

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

**YÜKSEK İYONLAŞMIŞ TUNGSTEN VE ALTIN İÇİN İŞİMALI GEÇİŞLER
VE KENDİLİĞİNDEN İYONLAŞMANIN KONFIGÜRASYON ETKİLEŞME
YÖNTEMİ İLE HESAPLANMASI**

DOKTORA TEZİ

Gülay GÜNDAY KONAN

Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK

Tez Danışmanı : Prof. Dr. Leyla ÖZDEMİR

Ocak 2017

T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

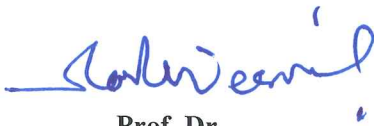
YÜKSEK İYONLAŞMIŞ TUNGSTEN VE ALTIN İÇİN IŞIMALI
GEÇİŞLER VE KENDİLİĞİNDEN İYONLAŞMANIN
KONFIGÜRASYON ETKİLEŞME YÖNTEMİ İLE HESAPLANMASI

DOKTORA TEZİ

Gülay GÜNDAY KONAN

Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK

Bu tez 18 / 01 /2017 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından oybirliği / oyçokluğu ile kabul edilmiştir.



Prof. Dr.
Kadir ESMER
Jüri Başkanı



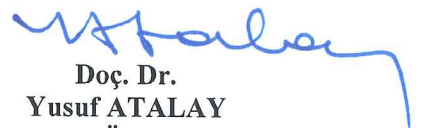
Prof. Dr.
Leyla ÖZDEMİR
Üye



Prof. Dr.
Erdoğan TARCAN
Üye



Prof. Dr.
İbrahim OKUR
Üye



Doç. Dr.
Yusuf ATALAY
Üye

BEYAN

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

Gülay GÜNDAY KONAN

20.12.2016

TEŞEKKÜR

Bu tez çalışmasının yürütülmesi sırasında değerli görüşleriyle yol gösteren, teşvik eden, bilgi ve yardımlarını esirgemeyen danışman hocam Prof. Dr. Leyla ÖZDEMİR'e saygı ve teşekkürlerimi sunarım.

Çalışmamın her aşamasında bilgi ve deneyimlerinden yararlandığım değerli hocalarım Yrd. Doç. Dr. Betül USTA'ya, Yrd. Doç. Dr. Güldem ÜRER'e, çalışma süresince hep destek olan çalışma arkadaşım Arş. Gör. Selda ESER'e ve paylaştıkları fikirleriyle beni destekleyen ve her zaman yanımda olan tüm arkadaşlarıma teşekkür ederim.

Hayatım boyunca her türlü maddi ve manevi fedakârlığa katlanarak bugünlere gelmemi sağlayan, beni sevgiyle yetiştiren, sevincimde ve üzüntümde her zaman yanımda olan çok değerli ailem Ali GÜNDAY, Asiye GÜNDAY, Ufuk GÜNDAY ve Meral GÜNDAY'a, bana güvendikleri ve yanımda oldukları için sonsuz sevgi, saygı ve şükranlarımı sunarım. Tez süreci boyunca hiçbir şekilde emeklerini esirgemeyip yanımda oldukları ve bana destek verdikleri için, kendi ailem gibi bildiğim Salih KONAN, Sakine KONAN ve Cem KONAN'a çok teşekkür ederim.

Yoğun çalışmalarım sırasında bana sabır gösteren, motivasyonumu yüksek tutmamı sağlayan, varlığından güç aldığım, her zaman yanımda olan çok değerli eşim Ali KONAN'a ve bana anne olma mutluluğunu yaşatan, hayata bambaşka bir açıdan bakmamı sağlayan biricik oğlum Çağan KONAN'a tüm kalbimle teşekkür ederim.

Bu çalışma SAÜ Bilimsel Araştırma Projeleri Komisyonu tarafından desteklenmiştir (Proje No: 2013-50-02-013).

İÇİNDEKİLER

TEŞEKKÜR.....	i
İÇİNDEKİLER	ii
KISALTMALAR LİSTESİ	iv
ŞEKİLLER LİSTESİ	vi
TABLOLAR LİSTESİ	vii
ÖZET	ix
SUMMARY	x
BÖLÜM 1.	
GİRİŞ.....	1
BÖLÜM 2.	
KAYNAK ARAŞTIRMASI	3
BÖLÜM 3.	
HESAPLAMA YÖNTEMİ	6
3.1. Atomik Yapı Hesaplama Yöntemleri	6
3.2. Relativistik Olmayan Hamiltonyen ve Radyal Dalga Fonksiyonları.	7
3.3. Açısal Momentum Çiftlenimleri	10
3.3.1. <i>LS</i> -çiftlenimi	11
3.3.2. <i>jj</i> -çiftlenimi	14
3.4. Atomik Hamiltonyene Getirilen Bazı Katkılar ve Etkiler.....	16
3.4.1. Relativistik düzeltmeler.....	16
3.4.2. Kuantum elektrodinamik (QED) düzeltmeler.....	20
3.4.3. Korelasyon etkileri.....	24
3.5. Işımalı ve Işımasız Geçişler.....	25

3.5.1. Enerji seviyeleri arasındaki ışımalı geçişler.....	25
3.5.2. Işımalı geçişler için seçim kuralları.....	28
3.5.3. Kendiliğinden iyonlaşma (Autoionization).....	29
BÖLÜM 4.	
ARAŞTIRMA BULGULARI VE TARTIŞMA.....	33
4.1. Atomik Yapı Hesaplamaları ile İlgili Genel Bilgiler	34
4.2. Sodyum (Na) Benzeri Tungsten ve Altın İyonları (W^{63+} , Au^{68+}) İçin Yapılan Atomik Yapı Hesaplamaları.....	36
4.2.1. Sodyum benzeri tungsten için hesaplama sonuçları (W^{63+}).....	37
4.2.2. Sodyum benzeri altın için hesaplama sonuçları (Au^{68+}).....	58
4.3. Magnezyum (Mg) Benzeri Tungsten ve Altın İyonları (W^{62+} , Au^{67+}) İçin Yapılan Atomik Yapı Hesaplamaları.....	70
4.3.1. Magnezyum benzeri tungsten için hesaplama sonuçları (W^{62+}).....	71
4.3.2. Magnezyum benzeri altın için hesaplama sonuçları (Au^{67+})...	90
BÖLÜM 5.	
SONUÇ VE ÖNERİLER	104
KAYNAKLAR	107
ÖZGEÇMİŞ	115

KISALTMALAR LİSTESİ

CI	: Konfigürasyon etkileşimi (Configuration interaction)
CSFs	: Konfigürasyon hal fonksiyonları (Configuration state functions)
CSS'	: Spin-spin temas (Contact spin-spin)
CV	: Öz-valans (Core-valence)
D	: Darwin
DCB	: Dirac-Coulomb-Breit
EBIT	: Elektron ışını iyon tuzağı (Electron beam ion trap)
FAC	: Esnek atomik kod (Flexible atomic code)
FS	: İnce yapı (Fine structure)
GRASP	: Genel amaçlı relativistik atomik yapı paketi (General purpose relativistic atomic structure program)
HClS	: Yüksek yüklü iyonlar (Highly charged ions)
HULLAC	: Relativistik Hebrew Üniversitesi Lawrence-Livermore atomik kodu (Relativistic Hebrew University Lawrence-Livermore atomic code)
MCDF	: Çok konfigürasyonlu Dirac-Fock (Multiconfiguration Dirac-Fock)
MCDHF	: Çok konfigürasyonlu Dirac-Hartree-Fock (Multiconfiguration Dirac-Hartree-Fock)
MCHF	: Çok konfigürasyonlu Hartree-Fock (Multiconfiguration Hartree-Fock)
MR-MP	: Relativistik çok referanslı Møller-Plesset (Relativistic multireference Møller-Plesset)
NIST	: National institute of standards and technology's web site
NR	: Relativistik olmayan (Non-relativistic)
OO'	: Yörünge-yörünge (Orbit-orbit)
QED	: Kuantum elektrodinamik (Quantum electrodynamic)
RC	: Relativistik düzeltme (Relativistic correction)

- RCIM : Relativistik konfigürasyon etkileşme yöntemi (Relativistic configuration interaction method)
- RMBPT : Relativistik çok-parçacık pertürbasyon teorisi (Relativistic many-body perturbation theory)
- SO : Çekirdek spin-yörünge (Spin-orbit)
- SO' : Spin-diğer yörünge (Spin-other orbit)
- VV : Valans-valans (valence-valence)

ŞEKİLLER LİSTESİ

Şekil 3.1. <i>LS</i> -çiftlenim modeli	11
Şekil 3.2. İki elektronlu bir atomda, manyetik alanın Paschen-Back bölgesinde <i>jj</i> -çiftlenim modeli	15
Şekil 3.3. Kendiliğinden iyonlaşma	30
Şekil 3.4. Çok elektronlu atomlar için kendiliğinden iyonlaşmanın şematik gösterimi	30
Şekil 4.1. W^{63+} iyonunun enerji seviyelerinin RMBPT kodu sonuçları ile karşılaştırılması.....	41
Şekil 4.2. W^{63+} iyonunun E1 geçişlerine ait ağırlıklı geçiş olasılıklarının RMBPT kodu sonuçları ile karşılaştırılması.....	54
Şekil 4.3. W^{63+} iyonunun ağırlıklı kendiliğinden iyonlaşma oranlarının COWAN kodu sonuçları ile karşılaştırılması.....	58
Şekil 4.4. W^{62+} iyonunun enerji seviyelerinin RMBPT kodu sonuçları ile karşılaştırılması	80
Şekil 4.5. W^{62+} iyonunun E1 geçişlerine ait geçiş olasılıklarının RMBPT kodu sonuçları ile karşılaştırılması.....	87
Şekil 4.6. W^{62+} iyonunun kendiliğinden iyonlaşma oranlarının COWAN kodu sonuçları ile karşılaştırılması.....	90
Şekil 4.7. Au^{67+} iyonunun enerji seviyelerinin FAC kodu sonuçları ile karşılaştırılması	97
Şekil 4.8. Au^{67+} iyonunun E1 geçişlerine ait geçiş olasılıklarının FAC kodu sonuçları ile karşılaştırılması	100

TABLolar LİSTESİ

Tablo 2.1.	Çalışılan iyonların (W^{63+} , W^{62+} , Au^{68+} ve Au^{67+}) enerji seviyeleri, ışıma parametreleri ve kendiliğinden iyonlaşma parametreleriyle ilgili mevcut çalışmalar.....	5
Tablo 3.1.	Spektroskopik gösterim.....	13
Tablo 4.1.	Na benzeri tungsten ve altın iyonlarının enerji seviyeleri ve ışımali geçiş parametreleri hesaplamalarında kullanılan konfigürasyonlar	37
Tablo 4.2.	W^{63+} iyonunun düşük enerji seviyeleri, E (10^3 cm^{-1}).....	38
Tablo 4.3.	W^{63+} iyonunun $2s3l3l'$, $2p^53l3l'$ ve $3l$ ($l, l' = 0, 1, 2$) seviyelerinin enerjileri, E (10^3 cm^{-1}). A: Bu çalışma (AUTOSTRUCTURE), B: HULLAC kodu, C: COWAN kodu, D: RMBPT kodu	43
Tablo 4.4.	W^{63+} iyonunun $2s3l3l'$ ve $3l$ ($l, l' = 0, 1, 2$) seviyeleri arasındaki elektrik dipol (E1) geçişleri için dalgaboyları, λ (Å), ağırlıklı salıncı şiddetleri, gf ve ağırlıklı geçiş olasılıkları, gA_r (s^{-1}).....	47
Tablo 4.5.	W^{63+} iyonunun $2p^53l3l'$ ve $3s$ seviyeleri arasındaki elektrik dipol (E1) geçişleri için dalgaboyları, λ (Å), ağırlıklı salıncı şiddetleri, gf ve ağırlıklı geçiş olasılıkları, gA_r (s^{-1}).....	51
Tablo 4.6.	W^{63+} iyonunun yasaklı geçişlerinin (E2, M1 ve M2) dalgaboyları, λ (Å), ağırlıklı salıncı şiddetleri, gf ve ağırlıklı geçiş olasılıkları, gA_r (s^{-1}).....	55
Tablo 4.7.	W^{63+} iyonunun ağırlıklı kendiliğinden iyonlaşma oranları, gA_a (s^{-1}) ve elektrik dipol (E1) geçişlerinin dalgaboyları, λ (Å) ve ağırlıklı geçiş olasılıkları, gA_r (s^{-1}).....	57
Tablo 4.8.	Au^{68+} iyonunun düşük enerji seviyeleri, E (cm^{-1}).....	59
Tablo 4.9.	Au^{68+} iyonunun elektrik dipol (E1) geçişleri için dalgaboyları, λ (Å), ağırlıklı salıncı şiddetleri, gf ve geçiş olasılıkları, A_r (s^{-1})...	61

Tablo 4.10.	Au ⁶⁸⁺ iyonunun yasaklı geçişlerinin (E2, M1 ve M2) dalgaboyları, λ (Å), ağırlıklı salıncı şiddetleri, gf ve geçiş olasılıkları, A_r (s ⁻¹).....	66
Tablo 4.11.	Au ⁶⁸⁺ iyonunun kendiliğinden iyonlaşma oranları, A_a (s ⁻¹) ve elektrik dipol (E1) geçişlerinin dalgaboyları, λ (Å) ve geçiş olasılıkları, A_r (s ⁻¹).....	69
Tablo 4.12.	Mg benzeri tungsten ve altın iyonlarının enerji seviyeleri ve ışımalı geçiş parametreleri hesaplamalarında kullanılan konfigürasyonlar.....	71
Tablo 4.13.	W ⁶²⁺ iyonunun düşük enerji seviyeleri, E (10 ³ cm ⁻¹).....	73
Tablo 4.14.	W ⁶²⁺ iyonunun elektrik dipol (E1) geçişleri için dalgaboyları, λ (Å) ağırlıklı salıncı şiddetleri, gf ve geçiş olasılıkları, A_r (s ⁻¹)....	81
Tablo 4.15.	W ⁶²⁺ iyonunun yasaklı geçişlerinin (E2, M1 ve M2) dalgaboyları, λ (Å), ağırlıklı salıncı şiddetleri, gf ve geçiş olasılıkları, A_r (s ⁻¹)....	88
Tablo 4.16.	W ⁶²⁺ iyonunun kendiliğinden iyonlaşma oranları, A_a (s ⁻¹) ve elektrik dipol (E1) geçişlerinin dalgaboyları, λ (Å) ve ağırlıklı geçiş olasılıkları, gA_r (s ⁻¹).....	89
Tablo 4.17.	Au ⁶⁷⁺ iyonunun düşük enerji seviyeleri, E (eV).....	92
Tablo 4.18.	Au ⁶⁷⁺ iyonunun elektrik dipol (E1) geçişleri için dalgaboyları, λ (Å), ağırlıklı salıncı şiddetleri, gf ve geçiş olasılıkları, A_r (s ⁻¹)...	98
Tablo 4.19.	Au ⁶⁷⁺ iyonunun yasaklı geçişlerinin (E2, M1 ve M2) dalgaboyları, λ (Å), ağırlıklı salıncı şiddetleri, gf ve geçiş olasılıkları, A_r (s ⁻¹)...	101
Tablo 4.20.	Au ⁶⁷⁺ iyonunun kendiliğinden iyonlaşma oranları, A_a (s ⁻¹) ve elektrik dipol (E1) geçişlerinin dalgaboyları, λ (Å) ve geçiş olasılıkları, A_r (s ⁻¹).....	102

ÖZET

Anahtar kelimeler: AUTOSTRUCTURE, enerji seviyeleri, dalgalıboyları, salınıcı şiddetleri, geiş olasılıkları, kendiliğinden iyonlaşma oranları, kuantum elektrodinamik katkıları, Breit relativistik katkıları, korelasyon etkileri

Bu tez çalışmasında, yüksekçe iyonlaşmış sodyum ve magnezyum benzeri tungsten ve altın iyonlarının (W^{63+} , W^{62+} , Au^{68+} ve Au^{67+}) enerji seviyeleri, bu seviyeler arasındaki elektrik dipol (E1), manyetik dipol (M1), elektrik kuadrupol (E2) ve manyetik kuadrupol (M2) geişlerine ait dalgalıboyları, salınıcı şiddetleri ve geiş olasılıkları hesapları Badnell tarafından geliştirilen AUTOSTRUCTURE atomik yapı koduyla yapılmaktadır. Hesaplamalarda korelasyon etkileri, kuantum elektrodinamik (QED) katkıları (öz-enerji ve vakum polarizasyonu) ve Breit relativistik katkılarının (elektronlar arası manyetik etkileşim ve elektron-elektron etkileşiminin gecikme etkileri) hesap sonuçlarına etkisi incelenmektedir. Bu ışmalı geişlerin yanı sıra kendiliğinden iyonlaşma oranları da verilmektedir.

Elde edilen sonuçlar mevcut diğerkaynaklardaki deneysel ve teorik çalışmalarla karşılaştırıldığında uyumludur. Özellikle öz-valans korelasyonuna göre öz tabakalardan uyarılmaları içeren konfigürasyonlarla birlikte Breit relativistik ve QED etkileri dikkate alındığında bu uyum daha iyi sağlanmaktadır.

THE RADIATIVE TRANSITION AND AUTOIONIZATION CALCULATIONS FOR HIGHLY IONIZED TUNGSTEN AND GOLD USING CONFIGURATION INTERACTION METHOD

SUMMARY

Keywords: AUTOSTRUCTURE, energy levels, wavelengths, oscillator strengths, transition probabilities, autoionization rates, quantum electrodynamics, Breit relativistic contributions, correlation effects

In this study, energy levels and transition parameters such as wavelengths, oscillator strengths and transition probabilities for electric dipole (E1), magnetic dipole (M1) electric quadrupole (E2), and magnetic quadrupole (M2) transitions between these levels for highly charged sodium and magnesium like tungsten and gold ions (W^{63+} , W^{62+} , Au^{68+} and Au^{67+}) have been calculated using AUTOSTRUCTURE atomic code developed by Badnell. In these calculations, the effects on the computational results of correlation effects, quantum electrodynamic (QED) contributions (self-energy and vacuum polarization) and Breit relativistic effects (magnetic interaction between the electrons and retardation effects of the electron–electron interaction) have been investigated. In addition to these radiative transitions, autoionization rates have been also given.

The obtained results have a good agreement when compared to other theoretical and experimental results in literature. In particular, this agreement is better when Breit relativistic and QED effects take into account along with configurations including core subshell excitations according to core-valence correlation.

BÖLÜM 1. GİRİŞ

Yüksek iyonlaşmış (yükü) iyonlar, (HCIs- Highly Charged Ions) pozitif olarak yüksekçe iyonlaşmış olarak tanımlanırlar. Bu tür iyonlar güneş tacı ve füzyon plazmaları gibi sıcak plazmalarda ortaya çıkar. HCI üzerindeki spektroskopik çalışmalar plazma fiziğinde oldukça önemlidir. Plazmanın detaylı ve duyarlı tasarımı için ihtiyaç duyulmaktadır. Bir plazma modeli atom modellerini esas aldığı için, hassas plazma modeli hassas atom modellerine ihtiyaç duyar. Ağır bir çekirdeğin yakınında hızlıca hareket eden elektronlar relativistik ve kuvvetli bir alanda kuantum elektrodinamik (QED) etkileri içeren temel atom teorilerini test etmek için uygun bir sistemdir. Yani relativistik ve kuantum elektrodinamik katkıları çekirdek yüküne (Ze) bağlı olduğundan yüksekçe yükü iyonlar QED katkılarını araştırmak için çok uygundur. Aynı zamanda son yörüngelerinde sadece birkaç valans elektronu olduğundan, çok elektronlu sistemlerde QED katkılarını test etmek için çok kullanışlıdır. Ayrıca, bir HCI'nın büyük potansiyel enerjisi onun maddeyle etkileşmesinde etkin bir reaksiyona neden olur (Azuma ve ark., 2009). Çok elektronlu atomlarda optiksel elektronlar, diğer elektronlar ve çekirdek tarafından oluşturulan ortalama-alan potansiyelinde hareket ederler. Ancak elektronlar atomdan uzaklaştırıldığında optiksel elektronlar tarafından oluşturulan alan hızlıca Coulomb alanına yaklaşır. Elektron bulutunun boyutu $1/Z$ şeklinde Z çekirdek yükü ile elde edilebilir. Tipik matris elemanları (elektron-elektron ve elektron-çekirdek etkileşmeleri için) atomların yarıçaplarının birkaç kuvveti ile orantılı olduğu için dış katkıların etkileşimlerinin çoğu Z 'nin artmasıyla azalır. HCI'nın büyük potansiyel enerjiye sahip olması özelliği etkin iyon kaynaklarının gelişimiyle önem kazanmıştır ve nano ölçekli üretim, yüzey analizi, sağlık fiziği, nükleer füzyon, astrofizik, atomik fizik, yüksek sıcaklık plazma tanısı vs. gibi alanlardaki yeni teknolojilerde de ihtiyaç oldukça artmaktadır (Gillaspy, 2001; Beyler ve Shevelko, 2003; Azuma ve ark., 2009).

