ^b
2s ² 3s	² S	1/2	2s ² 3p	² P ^o	3/2	–	1,98(7) ^{a1} ; 3,933(7) ^{a2} ; 1,72(7) ^b
2s ² 3s	² S	1/2	2s ² 3p	² P ^o	1/2	–	1,98(7) ^{a1} ; 3,932(7) ^{a2} ; 1,72(7) ^b
2s ² 3p	² P ^o	1/2	2s ² 4s	² S	1/2	–	5,14(6) ^{a1} ; 5,077(5) ^{a2} ; 5,55(6) ^b
2s ² 3p	² P ^o	3/2	2s ² 4s	² S	1/2	–	1,03(7) ^{a1} ; 1,015(6) ^{a2} ; 1,11(7) ^b
2s ² 3p	² P ^o	1/2	2s ² 3d	² D	3/2	1,16(8) ^A	9,54(6) ^{a1} ; 1,925(7) ^{a2} ; 1,06(7) ^b
2s ² 3p	² P ^o	3/2	2s ² 3d	² D	5/2	1,39(8) ^A	1,14(7) ^{a1} ; 2,312(7) ^{a2} ; 1,27(7) ^b
2s ² 3p	² P ^o	3/2	2s ² 3d	² D	3/2	2,32(7) ^A	1,91(6) ^{a1} ; 3,849(6) ^{a2} ; 2,11(6) ^b
2s ² 2p	² P ^o	1/2	2s ² 3d	² D	3/2	8,63(9) ^A ; 4,63(9) ^B	2,75(8) ^{a1} ; 1,117(9) ^{a2} ; 1,70(8) ^b
2s ² 2p	² P ^o	3/2	2s ² 3d	² D	5/2	1,03(10) ^A ; 5,56(9) ^B	3,29(8) ^{a1} ; 1,340(9) ^{a2} ; 2,04(8) ^b
2s ² 2p	² P ^o	3/2	2s ² 3d	² D	3/2	1,73(9) ^A ; 9,27(8) ^B	5,48(7) ^{a1} ; 2,228(8) ^{a2} ; 3,39(7) ^b
E2 Geçişleri							
2s ² 2p	² P ^o	1/2	2s ² 2p	² P ^o	3/2	6,43(-16) ^A ; 6,39(-16) ^B	6,24(-16) ^b
2s2p ²	⁴ P	1/2	2s2p ²	⁴ P	5/2	9,96(-17) ^A ; 3,54(-11) ^B	7,78(-17) ^b
2s2p ²	⁴ P	3/2	2s2p ²	⁴ P	5/2	7,00(-18) ^A ; 1,98(-12) ^B	5,84(-18) ^b
2s2p ²	⁴ P	1/2	2s2p ²	⁴ P	3/2	3,80(-19) ^A ; 1,42(-13) ^B	1,74(-19) ^b
M1 Geçişleri							
2s ² 2p	² P ^o	1/2	2s ² 2p	² P ^o	3/2	3,08(-8) ^A ; 3,05(-8) ^B	3,20(-8) ^b
2s2p	⁴ P	3/2	2s2p ²	⁴ P	5/2	2,61(-9) ^A ; 2,18(-9) ^B	4,10(-9) ^b
2s2p ²	⁴ P	1/2	2s2p ²	⁴ P	3/2	2,52(-9) ^A ; 2,23(-9) ^B	2,23(-9) ^b

^{a1,a2} Ref. [60,61], ^b Ref. [53]

Tablo 3.5. B I'in bazı seviyeleri arasındaki E1, E2 ve M1 geçişlerine ait gf ağırlıklı salıncı şiddetleri

Alt Seviye			Üst Seviye			gf	
Konf.	Terim	J	Konf.	Terim	J	gf _{MCHF}	gf diğer çalışmalar
E1 Geçişleri							
2s ² 2p	² P ^o	1/2	2s2p ²	² P	3/2	0,60354 ^A ; 0,58937 ^B	0,45936 ^{a1} ; 0,589 ^{a2} ; 0,39 ^b
2s ² 2p	² P ^o	1/2	2s2p ²	² P	1/2	1,20713 ^A ; 1,17886 ^B	0,91876 ^{a1} ; 1,179 ^{a2} ; 0,782 ^b
2s ² 2p	² P ^o	3/2	2s2p ²	² P	3/2	3,01851 ^A ; 2,94804 ^B	2,29892 ^{a1} ; 2,951 ^{a2} ; 1,948 ^b
2s ² 2p	² P ^o	3/2	2s2p ²	² P	1/2	0,60387 ^A ; 0,58979 ^B	0,46030 ^{a1} ; 0,591 ^{a2} ; 0,39 ^b
2s ² 2p	² P ^o	1/2	2s2p ²	² S	1/2	0,05017 ^A ; 0,09046 ^B	0,21323 ^{a1} ; 0,209 ^{a2} ; 0,0328 ^b
2s ² 2p	² P ^o	3/2	2s2p ²	² S	1/2	0,09982 ^A ; 0,18019 ^B	0,42483 ^{a1} ; 0,417 ^{a2} ; 0,0656 ^b
2s ² 2p	² P ^o	1/2	2s2p ²	² D	3/2	0,37468 ^A ; 0,17808 ^B	0,26267 ^{a1} ; 0,005 ^{a2} ; 0,0944 ^b
2s ² 2p	² P ^o	3/2	2s2p ²	² D	5/2	0,67392 ^A ; 0,32023 ^B	0,47238 ^{a1} ; 0,009 ^{a2} ; 0,17 ^b
2s ² 2p	² P ^o	3/2	2s2p ²	² D	3/2	0,07474 ^A ; 0,03548 ^B	0,05236 ^{a1} ; 0,001 ^{a2} ; 0,01876 ^b
2s ² 2p	² P ^o	1/2	2s ² 3s	² S	1/2	0,11588 ^A ; 0,00157 ^B	0,16833 ^{a1} ; 0,099 ^{a2} ; 0,157 ^b
2s ² 2p	² P ^o	3/2	2s ² 3s	² S	1/2	0,23182 ^A ; 0,00316 ^B	0,33653 ^{a1} ; 0,198 ^{a2} ; 0,3144 ^b
2s ² 3p	² P ^o	1/2	2s ² 5s	² S	1/2		0,04330 ¹ ; 0,0414 ^b
2s ² 3p	² P ^o	3/2	2s ² 5s	² S	1/2		0,08658 ^{a1} ; 0,0828 ^b
2s ² 3s	² S	1/2	2s ² 3p	² P ^o	3/2		1,55439 ^{a1} ; 1,787 ^{a2} ; 1,404 ^b
2s ² 3s	² S	1/2	2s ² 3p	² P ^o	1/2		0,77705 ^{a1} ; 0,893 ^{a2} ; 0,702 ^b
2s ² 3p	² P ^o	1/2	2s ² 4s	² S	1/2		0,38233 ^{a1} ; 0,062 ^{a2} ; 0,406 ^b
2s ² 3p	² P ^o	3/2	2s ² 4s	² S	1/2		0,76446 ^{a1} ; 0,125 ^{a2} ; 0,812 ^b
2s ² 3p	² P ^o	1/2	2s ² 3d	² D	3/2	0,10795 ^A	1,68105 ^{a1} ; 1,035 ^{a2} ; 1,678 ^b
2s ² 3p	² P ^o	3/2	2s ² 3d	² D	5/2	0,19406 ^A	3,02507 ^{a1} ; 1,864 ^{a2} ; 3,016 ^b
2s ² 3p	² P ^o	3/2	2s ² 3d	² D	3/2	0,02156 ^A	0,33611 ^{a1} ; 0,207 ^{a2} ; 0,334 ^b
2s ² 2p	² P ^o	1/2	2s ² 3d	² D	3/2	2,84580 ^A ; 1,83562 ^B	0,41959 ^{a1} ; 2,144 ^{a2} ; 0,34 ^b
2s ² 2p	² P ^o	3/2	2s ² 3d	² D	5/2	5,12304 ^A ; 3,30435 ^B	0,75492 ^{a1} ; 3,858 ^{a2} ; 0,612 ^b
2s ² 2p	² P ^o	3/2	2s ² 3d	² D	3/2	0,56926 ^A ; 0,36719 ^B	0,08381 ^{a1} ; 0,427 ^{a2} ; 0,068 ^b
E2 Geçişleri							
2s ² 2p	² P ^o	1/2	2s ² 2p	² P ^o	3/2	1,65(-17) ^A ; 1,58(-17) ^B	—
2s2p ²	⁴ P	1/2	2s2p ²	⁴ P	5/2	3,28(-12) ^A ; 8,51(-18) ^B	—
2s2p ²	⁴ P	3/2	2s2p ²	⁴ P	5/2	6,67(-13) ^A ; 1,78(-18) ^B	—
2s2p ²	⁴ P	1/2	2s2p ²	⁴ P	3/2	3,90(-14) ^A ; 9,81(-20) ^B	—
M1 Geçişleri							
2s ² 2p	² P ^o	1/2	2s ² 2p	² P ^o	3/2	7,90(-10) ^A ; 7,53(-10) ^B	—
2s2p ²	⁴ P	3/2	2s2p ²	⁴ P	5/2	7,32(-10) ^A ; 7,92(-10) ^B	—
2s2p ²	⁴ P	1/2	2s2p ²	⁴ P	3/2	6,13(-10) ^A ; 6,50(-10) ^B	—

a1,a2 Ref. [60,61], b Ref. [53]

geçişlerdeki relativistik etkileri ve karşılıklı etkileşmelerin etkisini göstermektedir. Genel olarak, elde edilen sonuçlar diğerleriyle uyumludur.

B II ile ilgili hesaplamalarda, tek pariteli konfigürasyon seti ile iki çift pariteli konfigürasyon seti kullanıldı. Çift pariteli iki konfigürasyon setindeki farklılık; $1s^22p^2$ ile iyonlaşma limitinin üzerindeki $1s^22p3p$ durumundaki p yörüngesinin ayrı olarak hesaba katılmasıdır. Seçilen konfigürasyonlar Tablo 1’de verildi. Tablo 6 tekli ve üçlü terimli olan Be-benzeri borun farklı durumlardaki enerjilerini göstermektedir. $1s^22s3s \ ^1S$ durumunun enerjisi diğer çalışmalarla kıyaslandığında oldukça yüksek değerdedir. Konfigürasyon setine $3s^2$ ve $2p3p$ eklendiğinde bu değer 119616 cm^{-1} ’ye ulaşmaktadır. Ancak temel ve diğer durumlardaki enerjilerin bozulduğu görüldü. $1s^22p^2 \ ^3P$ seviyesinin A konfigürasyon setindeki sonucu iyileştirmek için B konfigürasyon seti alındı. Ancak bu değişiklik ile enerjisi büyük olan seviyelerde küçük miktarda artış gözlemlendi. Tablo 7, 8 ve 9’da bazı seviyelerin E1, E2 ve M1 geçişlerine ait geçiş parametreleri verilmektedir. Çift paritedeki konfigürasyon setinin değiştirilmesi ile $2s3d$, $2s4d$ ve $2s5d$ geçişlerinin değerleri değişmezken bazı seviyelerin değerlerinin iyileştiği gözlemlendi. Özellikle $2s2p \ ^3P^o - 2p^2 \ ^3P$ geçişlerinde iyileşmenin daha belirgin olduğu göze çarpmaktadır.

B III ile ilgili hesaplamalarda, tek paritede $1s^22p$, $1s^23p$, $1s^2nl(n=4-5, l=1,3)$ ve çift paritede $1s^2nl(n=2-5, l=0,2)$, $1s^2ns(n=6-7)$ durumlu değerlik elektronların enerjileri, elektrik dipol, elektrik kuadrupol ve manyetik dipol geçişlerinin dalgaboyu, geçiş olasılıkları ve ağırlıklı salıncı şiddetleri hesaplandı. Seçilen tek konfigürasyonlu sette (Tablo 1) elde edilen hesaplama sonuçları, Kramida ve diğerlerinin çalışmalarındaki [42] ve NIST [53]’teki değerlere oldukça yakındır. Çift pariteli konfigürasyon seti 5s ile sonlandırıldığında bu seviyenin enerjisi $1435491,2 \text{ cm}^{-1}$ gibi beklenen değerden çok üstünde bir sonuç çıkmaktaydı. 6s ve 7s seviyelerini de sete eklenildiğinde bu değer $262357,29 \text{ cm}^{-1}$ ’ye ulaşmakta ve diğer değerlere çok yakın olmaktadır. Tablo 11, 12 ve 13’te iki kez iyonlaşmış Li-benzeri borun geçiş parametrelerine ait hesaplama sonuçları verilmektedir. 3d ve 4d geçişlerinden elde edilen veriler diğer çalışmalarla karşılaştırıldığında uyumlu olduğu görülmektedir. E2 ve M1 geçişlerinde daha önce yapılmış çalışma olmadığından yüksek mertebeden geçişlere tablolarda yer verilmektedir.

Tablo 3.6. B II için E (cm⁻¹) enerji seviyeleri

Seviyeler			E (cm ⁻¹)	
Konf.	Terim	J	E _{MCHF+BP}	E diğer çalışmalar
1s ² 2s ²	¹ S	0	0,00 ^{A,B}	0,00 ^a
1s ² 2s2p	³ P ^o	0	37332,412 ^A ; 37368,625 ^B	37335,54 ^a
		1	37337,197 ^A ; 37373,408 ^B	37341,65 ^a
		2	37350,629 ^A ; 37386,840 ^B	37357,80 ^a
1s ² 2s2p	¹ P ^o	1	79093,527 ^A ; 79129,738 ^B	73396,510 ^a
1s ² 2p ²	³ P	0	99857,109 ^A ; 97502,253 ^B	98911,380 ^a
		1	99863,811 ^A ; 97509,799 ^B	98919,870 ^a
		2	99872,989 ^A ; 97520,984 ^B	98933,260 ^a
1s ² 2p ²	¹ D	2	106866,877 ^A ; 104058,255 ^B	102362,77 ^a
1s ² 2p ²	¹ S	0	139200,210 ^A ; 135304,946 ^B	127661,19 ^a
1s ² 2s3s	³ S	1	161025,862 ^A ; 161062,073 ^B	129773,83 ^a
1s ² 2s3s	¹ S	0	171171,377 ^A ; 171403,278 ^B	137622,25 ^a
1s ² 2s3p	³ P ^o	0	181063,651 ^A ; 181099,862 ^B	143989,95 ^a
		1	181064,860 ^A ; 181101,071 ^B	143990,56 ^a
		2	181067,727 ^A ; 181103,938 ^B	143994,11 ^a
1s ² 2s3p	¹ P ^o	1	184084,002 ^A ; 184120,213 ^B	144102,94 ^a
1s ² 2s3d	³ D	3	185567,921 ^A ; 185604,132 ^B	150649,68 ^a
		1	185559,240 ^A ; 185595,452 ^B	150649,68 ^a
		2	185562,588 ^A ; 185598,799 ^B	150649,68 ^a
1s ² 2s3d	¹ D	2	193524,460 ^A ; 193910,791 ^B	154686,12 ^a
1s ² 2s4s	³ S	1	206279,156 ^A ; 206315,395 ^B	166344,89 ^a
1s ² 2s4s	¹ S	0	204623,125 ^A ; 204947,727 ^B	167935,31 ^a
1s ² 2s4p	¹ P ^o	1	208384,787 ^A ; 208430,998 ^B	170591,33 ^a
1s ² 2s4p	³ P ^o	0	207475,029 ^A ; 207551,240 ^B	171545,96 ^a
		1	207473,431 ^A ; 207509,642 ^B	171545,96 ^a
		2	207471,886 ^A ; 207507,496 ^B	171545,96 ^a
1s ² 2s4d	³ D	1	212463,327 ^A ; 212499,538 ^B	174073,33 ^a
		3	212464,527 ^A ; 212499,755 ^B	174073,33 ^a
		2	212463,347 ^A ; 212499,558 ^B	174073,33 ^a
1s ² 2s4f	³ F ^o	3	214149,501 ^A ; 214185,712 ^B	174903,33 ^a
		2	214149,314 ^A ; 214185,525 ^B	174903,33 ^a
1s ² 2s4f	¹ F ^o	3	211404,970 ^A ; 211441,181 ^B	174921,89 ^a
1s ² 2s5s	³ S	1	221530,432 ^A ; 221433,586 ^B	180897,12 ^a
1s ² 2s5s	¹ S	0	219282,716 ^A ; 220090,548 ^B	181552,03 ^a
1s ² 2p3s	³ P ^o	0	837904,726 ^A ; 837940,937 ^B	181645,90 ^a
		1	837901,860; 837938,071 ^B	181655,55 ^a
		2	837912,737 ^A ; 837948,948 ^B	181676,76 ^a
1s ² 2s5p	¹ P ^o	1	238321,518 ^A ; 238357,729 ^B	181765,70 ^a
1s ² 2s5p	³ P ^o	0	232276,046 ^A ; 232312,257 ^B	183618,81 ^a
		1	232277,620 ^A ; 232313,831 ^B	183618,81 ^a
		2	232281,753 ^A ; 232317,964 ^B	183618,81 ^a

