

107966

T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**KÜKÜRT'ÜN BAZI İYONLARI İÇİN ENERJİ
SEVİYELERİ VE GEÇİŞ OLASILIKLARININ MCHF
YÖNTEMİ İLE İNCELENMESİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Güldem ÜRER

Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK
Tez Danışmanı : Yrd. Doç. Dr. Leyla ÖZDEMİR

Aralık 2005

T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

KÜKÜRT'ÜN BAZI İYONLARI İÇİN ENERJİ
SEVİYELERİ VE GEÇİŞ OLASILIKLARININ MCHF
YÖNTEMİ İLE İNCELENMESİ


YÜKSEK LİSANS TEZİ

Güldem ÜRER

Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK

Bu tez 21/12/2005 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından Oybirliği ile kabul edilmiştir.


Yrd. Doç. Dr. Leyla ÖZDEMİR
Jüri Başkanı


Doç. Dr. İbrahim OKUR
Üye


Yrd. Doç. Dr. Ö. Faruk GÖZÜKIZIL
Üye

ÖNSÖZ

Bu çalışmada hidrojen, helyum ve lityum benzeri Kükürt (S XVI, S XV ve S XIV) için seçilen tek pariteli ve çift pariteli konfigürasyonlara ait enerji seviyeleri, geçiş enerjileri, ağırlıklı osilatör şiddetleri ve geçiş olasılıkları hesaplandı. Bu hesaplamalar için çok konfigürasyonlu Hartree-Fock (Multiconfiguration Hartree-Fock–MCHF) yöntemi kullanıldı.

Biçilen ömürlerimizde hayatlarımıza dokunuyoruz ve yarına taşıyoruz birbirimizi. Yarına taşınırken yüreğimde yer eden, bana öncülük eden değerli hocam Yrd. Doç. Dr. Leyla ÖZDEMİR'e, aileme ve Araş. Gör. Filiz ERTUĞRAL'a teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ.....	ii
İÇİNDEKİLER.....	iii
KISALTMALAR.....	v
TABLolar LİSTESİ.....	vi
ÖZET.....	vii
SUMMARY.....	viii
BÖLÜM 1.	
GİRİŞ.....	1
1.1. S XVI, SXV ve SXIV İyonları ile İlgili Yapılmış Çalışmalar.....	1
BÖLÜM 2.	
HARTREE-FOCK VE ÇOK KONFIGÜRASYONLU HARTREE- FOCK YAKLAŞIKLIKLARI.....	4
2.1. Çok Elektronlu Atomlar için Relativistik Olmayan Hamiltonyen.....	4
2.2. Dalga Fonksiyonunun Özellikleri.....	4
2.2.1. Normalleşme.....	4
2.2.2. Antisimetriklik.....	5
2.2.3. Parite.....	5
2.2.4. Açısai Özellikler.....	6
2.3. Çok Elektronlu Sistemler.....	7
2.3.1. Merkezi alan yaklaşıklığı.....	7
2.3.2. Varyasyon yöntemi.....	10
2.4. Hartree-Fock Yöntemi.....	12
2.5. Çok Konfigürasyonlu Hartree-Fock Yaklaşıklığı (Multiconfiguration Hartree-Fock Approximation–MCHF).....	14

2.5.1. Korelasyon enerjisi.....	14
2.5.2. Çok konfigürasyonlu Hartree-Fock yöntemi.....	19
2.5.3. Ortonormal olmayan açılım.....	22
2.5.4. Köşegen enerji parametresi.....	23
2.5.5. Kararlılık şartı.....	23
2.5.6. Genelleştirilmiş Brillouin Teoremi (GBT).....	24
BÖLÜM 3.	
RELATİVİSTİK DÜZELTMELER.....	25
3.1. Relativistik Etkiler.....	25
3.2. Breit-Pauli Hamiltonyeni ve Dalga Fonksiyonu.....	25
3.3. İnce Yapı Seviyeleri.....	27
BÖLÜM 4.	
İZİNLİ VE YASAKLI GEÇİŞLER.....	30
4.1. Geçişler.....	30
4.1.1 Geçiş özellikleri.....	30
4.2. Kesin ve Yaklaşık Seçim Kuralları.....	32
BÖLÜM 5.	
SONUÇLAR VE TARTIŞMA.....	34
5.1. S XVI, S XV ve SXIV İyonları için Yapılan Hesaplar.....	34
5.1.1. S XVI'ya ait seviye enerjileri dalga boyları, ağırlıklı osilator şiddetleri ve geçiş olasılıkları.....	34
5.1.2. S XV'e ait seviye enerjileri dalga boyları, ağırlıklı osilator şiddetleri ve geçiş olasılıkları.....	34
5.1.3. S XIV'e ait seviye enerjileri dalga boyları, ağırlıklı osilator şiddetleri ve geçiş olasılıkları.....	48
5.2. Tartışma.....	59
KAYNAKLAR.....	60
ÖZGEÇMİŞ.....	66

KISALTMALAR LİSTESİ

- MCHF : Çok konfigürasyonlu Hartree-Fock (Multiconfiguration Hartree-Fock)
CSF : Konfigürasyon Hal fonksiyonu (Configuration State Function)
GBT : Genelleştirilmiş Birilliouin Teoremi
CV : Öz-Valans (Değerlik) Korelasyonu
CC : Öz-Öz Korelasyonu



TABLolar LİSTESİ

Tablo 5.1. Hidrojen benzeri Kükürt'ün ns ($2 \leq n \leq 5$) ve np ($1 \leq n \leq 5$) için seviye ve bu seviyeler arasındaki geçiş enerjileri (cm^{-1}).....	35
Tablo 5.2. Hidrojen benzeri Kükürt'ün ns ($2 \leq n \leq 5$) ve np ($1 \leq n \leq 5$) seviyeleri arasındaki geçişler için λ dalga boyları (Å), gf ağırlıklı osilator şiddetleri ve Aki geçiş olasılıkları (s^{-1}).....	37
Tablo 5.3. Helyum benzeri Kükürt ün $1s^2$, $1s2s$, $1s2p$, $1s3s$, $1s3p$, $1s3d$ seviye enerjileri ve bu seviyeler arasındaki geçiş enerjileri (cm^{-1}).....	39
Tablo 5.4. Helyum benzeri Kükürt'ün $1s^2$, $1s2s$, $1s2p$, $1s3s$, $1s3p$, $1s3d$ seviyeleri arasındaki geçişler için λ dalga boyları (Å), gf ağırlıklı osilator şiddetleri ve Aki geçiş olasılıkları (s^{-1}).....	43
Tablo 5.5. Lityum benzeri Kükürt'ün $1s^22s$, $1s^22p$, $1s^23s$, $1s^23p$, $1s^23d$, $1s^24s$, $1s^24p$, $1s^24d$, $1s^24f$, $1s^25s$, $1s^25p$, $1s^25f$ seviye enerjileri ve bu seviyeler arasındaki geçiş enerjileri (cm^{-1}).....	49
Tablo 5.6. Lityum benzeri Kükürt'ün $1s^22s$, $1s^22p$, $1s^23s$, $1s^23p$, $1s^23d$, $1s^24s$, $1s^24p$, $1s^24d$, $1s^24f$, $1s^25s$, $1s^25p$, $1s^25f$ seviyeleri arasındaki geçişler için λ dalga boyları (Å), gf ağırlıklı osilator şiddetleri ve Aki geçiş olasılıkları (s^{-1}).....	53

ÖZET

Anahtar kelimeler: MCHF metodu, relativistik düzeltmeler, geçiş enerjileri, dalga boyu, ağırlıklı osilatör şiddeti, geçiş olasılıkları.

Bu çalışmada Breit-Pauli relativistik düzeltmeleri ile çok konfigürasyonlu Hartree-Fock (Multiconfiguration Hartree-Fock–MCHF) yaklaşıklığı kullanılarak hidrojen, helyum ve lityum benzeri Kükürt'ün (S XVI, S XV ve S XIV) bazı uyarılmış seviyelerinin enerjileri ve bu seviyeler arasındaki geçişler için enerjiler, dalga boyları, ağırlıklı osilatör şiddetleri ve geçiş olasılıkları hesaplanmaktadır. İlk bölümde; incelenen iyonlar ile ilgili yapılmış çalışmalar, ikinci bölümde; çok elektronlu atomlar ve çok konfigürasyonlu Hartree-Fock yöntemi, üçüncü bölümde; Breit-Pauli relativistik düzeltmeleri, dördüncü bölümde; geçiş olasılıkları hakkında bilgiler verilmektedir. Dalga fonksiyonları ve bazı relativistik düzeltmeler MCHF atomik yapı paketi kullanılarak hesaplanmaktadır. Elde edilen sonuçlar diğer çalışmalar ile karşılaştırmalı olarak son bölümde sunulmaktadır.

INVESTIGATION OF ENERGY LEVELS AND TRANSITION PROBABILITIES FOR SOME IONS OF SULPHUR BY USING MCHF METHOD

SUMMARY

Keywords: MCHF method, relativistic corrections, transition energies, wavelengths, weighted oscillator strengths, transition probabilities.

In this study, level and transition energies, wavelengths, weighted oscillator strengths, and transition probabilities for some excited levels for hydrogenlike, heliumlike and lithiumlike sulphur (S XVI, S XV and S XIV) have been calculated using multiconfiguration Hartree-Fock approximation with Breit-Pauli relativistic corrections. In the first chapter previous works on S XVI, SXV and SXIV have been given. Second, third and fourth chapters deals with the concept of many electron atoms multiconfiguration Hartree-Fock method, Breit-Pauli relativistic corrections and transition probabilities, respectively. Wavefunctions and some relativistic corrections have been calculated using MCHF atomic package. In the last chapter results obtained have been compared with the experiments and calculations.

BÖLÜM 1. GİRİŞ

1.1. S XVI, SXV ve SXIV İyonları ile İlgili Yapılmış Çalışmalar

Bu çalışmada hidrojen, helyum ve lityum benzeri Kükürt'ün (S XVI, SXV ve SXIV) Breit-Pauli relativistik düzeltmelerini içeren çok konfigürasyonlu Hartree-Fock (multiconfiguration Hartree-Fock–MCHF) yaklaşıklığı [1] ile bazı atomik özellikleri incelenmektedir. MCHF atomik yapı paketi [2] kullanılarak seviye enerjileri ve incelenen seviyeler arasındaki geçişlerin enerjileri, dalga boyları, ağırlıklı osilatör şiddetleri ve geçiş olasılıkları hesaplanmaktadır.

İncelemede, S XVI için çift pariteli ns ($1 \leq n \leq 5$) ve tek pariteli np ($2 \leq n \leq 5$); S XV için çift pariteli, $1s^2$, $1s2s$, $1s3s$, $1s3d$ tek pariteli $1s2p$, $1s3p$; S XIV için çift pariteli $1s^22s$, $1s^23s$, $1s^23d$, $1s^24s$, $1s^24d$, $1s^25s$ tek pariteli $1s^22p$, $1s^23p$, $1s^24p$, $1s^24f$, $1s^25p$, $1s^25f$ konfigürasyonları kullanıldı.

Hidrojen ve lityum benzeri Kükürt için mevcut çalışmalar oldukça azdır. Helyum benzeri Kükürt için yapılan çalışmalar ise $2s-2p$ geçişleri üzerinde yoğunlaşmıştır.

Drake iki elektronlu iyonların $1s2s$ 1S halinden kendiliğinden iki foton yayma oranlarının teorik bir çalışmasını yaptı [3]. Dalga boyu 228 \AA dan büyük olan temel halden soğurma çizgileri için atomik veriler Verner ve grubu tarafından yayınlandı [4]. $Z=1-92$ aralığındaki hidrojen benzeri iyonların λ , A ve f değerleri Pal'chikov tarafından sunuldu [5]. $Z=1-118$ olan hidrojen benzeri iyonların $E1$, $M1$, $E2$, $M2$, $E3$, $M3$ için geçiş olasılıkları, yarı ömürleri ve dallanma kesirleri Jitrik ve Bunge tarafından nokta yük Dirac öz fonksiyonları ile değerlendirildi [6].

Walker ve Rugge hidrojen ve helyum benzeri Kükürt'ün temel seri çizgileri güneş spektrumunda incelendi ve dalga boyları sunuldu [7]. Helyum benzeri iyonların 2^3S uyarılmış hallerinin yarı ömürleri relativistik manyetik dipol geçişleri teorisi ile

incelendi [8]. S XV in $1s2p\ ^3P_2$, S XIV ün $1s2s2p\ ^4P_{5/2}$ hallerinin yarı ömürleri Cocke ve grubu tarafından tanımlandı [9]. Helyum benzeri Kükürt'ün $2\ ^3S_1$ halinin yarı ömrünün demet-yaprak ölçümleri Bednar ve grubu tarafından yapıldı [10]. Helyum benzeri atomlara relativistik rasgele faz yaklaşıklığı uygulanarak izinli ve yasaklı geçişler incelendi [11]. Helyum benzeri Kükürt'ün $2\ ^3P_1$ uyarılmış halinin yarı ömür ölçümleri uçuş süresi tekniği ile incelendi [12]. Helyum benzeri Mg, Al, S, Fe, ve Ni'in $m\ ^1S_0 - n\ ^1P_1$ ve $m\ ^3S_1 - n\ ^3P_1$ ($2 \leq m, n \leq 5$) geçişleri için osilatör şiddetleri relativistik rasgele faz yaklaşıklığı ile hesaplandı [13]. S XV i içine alan helyum benzeri beş iyonun $1s3p\ ^3P_1 - 1s^2\ ^3P_1$ geçişi ilk kez lazer üretici plazmada gözlemlendi [14]. Helyum benzeri iyonların $1s2p\ ^3P_1 - 1s^2\ ^1S_0$ ve $1s2p\ ^1P_1 - 1s^2\ ^1S_0$ geçişleri için relativistik Hartree-Fock ve rasgele faz yaklaşıklıkları ile atomik özellikleri incelendi [15]. İki ve üç elektronlu atomlar için oldukça ayrıntılı veri analizi Berry ve çalışma arkadaşları tarafından yapıldı [16]. S XV iyonunun $1s2s\ ^3S-1s2p\ ^3P$ geçişlerinin dalga boyu ölçümleri yapıldı [17,18]. S XV için $2\ ^1P_1, 2\ ^3P_1$ hallerinden temel hale geçişler 4.10^{-5} mertebesinde hassasiyetle ölçüldü [19]. Vainshtein ve Safronova, perturbasyon yöntemi ile helyum ve lityum benzeri iyonların enerji seviyelerini hesapladılar [20]. $Z=16-39$ olan helyum benzeri iyonların rezonans geçişlerinin dalga boyları için düşük indüktanslı vakum kıvılcımı spektrumundan elde edilen sonuçlar MZ programı ile yapılan hesaplama sonuçları ile karşılaştırılarak sunuldu [21]. Helyum benzeri iyonlara relativistik rasgele faz yaklaşıklığı uygulanarak $n=2$ halinden ışımali geçişler incelendi [22]. Johnson ve Sapirstein $Z=10-36$ aralığındaki helyum benzeri atomların $2\ ^3P_0, 2\ ^3P_1, ^3S_1$ hallerini relativistik çok cisim perturbasyon teorisi ile incelediler [23]. Çekirdek yükü $2 \leq Z \leq 92$ olan helyum benzeri iyonların $1s2s\ ^3S_1 - 1s2p\ ^3P_{0,1,2}$ geçişleri için üçlü hal enerjilerinin relativistik kısımları QED ile Berry ve Dunford tarafından karşılaştırıldı [24]. $5 \leq Z \leq 100$ aralığında olan helyum benzeri iyonlar için $n=2$ üçlü hallerinin relativistik konfigürasyon etkileşim hesapları yapılarak diğer çalışmalarla karşılaştırmalı olarak verilmiştir [25]. S XV'i de Helyum benzeri iyonların $n=1, 2$ hallerinin relativistik her mertebeden çok cisim hesapları yapılarak toplam iyonlaşma enerjileri sunuldu [26]. Hidrojen benzeri Fe ve helyum benzeri Fe, Ca ve S Safronova'nın MZ kodlu programı, Cornille'nin AUTLSJ kodlu, Nilsen'in Yoda kodlu programı ile incelenerek sonuçlar karşılaştırmalı olarak verildi [27]. He benzeri üç iyonun ($Si^{14+}, Ca^{18+}, Fe^{24+}$) Dirac atomik R-Matris programı (Norrington P.H., Grant I.P.) elektron

çarpışma uyarılmaları için çarpışma şiddetlerini hesaplamada kullandı [28]. Kingston, Norrington ve Boone Ca XIX ve S XVI için yaptıkları çalışmada GRASP ve CIV3 programını kullanarak elde ettikleri sonuçları karşılaştırmalı olarak sundular [29]. Başka bir çalışmada helyum benzeri benzeri Kükürt'ün vakum mor ötesi $1s2s\ ^3S_1 - 1s2p\ ^3P_{2,0}$ geçişleri ölçüldü [30].

Fawcett, yüksek mertebeden iyonlaşmış yayma çizgilerini sınıflandırdı [31]. Güneş alevleri bölgesinde 171-630 Å aralığında yapılan bir spektral çalışmada S XIV için iki çizgi gözlendi [32]. Indelicato ve Desclaux lityum benzeri iyonların $1s^22s, 1s^22p$ enerji seviyelerini çok konfigürasyonlu Dirac Fock yöntemi ile inceleyerek oldukça doğru bir şekilde hesapladılar [33]. Safronova ve çalışma arkadaşları çekirdek yükü $6 < Z < 42$ aralığında olan lityum benzeri iyonların iç tabaka uyarılmaları için bazı atomik özellikleri hesapladılar [34]. Lityum benzeri iyonlar için osilator şiddeti ve enerji, Hylleraas tipi varyasyonel yöntemi ile hesaplandı [35]. Li ve Be dizilimine sahip iyonların uyarılmış hal enerjileri MZ ve MBPT programları ile hesaplanarak Z ye bağımlılıkları incelendi [36]. Nahar S XIV ü de içine alan on beş lityum benzeri iyonu $0 \leq l \leq 9$ ve $n = 10$ a kadar olmak üzere, BPRM ile ince yapı enerji seviyeleri ve osilator şiddetlerini hesapladı [37]. Lepson ve diğerleri laboratuvarında elde edilen dalga boyu ölçümleri ile HULLAC hesap sonuçlarını karşılaştırdılar [38].

BÖLÜM 2. HARTREE-FOCK VE ÇOK KONFIGÜRASYONLU HARTREE-FOCK YAKLAŞIKLIKLARI

2.1. Çok Elektronlu Atomlar için Relativistik Olmayan Hamiltonyen

Kuantum mekaniğinde N-elektronlu bir sistemin kararlı hali,

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

Schrödinger denklemindeki ψ toplam dalga fonksiyonu ile tanımlanır ve sistemin halini belirleyen bu dalga fonksiyonunun belirli özellikleri vardır.

2.2. Dalga Fonksiyonunun Özellikleri

2.2.1. Normalleşme

$\psi(r;t)$ ile tanımlanan bir parçacığın t anında $dr = dxdydz$ hacminde bulunma olasılığı

$$P(r;t)dr = |\psi(r;t)|^2 dr = \psi(r;t)\psi^*(r;t) \quad (2.2)$$

şeklindeki konum (olasılık) yoğunluğu ile belirlenir. $P(r;t)$ her yerde tek değere sahip olması gerektiğinden ψ de sürekli ve tek değerli olmalıdır. Parçacığın bu dr hacimde herhangi bir yerde bulunma olasılığı 1 dir . Dalga fonksiyonu

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(r;t)|^2 dr = 1 \quad (2.3)$$

şeklinde bire normalleşmiş olur.

2.2.2. Antisimetriklilik

Elektronlar ayırt edilemez parçacıklar oldukları için Hamiltonyen işlemcisi, elektronların koordinat değişimlerinden bağımsız olmalıdır. Bir atomik sistemin doğru tanımı, tamamen antisimetrik olan öz fonksiyonların lineer kombinasyonu ile yapılır. Böyle bir antisimetrik öz fonksiyonun mümkün gösterimi

$$\frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\wp} (-1)^p \wp \psi(q_1, \dots, q_N) \quad (2.4)$$

lineer kombinasyonu ile verilir. \wp iki elektronun koordinatlarını değiştiren işlemci (toplam tüm $N!$ değişimleri üzerindedir) p permütasyonun, değişim işlemcisinin, paritesidir. Buradan

$$\wp_{ij} \psi(q_1, \dots, q_i, \dots, q_j, \dots, q_N) = \psi(q_1, \dots, q_j, \dots, q_i, \dots, q_N) \quad (2.5)$$

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

A antisimetri işlemcisi tanımlanır. Antisimetrik dalga fonksiyonu, konum ve spin olarak özdeş iki elektron durumunda sıfırdır. Uzaysal değişkenlere göre dalga fonksiyonunun sürekliliğinden dolayı, dalga fonksiyonun mutlak değeri, aynı spinli iki elektron birbirlerine yakın olduklarında küçüktür.

2.2.3. Parite

L , M_L , S ve M_s açısal momentum kuantum sayılarına ek olarak, Hamiltonyen işlemcisinin öz fonksiyonları bunların pariteleri ile gösterilir:

$$\Pi \psi(q_1, \dots, q_N) = (-1)^k \psi(q_1, \dots, q_N). \quad (2.7)$$

Parite işlemcisinin tanımından $\Pi^2 = 1$ ve özdeğerinin ± 1 olduğu açıktır. Parite işlemcisi, Hamiltonyen ve açısal momentum işlemcisi ile sıra değiştirir ve bundan dolayı atomik öz fonksiyonlar Π nin özfonksiyonları olarak da alınabilir. Parite işlemcisinin $+1$ ve -1 özdeğerlerine ait özfonksiyonları sırasıyla çift ve tek olarak adlandırılır.