Evrenin çoğu yüksekçe iyonlaşmış maddeyle kaplıdır (Fang ve Canizares, 2000). Dünyada oldukça nadir olduklarından ve dünya atmosferinde oldukça yüksek X-ışını soğurmasıyla kozmik kaynaklardan gözlenmelerinden dolayı yüksekçe iyonlaşmış madde ile ilgili bilimsel çalışma ve uygulamalar kısıtlı kalmaktadır. Yüksekçe iyonlaşmış madde ile ilgili atom fiziği ve geleneksel iyon demet teknolojileri laboratuvar incelemelerinden önce geliştirilmiştir. Ancak günümüzde güçlü düzenekler doğal olarak oluşmuş herhangi bir atomun herhangi bir iyonlaşma safhasını üretmeyi başarabilmektedir. Bu düzeneklerin bazıları bir masa üstüne monte edilebilecek kadar küçük olmasına rağmen bazıları oldukça büyük düzeneklerdir ki bunlar ışık hızına yakın hızlarda iyonlar üretebilmektedirler (Levine ve ark. 1988; Angert, 1991; Stohlker ve ark., 2000). Her iki tür, ayrı uygulamalar için geliştirilmişlerdir fakat her ikisi de evrenin hala incelenmemiş ve değişik alanlara etkisi beklenen bir kısmına bir pencere açma ortak özelliğine sahiptir (Gillaspy, 2001).

Bu çalışmada periyodik tablonun altıncı sırasında yer alan altın (Au) ve tungstenin (W) bazı yüksekçe iyonlaşmış durumları ile ilgili bazı atomik yapı hesaplamaları yapıldı. Sodyum (Na) ve magnezyum (Mg) benzeri tungsten ve altın (W^{63+} , W^{62+} , Au^{68+} , Au^{67+}) iyonlarının enerji seviyeleri, elektrik dipol (E1), manyetik dipol (M1), elektrik kuadrupol (E2) ve manyetik kuadrupol (M2) geçişlerine ait ışınım parametreleri (dalga boyları, salınıcı şiddetleri ve geçiş olasılıkları) ve kendiliğinden iyonlaşma oranları Badnell tarafından geliştirilen AUTOSTRUCTURE programı kullanılarak hesaplandı. Hesaplamalarda, korelasyon etkileri, kuantum elektrodinamik (QED) katkıları (öz-enerji ve vakum polarizasyonu) ve Breit relativistik katkılarının (elektronlar arası manyetik etkileşim ve elektron-elektron etkileşiminin gecikme etkileri) etkileri araştırıldı.

BÖLÜM 2. KAYNAK ARAŞTIRMASI

Tungsten iyonları ($Z=74$), plazma kaplama bileşenlerinin baş adayı olarak son yıllarda füzyon araştırmalarının odağı haline gelmiştir (Hu ve ark., 2011b). Manyetik sınırlamadan kaçan parçacıklar tarafından üretilen yüksek parçacık ve gücünü taşıyabilecek plazma kaplama bileşenleri için tungsten, avantajlı özelliklerinden dolayı duvar malzemesi olarak tercih edilmektedir (Biedermann ve ark., 2009). Tungstenin dikkat çekici özellikleri; düşük hidrojen birikimi, yüksek erime noktası ve yüksek ısıl iletkenliğidir (Chen ve Cheng, 2011). Aynı zamanda tungsten gibi ağır elementlerin spektral çalışmaları, atom fiziği, astronomi ve plazma fiziği gibi birçok alanda büyük öneme sahiptir (Podpaly ve ark., 2009). Füzyon plazmalarında tungsten konsantrasyonunun ölçümünün tanısı ve modellenmesini desteklemeyi sağlamak için birçok tungsten iyonunun atomik geçişlerinin bilgisine ihtiyaç duyulur (Biedermann ve ark., 2009). Benzer şekilde yüksekçe iyonlaşmış altın iyonlarının (Au, $Z=79$) atomik yapı ve spektroskopik bilgisi, plazma fiziği, füzyon reaktörleri, biyomedikal uygulamalar, yüksek enerji astrofiziği gibi birçok bilimsel alanda önem taşımaktadır (Hamasha ve Alshaiub, 2012). Altın ve iyonları genellikle füzyon reaktörlerinde malzeme olarak, füzyon plazmalarında da radyasyon emisyon profilinin analizinde kullanılır (Wurden ve Peterson, 1999). Yüksek enerji astrofiziğinde altının atomik bilgisi gama ışınlarının nasıl patladığını ve evrendeki diğer olayları anlamayı kolaylaştırmaktadır (Filevich ve ark., 2005). Altın, X ışını kaynağı olarak birçok uygulamada kullanılır. Altının en çok kullanılan özelliği oksitlenmemesi yani kimyasal olarak reaksiyona girmemesidir (Nahar ve ark., 2008). Ayrıca altının yapı malzemesi olarak kullanıldığı ulusal ateşleme tesisi gereçlerinde, eylemsiz sınırlanmış füzyon (inertial-confinement fusion) deneylerinde altının atomik bilgisinden faydalanılır (Li ve ark., 2010). Altın nanoparçacıkları son zamanlarda biyomedikal araştırmalarda kullanılmaya başlandı. X ışını soğurulması vücut dokusunu geçer ve zehirli değildir (Nahar ve ark., 2008). Altın nanoparçacıkları tarafından soğurulan X

ışınlarının radyoterapi verimini artırdığı bulunmuştur (Hainfeld ve ark., 2004). Ayrıca altın iyonlarının Auger elektronları kanser terapisi için yeni bir yöntem olarak da son yıllarda önem kazandı (Montenegro ve ark., 2009; Pradhan ve ark., 2009). Altın nanoparçacıkları kanserli hücelere tutununca ve 120-250 keV enerjili X ışınlarıyla ışınlanınca kanserli hücrelerin daha verimli olarak öldürüldüğü bulundu (Hainfeld ve ark., 2004).

Tungsten ve altın atomunun öneminin yanı sıra, sodyum ve magnezyum benzeri iyonlar da birçok uygulama için büyük öneme sahiptir. Sodyum benzeri yüksek yüklü iyonlar, astronomide (Laming ve Feldman, 1999) ve füzyon enerji gereçlerinin tanısında (Feldman ve ark., 2008) önemli bir rol oynar. Bu iyonların spektrumları X-ışını lazer modellemesi için önemlidir. Ayrıca sodyum benzeri yörünge spektrumu, uluslararası termonükleer deneysel reaktör füzyon plazmaları (ITER) gibi çok yüksek sıcaklıkta laboratuvar plazmalarının L-tabaka tanısı için ilgi çekmektedir. Çok elektronlu sistemler arasında, son kapalı tabaka dışında bir valans elektronuna sahip iyonlar, incelemesi kolay atomik sistemlerdir. Böylece sodyum benzeri yüksek Z'li iyonlar atomik yapı hesaplamaları için mükemmel model oluştururlar. Sodyum benzeri iyonların yanı sıra magnezyum benzeri iyonlardaki geçişler; astrofizik, plazma ve termonükleer füzyon araştırmaları alanlarındaki uygulamalar için büyük öneme sahiptir. Magnezyum benzeri iyonlar kapalı öz dışında son yörüngesinde iki elektrona sahip olduğundan teorik hesaplamalarda korelasyon etkileri önemli bir rol oynar (Fan ve Zheng, 2004). Bu yüzden sodyum benzeri iyonlar gibi atomik yapı incelemesi için çoğunlukla kullanılırlar.

Bu çalışmada incelenen sodyum ve magnezyum benzeri tungsten ve altın (W^{63+} , W^{62+} , Au^{68+} ve Au^{67+}) iyonları için enerji seviyeleri, ışınma parametreleri ve kendiliğinden iyonlaşma parametreleri ile ilgili mevcut yapılmış teorik ve deneysel çalışmalar Tablo 2.1.'de verilmektedir.

Tablo 2.1. Çalışılan iyonların (W^{63+} , W^{62+} , Au^{68+} ve Au^{67+}) enerji seviyeleri, ışıma parametreleri ve kendiliğinden iyonlaşma parametreleriyle ilgili mevcut çalışmalar

İyon	Enerji seviyeleri	İşıma parametreleri	Kendiliğinden iyonlaşma parametreleri
Na	Johnson ve ark., 1988	Theodosiou ve Curtis, 1988	Safronova ve ark., 2009b
Benzeri	Seely ve Wagner, 1990	Seely ve Wagner, 1990	Preval ve ark., 2016
Tungsten (W^{63+})	Kim ve ark., 1991 Johnson ve ark., 1996 Safronova ve ark., 2009b Kramida ve Shirai, 2009 Kramida, 2011 Chen ve Cheng, 2011 Hu ve ark., 2011b Beiersdorfer ve ark., 2012b Gillaspy ve ark., 2013 Dipti ve ark., 2014 Sapirstein ve Cheng, 2015 Aggarwal ve Keenan, 2016 Konan ve Özdemir, 2016a	Feldman ve ark., 2008 Ralchenko ve ark., 2008 Pütterich ve ark., 2008 Gillaspy ve ark., 2009 Bidermann ve ark., 2009 Safronova ve ark., 2009b Kramida ve Shirai, 2009 Yanagibayashi ve ark., 2010 Clementson ve Beiersdorfer, 2010 Chen ve Cheng, 2011 Clementson ve ark., 2011 Chen ve Cheng, 2011 Kramida, 2011; Hu ve ark., 2011b Gillaspy ve ark., 2013 Dipti ve ark., 2014 Aggarwal ve Keenan, 2016 Konan ve Özdemir, 2016a	
Na	Kim ve ark., 1991	Theodosiou ve Curtis, 1988	
Benzeri	Vilkas ve ark., 2007	Seely ve Wagner, 1990	
Altın (Au^{68+})	Brown ve ark., 2008 Hu ve ark., 2011a Beiersdorfer ve ark., 2012a Beiersdorfer ve ark., 2012b Gillaspy ve ark., 2013 Sapirstein ve Cheng, 2015 Konan ve Özdemir, 2016b	Kim ve ark., 1991 Vilkas ve ark., 2007 Brown ve ark., 2008 Ralchenko ve ark., 2008 Gillaspy ve ark., 2009 Träbert ve ark., 2009 Gillaspy, 2010 Gillaspy ve ark., 2013 Konan ve Özdemir, 2016b	-
Mg	Ralchenko ve ark., 2008	Zou ve Fischer, 2001	Safronova ve ark., 2009a
Benzeri	Kramida ve Shirai, 2009	Pütterich ve ark., 2008	Preval ve ark., 2016
Tungsten (W^{62+})	Safronova ve ark., 2009a Safronova ve Safronova, 2010 Clementson ve Beiersdorfer, 2010 Chen ve Cheng, 2011 Clementson ve ark., 2011 Hu ve ark., 2011b Kramida, 2011 Beiersdorfer ve ark., 2012b Özdemir ve ark., 2013 Konan ve ark., 2014a Dipti ve ark., 2014 Hao ve Kang, 2015 Aggarwal ve Keenan, 2016 Santana, 2016 Xu ve ark., 2016	Ralchenko ve ark., 2008 Feldman ve ark., 2008 Kramida ve Shirai, 2009 Safronova ve ark., 2009a Bidermann ve ark., 2009 Safronova ve Safronova, 2010 Yanagibayashi ve ark., 2010 Clementson ve Beiersdorfer, 2010 Clementson ve ark., 2011 Chen ve Cheng, 2011 Hu ve ark., 2011b; Kramida, 2011 Özdemir ve ark., 2013 Hu ve ark., 2014 Dipti ve ark., 2014 Konan ve ark., 2014a Hao ve Kang, 2015 Aggarwal ve Keenan, 2016	
Mg	Vilkas ve ark., 2007	Zou ve Fischer, 2001	
Benzeri	Brown ve ark., 2008	Vilkas ve ark., 2007	
Altın (Au^{67+})	Hu ve ark., 2011a Hamasha ve Alshaiub, 2012 Beiersdorfer ve ark., 2012b Hamasha, 2013 Hu ve ark., 2014 Konan ve ark., 2014b Santana, 2016	Ralchenko ve ark., 2008 Brown ve ark., 2008 Träbert ve ark., 2009 Hamasha ve Alshaiub, 2012 Hamasha, 2013; Hu ve ark., 2014 Konan ve ark., 2014b	-

BÖLÜM 3. HESAPLAMA YÖNTEMİ

3.1. Atomik Yapı Hesaplama Yöntemleri

Atom fiziği, kuantum teorisinin ortaya çıkışından beri daima önemli bir test alanı oldu. Çeşitli hesaplama yöntemleri (Hylleraas, 1928; Hylleraas, 1929; Hartree, 1946), atom spektroskopisinden (Edlén, 1963; Edlén, 1964) güçlü lazer alanlarına kadar geniş bir alanda kullanıldı (Joachain, 2014). Atom fiziğindeki araştırmaların en ilgi çekici alanları şu şekilde sınıflandırılabilir:

1. Atomik sistemlerin elektromanyetik etkileşimlerini dikkate alan çok-cisim teorileri
2. Temel atomik yapı özellikleri
3. Elektron ve iyonları içeren evren hakkındaki bilginin çoğu elektromanyetik ışınım ile ulaşır ve görünür evrenin çoğu plazma durumunda olduğu için astrofizikteki plazma tanısı
4. Tanılama ve diğer amaçlar için, özellikle pahalı ve zaman alan deneylerle karşılaştırma yapmak için hesaplama yöntemlerinden faydalanılarak deneyleri tamamlama.

Atomik özelliklerin belirlenmesinde en verimli yöntem, iyonları modellemek için hesaplama yöntemlerini kullanmak ve bunları uygun deney sonuçlarıyla karşılaştırmaktır. Teknolojinin ilerlemesiyle, hesaplama yöntemleriyle birçok özellik hesaplanır ve deneyler sayesinde de bu sonuçların doğruluk ve geçerliliği belirlenir. Atom fiziğinde kullanılan hesaplama yöntemleri genel olarak pertürbasyon ya da varyasyon teorisi temeline dayandırılarak sınıflandırılabilir ve her biri relativistik olmayan ya da relativistik olarak karakterize edilebilir (Fischer ve ark., 2016). Günümüzde atomik yapı özelliklerinin belirlenmesinde yaygın olarak kullanılan ve

değişik yöntemlere göre hazırlanmış program kodları vardır. CIV3 (Konfigürasyon etkileşme sürümü 3) (Hibbert, 1975; Gupta ve Msezane, 2009), COWAN (Cowan, 1981), SUPERSTRUCTURE (Eissner ve ark., 1974) gibi atomik kodlar relativistik olmayan yaklaşıma dayalı iken, RMBPT kodu (Relativistik çok-parçacık pertürbasyon teorisi) (Safronova ve ark., 2002a; 2002b), birinci ve ikinci dereceden relativistik enerji düzeltmelerini içeren relativistik çok parçacık pertürbasyon teorisine dayanır. AUTOSTRUCTURE (Badnell, 2011) relativistik olmayan ya da yarı relativistik dalga fonksiyonunu kullanarak hesaplama yapar. HULLAC (Bar-Shalom ve ark., 2001), ATOM (Amusia ve Chernysheva, 1997) ve FAC (Gu, 2008) gibi kodlar ise Dirac denkleminin çözümü temeline dayanarak geliştirilen tamamen relativistik kodlardır. Bu çalışmada AUTOSTRUCTURE (Badnell, 2011) programı kullanıldığından, teorik bilgi bu çerçevede verilmiştir.

3.2. Relativistik Olmayan Hamiltonyen ve Radyal Dalga Fonksiyonları

Çekirdek etrafında tek elektronun olduğu hidrojen benzeri sistemlerde relativistik olmayan bağ problemini çözmek kolaydır. Çok elektronlu sistemlerde ise bu problem için

$$\langle \delta\psi | H - E | \psi \rangle = 0 \quad (3.1)$$

şeklindeki varyasyon (değişim) prensibine dayanarak yaklaşık çözümler getirilir. Kuantum mekaniğinde N -elektronlu atomun kararlı bir durumu, $\mathbf{q}_i = (\mathbf{r}_i, \sigma_i)$, i elektronun uzay ve spin koordinatları olmak üzere, $\Psi(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N)$ dalga fonksiyonu ile tanımlanır. Dalga fonksiyonunun uzay değişkenlerine göre sürekli olduğu ve

$$H\Psi(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N) = E\Psi(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N) \quad (3.2)$$

şeklindeki dalga denkleminin bir çözümü olduğu kabul edilir. Burada H atomik sistemin Hamiltonyen işlemcisidir. Dalga denklemi bir özdeğer problemidir ve çözümleri yalnızca sistemin toplam enerjisini gösteren belirli E değerleri için vardır.

H işlemcisi belirli kuantum mekaniksel yapı ve atomik sistemdeki çekirdek modellerine de bağlıdır. Relativistik olmayan hesaplamalar için başlangıç noktası, koordinat sisteminin merkezindeki sonsuz kütleli çekirdek nokta yükü için kullanılan zamandan bağımsız Schrödinger denklemidir. Hamiltonyen kinetik ve elektrostatik enerji toplamıdır ve atomik birimlerde

$$H_{NR} = \sum_{i=1}^N h(i) + \sum_{j>i=1}^N \frac{1}{r_{ij}} = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} \right) + \sum_{j>i=1}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (3.3)$$

ile verilir. Burada $h(i)$, Z çekirdek yükünün Coulomb alanında hareket eden i . elektronun tek elektron Hamiltonyenidir. N , elektron sayısı, r_i , elektron-çekirdek uzaklığı ve r_{ij} , i . ve j . elektronlar arası mesafedir. (3.3)'ün sağ tarafındaki tek elektron terimleri, çekirdeğe göre elektronların kinetik ve potansiyel enerjilerini; iki elektron terimleri de elektronlar arası Coulomb potansiyel enerjilerini tanımlar. Hamiltonyen aynı zamanda yaklaşık olarak

$$H_{NR} = H_0 = \sum_{i=1}^N h_0(i) = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} + u_i(r_i) \right) \quad (3.4)$$

şeklinde yazılır. Burada $u_i(r)$, sadece r 'ye bağlıdır. (3.4)'e göre her elektron

$$V_i^C(r) = -\frac{Z}{r} + u_i(r) \quad (3.5)$$

merkezi alanında hareket eder. Bu alanda küresel simetri

$$\left(-\frac{1}{2} \nabla^2 + V_i^C(r) \right) \psi_i(r, \theta, \varphi, \sigma) = \epsilon_i \psi_i(r, \theta, \varphi, \sigma) \quad (3.6)$$

dir. Bağ durumları ($\epsilon_i < 0$) için, ψ_i çözümleri küresel koordinatlarda

$$\psi_{nlm_l m_s}(r, \theta, \varphi, \sigma) = \frac{P_{nl}(r)}{r} Y_{lm_l}(\theta, \varphi) \chi_{m_s}^{(1/2)}(\sigma) \quad (3.7)$$

şeklinde yazılır. Burada l ve $s = 1/2$ sırasıyla yörünge ve spin kuantum sayılarını gösterir. m_l ve m_s , z-ekseni boyunca l ve s 'nin izdüşümünü, ve σ spin değişimini gösterir. $P_{nl}(r)$ radyal dalga fonksiyonları, SUPERSTRUCTURE'da (Eissner ve ark., 1974) olduğu gibi genellikle başlangıçta verilen sayısal veya istatistik bir modele dayanarak elde edilirler. Örneğin Thomas-Fermi istatistiksel model ile radyal fonksiyonlar,

$$\left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + V_{nl}(\lambda_l, r) + \frac{l(l+1)}{2r^2} \right) P_{nl}(r) = \epsilon_{nl} P_{nl}(r) \quad (3.8)$$

radyal denkleminin çözümleridir. Bağ (ya da sınır) koşullarına bağlı olarak

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \{P_{nl} / r^{l+1}\} = A_{nl} \quad \text{ve} \quad \lim_{r \rightarrow \infty} \{P_{nl}(r)\} = B_{nl} \exp(-\sqrt{\epsilon} r) \quad (3.9)$$

yazılabilir. (3.8) eşitliğindeki $V_{nl}(\lambda_l, r)$, Gombas (1956) tarafından tanımlanan Thomas-Fermi-Dirac istatistiksel model potansiyelidir. Bu potansiyel

$$V(\lambda_l, r) = L(Z, N, r / \lambda_l) / r \quad (3.10)$$

olarak da yazılabilir. Burada

$$\lim_{r \rightarrow 0} L(Z, N, r / \lambda_l) = Z \quad \text{ve} \quad \lim_{r \rightarrow \infty} L(Z, N, r / \lambda_l) = Z - (N - 1) \quad (3.11)$$

dir. (3.8)'deki potansiyel aynı l 'ye sahip tüm radyal fonksiyonlar için aynı olduğundan,

$$\int_0^{\infty} P_{nl}(r) P_{n'l'}(r) dr = \delta_{nn'} \quad (3.12)$$

şeklinde ortogonallik şartları uygulanabilir. Başlangıçta sayısal olarak verilen radyal fonksiyonlar için ise

$$Q_{nl}^{(0)}(r) = \left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2Z}{r} \right\} P_{nl}^{(0)}(r) \quad (3.13)$$

eşitliğini kullanarak yeni radyal fonksiyonlar belirlenir. Radyal dalga fonksiyonları değişik varyasyonel ölçüm parametrelerinin dikkate alındığı farklı potansiyel ile başlanarak da yazılabilir. Örneğin Badnell (2011) tarafından Thomas-Fermi-Dirac-Amaldi potansiyeli dikkate alınır.