Tablo 3.6.'nın devamı

Seviyeler			E (cm ⁻¹)	
Konf.	Terim	J	E _{MCHF+BP}	E diğer çalışmalar
1s ² 2s5d	³ D	2	235824,911 ^A ; 235861,122 ^B	184633,72 ^a
		3	235825,929 ^A ; 235862,140 ^B	184633,72 ^a
		1	235824,588 ^A ; 235860,799 ^B	184633,72 ^a
1s ² 2s5f	³ F ^o	2	235824,588 ^A ; 235860,799 ^B	184908,78 ^a
		3	234925,252 ^A ; 234961,463 ^B	184908,78 ^a
		3	240223,225 ^A ; 240259,436 ^B	184958,20 ^a
1s ² 2s5f	¹ F ^o	3	240223,225 ^A ; 240259,436 ^B	184958,20 ^a
1s ² 2s5d	¹ D	2	215031,693 ^A ; 247951,341 ^B	185323,18 ^a
1s ² 2p3s	¹ P ^o	1	854460,849 ^A ; 854497,060 ^B	186629,92 ^a
1s ² 2s6s	³ S	1	791240,261 ^A ; 791276,472 ^B	188170,60 ^a
1s ² 2s6s	¹ S	0	856657,348 ^A ; 856694,187 ^B	188550,00 ^a
1s ² 2p3p	¹ P	1	190720,612 ^A ; 190756,821 ^B	189127,98 ^a
1s ² 2p3p	³ D	1	196474,792 ^A ; 196511,003 ^B	191034,80 ^a
		2	196480,931 ^A ; 196517,140 ^B	191044,60 ^a
		3	196490,658 ^A ; 196526,870 ^B	191063,40 ^a
1s ² 2p3p	³ S	1	198224,364 ^A ; 198260,575 ^B	193226,50 ^a
1s ² 2p3p	³ P	0	203660,415 ^A ; 206087,740 ^B	195601,70 ^a
		1	203666,394 ^A ; 206092,802 ^B	195608,22 ^a
		2	203675,144 ^A ; 206099,568 ^B	195619,05 ^a
1s ² 2p3p	¹ D	2	211581,127 ^A ; 213666,182 ^B	196979,60 ^a
1s ² 2p3d	³ F ^o	2	199563,122 ^A ; 199599,333 ^B	197694,70 ^a
		3	199570,204 ^A ; 199606,416 ^B	197703,70 ^a
		2	201188,199 ^A ; 201224,409 ^B	197720,14 ^a
1s ² 2p3d	¹ D ^o	2	201188,199 ^A ; 201224,409 ^B	197720,14 ^a
1s ² 2p3d	³ D ^o	1	208565,288 ^A ; 208601,500 ^B	200478,10 ^a
		2	208568,666 ^A ; 208604,877 ^B	200481,90 ^a
		3	208573,025 ^A ; 208609,236 ^B	200487,28 ^a
1s ² 2p3d	³ P ^o		213137,870 ^A ; 213174,081 ^B	200726,60 ^a
1s ² 2p3p	¹ S	0	241337,974 ^A ; 244047,318 ^B	203130? ^a
1s ² 2p3d	¹ P ^o	1	224831,876 ^A ; 224868,087 ^B	205107,00 ^a
1s ² 2p4s	³ P ^o		216836,461 ^A ; 216872,672 ^B	215650? ^a
1s ² 2p4s	¹ P ^o	1	217539,498 ^A ; 217575,709 ^B	217020,00 ^a

^a Ref. [53]

Tablo 3.7. B II'in bazı seviyeleri arasındaki E1, E2 ve M1 geçişlerine ait $\lambda(A^\circ)$ dalga boyları

Alt Seviye			Üst Seviye			$\lambda(A^\circ)$	
Konf.	Terim	J	Konf.	Terim	J	$\lambda_{MCHF+BP}$	$\lambda_{diğer\ çalışmalar}$
E1 Geçişler							
2s2p	³ P ^o	2	2s5d	³ D	3	503,87 ^A ; 503,87 ^B	678,9976 ^a
2p ²	³ P	2	2p3d	³ D ^o	3	920,01 ^A ; 900,23 ^B	984,698 ^a
2s2p	³ P ^o	1	2s5d	³ D	2	503,84 ^A ; 503,84 ^B	678,9232 ^a
2p ²	³ P	1	2p3d	³ D ^o	2	919,97 ^A ; 874,98 ^B	984,620 ^a
2s2p	³ P ^o	0	2s5d	³ D	1	503,82 ^A ; 503,82 ^B	678,8959 ^a
2p ²	³ P	0	2p3d	³ D ^o	1	893,61 ^A ; 900,14 ^B	984,574 ^a
2s2p	³ P ^o	1	2s5d	³ D	1	503,84 ^A ; 503,84 ^B	678,9232 ^a
2s2p	³ P ^o	2	2s5d	³ D	2	503,87 ^A ; 503,87 ^B	678,9976 ^a
2s2p	³ P ^o	1	2s3d	³ D	1	674,70 ^A ; 674,70 ^B	882,550 ^a
2p ²	³ P	1	2p3d	³ D ^o	1	920,00 ^A ; 900,20 ^B	984,657 ^a
2s ²	¹ S	0	2s5p	¹ P ^o	1	419,62 ^A ; 419,56 ^B	550,158 ^a
2s2p	¹ P ^o	1	2s5d	¹ D	2	735,67 ^A ; 592,37 ^B	893,4421 ^a
2p ²	¹ D	2	2s5f	¹ F ^o	3	749,91 ^A ; 734,25 ^B	1210,721 ^a
2s2p	³ P ^o	2	2s3d	³ D	2	674,74 ^A ; 674,74 ^B	882,676 ^a
2p ²	³ P	2	2p3d	³ D ^o	2	920,05 ^A ; 900,27 ^B	984,750 ^a
2s2p	³ P ^o	2	2s4d	³ D	3	571,09 ^A ; 571,05 ^B	731,4458 ^a
2s ²	¹ S	0	2s3p	¹ P ^o	1	543,26 ^A ; 543,15 ^B	693,9484 ^a
2s ²	¹ S	0	2s2p	¹ P ^o	1	1264,39 ^A ; 1263,81 ^B	1362,463 ^a
2p ²	¹ S	0	2s5p	¹ P ^o	1	419,62 ^A ; 419,56 ^B	1848,275 ^a
2s2p	¹ P ^o	1	2p ²	¹ S	0	1663,79 ^A ; 1780,24 ^B	1842,819 ^a
2s2p	³ P ^o	2	2s3s	³ S	1	808,61 ^A ; 808,61 ^B	1082,0634 ^a
2s2p	¹ P ^o	1	2p3p	¹ P	1	895,89 ^A ; 895,89 ^B	864,0692 ^a
2s2p	¹ P ^o	1	2p ²	¹ S	0	1599,57 ^A ; 1663,18 ^B	1624,175 ^a
2s2p	³ P ^o	0	2p ²	³ P	1	1599,28 ^A ; 1662,84 ^B	1623,790 ^a
2s2p	³ P ^o	0	2s4d	³ D	1	571,03 ^A ; 571,03 ^B	731,3264 ^a
2s ²	¹ S	0	2s4p	¹ P ^o	1	479,88 ^A ; 479,80 ^B	586,1963 ^a
2s2p	³ P ^o	1	2s3s	³ S	1	808,52 ^A ; 808,52 ^B	1081,8743 ^a
2s2p	³ P ^o	1	2p3p	³ P	0	601,27 ^A ; 592,75 ^B	631,8714 ^a
2s2p	³ P ^o	2	2s4d	³ D	2	571,09 ^A ; 571,09 ^B	731,4458 ^a
2s2p	³ P ^o	1	2s4d	³ D	2	571,04 ^A ; 571,05 ^B	731,3594 ^a
2s2p	³ P ^o	1	2p3p	³ D	1	628,42 ^A ; 628,42 ^B	809,172 ^a
2s3p	¹ P ^o	1	2p3p	¹ P	1	15068,71 ^A ; 15068,72 ^B	2220,295 ^a
2s2p	³ P ^o	2	2p ²	³ P	1	1599,75 ^A ; 1663,34 ^B	1624,377 ^a
2s2p	³ P ^o	2	2p ²	³ P	2	1599,57 ^A ; 1663,03 ^B	1624,024 ^a
2p ²	¹ D	2	2s5p	¹ P ^o	1	760,76 ^A ; 741,83 ^B	1259,399 ^a
2s2p	³ P ^o	0	2s3s	³ S	1	808,49 ^A ; 808,49 ^B	1081,8028 ^a
2s2p	³ P ^o	1	2p ²	³ P	2	1599,17 ^A ; 1662,66 ^B	1623,598 ^a
2s2p	³ P ^o	1	2p ²	³ P	1	1599,40 ^A ; 1662,97 ^B	1623,951 ^a
2p ²	¹ D	2	2s4f	¹ F ^o	3	956,64 ^A ; 931,29 ^B	1378,1865 ^a
2s3p	¹ P ^o	1	2s4s	¹ S	0	4869,01 ^A ; 4792,80 ^B	4194,792 ^a
2s3d	³ D	2	2s4f	³ F ^o	3	3498,28 ^A ; 3498,28 ^B	4121,928 ^a
2s2p	³ P ^o	2	2p3p	³ P	2	601,27 ^A ; 592,75 ^B	631,8666 ^a
2s2p	³ P ^o	1	2s3d	³ D	2	674,68 ^A ; 674,68 ^B	882,550 ^a
2s2p	³ P ^o	2	2s5s	³ S	1	543,37 ^A ; 543,37 ^B	696,6732 ^a
2s3d	¹ D	2	2s4f	¹ F ^o	3	5592,97 ^A ; 5704,67 ^B	4940,365 ^a
2s3p	³ P ^o	2	2s4d	³ D	3	3185,30 ^A ; 3185,30 ^B	3323,598 ^a
2p ²	¹ D	2	2s4p	¹ P ^o	1	985,00 ^A ; 958,15 ^B	1465,6619 ^a
2s2p	³ P ^o	2	2p3p	³ S	1	621,64 ^A ; 621,64 ^B	641,566 ^a
2s3p	³ P ^o	2	2p3p	³ D	3	6484,19 ^A ; 6484,19 ^B	2123,868 ^a
2s3d	³ D	3	2p3d	³ D ^o	3	4347,09 ^A ; 4347,09 ^B	2005,868 ^a
2s2p	³ P ^o	1	2s4d	³ D	2	571,05 ^A ; 571,05 ^B	731,3594 ^a
2s3d	³ D	1	2p3d	³ D ^o	1	4346,91 ^A ; 4346,91 ^B	2006,238 ^a

Tablo 3.7.'nin devamı

Alt Seviye			Üst Seviye			λ (Å°)	
Konf.	Terim	J	Konf.	Terim	J	$\lambda_{\text{MCHF+BP}}$	$\lambda_{\text{diğer çalışmalar}}$
2s3d	³ D	2	2p3d	³ D ^o	2	4346,90 ^A ; 4346,90 ^B	2006,085 ^a
2s3p	³ P ^o	1	2p3p	³ D	2	6487,07 ^A ; 3185,03 ^B	2124,545 ^a
2p ²	³ P	0	2p3s	³ P ^o	1	135,50 ^A ; 135,06 ^B	1208,554 ^a
2s3d	³ D	1	2s4f	³ F ^o	2	3497,90 ^A ; 3497,90 ^B	4121,928 ^a
2s3p	³ P ^o	1	2p3p	³ P	0	4425,88 ^A ; 4002,34 ^B	1937,566 ^a
2s3p	³ P ^o	2	2p3p	³ P	2	4423,56 ^A ; 4000,91 ^B	1937,048 ^a
2s2p	³ P ^o	2	2s3d	³ D	3	674,72 ^A ; 674,42 ^B	882,6758 ^a
E2 Geçişleri							
2s ²	¹ S	0	2p ²	¹ D	2	935,79 ^A ; 961,05 ^B	976,9177 ^a
2s ²	¹ S	0	2p ²	³ P	2	1001,32 ^A ; 1025,47 ^B	1010,782 ^a
2s2p	³ P ^o	2	2s2p	¹ P ^o	1	2395,74 ^{A,B}	2773,98 ^a
2p ²	³ P	2	2p ²	¹ S	0	2542,90 ^A ; 2646,76 ^B	3479,94 ^a
2p ²	¹ D	2	2p ²	¹ S	0	3092,94 ^A ; 3200,50 ^B	3951,698 ^a
2p ²	³ P	0	2p ²	¹ D	2	14266,54 ^A ; 15253,99 ^B	28974 ^a
2p ²	³ P	1	2p ²	¹ D	2	14280,20 ^A ; 15271,56 ^B	29045 ^a
2s2p	³ P ^o	0	2s2p	³ P ^o	2	5489834,47 ^{A,B}	4492000 ^a
2p ²	³ P	0	2p ²	³ P	2	6297073,82 ^A ; 5339304,68 ^B	4570000 ^a
2s2p	³ P ^o	1	2s2p	³ P ^o	2	7445363,75 ^{A,B}	6190000 ^a
2p ²	³ P	1	2p ²	³ P	2	10895654,26 ^A ; 8941449,40 ^B	7470000 ^a
M1 Geçişleri							
2s ²	¹ S	0	2p ²	³ P	1	1001,42 ^A ; 1025,59 ^B	1010,92 ^a
2s2p	³ P ^o	0	2s2p	¹ P ^o	1	2394,70 ^{A,B}	2772,26 ^a
2s2p	³ P ^o	2	2s2p	¹ P ^o	1	2395,74 ^{A,B}	2773,98 ^a
2p ²	³ P	1	2p ²	¹ S	0	2542,31 ^A ; 2645,98 ^B	3478,32 ^a
2p ²	³ P	1	2p ²	¹ D	2	14280,20 ^A ; 15271,56 ^B	29045 ^a
2s2p	³ P ^o	1	2s2p	³ P ^o	2	7445363,75 ^{A,B}	6192000 ^a
2p ²	³ P	1	2p ²	³ P	2	10895654,26 ^A ; 8941449,40 ^B	7470000 ^a
2p ²	³ P	0	2p ²	³ P	1	14919982,36 ^A ; 13253527,09 ^B	11780000 ^a
2s2p	³ P ^o	0	2s2p	³ P ^o	1	20901663,37 ^{A,B}	16370000 ^a

^aRef.[53]

Tablo 3.8. B II'nin bazı seviyeleri arasındaki E1, E2 ve M1 geçişlerine ait Aki geçiş olasılıkları