2.2.4. Açısal Özellikler

Relativistik olmayan Hamiltonyen, toplam yörünge açısal momentum operatörü

$$L = \sum_{i=1}^N l_i \text{ ve toplam spin açısal momentum işlemcisi } S = \sum_{i=1}^N s_i \text{ ile sıra değiştirir:}$$

$$[H, L] = [H, S] = 0. \quad (2.8)$$

Buna göre H , L , L_z , S ve S_z aralarında sıra değiştiren operatörler takımı olur. Bu ise bahsi geçen işlemcilerin eş zamanlı olarak ortaya çıktığını gösterir:

$$H\psi(q_1, \dots, q_N) = E\psi(q_1, \dots, q_N) \quad (2.9)$$

$$L^2\psi(q_1, \dots, q_N) = L(L+1)\psi(q_1, \dots, q_N) \quad (2.10)$$

$$L_z\psi(q_1, \dots, q_N) = M_L\psi(q_1, \dots, q_N) \quad (2.11)$$

$$S^2\psi(q_1, \dots, q_N) = S(S+1)\psi(q_1, \dots, q_N) \quad (2.12)$$

$$S_z\psi(q_1, \dots, q_N) = M_s\psi(q_1, \dots, q_N). \quad (2.13)$$

Bu işlemcilerin eş zamanlı özfonksiyonları, $\psi(\gamma L M_L S M_S; q_1, \dots, q_N)$ olarak gösterilebilir. γ , hali tam olarak belirlemek için gerekli ek kuantum sayılarıdır.

2.3. Çok Elektronlu Sistemler

Dalga denklemi bir özdeğer problemidir ve çözümleri yalnızca belirli E değerleri için mevcuttur. Bu değerler işlemcinin özdeğerleridir ve sistemin toplam enerjisinin mümkün değerini gösterirler. H atomik sistemin Hamiltonyeni veya Hamiltonyen işlemcisidir. Hamiltonyenin tam şekli sistemin özelliklerine bağlıdır.

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

2.3.1. Merkezi alan yaklaşıklığı

Merkezi alan yaklaşıklığı elektronların çekirdek ve diğer tüm elektronların oluşturdukları etkin, küresel simetrik $V(r)$ potansiyelinde hareket ettikleri düşüncesine dayanır.

N -elektronlu, Z atom numaralı bir atomik sistem incelenirken hesaba katılması gereken nicelikler şunlardır:

- i) Sonsuz kütleli, noktasal bir yük olarak kabul edilen çekirdeğin elektrostatik Coulomb etkileşme alanında elektronun kinetik ve potansiyel enerjileri.
- ii) Elektronlar arasındaki elektrostatik Coulomb itme etkileşimi.
- iii) Elektronların spinlerinin yörüngesel hareketleri ile olan manyetik etkileşimleri (spin-yörünge).

iv) Elektronlar arasındaki spin-spin etkileşimleri gibi birkaç küçük etki, çeşitli görelilik etkileri, ışınlı düzeltmeler ve çekirdek düzeltmeleri (çekirdeğin sonlu kütlesi, sonlu boyutu, çekirdek manyetik momenti nedeni ile olan düzeltmeler).

Çok elektronlu bir atomun bu kadar ayrıntılı incelenmesi çok zor olduğu için dördüncü maddedeki tüm küçük etkiler ihmal edilir, spin-yörünge etkileşimleri ise bir düzeltme gibi incelenir. Bu kabullenimler ışığı altında, dış alan yokken N elektronlu bir atomun Hamiltonyeni atomik birimlerde

$$H = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} \right) + \sum_{i>j}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (2.14)$$

dir. Buradaki ilk terim kinetik enerjiyi, ikinci terim potansiyel enerjiyi, üçüncü terim elektronlar arası Coulomb itmesini, r_i i . elektronun bağıl koordinatını, r_{ij} i ve j elektronları arasındaki uzaklığı gösterir.

Denklem (2.14) ile verilen yaklaşık Hamiltonyen L^2 , L_z , S^2 ve S_z toplam açısal momentum işlemcileri ile sıra değiştirir. Bu nedenle Hamiltonyenin özfonksiyonları, bu işlemcilerin de özfonksiyonları olarak seçilebilir.

Bir elektronun etkin potansiyel enerjisine iyi bir yaklaşıklık

$$V(r) = -\frac{Z}{r} + S(r) \quad (2.15)$$

küresel simetrik potansiyel ile sağlanır. Atom veya iyonların yapısı ile ilgili çok önemli özelliklerin incelenmesi için $V(r)$ merkezi potansiyelin ayrıntılı bilinmesine gerek yoktur ($r \rightarrow 0$, $r \rightarrow \infty$ durumlarını incelemek yeterlidir).

(2.14) Hamiltonyeni pertürbe olmamış ve pertürbe kısım olmak üzere iki kısma ayrılarak yeniden yazılabilir:

$$H = H_c + H_1 \quad (2.16)$$

$$H_c = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{2} \nabla_{r_i}^2 + V(r_i) \right) = \sum_{i=1}^N h_i \quad (2.17)$$

$$h_i = -\frac{1}{2} \nabla_{r_i}^2 + V(r_i) \quad (2.18)$$

$$H_1 = \sum_{i < j}^N \frac{1}{r_{ij}} - \sum \left(\frac{Z}{r_i} + V(r_i) \right) = \sum_{i < j}^N \frac{1}{r_{ij}} - \sum_i S(r) \quad (2.19)$$

Hamiltonyen terimlere ayrılabilirdiği için özdeğer ve özfonksiyonlar

$$E = \sum_i^N E_i, \quad (2.20)$$

$$\psi(q_1, \dots, q_N) = \prod_i^N \phi(\alpha_i; q_i) \quad (2.21)$$

şeklinde yazılabilirler. ϕ ile temsil edilen bireysel spin orbitalleri, bir-elektron denklemlerinin çözümleridir:

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + U(r) \right] \phi(\alpha, q) = E \phi(\alpha, q). \quad (2.22)$$

Burada $U(r)$ potansiyeli

$$U(r) = -\frac{Z}{r} + V(r) \quad (2.23)$$

şeklinde tanımlanır. Bu potansiyel n ve l nin her ikisine de bağlıdır.

Hamiltonyen elektron koordinatlarının yer değişiminden bağımsız olduğu için (2.4) koordinat değişimi ile bir özfonksiyon elde edilir. Özfonksiyonlar birleştirilerek antisimetrik bir fonksiyon oluşturulur:

$$\Phi(q_1, \dots, q_N) = A \prod_i^N \Phi(\alpha_i, q_i). \quad (2.24)$$

Bu fonksiyon

$$\Phi(q_1, \dots, q_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} q_{(\alpha_1, q_1)} & \dots & q_{(\alpha_1, q_N)} \\ q_{(\alpha_2, q_1)} & \dots & q_{(\alpha_2, q_N)} \\ \dots & \dots & \dots \\ q_{(\alpha_N, q_1)} & \dots & q_{(\alpha_N, q_N)} \end{vmatrix} \quad (2.25)$$

ile verilen bir Slater determinantıdır. Bu gösterimden dalga fonksiyonunun, antisimetrik olduğu ve Pauli dışarlama ilkesini sağladığı rahatlıkla görülebilir. Slater determinantı ile ifade edilen dalga fonksiyonu, iki elektronun yerleri değiştirildiğinde (determinantta iki satırın yer değiştirmesine karşılık gelir) determinantın işareti değişeceğinden, dalga fonksiyonu antisimetriktir. İki elektronun $\alpha = n, l, m_l, m_s$ sinin özdeş olması durumunda (iki satırın aynı olması) determinantın değeri sıfır olacağından dalga fonksiyonu Pauli dışarlama ilkesini sağlar.

Buradaki her bir yörüngemsinin (spin-orbital) paritesi $(-1)^l$, Slater determinantının paritesi ise

$$\pi = (-1)^{l_1} (-1)^{l_2} \dots (-1)^{l_n} = (-1)^{\sum l_i} \quad (2.26)$$

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

2.3.2. Varyasyon yöntemi

Sınırlı hal sistemleri için toplam dalga fonksiyonu ψ , $\langle \psi | \psi \rangle$ olarak sınırlandırılmış olarak N elektron fonksiyonudur. (2.1) denkleminde

$$\langle \psi | H - E | \psi \rangle = 0 \quad (2.27)$$

$$E = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (2.28)$$

elde edilir. Sınır şartlarında ψ deki $\delta\psi$ değişimine göre tam çözümü ele alındığında $\delta\psi$ de birinci merteye düzeltme

$$\begin{aligned} \delta \langle \psi | H - E | \psi \rangle &= \langle \delta\psi | H - E | \psi \rangle + \langle \psi | H - E | \delta\psi \rangle \\ &= 2 \langle \psi | H - E | \delta\psi \rangle \end{aligned} \quad (2.29)$$

dir. Çünkü H sınır hal fonksiyonu için hermityendir, fakat tam fonksiyon denklem (2.1) i sağlar:

$$\langle \delta\psi | H - E | \psi \rangle = 0. \quad (2.30)$$

$\langle \psi + \delta\psi | \psi + \delta\psi \rangle$ gibi tüm varyasyonlar $\delta\psi$ ile sınırlı olur.

Ψ ile verilen fonksiyonel yaklaşık çözüm ise aynı fonksiyonel şekle sahip $\Psi + \delta\Psi$ gibi bir Ψ keyfi varyasyon ele alındığında

$$\langle \Psi | H - E | \Psi \rangle = 0 \quad (2.31)$$

ve

$$\langle \delta\Psi | H - E | \Psi \rangle = 0 \quad (2.32)$$

ile en iyi yaklaşıklık elde edilir:

$$(H - E)\Psi = R. \quad (2.33)$$

R Schrödinger denkleminde kalan veya hata olur. (2.28) ve (2.29) denklemleri kalanın Ψ ve $\delta\Psi$ tüm izinli varyasyonlarının ikisinin de ortogonal olmasını gerektirir. (2.28) ve (2.29) denklemlerinin çözümleri birinci mertebede kararlı enerji fonksiyonelinin kalan fonksiyonlarıdır:

$$E(\Psi) = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}. \quad (2.34)$$

Bu enerji fonksiyonelinin kararlılık özelliği kullanılarak Hartree-Fock denklemleri elde edilebilir.

2.4. Hartree-Fock Yöntemi

Çok elektronlu sistemlerde Schrödinger denkleminin çözümü, potansiyel enerji terimi nedeni ile zordur. Merkezi alan yaklaşıklığına göre her elektron aynı ($Z/r + V(r)$) potansiyelinde hareket ettiği için $V(r)$ nin seçimi önemlidir. Hartree her elektron çekirdeğin çekici alanı ve diğer elektronların itme etkileşimlerinin oluşturduğu, bir etkin potansiyelde hareket eder düşüncesi ile yola çıkarak Hartree denklemlerini türetmiştir. Hartree bu denklemlerin çözümü için öz uyumlu alan denilen tekrarlamalı bir yöntem önermiştir.

Hartree dalga denklemi, radyal fonksiyonların çarpımı olan küresel simetrik bir dalga fonksiyonunu verir. Fock bu denklemlerin Pauli dışarlama ilkesini sağlamadığına dikkat çekmiştir.

Hartree-Fock potansiyeli ve Hartree-Fock denklemi şu şekilde ifade edilir:

$$V(q_i) = -\frac{Z}{r} + \sum_{\mu} V_{\mu}^d(r_i) - V_{\mu}^d(q_i) \quad (2.35)$$

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla_r^2 + V(q_i) \right] U_{\lambda}(q_i) = E U_{\lambda}. \quad (2.36)$$

V^d her kabuktan gelen simetrik katkıların toplamıdır ve küresel simetriktir.

$$\begin{aligned}
 V^d(r_i) &= \sum_{\mu} V_{\mu}^d(r_i) \\
 &= \int u_{\mu}^*(q_j) \frac{1}{r_{ij}} u_{\mu}(q_j) dq_j \\
 &= \int u_{\mu}^*(r_j) \frac{1}{r_{ij}} u_{\mu}(r_j) dr_j
 \end{aligned} \tag{2.37}$$

$$V^{dt}(q_i) = \sum_{\mu} V_{\mu}^{dt}(q_i) \tag{2.38}$$

V^{dt} ise Fock'un Hartree denklemlerine katkı olarak geliştirdiği değiş-tokuş potansiyelidir. Değiş-tokuş işlemcisi sadece uzay koordinatlarına etkir ve keyfi $f(q_j)$ fonksiyonuna etkisi

$$V_{\mu}^{dt}(q_i) f(q_i) = \left[\int u_{\mu}^*(r_j) \frac{1}{r_{ij}} f(q_j) dq_j \right] u_{\mu}(r_j) \tag{2.39}$$

şeklinde ifade edilir.

Hartree-Fock denklemlerinin en göze çarpan özelliği u_{μ} spin yörüngemsilerinin her birinin ayrı ayrı Schrödinger denklemini görünümünde olmalarıdır. Bununla birlikte bunlar gerçek özdeğer denklemleri değildir, çünkü V potansiyeli Hartree-Fock V^d ve V^{dt} işlemcileri yoluyla spin yörüngemsilerine bağlıdır. Hartree-Fock integral-diferansiyel denklemler sistemi yaklaşık bireysel spin yörüngemsileri olan $u_{\alpha}^1, u_{\beta}^1, \dots, u_{\nu}^1$ den başlayarak tekrarlama ile çözülür. Önce bunlara karşılık gelen Hartree-Fock potansiyelinin yaklaşık ifadesi $V^{(1)}$ hesaplanır. Sonra Hartree-Fock denklemleri yeni $u_{\alpha}^2, u_{\beta}^2, \dots, u_{\nu}^2$ spin yörüngemsilerini elde etmek için bu $V^{(1)}$ potansiyeli ile çözülür. Bunlar da yeni $V^{(2)}$ potansiyelini verir. Spin yörüngemsileri bundan önceki döngüde elde edilen $V^{(n-1)}$ potansiyeli ile özdeş olan $V^{(n)}$ potansiyelini (belli bir yaklaşıklıkla) verinceye kadar tekrarlanır. Bu yolla bulunan Hartree-Fock potansiyeli atomun (veya iyonun) öz uyumlu alanı olarak bilinir.

2.5. Çok Konfigürasyonlu Hartree-Fock Yaklaşığı (Multiconfiguration Hartree-Fock Approximation–MCHF)

Çok elektronlu sistemlerde varyasyonel dalga fonksiyonu $\Psi = \Phi(\gamma LS)$ konfigürasyonu olarak seçilir. Buradaki radyal dalga fonksiyonları belli değildir ve varyasyonlardaki kararlılık şartı Hartree-Fock denklemlerine götürür. Varyasyonlar yerine

$$\Psi(\gamma LS) = \sum_i^N c_i \Phi_i(\gamma_i LS) \quad (2.40)$$

çok konfigürasyonlu açılım seçilirse, radyal fonksiyonlardaki varyasyona göre kararlılık şartı Hartree-Fock yöntemlerine benzer diferansiyel denklemler takımına götürür. Diferansiyel denklemler, karışım (açılım) katsayılarının değişiminden ortaya çıkan matris özdeğer denkleminde eşlenir ve bu iki yöntem eş zamanlı olarak çözülür. Bu varyasyonel fonksiyonu temel alan yöntem, çok konfigürasyonlu Hartree-Fock yöntemi olarak bilinir.

2.5.1. Korelasyon enerjisi

Hartree-Fock yöntemi Schrödinger denkleminin tam çözümü için bir yaklaşıktır ve bu yaklaşıklık uygulanırken elektronların diğer elektronlar tarafından belirlenen bir alanda hareket ettikleri kabul edildiği için enerjide bir fark oluşur:

$$E^{Kor} = E^{Tam} - E^{HF} . \quad (2.41)$$

Hamiltonyenin tam enerjisi E^{Tam} ile Hartree-Fock enerjisi E^{HF} arasındaki bu enerjiye ‘Korelasyon enerjisi’ denir.

Farklı korelasyon tiplerini sınıflandırmak için birinci mertebeye korelasyon yapısına ve düzeltmeyi göstermek için kullanılan konfigürasyon hal fonksiyonlarına (Configuration State Function–CSF) bakılmalıdır.

Kompleks, aynı parite ve baş kuantum sayılı CSF lerin bir setidir. Z ye bağlı pertorbasyon teorisine göre kompleks, atomdaki baskın korelasyon etkilerini tanımlayan sıfıncı mertebeye dalga fonksiyonunun bir parçası olmalıdır. Bu teori büyük Z ler için geçerlidir ve düşük iyonizasyonlar veya nötral atomlar için kullanışlı olmayabilir. Bu durumda kompleksin önemli katkı sağlamayan üyelerini sıfıncı mertebeye dalga fonksiyonunun bir parçası gibi düşünmek gerekli değildir.

Bir çok sistemde önemli korelasyon etkileri kompleks içindeki ve dışındaki CSF ler ile tanımlanır. Sıfıncı mertebeye dalga fonksiyonunda alınan CSF leri bulmak için, deneyimler ile bulunmuş belirli orbital yer değiştirmelerine bakılabilir. Bu yer değiştirmelerden bazıları $s \leftrightarrow d$, $s^2 \leftrightarrow d^2$, $p^2 \leftrightarrow sd$, $d^2 \leftrightarrow pf$ yer değiştirmeleridir.

Sıfıncı mertebeye dalga fonksiyonu baskın CSF leri içermelidir. Bazı amaçlar için sıfıncı mertebeye dalga fonksiyonu yeterli olmasına karşın birçok durumda yüksek mertebeden düzeltmeler önemlidir. Sıfıncı mertebeye dalga fonksiyonu, sıfıncı mertebeye dalga fonksiyonlarındaki tüm CSF lerden orbital yer değiştirmeleri ile üretilen CSF leri içerecek hale getirilirse bir iyileştirme elde edilir.

Korelasyon etkilerini pertorbasyon yöntemi ile incelemek oldukça uygundur. Hamiltonyen üzerinde $\rho = Zr$ (uzunluk biriminde) değişken dönüşümü yapıldığında yeni Hamiltonyen

$$H = Z^2(H_0 + Z^{-1}V) \quad (2.42)$$

şeklini alır. H_0 ve V ise aşağıdaki gibidir:

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

$$V = \sum_{i>j}^N \frac{1}{\rho_{ij}} \quad (2.44)$$

$$\psi = \psi_0 + Z^{-1}\psi_1 + Z^{-2}\psi_2 + \dots \quad (2.45)$$

Dalga fonksiyonunun (2.25) denklemindeki gibi olduğu kabul edilirse enerjiyi

$$E = Z^2 (E_0 + Z^{-1} E_1 + Z^{-2} E_2 + \dots) \quad (2.46)$$

şeklinde yazmak mümkündür. (2.25) ve (2.26) açılımları Schrödinger denklemlerinde kullanıldığında

$$(H_0 - E_0)\psi_0 = 0 \quad (2.47)$$

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

$$(H_0 - E_0)\psi_2 = (E_1 - V)\psi_1 + E_2\psi_0 \quad (2.49)$$

elde edilir. (2.47) denklemi hidrojen tipi yörüngesiler üretir. $|(nl)\nu LS\rangle$ konfigürasyon hal fonksiyonu ise Schrödinger denklemi ve enerji ifadesi

$$H_0 |(nl)\nu LS\rangle = E_0 |(nl)\nu LS\rangle \quad (2.50)$$

$$E_0 = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \frac{1}{n_i^2} \quad (2.51)$$

dir. Buradan E_0 in yalnızca n baş kuantum sayısına bağlı olduğu görülür.

Dejenere haller için pertürbasyon teorisine göre ψ_0 , dejenere konfigürasyon hal fonksiyonlarının lineer birleşimidir. Bu lineer birleşim yalnızca aynı pariteli fonksiyonlar birbirine etki ettiği için, aynı pariteli ve aynı baş kuantum sayılı konfigürasyon hal fonksiyonları üzerindedir:

$$\psi_0 = \sum c_{(l')\nu'} |(nl')\nu' LS\rangle. \quad (2.52)$$

Birinci merteye ψ_1 düzeltmesi, denklem (2.28) in ψ_0 a ortogonal (dik) bir çözümdür. Bu H_0 a ait normalleştirilmiş ara konfigürasyon hal fonksiyonlarının $|\gamma_\nu LS\rangle$ lineer konfigürasyonuna genişletilebilir:

$$\psi_1 = \sum_{\nu} \frac{|\gamma_\nu LS\rangle \langle \gamma LS | V | \psi_0 \rangle}{E_0 - E_{\gamma_\nu LS}} \quad (2.53)$$

$$E_{\gamma_\nu LS} = \langle \gamma_\nu LS | H_0 | \gamma_\nu LS \rangle \quad (2.54)$$

$$E_{\gamma_\nu LS} = E_0 \quad (2.55)$$

$$E_2 = \langle \psi_0 | V | \psi_1 \rangle = \sum_{\nu} \frac{\langle \gamma LS | V | \psi_0 \rangle^2}{E_0 - E_{\gamma_\nu LS}}. \quad (2.56)$$

Birinci merteye düzeltme aynı zamanda üçüncü merteye enerji düzeltmesini de temsil eder:

$$E_3 = \langle \psi_1 | V - E | \psi_1 \rangle. \quad (2.57)$$

ψ_1 in oldukça önemli olduğu açıkça görülmektedir. Aynı elektronik dizilişle deneysel terim enerjisinin analizi, üçten daha büyük iyonlaşma derecesi için, üçüncü merteye enerjisi $Z^1 E_3$ relativistik etkilerinden daha küçüktür.

Çok elektronlu sistemlerin tanımlanması için genelde ψ_0 yeterli olurken bir çok atomik özellik için birinci merteye de önemli olmaktadır.