3.3. Açısal Momentum Çiftlenimleri

Bir atomun toplam açısal momentumu, (J), o atomun yörünge açısal momentumu (L) ve spin açısal momentumunun (S) toplanması ile elde edilir. Atomlarda elektronların ve çekirdek içinde nükleonların açısal momentumlarının (ya da manyetik dipol momentlerin) çiftlenim şekillerini, çiftlenimin olduğu yerdeki manyetik alan şiddetleri belirler. Bu manyetik alan, ya sistemin iç yapısından kaynaklanan bir yerel alan ya da çekirdeğin dışından uygulanan bir dış alandır (Aygün ve Zengin, 1998).

Elektrostatik enerji düzeltmesi ve spin yörünge terimi, merkezci alan Hamiltonyenine pertürbasyon olarak eklenir. Bu pertürbasyon hesabının yapılma biçimi bu düzeltme terimlerinin bağıl büyüklüklerine bağlıdır. Pertürbe eden değerler aynı mertebede olmaları halinde, bunların aynı adımda türetilmesi gerektiğinden, incelenmesi zordur ve ara çiftlenim (intermediate coupling) olarak bilinir (Köksal ve Gümüş, 1999) Bu pertürbasyonlardan birinin diğerinden çok büyük olması durumlarında ise ‘ LS -çiftlenimi’ (Russel-Saunders çiftlenimi) veya ‘ jj -çiftlenimi’ oluşur. Özellikle hafif atomlarda LS -çiftlenimi oluşurken, ağır atomlara doğru gidildikçe, jj -çiftlenimine rastlanır.

3.3.1. *LS*-çiftlenimi

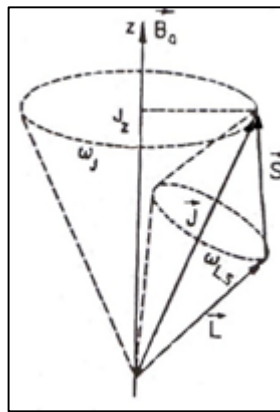
LS-çiftlenimi, Russel-Saunders çiftlenimi veya atom üzerine uygulanan dış alan Zeeman bölgesinde kaldığı sürece çiftlenim şekli bozulmadığından ‘zayıf alan çiftlenimi’ olarak da adlandırılır. Bu çiftlenim modeline daha çok hafif atomlarda rastlanır. Bunun nedeni, spin yörünge teriminin elektrostatik enerji düzeltmesi yanında çok küçük olmasıdır. Dolayısıyla spin-yörünge etkisi $\mathbf{l}_i \cdot \mathbf{s}_i$ ihmal edilebilir. Atomun elektronlarının yörünge açısal momentumları ve spin açısal momentumları kendi aralarında

$$\mathbf{L} = \sum_i \mathbf{l}_i \quad \text{ve} \quad \mathbf{S} = \sum_i \mathbf{s}_i \quad (3.14)$$

şeklinde ayrı ayrı birleşerek atomun toplam yörünge ve spin açısal momentumlarını oluştururlar. Atomun elektronlarına ait toplam açısal momentumu ise

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad (3.15)$$

ile belirlidir. Çiftlenimlerin vektörel toplamla ifade edilmesi önemlidir (Fließbach, 1991). *LS*-çiftlenim modeli Şekil 3.1.’de gösterilmektedir.



Şekil 3.1. *LS*- çiftlenim modeli (Aygün ve Zengin, 1998)

LS-çiftlenim modelinde \mathbf{L} ve \mathbf{S} vektörleri çift oldukları \mathbf{J} etrafında bir ortak ω_{LS} açısal frekansı ile presesyon hareketi yaparken, eğer bir dış alan (Zeeman bölgesinde)

uygulanmış ise, J dış alan etrafında w_J frekansı ile presesyon hareketi yapar. Dış manyetik alan LS -çiftlenimini kıramadığında $w_{LS} > w_J$ olacağı açıktır. Kuantum sisteminin durumunu belirleyen geçerli kuantum sayıları bu modelde l, m_l, s ve m_s olur.

$l_i \cdot s_i$ gibi tek bir terimin katkısı küçüktür fakat L ve S 'ye eklendikten sonra tüm sistemin spin ve yörüngeye ilişkin değerleri birbiriyle etkileşir ve Hamiltonyene katkıda bulunur. Enerji katkısını elde etmek için, LS -çiftlenim durumunun bra ve ket vektörleri, sistemin Hamiltonyen işlemcisinin terimine etki etmelidir yani $L \cdot S$ ile orantılıdır (Fließbach, 1991). Bu yaklaşım enerjiye birinci dereceden düzeltmeyi elde etmek için gereklidir. Spin yörünge teriminden pertürbasyon teorisiyle J 'ye bağlı ince yapı elde edilir. $L \cdot S$ ile orantılı terim, aynı alt uzayı sağlayarak köşegenleştirilebilir ve spin-yörünge terimi Wigner-Eckart teoremiyle gösterilebilir (Cornwell, 1997):

$$\langle E_{LS} \rangle = \langle L, S, J, m_J | H_{LS} | L, S, J, m_J \rangle = \langle \Psi_{LSm_J} | L \cdot S | \Psi_{LSm_J} \rangle \quad (3.16)$$

$$= \frac{1}{2} \left(\langle \Psi_{LSm_J} | J^2 - L^2 - S^2 | \Psi_{LSm_J} \rangle \right) \quad (3.17)$$

$$= \frac{1}{2} \left(\langle \Psi_{LSm_J} | (J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)) | \Psi_{LSm_J} \rangle \right) \Psi \quad (3.18)$$

$$= \frac{1}{2} (J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)) \quad (3.19)$$

Spin yörünge düzeltmesi ve H Hamiltonyenli sistemin ortonormal olması için

$$| \Psi_{LSm_J} \rangle = | L, S, J, m_J \rangle \quad (3.20)$$

olduğu kabul edilir (Landau ve Lifshitz, 1987). L ve S 'nin verilen değerlerine ait mümkün J değerleri,

$$J = |L - S|, |L - S| + 1, \dots, L + S - 1, L + S \quad (3.21)$$

dir. L, S, J ve m_J ile karakterize edilen mümkün durumlar genel bir terimlendirme ile gösterilir ve bunlar terim sembolü denilen

$${}^{2S+1}L_J \quad (3.22)$$

ile ifade edilir. Parite belirtilmek istenirse ‘^o’ (tek parite için) veya ‘^e’ (çift parite için) sağ üst indisi eklenir. Parite açısal momentum kuantum sayılarının toplamının tek veya çift oluşuna göre tek veya çifttir ve

$$P = (-1)^{\sum_{i=1}^N l_i} \quad (3.23)$$

ile verilir. Bir terim sembolü bir seviyeyi (L, S, J) ifade eder. m_J ’yi de içeren tüm kuantum sayıları seti bir durum olarak adlandırılır. Açısal momentum işlemcisi özdeğerini ifade etmek için L Tablo 3.1.’deki gibi harflerle ifade edilir ve çizgi karakteristikleri arasındaki ilişkiden dolayı spektroskopik gösterim olarak adlandırılır. Bu gösterimde l kuantum sayısının $0 \leq l \leq (n-1)$ aralığında tam sayı olan değerlerine karşılık, baştan itibaren sıra ile S (keskin), P (baş), D (dağınık), F (temel) seri ve devamında Latin alfabesinin harfleri ile tamamlayarak bir gösterim (notasyon) oluşturulur.

Tablo 3.1. Spektroskopik gösterim

Açısal momentum değeri (l)	0	1	2	3	4	5	6	7	...
Elektronlar	S	P	D	F	G	H	I	K	...
Seviyeler	s	p	d	f	g	H	i	k	...

$2S+1$ tane farklı m_s değerine ayrılması sol üst köşede çok katlılık (çokluk) simgesi olmasına neden olur. Çok katlılık spektroskopide oluşan çizgi sayısı demektir. $2S+1=1$ (yani $S=0$ ise) bu terime tekli denir. $2S+1=2, 3, 4, \dots$ ise bunlara da sırasıyla ikili, üçlü, dörtlü v.b. denir. m_j değerleri bu notasyonda gösterilmez. LS -çiftlenimindeki durumlar bu değerle karakterize edilmez ve J 'nin her değerinin $2J+1$ durumu kadar katlılığı olur. Bunlar bir ölçüm durumunda bu değerlere ayrılır ve özel bir yön belirtir. Bu durumda J nin izdüşümüyle m_j önemli olur. Geçiş sırasında bazı özel yönlerde manyetik alan uygulanması deneysel olarak bu özellik ayrılmasını ortaya çıkarabilir. m_l 'nin $2L+1$ mümkün değeri vardır. S ve L değerlerinin her eş takımı için $(2L+1)(2S+1)$ katlılığına sebep olur. Pertürbasyonların eklenmesiyle birlikte enerji düzeylerinde yarılmalar gözlenecektir.

3.3.2. jj -çiftlenimi

Spin-yörünge teriminin elektrostatik enerji düzeltmesinden daha büyük olduğu durumlarda jj -çiftlenimi meydana gelir. Spin yörünge etkileşme enerjisi Z^4 ile orantılı iken, elektrostatik düzeltme Z ile orantılıdır. Bu nedenle, elektrostatik düzeltme terimine göre, spin yörünge teriminin öneminin, Z artarken artacağı beklenir. Buna göre jj -çiftlenimi, Z değeri büyük olan atomlar ya da iyonlar için oluşabilir. Gerçekten saf jj -çiftlenimi nadir bulunur; fakat ağır atomların spektrumu, jj -çiftlenimi ile belirlemeye yakın bir yapı gösterirler. jj -çiftleniminin en iyi örneklerini yüksek Z değerine sahip büyük yüklü iyonlar oluştururlar. Çünkü bu durumda elektrostatik düzeltme teriminin bağıl önemi, elektronların sayısındaki düşüş nedeniyle azalır (Köksal ve Gümüş, 1999).

jj -çiftleniminde her bir elektronun kendi spin ve yörünge etkileşmesi sonucu tek elektron toplam açısal momentumu

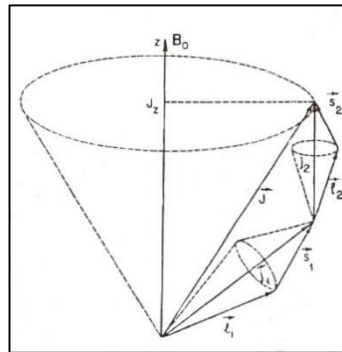
$$\mathbf{j}_i = \mathbf{l}_i + \mathbf{s}_i \quad (3.24)$$

şeklinde oluşur ve bu açısal momentumlar da toplanarak tüm sistemin toplam açısal momentumu

$$\mathbf{J} = \sum_{i=1}^N \mathbf{j}_i \quad (3.25)$$

olarak elde edilir. Tek elektron vektör nicelikleri aynı m_{l_i} ve m_{s_i} 'ye sahiplerdir. Daha sonra mümkün j_i 'ye eklenirler. Son olarak da bunlar toplanarak toplam açısal momentum \mathbf{J} 'yi oluştururlar. Fakat tek elektron niceliklerinden Pauli ilkesine uyan kombinasyonlar fiziksel olarak mümkün olur. LS -çiftleniminde eşdeğer elektronlar aynı n ve l 'ye sahipken, jj -çiftleniminde eşdeğer elektronlar aynı n_i , l_i ve j_i 'ye sahiptir. Aynı zamanda etkin kuantum sayıları da n , l , j ve m_j 'dir.

jj -çiftlenimi durumunda spektrum terimleri için gösterim, her bir elektronun, (n_i, l_i, j_i) kuantum sayılarını ve \mathbf{J} toplam açısal momentum kuantum sayısını belirlemesi gerekir. Bireysel j_i 'lerin değerleri genel olarak parantezler arasında ve J alt indis olarak yazılır. jj -çiftlenim modeli Şekil 3.2.'de gösterilmektedir (Aygün ve Zengin, 1998).



Şekil 3.2. İki elektronlu bir atomda, manyetik alanın Paschen-Back bölgesinde jj -çiftlenim modeli (Aygün ve Zengin, 1998)

Pertürbasyon düzeltmesiyle elektrostatik düzeltme terimi hesaba katılır. Hamiltonyenin, elektronun (n_i, l_i, j_i) kuantum sayıları takımı ile belirlenen bir E düzeyi artık pertürbasyonun eklenmesi ile sistemin J toplam açısal momentum kuantum

sayısının deęerleri ile gsterilen belirli dzeyele yarılacaktır. *LS*-iftleniminde olduęu gibi, bu dzeyelerin her biri M_j 'ye gre $(2J+1)$ kez katlıdır (dejeneredir).

3.4. Atomik Hamiltonyene Getirilen Bazı Katkılar ve Etkiler

3.4.1. Relativistik dzeltmeler

ok elektronlu sistemin relativistik olmayan davranışında elektronlar arası elektrostatik etkileşim dikkate alınmaktadır. Ancak elektronlar arası etkileşimin relativistik tanımı için Coulomb etkileşimi yetersizdir. Elektronun spin hareketinden gelen manyetik zelliklerin hesaba katılması gerekir. Relativistik modelde elektron hızı ışık hızına yaklaştığından, manyetik etkileşimler daha da nemli hale gelir. Ayrıca ışık hızı sonlu olduğundan, gecikme etkileri grlr.

Relativistik etkiler, aęır atomlar ve ykseke iyonlaşmış sistemlerde daha da nemlidir. Relativistik etkileri hesaba katmak için ya Dirac denklemini ozmek gerekir ya da Schrdinger denklemine en dşk mertebeden relativistik dzeltmeler pertrbasyon olarak eklenir. Bu dzeltmeler ince yapı sabiti α 'nın kuvvetlerine gre tretilir. Relativistik olmayan Hamiltonyene Dirac-Coulomb-Breit yaklaşımları kullanılarak birinci mertebeden dzeltme olan α^2 mertebesinde ek terimler ieren Hamiltonyen 'Breit-Pauli Hamiltonyeni' olarak bilinir.

Radyal dalga fonksiyonları, Breit-Pauli relativistik etkilerini de ierecek şekilde

$$H_{BP} = H_{NR} + H_{RC} \quad (3.26)$$

olarak verilen Hamiltonyenin z fonksiyonları şeklinde elde edilir. H_{NR} , (3.3) ile verilen relativistik olmayan Hamiltonyendir. H_{RC} ise relativistik dzeltme iřlemcilerini ierir:

$$H_{RC} = H_{RC1} + H_{RC2} \quad (3.27)$$

H_{RC1} , bir-cisim işlemcileri olan kütle-hız ($f_i(kütle)$), Darwin ($f_i(d)$) ve çekirdek spin-yörünge ($f_i(so)$) düzeltmelerinden oluşur:

$$H_{RC1} = \sum_{i=1}^N [f_i(kütle) + f_i(d) + f_i(so)] \quad (3.28)$$

burada $f_i(kütle)$, $f_i(d)$ ve $f_i(so)$ sırasıyla

$$f_i(kütle) = -\frac{1}{4} \alpha^2 \nabla_i^4 \quad (3.29)$$

$$f_i(d) = -\frac{1}{4} Z \alpha^2 \nabla_i^2 \left(\frac{1}{r_i} \right) \quad (3.30)$$

ve

$$f_i(so) = \left(\frac{Z \alpha^2}{r_i^3} \right) \mathbf{l}(i) \cdot \mathbf{s}(i) \quad (3.31)$$

şeklindedir. H_{RC2} Hamiltonyeni ise

$$H_{RC2} = H_{FS2} + H_{NFS2} \quad (3.32)$$

olmak üzere iki-cisim işlemcilerinden oluşur. Bu ifadede H_{FS2} , spin-yörünge $g_{ij}(so)$, spin-diğer yörünge $g_{ij}(so + so')$ ve spin-spin $g_{ij}(ss')$ düzeltmelerini kapsayan iki-cisim ince yapı işlemcisidir:

$$H_{FS2} = \sum_{i<j} \left(g_{ij}(so + so') + g_{ij}(ss') \right) \quad (3.33)$$

Burada

$$g_{ij}(so + so') = -\alpha^2 \left[\left(\frac{i \cdot j}{r_{ij}^3} \times p_i \right) \cdot (s(i) + 2s(j)) + \left(\frac{r_{ij}}{r_{ij}^3} \times p_i \right) \cdot (s(j) + 2s(i)) \right] \quad (3.34)$$

ve

$$g_{ij}(ss') = 2\alpha^2 \left[\frac{s(i) \cdot s(j)}{r_{ij}^3} - 3 \frac{(s(i) \cdot r_{ij})(s(j) \cdot r_{ij})}{r_{ij}^5} \right] \quad (3.35)$$

dır. (3.32) H_{NFS2} 'deki, iki-cisim ince yapı olmayan işlemcileri olan spin-spin temas $g_{ij}(css')$, Darwin $g_{ij}(d)$ ve yörünge-yörünge $g_{ij}(oo')$ düzeltmelerinden oluşur:

$$H_{NFS2} = \sum_{i<j} \left(g_{ij}(css') + g_{ij}(d) + g_{ij}(oo') \right) \quad (3.36)$$

Buradaki $g_{ij}(css')$, $g_{ij}(d)$ ve $g_{ij}(oo')$ ifadeleri

$$g_{ij}(css') = -\frac{16\pi}{3} \alpha^2 s(i) \cdot s(j) \delta(r_{ij}), \quad (3.37)$$

$$g_{ij}(d) = -\frac{1}{2} \alpha^2 \nabla_i^2 \left(\frac{1}{r_{ij}} \right) \quad (3.38)$$

$$g_{ij}(oo') = -\frac{\alpha^2}{r_{ij}} \left(\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{p}_j + \frac{\mathbf{r}_{ij} \cdot (\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{p}_j) \mathbf{p}_i}{r_{ij}^3} \right) \quad (3.39)$$

dır (Eissner ve ark., 1974; Badnell, 1997). Breit-Pauli Hamiltonyeni \mathbf{J} toplam açısal momentum işlemcisi ile sıra değiştirir ve karşılık gelen dalga fonksiyonu ise \mathbf{J}^2 ve J_z 'nin özfonksiyonları olmalıdır. Çok konfigürasyonlu yaklaşımda, Breit-Pauli dalga fonksiyonları,

$$\Psi(\gamma JM_J) = \sum_{i=1}^M c_i \Phi(\gamma L_i S_i JM_J) \quad (3.40)$$

şeklinde lineer kombinasyonlar (birleşimler) olarak verilir. Burada $\Phi(\gamma LSJM_J)$ 'ler LSJ çiftlenimli konfigürasyon hal fonksiyonlarıdır (CSF):

$$\Phi(\gamma LSJM_J) = \sum_{M_L M_S} \langle LM_L SM_S | LSJM_J \rangle \Phi(\gamma LM_L SM_S) \quad (3.41)$$

İnce yapı olmayan etkileşimler iyonlaşma potansiyellerini, toplam enerjileri ve terim ayrışmasını etkiler. Bu etkileşimlerin hesaba katıldığı sonuçlar deneysel değerlere daha yakın çıkar. İki-cisim ince yapı olmayan etkileşimler, tek-cisim relativistik terimlere göre korelasyon etkilerine daha duyarlıdır ve tek-cisim relativistik düzeltmelerin yanında küçük bir katkısı olmasına rağmen önemlidir. Relativistik durum küçük Z 'li atomlarda çok fazla katkısı olmamasına rağmen, büyük Z 'li atomları daha çok etkilemektedir (Eissner ve ark.,1974).