Alt Seviye			Üst Seviye			Aki(s ⁻¹)	
Konf.	Terim	J	Konf.	Terim	J	Aki _{MCHF+BP}	Aki _{diğer çalışmalar}
E1 Geçişleri							
2p ²	³ P	2	2p3d	³ D ^o	3	5,97(9) ^A ; 7,12(9) ^B	2,62(9) ^a
2s2p	³ P ^o	1	2s5d	³ D	2	4,73(9) ^A ; 4,73(9) ^B	3,0(8) ^a
2p ²	³ P	1	2p3d	³ D ^o	2	4,47(9) ^A ; 5,33(9) ^B	1,97(9) ^a
2s2p	³ P ^o	0	2s5d	³ D	1	3,51(9) ^A ; 3,51(9) ^B	2,59(8) ^a
2p ²	³ P	0	2p3d	³ D ^o	1	3,31(9) ^A ; 3,95(9) ^B	1,46(9) ^a
2s2p	³ P ^o	1	2s5d	³ D	1	2,63(9) ^A ; 2,63(9) ^B	1,94(8) ^a
2s2p	³ P ^o	2	2s5d	³ D	2	2,63(9) ^A ; 1,58(9) ^B	1,16(8) ^a
2s2p	³ P ^o	1	2s3d	³ D	1	2,54(9) ^A ; 2,54(9) ^B	1,02(9) ^a
2p ²	³ P	1	2p3d	³ D ^o	1	2,49(9) ^A ; 2,97(9) ^B	1,09(9) ^a
2s ²	¹ S	0	2s5p	¹ P ^o	1	2,17(9) ^A ; 2,09(9) ^B	1,77(8) ^a
2s2p	¹ P ^o	1	2s5d	¹ D	2	1,96(9) ^A ; 7,89(9) ^B	3,62(8) ^a
2p ²	¹ D	2	2s5f	¹ F ^o	3	1,54(9) ^A ; 1,91(9) ^B	1,05(8) ^a
2s2p	³ P ^o	2	2s3d	³ D	2	1,52(9) ^A ; 1,52(9) ^B	6,13(8) ^a
2p ²	³ P	2	2p3d	³ D ^o	2	1,50(9) ^A ; 1,79(9) ^B	6,53(8) ^a
2s2p	³ P ^o	2	2s4d	³ D	3	1,46(9) ^A ; 1,46(9) ^B	9,47(8) ^a
2s ²	¹ S	0	2s3p	¹ P ^o	1	1,45(9) ^A ; 1,44(9) ^B	5,01(8) ^a
2s ²	¹ S	0	2s2p	¹ P ^o	1	1,44(9) ^A ; 1,44(9) ^B	1,20(9) ^a
2p ²	¹ S	0	2s5p	¹ P ^o	1	1,31(9) ^A ; 1,10(9) ^B	1,67(8) ^a
2s2p	¹ P ^o	1	2p ²	¹ S	0	1,31(9) ^A ; 1,01(9) ^B	1,33(9) ^a
2s2p	³ P ^o	2	2s3s	³ S	1	1,26(9) ^A ; 1,26(9) ^B	6,08(8) ^a
2s2p	¹ P ^o	1	2p3p	¹ P	1	1,26(9) ^A ; 1,26(9) ^B	3,95(8) ^a
2s2p	³ P ^o	1	2p ²	³ P	0	9,94(8) ^A ; 9,00(8) ^B	8,65(8) ^a
2s2p	³ P ^o	0	2p ²	³ P	1	9,94(8) ^A ; 1,01(8) ^B	2,89(8) ^a
2s2p	³ P ^o	0	2s4d	³ D	1	8,14(8) ^A ; 8,14(8) ^B	5,25(8) ^a
2s ²	¹ S	0	2s4p	¹ P ^o	1	8,11(8) ^A ; 8,19(8) ^B	3,32(8) ^a
2s2p	³ P ^o	1	2s3s	³ S	1	7,56(8) ^A ; 7,56(8) ^B	3,65(8) ^a
2s2p	³ P ^o	1	2p3p	³ P	0	6,80(8) ^A ; 3,59(8) ^B	1,35(8) ^a
2s2p	³ P ^o	2	2s4d	³ D	2	6,10(8) ^A ; 3,66(8) ^B	2,36(8) ^a
2s2p	³ P ^o	1	2s4d	³ D	1	6,10(8) ^A ; 6,10(8) ^B	3,94(8) ^a
2s2p	¹ P ^o	1	2p3p	¹ D	2	4,74(8) ^A ; 2,12(9) ^B	2,13(8) ^a
2s3p	¹ P ^o	1	2p3p	¹ P	1	4,28(8) ^A ; 4,28(8) ^B	3,49(8) ^a
2s2p	³ P ^o	2	2p ²	³ P	1	4,14(8) ^A ; 3,75(8) ^B	3,59(8) ^a
2s2p	³ P ^o	2	2p ²	³ P	2	7,46(8) ^A ; 6,75(8) ^B	6,48(8) ^a
2p ²	¹ D	2	2s5p	¹ P ^o	1	2,69(8) ^A ; 2,18(8) ^B	1,91(8) ^a
2s2p	³ P ^o	0	2s3s	³ S	1	2,52(8) ^A ; 2,52(8) ^B	1,22(8) ^a
2s2p	³ P ^o	1	2p ²	³ P	2	2,48(8) ^A ; 2,25(8) ^B	2,17(8) ^a
2s2p	³ P ^o	1	2p ²	³ P	1	2,48(8) ^A ; 2,25(8) ^B	2,16(8) ^a
2p ²	¹ D	2	2s4f	¹ F ^o	3	2,38(8) ^A ; 2,84(8) ^B	1,07(8) ^a
2s3p	¹ P ^o	1	2s4s	¹ S	0	1,92(8) ^A ; 1,89(8) ^B	1,34(8) ^a
2s3d	³ D	2	2s4f	³ F ^o	3	1,73(8) ^A ; 1,73(8) ^B	2,09(8) ^a
2s2p	³ P ^o	2	2p3p	³ P	2	1,70(8) ^A ; 2,70(8) ^B	1,01(8) ^a
2s2p	³ P ^o	1	2s3d	³ D	2	1,69(8) ^A ; 4,57(9) ^B	1,83(9) ^a
2s2p	³ P ^o	2	2s5s	³ S	1	1,42(8) ^A ; 1,42(8) ^B	1,08(8) ^a
2s3d	¹ D	2	2s4f	¹ F ^o	3	9,09(7) ^A ; 8,49(7) ^B	1,88(8) ^a
2s3p	³ P ^o	2	2s4d	³ D	3	7,99(7) ^A ; 7,99(7) ^B	1,15(8) ^a
2p ²	¹ D	2	2s4p	¹ P ^o	1	6,00(7) ^A ; 1,09(8) ^B	1,05(8) ^a
2s2p	³ P ^o	2	2p3p	³ S	1	5,80(7) ^A ; 1,10(9) ^B	1,08(8) ^a
2s3p	³ P ^o	2	2p3p	³ D	3	4,30(7) ^A ; 4,30(7) ^B	1,58(8) ^a
2s3d	³ D	3	2p3d	³ D ^o	3	4,24(7) ^A ; 4,24(7) ^B	2,21(8) ^a
2s2p	³ P ^o	1	2s4d	³ D	2	4,07(7) ^A ; 1,10(9) ^B	7,08(8) ^a
2s3d	³ D	1	2p3d	³ D ^o	1	3,59(7) ^A ; 3,59(7) ^B	1,87(8) ^a
2s3d	³ D	2	2p3d	³ D ^o	2	3,59(7) ^A ; 3,33(7) ^B	1,74(8) ^a

Tablo 3.8.'in devamı

Alt Seviye			Üst Seviye			Aki(s)	
Konf.	Terim	J	Konf.	Terim	J	Aki _{MCHF+BP}	Aki _{diğer çalışmalar}
2s3p	³ P ^o	1	2p3p	³ D	2	3,22(7) ^A ; 3,22(7) ^B	1,19(8) ^a
2p ²	³ P	1	2s3p	³ P ^o	0	2,33(7) ^A ; 1,37(7) ^B	2,40(8) ^a
2s3d	³ D	1	2s4f	³ F ^o	2	1,64(8) ^A ; 1,64(8) ^B	1,98(8) ^a
2s3p	³ P ^o	1	2p3p	³ P	0	1,14(7) ^A ; 5,38(6) ^B	2,42(8) ^a
2s3p	³ P ^o	2	2p3p	³ P	2	2,86(6) ^A ; 1,18(7) ^B	1,81(8) ^a
2s2p	³ P ^o	2	2s3d	³ D	3	5,40(5) ^A ; 6,09(9) ^B	2,45(9) ^a
E2 Geçişleri							
2s ²	¹ S	0	2p ²	¹ D	2	2,27(3) ^A ; 2,08(3) ^B	1,83(3) ^a
2s ²	¹ S	0	2p ²	³ P	2	2,96(-3) ^A ; 4,20(-3) ^B	1,24(-2) ^a
2s2p	³ P ^o	2	2s2p	¹ P ^o	1	6,14(-6) ^{A,B}	6,65(-6) ^a
2p ²	³ P	2	2p ²	¹ S	0	3,46(-4) ^A ; 5,95(-4) ^B	3,09(-4) ^a
2p ²	¹ D	2	2p ²	¹ S	0	1,12(2) ^A ; 1,18(2) ^B	2,58(1) ^a
2p ²	³ P	0	2p ²	¹ D	2	1,06(-9) ^A ; 9,97(-10) ^B	5,54(-10) ^a
2p ²	³ P	1	2p ²	¹ D	2	9,73(-9) ^A ; 1,38(-8) ^B	3,11(-9) ^a
2s2p	³ P ^o	0	2s2p	³ P ^o	2	3,19(-16) ^{A,B}	8,88(-16) ^a
2p ²	³ P	0	2p ²	³ P	2	1,61(-16) ^A ; 4,37(-16) ^B	6,62(-16) ^a
2s2p	³ P ^o	1	2s2p	³ P ^o	2	1,56(-16) ^{A,B}	4,02(-16) ^a
2p ²	³ P	1	2p ²	³ P	2	2,34(-17) ^A ; 7,46(-17) ^B	1,25(-16) ^a
M1 Geçişleri							
2s ²	¹ S	0	2p ²	³ P	1	6,11(-5) ^A ; 6,90(-5) ^B	8,50(-5) ^a
2s2p	³ P ^o	0	2s2p	¹ P ^o	1	7,49(-5) ^{A,B}	9,57(-5) ^a
2s2p	³ P ^o	2	2s2p	¹ P ^o	1	9,35(-5) ^{A,B}	1,19(-4) ^a
2p ²	³ P	1	2p ²	¹ S	0	5,99(-4) ^A ; 8,30(-4) ^B	4,64(-4) ^a
2p ²	³ P	1	2p ²	¹ D	2	8,58(-6) ^A ; 1,04(-5) ^B	4,84(-6) ^a
2s2p	³ P ^o	1	2s2p	³ P ^o	2	3,27(-8) ^{A,B}	5,68(-8) ^a
2p ²	³ P	1	2p ²	³ P	2	1,04(-8) ^A ; 1,89(-8) ^B	3,25(-8) ^a
2p ²	³ P	0	2p ²	³ P	1	5,41(-9) ^A ; 7,72(-9) ^B	1,11(-8) ^a
2s2p	³ P ^o	0	2s2p	³ P ^o	1	1,97(-9) ^{A,B}	4,10(-9) ^a

^aRef.[53]

Tablo 3.9. B II'in bazı seviyeleri arasındaki E1, E2 ve M1 geçişlerine ait gf ağırlıklı salıncı şiddetleri

Alt Seviye			Üst Seviye			gf	
Konf.	Terim	J	Konf.	Terim	J	gf _{MCHF+BP}	gf _{diğer çalışmalar}
E1 Geçişleri							
2p ²	³ P	1	2p3d	³ D ^o	2	0,9459 ^A , 1,0791 ^B	0,4770 ^a
2s2p	³ P ^o	0	2s5d	³ D	1	-0,40026 ^A , -0,40026 ^B	0,0537 ^a
2p ²	³ P	0	2p3d	³ D ^o	1	1,26093 ^A , 1,43865 ^B	0,6370 ^a
2s2p	³ P ^o	1	2s5d	³ D	1	-0,1001 ^A , -0,1001 ^B	0,0134 ^a
2s2p	³ P ^o	2	2s5d	³ D	2	-0,0601 ^A , -0,0605 ^B	0,0080 ^a
2s2p	³ P ^o	1	2s3d	³ D	1	-0,1732 ^A , -0,1732 ^B	0,1190 ^a
2p ²	³ P	1	2p3d	³ D ^o	1	0,3161 ^A , 0,3607 ^B	0,1580 ^a
2s ²	¹ S	0	2s5p	¹ P ^o	1	0,1722 ^A , 0,1657 ^B	0,0241 ^a
2s2p	¹ P ^o	1	2s5d	¹ D	2	-0,2656 ^A , -0,6916 ^B	0,0722 ^a
2p ²	¹ D	2	2s5f	¹ F ^o	3	0,1822 ^A , 0,2156 ^B	0,0323 ^a
2s2p	³ P ^o	2	2s3d	³ D	2	-0,1039 ^A , -0,1039 ^B	0,0716 ^a
2p ²	³ P	2	2p3d	³ D ^o	2	0,1902 ^A , 0,2169 ^B	0,0949 ^a
2s2p	³ P ^o	2	2s4d	³ D	3	-0,1002 ^A , -0,1002 ^B	0,1060 ^a
2s ²	¹ S	0	2s3p	¹ P ^o	1	0,1929 ^A , 0,1906 ^B	0,1090 ^a
2s ²	¹ S	0	2s2p	¹ P ^o	1	1,0377 ^A , 1,0343 ^B	1,0000 ^a
2p ²	¹ S	0	2s5p	¹ P ^o	1	0,4376 ^A , 0,4672 ^B	0,2570 ^a
2s2p	¹ P ^o	1	2p ²	¹ S	0	-0,1815 ^A , -0,1605 ^B	0,2260 ^a
2s2p	³ P ^o	2	2s3s	³ S	1	-0,0741 ^A , -0,0741 ^B	0,0640 ^a
2s2p	¹ P ^o	1	2p3p	¹ P	1	-0,1510 ^A , -0,1510 ^B	0,0442 ^a
2s2p	³ P ^o	1	2p ²	³ P	0	-0,1271 ^A , -0,1245 ^B	0,1140 ^a
2s2p	³ P ^o	0	2p ²	³ P	1	-0,3815 ^A , -0,3734 ^B	0,3430 ^a
2s2p	³ P ^o	0	2s4d	³ D	1	-0,11932 ^A , -0,11932 ^B	0,1260 ^a
2s ²	¹ S	0	2s4p	¹ P ^o	1	0,0840 ^A , 0,0848 ^B	0,0513 ^a
2s2p	³ P ^o	1	2s3s	³ S	1	-0,0741 ^A , -0,0741 ^B	0,0640 ^a
2s2p	³ P ^o	1	2p3p	³ P	0	-0,0012 ^A , -0,0063 ^B	0,0061 ^a
2s2p	³ P ^o	2	2s4d	³ D	2	-0,0178 ^A , -0,0179 ^B	0,0189 ^a
2s2p	³ P ^o	1	2s4d	³ D	1	-0,0298 ^A , -0,0298 ^B	0,0946 ^a
2s2p	¹ P ^o	1	2p3p	¹ D	2	-0,0675 ^A , -0,2849 ^B	0,0348 ^a
2s3p	¹ P ^o	1	2p3p	¹ P	1	-0,1457 ^A , -0,1457 ^B	0,2580 ^a
2s2p	³ P ^o	2	2p ²	³ P	1	-0,0953 ^A , -0,0933 ^B	0,0852 ^a
2s2p	³ P ^o	2	2p ²	³ P	2	-0,2860 ^A , -0,2801 ^B	0,2560 ^a
2p ²	¹ D	2	2s5p	¹ P ^o	1	0,0139 ^A , 0,0109 ^B	0,0272 ^a
2s2p	³ P ^o	0	2s3s	³ S	1	-0,0741 ^A , -0,0741 ^B	0,0642 ^a
2s2p	³ P ^o	1	2p ²	³ P	2	-0,1590 ^A , -0,1556 ^B	0,1430 ^a
2s2p	³ P ^o	1	2p ²	³ P	1	-0,0954 ^A , -0,0934 ^B	0,0854 ^a
2p ²	¹ D	2	2s4f	¹ F ^o	3	0,4585 ^A , 0,5169 ^B	0,0427 ^a
2s3p	¹ P ^o	1	2s4s	¹ S	0	-0,2286 ^A , -0,2166 ^B	0,1180 ^a
2s3d	³ D	2	2s4f	³ F ^o	3	0,4447 ^A , 0,4447 ^B	0,7460 ^a
2s2p	³ P ^o	2	2p3p	³ P	2	-0,0678 ^A , -0,0142 ^B	0,0061 ^a
2s2p	³ P ^o	1	2s3d	³ D	2	-0,5196 ^A , -0,5196 ^B	0,3560 ^a
2s2p	³ P ^o	2	2s5s	³ S	1	-0,0038 ^A , -0,0038 ^B	0,0047 ^a
2s3d	¹ D	2	2s4f	¹ F ^o	3	0,5965 ^A , 0,5798 ^B	0,9640 ^a
2s3p	³ P ^o	2	2s4d	³ D	3	-0,1701 ^A , -0,1701 ^B	0,2670 ^a
2p ²	¹ D	2	2s4p	¹ P ^o	1	0,0052 ^A , 0,0051 ^B	0,0203 ^a
2s2p	³ P ^o	2	2p3p	³ S	1	-0,0383 ^A , -0,0383 ^B	0,0040 ^a
2s3p	³ P ^o	2	2p3p	³ D	3	-0,3793 ^A , -0,3793 ^B	0,1500 ^a
2s3d	³ D	1	2p3d	³ D ^o	1	0,1018 ^A , 0,1018 ^B	0,1130 ^a
2s3d	³ D	3	2p3d	³ D ^o	3	0,0038 ^A , 0,0038 ^B	0,1330 ^a
2s3d	³ D	2	2p3d	³ D ^o	2	0,0943 ^A , 0,0943 ^B	0,1050 ^a
2s3p	³ P ^o	1	2p3p	³ D	2	-0,3388 ^A , -0,3388 ^B	0,1340 ^a
2p ²	³ P	1	2s3p	³ P ^o	0	0,0018 ^A , 0,0010 ^B	0,1600 ^a
2s3d	³ D	1	2s4f	³ F ^o	2	0,4999 ^A , 0,4999 ^B	0,8410 ^a