(2.31) denklemi (2.32) denkleminde kullanıldığında

$$\psi_1 = \sum_{(l')\nu'} c_{(l')\nu'} \sum_{\nu} \frac{|\gamma_\nu LS\rangle \langle \gamma LS | V | (nl')\nu' LS \rangle}{E_0 - E_{\gamma_\nu LS}} \quad (2.58)$$

elde edilir. Buradan c karışım katsayılarının, ara konfigürasyon hal fonksiyonlarının etkileşmesinin toplamında önemli bir faktör olduğu açıkça görülür. Bu nedenle genelde birinci merteye düzeltme, birinci merteye düzeltmelerin lineer bir kombinasyonu olarak göz önünde tutulabilir.

$\psi_0 = |\gamma LS\rangle$ ($\gamma LS = (nl)vLS$) durumunda konfigürasyon hallerinin γLS ile etkileşimi bir elektronla üç çeşittir:

i) Konfigürasyon hal fonksiyonu $\gamma L'S'$ den farklı baş kuantum sayısına, aynı spin ve yörünge açısız çiftlenimine sahipse, bu konfigürasyon hal fonksiyonları radyal korelasyonun bir parçasıdır.

ii) CSF nin spin çiftlenimi γLS den farklı ise bu konfigürasyonlar spin kutuplanmasının bir parçasıdır.

iii) CSF nin yörünge açısız çiftlenimi γLS den farklı ise bu konfigürasyonlar yörünge kutuplanmasının gösterirler.

$\{a, b, \dots\}$, $(nl)vLS$ dolu yörüngeler ve $\{v, v', \dots\}$ dolu olmayan yörüngelerdir. Çift yer değiştirme $ab \rightarrow vv'$, açılımında bir CSF üretilebilir ve farklı korelasyon etkilerine göre sınıflandırılabilir:

i) ab değerlik elektronlarının yörüngeleri ise valans (değerlik) korelasyonu; farklı seviyeler arasındaki enerji ayrılıkları açıklamaya çalışıldığında ilk yaklaşıklık da aktif olmayan kapalı tabakalar tanımlanır ve yalnızca dıştaki değerlik elektronları arasındaki korelasyon göz önüne alınır. Bu korelasyona valans korelasyonu denir

ii) a öze ait yörünge, b değerlik yörüngesi ise öz-valans (değerlik) korelasyonu; MCHF yönteminde kutuplanma etkisi dış değerlik elektronları arasındaki korelasyon ve öz veya öz-valans (CV) olarak tanımlanır.

iii) ab özün yörüngeleri, ise öz-öz korelasyonu (CC) olarak adlandırılır.

2.5.2. Çok konfigürasyonlu Hartree-Fock yöntemi

Çok konfigürasyonlu Hartree-Fock yönteminde dalga fonksiyonu ortonormal hal fonksiyonlarının lineer kombinasyonudur:

$$\psi(\gamma LS) = \sum_{i=1}^M c_i \phi(\gamma_i LS); \quad \sum_{i=1}^M c_i^2 = 1. \quad (2.59-60)$$

Enerji ise

$$\begin{aligned} \varepsilon(\gamma LS) &= \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M c_i c_j \langle \phi(\gamma_i LS) | H | \phi(\gamma_j LS) \rangle \\ &= \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M c_i c_j H_{ij} \\ &= \sum_{i=1}^M c_i^2 H_{ii} + 2 \sum_{i>j}^M c_i c_j H_{ij}, \end{aligned} \quad (2.62)$$

şeklindedir. H_{ij} Hamiltonyen matrisi, $c = (c_1, c_2, \dots, c_m)^t$ karışım katsayılarının oluşturduğu bir sütun vektörüdür. Bu durumda enerji

$$E = c^t H c \quad (2.63)$$

şeklinde yazılabilir. Etkileşme matris elemanları radyal fonksiyonlara ($P, [P(a, b), P(b, r), \dots]$ sütun matris) bağlı olduğu için enerji fonksiyoneli hem P ye hem de c ye bağlı olur. MCHF denklemlerinin türetilmesinde, enerji daha da indirgenmiş olur ve radyal fonksiyonlar c cinsinden ifade edilir.

Hamiltonyen matris elemanları açıl momentum teorisinden elde edilirler:

$$H_{ij} = \sum_{ab} \omega_{ab}^{ij} I(a, b) + \sum_{abcd; k} v_{abcd; k}^{ij} R^k(ab, cd) \quad (2.64)$$

Bu durumda enerji;

$$\varepsilon(\gamma LS) = \sum_{ab} \omega_{ab} I(a, b) + \sum_{abcd; k} v_{abcd; k} R^k(ab, cd) \quad (2.65)$$

olur. ab ve $abcd$ üzerinden toplam, her bir konfigürasyon halinde bulunan yörüngeler üzerindedir. Burada

$$\omega_{ab} = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^M c_i c_j \omega_{ab}^{ij} \quad v_{abcd; k} = \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M c_i c_j v_{ab}^{ij} \quad (2.66-67)$$

dır. $I(a, b)$, $R^k(abcd; k)$ integrallerinin simetri özelliği kullanılarak toplam en aza indirilebilir, $I(a, b)$ için $a \leq b$, $a \leq c$ ve $b \leq d$ olduğu varsayılır.

Hartree-Fock denklemlerinin türetilmesi için, kararlılık şartı Lagrange çarpanlarını içeren bir fonksiyona uygulanmalıdır:

$$F(P, c) = \varepsilon(\gamma LS) + \sum_{a \leq b} \delta_{i, b} \lambda_{ab} \langle a | b \rangle - E \sum_{i=1}^M c_i^2. \quad (2.68)$$

c_i deki varyasyonlara göre kararlılık şartının türetilmesinde, $\varepsilon(\gamma LS)$ için en uygun şekil (2.62) denklemdir. Bu denklem köklü bir denkleme öncülük eder:

$$Hc = Ec. \quad (2.69)$$

Buradaki λ_{ab} Lagrange çarpanı, E sistemin toplam enerjisidir. $P(a; r)$ radyal fonksiyonlardaki değişmelere göre bir kararlılık şartı gereği her bir radyal fonksiyon, bir denklem sistemine öncülük eder. P , (2.8) kararlılık şartı için değiştirilecek radyal fonksiyon olursa,

$$i) \omega_{aa} I(a, a) \text{ nın değişimi,} \quad -\omega_{aa} \int_0^{\infty} \delta P(a, r) H \delta P(a, r) dr,$$

$$\text{ii) } \sum_{b, k} v_{abab; k} R^k (ab, ab) \text{ nin de\u0131i\u015fimi, } 2\omega_{aa} \int_0^a \delta P(a, r) \frac{1}{r} Y(a, r) P(a, r) dr$$

iii) Di\u011fer integrallerin de\u011fi\u015fimi

$$2\omega_{aa} \int_0^a \delta P(a, r) \frac{1}{r} \times dr$$

dir. Bazı katkılar $I(a, b)$ kö\u015fe\u011fen olmayan integrallerinden meydana gelir. Bu integrallere Slater integralleri denir. Ortonormal sınırlamalar ile beraber bu varyasyonların toplamı

$$2\omega_{aa} \int_0^{\infty} \delta P(a, r) \theta(r) dr = 0$$

\u015feklinde\u0131r. $\delta P(a, r)$ t\u00fcm k\u00fc\u00e7\u00fck de\u011fi\u015fimler i\u00e7in bu de\u011fi\u015fim $\theta(r) = 0$ \u015artını ve

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

e\u015itli\u011fini gerektirir. Burada a , y\u00f6r\u00fcngemsi kuantum sayıları, ε_{nl} ise

$$\varepsilon_{nl; nl} = \frac{2\lambda_{nl, nl}}{\omega_{nl, nl}}; \quad \varepsilon_{nl; n'l} = \frac{2\lambda_{nl, n'l}}{\omega_{nl, n'l}}$$

dir. Bu tanımlamalardan kö\u015fe\u011fen ve kö\u015fe\u011fen olmayan enerji parametreleri matrisinin simetrik olmadı\u011fı g\u00f6r\u00fcl\u00fcr. Buna ra\u011fmen

$$\omega_{nl, n'l} \varepsilon_{nl, n'l} = \omega_{n'l, n'l} \varepsilon_{n'l, nl}$$

dir.

i) Doluluk sayılarını $\omega_{nl,n'l'}$ tam sayı kabul edilirler, bunlar aslında beklenen doluluk sayıdır.

ii) $X(nl;r)$ fonksiyonu, bir konfigürasyon halindeki elektronların yer değişiminin yanı sıra konfigürasyonlar arasındaki etkileşimden meydana gelir.

2.5.3. Ortonormal olmayan açılım

Bir yörünge nl kuantum sayıları ile temsil edilirken, eklenecek üçüncü bir karakter, takım göstergesi olarak kullanılabilir. Aynı takım göstergeli yörüngeler ortogonal, farklı olanlar ortogonal değildir. Bir takım göstergesi olmayan yörüngeler tüm takımların üyeleridir.

Matris elemanlarının gösterimi, yörüngeler ortogonal olmadığına karmaşıktır. Enerji ifadesinin basit durumunu korumak ve genelleştirilmiş öz değer probleminden kaçınmak için bazı sınırlamalar getirilmelidir:

i) Her konfigürasyon hal fonksiyonundaki bütün yörüngeler birbiri ile ortogondur.

ii) Etkileşmeye doğrudan katılmayan elektronları içeren $\phi(\gamma_i LS)$ de en çok iki alt kabuk vardır. Bu elektronların yörüngeleri tüm $i, j \leq m$ için $\phi(\gamma_i LS)$ yörüngeleri için ortogonal değildir.

iii) Ortogonal olmayan yörüngelerdeki etkileşmeye katılmayan tüm elektronlar aynı l ye sahiptirler, her $\phi_{\gamma_i LS}$, $\phi_{\gamma_j LS}$ de bu elektronlardan en fazla iki tane bulundurlar.

$$\text{iv) } \langle \phi_{\gamma_i LS} | \phi_{\gamma_j LS} \rangle = \delta_{ij}$$

Radyal integraller (a_1, a_2, b_1, b_2 dolu yörüngeler olmak üzere) $\langle a_1 | a_2 \rangle^{p_1}$, O^1 ve $\langle a_1 | a_2 \rangle^{p_1} \langle b_1 | b_2 \rangle^{p_2}$, O^2 üst üste binme yörüngeleri ile yapılabilir. Enerji ifadesindeki

integraller ile radyal denklemin türetilmesi daha karmaşıktır; fakat teorinin temeli Hartree-Fock yöntemi ile aynıdır.

2.5.4. Köşegen enerji parametresi

Çok konfigürasyonlu Hartree-Fock yönteminde de Hartree-Fock yönteminde olduğu gibi bir konfigürasyonda tekli dolu bir yörünge köşegen enerjisi, bağlanma enerjisi ile ilişkilidir. Birçok konfigürasyonda bir yörünge görünür ve köşegen olmayan enerji parametresi çok uzun olmayan anlamlı bir parametredir. Tüm konfigürasyonlar tekli dolu ise bağlanma enerjisi çok konfigürasyonlu Hartree-Fock yaklaşıklığı ile verilen karışım katsayıları ile karşılıklı ilişkisi olan öze kısmen bağlıdır. Aksi takdirde yörünge korelasyon yörüngesi olduğu söylenir.

2.5.5. Kararlılık şartı

Ortonormal radyal baz alındığında enerji, bu bazlara göre yapılan hesap kararlı olmalıdır. Böyle bir hesaplama daima değişmez olduğu tekli konfigürasyon halinde görünür. Bu durumda atomun veya iyonun enerjisini en aza indirmek için Koopman teoremi kullanılır. Bu çözüm, bir sıfır köşegen olmayan enerji parametresine sahip olmakla karakterize edilir. Bir aktif uzayda, dalga fonksiyonu açılımı aynı simetrik yörüngeler var olduğunda, tam aktif uzay içerisinde bir dönüşüme karşılık radyal bazın bir dönmesi ve karışım katsayılarının değişecek olmasına rağmen, dalga fonksiyonu ve enerjisi değişmez. Böylece çok konfigürasyonlu Hartree-Fock dalga fonksiyonu tek değildir. Serbestlik derecesi, karışım katsayılarının sıfır olması şeklinde bir çözüm seçmekle kaldırılabilir. Genelleştirilmiş Brillouin Teoremi (GBT) ile bir pertürbasyon etkisinin enerji açılımındaki tüm mertebeler için sıfır olduğu gösterilebilir. Tek çözüm elde etmek için, çok konfigürasyonlu Hartree-Fock problemine ait bir konfigürasyon hal fonksiyonunu seçme tekniği ve Brillouin teoremine güvenmek olarak adlandırılır. Çok konfigürasyonlu Hartree-Fock programı, çift yörüngelerin bir dönmesine göre kararlı bir enerjiyi tayin ettiğinde, Hartree-Fock durumunda olduğu gibi ilgili Lagrange çarpanları sıfıra eşit olacaktır.

2.5.6. Genelleştirilmiş Brillouin Teoremi (GBT)

MCHF dalga fonksiyonu $P(nl;r) \rightarrow P(nl;r) + \epsilon P(n'l;r)$ radyal fonksiyonların pertürbasyonuna göre kararlıdır. Bu dalga fonksiyonu Ψ nin ilgili perturbasyonu (birinci mertebe için) $F(nl \rightarrow n'l)$ ile orantılı bir fonksiyon ise, kararlılık prensibine göre

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

olur. Eğer $F(nl \rightarrow n'l)$ geçişi bir CSF için olursa, bu CSF en azından birinci mertebe MCHF yaklaşıklığında olmalıdır. Genelleştirilmiş Brillouin teoremi tüm mertebeler için sağlandığında, katkı tüm dereceler için alınır ve dalga fonksiyonu değişmez.

BÖLÜM 3. RELATİVİSTİK DÜZELTMELER

3.1. Relativistik Etkiler

Ağır iyonlarda ve yüksek iyonlaşmış sistemlerde relativistik etkinin önemi büyüktür; hatta hafif atom veya iyonlar için yapılan hesaplamalarda da deney sonuçları ile iyi uyuşan detaylı bir teori için relativistik etkiler hesaba katılmalıdır. Bunun için Dirac denklemini çok elektronlu bir sistem için çözmek yerine Schrödinger denklemini için en düşük mertebeden relativistik katkıları almak yeterlidir. Bu düzeltmeler α ($\alpha = 1/c$, α ince yapı sabiti ve c ışık hızıdır.) kuvvetlerinde bir açılımla relativistik çok elektronlu denklemlerden türetilir.

3.2. Breit-Pauli Hamiltonyeni ve Dalga Fonksiyonu

α^2 mertebesinde bir düzeltme için ortaya çıkan Hamiltonyen Breit-Pauli Hamiltonyenidir. Bu Hamiltonyen relativistik olmayan Hamiltonyen için birinci mertebe düzeltmedir. Ancak yüksek mertebe pertürbasyon teorisinde yanlış sonuç verebilir. Breit-Pauli Hamiltonyeni

$$H_{BP} = H_{NR} + H_{RS} + H_{FS} \quad (3.1)$$

şeklinde yazılır. Burada, H_{NR} relativistik olmayan (Non-Relativistic) hamiltonyen, H_{RS} relativistik kayma (Relativistic Shift), H_{FS} ince yapı (Fine Structure) işlemcisidir. H_{RS} , L ve S ile sıra değiştirir. H_{MC} kütle düzeltmesi (Mass Correction), H_{D1} ve H_{D2} sırası ile bir ve iki cisim Darwin terimleri, H_{OO} yörünge-yörünge (Orbit-Orbit) terimi, H_{SSC} spin-spin (Spin-Spin Contact) terimi olmak üzere H_{RS} açık olarak,

$$H_{RS} = H_{MC} + H_{D1} + H_{D2} + H_{OO} + H_{SSC} \quad (3.2)$$

şeklinde ifade edilir. Burada,

$$H_{MC} = -\frac{\alpha^2}{8} \sum_{i=1}^N (\nabla_i^2) + \nabla_i^2 \quad (3.3)$$

$$H_{D1} = -\frac{\alpha^2 Z}{8} \sum_{i=1}^N (\nabla_i^2) \left(\frac{1}{r_i}\right) \quad (3.4)$$

$$H_{D2} = -\frac{\alpha^2}{4} \sum_{i<j}^N (\nabla_i^2) \left(\frac{1}{r_{ij}}\right) \quad (3.5)$$

$$H_{OO} = -\frac{\alpha^2}{2} \sum_{i<j}^N \left[\frac{P_i P_j}{r_{ij}} + \frac{r_{ij} (r_{ij} \cdot P_i) P_j}{r_{ij}^3} \right] \quad (3.6)$$

$$H_{SSC} = -\frac{8\pi\alpha^2}{3} \sum_{i<j}^N (S_i \cdot S_j) \delta(r_i r_j) \quad (3.7)$$

dir. H_{FS} terimi, spin ve yörünge açısal momentumları arasındaki etkileşimi tanımlar.

H_{FS} bir etkileşme terimi olduğu için L ve S ile sıra deęiştirmezken $J = L + S$ toplam açısal momentumla sıra deęiştirir. Bu işlemcinin açık ifadesi ise

$$H_{FS} = H_{SO} + H_{SOO} + H_{SS} \quad (3.8)$$

dir. H_{SO} çekirdek spin-yörünge (Spin-Orbit), H_{SOO} spin dięer yörünge (Spin-other Orbit) ve H_{SS} spin-spin terimidir:

$$H_{SO} = \frac{\alpha^2 Z}{2} \sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{r_i^3}\right) l_i \cdot s_i \quad (3.9)$$

$$H_{SOO} = -\frac{\alpha^2}{2} \sum_{i<j}^N \frac{r_{ij} \times p_i}{r_{ij}^3} (s_i + 2s_j) \quad (3.10)$$

$$H_{SS} = \alpha^2 \sum_{i < j}^N \frac{1}{r_{ij}^3} \left[s_i \cdot s_j 3 \frac{(s_i \cdot r_{ij})(s_j \cdot r_{ij})}{r_{ij}^2} \right]. \quad (3.11)$$

Breit-Pauli Hamiltonyeni J ile sıra deđiřtirir; öz fonksiyonları ise J^2 ve J_z nin özfonksiyonları olmalıdır. Dalga fonksiyonu $\Phi_{\gamma LSJM_j}$, LS çiftlenimli konfigürasyon hal fonksiyonları olmak üzere;

$$\Psi(\gamma LM_j) = \sum_{i=1}^M c_i \Phi(\gamma_i L_i S_i JM_j) \quad (3.12)$$

$$\Phi(\gamma LSJM_j) = \sum \langle LM_L SM_s | LSJM_j \rangle \Phi(\gamma LM_L SM_s) \quad (3.13)$$

ile verilen çok konfigürasyonlu lineer birleřimdir. L ve S farklı LS li konfigürasyon hal fonksiyonlarının iyi kuantumlu sayıları olmadığı için farklı LS terimlerinin karışımı alınır, dalga fonksiyonu ara çiftlenime tabi olur. Relativistik olmayan çok konfigürasyonlu Hartree-Fock yönteminden konfigürasyon hal fonksiyonları, Breit Pauli yaklaşıklığından karışım katsayıları elde edilerek matris özdeđer problemine ulaşılır:

$$H_{ij} = \langle \gamma_i L_i S_i JM_j | H_{BP} | \gamma_j L_j S_j JM_j \rangle. \quad (3.14)$$

Böylece Breit-Pauli Hamiltonyeninin öz deđer ve öz fonksiyonlarını bulma problemi, LSJ çiftlenimli konfigürasyon hal fonksiyonları arasındaki matris elemanlarının bulunmasına ve her J deđeri için matris köşegenleřtirmesine indirgenir.

3.3. İnce Yapı Seviyeleri

Relativistik düzeltmeleri almak için Breit-Pauli dalga fonksiyonunun bir terim içeren basit hali incelenir:

$$E = E_{NR} + E_{RS} + E_{FS} . \quad (3.15)$$

$$E_{NR} = \langle \gamma LSLM_j | H_{NR} | \gamma LSLM_j \rangle \quad (3.16)$$

$$E_{RS} = \langle \gamma L S L M_j | H_{RS} | \gamma L S L M_j \rangle \quad (3.17)$$

$$E_{FS} = \langle \gamma L S L M_j | H_{FS} | \gamma L S L M_j \rangle \quad (3.18)$$

$$E_{FS} = E_{SO} + E_{SOO} + E_{SS} \quad (3.19)$$

E_{FS} açılımındaki enerji J ye bağlıdır. Açısal momentum toplama kuralları kullanılarak J nin mümkün değerleri

$$|L-S|, |L-S+1|, \dots, L+S-1, L+S$$

ve terimdeki seviyelerin sayısı; $L \leq S$ ise $2S+1$, $L > S$ ise $2L+1$ çoklukları ile verilir.