Bir-cisim işlemcileri $Z^4\alpha^2$ mertebesindeyken, iki-cisim işlemcileri $Z^3\alpha^2$ mertebesindeydir. Yüksek Z 'li atomlarda tek-cisim işlemciler daha baskındır fakat kapalı tabakaların sayısı arttıkça bazı iki-cisim işlemcileri de tek-cisim işlemcisi mertebesi ($Z^4\alpha^2$) gibi davranır (Blume ve Watson, 1962). İnce yapı işlemcilerinden farklı olarak, ince yapı olmayan işlemciler L^2 ve S^2 ile komute ederler (sıra değiştirirler) (Badnell, 1997).

3.4.2. Kuantum elektrodinamik (QED) düzeltmeler

QED etkileri bir veya iki elektronlu iyonların en içteki enerji seviyelerinin Lamb kaymasında açıkça görülür. QED'nin etkisini gösterdiği diğer bir özellik ince yapı yarılmalarıdır. Aynı zamanda Zeeman etkisi ve bağ elektronlarının g -çarpanı QED etkileri ile ilgilidir ve elektromanyetik iyon tuzaklarında ölçülebilir (Gumberidze, 2003).

Kuantum elektrodinamiğin temel yöntemi Dirac, Jordan, Pauli, Heisenberg, Born, Fock, Wigner ve Fermi gibi ileri gelen teorisyenlerin çalışmalarında formüleştirildi. Bu teori, foton ve elektron pozitron çiftlerinin yaratma ve yok etme süreçlerini en basit şekilde tanımlanmasını sağladı. Fakat bu yöntemlerin yüksek dereceden pertürbasyon teorilerine uygulanması sonuç vermedi. Lamb ve Retherford mikrodalga tekniğini kullanarak $2s_{1/2}$ ve $2p_{1/2}$ durumlarının bağlanma enerjileri arasındaki küçük farkı keşfedene kadar bu problem çözümlenemedi (bu Lamb kayması olarak adlandırıldı) (Lamb ve Retherford, 1947). Bu ayrım relativistik kuantum mekaniği ile açıklanamadı. Dirac denkleminde göre çekirdek boyutu düzeltmeleri hidrojen için çok küçük olurken, bu seviyelerin enerjileri aynı olmalıydı. Enerjideki bu yarılmının vakum polarizasyondan geldiği ortaya çıktı. Bu katkı, gözlenen Lamb kaymasını açıklamak için çok küçüktü (-27 MHz). Önceki kuantum elektrodinamikte bu katkı hesaplanamıyordu. İlk olarak Bethe bu katkıyı hesaba kattı. Kramer yeniden normalizasyon görüşünü kullanarak bu etkiyi 1040 MHz elde etti. Daha sonra Dyson, Feynman, Schwinger ve Tomonaga QED teorisini sonuçlandırdı (Schweber, 1994). Yeniden normalizasyon yöntemiyle teorideki bu farkın giderilebileceğini buldular. Yeniden normalizasyonun temel görüşüne göre, elektron kütlesi ve elektron yükü gibi teoride bulunan parametreler doğrudan ölçülebilen nicelikler değildir. Deneyde doğrudan ölçülebilen fiziksel parametreler cinsinden ifade edildiklerinde tüm fiziksel niceliklerin QED hesaplamaları sonlu çıkar. QED'deki tüm hesaplamalar pertürbasyon teorisi ince yapı sabitini $\alpha=1/137,036$ temel alır (Gumberidze, 2003).

Kuantum elektrodinamik katkıları, öz enerji ve vakum polarizasyonu katkılarını içerir. Serbest bir elektronun öz enerjisi, klasik elektron yarıçapına sahip küre düzgün

yüklenmiş ise m_0c^2 mertebesinde. Öz enerji genellikle kendi ışınım alanı ile etkileşiminden dolayı bir elektronu düzenlemek zorunda olan enerji olarak hesaba katılır. Yani sanal bir fotonun yüklü parçacık tarafından yayılması ve yeniden soğurulması anlamına gelir. Bu enerji, elektron bağ durumundayken değişebilir, bir bakıma elektron kütesinin artışına benzerdir. Bu değişim enerji seviyesi hesaplamalarında hesaba katılmalıdır.

Vakum polarizasyonu, Coulomb yasasındaki kısa süreli değişimleri tanımlayıcı terimdir. Yani, foton değişimiyle yüklü bir parçacığın, sanal elektron pozitron çiftine eşleşmesini tanımlar. Yüklü parçacık, dielektriğin kutuplanmasına benzer şekilde, yükünü azaltarak vakumda kutuplanır. Vakumdaki sanal elektron pozitron çifti, yüklü parçacığın varlığından etkilenir. Bir elektron olması halinde ise pozitron çekecek ve sanal elektron itecektir. Bu durum, elektron yükünü perdeleyen vakum polarizasyonuna neden olur. Çekirdeğin Coulomb alanında bir elektron için vakum polarizasyon düzeltmesi, Coulomb potansiyeline Uehling düzeltmesi (Uehling, 1935) eklenerek hesaba katılır. İnce yapı sabiti α , mesafe ve enerjiye göre bir parça değişecektir (Nikolic, 2004).

Diğer bir QED etkisi elektronun g -çarpanının, Dirac değerinden küçük bir sapmasından oluşur. Dirac denklemine göre elektron manyetik momentinin mekanik momentine oranı olan serbest elektron g -çarpanı 2'ye eşittir. QED, bu değere bazı düzeltmeler getirir. Schwinger (1981) tarafından türetilen en düşük dereceden katkı eklendiğinde,

$$g_{teorik} = 2 \frac{(1+\alpha)}{(\pi + \dots)} \approx 2 \cdot (1,00116) \quad (3.42)$$

elde edilir. Schwinger'in düzeltmesi Kusch ve Foley (1947) tarafından deneysel olarak

$$g_{deneysel} = 2 \cdot 1,00119(5) \quad (3.43)$$

şeklinde desteklendi. Hidrojendeki Lamb kaymasının yanı sıra serbest elektron g -çarpanı değeri deneysel ve teorik sonuçlarda çok yüksek doğrulukla elde edilmektedir (Drake, 1996).

1970'lerin başlarında QED düzeltmeleri hidrojen ve helyum gibi düşük Z 'li sistemler için araştırıldı. α 'ya ek olarak bu sistemlerde küçük parametre olarak αZ parametresi vardı. Bunun sonucu olarak düşük Z 'li sistemler için tüm hesaplamalar α ve αZ 'ye dayandı. Yüksek Z 'li sistemlerde αZ parametresi küçük değildi ve böylece αZ açılımına dayanan hesaplamalar geçerli değildi. Ancak α 'ya ek olarak birkaç elektronlu iyonlarda diğer bir küçük parametre $1/Z$ vardı. Bu parametre, elektron çekirdek etkileşimine ($\sim Z^2$) göre elektronlar arası etkileşim gücünü ($\sim Z$) yansıtır. Diğer yandan bağ enerjisine ($\sim (\alpha Z)^2$) göre ışınım düzeltmeleri ($\sim \alpha(\alpha Z)^4$), $(\alpha(\alpha Z)^2)$ ile ölçeklendirilir. Çok yüksek Z 'li sistemler için, $1/Z$ parametresi, α ile karşılaştırılabilir ve böylece ışınım düzeltmeleri, elektronlar arası etkileşim düzeltmeleri gibi aynı seviyeye katkıda bulunur. Yüksek Z 'li birkaç elektronlu sistemler için, elektronların birbirleriyle etkileşmesi ve elektromanyetik alanla etkileşmesi (sırasıyla $1/Z$ ve α çarpanları kadar) çekirdek etkileşmesinden çok küçüktür. Böylece atomun elektronlarının sıfıncı dereceden yaklaşımını, sadece çekirdeğin Coulomb alanı ile etkileşmesi olarak kabul etmek doğaldır. Elektronların elektromanyetik alanla etkileşimi pertürbasyon teorisiyle hesaba katılır (Gumberidze, 2003).

Hidrojen-benzeri iyonlar için Lamb kayması, $\hbar = e = m_e = 1$ alındığında,

$$\Delta\mathcal{E}_{QED} = \frac{\alpha^3 Z^4}{\pi n^3} F_n(\alpha Z) \quad (3.44)$$

eşitliğiyle ifade edilir (Shabaev ve ark. 2013). (3.44)'te n baş kuantum sayısını, α ince yapı sabitini, Z çekirdek yükünü göstermektedir. Bu ifade köşegen olmayan matris elemanları için şu şekilde genelleştirilebilir:

$$\sigma_{n,n'} = \frac{\alpha^3 Z^4}{\pi (nn')^{3/2}} F_{n,n'}(\alpha Z) \quad (3.45)$$

F fonksiyonu; αZ ve n, n' katsayılarına zayıfça bağlıdır. Bu fonksiyon Shabaev ve arkadaşları (2013) tarafından tablolaştırıldı.

$$\frac{Z^3}{\pi(nn')^{3/2}} = |\Psi_n(0)\Psi_{n'}(0)| \quad (3.46)$$

olduğundan,

$$\sigma_{n,n'} \frac{\alpha^3 Z}{\pi} = |\Psi_n(0)\Psi_{n'}(0)| F_{n,n'}(\alpha Z) \quad (3.47)$$

elde edilir. Bu ifade, sadece hidrojen-benzeri iyonlar için değil, aynı zamanda çok elektronlu atomların valans elektronları için de kullanılır. Sobelman (1979)'a göre merkezdeki elektron yoğunluğu, bağlanma enerjisi ε_ν cinsinden ifade edilebilir. Bağlanma enerjisi,

$$\varepsilon_\nu = \frac{(Z_i + 1)^2}{2\nu^2} \quad (3.48)$$

olduğundan,

$$|\Psi_\nu(0)\Psi_{\nu'}(0)| = \frac{(Z_i + 1)^2 Z}{\pi(\nu\nu')^{3/2}} = \frac{(4\varepsilon_\nu \varepsilon_{\nu'})^{3/4} Z}{\pi(Z_i + 1)} \quad (3.49)$$

olur. Bu ifadede Z_i , iyon yükü (nötral atomlar için $Z_i=0$ dır) ve ν , etkin kuantum sayısıdır. Bu durumda QED düzeltmesi

$$\sigma_{\nu,\nu'} = \frac{(4\varepsilon_\nu \varepsilon_{\nu'})^{3/4}}{\pi(Z_i + 1)} \alpha^3 Z^2 F(\alpha Z) \quad (3.50)$$

halini alır (Konovalova ve Kozlov, 2015).

3.4.3. Korelasyon etkileri

Atom teorisi, her elektronun, çekirdeğin çekimi ve bir elektron ile diğer elektronlar arasındaki itme etkileşimlerinin ortalama etkisini gösteren bir etkin potansiyelde hareket ettiği düşünülen bağımsız parçacık modelini temel alır. Çoğu atom ve sistemin yapısı bu modele uymaktadır. Elektronların hareketindeki etkileşim ihmal edilirse, her elektronun diğer elektronlar tarafından belirlenen bir alanda bağımsız olarak hareket ettiği varsayılır. Elektronlar arasındaki bu etkiler ‘korelasyon etkileri’ olarak adlandırılır ve korelasyon etkilerinin ihmal edilmesiyle enerjideki hata ‘korelasyon enerjisi’ olarak tanımlanır. Özel olarak, varyasyon-pertürbasyon yöntemi çeşitli atomlar ve iyonlar için korelasyon enerjilerini elde etmek için başarılı bir şekilde uygulanabilir. Başka bir biçimde varyasyonel yöntem, Slater determinantlarının lineer bir birleşimi,

$$\Phi = \sum_i c_i \Phi_i \quad (3.51)$$

olan Φ deneme fonksiyonu ile kullanılabilir. Buradaki c_i katsayıları varyasyonel değişkenlerdir. Çeşitli Φ_i Slater determinantları, elektronlar tarafından işgal edilen spin-yörüngesilerin seçiminde farklı olur ve bu nedenle farklı yerleşimlere karşılık gelirler. Bu yaklaşım konfigürasyon-etkileşme yöntemi olarak bilinir (Köksal ve Gümüş, 1999).

Enerji seviye değerlerini ve ışımali geçiş parametrelerini de etkileyen korelasyon etkileri genel olarak 3 farklı şekilde sınıflandırılır. a ve b iki yörünge olmak üzere, ab yörüngelerinden elektron uyarılmaları gerçekleştiğinde, ab yörüngelerinin ikisi de valans (değerlik) yörüngesi ise bu korelasyona valans-valans korelasyonu, ab yörüngelerinin biri öz, diğeri valans yörüngesi ise bu korelasyona öz-valans korelasyonu denir. Yani öz-valans korelasyonunda valans yörüngesinin yanı sıra, kapalı alt tabakalardan da uyarılmalar olur. Elektron uyarılmalarının yapıldığı yörüngelerin her ikisi de öz yörüngesi ise bu korelasyona da öz-öz korelasyonu denir.

Bu korelasyon modelinde tüm uyarılmalar kapalı yörüngelerden olur (Fischer ve ark., 1997).

3.5. Işımalı ve Işımasız Geçişler

3.5.1. Enerji seviyeleri arasındaki ışmalı geçişler

Atomdaki ışmalı geçiş, iki durum arasındaki bir elektromanyetik geçiş olarak tanımlanır ve fotona ait açıl momentum ve parite ile karakterize edilir (Fischer ve ark., 1997). Atom, foton soğurmasıyla daha yüksek seviyelere uyarılır ya da uyarılmış atom yayınlama ile ışımaya yapar. Soğurulmuş ya da yayınlanmış foton k açıl momentumuna sahipse ve paritesi $\pi = (-1)^k$ ise, geçiş bir elektrik çok kutuplu (Ek) geçiştir. Fakat foton $\pi = (-1)^{k+1}$ paritesine sahipse geçişe ‘manyetik çok-kutuplu (Mk) geçiş’ denir. Genelde en büyük geçiş hızı elektrik dipol ($E1$) ışımada olduğundan ($1/\alpha^2$ kadar) $E1$ geçişleri ‘izinli’, daha yüksek dereceden elektrik ve manyetik geçişler ‘yasaklı’ olarak adlandırılır.

Işımalı geçiş bilgisi, astrofizik, plazma fiziği, termonükleer füzyon araştırmaları, lazerle izotop ayırma ve lazer sistemlerinin geliştirilmesi gibi birçok alan için çok önemlidir. Atomik spektroskopideki ışmalı geçiş olasılığı, salınıcı şiddeti gibi parametreler, hem atomik özelliklerin belirlenmesinde hem de deneysel verilerin yorumlanmasında önemli bir rol oynamaktadır. Geçiş olasılıklarının, sıcaklık ve atomik konsantrasyon ölçümlerinin doğruluğunu test etmek ve analizini yapmak için kullanılan geçişlerin seçiminde önemli bir yeri vardır. Uzak yıldızlarla ilgili bilgi edinmek için, güneş ışığından bize ulaşan soğurma çizgilerinin ince yapı çizgileri arasındaki geçiş olasılıkları incelenir. Uzak gezegenlerdeki madde miktarı, geçiş olasılıklarıyla ilişkilidir. Ayrıca geçiş olasılıkları, yerel olmayan denge plazmalarının modellenmesi ve spektral analizinde çok önemliyken, salınıcı şiddeti de güneş spektrumu için önemlidir (Pinnington ve ark., 1984; Liang ve ark., 2013).

Elektrik çok kutuplu ışınımında doğal (kendiliğinden) yayınlama için $A^{[k]}$ geçiş olasılığı, $S^{[k]}$ çizgi şiddeti cinsinden

$$A_{i'i}^{[k]} = G^{[k]} \alpha^{2k+1} (E_i - E_{i'})^{2k+1} (1/g_i) S^{[k]}(i, i') \quad (3.52)$$

eşitliğiyle verilir. Burada 2^k çok kutupluluğu gösterir. i ve i' sırasıyla ilk ve son durumlardır. g_i başlangıç durumun istatistiksel ağırlığıdır ve $G^{[k]}$ sayısal çarpandır. Elektrik dipol ve kuadrupol ışınımında $G^{[k]}$,

$$G^{[1]} = 1/3 \quad \text{ve} \quad G^{[2]} = 1/160 \quad (3.53)$$

değerlerini alır. (3.52) eşitliğinde E enerjileri Rydberg cinsinden, $S^{[k]}$ Bohr yarıçapı cinsinden, $A_{i'i}^{[k]}$ Rydberg süresinin tersi cinsindedir.

$$\tau_0 = \frac{2a_0}{\alpha c} = \frac{\hbar}{Ry} = 4,839 \times 10^{17} \text{ s} \quad (3.54)$$

olarak ifade edilen τ_0 , elektron için, hidrojenin temel durumundan yörüngesinin çapı boyunca geçme süresidir. $(1/2)\tau_0$ zamanın atomik birimi olarak adlandırılır. α ve τ_0 ' in değerlerini (Kuhn (1962) tarafından belirlenen atomik birimler) ekleyerek, geçiş olasılığı A_i boyutlu ifadeye geri çevrilir. E ve S boyutsuz alındığında geçiş olasılıkları,

$$A_{i'i}^{[1]} = 2,6774 \times 10^9 \text{ s}^{-1} \times (E_i - E_{i'})^3 \frac{1}{g_i} S^{[1]}(i, i') \quad (3.55)$$

ve

$$A_{i'i}^{[2]} = 2,6733 \times 10^3 \text{ s}^{-1} \times (E_i - E_{i'})^5 \frac{1}{g_i} S^{[2]}(i, i') \quad (3.56)$$

şeklinde yazılır. Bir diğer durum da, ışımalı geçişler soğurma ya da saçılma salınıcı şiddetleri ile tanımlanır. Aynı zamanda g_f ağırlıklı salınıcı şiddeti değeri de kullanılabilir. Salınıcı şiddeti, spektroskopik geçiş için soğurmaya karşılık gelen atom başına elektronların sayısı olarak tanımlanabilir. Yani, geçişin şiddetini ifade etmek için kullanılan boyutsuz bir niceliktir. Salınıcı şiddeti

$$f_{ii'}^{[1]} = \frac{1}{g_{i'}} \frac{E_i - E_{i'}}{3} S^{[1]}(ii') \quad , \quad E_{i'} < E_i \quad (3.57)$$

ve ağırlıklı salınıcı şiddeti de

$$(gf)_{ii'} = (gf)_{i'i} = g_i |f_{i'i}| = g_{i'} |f_{ii'}| \quad (3.58)$$

ile tanımlanır. Hem A hem f için atomik geçiş özellikleri, başlangıç ve son durumlar (i, i') için gf 'ye simetrik olan $S^{[k]}$ çizgi şiddeti ile desteklenir. $S^{[k]}(i, i')$, 2^k çok kutuplu ışınımı için, yük dağılımının k . momentinin matris elemanlarından düzenlenir. $S^{[k]}$ çizgi şiddeti

$$S^{[k]}(i, i') = S^{[k]}(i', i) = \sum_K |\langle i | \mathbf{P}^{[k]} | i' \rangle|^2 \quad (3.59)$$

olarak ifade edilir. Burada,

$$\mathbf{P}^{[k]} = b^{[k]} \mathbf{R}^{[k]} = b^{[k]} \sum_{p=1}^N r_p^{[k]} \quad (3.60)$$

dır. Küresel tensör işlemcisi $C_{(p)}$ cinsinden $r_{(p)}$ bir parçacık vektörü,

$$(r_p)_K^{[k]} = r_p^k c_K^{[k]}(p) \quad (3.61)$$

ve b katsayıları

$$b^{[1]} = \sqrt{1} \quad \text{ve} \quad b^{[2]} = \sqrt{2/3} \quad (3.62)$$

olur. (3.59) eşitliğinde P_k yerine P_m alarak,

$$P_m = -\sum_{p=1}^N (I(p) + 2s(p)) \quad (3.63)$$

manyetik dipol çizgi şiddeti tanımlanır. Manyetik dipol geçiş olasılığı bu durumda

$$A_{i'i}^m = \frac{\alpha^2}{12} (E_i - E_{i'})^3 \frac{1}{g_i} S_m(i, i') \quad (3.64)$$

olarak yazılır. Birimler elektrik çok kutuplu geçişteki gibi (3.52) eşitliğiyle aynıdır. α ve τ eklendiğinde

$$A_{i'i}^m = 3,5644 \times 10^4 s^{-1} (E_i - E_{i'})^3 \frac{1}{g_i} S_m(i, i') \quad (3.65)$$

şeklinde manyetik dipol geçiş olasılığı tanımlanır.