Tablo 3.9.'un devamı

Alt Seviye			Üst Seviye			gf	
Konf.	Terim	J	Konf.	Terim	J	gf _{MCHF+BP}	gf _{diğer çalışmalar}
2s3p	³ P ^o	1	2p3p	³ P	0	-0,0111 ^A , -0,0111 ^B	0,0454 ^a
2s3p	³ P ^o	2	2p3p	³ P	2	-0,0250 ^A , -0,0282 ^B	0,1020 ^a
2s2p	³ P ^o	2	2s3d	³ D	3	-0,5820 ^A , -0,0560 ^B	0,4010 ^a
E2 Geçişleri							
2s ²	¹ S	0	2p ²	¹ D	2	1,49(-6) ^A ; 1,45(-6) ^B	–
2s ²	¹ S	0	2p ²	³ P	2	-2,22(-12) ^A ; 3,31(-12) ^B	–
2s2p	³ P ^o	2	2s2p	¹ P ^o	1	1,58(-14) ^{A,B}	–
2p ²	³ P	2	2p ²	¹ S	0	3,35(-13) ^A ; 6,25(-13) ^B	–
2p ²	¹ D	2	2p ²	¹ S	0	1,60(-7) ^A ; 1,81(-7) ^B	–
2p ²	³ P	0	2p ²	¹ D	2	1,61(-16) ^A ; 1,74(-16) ^B	–
2p ²	³ P	1	2p ²	¹ D	2	1,49(-15) ^A ; 2,41(-15) ^B	–
2s2p	³ P ^o	0	2s2p	³ P ^o	2	7,19(-18) ^{A,B}	–
2p ²	³ P	0	2p ²	³ P	2	4,79(-18) ^A ; 9,33(-18) ^B	–
2s2p	³ P ^o	1	2s2p	³ P ^o	2	6,49(-18) ^{A,B}	–
2p ²	³ P	1	2p ²	³ P	2	2,08(-18) ^A ; 4,47(-18) ^B	–
M1 Geçişleri							
2s ²	¹ S	0	2p ²	³ P	1	2,76(-14) ^A ; 3,26(-14) ^B	–
2s2p	³ P ^o	0	2s2p	¹ P ^o	1	1,93(-13) ^{A,B}	–
2s2p	³ P ^o	2	2s2p	¹ P ^o	1	2,41(-13) ^{A,B}	–
2p ²	³ P	1	2p ²	¹ S	0	5,81(-13) ^A ; 8,71(-13) ^B	–
2p ²	³ P	1	2p ²	¹ D	2	1,31(-12) ^A ; 1,82(-12) ^B	–
2s2p	³ P ^o	1	2s2p	³ P ^o	2	1,36(-9) ^{A,B}	–
2p ²	³ P	1	2p ²	³ P	2	9,28(-10) ^A ; 1,13(-9) ^B	–
2p ²	³ P	0	2p ²	³ P	1	5,42(-10) ^A ; 6,10(-10) ^B	–
2s2p	³ P ^o	0	2s2p	³ P ^o	1	3,87(-10) ^{A,B}	–

^a Ref. [53]

Tablo 3.10. B III için E (cm⁻¹) enerji seviyeleri

Seviyeler			E (cm ⁻¹)	
Konf.	Terim	J	E _{MCHF+BP}	E _{diğer çalışmalar}
1s ² 2s	² S	1/2	0,00 ^A	0,00 ^{a,b}
1s ² 2p	² P ^o	1/2	48335,30 ^A	48358,34 ^a ; 48358,40 ^b
		3/2	48367,17 ^A	48392,92 ^a ; 48392,50 ^b
1s ² 3s	² S	1/2	179207,37 ^A	180201,92 ^a ; 180202,09 ^b
1s ² 3p	² P ^o	1/2	191948,80 ^A	192951,23 ^a ; 192951,40 ^b
		3/2	191958,12 ^A	192961,24 ^a ; 192961,42 ^b
1s ² 3d	² D	3/2	194752,62 ^A	196068,75 ^a ; 196068,89 ^b
		5/2	194755,49 ^A	196071,67 ^a ; 196071,81 ^b
1s ² 4s	² S	1/2	236755,69 ^A	237698,27 ^a ; 237698,45 ^b
1s ² 4p	² P ^o	1/2	241643,81 ^A	242829,74 ^a ; 242829,66 ^b
		3/2	241647,46 ^A	242833,65 ^a ; 242833,78 ^b
1s ² 4d	² F ^o	3/2	242784,98 ^A	244141,63 ^a ; 244141,83 ^b
		5/2	242786,17 ^A	244142,86 ^a ; 244143,06 ^b
1s ² 4f	² F ^o	5/2	242812,86 ^A	244199,12 ^a ; 244199,29 ^b
		7/2	242813,48 ^A	244199,74 ^a ; 244199,91 ^b
1s ² 5s	² S	1/2	262357,29 ^A	263159,78 ^a ; 263159,81 ^b
1s ² 5p	² P ^o	1/2	696244,93 ^A	265721,62 ^a ; 265721,77 ^b
		3/2	696764,85 ^A	265723,75 ^a ; 265723,88 ^b
1s ² 5f	² F ^o	5/2	265035,12 ^A	266422,38 ^a ; 266422,54 ^b
		7/2	265035,43 ^A	266422,70 ^a ; 266422,86 ^b
1s ² 6s	² S	1/2	347160,57 ^A	276627,40 ^a
1s ² 7s	² S	1/2	1995661,77 ^A	284616,40 ^a

^a Ref. [42], ^b Ref. [53]

Tablo 3.11. B III'in bazı seviyeleri arasındaki E1, E2 ve M1 geçişlerine ait $\lambda(A^\circ)$ dalga boyları

Alt Seviye			Üst Seviye			$\lambda(A^\circ)$	
Konf.	Terim	J	Konf.	Terim	J	$\lambda_{\text{MCHF+BP}}$	λ diğer çalışmalar
E1 Geçişleri							
2p	$^2P^o$	3/2	3d	2D	5/2	683,15 ^A	677,14 ^a
2p	$^2P^o$	1/2	3d	2D	3/2	683,01 ^A	677,00 ^a
2p	$^2P^o$	3/2	4d	2D	5/2	514,38 ^A	510,8546 ^a
2p	$^2P^o$	1/2	4d	2D	3/2	514,30 ^A	510,7648 ^a
2s	2S	1/2	3p	$^2P^o$	3/2	520,97 ^A	518,2388 ^a
2s	2S	1/2	3p	$^2P^o$	1/2	521,00 ^A	518,2657 ^a
3d	2D	5/2	4f	$^2F^o$	7/2	2080,93 ^A	2077,127 ^a
2p	$^2P^o$	3/2	3s	2S	1/2	764,33 ^A	758,671 ^a
3d	2D	3/2	4f	$^2F^o$	5/2	2080,83 ^A	2077,028 ^a
2p	$^2P^o$	3/2	3d	2D	3/2	683,16 ^A	677,157 ^a
2s	2S	1/2	4p	$^2P^o$	1/2	413,85 ^A	411,8112 ^a
2s	2S	1/2	4p	$^2P^o$	3/2	413,85 ^A	411,8045 ^a
3p	$^2P^o$	3/2	4d	2D	5/2	1967,52 ^A	1953,826 ^a
2p	$^2P^o$	1/2	3s	2S	1/2	764,14 ^A	758,475 ^a
3p	$^2P^o$	1/2	4d	2D	3/2	1967,20 ^A	1953,491 ^a
2p	$^2P^o$	3/2	4s	2S	1/2	530,85 ^A	528,2457 ^a
3d	2D	5/2	5f	$^2F^o$	7/2	1422,95 ^A	1421,443 ^a
3d	2D	3/2	5f	$^2F^o$	5/2	1422,90 ^A	1421,391 ^a
2p	$^2P^o$	3/2	4d	2D	3/2	514,38 ^A	510,8578 ^a
3p	$^2P^o$	3/2	4s	2S	1/2	2232,38 ^A	2234,591 ^a
2s	2S	1/2	2p	$^2P^o$	3/2	2067,62 ^A	2065,7787 ^a
2s	2S	1/2	2p	$^2P^o$	1/2	2068,99 ^A	2067,2346 ^a
2p	$^2P^o$	1/2	4s	2S	1/2	530,76 ^A	528,1506 ^a
2p	$^2P^o$	3/2	5s	2S	1/2	467,34 ^A	465,6201 ^a
3p	$^2P^o$	3/2	5s	2S	1/2	1420,54 ^A	1424,531 ^a
3p	$^2P^o$	1/2	4s	2S	1/2	2231,91 ^A	2234,091 ^a
3s	2S	1/2	4p	$^2P^o$	1/2	1601,71 ^A	1596,734 ^a
3s	2S	1/2	4p	$^2P^o$	3/2	1601,62 ^A	1596,635 ^a
E2 Geçişleri							
5f	$^2F^o$	5/2	5p	$^2P^o$	1/2	231,92 ^A	–
5f	$^2F^o$	7/2	5p	$^2P^o$	3/2	231,64 ^A	–
4p	$^2P^o$	3/2	5p	$^2P^o$	1/2	219,99 ^A	–
4p	$^2P^o$	1/2	5p	$^2P^o$	3/2	219,73 ^A	–
7s	2S	1/2	4d	2D	3/2	57,05 ^A	–
7s	2S	1/2	3d	2D	5/2	57,05 ^A	–
3d	2D	3/2	7s	2S	1/2	55,53 ^A	–
3d	2D	5/2	7s	2S	1/2	55,53 ^A	–
M1 Geçişleri							
3d	2D	3/2	3d	2D	5/2	34836105,61 ^A	–
4d	2D	3/2	4d	2D	5/2	83453527,77 ^A	–
3d	2D	5/2	4d	2D	3/2	2082,16 ^A	–
2p	$^2P^o$	3/2	5p	$^2P^o$	1/2	154,36 ^A	–

^aRef.[53]

Tablo 3.12. B III'ün bazı seviyeleri arasındaki E1, E2 ve M1 geçişlerine ait Aki geçiş olasılıkları

Alt Seviye			Üst Seviye			Aki(s ⁻¹)	
Konf.	Terim	J	Konf.	Terim	J	Aki _{MCHF}	Aki _{NIST}
E1 Geçişleri							
2p	² P ^o	3/2	3d	² D	5/2	5,53(9) ^A	5,57(9) ^a
2p	² P ^o	1/2	3d	² D	3/2	4,61(9) ^A	4,64(9) ^a
2p	² P ^o	3/2	4d	² D	5/2	1,86(9) ^A	1,88(9) ^a
2p	² P ^o	1/2	4d	² D	3/2	1,55(9) ^A	1,57(9) ^a
2s	² S	1/2	3p	² P ^o	3/2	1,20(9) ^A	1,27(9) ^a
2s	² S	1/2	3p	² P ^o	1/2	1,19(9) ^A	1,26(9) ^a
3d	² D	5/2	4f	² F ^o	7/2	1,12(9) ^A	1,12(9) ^a
2p	² P ^o	3/2	3s	² S	1/2	1,05(9) ^A	1,07(9) ^a
3d	² D	3/2	4f	² F ^o	5/2	1,04(9) ^A	1,04(9) ^a
2p	² P ^o	3/2	3d	² D	3/2	9,22(8) ^A	9,28(8) ^a
2s	² S	1/2	4p	² P ^o	1/2	5,72(8) ^A	6,53(8) ^a
2s	² S	1/2	4p	² P ^o	3/2	5,72(8) ^A	6,53(8) ^a
3p	² P ^o	3/2	4d	² D	5/2	5,43(8) ^A	5,57(8) ^a
2p	² P ^o	1/2	3s	² S	1/2	5,25(8) ^A	5,38(8) ^a
3p	² P ^o	1/2	4d	² D	3/2	4,53(8) ^A	4,63(8) ^a
2p	² P ^o	3/2	4s	² S	1/2	3,53(8) ^A	3,94(8) ^a
3d	² D	5/2	5f	² F ^o	7/2	3,71(8) ^A	3,70(8) ^a
3d	² D	3/2	5f	² F ^o	5/2	3,47(8) ^A	3,45(8) ^a
2p	² P ^o	3/2	4d	² D	3/2	3,10(8) ^A	3,13(8) ^a
3p	² P ^o	3/2	4s	² S	1/2	2,41(8) ^A	2,64(8) ^a
2s	² S	1/2	2p	² P ^o	3/2	1,93(8) ^A	1,89(8) ^a
2s	² S	1/2	2p	² P ^o	1/2	1,93(8) ^A	1,88(8) ^a
2p	² P ^o	1/2	4s	² S	1/2	1,77(8) ^A	1,96(8) ^a
2p	² P ^o	3/2	5s	² S	1/2	1,36(8) ^A	1,89(8) ^a
3p	² P ^o	3/2	5s	² S	1/2	1,34(8) ^A	1,18(8) ^a
3p	² P ^o	1/2	4s	² S	1/2	1,20(8) ^A	1,32(8) ^a
3s	² S	1/2	4p	² P ^o	1/2	1,16(8) ^A	1,27(8) ^a
3s	² S	1/2	4p	² P ^o	3/2	1,11(8) ^A	1,27(8) ^a
E2 Geçişleri							
7s	² S	1/2	3d	² D	5/2	4,07(9) ^A	–
7s	² S	1/2	4d	² D	3/2	2,72(9) ^A	–
5f	² F ^o	5/2	5p	² P ^o	1/2	6,44(8) ^A	–
5f	² F ^o	7/2	5p	² P ^o	3/2	5,55(8) ^A	–
4p	² P ^o	3/2	5p	² P ^o	1/2	2,23(8) ^A	–
3d	² D	5/2	7s	² S	1/2	1,84(8) ^A	–
3d	² D	3/2	7s	² S	1/2	1,23(8) ^A	–
4p	² P ^o	1/2	5p	² P ^o	3/2	1,12(8) ^A	–
M1 Geçişleri							
2p	² P ^o	3/2	5p	² P ^o	1/2	0,11934 ^A	–
3d	² D	5/2	4d	² D	3/2	2,02(-6) ^A	–
3d	² D	3/2	3d	² D	5/2	2,55(-10) ^A	–
4d	² D	3/2	4d	² D	5/2	1,86(-11) ^A	–

^a Ref. [53]

Tablo 3.13. B III'ün bazı seviyeleri arasındaki E1, E2 ve M1 geçişlerine ait gf ağırlıklı salıncı şiddetleri

Alt Seviye			Üst Seviye			gf	
Konf.	Terim	J	Konf.	Terim	J	gf _{MCHF+BP}	gf _{NIST}
E1 Geçişleri							
2p	² P ^o	3/2	3d	² D	5/2	-0,581 ^A	0,574 ^a
2p	² P ^o	1/2	3d	² D	3/2	-0,645 ^A	0,638 ^a
2p	² P ^o	3/2	4d	² D	5/2	-0,111 ^A	0,110 ^a
2p	² P ^o	1/2	4d	² D	3/2	-0,123 ^A	0,123 ^a
2s	² S	1/2	3p	² P ^o	3/2	0,097 ^A	0,102 ^a
2s	² S	1/2	3p	² P ^o	1/2	0,049 ^A	0,051 ^a
3d	² D	5/2	4f	² F ^o	7/2	0,968 ^A	0,967 ^a
2p	² P ^o	3/2	3s	² S	1/2	-0,046 ^A	0,046 ^a
3d	² D	3/2	4f	² F ^o	5/2	1,015 ^A	1,014 ^a
2p	² P ^o	3/2	3d	² D	3/2	-0,065 ^A	0,064 ^a
2s	² S	1/2	4p	² P ^o	1/2	0,015 ^A	0,017 ^a
2s	² S	1/2	4p	² P ^o	3/2	0,015 ^A	0,033 ^a
3p	² P ^o	3/2	4d	² D	5/2	-0,473 ^A	0,478 ^a
2p	² P ^o	1/2	3s	² S	1/2	0,046 ^A	0,046 ^a
3p	² P ^o	1/2	4d	² D	3/2	-0,5255 ^A	0,530 ^a
2p	² P ^o	3/2	4s	² S	1/2	-0,008 ^A	0,008 ^a
3d	² D	5/2	5f	² F ^o	7/2	0,150 ^A	0,149 ^a
3d	² D	3/2	5f	² F ^o	5/2	0,158 ^A	0,157 ^a
2p	² P ^o	3/2	4d	² D	3/2	-0,013 ^A	0,012 ^a
3p	² P ^o	3/2	4s	² S	1/2	-0,090 ^A	0,099 ^a
2s	² S	1/2	2p	² P ^o	3/2	0,248 ^A	0,242 ^a
2s	² S	1/2	2p	² P ^o	1/2	0,124 ^A	0,121 ^a
2p	² P ^o	1/2	4s	² S	1/2	-0,08 ^A	0,008 ^a
2p	² P ^o	3/2	5s	² S	1/2	-0,002 ^A	0,003 ^a
3p	² P ^o	3/2	5s	² S	1/2	-0,020 ^A	0,017 ^a
3p	² P ^o	1/2	4s	² S	1/2	-0,090 ^A	0,099 ^a
3s	² S	1/2	4p	² P ^o	1/2	0,043 ^A	0,049 ^a
3s	² S	1/2	4p	² P ^o	3/2	0,086 ^A	0,097 ^a
E2 Geçişleri							
5f	² F ^o	7/2	5p	² P ^o	3/2	1.785(-02) ^A	–
5f	² F ^o	5/2	5p	² P ^o	1/2	1.038(-02) ^A	–
7s	² S	1/2	4d	² D	5/2	3.975(-03) ^A	–
4p	² P ^o	1/2	5p	² P ^o	3/2	3.247(-03) ^A	–
4p	² P ^o	3/2	5p	² P ^o	1/2	3.238(-03) ^A	–
7s	² S	1/2	4d	² D	3/2	2.650(-03) ^A	–
3d	² D	5/2	7s	² S	1/2	1.703(-04) ^A	–
3d	² D	3/2	7s	² S	1/2	1.136(-04) ^A	–
M1 Geçişleri							
2p	² P ^o	3/2	5p	² P ^o	1/2	2.150(-05) ^A	–
3d	² D	3/2	3d	² D	5/2	2.787(-10) ^A	–
4d	² D	3/2	4d	² D	5/2	1.163(-10) ^A	–
3d	² D	5/2	4d	² D	3/2	5.262(-15) ^A	–

^a Ref. [53]

B IV ile ilgili hesaplamalarda, tek paritede $1s2p$, $1s3p$, $1s_{nl}(n=4-6, l=1,3)$ ve çift paritede $1s^2$, $1s2s$, $1s_{nl}(n=3-4, l=0,2)$, $2p3p$ konfigürasyonları (Tablo 1) alındı. İyonlaşma limitinin üzerindeki $2p3p$ seviyesi konfigürasyon setine dahil edildiğinde temel ve diğer seviyelere, özellikle $1s4s$ seviyesine katkısının olduğu görüldü. Tek pariteli konfigürasyon setinde $6p$ alınması, $5p$ seviyesinin enerji değerini iyileştirdiği görüldü. Bu tekli ve üçlü seviyelerin enerjileri Tablo 14’te verilmektedir. Tablo 15, 16 ve 17 öz-uyarılmış seviyelerin elektrik dipol, elektrik kuadrupol ve manyetik dipol geçişlerini göstermektedir ve daha önce yapılmış çalışma değerleri [44, 45, 51, 53] ile karşılaştırılmaktadır. Geçiş parametrelerinde $1s3d$ olan geçişlerin diğer geçişlere göre karşılaştırılan değerlere daha yakın olduğu gözlemlendi.