E_{SO} ve E_{SOO} nun her ikisi de spin tensör işlemcilerinin çarpımlarıdır. E_{SS} ise iki tensör işlemcisinin skaler çarpımıdır (Weigner Eckart yöntemi):

$$E_{SO} = \langle \gamma L S L M_j | H_{SO} | \gamma L S L M_j \rangle \propto (-1)^{L+S+J} \begin{Bmatrix} L & L & 1 \\ S & S & J \end{Bmatrix} \quad (3.20)$$

$$E_{SOO} = \langle \gamma L S L M_j | H_{SOO} | \gamma L S L M_j \rangle \propto (-1)^{L+S+J} \begin{Bmatrix} L & L & 1 \\ S & S & J \end{Bmatrix} \quad (3.21)$$

$$E_{SS} = \langle \gamma L S L M_j | H_{SS} | \gamma L S L M_j \rangle \propto (-1)^{L+S+J} \begin{Bmatrix} L & L & 2 \\ S & S & J \end{Bmatrix}. \quad (3.22)$$

6j-sembolleri kullanılarak daha açık ifadeler elde edilebilir:

$$E_{SO} = \{J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)\} \zeta_{SO}(\gamma LS) \quad (3.23)$$

$$E_{SOO} = \{J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)\} \zeta_{SOO}(\gamma LS) \quad (3.24)$$

$$E_{SS} = \left\{ \frac{3}{4} C(C+1) - L(L+1) - S(S+1) \right\} \zeta_{SS}(\gamma LS). \quad (3.25)$$

Burada

$$C = J(J+1) - L(L+1) - S(S+1) \quad (3.26)$$

dır. Spin-spin terimi ihmal edildiğinde J ve $J+1$ iki komşu ince yapı seviyesi arasındaki enerji farkı

$$\Delta E_{FS} = 2\zeta J \quad (3.27)$$

dir ve $\zeta = \zeta_{so}(\gamma LS) + \zeta_{soo}(\gamma LS)$ ince yapı için Lande aralık kuralıdır. ζ pozitif (artı işaretli) ve ince yapı enerjisi J ile artıyorsa ince yapı için 'normaldir', ζ negatif (eksi işaretli) ise 'tersine çevrilmiştir' denir. Ancak spin-spin etkileşimi ihmal edilemeyecek büyüklükte olduğundan Lande kuralı uygulanmaz ve ince yapı düzensiz bir şekillenim gösterir.



BÖLÜM 4. İZİNLI VE YASAKLI GEÇİŞLER

4.1. Geçişler

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 multipol geçişi, paritesi $\pi = (-1)^{k+1}$ ise manyetik multipol geçişi denir. Her geçiş paritesi π ve rankı k olan $O^{\pi(k)}$ küresel tensör işlemcisi ile tanımlanır.

4.1.1. Geçiş özellikleri

Geçiş integrali

$$I_q^{\pi k}(\gamma JM, \gamma' J' M') = \langle \gamma JM | O_q^{\pi(k)} | \gamma' J' M' \rangle \quad (4.1)$$

üstteki $\gamma' J' M'$ ve alttaki γJM seviyeleri arasındaki geçişi temsil eder. Bileşen şiddeti $S^{\pi k}$ dir:

$$S^{\pi k}(\gamma JM, \gamma' J' M') = \sum_q |I_q^{\pi k}(\gamma JM, \gamma' J' M')|^2 \quad (4.2)$$

$$S^{\pi k}(\gamma JM, \gamma' J' M') = \sum_{M, M', q} |\langle \gamma JM | O_q^{\pi(k)} | \gamma' J' M' \rangle|^2. \quad (4.3)$$

Toplam, dejenere halin kuantum sayıları üzerindedir. Elde edilen özellik çizgi şiddetidir ve indirgenmiş matris elemanlarının karesidir:

$$S^{nk}(\gamma J, \gamma' J') = \sum_{M, M', q} |\langle \gamma J \| O_q^{n(k)} \| \gamma' J' \rangle|^2. \quad (4.4)$$

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

$$A^{nk}(\gamma' J', \gamma J) = 2C_k [\alpha(E_{\gamma' J'} - E_{\gamma J})]^{2k+1} \frac{S^{nk}(\gamma' J', \gamma J)}{g_{J'}} \quad (4.5)$$

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

$$g_{J'} = 2J' + 1 \quad (4.6)$$

$$C_k = \frac{(2k+1)(k+1)}{k((2k+1)!!)^2}. \quad (4.7)$$

Ağırlıklı osilatör şiddeti soğurma ya da yaymadaki geçişi temsil eder. Düşük haldeki bir atom foton soğurarak üst seviyeye uyarıldığında (çıktığında) osilatör şiddeti

$$f^{nk}(\gamma J, \gamma' J') = \frac{1}{\alpha} c_k [\alpha(E_{\gamma' J'} - E_{\gamma J})]^{2k-1} \frac{S^{nk}(\gamma J, \gamma' J')}{g_J} \quad (4.8)$$

dir. Yayma osilatör şiddeti için sadece işaret değiştirilir. Bu özellik çizgi şiddeti gibi iki seviye arasında tamamen simetrikdir. Ağırlıklı osilatör şiddeti

$$gf^{nk}(\gamma J, \gamma' J') = g_J f^{nk}(\gamma J, \gamma' J') \quad (4.9)$$

ile verilir. Elektrik dipol (E1) ışınması (veya geçişi), daha yüksek mertebeden elektrik ve dipol manyetik geçişler yasaklı olsalar bile izinli olacaklardır.

4.2. Kesin ve Yaklaşık Seçim Kuralları

Kesin seçim kuralları tüm konfigürasyon hal fonksiyonları için uygulanır. Bir atomik hal fonksiyonunun açılımındaki tüm konfigürasyon hal fonksiyonları aynı paritelidir. Manyetik dipol operatörleri $(-1)^{k-1}$, elektrik dipol operatörleri $(-1)^k$, paritelidirler. İki halin paritesi π ve π' ile gösterilirse

$$E^{(k)}; \frac{\pi'}{\pi} = (-1)^k \quad (4.10)$$

$$M^{(k)}; \frac{\pi'}{\pi} = (-1)^{k-1} \quad (4.11)$$

şeklindedir. Bir atomik fonksiyonun diğer bir özelliği toplam J ile ilgilidir.

$$\Delta J = J - J' = 0, \pm 1, \dots, \pm k \quad k \leq J + J' \quad (4.12)$$

$J = J' = 0$ ise izinli değildir.

Uzay açısal momentumların seçim kuralları için $E^{(k)}$ işlemcisine karşılık gelen tensörün rankı k ise seçim kuralları

$$E^{(k)}; \quad \begin{aligned} \Delta S &= 0 \\ \Delta L &= 0, \pm 1, \dots, k \quad k \leq L + L' \end{aligned} \quad (4.13)$$

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

$$\begin{aligned} MA^{(k)}; & \quad \Delta S = 0 & \quad \Delta L = 0, \pm 1, \dots, k & \quad k \leq L + L' \\ MB^{(k)}; & \quad \Delta S = 0, \pm 1 & \quad \Delta L = 0, \pm 1, \dots, k & \quad k - 1 \leq L + L' \end{aligned} \quad (4.14)$$

şeklindedir.

BÖLÜM 5. SONUÇLAR VE TARTIŞMA

5.1. S XVI, S XV ve SXIV İyonları için Yapılan Hesaplar

Bu çalışmada Kükürt'ün ($Z=16$) üç iyonu (S XVI, S XV ve S XIV) için çok konfigürasyonlu Hartree-Fock yaklaşıklığı kullanılarak bazı seviye ve elektrik dipol (E1) geçişleri için geçiş enerjileri, dalga boyları, ağırlıklı osilatör şiddetleri ve geçiş olasılıkları MCHF atomik yapı programı ile hesaplandı [2].

MCHF yöntemi kullanılarak alınan konfigürasyonlar için dalga fonksiyonları, konfigürasyonların baskınlığını belirleyen karışım katsayıları ve relativistik olmayan enerjiler hesaplandı. Elde edilen bu dalga fonksiyonlarında Breit-Pauli relativistik etkileri dikkate alındı. Bu relativistik katkılarla beraber geçişlere ait enerjiler, dalga boyları, osilatör şiddetleri ve geçiş olasılıkları hesaplandı. Sonuçlar tablolarda karşılaştırmalı olarak verildi. Tablo 5.1, 5.3 ve 5.5'te alınan konfigürasyonlara ait seviye ve geçiş enerjileri cm^{-1} biriminde verildi. Tablolarda birinci sütunda konfigürasyonlar arasındaki geçişlerle; yalnızca tek pariteli haller “ $^{\circ}$ ” üst indis ile belirtildi. İkinci ve üçüncü sütunda alt ve üst seviyelere ait enerjiler ve son sütunda geçiş enerjileri verildi. * indisli değerler bu çalışmaya aittir. Karşılaştırma değerlerine ait kaynaklar tablo altlarında verilmektedir. Sonuçların sunumunda kısalık açısından ns veya $n\pi$ konfigürasyonu sadece konfigürasyonun baş kuantum sayısını gösteren n ile verildi. Tablolarda parantez içlerinde verilen değerler ise 10 un kuvvetlerini, $A.10^B=A(B)$, göstermektedir. Benzer şekilde aynı geçişlere ait dalga boyları, ağırlıklı osilatör şiddetleri ve geçiş olasılıklarına ait hesap sonuçları Tablo 5.2, 5.4, 5.6 da verilmektedir

5.1.1. S XVI'ya ait seviye enerjileri dalga boyları, ağırlıklı osilator şiddetleri ve geçiş olasılıkları

Hidrojen benzeri Kükürt'e (S XVI) ait çift parite için 1s, 2s, 3s, 4s, 5s, tek parite için 2p, 3p, 4p, 5p konfigürasyonları alındı. Çift parite için en baskın konfigürasyon 0,9981228 karışım katsayısı ile 1s halidir. Bunu -0,0610858 ile 3s, -0,0037211 ile 4s, -0,001799 ile 5s hali takip eder. Tek parite için en baskın konfigürasyon ise 0,09999996 ile 2p halidir. Tek parite için takip eden konfigürasyonlar -0,0008522 ile 5p, -0,0000453 ile 4p halidir. Bu konfigürasyon seçimi ile S XVI için elde edilen seviye enerjileri Tablo 5.1'de, dalga boyları geçiş olasılıkları ağırlıklı osilator şiddetleri ve geçiş olasılıkları Tablo 5.2'de sunuldu. Tablo 5.1'deki seviye enerjileri $1s^2 S_{1/2}$ seviyesine göre verildi.

5.1.2. S XV'e ait seviye enerjileri dalga boyları, ağırlıklı osilator şiddetleri ve geçiş olasılıkları

Helyum benzeri Kükürt'e (S XV) ait çift parite için $1s^2$, 1s2s, 1s3s, 1s3d, tek parite için 1s2p, 1s3p konfigürasyonları alındı. Çift parite için en baskın konfigürasyon 0,9999426 karışım katsayısı ile $1s^2$ temel halidir. Bunu -0,084749 ile 1s2s ve -0,0065580 ile 1s3s hali takip eder. Tek pariteli konfigürasyonlar baskınlık derecelerine göre 0,09959642 1s2p, -0,0000651 1s3p şeklinde sıralanırlar. Bu konfigürasyon seçimi ile S XV için elde edilen seviye ve geçiş enerjileri Tablo 5.3'te, dalga boyları, ağırlıklı osilator şiddetleri ve geçiş olasılıkları ve Tablo 5.4'te sunuldu. Tablo 5.3'teki seviye enerjileri $1s^2 \ ^1S_0$ seviyesine göre verildi.

Tablo 5.1 Hidrojen benzeri Kükürt'ün ns ($2 \leq n \leq 5$) ve np ($1 \leq n \leq 5$) için seviye ve bu seviyeler arasındaki geçiş enerjileri (cm^{-1}).

Konfigürasyonlar	Alt Seviye	Enerjiler Üst Seviye	Geçiş
$2 \ ^2P_{1/2}^o - 3 \ ^2S_{1/2}$	21743483,99*	152890952,48*	-
	21129243,10 ^a	25050649,80 ^a	-
$2 \ ^2P_{3/2}^o - 3 \ ^2S_{1/2}$	21767424,36*	152890952,48*	-
	21153436,50 ^a	25050649,80 ^a	-
$5 \ ^2P_{3/2}^o - 3 \ ^2S_{1/2}$	28288737,61*	152890952,48*	-
	25050641,20 ^d	27057697,30 ^d	-
$5 \ ^2P_{1/2}^o - 3 \ ^2S_{1/2}$	28287985,67*	152890952,48*	-
	25050649,80 ^a , 25050703 ^b	27056158,00 ^a , 27057763 ^b	-
$4 \ ^2P_{3/2}^o - 3 \ ^2S_{1/2}$	28744235,40*	152890952,48*	-
	25050649,80 ^a , 25050703 ^b , 25050641,20 ^d	26424832,60 ^a , 27056215 ^b , 26424824,00 ^d	-
$4 \ ^2P_{1/2}^o - 3 \ ^2S_{1/2}$	28744206,38*	152890952,48*	-
	25050649,80 ^a , 25050703 ^b	26421808,50 ^a , 26424890 ^b	-
$1 \ ^2S_{1/2} - 4 \ ^2P_{3/2}^o$	0,00*	28744235,40*	28744235,40*
	0,00 ^a , 0,00 ^b , 0,00 ^d	26424832,60 ^a , 26421866 ^b , 26424824,00 ^d	-
$1 \ ^2S_{1/2} - 4 \ ^2P_{1/2}^o$	0,00*	28744206,38*	28744206,38*
	0,00 ^a , 0,00 ^b	26421808,50 ^a , 26424890 ^b	-
$1 \ ^2S_{1/2} - 5 \ ^2P_{1/2}^o$	0,00*	28287985,67*	28287985,67*
	0,00 ^a , 0,00 ^b	27056158,00 ^a , 26421866 ^b	-
$1 \ ^2S_{1/2} - 5 \ ^2P_{3/2}^o$	0,00*	28288737,61*	28288737,61*
	0,00 ^a , 0,00 ^b , 0,00 ^d	27057705,84 ^a , 27056215 ^b , 27057697,30 ^d	-
$1 \ ^2S_{1/2} - 2 \ ^2P_{3/2}^o$	0,00*	21767424,36*	21767424,36*
	0,00 ^a , 0,00 ^b , 0,00 ^d	21153436,50 ^a , 27057763 ^b , 21153428,00 ^d	-
$1 \ ^2S_{1/2} - 2 \ ^2P_{1/2}^o$	0,00*	21743483,99*	21743483,99*
	0,00 ^a , 0,00 ^b , 0,00 ^d	21129243,10 ^a , 21153494,8 ^b , 21129235,00 ^d	-
$2 \ ^2P_{1/2}^o - 5 \ ^2S_{1/2}$	21743483,99*	28794261,88*	7050777,89*
	21129243,10 ^a	27056214,05 ^a , 21129300,4 ^b	-
$2 \ ^2P_{1/2}^o - 4 \ ^2S_{1/2}$	21743483,99*	28779412,60*	7035928,61*
	21129243,10 ^a	26421917,70 ^a	-
$2 \ ^2P_{3/2}^o - 5 \ ^2S_{1/2}$	21767424,36*	28794261,88*	7026837,52*
	21153436,50 ^a	27056214,05 ^a	-
$2 \ ^2P_{3/2}^o - 4 \ ^2S_{1/2}$	21767424,36*	28779412,60*	7011988,24*
	21153436,50 ^a	26421917,70 ^a	-
$5 \ ^2P_{1/2}^o - 5 \ ^2S_{1/2}$	28287985,67*	28794261,88*	506276,21*
	26421917,70 ^a	27056158,00 ^a	-

Tablo 5.1'in devamı

Konfigürasyonlar	Enerjiler		Geçiş
	Alt Seviye	Üst Seviye	
$5 \ ^2P_{3/2}^o - 5 \ ^2S_{1/2}$	28288737,61*	28794261,88*	505524,27*
	27056214,05 ^a	27057705,84 ^a	
$5 \ ^2P_{3/2}^o - 4 \ ^2S_{1/2}$	28288737,61*	28779412,60*	490674,99*
	26421917,70 ^a , 26421909,00 ^d	27057705,84 ^a , 27057697,30 ^d	
$4 \ ^2P_{3/2}^o - 4 \ ^2S_{1/2}$	28744235,40*	28779412,60*	35177,2*
	26421917,70 ^a	26424832,60 ^a	
$4 \ ^2P_{1/2}^o - 4 \ ^2S_{1/2}$	28744206,38*	28779412,60*	35206,22*
	26421808,50 ^a	26421917,70 ^a	
$4 \ ^2P_{3/2}^o - 5 \ ^2S_{1/2}$	28744235,40*	28794261,88*	50026,48*
	26424832,60 ^a	27056214,05 ^a	
$4 \ ^2P_{1/2}^o - 5 \ ^2S_{1/2}$	28744206,38*	28794261,88*	50055,5*
	26421808,50 ^a	27056214,05 ^a	

^a Atomic Line List v.2.04 [39]

^b NIST Atomic Spectra Database [40]

^d Kelly Atomic Line Database [42]

Tablo 5.2 Hidrojen benzeri Kükürt'ün ns ($2 \leq n \leq 5$) ve np ($1 \leq n \leq 5$) seviyeleri arasındaki geçişler için λ dalga boyları (Å), gf ağırlıklı osilatör şiddetleri ve Aki geçiş olasılıkları (s^{-1}).

Konfigürasyonlar	λ	gf	Aki
$2^2P_{1/2}^o - 3^2S_{1/2}$	0,76*	9,63074(0)*	5,52427(16)*
	25,501053 ^a , 25,50108 ^c	1,36(-2) ^a , 0,01360000 ^c , 4,6634(-4) ^e	1,40(11) ^a , 0,1389(12) ^c , 1,3919(11) ^e
$2^2P_{3/2}^o - 3^2S_{1/2}$	0,76*	1,93539(1)*	1,10975(17)*
	25,659360 ^a , 25,6593898 ^c	1,42(-2) ^a , 0,02830000 ^c , 6,8400(-4) ^e	2,88(11) ^a , 0,2859(12) ^c , 2,8631(11) ^e
$5^2P_{3/2}^o - 3^2S_{1/2}$	0,80*	1,42294(2)*	7,36775(17)*
	0,8241 ^b , 49,82412 ^c , 49,824 ^d	0,03980000 ^c	0,1069(12) ^c
$5^2P_{1/2}^o - 3^2S_{1/2}$	0,80*	7,12242(1)*	3,68791(17)*
	49,862673 ^a , 0,8626 ^b , 49,86258 ^c	4,04(-2) ^a , 0,04030000 ^c	1,08(11) ^a , 0,1080(12) ^c
$4^2P_{3/2}^o - 3^2S_{1/2}$	0,81*	2,51274(2)*	1,29156(18)*
	72,77052 ^a , 0,7703 ^b , 72,7703198 ^c , 72,770 ^d	3,18(-1) ^a , 0,15800002 ^c	2,00(11) ^a , 0,2000(12) ^c
$4^2P_{1/2}^o - 3^2S_{1/2}$	0,81*	1,25693(2)*	6,46066(17)*
	72,93102 ^a , 0,9308 ^b , 72,9308197 ^c	1,62(-1) ^a , 0,16200000 ^c	2,03(11) ^a , 0,2030(12) ^c
$1^2S_{1/2} - 4^2P_{3/2}^o$	3,48*	6,50587(-3)*	8,96339(11)*
	3,784319 ^a , 0,784311 ^b , 3,784313 ^c , 3,7843 ^c , 03,784 ^d	1,93(-2) ^a , 0,00959000 ^c	4,49(12) ^a , 0,4470(13) ^c , 0,5480(13) ^c
$1^2S_{1/2} - 4^2P_{1/2}^o$	3,48*	3,25181(-3)*	8,96027(11)*
	3,784752 ^a , 0,784744 ^b , 3,784746 ^c , 3,7847 ^c	9,62(-3) ^a , 0,00956000 ^c	4,48(12) ^a , 0,4449(13) ^c , 0,5480(13) ^c
$1^2S_{1/2} - 5^2P_{1/2}^o$	3,54*	1,83863(-3)*	4,90674(11)*
	3,6960163 ^a , 0,696008 ^b , 3,696010 ^c , 03,696 ^d	4,61(-3) ^a , 0,00459000 ^c	2,25(12) ^a , 0,2240(13) ^c , 0,14863(13) ^c
$1^2S_{1/2} - 5^2P_{3/2}^o$	3,54*	3,62430(-3)*	4,83633(11)*
	3,6958048 ^a , 0,695797 ^b , 3,695799 ^c	9,26(-3) ^a , 0,00461000 ^c	2,26(12) ^a , 0,2249(13) ^c , 0,14862(1)
$1^2S_{1/2} - 2^2P_{3/2}^o$	4,59*	4,21121(-1)*	3,32726(13)*
	4,727364 ^a , 0,727351 ^b , 4,727354 ^c , 4,7274 ^c , 4,72759 ^c , 04,727 ^d	2,77(-1) ^a , 0,13700000 ^c	4,13(13) ^a , 0,4090(14) ^c , 0,4159(14) ^c
$1^2S_{1/2} - 2^2P_{1/2}^o$	4,60*	2,10309(-1)*	3,31598(13)*
	4,732777 ^a , 0,732764 ^b , 4,73276699 ^c , 4,733440 ^c , 4,7327 ^c , 0,733400 ^c , 04,733 ^d	1,40(-1) ^a , 0,13800000 ^c	4,16(13) ^a , 0,4109(14) ^c , 0,4140(14) ^c
$2^2P_{1/2}^o - 5^2S_{1/2}$	14,18*	1,52752(-2)*	2,53255(11)*
	16,872025 ^a , 16,8746 ^c	1,22(-3) ^a , 0,01390000 ^c	2,86(10) ^a , 0,3269(12) ^c
$2^2P_{1/2}^o - 4^2S_{1/2}$	14,21*	1,01942(-3)*	1,68303(10)*
	18,894039 ^a , 18,89404 ^c	3,06(-3) ^a , 0,00304000 ^c	5,72(10) ^a , 0,5679(11) ^c

Tablo 5.2'nin devamı

Konfigürasyonlar	λ	gf	Aki
$2^2 P_{3/2}^o - 5^2 S_{1/2}$	14,23*	4,44478(-3)*	7,31924(10)*
	16,9411771 ^a , 16,9411799 ^c	1,27(-3) ^a , 0,00251000 ^c	5,89(10) ^a , 0,5829(11) ^c
$2^2 P_{3/2}^o - 4^2 S_{1/2}$	14,26*	1,65810(-3)*	2,71886(10)*
	18,980802 ^a , 18,98081 ^c	3,18(-3) ^a , 0,00630000 ^c	1,18(11) ^a , 0,1170(12) ^c
$5^2 P_{1/2}^o - 5^2 S_{1/2}$	197,52*	1,19835(3)*	1,02436(14)*
	157,66895 ^a	1,82(-1) ^a	4,88(10) ^a
$5^2 P_{3/2}^o - 5^2 S_{1/2}$	197,82*	2,39318(3)*	2,03965(14)*
	67034 ^a	1,59(-2) ^a	1,18(4) ^a
$5^2 P_{1/2}^o - 4^2 S_{1/2}$	203,49*	1,30039(1)*	1,04734(12)*
	1784000 ^a	2,98(-4) ^a	6,24(-1) ^a
$5^2 P_{3/2}^o - 4^2 S_{1/2}$	203,80*	2,60149(1)*	2,08884(12)*
	157,28510 ^a , 157,285 ^d	3,56(-1) ^a	4,80(10) ^a
$4^2 P_{3/2}^o - 4^2 S_{1/2}$	2842,80*	2,81582(1)*	1,16204(10)*
	34306 ^a	1,24(-2) ^a	3,52(4) ^a
$4^2 P_{1/2}^o - 4^2 S_{1/2}$	2840,46*	1,40953(1)*	5,82650(9)*
	916000 ^a	2,32(-4) ^a	1,84(0) ^a
$4^2 P_{3/2}^o - 5^2 S_{1/2}$	1998,98*	6,52622(-3)*	5,44700(6)*
	158,38286 ^a	5,47(-2) ^a	2,91(10) ^a
$4^2 P_{1/2}^o - 5^2 S_{1/2}$	1997,82*	3,19837(-3)*	2,67256(6)*
	157,62788 ^a	5,29(-2) ^a	1,42(10) ^a

^a Atomic Line List v.2.04 [39]^b NIST Atomic Spectra Database [40]^c CAMBD Atomic Spectra [41]^d Kelly Atomic Line Database [42]^e Pal'chikov (f değeri) [5]

Tablo 5.3 Helyum benzeri Kükürt'ün $1s^2$, $1s2s$, $1s2p$, $1s3s$, $1s3p$, $1s3d$ seviye enerjileri ve bu seviyeler arasındaki geçiş enerjileri (cm^{-1}).