3.5.2. Işımalı geçişler için seçim kuralları

Ara çiftlenim (*IC*) seçim kuralları *LS*-çiftlenim kurallarından biraz farklıdır. Seçim kuralları, geçişin tipine (elektrik dipol vs.) ve ara çiftlenim dalga fonksiyonları hesaplanırken Hamiltonyendeki ince yapı terimlerinin tipine bağlıdır. İkinci durumda spin-spin etkileşimi *SL* ve *S'L'* terimleri ile

$$|L - L'| \leq 2 \quad \text{ve} \quad |S - S'| \leq 1 \quad (3.66)$$

eşitliğine göre çiftlenir. Spin-yörünge, spin diğer yörünge etkileşimleri ise

$$|L - L'| \leq 1 \quad \text{ve} \quad |S - S'| \leq 1 \quad (3.67)$$

eşitliğine göre çiftlenir. Breit-Pauli Hamiltonyeninin ince yapı olmayan etkileşimleri ve Coulomb etkileşimleri ise sadece aynı *SL*'ye sahip terimler ile çiftlenir. Ayrıca

parite seçim kuralları daima SL çiftlenim durumuyla aynıdır. Tüm durumlarda $J \rightarrow J$ geçişi izinli değildir (Eissner ve ark., 1974).

Seçim kuralları elektrik dipol geçişlerde,

$$S = S' , \quad |L - L'| \leq 1 \quad \text{ve} \quad |J - J'| \leq 1 \quad (LS\text{-çiftlenimine göre}) \quad (3.68)$$

$$|S - S'| \leq 4, \quad |L - L'| \leq 5 \quad \text{ve} \quad |J - J'| \leq 1 \quad (\text{Ara çiftlenime göre}) \quad (3.69)$$

elektrik kuadrupol geçişlerde,

$$|S - S'| = 0 , \quad |L - L'| \leq 2 \quad \text{ve} \quad |J - J'| \leq 2 \quad (LS\text{-çiftlenimine göre}) \quad (3.70)$$

$$|S - S'| \leq 4, \quad |L - L'| \leq 7 \quad \text{ve} \quad |J - J'| \leq 2 \quad (\text{Ara çiftlenime göre}) \quad (3.71)$$

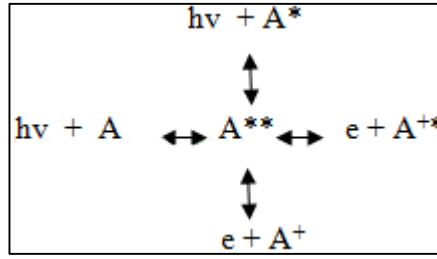
ve manyetik dipol geçişlerde,

$$|S - S'| \leq 4, \quad |L - L'| \leq 4 \quad \text{ve} \quad |J - J'| \leq 1 \quad (\text{Ara çiftlenime göre}) \quad (3.72)$$

şeklindedir.

3.5.3. Kendiliğinden iyonlaşma (Autoionization)

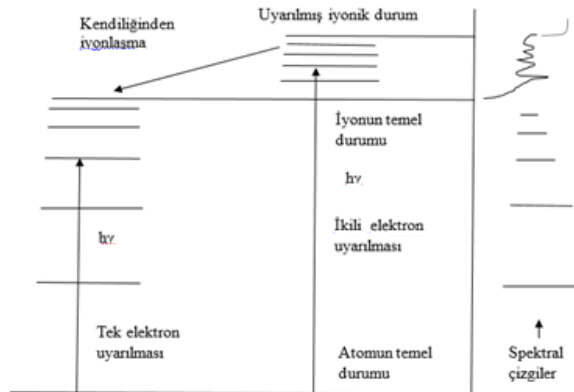
Çok elektronlu atomlarda, uyarılmış bir atoma (A^*) ikinci kez bir foton gönderilirse ya ikili uyarılmış duruma (A^{**}) geçer ya da bir kez uyarılmış duruma geçip bir serbest elektron bulundurabilir. İkili uyarılmış durumda atom fazla kararlı olmadığından ya başlangıç durumuna döner ya da ışıma yapmadan daha alt enerji durumuna geçebilir. Bu durumda elektron serbest hale gelir. Yani sanki foton değil de elektron yayınlıyormuş gibi görünür. Bu durum kendiliğinden iyonlaşmadır (Şekil 3.3.) (Fischer ve ark., 1997).



Şekil 3.3. Kendiliğinden iyonlaşma (Fischer ve ark., 1997)

Kendiliğinden iyonlaşma, ikili uyarılmış durumların bir sonucudur. İki elektron eş zamanlı olarak ayrılır. İki elektronun uyarılma enerjisi, birinci iyonlaşma enerjisini aştığında, ışımaz geçiş meydana gelir. Uyarılmış elektronlardan biri alt seviyeye inerken diğeri atomdan dışarı salınır. Bu süreç ikili uyarılmanın ardından çok hızlı meydana gelir. Uyarılmış durumun ömrü, ışımaz geçişte $10^{-9} - 10^{-7}$ s aralığında iken, kendiliğinden iyonlaşmada $10^{-16} - 10^{-12}$ s gibi daha kısadır. Işımalı geçişler kesikli bölgede olurken, kendiliğinden iyonlaşma geçişlerinde sürekli bölgeyle bir iletişim vardır. Ayrıca ikili uyarılmış durumlar iç tabaka elektronlarında meydana geliyor ise kendiliğinden iyonlaşma süreci Auger etkisi olarak adlandırılır.

Kendiliğinden iyonlaşma ve doğrudan iyonlaşma olaylarının her ikisinde de atom iyonlaşır fakat farklı yolları izleyerek iyonlaşma gerçekleşir. Doğrudan iyonlaşmada iyonlaşma eşiğine geçiş yapılırken, kendiliğinden iyonlaşmada, önce iyonlaşma eşiğinin üstündeki ikili uyarılmış rezonans durumuna çıkılır, sonra iyonlaşma eşiğine geçiş yapılır. Kendiliğinden iyonlaşma şematik gösterimi, helyumun $1snl; n > 1$ durumu için Şekil 3.4.'te verilmektedir (Erkoç ve Uzer, 1996).



Şekil 3.4. Çok elektronlu atomlar için kendiliğinden iyonlaşmanın şematik gösterimi (Erkoç ve Uzer, 1996)

Sürekli durumda bazı kendiliğinden iyonlaşma durumlarının varlığı sistemin soğurma spektrumunda gözlenebilir bir etkiye sahiptir. Kendiliğinden iyonlaşma durumlarının bir diğer özelliği, zamandan bağımsız Schrödinger denklemi, kendiliğinden iyonlaşma durumları için çözülemez (Erkoç ve Uzer, 1996).

Kendiliğinden iyonlaşmanın tarihsel gelişiminde ilk adım 1900'li yıllarda atılmıştır. Majorana 1931'de yayımlanan iki çalışmasında birinci iyonlaşma eşliğinin üstündeki enerji seviyelerini açıkladı (Majorana 1931a, 1931b). Bu çalışmaların birincisinde helyum atomunun $2s^2$, $2s2p$ ve $2p^2$ elektron konfigürasyonlarının çift uyarılmış durumları verildi. İkincisi, civa, çinko ve kadmiyumun iyonlaşma seviyesinin üstündeki $np^2 \ ^3P$ elektron konfigürasyonu ile ilişkilidir ve bu çalışma atomik spektrumdaki kendiliğinden iyonlaşmanın önemi konusunda öncülük etmiştir (Condon ve Shortley, 1935). Bir sonraki önemli çalışma, Beutler (1935) tarafından iyonlaşma seviyesinin üzerindeki seviyeler için soygazların soğurma spektrumu üzerine yapıldı. Bu çalışmada kendiliğinden iyonlaşma sürecinde kuvvetli asimetric soğurma çizgileri gözlemlendi. Daha sonra Fano (1935) sürekli ve kesikli seviyeler üzerine teorik bir analiz yaptı. Elektron saçılmalarıyla kendiliğinden iyonlaşma düzeyleri ilk defa Lassetre ve Symposium (1959) tarafından incelendi. Fano (1961), fotonlar için olan teoriyi elektron saçılmaları için genelleştirdi ve asimetric pik profillerinin, ayırt edilemeyen rezonans düzeyleri ile katlı sürekli düzeylerin girişiminden kaynaklandığını gösterdi. Fano tarafından oluşturulan kendiliğinden iyonlaşmanın teorisi fizikte geniş uygulama alanına sahip oldu.

Kendiliğinden iyonlaşma, atomik ve moleküler spektrumda da çok çeşitli şekilde gözlemlendiğinden spektroskopide önemli bir rol almaktadır (Arimondo ve ark., 2010). 1960'lardan sonra hızlandırıcı ışık kaynakları ve yüksek çözünürlükte elektron çarpışma cihazlarının gelişmesiyle kendiliğinden iyonlaşmaya ilgi arttı. 1970'lerde lazer spektroskopisinin gelişimiyle tekrar bir artış oldu (Aymar ve ark., 1996; Kohler ve ark., 2006). Kendiliğinden iyonlaşmanın Fano modelinin lineer olmayan genelleştirmesi Miroschnichenko ve arkadaşları (2005) ve Zhang ve arkadaşları (2006) tarafından yapıldı. Ayrıca kendiliğinden iyonlaşma, plazma fiziği, izotop ayrışması,

kimya ve yüzey bilimi, astrofizik gibi alanlarda önemli olduğundan sıkça çalışılmaktadır.

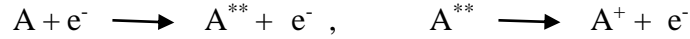
İki veya daha çok elektronu olan tüm atomlar ya da iyonlar kendiliğinden iyonlaşma durumlarına sahiplerdir (Badnell, 1986). Birinci mertebeye pertürbasyon kuramıyla kendiliğinden iyonlaşma geçiş olasılığı,

$$A_a(t' \rightarrow t) = \left(\frac{8I_H}{\hbar}\right) \left| \langle t | H | t' \rangle \right|^2 \quad (3.73)$$

olarak verilir (Cowan, 1981). Kendiliğinden iyonlaşma süreçleri, A herhangi bir atomu göstermek üzere,



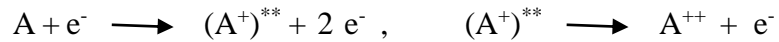
şeklinde foton etkisiyle olan pozitif kendiliğinden iyonlaşma,



şeklinde elektron etkisiyle olan pozitif kendiliğinden iyonlaşma,



şeklinde doğrudan elektron etki negatif iyonlaşma, negatif kendiliğinden iyonlaşma



ve elektron etki pozitif iyonlaşması ve uyarılması, pozitif uyarılmış iyonun kendiliğinden iyonlaşması (Auger etkisi) şeklindedir.

BÖLÜM 4. ARAŞTIRMA BULGULARI VE TARTIŞMA

Bu çalışmada magnezyum ve sodyum benzeri iyonların atomik yapı hesaplamaları Badnell tarafından geliştirilen AUTOSTRUCTURE (Badnell, 2011) programıyla yapıldı. AUTOSTRUCTURE programı, (Badnell, 1986; Badnell, 2011) relativistik olmayan ya da yarı-relativistik dalga fonksiyonları kullanarak atomik ve iyonik enerji seviyelerini, kendiliğinden iyonlaşma, fotoiyonlaşma, ışımalı geçiş gibi atomik süreçlere ait oran katsayıları ve tesir kesitlerini hesap eden genel bir programdır. Bu program Eissner ve arkadaşları (1974) tarafından geliştirilen SUPERSTRUCTURE programı temel alınarak Badnell (1986; 1997) tarafından geliştirilmiştir. AUTOSTRUCTURE programında konfigürasyon seti isteğe bağlı olarak seçilir ve doğruluk için yeni konfigürasyonlar eklenebilir (konfigürasyon etkileşimi, CI açılımı). Bu, radyal fonksiyonların seçimiyle ilişkilidir. Her nl radyal fonksiyon Thomas-Fermi ya da Slater-Tipi-Yörünge potansiyeli ile hesaplanır. Bunların her ikisi de ölçüm parametreleri içerir. Bu parametreler kullanıcı tarafından seçilen terim enerjilerinin ağırlıklı ortalaması minimize edilerek optimize edilir. Herhangi bir çiftlenimdeki (LS , IC veya ICR) Hamiltonyeni, özdeğer ve özvektörleri elde etmek için köşegenleştirilir. Kendiliğinden iyonlaşma durumunda ise N elektron ve $(N+1)$ hedef elektronları ayrı ayrı köşegenleştirilir.

AUTOSTRUCTURE kodu aynı zamanda kuantum elektrodinamik ve Breit katkılarını da içerir. Kuantum elektrodinamik katıklar seviye enerjilerine öz enerji ve vakum polarizasyonu katkılarını içerir. Sonlu çekirdek etkisi, çekirdek için genişletilmiş (extended) Fermi dağılımını varsayarak hesaba katılır. Breit ve QED katkılarının ikisi de pertürbasyon olarak eklenir. Yörüngeler sabittir fakat karışım katsayıları düzeltilmiş Hamiltonyeni köşegenleştirerek hesaplanır. Korelasyon etkileri CI (konfigürasyon etkileşimi) yöntemi ile hesaba katılır. Korelasyon etkileri, İki valans

elektronu arası korelasyon, bir valans bir öz elektronu arası korelasyon ve öz elektronları arası korelasyon olmak üzere 3 farklı şekilde incelenir.

Bu çalışmada plazma fiziğinde önemli yer tutan tungsten ve altın atomları seçilerek W^{62+} , W^{63+} , Au^{67+} ve Au^{68+} iyonları için enerji seviyeleri incelendi. Bu seviyeler arasındaki elektrik dipol (E1), elektrik kuadrupol (E2), manyetik dipol (M1) ve manyetik kuadrupol (M2) ışımali geçişlerine ait dalgaboyları, λ (Å), ağırlıklı salınıcı şiddetleri, gf ve geçiş olasılıkları (oranları), A_r (s^{-1}) ve ayrıca kendiliğinden iyonlaşma oranları A_a (s^{-1}) hesaplandı. Enerji seviyeleri hesaplanırken, dört farklı çalışma yapılarak korelasyon etkileri, kuantum elektrodinamik (QED) katkılar (öz enerji ve vakum polarizasyonu) ve Breit relativistik katkılarının (elektron-elektron etkileşiminin gecikme etkileri ve elektronlar arası manyetik etkileşim) enerji seviyeleri üzerindeki etkileri araştırıldı.

4.1. Atomik Yapı Hesaplamaları ile İlgili Genel Bilgiler

Hesaplamaların tümü iki konfigürasyon seti temel alınarak yapıldı. Birinci konfigürasyon setinde, sadece valans-valans korelasyonunu dikkate alacak şekilde konfigürasyonlar seçilirken, ikinci konfigürasyon setinde kapalı alt tabakalardan da uyarılmaları içeren (öz-valans korelasyonu) konfigürasyonlar dikkate alındı. Enerji tablolarında VV, valans-valans korelasyonunu, CV, öz-valans korelasyonunu göstermektedir. Her konfigürasyon seti için iki çalışma yapıldı. VV çalışması sadece korelasyon etkilerini içerirken, VV+BREIT+QED çalışması kuantum elektrodinamik (QED) ve Breit relativistik katkılarını da içermektedir. Aynı şekilde CV sadece korelasyon etkilerini içerirken, CV+BREIT+QED çalışması kuantum elektrodinamik (QED) katkıları ve Breit relativistik katkılarını da içermektedir.

Enerji seviyeleri tablolarında ilk sütun enerji seviyeleri sırasını, ikinci sütun seviyeyi (konfigürasyon ve terimi), üçüncü sütun sadece valans-valans korelasyonunu içeren enerjiyi (VV), dördüncü sütun valans-valans korelasyonuna ek olarak QED katkıları ve Breit relativistik katkılarını da içeren enerjiyi (VV+BREIT+QED), beşinci sütun öz-valans korelasyonunu içeren enerjiyi (CV), altıncı sütun öz-valans korelasyonuna

ek olarak QED katkıları ve Breit relativistik katkılarını da içeren enerjiyi (CV+BREIT+QED), yedinci sütun mevcut kaynaklardaki diğer çalışmalardan derlenen karşılaştırma değerlerini, son sütun ise CV+BREIT+QED sonuçlarıyla karşılaştırma değerleri arasında hesaplanan yüzde farkı vermektedir. Seviye enerjileri, düşük enerjiden itibaren artan şekilde sıralanmıştır.

Geçişlere ait tablolardaki sütunlarda sırasıyla, geçişler, bu geçişlere ait dalgaboyları, (λ), ağırlıklı salınıcı şiddetleri, (gf), ve geçiş olasılıkları (oranları), (A_r) sunulmaktadır. Mevcut kaynaklarda sunulan ışınım parametrelerine ait karşılaştırma değeri varsa, bunlar hesaplanan değerin hemen yanındaki sütunda yer almaktadır. Işımalı geçiş parametreleri CV+BREIT+QED hesabıyla yapılmıştır. Dolayısıyla bu sonuçlar korelasyon etkilerine ek olarak, kuantum elektrodinamik ve Breit relativistik katkılarını da içermektedir.

Kendiliğinden iyonlaşma tablolarındaki sütunlarda sırasıyla, geçişler, bu geçişlere ait ışınım geçiş olasılıkları (oranları) (A_r), dalgaboyları (λ) ve kendiliğinden iyonlaşma oranları (A_a) sunulmaktadır. Sonraki sütunda, karşılaştırma yapmak için, mevcut kaynaklardaki diğer çalışma sonuçları verilmektedir. Sonuçlar korelasyon etkilerine ek olarak, kuantum elektrodinamik ve Breit relativistik katkılarını da içermektedir.

Enerji seviyeleri ve bu seviyeler arasındaki elektrik dipol geçişleri için geçiş olasılıkları ve ayrıca kendiliğinden iyonlaşma oranlarının sonuçları tabloların yanı sıra grafiklerle de verildi. Enerji seviyesi grafiklerinde CV+BREIT+QED ile elde edilen sonuçlar kullanılmıştır.

Yapılan hesaplamalar sonucunda elde edilen verilerin çokluğu nedeniyle sınırlı miktarda seviye enerjileri ve geçişlere ait ışınım geçiş ve kendiliğinden iyonlaşma parametreleri tablolarda verildi. Parantez içindeki sayılar 10'un kuvvetlerini göstermektedir ($A(B)=A \times 10^B$). Enerji ve ışınım parametreleri tablolarında yalnızca tek pariteli seviyeler üst indis '0' ile işaretlenmiştir. Çift parite için herhangi bir işaretleme kullanılmamıştır. Tablolarda basitlik olsun diye dolu tabakalar ($1s^2 2s^2$ veya $1s^2 2s^2 2p^6$) belirtilmedi. Elde edilen sonuçların doğruluğunu göstermek için yüzde farklar

$((E_b - E_d) / E_d) \times 100$ ile hesaplandı. Burada E_b , bu çalışmayı, E_d , diğer çalışmaları göstermektedir. Yüzde farklar CV+BREIT+QED çalışma sonuçları kullanılarak elde edildi.

4.2. Sodyum (Na) Benzeri Tungsten ve Altın İyonları (W^{63+} , Au^{68+}) İçin Yapılan Atomik Yapı Hesaplamaları

Sodyum benzeri iyonların elektronik konfigürasyonu $1s^2 2s^2 2p^6 3s$ 'dir. Son yörüngesinde az elektron bulunan iyonlar atomik yapı hesaplamaları için uygun bir model olduğundan literatürde yoğun ilgi çekmektedir.

Na benzeri tungsten ve altın iyonları için yapılan enerji seviyeleri ve ışımali geçiş parametreleri çalışmalarında dikkate alınan konfigürasyon setleri Tablo 4.1.'de verilmektedir. Tabloda da görüldüğü gibi tungsten ve altın iyonlarında VV konfigürasyon setinde sadece 3s'den bir uyarılma varken, CV konfigürasyon setinde 2p özünden uyarılmalar da içeren konfigürasyonlar vardır.