B V ile ilgili hesaplamalarda, tek paritede $2p$, $3p$, $nl(n=4-6, l=1,3)$ ve çift paritede $1s$, $2s$, $nl(n=3-5, l=0,2)$, $6s$ (Tablo 1) seviyelerinden oluşan bir konfigürasyon seti oluşturuldu. Ancak $6s$ seviyesinin enerjisi hesaplamalarda sonuç vermezken $5s$ seviyesini doğru olarak hesaplanmasını sağladı. Tablo 18’de bu sonuç A olarak adlandırıldı. Tek elektronlu ikili terimli sistemden oluşan H-benzeri borun seviyeler arası geçiş dalga boyları, geçiş olasılıkları ve ağırlıklı salınıcı şiddetleri değerleri Tablo 19, 20 ve 21 verilmektedir. E1 geçişlerinde tüm değerlerin uyumlu olduğu görülmektedir. E2 ve M1 geçişler ile ilgili daha önce yapılmış çalışma olmadığından tabloda sadece yüksek mertebeden geçişler verilmektedir.

Tüm çalışmalarda; dalga boyu, geçiş olasılıkları ve ağırlıklı salınıcı şiddeti ile ilgili yapılan hesaplamalarda aynı J değerlerinin geçişleri bulunmamaktadır. Bunun sebebi; geçişler arasındaki enerji farklılığının çok düşük olmasından kaynaklandığı tahmin edilmektedir.

Bu çalışmalardan B III, B IV ve B V çalışmalarında seviyeler arasındaki geçişler fazla olduğu için sadece geçiş olasılığı büyük olan geçişlere yer verilmektedir.

Enerji seviyeleri, plazma incelemeleri, astrofizik, lazer geliştirme ve analitik kimyada geniş ölçüde uygulama alanı bulmaktadır. Bu nedenle daha çok ilgi, atom ve iyonların yüksek duyarlıklı enerji seviyeleri hesaplarına çekilmektedir. Bu alanda pek çok teoriksel yöntemler geliştirilmiştir: Çok-konfigürasyonlu Hartree-Fock

Tablo 3.14. B IV için E (cm⁻¹) enerji seviyeleri

Seviyeler			E (cm ⁻¹)	
Konf.	Terim	J	E _{MCHF+BP}	E diğer çalışmalar
1s ²	¹ S	0	0,00 ^A	0,00 ^{a,b}
1s2s	³ S	1	1588889,13 ^A	1601532,11 ^a ; 1601545,00 ^b
1s2s	¹ S	0	1632116,45 ^A	1635710,30 ^a ; 1635720,00 ^b
1s2p	³ P ^o	0	1622377,66 ^A	1636925,74 ^a ; 1636938,00 ^b
		1	1622357,72 ^A	1636909,54 ^a ; 1636922,00 ^b
		2	1622406,30 ^A	1636962,20 ^a ; 1636975,00 ^b
1s2p	¹ P ^o	1	1643535,98 ^A	1657971,80 ^a ; 1657980,00 ^b
1s3s	³ S	1	1870857,60 ^A	1882740,00 ^a ; 1882740,00 ^b
1s3s	¹ S	0	1885098,86 ^A	1891772,00 ^a ; 1891790,00 ^b
1s3p	³ P ^o	0	1877338,41 ^A	1892209,00 ^b
		1	1877333,47 ^A	1892215,00 ^b
		2	1877347,19 ^A	1892227,00 ^b
1s3d	³ D	1	1883160,95 ^A	1896680,00 ^b
		2	1883160,71 ^A	1896700,00 ^b
		3	1883165,42 ^A	1896730,00 ^b
1s3d	¹ D	2	1883447,54 ^A	1896828,00 ^a ; 1896836,00 ^b
1s3p	¹ P ^o	1	1883362,92 ^A	1898218,00 ^a ; 1898063,00 ^b
1s4s	³ S	1	1976328,97 ^A	1976434,20 ^a ; 1976420,00 ^b
1s4p	³ P ^o	0	1965947,76 ^A	1980286,00 ^b
		1	1965945,69 ^A	1980288,00 ^b
		2	1965951,35 ^A	1980294,00 ^b
1s4d	³ D	1	1983073,63 ^A	1982120,00 ^b
		2	1983073,39 ^A	1982130,00 ^b
		3	1983079,57 ^A	1982140,00 ^b
1s4d	¹ D	2	1983626,50 ^A	1982215,00 ^a ; 1982220,00 ^b
1s4f	¹ F ^o	3	1966926,54 ^A	1982232,50 ^a ; 1982240,00 ^b
1s4f	³ F ^o	2	1966923,64 ^A	1982255,00 ^b
		3	1966922,96 ^A	1982260,00 ^b
		4	1966924,60 ^A	1982269,00 ^b
		1	1968471,43 ^A	1982775,50 ^a ; 1982762,00 ^b
1s5p	³ P ^o	1	2020081,92 ^A	2020730,00 ^b
		2	2020092,03 ^A	2020730,00 ^b
1s5f	³ F ^o	2	2006739,32 ^A	2021600,00 ^b
		3	2006739,07 ^A	2021630,00 ^b
		4	2006739,84 ^A	2021730,00 ^b
1s5f	¹ F ^o	3	2006741,36 ^A	2021739,80 ^a ; 2021760,00 ^b
1s5p	¹ P ^o	1	2025285,40 ^A	2022009,10 ^a ; 2022044,00 ^b
1s6f	¹ F ^o	3	2040806,37 ^A	2043200,00 ^a ; 2043180,00 ^b
1s6f	³ F ^o	4	2040808,62 ^A	2043210,00 ^b
1s6p	¹ P ^o	1	2648776,44 ^A	2143356,00 ^a ; 2043360,00 ^b

^a Ref. [51], ^b Ref. [53]

Tablo 3.15. B IV'ün bazı seviyeleri arasındaki E1, E2 ve M1 geçişlerine ait $\lambda(A^\circ)$ dalga boyları

Alt Seviye			Üst Seviye			$\lambda(A^\circ)$	
Konf.	Terim	J	Konf.	Terim	J	$\lambda_{\text{MCHF+BP}}$	$\lambda_{\text{diğer çalışmalar}}$
E1 Geçişleri							
1s ²	¹ S	0	1s6p	¹ P ^o	1	37,76 ^A	48,9391 ^d
1s ²	¹ S	0	1s2p	¹ P ^o	1	60,85 ^A	60,31 ^a ; 60,3147 ^d
1s ²	¹ S	0	1s4p	¹ P ^o	1	53,10 ^A	50,43 ^a ; 50,4344 ^d
1s ²	¹ S	0	1s3p	¹ P ^o	1	50,80 ^A	52,69 ^a ; 52,6810 ^d
1s ²	¹ S	0	1s5p	¹ P ^o	1	49,38 ^A	49,46 ^a ; 49,4558 ^d
1s2s	¹ S	0	1s6p	¹ P ^o	1	98,37 ^A	245,311 ^d
1s2p	³ P ^o	2	1s3d	³ D	3	383,52 ^A	385,00 ^b ; 385,00 ^c ; 385,03 ^d
1s2p	¹ P ^o	1	1s3d	¹ D	2	416,84 ^A	418,66 ^b ; 418,66 ^c ; 418,662 ^d
1s2p	³ P ^o	2	1s4d	³ D	3	277,27 ^A	289,64 ^c ; 289,708 ^d
1s2p	¹ P ^o	1	1s4d	¹ D	2	294,05 ^A	308,41 ^b ; 308,41 ^c ; 308,41 ^d
1s2p	³ P ^o	1	1s3d	³ D	2	383,45 ^A	385,00 ^c ; 384,952 ^d
1s2p	³ P ^o	1	1s4d	³ D	2	277,24 ^A	289,64 ^b ; 289,64 ^c ; 289,664 ^d
1s2p	³ P ^o	0	1s3d	³ D	1	383,48 ^A	385,00 ^c ; 384,976 ^d
1s2p	³ P ^o	1	1s3d	³ D	1	383,45 ^A	385,00 ^c ; 384,952 ^d
1s2p	³ P ^o	0	1s4d	³ D	1	277,26 ^A	289,64 ^c ; 289,677 ^d
1s2s	¹ S	0	1s4p	¹ P ^o	1	297,32 ^A	288,12 ^c ; 288,13 ^d
1s2p	³ P ^o	1	1s4d	³ D	1	277,24 ^A	289,64 ^c ; 289,664 ^d
1s2s	¹ S	0	1s3p	¹ P ^o	1	398,04 ^A	380,94 ^c ; 380,941 ^d
1s2s	³ S	1	1s3p	³ P ^o	0	346,70 ^A	344,01 ^c ; 344,008 ^d
1s2s	³ S	1	1s3p	³ P ^o	1	346,71 ^A	344,01 ^c ; 344,008 ^d
1s2s	³ S	1	1s3p	³ P ^o	2	346,69 ^A	344,01 ^c ; 344,008 ^d
1s2s	³ S	1	1s4p	³ P ^o	0	256,22 ^A	264,02 ^c ; 264,022 ^d
1s2s	³ S	1	1s4p	³ P ^o	2	265,22 ^A	264,02 ^c ; 264,022 ^d
1s2s	³ S	1	1s4p	³ P ^o	1	265,23 ^A	264,02 ^c ; 264,022 ^d
1s2p	³ P ^o	2	1s3d	³ D	1	383,52 ^A	385,00 ^c ; 385,03 ^d
1s2p	³ P ^o	2	1s3d	³ D	2	383,52 ^A	385,00 ^c ; 385,03 ^d
1s2p	³ P ^o	2	1s4d	³ D	2	277,28 ^A	289,64 ^c ; 289,708 ^d
1s2s	³ S	1	1s5p	³ P ^o	1	231,93 ^A	238,54 ^d
1s2s	³ S	1	1s5p	³ P ^o	2	231,92 ^A	238,54 ^d
1s2s	¹ S	0	1s5p	¹ P ^o	1	254,36 ^A	258,867 ^d
1s2p	¹ P ^o	1	1s3s	¹ S	0	413,99 ^A	427,70 ^c ; 427,72 ^d
1s2p	³ P ^o	2	1s4s	³ S	1	282,56 ^A	294,50 ^c ; 294,575 ^d
1s2p	³ P ^o	2	1s3s	³ S	1	402,51 ^A	406,84 ^c ; 406,872 ^d
1s2p	³ P ^o	1	1s4s	³ S	1	282,52 ^A	294,50 ^c ; 294,529 ^d
1s2p	³ P ^o	1	1s3s	³ S	1	402,44 ^A	406,84 ^c ; 406,784 ^d
1s2p	³ P ^o	2	1s4d	³ D	1	277,28 ^A	289,64 ^c ; 289,708 ^d
1s2p	³ P ^o	0	1s4s	³ S	1	282,54 ^A	294,50 ^c ; 294,543 ^d
1s2p	³ P ^o	0	1s3s	³ S	1	402,47 ^A	406,84 ^c ; 406,811 ^d
E2 Geçişleri							
1s ²	¹ S	0	1s4d	¹ D	2	50,42 ^A	50,4486 ^d
1s ²	¹ S	0	1s3d	¹ D	2	53,10 ^A	52,7196 ^d
1s2p	¹ P ^o	1	1s4f	¹ F ^o	3	309,24 ^A	308,394 ^d
M1 Geçişleri							
1s ²	¹ S	0	1s2s	³ S	1	62,94 ^A	62,4402 ^d

^a Ref. [44], ^b Ref. [45], ^c Ref. [51], ^d Ref. [53]

Tablo 3.16. B IV'ün bazı seviyeleri arasındaki E1, E2 ve M1 geçişlerine ait Aki geçiş olasılıkları

Alt Seviye			Üst Seviye			Aki(s ⁻¹)	
Konf.	Terim	J	Konf.	Terim	J	Aki _{MCHF+BP}	Aki _{diğer çalışmalar}
E1 Geçişleri							
1s ²	¹ S	0	1s6p	¹ P ^o	1	7,84(11) ^A	1,34(10) ^a
1s ²	¹ S	0	1s2p	¹ P ^o	1	3,92(11) ^A	3,72(11) ^a
1s ²	¹ S	0	1s4p	¹ P ^o	1	1,35(11) ^A	4,54(10) ^a
1s ²	¹ S	0	1s3p	¹ P ^o	1	1,30(11) ^A	1,08(11) ^a
1s ²	¹ S	0	1s5p	¹ P ^o	1	7,87(10) ^A	2,32(10) ^a
1s2s	¹ S	0	1s6p	¹ P ^o	1	2,17(10) ^A	7,11(8) ^a
1s2p	³ P ^o	2	1s3d	³ D	3	1,79(10) ^A	1,75(10) ^a
1s2p	¹ P ^o	1	1s3d	¹ D	2	1,64(10) ^A	1,61(10) ^a
1s2p	³ P ^o	2	1s4d	³ D	3	1,61(10) ^A	5,88(9) ^a
1s2p	¹ P ^o	1	1s4d	¹ D	2	1,37(10) ^A	5,01(9) ^a
1s2p	³ P ^o	1	1s3d	³ D	2	1,34(10) ^A	1,32(10) ^a
1s2p	³ P ^o	1	1s4d	³ D	2	1,21(10) ^A	4,40(9) ^a
1s2p	³ P ^o	0	1s3d	³ D	1	9,96(9) ^A	9,74(9) ^a
1s2p	³ P ^o	1	1s3d	³ D	1	9,96(9) ^A	7,30(9) ^a
1s2p	³ P ^o	0	1s4d	³ D	1	8,97(9) ^A	3,27(9) ^a
1s2s	¹ S	0	1s4p	¹ P ^o	1	8,46(9) ^A	2,33(9) ^a
1s2p	³ P ^o	1	1s4d	³ D	1	6,72(9) ^A	2,45(9) ^a
1s2s	¹ S	0	1s3p	¹ P ^o	1	6,17(9) ^A	5,12(9) ^a
1s2s	³ S	1	1s3p	³ P ^o	0	5,99(9) ^A	5,47(9) ^a
1s2s	³ S	1	1s3p	³ P ^o	1	5,99(9) ^A	5,47(9) ^a
1s2s	³ S	1	1s3p	³ P ^o	2	5,99(9) ^A	5,47(9) ^a
1s2s	³ S	1	1s4p	³ P ^o	0	5,99(9) ^A	2,52(9) ^a
1s2s	³ S	1	1s4p	³ P ^o	2	5,93(9) ^A	2,52(9) ^a
1s2s	³ S	1	1s4p	³ P ^o	1	5,93(9) ^A	2,52(9) ^a
1s2p	³ P ^o	2	1s3d	³ D	1	4,98(9) ^A	4,87(8) ^a
1s2p	³ P ^o	2	1s3d	³ D	2	4,48(9) ^A	4,37(9) ^a
1s2p	³ P ^o	2	1s4d	³ D	2	4,03(9) ^A	1,47(9) ^a
1s2s	³ S	1	1s5p	³ P ^o	1	2,72(9) ^A	1,32(9) ^a
1s2s	³ S	1	1s5p	³ P ^o	2	2,72(9) ^A	1,32(9) ^a
1s2s	¹ S	0	1s5p	¹ P ^o	1	2,46(9) ^A	1,22(9) ^a
1s2p	¹ P ^o	1	1s3s	¹ S	0	1,90(9) ^A	2,50(9) ^a
1s2p	³ P ^o	2	1s4s	³ S	1	1,73(9) ^A	6,51(8) ^a
1s2p	³ P ^o	2	1s3s	³ S	1	1,68(9) ^A	1,67(9) ^a
1s2p	³ P ^o	1	1s4s	³ S	1	1,04(9) ^A	3,90(8) ^a
1s2p	³ P ^o	1	1s3s	³ S	1	1,01(9) ^A	1,01(9) ^a
1s2p	³ P ^o	2	1s4d	³ D	1	4,48(8) ^A	1,63(8) ^a
1s2p	³ P ^o	0	1s4s	³ S	1	3,47(8) ^A	1,30(8) ^a
1s2p	³ P ^o	0	1s3s	³ S	1	3,37(8) ^A	3,38(8) ^a
E2 Geçişleri							
1s ²	¹ S	0	1s4d	¹ D	2	5,13(5) ^A	2,88(6) ^a
1s ²	¹ S	0	1s3d	¹ D	2	9,79(6) ^A	5,15(6) ^a
1s2p	¹ P ^o	1	1s4f	¹ F ^o	3	6,14(4) ^A	2,53(10) ^a
M1 Geçişleri							
1s ²	¹ S	0	1s2s	³ S	1	4,38(-12) ^A	6,696 ^a