Konfigürasyonlar	Enerjiler		
	Alt Seviye	Üst seviye	Geçiş
$1\ ^1S_0 - 3\ ^1P_1^o$	0,00* 0,00 ^a , 0,00 ^d , 0,00 ^b , 0,0 ^w	25984998,15* 23260416,00 ^a , 23261370,00 ^d , 23260416 ^b , 23,2599(6) ^p	25984998,15* 211,972 ^k , 211,9554 ^w , 211,9541 ^w , 211,972 ^x , 211,786 ^x
$1\ ^1S_0 - 3\ ^3P_1^o$	0,00* 0,00 ^d , 0,00 ^b	25984912,82* 23231480,00 ^d , 23230551 ^b , 211,694 ^x , 211,505 ^x , 211,6685 ^w , 211,6686 ^w	25984912,82* 211,6685 ^w , 211,694 ^k
$1\ ^1S_0 - 2\ ^1P_1^o$	0,00* 0,00 ^a , 0,00 ^d , 0,00 ^b	19843930,92* 19846285,00 ^a , 19847250,00 ^d , 19846285 ^b , 19,8456(6) ^p , 180,880 ^x , 180,691 ^x , 180,8644 ^w , 180,8633 ^w	19843930,92* 2461,8 ^e , 19846,5(3) ^f , 19846,8(3) ^f , 90,471 ^h , 9,04531(1) ^k , 2460,630 ^y , 2461,8 ^e , 2461,36 ^o , 2460,67 ^o
$1\ ^1S_0 - 2\ ^3P_1^o$	0,00* 0,00 ^d , 0,00 ^b	19737302,31* 19738530,00 ^d , 19737521 ^b	19737302,31* 2448,0 ^e , 2447,46 ^o , 179,8355 ^w , 89,953 ^h , 8,99584(1) ^l , 19,7369(6) ^p , 179,86 ^k
$2\ ^3S_1 - 3\ ^1P_1^o$	19623928,46* 19602076 ^b , 19,6014(6) ^p , 178,641 ^x , 178,452 ^x , 178,6062 ^w , 178,6029 ^w	25984998,15* 23230551 ^b	6361069,69*
$2\ ^3S_1 - 3\ ^3P_1^o$	19623928,46*	25984912,82*	6360984,36*
$2\ ^3S_1 - 3\ ^3P_0^o$	19623928,46* 19602076,00 ^a , 19602076 ^b	25984908,61* 23229571,00 ^a , 23229571 ^b , 23,2288(6) ^p , 211,6593 ^w , 211,686 ^x , 211,496 ^x	6360980,15*
$2\ ^3S_1 - 3\ ^3P_2^o$	19623928,46* 19603070,00 ^d , 19602076 ^b	25984929,41* 23235340,00 ^d , 23234429 ^b , 211,7037 ^w , 211,7038 ^w , 211,727 ^x , 211,541 ^x	6361000,95*
$2\ ^1S_0 - 3\ ^1P_1^o$	19770139,58* 19745473,00 ^a , 19746390,00 ^d , 19745473 ^b , 179,931 ^x , 179,771 ^x , 19,7449(6) ^p , 179,9278 ^w , 179,9234 ^w	25984998,15* 23260416,00 ^a , 23261370,00 ^d , 23260416 ^b	6214858,57*
$2\ ^1S_0 - 3\ ^3P_1^o$	19770139,58*	25984912,82*	6214773,24*
$2\ ^3P_1^o - 3\ ^1D_2$	19737302,31*	23285920,12*	3548617,81*

Tablo 5.3'ün devamı

Konfigürasyonlar	Enerjiler		
	Alt Seviye	Üst seviye	Geçiş
$2^3 P_0^o-3^3 D_1$	19734459,09* 19734314,00 ^a , 19734314 ^b , 211,910 ^x , 211,722 ^x , 2118990 ^w , 211,8902 ^w	23282351,32* 23254611,00 ^a , 23254611 ^b , 19,7337(6) ^p , 179,836 ^x , 179,651 ^x , 179,8058 ^w , 179,8058 ^w	3547892,23*
$2^3 P_1^o-3^3 D_2$	19737302,31* 19737521,00 ^a , 19737521 ^b , 23,2540(6) ^p , 211,911 ^x , 211,723 ^x , 211,8905 ^w , 211,8907 ^w	23282484,22* 23254645,00 ^a , 23254645 ^b	3545181,91*
$2^3 P_1^o-3^3 D_1$	19737302,31* 19737521,00 ^a	23282351,32* 23254611,00 ^a	3545049,01*
$2^3 P_2^o-3^1 D_2$	19749175,36*	23285920,12* 19,7500(6) ^p , 179,979 ^x , 179,801 ^x , 179,9542 ^w , 179,9542 ^w	3536744,76*
$2^3 P_2^o-3^3 D_3$	19749175,36* 19750573,00 ^a , 19750573 ^b , 211,924 ^x , 211,736 ^x , 211,9041 ^w , 211,9043 ^w	23284217,01* 23256165,00 ^a , 23256165 ^b	3535041,65*
$2^3 P_2^o-3^3 D_2$	19749175,36* 19750573,00 ^a	23282484,22* 23254645,00 ^a	3533308,86*
$2^3 P_2^o-3^3 D_1$	19749175,36* 19750573,00 ^a	23282351,32* 23254611,00 ^a	3533175,96*
$2^3 P_1^o-3^1 S_0$	19737302,31* 23,2305(6) ^p , 211,693 ^x , 211,517 ^x , 211,6948 ^w , 211,6922 ^w	23266089,04*	3528786,73*
$2^3 P_0^o-3^3 S_1$	19734459,09* 19734314,00 ^a , 19734314 ^b , 23,1925(6) ^p , 211,360 ^x , 211,167 ^x , 211,3235 ^w , 211,3255 ^w	23218828,50* 23193163,00 ^a , 23193163 ^b	3484369,41*
$2^3 P_1^o-3^3 S_1$	19737302,31* 19737521,00 ^a , 19737521 ^b	23218828,50* 23193163,00 ^a , 23193163 ^b	3481526,19*
$2^3 P_2^o-3^3 S_1$	19749175,36* 19750573,00 ^a , 19750573 ^b	23218828,50* 23193163,00 ^a , 23193163 ^b	3469653,14*
$2^1 P_1^o-3^1 D_2$	19843930,92* 19846285,00 ^a , 19846285 ^b	23285920,12* 23257195,00 ^a , 23257195 ^b	3441989,20*
$2^1 P_1^o-3^3 D_2$	19843930,92*	23282484,22*	3438553,30*
$2^1 P_1^o-3^3 D_1$	19843930,92*	23282351,32*	3438420,40*
$2^1 P_1^o-3^1 S_0$	19843930,92* 19846285,00 ^a , 19846285 ^b	23266089,04* 23231087,00 ^a , 23231087 ^b	3422158,12*
$2^1 P_1^o-3^3 S_1$	19843930,92*	23218828,50*	3374897,58*

Tablo 5.3'ün devamı

Konfigürasyonlar	Enerjiler		Geçiş
	Alt Seviye	Üst seviye	
$3\ ^3S_1 -3\ ^1P_1^o$	23218828,50*	25984998,15*	2766169,65*
$3\ ^3S_1 -3\ ^3P_2^o$	23218828,50*	25984929,41*	2766100,91*
	23193163,00 ^a , 23194100,00 ^d	23234429,00 ^a , 23235340,00 ^d	
$3\ ^3S_1 -3\ ^3P_1^o$	23218828,50*	25984912,82*	2766084,32*
	23193163,00 ^a	23230551,00 ^a	
$3\ ^3S_1 -3\ ^3P_0^o$	23218828,50*	25984908,61*	2766080,11*
	23193163,00 ^a	23229571,00 ^a	
$3\ ^1S_0 -3\ ^1P_1^o$	23266089,04*	25984998,15*	2718909,11*
	23231087,00 ^a , 23231940,00 ^d	23260416,00 ^a , 23261370,00 ^d	
$3\ ^1S_0 -3\ ^3P_1^o$	23266089,04*	25984912,82*	2718823,78*
$3\ ^3D_1 -3\ ^3P_2^o$	23282351,32*	25984929,41*	2702578,09*
	23234429,00 ^a	23254611,00 ^a	
$3\ ^3D_1 -3\ ^3P_1^o$	23282351,32*	25984912,82*	2702561,50*
	23230551,00 ^a	23254611,00 ^a	
$3\ ^3D_1 -3\ ^3P_0^o$	23282351,32*	25984908,61*	2702557,29*
	23229571,00 ^a	23254611,00 ^a	
$3\ ^3D_2 -3\ ^1P_1^o$	23282484,22*	25984998,15*	2702513,93*
	23230551,00 ^a	23254645,00 ^a	
$3\ ^3D_2 -3\ ^3P_2^o$	23282484,22*	25984929,41*	2702445,19*
$3\ ^3D_2 -3\ ^3P_1^o$	23282484,22*	25984912,82*	2702428,60*
$3\ ^3D_1 -3\ ^1P_1^o$	23282351,32*	25984998,15*	2702646,83*
$3\ ^3D_3 -3\ ^3P_2^o$	23284217,01*	25984929,41*	2700712,40*
	23234429,00 ^a	23256165,00 ^a	
$3\ ^1D_2 -3\ ^3P_2^o$	23285920,12*	25984929,41*	2699009,29*
	23234429,00 ^a	23254645,00 ^a	
$3\ ^1D_2 -3\ ^1P_1^o$	23285920,12*	25984998,15*	2699078,03*
	23257195,00 ^a	23260416,00 ^a	
$3\ ^1D_2 -3\ ^3P_1^o$	23285920,12*	25984912,82*	2698992,70*
$2\ ^3S_1 -2\ ^1P_1^o$	19623928,46*	19843930,92*	220002,46*
	19602076 ^b	19846285 ^b	
$2\ ^3S_1 -2\ ^3P_2^o$	19623928,46*	19749175,36*	125246,90*
	19602076 ^b	19750573 ^b	148497 ^v , 148496 ^t , 148498 ^q , 148480 ^m , 148488,3 ⁿ , 148493 ⁿ , 148470 ^l
$2\ ^3S_1 -2\ ^3P_1^o$	19623928,46*	19737302,31*	113373,85*
	19602076 ^b	19737521 ^b	

Tablo 5.3'ün devamı

Konfigürasyonlar	Enerjiler		Geçiş
	Alt Seviye	Üst seviye	
$2 \ ^3S_1 - 2 \ ^3P_0^o$	19623928,46*	19734459,09*	110530,63*
	19602076 ^b	19734314 ^b	132219 ^{t, v, y, u} , 141621 ^u , 132200 ^m , 132198 ⁿ , 132171,9 ⁿ , 132214 ^q , 132169 ^l
$2 \ ^1S_0 - 2 \ ^1P_1^o$	19770139,58*	19843930,92*	73791,34*
	19746390,00 ^d , 19745473 ^b	19847250,00 ^d , 19846285 ^b	
$2 \ ^3P_1^o - 2 \ ^1S_0$	19737302,31*	19770139,58*	32837,27*

^a Atomic Line List v.2.04 [39]

^b NIST Atomic Spectra Database [40]

^d Kelly Atomic Line Database [42]

^s Cocke ve diğerleri (eV biriminde) [9]

^h Johnson ve Lin (Atomik birimde) [11]

^k Drake (Atomik birimde) [15]

^l Berry ve diğerleri [16]

^m Livingston ve diğerleri [17]

ⁿ DeSerio ve diğerleri [18]

^o Schleinkofer ve diğerleri (eV biriminde)[19]

^p Vainshtein ve Safronova [20]

^r Aglitsky ve diğerleri [21]

^t Johnson ve Sapirstein [23]

^u Berry ve diğerleri [24]

^v Chen ve diğerleri [25]

^y Plante ve diğerleri (seviye: cm⁻¹, geçiş: eV biriminde)[26]

^w Kimura ve diğerleri (Ryd biriminde) [28]

^x Kingston ve diğerleri (Ryd biriminde) [29]

^q Howie ve diğerleri [30]

Tablo 5.4 Helyum benzeri Kükürt'ün $1s^2$, $1s2s$, $1s2p$, $1s3s$, $1s3p$, $1s3d$ seviyeleri arasındaki geçişler için λ dalga boyları (Å), gf ağırlıklı osilatör şiddetleri ve Aki geçiş olasılıkları (s^{-1}).

Konfigürasyonlar	λ	gf	Aki
$1\ ^1S_0 - 3\ ^1P_1^o$	3,85* 4,2991492 ^a , 4,299 ^d , 0,2991 ^b , 4,299600 ^c , 4,29875 ^c , 4,298900 ^c , 4,299 ^c , 4,2996 ^d , 4,2990 ^x , 4,3046 ^x , 4,2985 ^j	1,23317(-4)* 1,53(-1) ^a , 0,04900000 ^c , 1,683(-1) ^x , 1,699(-1) ^x , 0,1505 ⁱ , 0,1579 ^w	1,85129(10)* 1,85(13) ^a , 0,1770(14) ^c , 2,025(13) ^x , 2,040(13) ^x
$1\ ^1S_0 - 3\ ^3P_1^o$	3,85* 4,304 ^d , 0,3047 ^b , 5,0648 ^c , 5,06649239 ^c , 5,0662 ^c , 4,30504 ^c , 4,3045 ^c , 4,3052 ^j , 4,3040 ^j , 4,3046 ^x , 4,3084 ^x	2,46073(-6)* 1,480(-3) ^x , 1,429(-3) ^w , 1,602(-3) ^x	3,69412(8)* 1,776(11) ^x , 1,919(11) ^x
$1\ ^1S_0 - 2\ ^1P_1^o$	5,04* 5,0387264 ^a , 5,039 ^{d,f} , 0,03873 ^b , 5,0391 ^c , 5,0387 ^c , 5,03872639 ^c , 5,03859 ^c , 5,03863 ^c , 5,037400 ^c , 5,0384 ^c , 5,0385 ^c , 5,036 ^h , 5,0379 ^x , 5,0432 ^x , 5,038,91 ^r , 5,038,60 ^r , 5,038 ^h	7,51647(-1)* 7,67(-1) ^a , 0,24800000 ^c , 0,7514 ⁱ , 0,7508 ^x , 0,751 ^s , 7,509(-1) ^x , 7,735(-1) ^x , 7,762(-1) ^x , 0,7690 ^w	6,58073(13)* 6,72(13) ^a , 0,6680(14) ^c , 0,6519(14) ^c , 6,579(13) ^k , 6,59(13) ^s , 6,576(13) ^x , 6,776(13) ^x , 6,786(13) ^x
$1\ ^1S_0 - 2\ ^3P_1^o$	5,07* 27,55979 ^a , 0,066 ^d , 0,06649 ^b , 5,0666 ^c , 5,06634 ^c , 5,065 ^h , ^f , 5,066 ^h , 5,0664 ^x , 5,0715 ^h	6,07115(-3)* 1,32(-1) ^a , 6,718(-3) ^k , 6,77(-3) ^s , 6,379(-3) ^w , 6,445(-3) ^x , 6,643(-3) ^x	5,25837(11)* 1,16(12) ^a , 0,5669(12) ^c , 5,309(11) ^h , 5,87(11) ^{h,s} , 5,822(11) ^k , 5,583(11) ^x , 5,743(11) ^x
$2\ ^3S_1 - 3\ ^1P_1^o$	15,72* 0,560 ^b , 27,3183 ^c	2,53644(-10)* 1,111(-3) ^x , 1,003(-3) ^x	2,28186(3)* 9,916(9) ^x , 8,953(9) ^x
$2\ ^3S_1 - 3\ ^3P_1^o$	15,72* 27,545 ^c , 27,5743 ^c , 27,570 ^x	3,44162(-7)* 0,12900000 ^c , 1,234(-1) ^x , 1,255(-1) ^x	3,09611(6)* 0,1130(13) ^c , 1,083(12) ^x , 1,101(12) ^x
$2\ ^3S_1 - 3\ ^3P_0^o$	15,72* 27,56723 ^a , 0,567 ^b , 27,565 ^c , 27,545 ^c , 27,577 ^x	1,26829(-7)* 4,39(-2) ^a , 0,12900000 ^c , 4,155(-2) ^x , 4,241(-2) ^x	3,42287(6)* 1,16(12) ^a , 0,1130(13) ^c , 1,093(12) ^x , 1,116(12) ^x
$2\ ^3S_1 - 3\ ^3P_2^o$	15,72* 27,530 ^d , 0,530 ^b , 27,545 ^c , 27,529700 ^c , 27,53 ^c , 27,540 ^x	4,21734(-7)* 0,12900000 ^c , 2,063(-1) ^x , 2,077(-1) ^x	2,27638(6)* 0,1130(13) ^c , 1,089(12) ^x , 1,096(12) ^x

Tablo 5.4'ün devamı

Konfigürasyonlar	λ	gf	Aki
$2^1S_0-3^1P_1$	16,09* 28,44996 ^a , 28,450 ^d , 0,450 ^b , 28,4315 ^c , 28,450000 ^c , 28,450000 ^c , 28,464 ^x	8,24755(-7)* 4,07(-1) ^a , 0,13500002 ^c , 0,395 ⁱ , 4,085(-1) ^x , 4,149(-1) ^x	7,08258(6)* 1,12(12) ^a , 0,1110(13) ^c , 1,123(12) ^x , 1,139(12) ^x
$2^1S_0-3^3P_1$	16,09* 28,7089 ^c	4,05081(-9)* 4,042(-3) ^x , 1,139(-3) ^x	3,47854(4)* 1,092(10) ^x , 1,115(10) ^x
$2^3P_1^0-3^1D_2$	28,18* 28,419 ^x	1,50771(-1)* 6,109(-2) ^x , 6,132(-2) ^x	2,53274(11)* 30,28(11) ^x , 3,038(11) ^x
$2^3P_0^0-3^3D_1$	28,19* 28,40669 ^a , 0,407 ^b , 28,476000 ^c , 28,4056 ^c , 28,413 ^x	7,93842(-1)* 6,85(-1) ^a , 0,22600000 ^c , 6,730(-1) ^x , 6,759(-1) ^x	2,22167(12)* 1,89(12) ^a , 0,1860(13) ^c , 1,854(12) ^x , 1,862(12) ^x
$2^3P_1^0-3^3D_2$	28,21* 28,43232 ^a , 0,432 ^b , 28,378300 ^c , 28,476000 ^c , 28,440 ^x	1,63931(0)* 5,13(-1) ^a , 0,30500000 ^c , 4,457(-1) ^x , 4,472(-1) ^x	2,74849(12)* 2,54(12) ^a , 0,2509(13) ^c , 2,206(12) ^x , 2,213(12) ^x
$2^3P_1^0-3^3D_1$	28,21* 28,43260 ^a , 28,3746 ^c , 28,476000 ^c , 28,440 ^x	5,90472(-1)* 1,71(-1) ^a , 0,17000000 ^c , 1,671(-1) ^x , 1,677(-1) ^x	1,64986(12)* 1,41(12) ^a , 0,1399(13) ^c , 1,379(12) ^x , 1,384(12) ^x
$2^3P_2^0-3^1D_2$	28,28* 28,5139 ^c , 28,526 ^x	8,91725(-2)* 1,994(-2) ^x	1,48797(11)* 1,636(11) ^x , 1,634(11) ^x
$2^3P_2^0-3^3D_3$	28,29* 28,52585 ^a , 0,526 ^b , 28,526200 ^c , 28,476000 ^c , 28,534 ^x	3,32273(0)* 5,73(-1) ^a , 0,40800000 ^c , 5,687(-1) ^x , 5,690(-1) ^x	3,95650(12)* 3,35(12) ^a , 0,3359(13) ^c , 3,330(12) ^x
$2^3P_2^0-3^3D_2$	28,30* 28,53823 ^a , 28,541800 ^c , 28,476000 ^c , 28,547 ^x	5,03967(-1)* 1,02(-1) ^a , 0,10200000 ^c , 8,158(-2) ^x , 8,174(-2) ^x	8,39308(11)* 8,37(11) ^a , 0,8359(12) ^c , 6,682(11) ^x , 6,690(11) ^x
$2^3P_2^0-3^3D_1$	28,30* 28,53850 ^a , 28,538 ^c , 28,476000 ^c	3,94548(-2)* 6,81(-3) ^a , 0,01130000 ^c , 6,759(-3) ^x , 6,773(-3) ^x	1,09505(11)* 9,30(10) ^a , 0,9290(11) ^c , 9,226(10) ^x , 9,240(10) ^x
$2^3P_1^0-3^1S_0$	28,34* 28,564600 ^c	4,80322(-4)* 9,923(-5) ^x , 1,428(-74) ^x	3,98941(9)* 2,423(9) ^x , 3,488(9) ^x