Na benzeri tungsten iyonunda enerji seviye sıralaması mevcut diğer çalışmalarla (Safronova ve ark., 2009b) farklı çıktığından diğer kodlarla daha iyi karşılaştırma yapabilmek için enerji seviyeleri için ek bir çalışma yapıldı. Bu çalışma CV-2 olarak adlandırıldı. CV-2 çalışmasında 2p özünün yanı sıra 2s özünden de uyarılma ile elde edilen konfigürasyonlar kullanıldı.

Na benzeri iyonlarda kendiliğinden iyonlaşma seviyeleri, $1s^2 2s^2 2p^6$ seviyesinin üstündeki seviyeler olarak düşünüldü.

Tablo 4.1. Na benzeri tungsten ve altın iyonlarının enerji seviyeleri ve ışımali geçiş parametreleri hesaplamalarında kullanılan konfigürasyonlar

		Konfigürasyonlar
	VV	3s, 3p, 3d, 4s, 4p, 4d, 4f, 5s, 5p, 5d, 5f, 5g, 6s, 6p, 6d, 6f, 6g, 6h, 7s, 7p, 7d, 7f, 7g, 7h, 7i
W⁶³⁺	CV	3s, 3p, 3d, 4s, 4p, 4d, 4f, 5s, 5p, 5d, 5f, 5g, 6s, 6p, 6d, 6f, 6g, 6h, 7s, 7p, 7d, 7f, 7g, 7h, 7i, 2p ⁵ 3s ² , 2p ⁵ 3s3p, 2p ⁵ 3s3d, 2p ⁵ 3p ² , 2p ⁵ 3p3d, 2p ⁵ 3d ²
	CV-2	3s, 3p, 3d, 2p ⁵ 3s ² , 2p ⁵ 3s3p, 2p ⁵ 3s3d, 2p ⁵ 3p ² , 2p ⁵ 3p3d, 2p ⁵ 3d ² , 2s3s ² , 2s3s3p, 2s3s3d, 2s3p ² , 2s3p3d, 2s3d ²
	VV	3s, 3p, 3d, 4s, 4p, 4d, 4f, 5s, 5p, 5d, 5f, 5g, 6s, 6p, 6d, 6f, 6g, 6h, 7s, 7p, 7d, 7f, 7g, 7h, 7i
Au⁶⁸⁺	CV	3s, 3p, 3d, 4s, 4p, 4d, 4f, 5s, 5p, 5d, 5f, 5g, 6s, 6p, 6d, 6f, 6g, 6h, 7s, 7p, 7d, 7f, 7g, 7h, 7i, 2p ⁵ 3s3p, 2p ⁵ 3s3d, 2p ⁵ 3p ² , 2p ⁵ 3p3d, 2p ⁵ 3d ² , 2p ⁵ 3d4s, 2p ⁵ 3d4p, 2p ⁵ 3d4d, 2p ⁵ 3d4f

4.2.1. Sodyum benzeri tungsten için hesaplama sonuçları (W⁶³⁺)

Sodyum benzeri tungstene ait enerji seviyeleri, dalgaboyları, salınıcı şiddetleri, geçiş olasılıkları gibi ışımali parametrelerini ve kendiliğinden iyonlaşma oranlarını içeren deneysel ve teorik çalışmaların bir kısmı Tablo 2.1.'de verilmektedir. W⁶³⁺ iyonu için en düşük enerji seviyeleri ve bu seviyeler arası geçişler, genel amaçlı relativistik atomik yapı paketi (GRASP) (Dyall ve ark., 1989) ve esnek atomik kod (FAC) (Gu, 2008) ile hesaplanmış ve deneysel (EBIT) olarak çalışılmıştır. Daha yüksek seviyeler ve bunlar arasındaki geçişlerin hesabı Cowan'ın relativistik çok konfigürasyonlu Hatree-Fock yöntemi (COWAN) (Cowan, 1981), relativistik Hebrew Üniversitesi Lawrence-Livermore atomik kodu, (HULLAC), (Bar-Shalom ve ark., 2001) ve relativistik çok parçacık pertürbasyon teorisi (RMBPT) (Safronova ve ark., 2002a 2002b) ile yapıldı. Ayrıca W²⁺'den W⁷³⁺'e kadar olan tungsten iyonlarının enerji seviyeleri ve ışımali geçiş bilgisi ve tungsten spektroskopisindeki son gelişmeler üzerine iki derleme yayımlandı (Kramida ve Shirai, 2009; Kramida, 2011).

Korelasyon etkilerini, QED ve Breit relativistik katkılarını araştırmak için yapılan CV çalışmasının enerji seviyeleri ve mevcut kaynaklardaki verilerle (NIST; Seely ve ark., 1991; Safronova ve ark., 2009b; Aggarwal ve Keenan, 2016) karşılaştırılması Tablo 4.2.'de verilmektedir. Enerji seviyeleri taban hal olan 1s²2s²2p⁶3s²S_{1/2} seviyesine göre cm⁻¹ birim sistemine göre verilmektedir. VV konfigürasyon setiyle yapılan hesaplamalarda 45, CV konfigürasyon setiyle yapılan hesaplamalarda 219

enerji seviyesi elde edildi. Tablo 4.2.'de bu sonuçların ilk 45 seviyesi ve özellikle karşılaştırma değeri olanlar verilmektedir. Mevcut kaynaklarda W^{63+} iyonuyla ilgili bazı çalışmalar mevcuttur (NIST; Seely ve ark., 1991; Safronova ve ark., 2009b; Aggarwal ve Keenan, 2016) ve bunlarla karşılaştırıldığında elde edilen sonuçların uyumlu olduğu görülmektedir. Safronova ve arkadaşlarının (2009b) çalışmalarında üç farklı kodla hesaplama yapılmıştır. Tabloda HULLAC, COWAN, RMBPT çalışmaları sırasıyla b, c ve d şeklinde gösterilmektedir.

W^{63+} için sonuçlar değerlendirildiğinde, öz ve değerlik elektronları arasındaki karşılıklı etkileşmenin dikkate alınmasıyla, 3d seviyeleri hariç, enerji seviyesi değerlerinde bir artış oldu. Örneğin, $3p \ ^2P_{3/2}$ seviyesi için enerji değeri VV hesabında $4269,602(3) \text{ cm}^{-1}$ iken CV hesabında $4324,377(3) \text{ cm}^{-1}$ olarak elde edildi. Ayrıca bu hesaplamalara QED ve Breit katkıları eklendiğinde enerji seviyelerinde bir miktar azalma gözlemlendi. CV hesabında $3p \ ^2P_{3/2}$ seviyesi için $4324,377(3) \text{ cm}^{-1}$ olan enerji değeri, Breit ve QED katkılarıyla (CV+Breit+QED) $4297,316(3) \text{ cm}^{-1}$ olarak bulundu. Dört hesabın sonuçları birbirine çok yakın olmakla birlikte VV+Breit+QED sonuçları karşılaştırma değerlerine daha yakın gözükmektedir. Özden uyarılmaların genel olarak enerji değerlerini düzeltiyor olmasına rağmen bu iyonda bazı konfigürasyonlar sonuçları kötüleştirdiği görüldü. Yüksek seviyelerde de uyum iyidir. Tablo 4.2.'deki sonuçların ayrıca NIST'teki değerlerle yüzde fark hesabı yapıldı. Yüzde farklar incelendiğinde genellikle 0,07-2,12 aralığında olduğu görülmektedir.

Tablo 4.2. W^{63+} iyonunun düşük enerji seviyeleri, E (10^3 cm^{-1})

Sıra	Seviyeler	Bu çalışma				Diğer çalışmalar	Fark (%)
		VV	VV+Breit+QED	CV	CV+Breit+QED		
1	3s $\ ^2S_{1/2}$	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000 ^{a,b,c,d,e,f,g}	0,00
2	3p $\ ^2P_{1/2}$	1121,747	1097,453	1287,482	1261,648	1287,000 ^a 1304,178 ^b 1205,241 ^c 1287,216 ^d 1288,942 ^f 1305,753 ^g	1,96
3	3p $\ ^2P_{3/2}$	4269,602	4241,861	4324,377	4297,316	4300,500 ^a 4313,489 ^b 4374,320 ^c 4299,808 ^d 4302,000 ^e 4304,095 ^f 4316,681 ^g	0,07

Tablo 4.2. (Devamı)

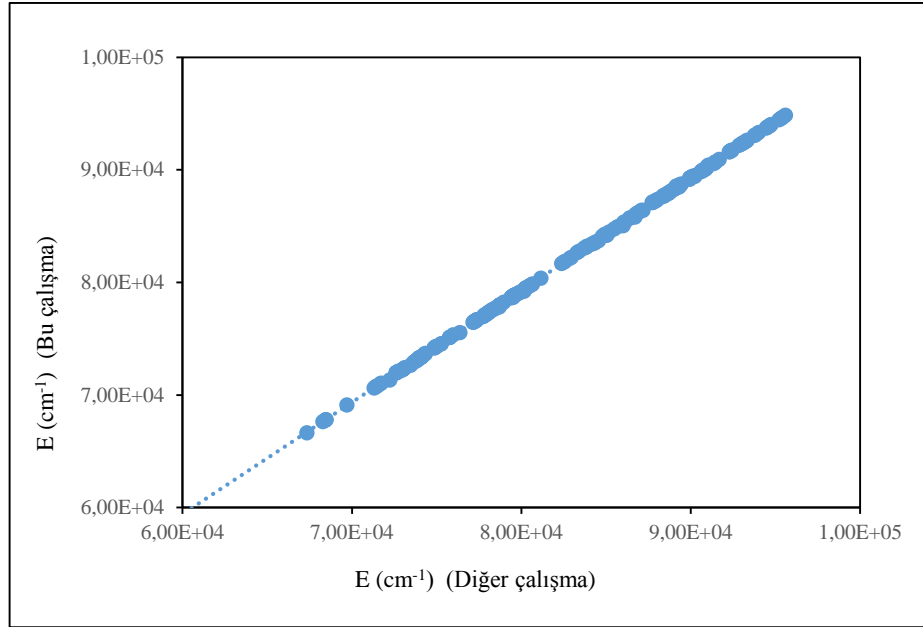
Sıra	Seviyeler	Bu çalışma				Diğer çalışmalar	Fark (%)
		VV	VV+Breit +QED	CV	CV+Breit +QED		
4	3d ² D _{3/2}	5833,215	5796,998	5841,450	5805,145	5812,700 ^a 5826,942 ^b 5737,438 ^c 5808,930 ^d 5813,400 ^e 5808,967 ^f 5828,445 ^g	1,29
5	3d ² D _{5/2}	6559,277	6522,696	6555,274	6518,638	6497,600 ^a 6509,423 ^b 6461,643 ^c 6495,625 ^d 6499,100 ^e 6493,486 ^f 6511,505 ^g	0,32
6	4s ² S _{1/2}	26273,263	26250,896	26819,427	26796,939	26240,000 ^a 26241,000 ^e 26226,923 ^f 26234,472 ^g	2,12
7	4p ² P _{1/2}	26788,734	26756,335	27334,024	27301,518	26767,000 ^a 26767,000 ^e 26759,500 ^f 26773,579 ^g	1,99
8	4p ² P _{3/2}	28040,748	28007,689	28586,421	28553,232	28003,000 ^a 28003,000 ^e 27993,781 ^f 28006,653 ^g	1,96
9	4d ² D _{3/2}	28624,881	28588,180	29171,326	29134,509	28572,000 ^a 28573,000 ^e 28564,646 ^f 28581,194 ^g	1,96
10	4d ² D _{5/2}	28934,675	28897,829	29481,153	29444,188	28871,000 ^a 28872,000 ^e 28860,410 ^f 28876,563 ^g	1,98
11	4f ² F _{5/2}	29235,398	29198,460	29781,501	29744,448	29183,000 ^a 29183,000 ^e 29161,167 ^f 29174,960 ^g	1,92
12	4f ² F _{7/2}	29368,669	29331,717	29914,801	29877,733	29313,000 ^a 29314,000 ^e 29290,821 ^f 29304,758 ^g	1,92
13	5s ² S _{1/2}	37956,687	37926,927	38503,146	38473,266	37895,643 ^f 37920,750 ^g	-
14	5p ² P _{1/2}	38230,528	38195,731	38776,855	38741,943	38162,952 ^f 38191,154 ^g	-
15	5p ² P _{3/2}	38851,239	38816,324	39397,522	39362,484	38783,462 ^f 38811,104 ^g	-
16	5d ² D _{3/2}	39131,791	39094,981	39678,397	39641,470	39063,138 ^f 39092,635 ^g	-
17	5d ² D _{5/2}	39290,945	39254,063	39837,551	39800,550	39236,000 ^a 39236,000 ^e 39215,432 ^f 39244,698 ^g	1,43
18	5f ² F _{5/2}	39439,080	39402,160	39985,485	39948,448	39378,000 ^a 39378,000 ^e 39364,751 ^f 39391,746 ^g	1,44

Tablo 4.2. (Devamı)

Sıra	Seviyeler	Bu çalışma				Diğer çalışmalar	Fark (%)
		VV	VV+Breit +QED	CV	CV+Breit +QED		
19	5f $^2F_{7/2}$	39507,820	39470,889	40054,239	40017,190	39446,000 ^a 39447,000 ^e 39431,427 ^f 39458,488 ^g	1,44
20	5g $^2G_{7/2}$	39526,999	39490,115	40073,752	40036,750	39480,000 ^a 39479,000 ^e 39451,191 ^f 39478,932 ^g	1,41
21	5g $^2G_{9/2}$	39567,128	39530,244	40113,881	40076,878	39518,000 ^a 39519,000 ^e 39490,751 ^f 39518,504 ^g	1,41
22	6s $^2S_{1/2}$	44144,881	44112,002	44691,456	44658,459	44065,810 ^f 44103,504 ^g	-
23	6p $^2P_{1/2}$	44308,991	44273,227	44855,543	44819,662	44219,782 ^f 44257,630 ^g	-
24	6p $^2P_{3/2}$	44659,704	44623,981	45206,175	45170,332	44577,526 ^f 44611,939 ^g	-
25	6d $^2D_{3/2}$	44814,490	44777,644	45361,153	45324,189	44738,247 ^f 44770,883 ^g	-
26	6d $^2D_{5/2}$	44906,642	44869,754	45453,300	45416,293	44828,397 ^f 44859,024 ^g	-
27	6f $^2F_{5/2}$	44990,400	44953,494	45536,945	45499,921	44914,079 ^f 44942,589 ^g	-
28	6f $^2F_{7/2}$	45030,320	44993,406	45576,872	45539,840	44953,278 ^f 44981,304 ^g	-
29	6g $^2G_{7/2}$	45042,722	45005,838	45589,475	45552,473	44967,039 ^f 44994,538 ^g	-
30	6g $^2G_{9/2}$	45065,984	45029,100	45612,737	45575,734	44989,974 ^f 45017,462 ^g	-
31	6h $^2H_{9/2}$	45066,434	45029,551	45613,190	45576,188	44990,336 ^f	-
32	6h $^2H_{11/2}$	45081,835	45044,952	45628,590	45591,589	45005,556 ^f	-
33	7s $^2S_{1/2}$	47810,966	47776,553	48357,601	48323,070	47733,056 ^f	-
34	7p $^2P_{1/2}$	47919,860	47883,625	48466,505	48430,152	47828,889 ^f	-
35	7p $^2P_{3/2}$	48136,029	48099,912	48682,586	48646,348	48052,073 ^f	-
36	7d $^2D_{3/2}$	48228,285	48191,422	48774,978	48737,998	48151,747 ^f	-
37	7d $^2D_{5/2}$	48286,285	48249,397	48832,972	48795,965	48208,503 ^f	-
38	7f $^2F_{5/2}$	48338,086	48301,188	48884,706	48847,690	48261,485 ^f	-
39	7f $^2F_{7/2}$	48363,266	48326,362	48909,888	48872,866	48286,219 ^f	-
40	7g $^2G_{7/2}$	48371,504	48334,620	48918,257	48881,255	48295,876 ^f	-
41	7g $^2G_{9/2}$	48386,158	48349,274	48932,911	48895,909	48310,318 ^f	-
42	7h $^2H_{9/2}$	48386,539	48349,656	48933,294	48896,293	48310,460 ^f	-
43	7i $^2I_{11/2}$	48396,174	48359,291	48942,929	48905,928	48320,051 ^f	-
44	7h $^2H_{11/2}$	48396,245	48359,362	48943,000	48905,999	48320,062 ^f	-
45	7i $^2I_{13/2}$	48403,081	48366,198	48949,836	48912,835	48326,888 ^f	-

^aNIST, ^{b,c,d}Safronova ve ark., 2009b; ^eSeely ve ark., 1991; ^{f,g}Aggarwal ve Keenan, 2016

Şekil 4.1.'de enerji seviyelerinin Safronova ve arkadaşlarının (2009b) RMBPT kodu sonuçlarıyla karşılaştırılması gösterilmektedir. Şekil 4.1.'den uyumun oldukça iyi olduğu görülmektedir.



Şekil 4.1. W^{63+} iyonunun enerji seviyelerinin RMBPT kodu sonuçları (Safronova ve ark., 2009b) ile karşılaştırılması

Na benzeri tungstenin enerji seviye sıralaması karşılaştırma değerlerinden oldukça farklıdır. Diğer çalışmalarla daha iyi karşılaştırma yapabilmek için CV-2 olarak adlandırılan bir çalışma daha yapıldı. Bu çalışmadan 242 enerji seviyesi elde edildi. Tablo 4.3.'te bu sonuçların ilk 67 seviyesi verilmektedir. Enerji seviyeleri taban hal olan $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 S_{1/2}$ seviyesine göre cm^{-1} birim sistemine göre verilmektedir. Bu çalışmada elektronlar arası korelasyon ve kuantum elektrodinamik (QED) katkıları ve Breit relativistik katkıları dikkate alındı (CV+Breit+QED). Tabloda $2p^5$ yerine kolay yazım olması ve benzer haller üretildiği için $2p$ yazıldı. Tablo 4.3.'te B, C, D sütunlarındaki terimlerdeki sağ üst indis farklı enerji seviyelerini göstermektedir.

W^{63+} iyonu için elde edilen enerji seviyeleri, Safronova ve arkadaşlarının (2009b) RMBPT, HULLAC ve COWAN kodları ile elde edilen hesaplama sonuçları ile karşılaştırıldığında sonuçların uyumlu olduğu görülmektedir. Kodların seviye gösterim şekli farklı olduğundan her biri ayrı sütunlarda gösterildi. Tablo 4.3.'te görüldüğü gibi bazı seviyelerin sırası diğerlerinden farklıdır. Örneğin 'sıra' sütununda 7. seviyede $2p^5 3s 3p^2 P_{3/2}$ varken COWAN kodu sonuçlarına göre $2p^5 3s 3p^4 P_{3/2}$ seviyesi vardır. Bu durumda olanlar 'sıra' sütununda '*' ile gösterildi. Benzer durumlar aynı zamanda COWAN, HULLAC ve RMBPT kodları arasında da görülmektedir

(Safronova ve ark., 2009b). Tek paritelilerde $2p^53p^2$ ve $2p^53s3d$ konfigürasyonları, çift paritelilerde $2p^53s3p$ ve $2p^53p3d$ konfigürasyonlarının güçlü karışımı Safronova ve arkadaşları (2002a, 2002b) tarafından incelendi ve bu durumun, kodlardan elde edilen bazı seviyelerin gösteriminde farklılığa sebep olduğu sonucuna varıldı (Örneğin 28. seviyede $2p^53p^2$ ile $2p^53s3d$ yer değiştirmiştir).

Sodyum benzeri tungstende kapalı alt tabakaların dışında bir dış elektron olduğu için diğer alt tabakalardaki elektronlar arasındaki etkileşim oldukça azdır. Buradan yola çıkarak diğer çalışmalarla karşılaştırıldığında görülen bazı seviyelerdeki uyumsuzluklar, özden uyarılmaların daha çok olduğu daha fazla konfigürasyon içeren konfigürasyon setleriyle yapılan çalışmalarla giderilebilir. Ancak bu durumda çok sayıda konfigürasyon hal fonksiyonları ortaya çıktığından hesaplamalarda kısıtlama yapılması gerekmektedir.