^a Ref. [53]

Tablo 3.17. B IV'ün bazı seviyeleri arasındaki E1, E2 ve M1 geçişlerine ait gf ağırlıklı salımcı şiddetleri

Alt Seviye			Üst Seviye			gf	
Konf.	Terim	J	Konf.	Terim	J	gf _{MCHF+BP}	gf _{diğer çalışmalar}
E1 Geçişleri							
1s ²	¹ S	0	1s6p	¹ P ^o	1	0,5025 ^A	0,0144 ^a
1s ²	¹ S	0	1s2p	¹ P ^o	1	0,6527 ^A	0,6088 ^a
1s ²	¹ S	0	1s4p	¹ P ^o	1	0,1568 ^A	0,0520 ^a
1s ²	¹ S	0	1s3p	¹ P ^o	1	0,1647 ^A	0,1358 ^a
1s ²	¹ S	0	1s5p	¹ P ^o	1	0,0863 ^A	0,0255 ^a
1s2s	¹ S	0	1s6p	¹ P ^o	1	0,0946 ^A	0,0192 ^a
1s2p	³ P ^o	2	1s3d	³ D	3	-0,00656 ^A	0,5452 ^a
1s2p	¹ P ^o	1	1s3d	¹ D	2	-0,7127 ^A	0,7048 ^a
1s2p	³ P ^o	2	1s4d	³ D	3	-0,7147 ^A	0,1035 ^a
1s2p	¹ P ^o	1	1s4d	¹ D	2	-0,2954 ^A	0,1192 ^a
1s2p	³ P ^o	1	1s3d	³ D	2	-0,4937 ^A	0,4858 ^a
1s2p	³ P ^o	1	1s4d	³ D	2	-0,2325 ^A	0,0923 ^a
1s2p	³ P ^o	0	1s3d	³ D	1	-0,6587 ^A	0,6491 ^a
1s2p	³ P ^o	1	1s3d	³ D	1	-0,1647 ^A	0,1623 ^a
1s2p	³ P ^o	0	1s4d	³ D	1	-0,3100 ^A	0,1232 ^a
1s2s	¹ S	0	1s4p	¹ P ^o	1	0,3364 ^A	0,0870 ^a
1s2p	³ P ^o	1	1s4d	³ D	1	-0,0775 ^A	0,0308 ^a
1s2s	¹ S	0	1s3p	¹ P ^o	1	0,4393 ^A	0,3342 ^a
1s2s	³ S	1	1s3p	³ P ^o	0	0,0360 ^A	0,0323 ^a
1s2s	³ S	1	1s3p	³ P ^o	1	0,1079 ^A	0,0970 ^a
1s2s	³ S	1	1s3p	³ P ^o	2	0,1798 ^A	0,1616 ^a
1s2s	³ S	1	1s4p	³ P ^o	0	0,0208 ^A	0,0088 ^a
1s2s	³ S	1	1s4p	³ P ^o	2	0,1042 ^A	0,0439 ^a
1s2s	³ S	1	1s4p	³ P ^o	1	0,0626 ^A	0,0263 ^a
1s2p	³ P ^o	2	1s3d	³ D	1	-0,0065 ^A	0,0065 ^a
1s2p	³ P ^o	2	1s3d	³ D	2	-0,0987 ^A	0,0972 ^a
1s2p	³ P ^o	2	1s4d	³ D	2	-0,0464 ^A	0,0185 ^a
1s2s	³ S	1	1s5p	³ P ^o	1	0,0219 ^A	0,0112 ^a
1s2s	³ S	1	1s5p	³ P ^o	2	0,0365 ^A	0,0187 ^a
1s2s	¹ S	0	1s5p	¹ P ^o	1	0,0717 ^A	0,0367 ^a
1s2p	¹ P ^o	1	1s3s	¹ S	0	-0,0162 ^A	0,0229 ^a
1s2p	³ P ^o	2	1s4s	³ S	1	-0,0124 ^A	0,0051 ^a
1s2p	³ P ^o	2	1s3s	³ S	1	-0,0245 ^A	0,0252 ^a
1s2p	³ P ^o	1	1s4s	³ S	1	-0,0124 ^A	0,0051 ^a
1s2p	³ P ^o	1	1s3s	³ S	1	-0,0245 ^A	0,0251 ^a
1s2p	³ P ^o	2	1s4d	³ D	1	-0,0031 ^A	0,0012 ^a
1s2p	³ P ^o	0	1s4s	³ S	1	-0,0125 ^A	0,0051 ^a
1s2p	³ P ^o	0	1s3s	³ S	1	-0,0245 ^A	0,0252 ^a
E2 Geçişleri							
1s ²	¹ S	0	1s4d	¹ D	2	9.775(-07) ^A	–
1s ²	¹ S	0	1s3d	¹ D	2	1.587(-08) ^A	–
1s2p	¹ P ^o	1	1s4f	¹ F ^o	3	6.158(-06) ^A	–
M1 Geçişleri							
1s ²	¹ S	0	1s2s	³ S	1	7.811(-24) ^A	–

^a Ref. [53]

Tablo 3.18. B V için E (cm⁻¹) enerji seviyeleri

Seviyeler			E (cm ⁻¹)	
Konf.	Terim	J	E _{MCHF+BP}	E diğer çalışmalar
1s	² S	1/2	0,00 ^A	0,00 ^{a,b}
2p	² P ^o	1/2	2058251,7550 ^A	2057998,1140 ^a ; 2057998,0350 ^b
		3/2	2058480,1210 ^A	2058227,0843 ^a ; 2058227,0057 ^b
2s	² S	1/2	2058246,0050 ^A	2058011,6040 ^a ; 2058011,5490 ^b
3p	² P ^o	1/2	2439468,7510 ^A	2439195,6697 ^a ; 2439195,5981 ^b
		3/2	2439536,3650 ^A	2439263,5145 ^a ; 2439263,4429 ^b
3s	² S	1/2	2439467,0460 ^A	2439199,6964 ^a ; 2439199,6320 ^b
3d	² D	3/2	2439536,3600 ^A	2439263,4019 ^a ; 2439262,3303 ^b
		5/2	2439558,9090 ^A	2439286,0032 ^a ; 2439285,9317 ^b
4p	² P ^o	1/2	2572885,3960 ^A	2572605,5062 ^a ; 2572605,4371 ^b
		3/2	2572913,8950 ^A	2572634,1274 ^a ; 2572634,0583 ^b
4s	² S	1/2	2572882,6760 ^A	2572607,2098 ^a ; 2572607,1437 ^b
4d	² D	3/2	2572913,8950 ^A	2572634,0793 ^a ; 2572634,0102 ^b
		5/2	2572973,4070 ^A	2572643,6145 ^a ; 2572643,5454 ^b
4f	² F ^o	5/2	2572923,4070 ^A	2572643,5973 ^a ; 2572643,5282 ^b
		7/2	2572928,1630 ^A	2572648,3642 ^a ; 2572648,2951 ^b
5p	² P ^o	1/2	2634634,2720 ^A	2634351,2278 ^a ; 2634351,1598 ^b
		3/2	2634648,8410 ^A	2634365,8814 ^a ; 2634365,8134 ^b
5s	² S	1/2	2634633,8970 ^A	2634352,1013 ^a ; 2634352,0348 ^b
5d	² D	3/2	2634648,8450 ^A	2634365,8566 ^a ; 2634365,7886 ^b
		5/2	2634653,7110 ^A	2634370,7386 ^a ; 2634370,6706 ^b
5f	² F ^o	5/2	2634653,7150 ^A	2634370,7298 ^a ; 2634370,6618 ^b
		7/2	2634656,1490 ^A	2634373,1704 ^a ; 2634373,1024 ^b
6f	² F ^o	5/2	2668186,4470 ^A	2667901,7405 ^a ; 2667901,6731 ^b
		7/2	2668187,8560 ^A	2667903,1529 ^a ; 2667903,0855 ^b

^a Ref. [51] ^b Ref. [53]

Tablo 3.19. B V'in bazı seviyeleri arasındaki E1, E2 ve M1 geçişlerine ait $\lambda(A^\circ)$ dalga boyları

Alt Seviye			Üst Seviye			$\lambda(A^\circ)$	
Konf.	Terim	J	Konf.	Terim	J	$\lambda_{\text{MCHF+BP}}$	$\lambda_{\text{diğer çalışmalar}}$
E1 Geçişleri							
1s	2S	1/2	2p	$^2P^o$	3/2	48,58 ^A	48,59 ^a ; 48,585 ^b
1s	2S	1/2	2p	$^2P^o$	1/2	48,59 ^A	48,59 ^a ; 48,591 ^b
1s	2S	1/2	3p	$^2P^o$	3/2	40,99 ^A	40,98 ^a ; 40,996 ^b
1s	2S	1/2	3p	$^2P^o$	1/2	40,99 ^A	40,98 ^a ; 40,997 ^b
1s	2S	1/2	4p	$^2P^o$	3/2	38,87 ^A	38,87 ^a ; 38,870 ^b
1s	2S	1/2	4p	$^2P^o$	1/2	38,87 ^A	38,87 ^a ; 38,871 ^b
2p	$^2P^o$	3/2	3d	2D	5/2	26,43 ^A	262,40 ^a ; 262,426 ^b
2p	$^2P^o$	1/2	3d	2D	3/2	262,28 ^A	262,40 ^a ; 262,284 ^b
1s	2S	1/2	5p	$^2P^o$	3/2	37,96 ^A	37,94 ^a ; 37,959 ^b
1s	2S	1/2	5p	$^2P^o$	1/2	37,96 ^A	37,94 ^a ; 37,960 ^b
2s	2S	1/2	3p	$^2P^o$	3/2	262,28 ^A	262,40 ^a ; 262,293 ^b
2s	2S	1/2	3p	$^2P^o$	1/2	262,33 ^A	262,40 ^a ; 262,340 ^b
2p	$^2P^o$	3/2	4d	2D	5/2	194,39 ^A	194,40 ^a ; 194,395 ^b
2p	$^2P^o$	1/2	4d	2D	3/2	194,31 ^A	194,40 ^a ; 194,312 ^b
3d	2D	5/2	4f	$^2F^o$	7/2	749,84 ^A	749,70 ^a ; 749,837 ^b
3d	2D	3/2	4f	$^2F^o$	5/2	749,74 ^A	749,70 ^a ; 749,737 ^b
2p	$^2P^o$	3/2	3d	2D	3/2	262,44 ^A	262,40 ^a ; 262,442 ^b
2s	2S	1/2	4p	$^2P^o$	3/2	194,31 ^A	194,40 ^a ; 194,317 ^b
2s	2S	1/2	4p	$^2P^o$	1/2	194,32 ^A	194,40 ^a ; 194,328 ^b
2p	$^2P^o$	3/2	5d	2D	5/2	173,57 ^A	173,50 ^a ; 173,568 ^b
2p	$^2P^o$	1/2	5d	2D	3/2	173,50 ^A	173,50 ^a ; 173,500 ^b
3p	$^2P^o$	3/2	4d	2D	5/2	749,74 ^A	749,70 ^a ; 749,737 ^b
3p	$^2P^o$	1/2	4d	2D	3/2	749,41 ^A	749,70 ^a ; 749,409 ^b
2s	2S	1/2	5p	$^2P^o$	3/2	173,50 ^A	173,50 ^a ; 173,504 ^b
2s	2S	1/2	5p	$^2P^o$	1/2	173,50 ^A	173,40 ^a ; 173,509 ^b
3d	2D	5/2	5f	$^2F^o$	7/2	512,59 ^A	512,30 ^a ; 512,591 ^b
3d	2D	3/2	5f	$^2F^o$	5/2	512,54 ^A	512,30 ^a ; 512,538 ^b
2p	$^2P^o$	3/2	3s	2S	1/2	262,49 ^A	262,486 ^b
3p	$^2P^o$	3/2	5d	2D	5/2	512,54 ^A	512,30 ^a ; 512,539 ^b
2p	$^2P^o$	3/2	4d	2D	3/2	194,40 ^A	194,399 ^b
3s	2S	1/2	4p	$^2P^o$	1/2	749,56 ^A	749,560 ^b
3s	2S	1/2	4p	$^2P^o$	3/2	749,40 ^A	749,432 ^b
3p	$^2P^o$	1/2	5d	2D	3/2	512,37 ^A	512,30 ^a ; 512,373 ^b
4d	2D	5/2	5f	$^2F^o$	7/2	1619,97 ^A	1619,70 ^a ; 1619,970 ^b
4d	2D	3/2	5f	$^2F^o$	5/2	1619,78 ^A	1619,70 ^a ; 1619,783 ^b
3d	2D	5/2	6f	$^2F^o$	7/2	437,41 ^A	437,413 ^b
2p	$^2P^o$	1/2	3s	2S	1/2	262,33 ^A	262,328 ^b
3d	2D	3/2	6f	$^2F^o$	5/2	437,37 ^A	437,372 ^b
2p	$^2P^o$	3/2	4s	2S	1/2	194,41 ^A	194,409 ^b
3s	2S	1/2	5p	$^2P^o$	3/2	512,37 ^A	512,30 ^a ; 512,384 ^b
3s	2S	1/2	5p	$^2P^o$	1/2	512,41 ^A	512,422 ^b
4p	$^2P^o$	3/2	5d	2D	5/2	1619,78 ^A	1619,70 ^a ; 1619,784 ^b
4d	2D	5/2	6f	$^2F^o$	7/2	1049,76 ^A	1049,764 ^b
4p	$^2P^o$	1/2	5d	2D	3/2	1619,16 ^A	1619,162 ^b
3p	$^2P^o$	3/2	4s	2S	1/2	749,95 ^A	749,942 ^b
4d	2D	3/2	6f	$^2F^o$	5/2	1049,67 ^A	1049,80 ^a ; 1049,674 ^b
3p	$^2P^o$	3/2	4d	2D	3/2	749,79 ^A	749,791 ^b
3d	2D	5/2	4f	$^2F^o$	5/2	749,86 ^A	749,864 ^b
2p	$^2P^o$	3/2	5s	2S	1/2	173,57 ^A	173,573 ^b
2p	$^2P^o$	1/2	4s	2S	1/2	194,32 ^A	194,322 ^b
4s	2S	1/2	5p	$^2P^o$	3/2	1619,15 ^A	1619,70 ^a ; 1619,206 ^b
4s	2S	1/2	5p	$^2P^o$	1/2	1619,53 ^A	1619,590 ^b

Tablo 3.19.'ün devamı

Alt Seviye			Üst Seviye			$\lambda(\text{Å})$	
Konf.	Terim	J	Konf.	Terim	J	$\lambda_{\text{MCHF+BP}}$	$\lambda_{\text{diğer çalışmalar}}$
5d	2D	5/2	6f	$^2F^o$	7/2	2982,19 ^A	2981,36 ^a ; 2981,319 ^b
5d	2D	3/2	6f	$^2F^o$	5/2	2981,88 ^A	2981,36 ^a ; 2981,011 ^b
3p	$^2P^o$	1/2	4s	2S	1/2	749,57 ^A	749,560 ^b
3p	$^2P^o$	3/2	5s	2S	1/2	512,59 ^A	512,588 ^b
4p	$^2P^o$	3/2	5s	2S	1/2	1620,30 ^A	1620,274 ^b
2p	$^2P^o$	1/2	5s	2S	1/2	173,50 ^A	173,505 ^b
3d	2D	3/2	4p	$^2P^o$	1/2	749,95 ^A	749,951 ^b
3d	2D	5/2	4p	$^2P^o$	3/2	749,92 ^A	749,917 ^b
3d	2D	5/2	5f	$^2F^o$	5/2	512,60 ^A	512,598 ^b
3p	$^2P^o$	1/2	5s	2S	1/2	512,41 ^A	512,410 ^b
4p	$^2P^o$	1/2	5s	2S	1/2	1619,56 ^A	1619,523 ^b
4d	2D	3/2	5p	$^2P^o$	1/2	1620,29 ^A	1620,295 ^b
4d	2D	5/2	5p	$^2P^o$	3/2	1620,16 ^A	1620,161 ^b
E2 Geçişleri							
2p	$^2P^o$	3/2	4f	$^2F^o$	7/2	194.39 ^A	–
2p	$^2P^o$	3/2	5f	$^2F^o$	7/2	173.57 ^A	–
2p	$^2P^o$	3/2	6f	$^2F^o$	7/2	164.02 ^A	–
2p	$^2P^o$	3/2	4f	$^2F^o$	5/2	194.39 ^A	–
2p	$^2P^o$	3/2	5f	$^2F^o$	5/2	173.57 ^A	–
2p	$^2P^o$	1/2	4f	$^2F^o$	5/2	194.31 ^A	–
2p	$^2P^o$	1/2	5f	$^2F^o$	5/2	173.50 ^A	–
2p	$^2P^o$	1/2	6f	$^2F^o$	5/2	163.96 ^A	–
2p	$^2P^o$	1/2	3p	$^2P^o$	3/2	262.28 ^A	–
1s	2S	1/2	3d	2D	5/2	40.99 ^A	–
1s	2S	1/2	4d	2D	5/2	38.87 ^A	–
1s	2S	1/2	5d	2D	5/2	37.96 ^A	–
1s	2S	1/2	3d	2D	3/2	40.99 ^A	–
1s	2S	1/2	4d	2D	3/2	38.87 ^A	–
M1 Geçişleri							
2p	$^2P^o$	3/2	3p	$^2P^o$	1/2	262.49 ^A	–
2p	$^2P^o$	3/2	4p	$^2P^o$	1/2	194.41 ^A	–
2p	$^2P^o$	3/2	5p	$^2P^o$	1/2	173.57 ^A	–
3d	2D	5/2	4d	2D	3/2	749.92 ^A	–
3d	2D	5/2	5d	2D	3/2	512.61 ^A	–