Tablo 5.4'ün devamı

Konfigürasyonlar	λ	gf	Aki
$2^3 P_0^o - 3^3 S_1$	28,70* 28,91135 ^a , 0,911 ^b , 28,991 ^c , 28,910500 ^c	2,36347(-2)* 1,64(-2) ^a , 0,00554000 ^c , 1,434(-2) ^x , 1,591(-2) ^x	6,37972(10)* 4,36(10) ^a , 0,4400(11) ^c , 3,816(10) ^x , 4,231(10) ^x
$2^3 P_1^o - 3^3 S_1$	28,72* 28,93818 ^a , 0,938 ^b , 28,991 ^c , 28,878300 ^c	6,93685(-2)* 1,64(-2) ^a , 0,01660000 ^c , 1,422(-2) ^x , 1,552(-2) ^x , 0,049 ⁱ	1,86942(11)* 1,30(11) ^a , 0,1319(12) ^c , 1,133(11) ^x , 1,236(11) ^x
$2^3 P_2^o - 3^3 S_1$	28,82* 29,04790 ^a , 0,048 ^b , 28,991 ^c , 29,047600 ^c , 29,052 ^x	1,16760(-1)* 1,63(-2) ^a , 0,02760000 ^c , 1,505(-2) ^x , 1,575(-2) ^x	3,12515(11)* 2,15(11) ^a , 0,2189(12) ^c , 1,984(11) ^x , 2,074(11) ^x
$2^1 P_1^o - 3^1 D_2$	29,05* 29,31769 ^a , 0,318 ^b , 29,373700 ^c , 29,323 ^c , 29,344 ^x	2,07785(0)* 7,02(-1) ^a , 0,41900000 ^c , 6,026(-1) ^x , 6,028(-1) ^x	3,28388(12)* 3,27(12) ^a , 0,3250(13) ^c , 2,801(12) ^x , 2,802(12) ^x
$2^1 P_1^o - 3^3 D_2$	29,08* 29,4033 ^c , 29,366 ^x	2,28138(-1)* 9,633(-2) ^x , 9,731(-2) ^x	3,59837(11)* 4,470(11) ^x , 4,516(11) ^x
$2^1 P_1^o - 3^3 D_1$	29,08* 29,3993 ^c	4,65072(-3)* 1,435(-3) ^x , 1,386(-3) ^x	1,22248(10)* 1,110(10) ^x , 1,072(10) ^x
$2^1 P_1^o - 3^1 S_0$	29,22* 29,54383 ^a , 0,544 ^b , 29,6033 ^c , 29,545 ^c , 29,561 ^x	5,73534(-2)* 1,61(-2) ^a , 0,04880000 ^c , 0,048 ⁱ , 1,778(-2) ^x , 1,868(-2) ^x	4,48007(11)* 3,69(11) ^a , 0,3730(12) ^c , 4,068(11) ^x , 4,277(11) ^x
$2^1 P_1^o - 3^3 S_1$	29,63* 29,9404 ^c	5,46003(-4)* 1,684(-4) ^x , 1,328(-4) ^x	1,38268(9)* 1,257(9) ^x , 9,907(8) ^x
$3^3 S_1 - 3^1 P_1^o$	36,15*	1,57770(-5)* 4,566(-4) ^x , 4,519(-4) ^x	2,68403(7)* 1,377(6) ^x , 1,387(6) ^x
$3^3 S_1 - 3^3 P_2^o$	36,15* 2423,3 ^a , 2424,830 ^d , 2544,8 ^c	1,26689(-3)* 4,93(-2) ^a , 0,02800000 ^c , 4,888(-2) ^x , 4,938(-2) ^x	1,29309(9)* 3,36(7) ^a , 28800000,0 ^c , 3,189(7) ^x , 3,32(7) ^x
$3^3 S_1 - 3^3 P_1^o$	36,15* 2674,7 ^a , 2544,8 ^c	7,42972(-4)* 2,68(-2) ^a , 0,02800000 ^c , 2,643(-2) ^x , 0,080 ⁱ , 2,639(-2) ^x	1,26388(9)* 2,50(7) ^a , 28800000,0 ^c , 3,189(7) ^x , 2,417(7) ^x , 2,380(7) ^x

Tablo 5.4'ün devamı

Konfigurasyonlar	λ	gf	Aki
$3 \ ^3S_1 - 3 \ ^3P_0$	36,15* 2746,6 ^a , 2544,8 ^c	2,53401(-4)* 8,69(-3) ^a , 0,02800000 ^c , 8,694(-3) ^x , 8,627(-3) ^x	1,29319(9)* 2,31(7) ^a , 28800000,0 ^c , 2,23 6(7) ^x , 2,240(7) ^x
$3 \ ^1S_0 - 3 \ ^1P_1$	36,78* 3409,6 ^a , 3397,890 ^d , 3402,3 ^c	7,37700(-4)* 6,43(-2) ^a , 0,02140000 ^c , 6,520(-2) ^x , 6,233(-2) ^x 0,064 ⁱ	1,21248(9)* 1,23(7) ^a , 12300000,0 ^c , 1,356(7) ^x , 1,202(7) ^x
$3 \ ^1S_0 - 3 \ ^3P_1$	36,78*	1,55032(-5)* 2,052(-7) ^x , 8,197(-6) ^x	2,54793(7)* 4,694(-3) ^x , 2,931(1) ^x
$3 \ ^3D_1 - 3 \ ^3P_2$	37,00* 4954,9 ^a , 4337,1 ^c	1,24477(-5)* 1,84(-4) ^a , 0,00035100 ^c , 1,821(-4) ^x , 1,802(-4) ^x	1,21283(7)* 8,34(4) ^a , 124000,000 ^c , 8,156(4) ^x , 7,937(4) ^x
$3 \ ^3D_1 - 3 \ ^3P_1$	37,00* 4156,3 ^a , 4337,1 ^c	1,85076(-4)* 5,49(-3) ^a , 0,00527000 ^c , 4,2996 ^j , 5,399(-3) ^x , 5,413(-3) ^x	3,00542(8)* 2,12(6) ^a , 1870000,00 ^c , 2,023(6) ^x , 2,051(6) ^x
$3 \ ^3D_1 - 3 \ ^3P_0$	37,00* 3993,6 ^a , 4337,1 ^c	2,50507(-4)* 2,28(-2) ^a , 0,00702000 ^c , 2,256(-2) ^x , 2,272(-2) ^x	1,22038(9)* 3,18(6) ^a , 2490000,00 ^c , 3,035(6) ^x , 3,125(6) ^x
$3 \ ^3D_2 - 3 \ ^1P_1$	37,00* 4150,4 ^a	5,71635(-5)* 1,65(-2) ^a , 4,900(-4) ^x , 5,039(-4) ^x	9,28238(7)* 3,83(6) ^a , 2,483(4) ^x , 2,680(4) ^x
$3 \ ^3D_2 - 3 \ ^3P_2$	37,00* 4337,1 ^c	1,61047(-4)* 0,00316000 ^c , 2,221(-3) ^x , 2,199(-3) ^x	1,56900(8)* 1120000,00 ^c , 5,590(5) ^x , 5,834(5) ^x
$3 \ ^3D_2 - 3 \ ^3P_1$	37,00* 4337,1 ^c	5,39581(-4)* 0,00948000 ^c , 1,449(-2) ^x	8,76132(8)* 3360000,00 ^c , 3,267(6) ^x , 3,306(6) ^x
$3 \ ^3D_1 - 3 \ ^1P_1$	37,00*	4,03086(-6)* 1,443(-5) ^x , 1,420(-5) ^x	6,54606(6)* 4,443(2) ^x , 4,581(2) ^x
$3 \ ^3D_3 - 3 \ ^3P_2$	37,03* 4600,7 ^a , 4337,1 ^c	1,06061(-3)* 1,67(-2) ^a , 0,01260000 ^c , 1,664(-2) ^x , 1,652(-2) ^x	1,03197(9)* 3,75(6) ^a , 4480000,00 ^c , 3,704(6) ^x , 3,622(6) ^x

Tablo 5.4'ün devamı

Konfigürasyonlar	λ	gf	Aki
$3 \ ^1D_2 - 3 \ ^3P_2^o$	37,05*	2,84320(-5)*	2,76294(7)*
	4946,6 ^a	2,77(-3) ^a , 6,166(-4) ^x , 6,075(-4) ^x	7,54(5) ^a , 2,095(5) ^x , 2,051(5) ^x
$3 \ ^1D_2 - 3 \ ^1P_1^o$	37,05*	7,24928(-4)*	1,17417(9)*
	31050,0 ^a	1,76(-3) ^a , 1,966(-3) ^x , 2,040(-3) ^x	2,03(4) ^a , 3,850(4) ^x , 4,317(4) ^x
$3 \ ^1D_2 - 3 \ ^3P_1^o$	37,05*	2,97228(-5)*	4,81390(7)*
	27078 ^c	0,00335000 ^c , 2,102(-3) ^x , 2,149(-3) ^x	30500,000 ^c , 5,815(5) ^x , 6,007(5) ^x
$2 \ ^3S_1 - 2 \ ^1P_1^o$	454,55*	6,49279(-4)*	6,98700(6)*
	0,49 ^b	0,707(-3) ^s , 2,517(-4) ^x , 2,429(-4) ^x , 2,426(-4) ^x	9,96(6) ^s , 1,001(7) ^x , 9,781(6) ^x , 9,771(6) ^x
$2 \ ^3S_1 - 2 \ ^3P_2^o$	798,44*	7,64737(-2)*	1,60030(8)*
	0,41 ^b , 705,69 ^c , 673,85 ^c , 673,41 ^q , 67,343 ⁿ , 681,06 ^x , 675,61 ^x , 67,4 ^m	0,01670000 ^c , 2,903(-2) ^x , 0,053 ^s , 2,907(-2) ^x , 2,923(-2) ^x , 0,053 ^s	223000000 ^c , 2,509(8) ^x , 2,562(8) ^x , 2,66(8) ^s
$2 \ ^3S_1 - 2 \ ^3P_1^o$	882,05*	4,12025(-2)*	1,17748(8)*
	0,31 ^b	0,048 ^s , 1,578(-2) ^x , 1,575(-2) ^x	2,02(8) ^s , 1,895(8) ^x , 1,911(8) ^x
$2 \ ^3S_1 - 2 \ ^3P_0^o$	904,74*	1,34964(-2)*	1,09979(8)*
	0,21 ^b , 705,69 ^c , 75,644 ⁿ , 756,35 ^q , 762,63 ^x , 760,21 ^x	0,01670000 ^c , 0,047 ^s , 5,180(-3) ^x , 5,152(-3) ^x	223000000 ^c , 1,89(8) ^s , 1,782(8) ^x , 1,784(8) ^x
$2 \ ^1S_0 - 2 \ ^1P_1^o$	1355,20*	2,67541(-2)*	3,23896(7)*
	991,470 ^d , 0,95 ^b , 991,38 ^c , 991,47 ^c	0,01240000 ^c , 0,037 ^s , 3,721(-2) ^x , 3,592(-2) ^x , 0,037 ⁱ	83900000,0 ^c , 8,61(7) ^s , 8,974(7) ^x , 8,141(7) ^x
$2 \ ^1S_0 - 2 \ ^3P_1^o$	3045,37*	9,66818(-5)*	6,95351(4)*
		7,097(-6) ^x , 9,056(-6) ^x	2,90(3) ^s , 7,675(2) ^x , 1,779(3) ^x

^a Atomic Line List v.2.04 [39]^b NIST Atomic Spectra Database (nm biriminde)[40]^c CAMBD Atomic Spectra[41]^d Kelly Atomic Line Database [42]^f Walker ve Ruge [7]^h Johnson ve Lin (f değeri) [11]ⁱ Lin ve diğerleri (f değeri) [13]^j Boiko ve diğerleri [14]^k Drake [15]^m Livingston ve diğerleri (nm biriminde) [17]

- ^a DeSerio ve diğeri (nm biriminde)[18]
^r Aglitsky ve diğeri (mÅ biriminde) [21]
^s Lin ve diğeri (f değeri) [22]
^w Kimura ve diğeri (f değeri)[28]
^x Kingston ve diğeri (f değeri)[29]
^q Howie ve diğeri [30]

5.1.3. S XVI'e ait seviye enerjileri dalga boyları, ağırlıklı osilator şiddetleri ve geçiş olasılıkları

Lityum benzeri Kükürt'e ait çift parite için $1s^2$, $1s^22s$, $1s^23s$, $1s^23d$, $1s^24d$; tek parite için $1s^22p$, $1s^23p$, $1s^24p$, $1s^24f$, $1s^25f$ konfigürasyonları alındı. Çift pariteli en baskın konfigürasyon 0,9983086 karışım katsayısı ile $1s^22s$ halidir. Bunu -0,0514307 ile $1s^23s$, -0,0514307 ile $1s^24s$, -0,0139698 ile $1s^25s$ takip eder. Tek pariteli konfigürasyonlar baskınlık derecelerine göre 0,9999420 ile $1s^22p$, -0,0087539 ile 4p, -0,0053773 ile 5p, 0,0032264 ile 3p şeklinde sıralanırlar. Bu konfigürasyon seçimi ile S XIV için elde edilen seviye ve geçiş enerjileri Tablo 5.5'te, dalga boyları, ağırlıklı osilator şiddetleri ve geçiş olasılıkları Tablo 5.6'da sunuldu. Tablo 5.5'te sunulan seviye enerjileri $1s^22s \ ^2S_{1/2}$ seviyesine göre verildi.

Tablo 5.5 Lityum benzeri Kükürt'ün $1s^22s$, $1s^22p$, $1s^23s$, $1s^23p$, $1s^23d$, $1s^24s$, $1s^24p$, $1s^24d$, $1s^24f$, $1s^25s$, $1s^25p$, $1s^25f$ seviye enerjileri ve bu seviyeler arasındaki geçiş enerjileri (cm^{-1}).

Konfigürasyonlar	Enerjiler		
	Alt Seviye	Üst seviye	Geçiş
$2^2S_{1/2}-3^2P_{3/2}^o$	0,00* 0,00 ^a , 0,00 ^b , 0,00 ^d , 272,04448862 ^a	25802198,58* 3286550,00 ^a , 3286550 ^b , 3287000,00 ^d	25802198,58*
$2^2S_{1/2}-3^2P_{1/2}^o$	0,00* 0,00 ^a , 0,00 ^b , 0,00 ^d	25448202,47* 3282020,00 ^a , 3282020 ^b , 3282640,00 ^d , 328,1904(4) ^p	25448202,47*
$3^2S_{1/2}-3^2P_{3/2}^o$	3244448,90* 3220100,00 ^a , 321,9983(4) ^p	25802198,58* 3286550,00 ^a	22557749,68*
$3^2D_{5/2}-3^2P_{3/2}^o$	3310046,50* 3286550,00 ^a , 330,9471(4) ^p	25802198,58* 3310680,00 ^a	22492152,08*
$3^2D_{3/2}-3^2P_{3/2}^o$	3308669,22* 3286550,00 ^a	25802198,58* 3309260,00 ^a	22493529,36*
$3^2S_{1/2}-3^2P_{1/2}^o$	3244448,90* 3220100,00 ^a	25448202,47* 3282020,00 ^a	22203753,57*
$3^2D_{3/2}-3^2P_{1/2}^o$	3308669,22* 3282020,00 ^a , 224330,00 ^d	25448202,47* 3309260,00 ^a , 3307840,00 ^d	22139533,25*
$4^2D_{5/2}-3^2P_{3/2}^o$	4356163,61* 3286550,00 ^a , 3286550 ^b	25802198,58* 4357210,00 ^a , 4357210 ^b	21446034,97*
$4^2D_{3/2}-3^2P_{3/2}^o$	4355587,28* 3286550,00 ^a	25802198,58* 4356570,00 ^a	21446611,30*
$4^2S_{1/2}-3^2P_{3/2}^o$	4329762,77* 3286550,00 ^a , 3286550 ^b	25802198,58* 4319700,00 ^a , 4319700 ^b	21472435,81*
$4^2D_{3/2}-3^2P_{1/2}^o$	4355587,28* 3282020,00 ^a , 3282020 ^b	25448202,47* 4356570,00 ^a , 4356570 ^b	21092615,19*
$4^2S_{1/2}-3^2P_{1/2}^o$	4329762,77* 3282020,00 ^a , 3282020 ^b	25448202,47* 4319700,00 ^a , 4319700 ^b	21118439,7
$5^2S_{1/2}-3^2P_{3/2}^o$	4827762,56* 3286550,00 ^a	25802198,58* 4822550,00 ^a	20974436,02*
$5^2S_{1/2}-3^2P_{1/2}^o$	4827762,56* 3282020,00 ^a	25448202,47* 4822550,00 ^a	20620439,91*
$2^2S_{1/2}-5^2P_{3/2}^o$	0,00*	4835480,17*	4835480,17*
$2^2S_{1/2}-5^2P_{1/2}^o$	0,00*	4834572,97*	4834572,97*

Tablo 5.5'in devamı

Konfigürasyonlar	Alt Seviye	Energiler Üst seviye	Geçiş
$2^2 P_{1/2}^o - 5^2 S_{1/2}$	224148,08*	4827762,56*	4603614,48*
	224366,00 ^a , 224366 ^b , 271036907 ^a , 22,4354(4) ^p	4822550,00 ^a , 4822550 ^b	
$2^2 P_{3/2}^o - 5^2 S_{1/2}$	239257,20*	4827762,56*	4588505,36*
	239429,00 ^a , 239429 ^b	4822550,00 ^a , 4822550 ^b	
$2^2 S_{1/2} - 4^2 P_{3/2}^o$	0,00*	4345984,97*	4345984,97*
	0,00 ^a , 0,00 ^b , 0,00 ^d	4346860,00 ^a , 4346860 ^b , 4341800,00 ^d	
$2^2 S_{1/2} - 4^2 P_{1/2}^o$	0,00*	4344097,64*	4344097,64*
	0,00 ^a , 0,00 ^b	4344980,00 ^a , 4344980 ^b	
$2^2 P_{1/2}^o - 4^2 D_{3/2}$	224148,08*	4355587,28*	4131439,20*
	224366,00 ^a	4356570,00 ^a	
$2^2 P_{3/2}^o - 4^2 D_{3/2}$	239257,20*	4355587,28*	4116330,08*
	239429,00 ^a	4356570,00 ^a	
$2^2 P_{3/2}^o - 4^2 D_{5/2}$	239257,20*	4356163,61*	4116906,41*
	239429,00 ^a , 239429 ^b , 239460,00 ^d	4357210,00 ^a , 4357210 ^b , 4361500,00 ^d	
$2^2 P_{1/2}^o - 4^2 S_{1/2}$	224148,08*	4329762,77*	4105614,69*
	224366,00 ^a , 224366 ^b	4319700,00 ^a , 4319700 ^b	
$2^2 P_{3/2}^o - 4^2 S_{1/2}$	239257,20*	4329762,77*	4090505,57*
	239429,00 ^a , 239429 ^b , 239460,00 ^d	4319700,00 ^a , 4319700 ^b , 4332800,00 ^d	
$2^2 P_{1/2}^o - 3^2 D_{3/2}$	224148,08*	3308669,22*	3084521,14*
	224366,00 ^a , 224366 ^b	3309260,00 ^a , 3309260 ^b	
$2^2 P_{3/2}^o - 3^2 D_{5/2}$	239257,20*	3310046,50*	3070789,30*
	239429,00 ^a , 239429 ^b , 239460,00 ^d	3310680,00 ^a , 3310680 ^b , 3311070,00 ^d	
$2^2 P_{3/2}^o - 3^2 D_{3/2}$	239257,20*	3308669,22*	3069412,02*
	239429,00 ^a	3309260,00 ^a	
$2^2 P_{1/2}^o - 3^2 S_{1/2}$	224148,08*	3244448,90*	3020300,82*
	224366,00 ^a , 224366 ^b , 224330,00 ^d	3220100,00 ^a , 3220100 ^b , 3231100,00 ^d	
$2^2 P_{3/2}^o - 3^2 S_{1/2}$	239257,20*	3244448,90*	3005191,70*
	239429,00 ^a , 239429 ^b , 239460,00 ^d	3220100,00 ^a , 3220100 ^b , 3231100,00 ^d	
$3^2 S_{1/2} - 5^2 P_{3/2}^o$	3244448,90*	4835480,17*	1591031,27*
$3^2 S_{1/2} - 5^2 P_{1/2}^o$	3244448,90*	4834572,97*	1590124,07*
$3^2 D_{3/2} - 5^2 F_{5/2}^o$	3308669,22*	4840753,35*	1532084,13*
	3309260,00 ^a , 3309260 ^b	4841730,00 ^a , 4841730 ^b	
$3^2 D_{5/2} - 5^2 F_{7/2}^o$	3310046,50*	4840902,74*	1530856,24*
	3310680,00 ^a , 3310680 ^b	4841880,00 ^a , 4841880 ^b	