Tablo 4.3. W^{63+} iyonunun $2s3l3l'$, $2p^53l3l'$ ve $3l$ ($l, l' = 0, 1, 2$) seviyelerinin enerjileri, E (10^3 cm^{-1}). A: Bu çalışma (AUTOSTRUCTURE), B: HULLAC kodu, C: COWAN kodu, D: RMBPT kodu

A				B			C			D			Fark
Sıra	J	Seviye	$E(10^3\text{cm}^{-1})$	J	Seviye	$E(10^3\text{cm}^{-1})$	J	Seviye	$E(10^3\text{cm}^{-1})$	J	Seviye	$E(10^3\text{cm}^{-1})$	(%)
1	1/2	$3s^2S$	0,000	1/2	3s0001	0,000	1/2	$(^1S)3s^2S$	0,000	1/2	$3s_{1/2}$	0,000	0,00
2	1/2	$3p^2P$	1361,127 1287,000 ^{&}	1/2	3p0101	1304,178	1/2	$(^1S)3p^2P$	1205,241	1/2	$3p_{1/2}$	1287,216	5,74
3	3/2	$3p^2P$	4329,242 4300,500 ^{&}	3/2	3p0001	4313,489	3/2	$(^1S)3p^2P$	4374,320	3/2	$3p_{3/2}$	4299,808	0,68
4	3/2	$3d^2D$	5809,483 5812,700 ^{&}	3/2	3d0101	5826,942	3/2	$(^1S)3d^2D$	5737,438	3/2	$3d_{3/2}$	5808,930	0,01
5	5/2	$3d^2D$	6520,336 6497,600 ^{&}	5/2	3d0001	6509,423	5/2	$(^1S)3d^2D$	6461,643	5/2	$3d_{5/2}$	6495,625	0,38
6	3/2	$2p3s^2^2P$	67344,522	3/2	2p3s3s0101	66604,708	3/2	$2p3s^2(^1S)^2P$	66188,945	3/2	$2p_{3/2}3s_{1/2}3s_{1/2}[0]$	66618,203	1,09
7*	3/2	$2p3s3p^2P^a$	68285,545	3/2	2p3s3p0303	67621,449	3/2	$2p3s3p(^1S)^4P$	67118,070	3/2	$2p_{3/2}3s_{1/2}3p_{1/2}[0]$	67629,750	0,97
8	5/2	$2p3s3p^4D$	68416,452	5/2	2p3s3p0304	67754,143	5/2	$2p3s3p(^1S)^4D$	67235,344	5/2	$2p_{3/2}3s_{1/2}3p_{1/2}[1]$	67745,802	0,99
9	3/2	$2p3s3p^2D^a$	68459,954	3/2	2p3s3p0302	67787,427	3/2	$2p3s3p(^1S)^2D^a$	67264,152	3/2	$2p_{3/2}3s_{1/2}3p_{1/2}[1]$	67787,231	0,99
10	1/2	$2p3s3p^2P^a$	68472,231	1/2	2p3s3p0301	67796,348	1/2	$2p3s3p(^1S)^2P^a$	67271,306	1/2	$2p_{3/2}3s_{1/2}3p_{1/2}[1]$	67806,437	0,98
11*	3/2	$2p3p^2^4P$	69704,405	3/2	2p3p3p0501	69116,420	3/2	$2p3p^2(^1S)^2P$	68483,308	3/2	$2p_{3/2}3p_{1/2}3p_{1/2}[0]$	69097,331	0,88
12	7/2	$2p3s3p^4D$	71315,465	7/2	2p3s3p0107	70628,859	7/2	$2p3s3p(^1S)^4D$	70298,255	7/2	$2p_{3/2}3s_{1/2}3p_{3/2}[2]$	70624,698	0,98
13	3/2	$2p3s3p^4S$	71381,792	3/2	2p3s3p0102	70688,947	3/2	$2p3s3p(^1S)^4S$	70349,133	3/2	$2p_{3/2}3s_{1/2}3p_{3/2}[1]$	70691,872	0,98
14	5/2	$2p3s3p^4P$	71431,286	5/2	2p3s3p0106	70734,266	5/2	$2p3s3p(^1S)^4P$	70386,690	5/2	$2p_{3/2}3s_{1/2}3p_{3/2}[1]$	70743,329	0,97
15*	1/2	$2p3s3p^2P^b$	71525,129	1/2	2p3s3p0101	70822,756	1/2	$2p3s3p(^1S)^2S^a$	70464,172	1/2	$2p_{3/2}3s_{1/2}3p_{3/2}[1]$	70824,195	0,99
16	5/2	$2p3s3p^2D^a$	71676,820	5/2	2p3s3p0103	70980,228	5/2	$2p3s3p(^1S)^2D^a$	70599,119	5/2	$2p_{3/2}3s_{1/2}3p_{3/2}[2]$	70973,297	0,99
17	3/2	$2p3s3p^2P^b$	71731,238	3/2	2p3s3p0105	71031,552	3/2	$2p3s3p(^1S)^2P^b$	70640,827	3/2	$2p_{3/2}3s_{1/2}3p_{3/2}[2]$	71035,534	0,98
18	1/2	$2p3s3p^2S^a$	72244,032	1/2	2p3s3p0104	71335,680	1/2	$2p3s3p(^1S)^2S^b$	70873,693	1/2	$2p_{3/2}3s_{1/2}3p_{3/2}[2]$	71334,018	1,28
19	1/2	$2p3p^2^2P^a$	72614,016	1/2	2p3p3p0301	71980,586	1/2	$2p3p^2(^1D)^2P$	71546,221	1/2	$2p_{1/2}3s_{1/2}3s_{1/2}[0]$	71976,632	0,89
20*	5/2	$2p3p^2^4D$	72614,898	5/2	2p3p3p0303	71992,114	5/2	$2p3p^2(^3P)^4P$	71555,526	5/2	$2p_{3/2}3p_{1/2}3p_{3/2}[1]$	71983,353	0,88

Tablo 4.3 (Devami)

A				B			C			D			Fark (%)
Sıra	J	Seviye	E(10^3cm^{-1})	J	Seviye	E(10^3cm^{-1})	J	Seviye	E(10^3cm^{-1})	J	Seviye	E(10^3cm^{-1})	
21*	3/2	2p3p ² 2P ^a	72634,891	7/2	2p3p3p0307	71995,768	7/2	2p3p ² (¹ D) 2F	71558,137	7/2	2p _{3/2} 3p _{1/2} 3p _{3/2} [2]	71971,348	0,92
22*	7/2	2p3p ² 2F	72638,017	3/2	2p3p3p0302	71999,170	3/2	2p3p ² (¹ D) 2P	71561,938	3/2	2p _{3/2} 3p _{1/2} 3p _{3/2} [1]	71987,915	0,90
23*	3/2	2p3p ² 4S	72715,439	5/2	2p3p3p0306	72083,182	5/2	2p3p ² (¹ D) 2D	71629,842	5/2	2p _{3/2} 3p _{1/2} 3p _{3/2} [2]	72073,730	0,89
24*	5/2	2p3p ² 2D ^a	72729,208	3/2	2p3p3p0305	72086,150	3/2	2p3p ² (³ P) 2D	71633,463	3/2	2p _{3/2} 3p _{1/2} 3p _{3/2} [2]	72082,705	0,90
25	1/2	2p3s3d 4P	72871,590	1/2	2p3s3d0304	72134,457	1/2	2p3s3d(¹ S) 4P	71655,988	1/2	2p _{3/2} 3s _{1/2} 3d _{3/2} [1]	72155,957	0,99
26*	3/2	2p3s3d 4P	72965,208	3/2	2p3s3d0305	72245,132	3/2	2p3s3d(¹ S) 4D	71747,195	3/2	2p _{3/2} 3p _{3/2} 3p _{3/2} [2]	72245,544	1,00
27	5/2	2p3s3d 4F	73002,803	5/2	2p3s3d0306	72272,209	5/2	2p3s3d(¹ S) 4F	71766,282	5/2	2p _{3/2} 3p _{3/2} 3p _{3/2} [2]	72260,992	1,03
28	1/2	2p3s3d 2P ^a	73032,398	1/2	2p3s3d0301	72287,954	1/2	2p3s3d(¹ S) 2P ^a	71788,594	1/2	2p _{3/2} 3p _{1/2} 3p _{3/2} [1]	72285,487	1,03
29	7/2	2p3s3d 4F	73057,233	7/2	2p3s3d0307	72353,512	7/2	2p3s3d(¹ S) 4F	71842,984	7/2	2p _{3/2} 3p _{3/2} 3p _{3/2} [2]	72328,436	1,01
30	3/2	2p3s3d ² D ^a	73130,293	3/2	2p3s3d0302	72403,374	3/2	2p3s3d(¹ S) 2D ^a	71883,094	3/2	2p _{3/2} 3p _{3/2} 3p _{3/2} [0]	72402,144	1,01
31	5/2	2p3s3d 2F ^a	73133,673	5/2	2p3s3d0303	72420,314	5/2	2p3s3d(¹ S) 2F ^a	71897,911	5/2	2p _{3/2} 3s _{1/2} 3d _{3/2} [1]	72413,705	0,99
32	1/2	2p3p ² 2P ^b	73470,243	1/2	2p3p3p0304	72649,349	1/2	2p3p ² (¹ D) 2P	72082,258	1/2	2p _{3/2} 3p _{1/2} 3p _{3/2} [2]	72632,847	1,15
33	9/2	2p3s3d 4F	73639,268	9/2	2p3s3d0108	72888,700	9/2	2p3s3d(¹ S) 4F	72440,740	9/2	2p _{3/2} 3s _{1/2} 3d _{5/2} [3]	72877,785	1,04
34*	5/2	2p3s3d 2D ^a	73719,445	5/2	2p3s3d0106	72969,238	5/2	2p3s3d(¹ S) 4P	72507,856	5/2	2p _{3/2} 3s _{1/2} 3d _{3/2} [2]	72974,679	1,02
35	7/2	2p3s3d 4D	73783,190	7/2	2p3s3d0107	73028,014	7/2	2p3s3d(¹ S) 4D	72557,902	7/2	2p _{3/2} 3s _{1/2} 3d _{3/2} [2]	73031,305	1,03
36	3/2	2p3s3d 2D ^b	73829,758	3/2	2p3s3d0101	73078,079	3/2	2p3s3d(¹ S) 2D ^b	72600,365	3/2	2p _{3/2} 3s _{1/2} 3d _{3/2} [1]	73080,741	1,02
37	7/2	2p3s3d 2F ^a	73837,452	7/2	2p3s3d0103	73081,613	7/2	2p3s3d(¹ S) 2F ^a	72602,576	7/2	2p _{3/2} 3s _{1/2} 3d _{5/2} [2]	73068,241	1,05
38	5/2	2p3s3d 2D ^b	73934,315	5/2	2p3s3d0102	73177,320	5/2	2p3s3d(¹ S) 2D ^a	72684,102	5/2	2p _{3/2} 3s _{1/2} 3d _{5/2} [2]	73178,572	1,03
39	1/2	2p3p3d 4D ^a	73943,793	1/2	2p3p3d0701	73268,124	1/2	2p3p3d(¹ S) 4D ^b	72711,512	1/2	2p _{1/2} 3s _{1/2} 3p _{1/2} [0]	73284,366	0,90
40*	3/2	2p3p3d 4D ^a	74022,143	3/2	2p3s3d0105	73325,591	3/2	2p3s3d(¹ S) 2P ^b	72800,663	3/2	2p _{3/2} 3s _{1/2} 3d _{3/2} [2]	73318,388	0,96
41*	7/2	2p3p3d 2G ^a	74055,261	3/2	2p3p3d0702	73360,743	3/2	2p3p3d(¹ S) 4D ^a	72787,590	3/2	2p _{1/2} 3s _{1/2} 3p _{1/2} [1]	73352,936	0,96
42*	5/2	2p3p3d 4F ^a	74079,602	1/2	2p3s3d0104	73375,249	1/2	2p3s3d(¹ S) 2P ^b	72846,457	1/2	2p _{3/2} 3p _{3/2} 3p _{3/2} [2]	73363,068	0,98
43*	3/2	2p3s3d 2P ^a	74102,057	7/2	2p3p3d0707	73393,265	7/2	2p3p3d(¹ S) 2G ^a	72812,096	7/2	2p _{3/2} 3p _{1/2} 3d _{3/2} [2]	73355,518	1,02
44*	1/2	2p3s3d 2P ^b	74150,359	5/2	2p3p3d0703	73413,136	5/2	2p3p3d(¹ S) 4F ^a	72827,096	5/2	2p _{1/2} 3s _{1/2} 3p _{3/2} [2]	73402,599	1,02

Tablo 4.3 (Devami)

A				B			C			D			Fark (%)
Sıra	J	Seviye	E(10 ³ cm ⁻¹)	J	Seviye	E(10 ³ cm ⁻¹)	J	Seviye	E(10 ³ cm ⁻¹)	J	Seviye	E(10 ³ cm ⁻¹)	
45	1/2	2p3p3d 4P ^a	74252,118	1/2	2p3p3d0704	73605,035	1/2	2p3p3d(1S) 4P ^b	72984,632	1/2	2p _{1/2} 3s _{1/2} 3p _{1/2} [1]	73590,122	0,90
46*	5/2	2p3p3d 4P ^a	74311,076	5/2	2p3p3d0706	73667,323	5/2	2p3p3d(1S) 4F ^b	73030,230	5/2	2p _{3/2} 3p _{1/2} 3d _{3/2} [1]	73637,511	0,91
47*	3/2	2p3p3d 4P ^a	74339,649	3/2	2p3p3d0705	73694,387	3/2	2p3p3d(1S) 4D	73052,050	3/2	2p _{1/2} 3s _{1/2} 3p _{3/2} [1]	73677,718	0,90
48	7/2	2p3p3d 4D ^a	74851,594	7/2	2p3p3d0303	74172,411	7/2	2p3p3d(1S) 4D ^a	73617,411	7/2	2p _{3/2} 3p _{1/2} 3d _{5/2} [2]	74158,696	0,93
49	3/2	2p3p3d 2P ^a	74901,078	3/2	2p3p3d0305	74227,162	3/2	2p3p3d(1S) 2P ^c	73663,033	3/2	2p _{1/2} 3s _{1/2} 3p _{3/2} [2]	74221,768	0,92
50	9/2	2p3p3d 4G	74904,605	9/2	2p3p3d0308	74228,346	9/2	2p3p3d(1S) 4G	73664,344	9/2	2p _{3/2} 3p _{1/2} 3d _{5/2} [3]	74192,235	0,96
51	5/2	2p3p3d 2F ^a	74927,337	5/2	2p3p3d0306	74254,654	5/2	2p3p3d(1S) 2F ^d	73686,650	5/2	2p _{3/2} 3p _{3/2} 3d _{3/2} [1]	74242,328	0,92
52	5/2	2p3p3d 4P ^b	74980,761	5/2	2p3p3d0302	74300,637	5/2	2p3p3d(1S) 4P ^a	73725,023	5/2	2p _{3/2} 3p _{3/2} 3d _{5/2} [1]	74296,429	0,92
53	7/2	2p3p3d 2F ^a	75020,703	7/2	2p3p3d0307	74342,440	7/2	2p3p3d(1S) 2F ^b	73760,346	7/2	2p _{3/2} 3p _{3/2} 3d _{3/2} [2]	74323,782	0,94
54	1/2	2p3p3d 2P ^a	75264,288	1/2	2p3p3d0304	74565,129	1/2	2p3p3d(1S) 2P ^d	73941/256	1/2	2p _{1/2} 3s _{1/2} 3p _{3/2} [1]	74539,857	0,97
55	3/2	2p3p3d 2D ^a	75276,226	3/2	2p3p3d0301	74574,144	3/2	2p3p3d(1S) 2D ^e	73949,897	3/2	2p _{3/2} 3p _{1/2} 3d _{3/2} [1]	74551,346	0,97
56	1/2	2p3p ² 2S	75769,100	1/2	2p3p3p0102	75126,512	1/2	2p3p ² (³ P) 2S	74839,158	1/2	2p _{1/2} 3p _{1/2} 3p _{1/2} [0]	75112,723	0,87
57	7/2	2p3p ² 4D	75778,416	7/2	2p3p3p0105	75133,170	7/2	2p3p ² (³ P) 4D	74843,694	7/2	2p _{3/2} 3s _{1/2} 3d _{5/2} [3]	75110,535	0,89
58	5/2	2p3p ² 4P	75779,764	5/2	2p3p3p0104	75135,054	5/2	2p3p ² (³ P) 4P	74844,785	5/2	2p _{3/2} 3s _{1/2} 3d _{5/2} [3]	75115,726	0,88
59	3/2	2p3p ² 2P ^b	75987,452	3/2	2p3p3p0101	75335,033	3/2	2p3p ² (1S) 2P	75016,856	3/2	2p _{3/2} 3s _{1/2} 3d _{5/2} [2]	75326,350	0,88
60	3/2	2p3p ² 2P ^c	76370,486	3/2	2p3p3p0103	75556,473	3/2	2p3p ² (³ P) 2P	75183,564	3/2	2p _{3/2} 3s _{1/2} 3d _{5/2} [3]	75538,909	1,10
61	3/2	2p3p3d 4P ^b	77144,243	3/2	2p3p3d0509	76445,295	3/2	2p3p3d(1S) 4P ^b	76027,944	3/2	2p _{3/2} 3p _{1/2} 3d _{3/2} [2]	76455,935	0,90
62	1/2	2p3p3d 2P ^b	77180,390	1/2	2p3p3d0502	76499,604	1/2	2p3p3d(1S) 2P ^a	76071,863	1/2	2p _{3/2} 3p _{1/2} 3d _{3/2} [1]	76487,835	0,91
63	5/2	2p3p3d 4D ^a	77201,613	5/2	2p3p3d050a	76520,217	5/2	2p3p3d(1S) 4D	76087,911	5/2	2p _{3/2} 3p _{1/2} 3d _{3/2} [2]	76502,207	0,91
64	7/2	2p3p3d 4F ^a	77214,283	7/2	2p3p3d050b	76531,487	7/2	2p3p3d(1S) 4F ^b	76094,495	7/2	2p _{3/2} 3p _{3/2} 3d _{5/2} [2]	76505,554	0,93
65	5/2	2p3p3d 2F ^b	77246,757	5/2	2p3p3d0504	76567,318	5/2	2p3p3d(1S) 2F ^a	76129,650	5/2	2p _{3/2} 3p _{1/2} 3d _{5/2} [2]	76536,655	0,93
66	3/2	2p3p3d 2D ^b	77254,858	3/2	2p3p3d0503	76576,719	3/2	2p3p3d(1S) 2D ^b	76137,919	3/2	2p _{3/2} 3p _{1/2} 3d _{5/2} [2]	76552,819	0,92
67	9/2	2p3p3d 2G ^a	77271,854	9/2	2p3p3d050c	76591,127	9/2	2p3p3d(1S) 2G ^b	76147,548	9/2	2p _{3/2} 3p _{3/2} 3d _{3/2} [3]	76546,805	0,95

B,C,D:Safronova ve ark., 2009b ; ^aNIST

W^{63+} iyonunun CV-2 çalışmasından elde edilen seviyeler arasındaki elektrik dipol geçişleri için 9069 geçiş elde edildi. Tablo 4.4. $2s3l3l'$ 'den $3l'$ 'ye olan geçişler, Tablo 4.5. $2p^53l3l'$ 'den $3s$ 'ye olan geçişler için dalgaboyu, ağırlıklı salınıcı şiddeti ve geçiş olasılıklarını göstermektedir ($l, l'=0, 1, 2$). W^{63+} iyonu için daha geniş ölçekli hesaplama sonuçları Konan ve Özdemir (2016a) çalışmasında verildi. Sonuçlar sadece mevcut diğer çalışmalardaki HULLAC, COWAN ve RMBPT kodlarının sonuçları (Safronova ve ark., 2009b) ile karşılaştırılmaktadır. Na benzeri tungstene ait geçiş olasılıkları, karşılaştırmak için üst seviyenin istatistiksel ağırlığıyla çarpılarak ağırlıklı geçiş olasılığına (gA_f) çevrildi.

Elektrik dipol (E1) geçiş parametreleri genel olarak diğer çalışma sonuçlarıyla (Safronova ve ark., 2009b) uyumludur. Bu geçişler için hesaplanan ağırlıklı salınıcı şiddetleri ilk defa bu çalışmayla elde edilmektedir. Bu nedenle sadece birkaç salınıcı şiddeti karşılaştırılabilir (Dipti ve ark., 2014). $3s^2S_{1/2} - 2p^53s3d (^1S) ^2P_{3/2}$ ve $3s^2S_{1/2} - 2p^53s3d (^1S) ^2P_{1/2}$ geçişleri için ağırlıklı salınıcı şiddetleri sırasıyla 0,809 ve 0,747 bulunmuştur. Dipti ve arkadaşlarına (2014) göre bu değerler sırasıyla 1,542 ve 0,712'dir.