^a Ref. [51], ^bRef.[53]

Tablo 3.20. B V'in bazı seviyeleri arasındaki E1, E2 ve M1 geçişlerine ait Aki geçiş olasılıkları

En Alt Seviye			En Üst Seviye			Aki(s ⁻¹)	
Konf.	Terim	J	Konf.	Terim	J	Aki _{MCHF+BP}	Aki _{diğer çalışmalar}
E1 Geçişleri							
1s	² S	1/2	2p	² P ^o	3/2	3,92(11) ^A	3,92(11) ^a
1s	² S	1/2	2p	² P ^o	1/2	3,92(11) ^A	3,92(11) ^a
1s	² S	1/2	3p	² P ^o	3/2	1,04(11) ^A	1,05(11) ^a
1s	² S	1/2	3p	² P ^o	1/2	1,04(11) ^A	1,05(11) ^a
1s	² S	1/2	4p	² P ^o	3/2	4,25(10) ^A	4,27(10) ^a
1s	² S	1/2	4p	² P ^o	1/2	4,24(10) ^A	4,27(10) ^a
2p	² P ^o	3/2	3d	² D	5/2	4,04(10) ^A	4,04(10) ^a
2p	² P ^o	1/2	3d	² D	3/2	3,37(10) ^A	3,38(10) ^a
1s	² S	1/2	5p	² P ^o	3/2	2,13(10) ^A	2,15(10) ^a
1s	² S	1/2	5p	² P ^o	1/2	2,13(10) ^A	2,15(10) ^a
2s	² S	1/2	3p	² P ^o	3/2	1,40(10) ^A	1,41(10) ^a
2s	² S	1/2	3p	² P ^o	1/2	1,40(10) ^A	1,41(10) ^a
2p	² P ^o	3/2	4d	² D	5/2	1,29(10) ^A	1,29(10) ^a
2p	² P ^o	1/2	4d	² D	3/2	1,08(10) ^A	1,08(10) ^a
3d	² D	5/2	4f	² F ^o	7/2	8,62(9) ^A	8,62(9) ^a
3d	² D	3/2	4f	² F	5/2	8,05(9) ^A	8,05(9) ^a
2p	² P ^o	3/2	3d	² D	3/2	6,74(9) ^A	6,74(9) ^a
2s	² S	1/2	4p	² P ^o	3/2	6,03(9) ^A	6,05(9) ^a
2s	² S	1/2	4p	² P ^o	1/2	6,03(9) ^A	6,05(9) ^a
2p	² P ^o	3/2	5d	² D	5/2	5,89(9) ^A	5,90(9) ^a
2p	² P ^o	1/2	5d	² D	3/2	4,90(9) ^A	4,92(9) ^a
3p	² P ^o	3/2	4d	² D	5/2	4,40(9) ^A	4,40(9) ^a
3p	² P ^o	1/2	4d	² D	3/2	3,67(9) ^A	3,67(9) ^a
2s	² S	1/2	5p	² P ^o	3/2	3,08(9) ^A	3,10(9) ^a
2s	² S	1/2	5p	² P ^o	1/2	3,07(9) ^A	3,10(9) ^a
3d	² D	5/2	5f	² F ^o	7/2	2,84(9) ^A	2,84(9) ^a
3d	² D	3/2	5f	² F ^o	5/2	2,65(9) ^A	2,65(9) ^a
2p	² P ^o	3/2	3s	² S	1/2	2,64(9) ^A	2,63(9) ^a
3p	² P ^o	3/2	5d	² D	5/2	2,19(9) ^A	2,12(9) ^a
2p	² P ^o	3/2	4d	² D	3/2	2,15(9) ^A	2,15(9) ^a
3s	² S	1/2	4p	² P ^o	1/2	1,92(9) ^A	1,92(9) ^a
3s	² S	1/2	4p	² P ^o	3/2	1,91(9) ^A	1,92(9) ^a
3p	² P ^o	1/2	5d	² D	3/2	1,76(9) ^A	1,79(9) ^a
4d	² D	5/2	5f	² F ^o	7/2	1,62(9) ^A	1,62(9) ^a
4d	² D	3/2	5f	² F ^o	5/2	1,51(9) ^A	1,51(9) ^a
3d	² D	5/2	6f	² F ^o	7/2	1,34(9) ^A	1,34(9) ^a
2p	² P ^o	1/2	3s	² S	1/2	1,31(9) ^A	1,32(9) ^a
3d	² D	3/2	6f	² F ^o	5/2	1,26(9) ^A	1,25(9) ^a
2p	² P ^o	3/2	4s	² S	1/2	1,07(9) ^A	1,08(9) ^a
3s	² S	1/2	5p	² P ^o	3/2	1,02(9) ^A	1,03(9) ^a
3s	² S	1/2	5p	² P ^o	1/2	1,02(9) ^A	1,03(9) ^a
4p	² P ^o	3/2	5d	² D	5/2	9,29(8) ^A	9,30(8) ^a
4d	² D	5/2	6f	² F ^o	7/2	8,05(8) ^A	8,05(8) ^a
4p	² P ^o	1/2	5d	² D	3/2	7,73(8) ^A	7,76(8) ^a
3p	² P ^o	3/2	4s	² S	1/2	7,67(8) ^A	7,65(8) ^a
4d	² D	3/2	6f	² F ^o	5/2	7,52(8) ^A	7,51(8) ^a
3p	² P ^o	3/2	4d	² D	3/2	7,33(8) ^A	7,34(8) ^a
3d	² D	5/2	4f	² F ^o	5/2	5,75(8) ^A	5,75(8) ^a
2p	² P ^o	3/2	5s	² S	1/2	5,33(8) ^A	5,37(8) ^a
2p	² P ^o	1/2	4s	² S	1/2	5,32(8) ^A	5,38(8) ^a
4s	² S	1/2	5p	² P ^o	3/2	4,60(8) ^A	4,62(8) ^a
4s	² S	1/2	5p	² P ^o	1/2	4,60(8) ^A	4,61(8) ^a
5d	² D	5/2	6f	² F ^o	7/2	4,52(8) ^A	4,52(8) ^a
5d	² D	3/2	6f	² F ^o	5/2	4,22(8) ^A	4,22(8) ^a

Tablo 3.20.'nin devamı

Alt Seviye			Üst Seviye			Aki(s)	
Konf.	Terim	J	Konf.	Terim	J	Aki _{MCHF+BP}	Aki _{diğer çalışmalar}
3p	² P ^o	1/2	4s	² S	1/2	3,82(8) ^A	3,83(8) ^a
3p	² P ^o	3/2	5s	² S	1/2	3,76(8) ^A	3,77(8) ^a
4p	² P ^o	3/2	5s	² S	1/2	2,69(8) ^A	2,69(8) ^a
2p	² P ^o	1/2	5s	² S	1/2	2,61(8) ^A	2,69(8) ^a
3d	² D	3/2	4p	² P ^o	1/2	2,18(8) ^A	2,17(8) ^a
3d	² D	5/2	4p	² P ^o	3/2	1,96(8) ^A	1,96(8) ^a
3d	² D	5/2	5f	² F ^o	5/2	1,89(8) ^A	1,89(8) ^a
3p	² P ^o	1/2	5s	² S	1/2	1,87(8) ^A	1,89(8) ^a
4p	² P ^o	1/2	5s	² S	1/2	1,34(8) ^A	1,34(8) ^a
4d	² D	3/2	5p	² P ^o	1/2	1,18(9) ^A	1,18(8) ^a
4d	² D	5/2	5p	² P ^o	3/2	1,06(8) ^A	1,06(8) ^a
E2 Geçişleri							
2p	² P ^o	3/2	4f	² F ^o	7/2	9,66(5) ^A	–
2p	² P ^o	3/2	5f	² F ^o	7/2	6,47(5) ^A	–
2p	² P ^o	3/2	6f	² F ^o	7/2	4,08(5) ^A	–
2p	² P ^o	3/2	4f	² F ^o	5/2	2,15(5) ^A	–
2p	² P ^o	3/2	5f	² F ^o	5/2	1,44(5) ^A	–
2p	² P ^o	1/2	4f	² F ^o	5/2	7,51(5) ^A	–
2p	² P ^o	1/2	5f	² F ^o	5/2	5,05(5) ^A	–
2p	² P ^o	1/2	6f	² F ^o	5/2	3,09(5) ^A	–
2p	² P ^o	1/2	3p	² P ^o	3/2	1,87(5) ^A	–
1s	² S	1/2	3d	² D	5/2	9,30(6) ^A	–
1s	² S	1/2	4d	² D	5/2	5,17(6) ^A	–
1s	² S	1/2	4d	² D	5/2	3,14(6) ^A	–
1s	² S	1/2	3d	² D	3/2	9,30(6) ^A	–
1s	² S	1/2	4d	² D	3/2	5,17(6) ^A	–
M1 Geçişleri							
2p	² P ^o	3/2	3p	² P ^o	1/2	0,0935 ^A	–
2p	² P ^o	3/2	4p	² P ^o	1/2	0,0518 ^A	–
2p	² P ^o	3/2	5p	² P ^o	1/2	0,0293 ^A	–
3d	² D	5/2	4d	² D	3/2	3,52(-4) ^A	–
3d	² D	5/2	5d	² D	3/2	2,41(-4) ^A	–

^a Ref. [53]

Tablo 3.21. B V'in bazı seviyeleri arasındaki E1, E2 ve M1 geçişlerine ait gf ağırlıklı salınıcı şiddetleri

Alt Seviye			Üst Seviye			gf	
Konf.	Terim	J	Konf.	Terim	J	gf _{MCHF+BP}	gf _{diğer çalışmalar}
E1 Geçişleri							
1s	² S	1/2	2p	² P ^o	3/2	0,5542 ^A	0,5552 ^a
1s	² S	1/2	2p	² P ^o	1/2	0,2772 ^A	0,2772 ^a
1s	² S	1/2	3p	² P ^o	3/2	0,1052 ^A	0,1052 ^a
1s	² S	1/2	3p	² P ^o	1/2	0,0526 ^A	0,0528 ^a
1s	² S	1/2	4p	² P ^o	3/2	0,385 ^A	0,3866 ^a
1s	² S	1/2	4p	² P ^o	1/2	0,0192 ^A	0,0194 ^a
2p	² P ^o	3/2	3d	² D	5/2	-2,5039 ^A	0,6263 ^a
2p	² P ^o	1/2	3d	² D	3/2	-1,3902 ^A	0,6962 ^a
1s	² S	1/2	5p	² P ^o	3/2	0,0184 ^A	0,0186 ^a
1s	² S	1/2	5p	² P ^o	1/2	0,0092 ^A	0,0094 ^a
2s	² S	1/2	3p	² P ^o	3/2	0,5785 ^A	0,5802 ^a
2s	² S	1/2	3p	² P ^o	1/2	0,2896 ^A	0,290 ^a
2p	² P ^o	3/2	4d	² D	5/2	-0,4382 ^A	0,1906 ^a
2p	² P ^o	1/2	4d	² D	3/2	-0,2433 ^A	0,1219 ^a
3d	² D	5/2	4f	² F ^o	7/2	5,8131 ^A	5,8152 ^a
3d	² D	3/2	4f	² F ^o	5/2	4,0687 ^A	4,0708 ^a
2p	² P ^o	3/2	3d	² D	3/2	-0,2782 ^A	0,6959 ^a
2s	² S	1/2	4p	² P ^o	3/2	0,1366 ^A	0,137 ^a
2s	² S	1/2	4p	² P ^o	1/2	0,0683 ^A	0,0684 ^a
2p	² P ^o	3/2	5d	² D	5/2	-0,1595 ^A	0,0399 ^a
2p	² P ^o	1/2	5d	² D	3/2	-0,0884 ^A	0,0444 ^a
3p	² P ^o	3/2	4d	² D	5/2	-2,2244 ^A	0,5566 ^a
3p	² P ^o	1/2	4d	² D	3/2	-1,2345 ^A	0,6187 ^a
2s	² S	1/2	5p	² P ^o	3/2	0,0555 ^A	0,0024 ^a
2s	² S	1/2	5p	² P ^o	1/2	0,0277 ^A	0,028 ^a
3d	² D	5/2	5f	² F ^o	7/2	0,8948 ^A	0,8952 ^a
3d	² D	3/2	5f	² F ^o	5/2	0,6263 ^A	0,6268 ^a
2p	² P ^o	3/2	3s	² S	1/2	-0,0545 ^A	0,0136 ^a
3p	² P ^o	3/2	5d	² D	5/2	-0,5007 ^A	0,1253 ^a
2p	² P ^o	3/2	4d	² D	3/2	-0,0487 ^A	0,0122 ^a
3s	² S	1/2	4p	² P ^o	1/2	0,3228 ^A	0,0626 ^a
3s	² S	1/2	4p	² P ^o	3/2	0,6446 ^A	0,6466 ^a
3p	² P ^o	1/2	5d	² D	3/2	-0,2778 ^A	0,1393 ^a
4d	² D	5/2	5f	² F ^o	7/2	5,0854 ^A	5,088 ^a
4d	² D	3/2	5f	² F ^o	5/2	3,5589 ^A	3,562 ^a
3d	² D	5/2	6f	² F ^o	7/2	0,3081 ^A	0,3078 ^a
2p	² P ^o	1/2	3s	² S	1/2	-0,0271 ^A	0,0136 ^a
3d	² D	3/2	6f	² F ^o	5/2	0,2159 ^A	0,202 ^a
2p	² P ^o	3/2	4s	² S	1/2	-0,0122 ^A	0,0031 ^a
3s	² S	1/2	5p	² P ^o	3/2	0,1607 ^A	0,1614 ^a
3s	² S	1/2	5p	² P ^o	1/2	0,0803 ^A	0,0808 ^a
4p	² P ^o	3/2	5d	² D	5/2	-2,1913 ^A	0,5485 ^a
4d	² D	5/2	6f	² F ^o	7/2	1,0642 ^A	1,0638 ^a
4p	² P ^o	1/2	5d	² D	3/2	-1,2156 ^A	0,6096 ^a
3p	² P ^o	3/2	4s	² S	1/2	-0,1293 ^A	0,0323 ^a
4d	² D	3/2	6f	² F ^o	5/2	0,7454 ^A	0,7448 ^a
3p	² P ^o	3/2	4d	² D	3/2	-0,2472 ^A	0,0618 ^a
3d	² D	5/2	4f	² F ^o	5/2	0,2907 ^A	0,291 ^a
2p	² P ^o	3/2	5s	² S	1/2	-0,0048 ^A	0,0121 ^a
2p	² P ^o	1/2	4s	² S	1/2	-0,0060 ^A	0,0031 ^a
4s	² S	1/2	5p	² P ^o	3/2	0,7230 ^A	0,7260 ^a
4s	² S	1/2	5p	² P ^o	1/2	0,3620 ^A	0,363 ^a