Tablo 5.5'in devamı

Konfigürasyonlar	Alt Seviye	Energiler Üst seviye	Geçiş
$3^2 D_{5/2} - 5^2 F_{5/2}^o$	3310046,50*	4840753,35*	1530706,85*
	3310680,00 ^a	4841730,00 ^a	
$3^2 D_{3/2} - 5^2 P_{3/2}^o$	3308669,22*	4835480,17*	1526810,95*
$3^2 D_{5/2} - 5^2 P_{3/2}^o$	3310046,50*	4835480,17*	1525433,67*
$3^2 S_{1/2} - 4^2 P_{3/2}^o$	3244448,90*	4345984,97*	1101536,07*
	3220100,00 ^a , 3220100 ^b	4346860,00 ^a , 4346860 ^b	
$3^2 S_{1/2} - 4^2 P_{1/2}^o$	3244448,90*	4344097,64*	1099648,74*
	3220100,00 ^a , 3220100 ^b	4344980,00 ^a , 4344980 ^b	
$3^2 D_{3/2} - 4^2 F_{5/2}^o$	3308669,22*	4356627,17*	1047957,95*
	3309260,00 ^a , 3309260 ^b	4357630,00 ^a , 4357630 ^b	
$3^2 D_{5/2} - 4^2 F_{7/2}^o$	3310046,50*	4356919,59*	1046873,09*
	3310680,00 ^a , 3310680 ^b	4357930,00 ^a , 4357930 ^b	
$3^2 D_{5/2} - 4^2 F_{5/2}^o$	3310046,50*	4356627,17*	1046580,67*
	3310680,00 ^a	4357630,00 ^a	
$3^2 D_{3/2} - 4^2 P_{3/2}^o$	3308669,22*	4345984,97*	1037315,75*
	3309260,00 ^a	4346860,00 ^a	
$3^2 D_{5/2} - 4^2 P_{3/2}^o$	3310046,50*	4345984,97*	1035938,47*
	3310680,00 ^a	4346860,00 ^a	
$3^2 D_{3/2} - 4^2 P_{1/2}^o$	3308669,22*	4344097,64*	1035428,42*
	3309260,00 ^a	4344980,00 ^a	
$4^2 S_{1/2} - 5^2 P_{3/2}^o$	4329762,77*	4835480,17*	505717,40*
$4^2 S_{1/2} - 5^2 P_{1/2}^o$	4329762,77*	4834572,97*	504810,20*
$4^2 D_{3/2} - 5^2 F_{5/2}^o$	4355587,28*	4840753,35*	485166,07*
	4356570,00 ^a	4841730,00 ^a	
$4^2 D_{5/2} - 5^2 F_{7/2}^o$	4356163,61*	4840902,74*	484739,13*
	4357210,00 ^a	4841880,00 ^a	
$4^2 D_{5/2} - 5^2 F_{5/2}^o$	4356163,61*	4840753,35*	484589,74*
	4357210,00 ^a	4841730,00 ^a	
$4^2 P_{1/2}^o - 5^2 S_{1/2}$	4563572,64*	4827762,56*	264189,92*
	4344980,00 ^a	4822550,00 ^a	
$4^2 P_{3/2}^o - 5^2 S_{1/2}$	4345984,97*	4827762,56*	481777,59*
	4346860,00 ^a	4822550,00 ^a	
$4^2 D_{3/2} - 5^2 P_{3/2}^o$	4355587,28*	4835480,17*	479892,89*
$4^2 D_{5/2} - 5^2 P_{3/2}^o$	4356163,61*	4835480,17*	479316,56*
$4^2 D_{3/2} - 5^2 P_{1/2}^o$	4355587,28*	4834572,97*	478985,69*
$2^2 S_{1/2} - 2^2 P_{3/2}^o$	0,00*	239257,20*	239257,20*
	0,00 ^a , 0,00 ^b , 0,00 ^d	239429,00 ^a , 239429 ^b , 239460,00 ^d	239423 ¹ , 15182 ^p

Tablo 5.5'in devamı

Konfigürasyonlar	Alt Seviye	Enerjiler Üst seviye	Geçiş
$2^2S_{1/2} - 2^2P_{1/2}^o$	0,00*	224148,08*	224148,08*
	0,00 ^a , 0,00 ^b , 0,00 ^d	224366,00 ^a , 224366 ^b , 224330,00 ^d	224361 ^l , 224354 ^p
$4^2S_{1/2} - 4^2P_{3/2}^o$	4329762,77*	4345984,97*	16222,20*
	4319700,00 ^a	4346860,00 ^a	
$4^2S_{1/2} - 4^2P_{1/2}^o$	4329762,77*	4344097,64*	14334,87*
	4319700,00 ^a	4344980,00 ^a	
$4^2P_{1/2}^o - 4^2D_{3/2}$	4344097,64*	4355587,28*	11489,64*
	4344980,00 ^a	4356570,00 ^a	
$4^2P_{3/2}^o - 4^2D_{5/2}$	4345984,97*	4356163,61*	10178,64*
	4346860,00 ^a	4357210,00 ^a	
$4^2P_{3/2}^o - 4^2D_{3/2}$	4345984,97*	4355587,28*	9602,31*
	4346860,00 ^a	4356570,00 ^a	
$5^2S_{1/2} - 5^2P_{3/2}^o$	4827762,56*	4835480,17*	7717,61*
$5^2S_{1/2} - 5^2P_{1/2}^o$	4827762,56*	4834572,97*	6810,41*
$4^2D_{3/2} - 4^2F_{5/2}^o$	4355587,28*	4356627,17*	1039,89*
$4^2D_{5/2} - 4^2F_{7/2}^o$	4356163,61*	4356919,59*	755,98*
$4^2D_{5/2} - 4^2F_{5/2}^o$	4356163,61*	4356627,17*	463,56*

^a Atomic Line List v.2.04 [39]^b NIST Atomic Spectra Database [40]^d Kelly Atomic Line Database [41]^l Berry ve diğerleri [16]^p Vainshtein ve Safronova [20]^a Yan ve diğerleri (a.u.) [35]

Tablo 5.6 Lityum benzeri Kükürt'ün $1s^22s$, $1s^22p$, $1s^23s$, $1s^23p$, $1s^23d$, $1s^24s$, $1s^24p$, $1s^24d$, $1s^24f$, $1s^25s$, $1s^25p$, $1s^25f$ seviyeleri arasındaki geçişler için λ dalga boyları (Å), gf ağırlıklı osilator şiddetleri ve Aki geçiş olasılıkları (s^{-1}).

Konfigürasyonlar	λ	gf	Aki	
$2 \ ^2S_{1/2} - 3 \ ^2P_{3/2}^o$	3,88*	2,17001(0)*	2,40903(14)*	
	30,4270 ^a , 0,427 ^b ,	0,11600000 ^c ,	8,54(11) ^a , 0,8329(12) ^c ,	
	30,423000 ^c ,	0,11700000 ^c ,	0,8450(12) ^c ,	
	30,428 ^c ,	0,11500000 ^c	0,8300(12) ^c , 0,8350(12) ^c	
	30,428600 ^c ,			
	30,429 ^c , 30,43 ^c ,			
	30,430500 ^c ,			
	30,4402 ^c , 30,423 ^d ,			
	30,429 ^p			
	$2 \ ^2S_{1/2} - 3 \ ^2P_{1/2}^o$	3,93*	1,08013(0)*	2,33284(14)*
30,4690 ^a , 0,469 ^b ,		0,11600000 ^c ,	8,51(11) ^a , 0,8350(12) ^c ,	
30,4402 ^c , 30,463 ^c ,		0,11700000 ^c ,	0,8399(12) ^c , 0,8389(12) ^c	
30,470000 ^c ,		0,3859(12) ^c , 0,11900000 ^c		
30,470100 ^c ,				
30,471 ^c , 30,4719 ^c ,				
30,472 ^c , 30,463 ^d ,				
30,470 ^p				
$3 \ ^2S_{1/2} - 3 \ ^2P_{3/2}^o$		4,43*	1,64287(0)*	1,39399(14)*
		1504,9 ^a		1,59(8) ^a
$3 \ ^2D_{5/2} - 3 \ ^2P_{3/2}^o$	4,45*	5,53206(0)*	4,66675(14)*	
	4144,0 ^a		5,91(6) ^a	
$3 \ ^2D_{3/2} - 3 \ ^2P_{3/2}^o$	4,45*	6,13816(-1)*	5,17868(13)*	
	4403,0 ^a		8,21(5) ^a	
$3 \ ^2S_{1/2} - 3 \ ^2P_{1/2}^o$	4,50*	8,15670(-1)*	1,34111(14)*	
	1615,0 ^a		1,29(8) ^a	
$3 \ ^2D_{3/2} - 3 \ ^2P_{1/2}^o$	4,52*	3,04821(0)*	4,98284(14)*	
	3671,0 ^a , 32,430 ^d		7,08(6) ^a	
$4 \ ^2D_{5/2} - 3 \ ^2P_{3/2}^o$	4,66*	5,08513(0)*	3,89997(14)*	
	93,400 ^a , 0,400 ^b ,	0,35400000 ^c ,	2,70(11) ^a , 0,2720(12) ^c ,	
	93,2809 ^c ,	0,34900000 ^c ,	0,2679(12) ^c ,	
	93,3332994 ^c ,	0,36000000 ^c ,	0,2750(12) ^c , 0,2710(12) ^c	
	93,388 ^c , 93,3896 ^c ,	0,35500000 ^c		
	93,394 ^c , 93,4 ^c			
$4 \ ^2D_{3/2} - 3 \ ^2P_{3/2}^o$	4,66*	5,65883(-1)*	4,34020(13)*	
	93,456 ^a , 93,3853 ^c ,	0,05840000 ^c ,	4,48(10) ^a , 0,4470(11) ^c ,	
	93,4398 ^c , 93,4407 ^c	0,06010000 ^c ,	0,4590(11) ^c , 0,4529(11) ^c	
		0,05930000 ^c		
$4 \ ^2S_{1/2} - 3 \ ^2P_{3/2}^o$	4,66*	3,51739(0)*	2,70426(14)*	
	96,791 ^a , 0,791 ^b ,	0,09180000 ^c ,	6,40(10) ^a , 0,6550(11) ^c ,	
	96,6436995 ^c ,	0,09190000 ^c ,	0,6550(11) ^c ,	
	96,7565 ^c , 96,7583 ^c ,	0,09760000 ^c ,	0,6949(11) ^c , 0,6619(11) ^c	
	96,8465 ^c	0,09310000 ^c		

Tablo 5.6'nin devamı

Konfigürasyonlar	λ	gf	Aki
$4 \ ^2D_{3/2} - 3 \ ^2P_{1/2}^o$	4,74*	2,81545(0)*	4,17738(14)*
	93,062 ^a , 0,062 ^b ,	0,28900000 ^c ,	2,27(11) ^a , 0,2230(12) ^c ,
	92,997000 ^c ,	0,29800000 ^c ,	0,2299(12) ^c ,
	93,046 ^c ,	0,29400000 ^c ,	0,2259(12) ^c , 0,4529(11) ^c
	93,051300 ^c ,	0,29499998 ^c ,	
	93,062000 ^c ,	0,05900000 ^c	
	93,080000 ^c ,		
93,2809 ^c			
$4 \ ^2S_{1/2} - 3 \ ^2P_{1/2}^o$	4,74*	1,75083(0)*	2,60413(14)*
	96,369 ^a , 0,369 ^b ,	0,04780000 ^c ,	3,24(10) ^a , 0,3429(11) ^c ,
	96,3361 ^c ,	0,04480000 ^c ,	0,3220(11) ^c ,
	96,339800 ^c ,	0,04560000 ^c ,	0,3269(11) ^c , 0,3280(11) ^c
	96,4282 ^c ,	0,04590000 ^c	
	96,6436995 ^c		
$5 \ ^2S_{1/2} - 3 \ ^2P_{3/2}^o$	4,77*	5,02902(0)*	3,68918(14)*
	65,104 ^a ,	0,01990000 ^c ,	0,08(10) ^a , 0,3129(11) ^c ,
	65,0888995 ^c ,	0,02020000 ^c	0,3139(11) ^c , 0,3179(11) ^c
	65,0356 ^c ,		
65,1213994 ^c			
$5 \ ^2S_{1/2} - 3 \ ^2P_{1/2}^o$	4,85*	2,50352(0)*	3,55012(14)*
	64,913 ^a ,	0,00973000 ^c ,	1,56(10) ^a , 0,1539(11) ^c ,
	64,900100 ^c ,	0,00993000 ^c ,	0,1569(11) ^c , 0,1569(11) ^c
	64,932 ^c , 65,0356 ^c	0,00995000 ^c	
$2 \ ^2S_{1/2} - 5 \ ^2P_{3/2}^o$	20,68*	4,85470(-2)*	1,89281(11)*
	20,677100 ^c ,	0,01230000 ^c ,	0,1920(12) ^c , 0,1939(12) ^c
	20,677300 ^c	0,01250000 ^c ,	
	0,01240000 ^c		
$2 \ ^2S_{1/2} - 5 \ ^2P_{1/2}^o$	20,68*	2,44164(-2)*	1,90324(11)*
	20,677300 ^c ,	0,01250000 ^c ,	0,1939(12) ^c ,
	20,6814 ^c , 20,6812 ^c	0,01240000 ^c	0,1949(12) ^c , 0,1929(12) ^c
$2 \ ^2P_{1/2}^o - 5 \ ^2S_{1/2}$	21,72*	2,28033(-3)*	1,61172(10)*
	21,74772 ^a , 0,748 ^b ,	0,00159000 ^c ,	2,31(10) ^a , 0,2240(11) ^c ,
	21,7478 ^c ,	0,00165000 ^c	0,2329(11) ^c , 0,2320(11) ^c
	21,750400 ^c ,		
	21,7942 ^c		
$2 \ ^2P_{3/2}^o - 5 \ ^2S_{1/2}$	21,79*	5,16545(-3)*	3,62699(10)*
	21,8192 ^a , 0,819 ^b ,	0,00331000 ^c ,	4,58(10) ^a , 0,4650(11) ^c ,
	21,7942 ^c ,	0,00324000 ^c ,	0,4539(11) ^c , 0,4709(11) ^c
	21,819300 ^c ,	0,00336000 ^c	
	21,822400 ^c		

Tablo 5.6'nin devamı

Konfigürasyonlar	λ	gf	Aki
$2 \ ^2S_{1/2} - 4 \ ^2P_{3/2}^o$	23,01*	1,24215(-1)*	3,91216(11)*
	23,0051 ^a , 0,005 ^b ,	0,03040000 ^c ,	3,80(11)a, 0,3829(12) ^c ,
	23,005000 ^c ,	0,02950000 ^c ,	0,3710(12) ^c ,
	23,005100 ^c ,	0,02970000 ^c ,	0,3739(12) ^c , 0,3750(12) ^c
	23,005200 ^c ,	0,02970000 ^c	
	23,0076 ^c ,		
	23,040000 ^c ,		
	23,040 ^d , 23,005 ^p		
$2 \ ^2S_{1/2} - 4 \ ^2P_{1/2}^o$	23,02*	6,31442(-2)*	3,97400(11)*
	23,0151 ^a , 0,015 ^b ,	0,02970000 ^c ,	3,79(11)a, 0,3750(12) ^c ,
	23,0076 ^c , 23,015 ^c ,	0,03050000 ^c ,	0,3840(12) ^c ,
	23,0151 ^c , 23,0152 ^c ,	0,02970000 ^c ,	0,3739(12) ^c , 0,3759(12) ^c
	22,98 ^c , 23,015 ^p	0,02990000 ^c	
$2 \ ^2P_{1/2}^o - 4 \ ^2D_{3/2}$	24,21*	2,37366(-1)*	6,75595(11)*
	24,2002 ^a , 24,1976 ^c ,	0,06140000 ^c ,	6,99(11) ^a , 0,6989(12) ^c ,
	24,200000 ^c ,	0,06190000 ^c ,	0,7059(12) ^c , 0,7009(12) ^c
	24,2554 ^c , 24,28 ^c ,	0,06190000 ^c	
	24,200 ^p		
$2 \ ^2P_{3/2}^o - 4 \ ^2D_{3/2}$	24,29*	4,82663(-2)*	1,36373(11)*
	24,2887 ^a , 24,2554 ^c ,	0,01240000 ^c ,	1,38(11) ^a , 0,1399(12) ^c ,
	24,2861 ^c , 24,2893 ^c ,	0,01220000 ^c	0,1379(12) ^c , 0,1369(12) ^c
	24,2895 ^c		
$2 \ ^2P_{3/2}^o - 4 \ ^2D_{5/2}$	24,29*	4,36226(-1)*	8,21917(11)*
	24,2849 ^a , 0,285 ^b ,	0,07420000 ^c ,	8,30(11) ^a , 0,8420(12) ^c ,
	24,2554 ^c , 24,26 ^c ,	0,07370001 ^c ,	0,8340(12) ^c ,
	24,28 ^c , 24,282600 ^c ,	0,07280001 ^c	0,8389(12) ^c , 0,8239(12) ^c
	24,285800 ^c ,		
	24,286 ^c , 24,260 ^d ,		
	24,286 ^p		
$2 \ ^2P_{1/2}^o - 4 \ ^2S_{1/2}$	24,36*	6,80404(-3)*	3,82489(10)*
	24,4180 ^a , 0,418 ^b ,	0,00450000 ^c ,	4,68(10) ^a , 0,5039(11) ^c ,
	24,417900 ^c ,	0,00407000 ^c ,	0,4549(11) ^c ,
	24,418100 ^c , 24,42 ^c ,	0,00421000 ^c ,	0,4699(11) ^c , 0,4709(11) ^c
	24,422500 ^c ,	0,00423000 ^c	
	24,4768 ^c , 24,422 ^p		
$2 \ ^2P_{3/2}^o - 4 \ ^2S_{1/2}$	24,45*	1,46819(-2)*	8,19281(10)*
	24,5082 ^a , 0,508 ^b ,	0,00846000 ^c ,	9,25(10) ^a , 0,9419(11) ^c ,
	24,4768 ^c , 24,42 ^c ,	0,00917000 ^c ,	0,1020(12) ^c , 0,9240(11) ^c ,
	24,43 ^c , 24,508000 ^c ,	0,00832000 ^c ,	0,9510(11) ^c
	24,508200 ^c ,	0,00857000 ^c	
	24,5134 ^c , 24,430 ^d ,		
	24,513 ^p		
$2 \ ^2P_{1/2}^o - 3 \ ^2D_{3/2}$	32,42*	1,35851(0)*	2,15527(12)*
	32,4160 ^a , 0,416 ^b ,	0,33600000 ^c ,	2,15(12) ^a , 0,2129(13) ^c ,
	32,4031 ^c ,	0,34200000 ^c	0,2169(13) ^c , 0,2160(13) ^c
	32,407000 ^c ,		
	32,413000 ^c ,		
	32,413700 ^c ,		
	32,414 ^c , 32,43 ^c ,		
	32,506800 ^c		

Tablo 5.6'nın devamı

Konfigürasyonlar	λ	gf	Aki
$2 \ ^2P_{3/2}^o - 3 \ ^2D_{5/2}$	32,57*	2,43715(0)*	2,55480(12)*
	32,5600 ^a , 0,560 ^b ,	0,41100000 ^c ,	2,55(12) ^a , 0,2590(13) ^c ,
	32,506800 ^c ,	0,40500000 ^c	0,2550(13) ^c
	32,547200 ^c ,		
	32,550000 ^c ,		
$2 \ ^2P_{3/2}^o - 3 \ ^2D_{3/2}$	32,58*	2,70819(-1)*	4,25457(11)*
	32,5751 ^a ,	0,06840001 ^c ,	4,24(11) ^a , 0,4320(12) ^c ,
	32,506800 ^c ,	0,06740000 ^c ,	0,4239(12) ^c , 0,4309(12) ^c
	32,562000 ^c ,	0,06860000 ^c ,	
	32,573 ^c , 32,574000 ^c	0,06850000 ^c	
$2 \ ^2P_{1/2}^o - 3 \ ^2S_{1/2}$	33,11*	3,75767(-2)*	1,14318(11)*
	33,3808 ^a , 0,381 ^b ,	0,01940000 ^c ,	1,18(11) ^a , 0,1160(12) ^c ,
	33,259 ^c , 33,259 ^c ,	0,02040000 ^c ,	0,1220(12) ^c ,
	33,381 ^c ,	0,01970000 ^c ,	0,1180(12) ^c , 0,1189(12) ^c
	33,381400 ^c ,	0,02010000 ^c	
	33,382000 ^c ,		
	33,384 ^c , 33,4956 ^c ,		
33,259 ^d , 33,382 ^p			
$2 \ ^2P_{3/2}^o - 3 \ ^2S_{1/2}$	33,28*	7,44121(-2)*	2,24121(11)*
	33,5495 ^a , 0,549 ^b ,	0,04020000 ^c ,	2,33(11) ^a , 0,2390(12) ^c ,
	33,4956 ^c , 33,426 ^c ,	0,03980000 ^c ,	0,2360(12) ^c ,
	33,549600 ^c ,	0,04170000 ^c ,	0,2470(12) ^c , 0,2390(12) ^c
	33,550000 ^c ,	0,04040000 ^c	
	33,552 ^c , 33,426 ^d ,		
33,552 ^p			
$3 \ ^2S_{1/2} - 5 \ ^2P_{3/2}^o$	62,85*	9,81285(-2)*	4,14208(10)*
	61,8661 ^c , 61,8748 ^c ,	0,03420000 ^c ,	0,5960(11) ^c ,
	61,871700 ^c	0,03400000 ^c ,	0,5929(11) ^c , 0,5939(11) ^c
$3 \ ^2S_{1/2} - 5 \ ^2P_{1/2}^o$	62,89*	4,82285(-2)*	4,06688(10)*
	61,8661 ^c ,	0,03420000 ^c ,	0,5960(11) ^c , 0,5989(11) ^c
	33,546000 ^c ,	0,03440000 ^c	
	61,9087 ^c ,		
	61,911500 ^c		
$3 \ ^2D_{3/2} - 5 \ ^2F_{5/2}^o$	65,27*	6,34852(-1)*	1,65658(11)*
	65,254 ^a , 0,254 ^b		1,64(11) ^a
$3 \ ^2D_{5/2} - 5 \ ^2F_{7/2}^o$	65,32*	9,02488(-1)*	1,76338(11)*
	65,308 ^a , 0,308 ^b		1,75(11) ^a
$3 \ ^2D_{5/2} - 5 \ ^2F_{5/2}^o$	65,33*	4,50230(-2)*	1,17271(10)*
	65,315 ^a		1,17(10) ^a
$3 \ ^2D_{3/2} - 5 \ ^2P_{3/2}^o$	65,50*	1,20807(-3)*	4,69598(8)*
$3 \ ^2D_{3/2} - 5 \ ^2P_{1/2}^o$	65,54*	580364(-3)*	4,50661(9)*
	65,5396996 ^c ,	0,00434000 ^c ,	6740000000 ^c ,
	65,549 ^c , 65,5824 ^c	0,00429000 ^c ,	6660000000 ^c ,
		0,00448000 ^c	6940000000 ^c