Tablo 3.21.'in devamı

Alt Seviye			Üst Seviye			gf	
Konf.	Terim	J	Konf.	Terim	J	gf _{MCHF+BP}	gf _{diğer çalışmalar}
5d	² D	5/2	6f	² F ^o	7/2	4,8254 ^A	4,8252 ^a
5d	² D	3/2	6f	² F ^o	5/2	3,3784 ^A	3,378 ^a
3p	² P ^o	1/2	4s	² S	1/2	-0,0643 ^A	0,3227 ^a
3p	² P ^o	3/2	5s	² S	1/2	-0,0296 ^A	0,0074 ^a
4p	² P ^o	3/2	5s	² S	1/2	-0,2119 ^A	0,0529 ^a
2p	² P ^o	1/2	5s	² S	1/2	-0,0024 ^A	0,0012 ^a
3d	² D	3/2	4p	² P ^o	1/2	0,0367 ^A	0,0368 ^a
3d	² D	5/2	4p	² P ^o	3/2	0,0660 ^A	0,0660 ^a
3d	² D	5/2	5f	² F ^o	5/2	0,0447 ^A	0,0450 ^a
3p	² P ^o	1/2	5s	² S	1/2	-0,0147 ^A	0,0074 ^a
4p	² P ^o	1/2	5s	² S	1/2	-0,1054 ^A	0,0529 ^a
4d	² D	3/2	5p	² P ^o	1/2	0,0928 ^A	0,0928 ^a
4d	² D	5/2	5p	² P ^o	3/2	0,1669 ^A	0,1668 ^a
E2 Geçişleri							
2p	² P ^o	3/2	4f	² F ^o	7/2	6.097(-05) ^A	–
2p	² P ^o	3/2	5f	² F ^o	7/2	2.336(-05) ^A	–
2p	² P ^o	3/2	6f	² F ^o	7/2	1.317(-05) ^A	–
2p	² P ^o	3/2	4f	² F ^o	5/2	7.294(-06) ^A	–
2p	² P ^o	3/2	5f	² F ^o	5/2	3.893(-06) ^A	–
2p	² P ^o	1/2	4f	² F ^o	5/2	2.552(-05) ^A	–
2p	² P ^o	1/2	5f	² F ^o	5/2	1.368(-05) ^A	–
2p	² P ^o	1/2	6f	² F ^o	5/2	7.489(-06) ^A	–
2p	² P ^o	1/2	3p	² P ^o	3/2	7.706(-06) ^A	–
1s	² S	1/2	3d	² D	5/2	1.405(-05) ^A	–
1s	² S	1/2	4d	² D	5/2	7.029(-06) ^A	–
1s	² S	1/2	4d	² D	5/2	4.067(-06) ^A	–
1s	² S	1/2	3d	² D	3/2	9.373(-06) ^A	–
1s	² S	1/2	4d	² D	3/2	4.685(-06) ^A	–
M1 Geçişleri							
2p	² P ^o	3/2	3p	² P ^o	1/2	1.932(-12) ^A	–
2p	² P ^o	3/2	4p	² P ^o	1/2	5.866(-13) ^A	–
2p	² P ^o	3/2	5p	² P ^o	1/2	2.649(-13) ^A	–
3d	² D	5/2	4d	² D	3/2	1.881(-06) ^A	–
3d	² D	5/2	5d	² D	3/2	4.223(-07) ^A	–

^a Ref. [53]

(MCHF) yöntemi [54-56], çok konfigürasyonlu Dirac-Hartree-Fock (MCDHF) yöntemi [54-56], konfigürasyon etkileşme (CI) yöntemi [57], relativistik çok-cisim pertürbasyon teorisi (RMBPT) [58] ve en zayıf bağ seçimi potansiyel modeli (WBEPM) teorisi [59], vs söylenebilir.

MCHF yöntemi, atomların ve iyonların enerji seviyelerini de içeren özelliklerini hesaplamak için geniş çapta kullanılmaktadır. Bu çalışmada da MCHF yaklaşıklığı etkileşme terimleri için en iyi radyal fonksiyonları elde etmek için kullanıldı ve relativistik etkiler Breit-Pauli yaklaşıklığı kapsamında alındı. Böylece bu yöntem kullanılarak B ve iyonları için elde edilen verilerin için faydalı olacağı düşünülmektedir.

KAYNAKLAR

- [1] FOWLER, A., Report on Series in Line Spectra, (London: Fleetway Press Ltd), 1-190, 1922.
- [2] BOWEN, I.S., Series Spectra of Boron, Carbon, Nitrogen, Oxygen and Fluorine, Phys. Rev., 29, 231-247, 1927.
- [3] MILIKAN, R.A., BOWEN I.S., Extreme Ultra-violet Spectra, Phys. Rev., 23, 1-34, 1924.
- [4] BOWEN, I.S., MILIKAN, R.A., The Series Spectra of the Stripped Boron Atom (BIII), Proc. Natl. Acad. Sci., USA, 10, 199-203, 1924.
- [5] BOWEN, I.S., MILIKAN, R.A., Series Spectra of Two-Valence-Electron Atoms of Boron (B II) and Carbon (C III), Phys. Rev., 26, 310-318, 1925.
- [6] SELWYN, E.H.W., Arc Spectra in the Region λ 1600-2100, Proc. Soc., 41, 392-403, 1929.
- [7] ODINTZOVA, G.A., STRIGANOV, A.R., The Spectrum and Energy Levels of the Neutral Atom of Boron (B I), J. Phys. Chem. Ref. Data, 8, 63-67, 1979.
- [8] KRAMIDA, A.E., RYABTSEV, A.N., A Critical Compilation of Energy Levels and Spectral Lines of Neutral Boron, Phys. Scr., 76, 544-557, 2007.
- [9] FISCHER, C.F., BRAGE, T., JOHNSON, P., Computational Atomic Structure-an MCHF, Bristol and Philadelphia, Institute of Physics Publishing, 1997.
- [10] BRUCH, R., PAUL, G., ANDRA, J., Metastable Autoionizing Three- and Four-Electron States in Beryllium, J. Phys. B, 8, L253-L258, 1975.
- [11] BECK, D.R., NICOLADIES, C.A., High Spin and Mixed States in BI and BII, Phys. Lett., 61A, 227-229, 1977.
- [12] MANNERVIK, S., CEDERQUIST, H., MARTINSON, I., BRAGE, T., FISCHER, C.F., $1s2s2p^2\ ^5p^3\ ^5S$ Transition in B II, Phys. Rev A, 35, 3136-3138, 1987.

- [13] SCHNEDIER, D., BRUCH, R., SCHWARZ, W.H.E., CHANG, T.C., MOORE, C.F., Identifications of Auger Spectra From 2-MeV Foil-Excited Carbon Ions, *Phys. Rev. A*, 15, 926-934, 1977.
- [14] RØDBRO, M., BRUCH, R., BISGAARG, P., DAHL, P., FASTRUP, B., High-Resolution Auger Spectra of Boron Excited in 200 keV B^+ Single Collisions, *J. Phys. B*, 10, L483-L487, 1977.
- [15] RØDBRO, M., BRUCH, R., BISGAARG, P., High-Resolution Projectile Auger Spectroscopy for Li, Be, B and C Excited in Single Gas Collisions. I. Line Energies for Prompt Decays, *J. Phys. B*, 12, 2413-2447, 1979.
- [16] MARTINSON, I., BICKEL, W.S., ÖLME, A., Bean-Foil Spectra of Boron 450-5000 \AA , *J. Opt. Soc. Am.*, 60, 1213-1220, 1970.
- [17] KERNEHAN, J.A., PINNINGTON, E.H., LIVINGSTON, A.E., IRWIN, D. J.G., Mean-life Measurements for Levels in B I-B IV, *Phys. Scr.* 12, 319-322, 1975.
- [18] BRAGE, T., FISCHER, C.F., The $1s2s2p^2\ ^5P-1s2p^3\ ^5S$ Transition in Be I-like ions, *J. Phys. B*, 21, 2563-2569, 1988.
- [19] BLUNDELL, S.A., JOHNSON, W.R., SAFRONOVA, M.S., SAFRONOVA, U.I., Relativistic Many-body Calculations of the Energies of $n=4$ States along the Zinc Isoelectronic Sequence, *Phys. Rev. A*, 77, 032507, 2008.
- [20] ZHENG, N.W., FAN, J., MA, D.X., WANG, T., Theoretical Study of Energy Levels and Transition Probabilities of Singly Ionized Aluminum (Al II), *J. Phys. Soc. Jap.*, 72, 3091-3096, 2003.
- [21] RYABTSEV, A.N., KINK, I., AWAYA, Y., EKBERG, J.O., MANNERVIK, S., ÖLME, A., MARTINSON, I., Additions to the Spectrum and Energy Levels and a Critical Compilation of Singly-Ionized Boron, B II, *Phys. Scr.*, 489-501, 71, 2005.
- [22] CHENG, K.T., HARDIS, J.E., DEHM, E.J., BECK, D.R., Fine and Hyperfine Structure of the Li^- Spectrum, *Phys. Rev. A*, 30, 698-702, 1984.
- [23] YANG, H.Y., CHUNG, K.T., Energy, Fine-structure, and Hyperfine-structure Studies of the Core-excited States $1s2s2p^2(^5P)$ and $1s2p^3(^5S)$ for Be-like Systems, *Phys. Rev. A*, 51, 3621-3629, 1995.

- [24] GOU, B., WANG, F., Relativistic Energy, Fine Structure, and Hyperfine Structure of the High-lying Core-excited States ${}^5P(n)$ ($n=1-7$) and ${}^5S^o(m)$ ($m=1-5$) for Be-like Boron and Carbon, *Phys. Rev. A*, 69, 042513, 1-5, 2004.
- [25] DZUBA, V.A., SAFRONOVA, U.I., JOHNSON, W.R., Energy Levels and Lifetimes of NdIV, PmIV, SmIV, and EuIV, *Phys. Rev. A*, 68, 032503, 1-4, 2003.
- [26] WEISS, A.W., Private Communication to IM, 1973.
- [27] ERICSON, A., EDLÉN, B., Serienspektren der Leichtesten Elemente im Extremen Ultraviolett, *Z. Phys.*, 59, 656-679, 1930.
- [28] EDLÉN, B., Das Zweite Funkenspektrum des Bors, B III, im Gebiet 5000-2000 Å, *Z. Phys.*, 72, 763-766, 1930.
- [29] EDLÉN, B., Wellenlangen und Termsysteme zu den Atomspectren der Elemente Lithium, Beryllium, Bor, Kohlenstoff, Stickstoff und Sauerstoff, *Nova Acta. Reg. Soc. Sci. Upsal.* IV, 9 (6), 1-153, 1934.
- [30] MOORE, C.E., Atomic Energy Levels (National Bureau of Standards Circular 467) Vol. I, (Washington DC, US Government Printing Office), 1949.
- [31] ÖLME, A., The Spectrum of Doubly Ionized Boron, B III, *Ark. Fys.*, 40 35-47, 1969.
- [32] LITZÉN, U., KLING, R., Precision Measurement of Wavelengths and Isotope Shifts of B III Resonance Lines at 2065 and 2067 Å, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 31, L933-L936, 1998.
- [33] EDLÉN, B., The Transitions $3s-3p$ and $3p-3d$, and the Ionization Energy in the Na I Iso-electronic Sequence, *Phys. Scr.*, 17, 565-574, 1978, EDLÉN, B., Accurate Semi-Empirical Formulae for the Energy Structure of Li I-like Spectra *Phys. Scr.*, 19, 255-266, 1979.
- [34] MANNERVIK, S., Optical Studies of Multiply Excited States, *Phys. Scr.*, 40, 28-52, 1989.
- [35] TO, K.X., KNYSTAUTAS, E.J., DROUIN, R., BERRY, H., Doubly-Excited States in B III, *Beam-Foil Spectroscopy Vol. 1*, ed I A Sellin, Pegg D J, (New York: Plenum), 385, 1976.
- [36] CHUNG, K.T., BRUCH, R., TRÄBERT, E., HECKMANN, P.H., On the Quartet System of B III, *Phys. Scr.*, 29, 108-112, 1984.

- [37] KNYSTAUTAS, E.J., DROUIN, R., Satellite Lines in Highly-stripped Ions of B, C, N, O, and F, Beam-Foil Spectroscopy Vol. 1, ed I A Sellin, Pegg D J, (New York: Plenum), 377, 1976.
- [38] KENNEDY, E.T., CARROLL, P.K., Satellite Lines of low-Z Elements (Li, Be, B) Observed in Laser-produced Plasmas, J. Phys. B: At. Mol. Phys., 11, 965-974, 1978.
- [39] BRUCH, R., CHUNG, K.T., TRÄBERT, E., HECKMANN, P.H., RATH, B., MÜLLER, H.R., High-resolution EUV Spectra of Core-excited 2P , $^2D^0$ and 2F States of Doubly Ionised Boron, J. Phys. B: At. Mol. Phys., 17, 333-344, 1984.
- [40] JANITTI, E., NICOLASI, P., TONDELLO, G., Photoabsorption Spectrum of Be^+ , Physica, 124C, 139-147, 1984.
- [41] TYRÉN, F., Nova Acta Reg. Soc. Upsal. IV 12 (1) 66 1940.
- [42] KRAMIDA, A.E., RYABTSEV, A.N., EKBERG, J.O., KINK, I., MANNERVIK, S., MARTINSON, I., Additions to the Spectrum and Energy Levels and Critical Compilation of Doubly Ionized Boron, B III, Phys. Scr., 78, 025301, 1-22, 2008.
- [43] ROBINSON, H.A., Helium I like Spectra, Phys. Rev., 51, 14-18, 1937.
- [44] SVENSSON, L.Å., Remeasured Wavelengths of Some Resonance Lines of Be III, B IV, C V and O VII, Phys. Scr., 1, 246, 1970.
- [45] EIDELSBURG, M., The Spectrum and Term System for Helium-like Boron, B IV, J. Phys. B: At. Mol. Phys., 7, 1476, 1974.
- [46] TO, K.X., Étude Spectroscopique du Boré à L'Aide de la Technique Faisceau-Lame: B III, B IV et B V PhD Thesis Université Laval Quebec Canada, 1978.
- [47] DINNEEN, T.P., BERRAH-MANSOUR N., BERRY, H.G., YOUNG, L., PADRO, P.C., Precision Measurements of Relativistic and QED Effects in Helium-like Boron, Phys. Rev. Lett., 66, 2859-2862, 1991.
- [48] ACCAD, Y., PEKERIS, C.L., SCHIFF, B., *S* and *P* States of the Helium Isoelectronic Sequence up to $Z=10$, Phys. Rev. A, 4, 516-536, 1971.
- [49] SAKAUE, H.A., Ejected Electron Spectra from Doubly-excited States ($2lnl'$) of He-like Ions Produced by the B^{5+} , C^{6+} -He Collisions, J. Phys. B: At. Mol. Phys., 24, 3787-3795, 1991.
- [50] TYRÉN, F., Wallenlangenbestimmungen der *L*-serie an den Elementen 29 Cu bis 26 Fe, Z. Phys., 98, 768-774, 1936.

- [51] KRAMIDA, A.E., RYABTSEV, A.N., EKBERG, J.O., KINK, I., MANNERVIK, S., MARTINSON, I., Additions to the Spectrum and Energy Levels and a Critical Compilation of Helium-like and Hydrogen-like Boron, B IV and B V, Phys. Scr., 78, 025302, 1-18 2008.
- [52] FISCHER, C.F., The MCHF Atomic-structure Package, Comput. Phys. Commun., 128, 635-636, 2000.
- [53] NIST: Available: <http://physics.nist.gov/asd3>, Eylül, 2010.
- [54] IRIMIA, A., FISCHER, C.F., Breit–Pauli and Dirac–Hartree–Fock Energy Levels and Transition Probabilities in Neutral Argon, J. Phys. B, 37, 1659-1672, 2004.
- [55] FISCHER, C.F., TACHIEV, G., Breit–Pauli Energy Levels, Lifetimes, and Transition Probabilities for the Beryllium-like to Neon-like Sequences, At. Nucl. Data Tables, 87, 1-184, 2004.
- [56] FISCHER, C.F., TACHIEV, G., IRIMIA, A., Relativistic Energy Levels, Lifetimes, and Transition Probabilities for the Sodium-like to Argon-like Sequences, At. Data Nucl. Data Tables, 92, 607-812, 2006.
- [57] YANG, H.Y., CHUNG, K.T., Energy, Fine-structure, and Hyperfine-structure Studies of the Core-excited States $1s2s2p^2(^5P)$ and $1s2p^3(^5S)$ for Be-like Systems, Phys. Rev. A, 51, 3621-3629, 1995.
- [58] WANG, F., GOU, B.C., Relativistic Energy, Fine Structure and Hyperfine Structure of the Core-excited States $1s2s2pnp\ ^5P$ ($n = 2-6$) and $1s2p^2mp\ ^5S^o$ ($m = 2-6$) for Beryllium, J. Phys. B, 36, 331-340, 2003.
- [59] HATA, J., GRANT, I.P., The $1s2s2p^2\ ^5P-1s2p^3\ ^5S$ Transitions in the Beryllium Isoelectronic Sequence, J. Phys. B, 16, L125-L128, 1983.
- [60] AĞAR, O., ÖZDEMİR, L., ÜRER, G., KARAÇOBAN, N., The Influence of Correlation and Relativistic Contributions on Level Structure of B I, Turkish Physical Society, 27th International Physics Congress, Istanbul, 14-17 September 2010.
- [61] KARAÇOBAN, B., ÖZDEMİR, L., AĞAR, O., ÜRER, G., An Investigation on Level Structure of B I Using Configuration Interaction Methods, International Journal of Physics, 0975 7155 2010 (sunuldu).

ÖZGEÇMİŞ

Osman AĞAR, 15.10.1987'de Şanlıurfa'da doğdu. İlk, orta ve lise eğitimini Mardin Kızıltepe'de tamamladı. 2004'de Kocaeli Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik bölümünü kazandı. 2008-2009 öğrenim yılında Kocaeli Üniversitesi'nden mezun oldu. 2009 yılında Sakarya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim dalında yüksek lisansa başladı ve halen aynı üniversitede yüksek lisans eğitimine devam etmektedir.