Tablo 5.6'nın devamı

Konfigürasyonlar	λ	gf	Aki
$3 \ ^2D_{5/2} - 5 \ ^2P_{3/2}^o$	65,56*	1,07386(-2)*	4,16678(9)*
	65,5578 ^c , 65,549 ^c , 65,6008996 ^c	0,00384000 ^c , 0,00386000 ^c , 0,00395000 ^c	5960000000 ^c , 5990000000 ^c , 6120000000 ^c
$3 \ ^2S_{1/2} - 4 \ ^2P_{3/2}^o$	90,78*	4,75116(-1)*	9,61308(10)*
	88,750 ^a , 0,750 ^b , 88,7415 ^c , 88,744 ^c , 88,745200 ^c , 88,7497 ^c , 88,766200 ^c	0,12600000 ^c , 0,13000000 ^c	1,09(11) ^a , 0,1069(12) ^c , 0,1100(12) ^c , 0,1059(12) ^c
$3 \ ^2S_{1/2} - 4 \ ^2P_{1/2}^o$	90,94*	2,37290(-1)*	9,56935(10)*
	88,898 ^a , 0,898 ^b , 88,766200 ^c , 88,884 ^c , 88,8905 ^c , 88,894200 ^c , 88,8979 ^c	0,12800002 ^c , 0,13200000 ^c	1,09(11) ^a , 0,1080(12) ^c , 0,1120(12) ^c
$3 \ ^2D_{3/2} - 4 \ ^2F_{5/2}^o$	95,43*	4,05699(0)*	4,95297(11)*
	95,386 ^a , 0,386 ^b , 95,386000 ^c , 95,4 ^c		4,97(11) ^a
$3 \ ^2D_{5/2} - 4 \ ^2F_{7/2}^o$	95,52*	5,80175(0)*	5,30130(11)*
	95,488 ^a , 0,488 ^b , 95,488 ^c , 95,5 ^c		5,31(11) ^a
$3 \ ^2D_{5/2} - 4 \ ^2F_{5/2}^o$	95,55*	2,90073(-1)*	3,53205(10)*
	95,516 ^a		3,54(10) ^a
$3 \ ^2D_{3/2} - 4 \ ^2P_{3/2}^o$	96,40*	6,41161(-3)*	1,15041(9)*
	96,376 ^a , 96,3931993 ^c , 96,3966 ^c , 96,492 ^c , 96,5494995 ^c	0,00231000 ^c , 0,00215000 ^c , 0,00220000 ^c , 0,00218000 ^c	1,57(9) ^a , 1660000000 ^c , 1540000000 ^c , 1580000000 ^c , 1560000000 ^c
$3 \ ^2D_{5/2} - 4 \ ^2P_{3/2}^o$	96,53*	5,90859(-2)*	1,05735(10)*
	96,508 ^a , 96,5246 ^c , 96,5257 ^c , 96,5494995 ^c , 96,6213994 ^c	0,02100000 ^c , 0,01950000 ^c , 0,01960000 ^c , 0,02000000 ^c	1,41(10) ^a , 0,1500(11) ^c , 0,1389(11) ^c , 0,1410(11) ^c , 0,1430(11) ^c
$3 \ ^2D_{3/2} - 4 \ ^2P_{1/2}^o$	96,58*	3,16329(-2)*	1,13103(10)*
	96,551 ^a , 96,5494995 ^c , 96,5691 ^c , 96,5725 ^c , 96,6671994 ^c	0,02180000 ^c , 0,02370000 ^c , 0,02210000 ^c , 0,02270000 ^c	1,56(10) ^a , 0,1560(11) ^c , 0,1700(11) ^c , 0,1580(11) ^c , 0,1620(11) ^c
$4 \ ^2S_{1/2} - 5 \ ^2P_{3/2}^o$	197,74*	5,66016(-1)*	2,41385(10)*
$4 \ ^2S_{1/2} - 5 \ ^2P_{1/2}^o$	198,10*	2,87364(-1)*	2,44222(10)*
$4 \ ^2D_{3/2} - 5 \ ^2F_{5/2}^o$	206,12*	3,57253(0)*	9,34825(10)*
	206,12 ^a		9,28(10) ^a
$4 \ ^2D_{5/2} - 5 \ ^2F_{7/2}^o$	206,30*	5,09687(0)*	9,98517(10)*
	206,33 ^a		9,94(10) ^a

Tablo 5.6'nın devamı

Konfigürasyonlar	λ	gf	Aki
4 $^2D_{5/2}$ -5 $^2F_{5/2}^o$	206,36*	2,54967(-1)*	6,65589(9)*
	206,39 ^a		6,63(9) ^a
4 $^2P_{1/2}^o$ -5 $^2S_{1/2}$	206,76*	1,10512(-1)*	8,62171(9)*
	209,39 ^a		1,11(10) ^a
4 $^2P_{3/2}^o$ -5 $^2S_{1/2}$	207,57*	2,29180(-1)*	1,77405(10)*
	210,22 ^a		2,19(10) ^a
4 $^2D_{3/2}$ -5 $^2P_{3/2}^o$	208,38*	2,26824(-2)*	8,71049(8)*
4 $^2D_{5/2}$ -5 $^2P_{3/2}^o$	208,63*	2,03935(-1)*	7,81272(9)*
4 $^2D_{3/2}$ -5 $^2P_{1/2}^o$	208,78*	1,16946(-1)*	8,94799(9)*
2 $^2S_{1/2}$ -2 $^2P_{3/2}^o$	417,97*	1,27946(-1)*	1,22130(9)*
	417,660 ^a , 0,66 ^b , 417,610 ^d , 41,77 ⁿ , 417,60 ^ß , 417,64 ^v		1,22(9) ^a
2 $^2S_{1/2}$ -2 $^2P_{1/2}^o$	446,14*	5,97835(-2)*	1,00172(9)*
	445,700 ^a , 0,70 ^b , 445,770 ^d , 44,6 ^m , 44,57 ⁿ , 445,78 ^ß , 445,68 ^v	0,08823231373 ^a , 0,08820446032 ^a , 0,08823240 ^a	1,00(9) ^a
4 $^2S_{1/2}$ -4 $^2P_{3/2}^o$	6164,50*	1,79697(-1)*	7,88543(6)*
	3682,0 ^a		3,65(7) ^a
4 $^2S_{1/2}$ -4 $^2P_{1/2}^o$	6976,12*	7,92448(-2)*	5,43067(6)*
	3956,0 ^a		2,94(7) ^a
4 $^2P_{1/2}^o$ -4 $^2D_{3/2}$	8703,64*	1,01982(-1)*	2,24493(6)*
	8630,0 ^a		2,32(6) ^a
4 $^2P_{3/2}^o$ -4 $^2D_{5/2}$	9824,66*	1,62758(-1)*	1,87455(6)*
	9660,0 ^a		1,99(6) ^a
4 $^2P_{3/2}^o$ -4 $^2D_{3/2}$	10414,34*	1,70618(-2)*	2,62326(5)*
	10300,0 ^a		2,73(5) ^a
5 $^2S_{1/2}$ -5 $^2P_{3/2}^o$	12957,60*	2,20316(-1)*	2,18815(6)*
5 $^2S_{1/2}$ -5 $^2P_{1/2}^o$	14683,66*	9,72629(-2)*	1,50449(6)*
4 $^2D_{3/2}$ -4 $^2F_{5/2}^o$	96165,25*	9,75726(-3)*	1,17295(3)*
4 $^2D_{5/2}$ -4 $^2F_{7/2}^o$	132281,00*	1,01299(-2)*	4,82683(2)*
4 $^2D_{5/2}$ -4 $^2F_{5/2}^o$	215723,59*	3,10389(-4)*	7,41481(0)*

^a Atomic Line List v.2.04 [39]^b NIST Atomic Spectra Database[40]^c CAMBD Atomic Spectra[41]^d Kelly Atomic Line Database[42]^m Livingston ve diğerleri (nm) [17]ⁿ DeSerio ve diğerleri (nm)[18]^p Vainshtein ve Safronova [20]

^a Yan ve diğerleri (f değeri) [35]

^β Fawcett [31]

^γ Dere [32]

5.2. Tartışma

Tablolar incelendiğinde S XVI için elde edilen sonuçların diğer çalışma sonuçları ile oldukça uyumlu olduğu gözlenmektedir. Enerjilerde ikinci basamaktaki uyum zaman zaman üçüncü basamağa kadar çıkmaktadır. Enerjilerdeki bu uyum dalga boyları ağırlıklı osilator şiddetleri ve geçiş olasılıklarında da gözlenmektedir.

S XV için elde edilen sonuçlarda gözlenen uyum, S XVI için elde edilen sonuçlardaki uyum ile kıyaslandığında daha iyidir. Enerjilerdeki uyum genelde üçüncü basamaktadır. $n = n'$ seviyesinde gözlenen uyumsuzluğun nedeninin ise konfigürasyon listesinin kısıtlı tutulmasından kaynaklandığı düşünülmektedir.

S XIV sonuçlarında ise bire bir denilebilecek uyum gözlenmektedir. Burada konfigürasyon listesinin geniş tutulması sebebiyle $n = n'$ seviyelerinde görülen uyumsuzlukta hemen hemen ortadan kalkmaktadır.

Üç iyon kıyaslandığında iyonlaşma derecesi azaldıkça uyumun arttığı gözlenmektedir.

KAYNAKLAR

- [1] FISCHER C.F., BRAGE T., JOHNSON P.,: “Computational atomic structure-an MCHF approach”, Bristol and Philadelphia, Institute of Physics Publishing, 1997.
- [2] FISCHER C.F.,: “The MCHF atomic-structure Package” Computer Physics Communications, Vol. 64, 369-398, 1991.
- [3] DRAKE G.W.F.,: “Spontaneous two-photon decay rates in hydrogenlike and heliumlike ions”, Physical Review A, Vol. 34, pp. 2871-2880, 1986.
- [4] VERNER D.A., BARTHEL P.D., and TYLER D.,: “Atomic data for absorption lines from the ground level at wavelengths greater than 228 Å”, Astronomy & Astrophysics Supplement Series, Vol. 108, pp. 287-340, 1994.
- [5] PAL’CHIKOV V.G.,: “Relativistic transition probabilities and oscillator strengths in hydrogen-like atoms”, Physica Scripta, Vol. 57, pp. 581-593, 1998.
- [6] JITRIK O., and BUNGE C.F.,: “Salient features of electric and magnetic multipole transition probabilities of hydrogen-like systems”, Physica Scripta, Vol. 69, pp. 196-202, 2003.
- [7] WALKER A.B.C., and RUGGE H.R.,: “Observation of autoionizing states in the solar corona”, The Astrophysical Journal, Vol. 164, pp. 181-190, 1971.
- [8] DRAKE G.W.F.,: “Theory of relativistic magnetic dipole transitions: lifetime of the metastable 2^3S state of the heliumlike ions”, Physical Review A, Vol. 3, pp. 908-915, 1971.

- [9] COCKE C.L., CURNUTTE B., and RANDALL R.: "X-ray emission from foil-excited sulphur beams", *Physical Review A*, Vol. 9, pp. 1823-1827, 1974.
- [10] BEDNAR J.A., COCKE C.L., CURNUTTE B., and RANDALL R.: "Lifetime of the $2\ ^3S_1$ state in heliumlike sulphur and chlorine", *Physical Review A*, Vol. 11, pp. 460-466, 1975.
- [11] JOHNSON W.R., and LIN C.D.: "Relativistic random phase approximation applied to atoms of the He isoelectronic sequence", *Physical Review A*, Vol. 14, pp. 565-575, 1976.
- [12] VARGHESE S.L., COCKE C.L., and CURNUTTE B.: "Lifetime measurements of the $2\ ^3P_1$ state in heliumlike silicon and sulphur", *Physical Review A*, Vol. 14, pp. 1729-1734, 1976.
- [13] LIN C.D., JOHNSON W.R., and DALGARNO A.: "Oscillator strengths of transitions between low-lying s and p states of helium-like ions", *The Astrophysical Journal* Vol. 217, pp. 1011-1015, 1977.
- [14] BOIKO V.A., Ya FAENOV A., PIKUZ S.A., Yu SKOBELEV I., VINOGRADOV A.V., and YUKOV A.E.: "The observation of intercombination lines $1s3p\ ^3P_1 \rightarrow 1s^2\ ^1S_0$ of multicharged He-like ions in laser-produced plasmas", *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, Vol. 10, pp. 3387-3394, 1977.
- [15] DRAKE G.W.F.: "Unified relativistic theory for $1s2p\ ^3P_1-1s^2\ ^1S_0$ frequencies and transitions rates in heliumlike ions", *Physical Review A*, Vol. 19, pp. 1387-1397, 1979.
- [16] BERRY H.G., DESERIO R., and LIVINGSTON A.E.: "Wavelengths and fine structure of 2s-2p transitions in two- and three-electron ions", *Physical Review A*, Vol. 22, pp. 998-1011, 1980.

- [17] LIVINGSTON A.E., HINTERLONG S.J., POIRIER J.A., DESERIO R., and BERRY H.G.: “Wavelength measurement of $1s2s\ ^3S - 1s2p\ ^3P$ transitions in helium-like $^{28}\text{Si}^{12+}$, $^{32}\text{S}^{14+}$ and $^{35}\text{Cl}^{15+}$ ”, *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, Vol. 13, pp. L139-L142, 1980.
- [18] DESERIO R., BERRY H.G., BROOKS R.L., HARDIS J., LIVINGSTON A.E., and HINTERLONG S.J.: “ $2s-2p$ transitions in heliumlike ions”, *Physical Review A*, Vol.24, pp. 1872-1888, 1981.
- [19] SCHLEINKOFER L., BELL F., BETZ H.-D., TROLLMANN G., and ROTHERMEL J.: “Precision wavelength determination of $2\ ^1P_1 - 1\ ^1S_0$ and $2\ ^3P_1 - 1\ ^1S_0$ transitions in helium-like sulfur ions”, *Physica Scripta*, Vol. 25, pp. 917-923, 1982.
- [20] Vainshtein L.A., and Safronova U.I.: “Energy levels of He- and Li-like ions (States $1snl$, $1s2nl$ with $n=2-5$)”, *Physica Scripta*, Vol. 31, pp.519-532, 1985.
- [21] AGLITSKY E.V., ANTSIFEROV P.S., MANDELSTAM S.L., PANIN A.M., SAFRONOVA U.I. ULITIN S.A., and VAINSHTEIN L.A.: “Comparison of calculated and measured wavelengths resonance transitions in He-like ions for $Z=16-39$ ”, *Physica Scripta*, Vol. 38, pp. 136-142, 1988.
- [22] LIN C.D., JOHNSON W.R., and DALGARNO A.: “Radiative decays of the $n=2$ states of heliumlike ions”, *Physical Review A*, Vol. 15, pp. 154-161, 1977.
- [23] JOHNSON W.R., and SAPIRSTEIN J.: “Relativistic many-body perturbation theory applied to $n=2$ triplet states of heliumlike ions”, *Physical Review A*, Vol. 46, pp. R2197-R2200, 1992.
- [24] BERRY H.G., DUNFORD R.W., and LIVINGSTON A.E.: “Comparisons of the QED and relativistic part of triplet-state energies in the heliumlike sequence”, *Physical Review A*, Vol. 47, pp. 698-701, 1993.

- [25] CHEN M.H., and CHENG K.T.: "Relativistic configuration-interaction calculations of $n=2$ triplet states of Heliumlike ions", *Physical Review A*, Vol. 47, pp. 3692-3703, 1993.
- [26] PLANTE D.R., JOHNSON W.R., and SAPIRSTEIN J.: "Relativistic all-order many-body calculations of the $n=1$ and $n=2$ states of helium like ions", *Physical Review A*, Vol. 49, pp. 3519-3530, 1994.
- [27] KATO T., SAFRONOVA U.I., SHLYAPTSEVA A.S., CORNILLE M., DUBOU J., and NILSEN J.: "Comparison of satellite spectra for H-like Fe and He-like Fe, Ca, and S calculated by three different methods", *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, Vol. 67, pp. 225-329, 1997.
- [28] KIMURA E., NAKAZAKI S., BERRINGTON K.A., and NORRINGTON P.H.: "Rate coefficients for electron impact excitation of helium-like ions within the Dirac R-matrix approach", *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, Vol. 33, pp. 3449-3466, 2000.
- [29] KINGSTON A.E., NORRINGTON P.H., and BOONE A.W.: "Spontaneous transition rates for electric dipole (E1), magnetic dipole (M1), electric quadrupole (E2), magnetic quadrupole (M2) transitions for He-like calcium and sulfur ions" *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, Vol. 35, pp. 4077-4100, 2002.
- [30] HOWIE D.J.H., SILVER J.D., and MYERS E.G.: "Measurement of $1s2s\ ^3S_1 - 1s2p\ ^3P_{2,0}$ wavelengths in helium-like sulphur", *Journal of Physics B: Atomic, Molecular Optical Physics*, Vol. 29, pp. 927-936, 1996.
- [31] FAWCETT B.C.: "Classification of highly ionized emission lines due to, transitions from singly and doubly excited levels in sodium, magnesium, aluminium, silicon, phosphorus, sulphur and chlorine", *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, Vol. 3, pp. 1152-1163, 1970.

- [32] DERE K.P.,: “Spectral lines observed in solar flares between 171 and 630 Angstroms”, The Astrophysical Journal, Vol. 221, pp. 1062-1067, 1978.
- [33] INDELICATO P., and DESCLAUX J.P.,: “Multiconfiguration Dirac-Fock calculations of transition energies with QED corrections in three-electron ions”, Physical Review A, Vol. 42, pp. 5139-5149, 1990.
- [34] SAFRONOVA U.I., SAFRONOVA M.S., and KATO T.,: “Cross Sections and rate coefficients for inner-shell excitation of Li-like ions with $6 < Z < 42$ ”, Physica Scripta, Vol. 54, pp. 68-84, 1996.
- [35] YAN Z.-C., TAMBASCO M., and DRAKE G.W.F.,: “Energies and oscillator strengths for lithiumlike ions”, Physical Review A , Vol. 57, pp. 1652-1661, 1998.
- [36] SAFRONOVA U.I., JOHNSON W.R., and SAFRONOVA M.S.,: “Relativistic Z-dependent corrections for Li- and Be-like ions”, Physica Scripta, Vol. 58, pp. 348-362, 1998.
- [37] NAHAR N.S.,: “Relativistic fine structure oscillator strengths for Li-like ions: C IV -SiXII, S XIV, Ar XVI, Ca XVIII, Ti XX, Cr XXII, and Ni XXVI”, Astronomy & Astrophysics Vol. 389, pp. 716-728, 2002.
- [38] LEPSON J.K., BEIERSDORFER P. BEHAR E., and KAHN S.M.,: “Comparisons of laboratory wavelengths measurements with theoretical calculations for neon-like through lithium-like argon sulfur and silicon”, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, Vol. 235, pp. 131-134, 2005.
- [39] <http://www.pa.uky.edu/~peter/atomic/>, Hoof P.V., 1999.
- [40] <http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/index.html>, Martin W.C., Sugar J. Fuhr J.R, 2005

[41] <http://www.camdb.ac.cn/e/>, Smith P., 2001

[42] <http://cfa-www.harvard.edu/amdata/ampdata/kelly/kelly.html>, Kelly, Esmond J.R., and Smith P.L., 2001



ÖZGEÇMİŞ

1980 yılında Sakarya'da doğdu. İlk, orta ve lise öğrenimini Sakarya'da tamamladı. 1998'de Sakarya Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümünü kazandı. 2002'de Sakarya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim dalında Yüksek lisansa başladı. 2004 yılında Sakarya Üniversitesinde Araştırma Görevlisi olarak çalışmaya başladı. Halen aynı üniversitede Yüksek Lisans eğitime ve görevine devam etmektedir.