Geçiş oranları ve dalgaboyları RMBPT kodu sonuçlarıyla karşılaştırıldığında, (Safronova ve ark., 2009b) dalgaboyları için uyum iyi iken, bazı geçişlerin geçiş olasılıklarının RMBPT kodu sonuçlarından oldukça farklı olduğu görülmektedir. Ancak COWAN, HULLAC ve RMBPT kodlarının sonuçları (Safronova ve ark., 2009b) da incelendiğinde bunlar arasında da aynı durum vardır. Bu durumu tam olarak açıklayamamakla birlikte, bazı seviyelerin farklı adlandırılmasından (Tablo 4.3.'te 'sıra' sütununda '*' ile işaretli seviyeler ve Safronova ve arkadaşlarının (2009b) çalışmasında küçük harf üst indisiyle belirtilen seviyeler) kaynaklanmış olabileceği söylenebilir. Ayrıca bu iyon için yapılan hesaplamalarda, enerji seviyelerinde olduğu gibi, elektrik dipol geçişlerinde de bazı seviye geçişleri birden fazla çıkmıştır.

Tablo 4.4. W^{63+} iyonunun $2s3l3l'$ ve $3l$ ($l, l' = 0, 1, 2$) seviyeleri arasındaki elektrik dipol (E1) geçişleri için dalgaboyları, λ (Å), ağırlıklı salıncı şiddetleri, gf ve ağırlıklı geçiş olasılıkları, gA_r (s^{-1})

Geçişler				λ (Å)		gf	gA_r (s^{-1})	
Alt seviye	Üst seviye		Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	
3p	$^2P_{1/2}$	$2s3d^2(^1S)$	$^2S_{1/2}$	1,0611	1,0680 ^a 1,0700 ^b 1,0688 ^c	1,862(-05)	1,104(11)	1,101(11) ^a 6,527(10) ^b 8,246(10) ^c
3p	$^2P_{1/2}$	$2s3d^2(^3P)$	$^2P_{3/2}$	1,0630	1,0699 ^a 1,0716 ^b 1,0708 ^c	7,949(-06)	4,700(10)	2,818(10) ^a 4,824(10) ^b 1,306(10) ^c
3p	$^2P_{1/2}$	$2s3d^2(^3P)$	$^2P_{1/2}$	1,0709	1,0775 ^a 1,0799 ^b 1,0785 ^c	2,832(-05)	1,648(11)	4,645(10) ^a 2,506(11) ^b 6,458(10) ^c
3s	$^2S_{1/2}$	$2s3p3d(^2S)$	$^2P_{b1/2}$	1,0713	1,0784 ^a 1,0803 ^b 1,0795 ^c	5,748(-05)	3,340(11)	9,331(10) ^a 5,625(11) ^b 1,497(11) ^c
3s	$^2S_{1/2}$	$2s3p3d(^2S)$	$^2P_{b3/2}$	1,0720	1,0791 ^a 1,0809 ^b 1,0803 ^c	3,098(-05)	1,800(11)	1,315(11) ^a 2,237(11) ^b 1,707(11) ^c
3p	$^2P_{1/2}$	$2s3d^2(^3P)$	$^4P_{3/2}$	1,0730	1,0797 ^a 1,0817 ^b 1,0805 ^c	5,530(-06)	3,200(10)	1,427(10) ^a 5,115(10) ^b 1,388(10) ^c
3s	$^2S_{1/2}$	$2s3p3d(^2S)$	$^2D_{b3/2}$	1,0741	1,0812 ^a 1,0827 ^b 1,0823 ^c	3,701(-07)	2,140(09)	5,307(10) ^a 3,979(09) ^b 2,536(10) ^c
3p	$^2P_{1/2}$	$2s3d^2(^3P)$	$^4P_{1/2}$	1,0794	1,0857 ^a 1,0886 ^b 1,0867 ^c	3,053(-07)	1,748(09)	9,345(08) ^a 1,468(10) ^b 1,578(08) ^c
3s	$^2S_{1/2}$	$2s3p3d(^2S)$	$^2P_{a1/2}$	1,0818	1,0886 ^a 1,0908 ^b 1,0899 ^c	1,042(-04)	5,940(11)	4,966(11) ^a 7,237(11) ^b 3,880(11) ^c
3p	$^2P_{1/2}$	$2s3d^2(^3F)$	$^4F_{3/2}$	1,0822	1,0888 ^a 1,0912 ^b 1,0897 ^c	3,017(-06)	1,718(10)	9,083(10) ^a 5,422(10) ^b 9,164(10) ^c
3s	$^2S_{1/2}$	$2s3p3d(^2S)$	$^4P_{3/2}$	1,0824	1,0892 ^a 1,0912 ^b 1,0904 ^c	3,377(-05)	1,924(11)	1,167(11) ^a 2,509(11) ^b 1,080(11) ^c
3s	$^2S_{1/2}$	$2s3p3d(^2S)$	$^4P_{1/2}$	1,0831	1,0900 ^a 1,0919 ^b 1,0910 ^c	6,252(-07)	3,560(09)	1,175(10) ^a 6,155(09) ^b 1,153(10) ^c
3s	$^2S_{1/2}$	$2s3p3d(^2S)$	$^4D_{3/2}$	1,0836	1,0906 ^a 1,0924 ^b 1,0917 ^c	2,278(-05)	1,296(11)	1,493(11) ^a 1,740(11) ^b 1,391(11) ^c
3p	$^2P_{3/2}$	$2s3d^2(^1S)$	$^2S_{1/2}$	1,0956	1,1034 ^a 1,1076 ^b 1,1044 ^c	4,966(-04)	2,760(12)	2,101(12) ^a 3,338(12) ^b 2,158(12) ^c
3p	$^2P_{3/2}$	$2s3d^2(^3P)$	$^2P_{3/2}$	1,0976	1,1055 ^a 1,1093 ^b 1,1064 ^c	2,986(-04)	1,650(12)	1,001(12) ^a 2,422(12) ^b 1,166(12) ^c
3p	$^2P_{3/2}$	$2s3d^2(^1D)$	$^2D_{5/2}$	1,0990	1,1067 ^a 1,1103 ^b 1,1078 ^c	1,940(-04)	1,070(12)	8,036(11) ^a 1,166(12) ^b 3,620(11) ^c
3p	$^2P_{3/2}$	$2s3d^2(^3P)$	$^2P_{1/2}$	1,1060	1,1136 ^a 1,1181 ^b 1,1147 ^c	6,942(-05)	3,780(11)	3,073(11) ^a 7,359(11) ^b 2,316(11) ^c
3p	$^2P_{3/2}$	$2s3d^2(^3F)$	$^2F_{5/2}$	1,1075	1,1151 ^a 1,1193 ^b 1,1162 ^c	4,394(-05)	2,390(11)	1,107(11) ^a 5,699(11) ^b 1,208(11) ^c
3p	$^2P_{3/2}$	$2s3d^2(^3P)$	$^4P_{3/2}$	1,1083	1,1159 ^a 1,1201 ^b 1,1169 ^c	3,176(-06)	1,720(10)	3,577(10) ^a 1,368(10) ^b 2,930(10) ^c

Tablo 4.4. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)		gf	gA_r (s ⁻¹)	
Alt seviye	Üst seviye			Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Bu çalışma	Diğer çalışmalar
3p	² P _{3/2}	2s3d ² (³ F)	⁴ F _{5/2}	1,1089	1,1166 ^a 1,1207 ^b 1,1176 ^c	6,704(-05)	3,640(11)	5,523(11) ^a 5,231(11) ^b 5,630(11) ^c
3p	² P _{1/2}	2s3p ² (¹ S)	² S _{1/2}	1,1150	1,1212 ^a 1,1204 ^b 1,1222 ^c	2,063(-06)	1,110(10)	1,850(11) ^a 1,179(10) ^b 1,686(11) ^c
3p	² P _{3/2}	2s3d ² (³ P)	⁴ P _{1/2}	1,1151	1,1224 ^a 1,1275 ^b 1,1235 ^c	8,882(-05)	4,760(11)	5,297(11) ^a 5,444(11) ^b 5,038(11) ^c
3p	² P _{1/2}	2s3p ² (³ P)	² P _{3/2}	1,1164	1,1227 ^a 1,1217 ^b 1,1237 ^c	3,680(-05)	1,968(11)	2,377(11) ^a 1,720(11) ^b 3,234(11) ^c
3p	² P _{3/2}	2s3d ² (³ F)	⁴ F _{3/2}	1,1181	1,1257 ^a 1,1303 ^b 1,1267 ^c	2,467(-05)	1,320(11)	9,733(10) ^a 1,904(11) ^b 8,992(10) ^c
3s	² S _{1/2}	2s3p3d(² S)	² D ^b _{3/2}	1,1187	1,1179 ^a 1,1212 ^b 1,1188 ^c	4,574(-05)	2,436(11)	1,115(12) ^a 4,517(11) ^b 1,386(12) ^c
3d	² D _{3/2}	2s3p3d(² S)	² P ^b _{1/2}	1,1424	1,1507 ^a 1,1516 ^b 1,1517 ^c	8,722(-05)	4,460(11)	4,222(11) ^a 6,673(11) ^b 3,066(11) ^c
3p	² P _{1/2}	2s3s3d(² S)	² D ^b _{3/2}	1,1427	1,1546 ^a 1,1510 ^b 1,1548 ^c	7,202(-03)	3,680(13)	2,728(13) ^a 6,577(13) ^b 5,480(13) ^c
3d	² D _{3/2}	2s3p3d(² S)	² P ^b _{3/2}	1,1432	1,1515 ^a 1,1523 ^b 1,1526 ^c	1,310(-03)	6,680(12)	4,940(12) ^a 6,798(12) ^b 5,184(12) ^c
3d	² D _{3/2}	2s3p3d(² S)	² D ^a _{5/2}	1,1434	1,1518 ^a 1,1526 ^b 1,1529 ^c	2,006(-03)	1,030(13)	8,985(12) ^a 8,861(12) ^b 1,059(13) ^c
3d	² D _{3/2}	2s3p3d(² S)	² D ^b _{3/2}	1,1456	1,1539 ^a 1,1544 ^b 1,1549 ^c	8,921(-03)	4,520(13)	4,434(13) ^a 4,203(13) ^b 4,056(13) ^c
3d	² D _{3/2}	2s3p3d(² S)	⁴ P _{5/2}	1,1471	1,1553 ^a 1,1556 ^b 1,1563 ^c	1,355(-09)	6,900(06)	7,048(09) ^a 8,977(09) ^b 2,248(10) ^c
3p	² P _{1/2}	2s3s3d(² S)	² D ^a _{3/2}	1,1494	1,1569 ^a 1,1592 ^b 1,1579 ^c	1,000(-02)	5,040(13)	6,267(13) ^a 1,600(14) ^b 3,331(12) ^c
3s	² S _{1/2}	2s3s3p(² S)	² P ^a _{3/2}	1,1517	1,1598 ^a 1,1610 ^b 1,1607 ^c	5,447(-02)	2,740(14)	2,969(14) ^a 1,040(14) ^b 3,756(14) ^c
3d	² D _{5/2}	2s3p3d(² S)	² P ^b _{3/2}	1,1526	1,1606 ^a 1,1620 ^b 1,1618 ^c	1,652(-01)	8,280(14)	7,636(14) ^a 1,068(15) ^b 7,188(14) ^c
3d	² D _{5/2}	2s3p3d(² S)	² D ^a _{5/2}	1,1527	1,1610 ^a 1,1623 ^b 1,1621 ^c	3,331(-01)	1,670(15)	1,510(15) ^a 2,157(15) ^b 1,477(15) ^c
3p	² P _{3/2}	2s3p ² (¹ S)	² S _{1/2}	1,1531	1,1604 ^a 1,1616 ^b 1,1614 ^c	1,366(-01)	6,860(14)	6,357(14) ^a 8,783(14) ^b 6,292(14) ^c
3s	² S _{1/2}	2s3s3p(² S)	² P ^b _{1/2}	1,1533	1,1614 ^a 1,1621 ^b 1,1624 ^c	1,551(-01)	7,780(14)	6,780(14) ^a 1,119(15) ^b 6,328(14) ^c
3d	² D _{5/2}	2s3p3d(² S)	⁴ D _{7/2}	1,1542	1,1622 ^a 1,1633 ^b 1,1635 ^c	3,332(-02)	1,670(14)	2,011(14) ^a 2,859(14) ^b 1,689(14) ^c

Tablo 4.4. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)		gf	gA_r (s ⁻¹)	
Alt seviye	Üst seviye			Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Bu çalışma	Diğer çalışmalar
3d	² D _{3/2}	2s3p3d(² S)	² P ^a _{1/2}	1,1543	1,1624 ^a 1,1636 ^b 1,1635 ^c	1,931(-01)	9,660(14)	8,844(14) ^a 1,221(15) ^b 8,808(14) ^c
3p	² P _{1/2}	2s3s3d(² S)	⁴ D _{3/2}	1,1544	1,1618 ^a 1,1628 ^b 1,1626 ^c	3,874(-02)	1,940(14)	3,963(14) ^a 4,491(14) ^b 4,808(14) ^c
3d	² D _{3/2}	2s3p3d(² S)	² F ^a _{5/2}	1,1545	1,1627 ^a 1,1639 ^b 1,1639 ^c	5,639(-01)	2,820(15)	2,634(15) ^a 3,618(15) ^b 2,659(15) ^c
3p	² P _{3/2}	2s3p ² (³ P)	² P _{3/2}	1,1546	1,1619 ^a 1,1630 ^b 1,1631 ^c	5,448(-01)	2,720(15)	2,480(15) ^a 3,513(15) ^b 2,477(15) ^c
3d	² D _{3/2}	2s3p3d(² S)	⁴ P _{3/2}	1,1550	1,1630 ^a 1,1640 ^b 1,1642 ^c	2,105(-01)	1,050(15)	8,903(14) ^a 1,283(15) ^b 8,344(14) ^c
3d	² D _{5/2}	2s3p3d(² S)	² D ^b _{3/2}	1,1550	1,1630 ^a 1,1642 ^b 1,1641 ^c	2,142(-01)	1,070(15)	9,604(14) ^a 1,335(15) ^b 9,904(14) ^c
3p	² P _{1/2}	2s3s3d(² S)	⁴ D _{1/2}	1,1552	1,1629 ^a 1,1638 ^b 1,1636 ^c	1,502(-03)	7,500(12)	6,127(13) ^a 1,488(13) ^b 1,149(14) ^c
3p	² P _{3/2}	2s3p ² (³ P)	⁴ P _{5/2}	1,1555	1,1627 ^a 1,1637 ^b 1,1638 ^c	1,405(-01)	7,020(14)	6,552(14) ^a 8,870(14) ^b 5,670(14) ^c
3d	² D _{3/2}	2s3p3d(² S)	⁴ P _{1/2}	1,1558	1,1639 ^a 1,1649 ^b 1,1649 ^c	1,574(-05)	7,860(10)	2,510(12) ^a 1,249(12) ^b 1,754(12) ^c
3d	² D _{5/2}	2s3p3d(² S)	² F ^a _{7/2}	1,1560	1,1641 ^a 1,1651 ^b 1,1652 ^c	7,513(-01)	3,750(15)	3,392(15) ^a 4,638(15) ^b 3,374(15) ^c
3s	² S _{1/2}	2s3s3p(² S)	² P ^b _{3/2}	1,1564	1,1645 ^a 1,1646 ^b 1,1654 ^c	3,296(-01)	1,644(15)	1,441(15) ^a 2,356(15) ^b 1,372(15) ^c
3d	² D _{3/2}	2s3p3d(² S)	⁴ D _{3/2}	1,1564	1,1646 ^a 1,1655 ^b 1,1656 ^c	6,826(-04)	7,400(14)	6,942(14) ^a 1,002(15) ^b 7,396(14) ^c
3d	² D _{3/2}	2s3p3d(² S)	⁴ D _{5/2}	1,1564	1,1645 ^a 1,1653 ^b 1,1656 ^c	6,826(-04)	3,410(12)	2,658(12) ^a 3,396(12) ^b 1,820(12) ^c
3d	² D _{5/2}	2s3p3d(² S)	⁴ P _{5/2}	1,1566	1,1645 ^a 1,1654 ^b 1,1656 ^c	1,925(-01)	9,600(14)	8,605(14) ^a 1,255(15) ^b 8,898(14) ^c
3p	² P _{1/2}	2s3p ² (³ P)	² P _{1/2}	1,1571	1,1635 ^a 1,1644 ^b 1,1646 ^c	1,850(-01)	9,220(14)	7,761(14) ^a 1,176(15) ^b 7,078(14) ^c
3p	² P _{1/2}	2s3p ² (³ P)	⁴ P _{3/2}	1,1579	1,1643 ^a 1,1650 ^b 1,1652 ^c	7,163(-04)	3,564(12)	5,952(14) ^a 3,310(14) ^b 1,038(15) ^c
3d	² D _{5/2}	2s3p3d(² S)	² F ^a _{5/2}	1,1641	1,1720 ^a 1,1738 ^b 1,1733 ^c	4,501(-03)	2,210(13)	1,479(13) ^a 1,140(13) ^b 2,032(13) ^c
3d	² D _{5/2}	2s3p3d(² S)	⁴ P _{3/2}	1,1645	1,1723 ^a 1,1739 ^b 1,1735 ^c	2,031(-06)	1,000(10)	5,555(10) ^a 2,427(11) ^b 1,804(08) ^c
3d	² D _{5/2}	2s3p3d(² S)	⁴ F _{7/2}	1,1648	1,1724 ^a 1,1741 ^b 1,1738 ^c	1,383(-03)	6,800(12)	5,189(10) ^a 1,107(13) ^b 3,576(10) ^c

Tablo 4.4. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)		gf	gA_r (s ⁻¹)	
Alt seviye	Üst seviye			Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Bu çalışma	Diğer çalışmalar
3d	² D _{5/2}	2s3p3d(² S)	⁴ D _{5/2}	1,1660	1,1738 ^a 1,1753 ^b 1,1750 ^c	2,407(-02)	1,180(14)	9,067(13) ^a 1,223(14) ^b 8,334(13) ^c
3p	² P _{3/2}	2s3s3d(² S)	² D ^a _{5/2}	1,1800	1,1890 ^a 1,1930 ^b 1,1899 ^c	3,780(-04)	1,810(12)	5,764(12) ^a 9,126(14) ^b 2,837(14) ^c
3p	² P _{3/2}	2s3s3d(² S)	² D ^b _{3/2}	1,1829	1,1961 ^a 1,1946 ^b 1,1964 ^c	7,289(-02)	3,480(14)	5,310(15) ^a 3,198(13) ^b 4,760(15) ^c
3p	² P _{3/2}	2s3s3d(² S)	² D ^b _{5/2}	1,1838	1,1950 ^a 1,1956 ^b 1,1953 ^c	1,955(-02)	9,300(13)	6,892(15) ^a 4,242(14) ^b 5,506(15) ^c
3d	² D _{3/2}	2s3p3d(² S)	² F ^b _{5/2}	1,1865	1,1970 ^a 1,1979 ^b 1,1981 ^c	1,208(-02)	5,720(13)	1,008(12) ^a 1,608(14) ^b 9,114(09) ^c
3p	² P _{3/2}	2s3s3d(² S)	² D ^a _{3/2}	1,1900	1,1986 ^a 1,2034 ^b 1,1997 ^c	2,341(-02)	1,100(14)	2,205(14) ^a 1,075(14) ^b 1,323(13) ^c
3p	² P _{3/2}	2s3s3d(² S)	⁴ D _{5/2}	1,1944	1,2030 ^a 1,2062 ^b 1,2039 ^c	2,676(-01)	1,250(15)	2,041(15) ^a 1,268(15) ^b 2,209(15) ^c
3s	² S _{1/2}	2s3s3p(² S)	² P ^a _{1/2}	1,1946	1,2030 ^a 1,2067 ^b 1,2040 ^c	1,959(-01)	9,160(14)	1,192(15) ^a 7,118(14) ^b 1,337(15) ^c
3p	² P _{3/2}	2s3s3d(² S)	⁴ D _{3/2}	1,1954	1,2039 ^a 1,2073 ^b 1,2048 ^c	5,242(-04)	2,450(12)	5,915(13) ^a 6,133(13) ^b 1,061(14) ^c
3p	² P _{3/2}	2s3s3d(² S)	⁴ D _{1/2}	1,1962	1,2051 ^a 1,2083 ^b 1,2058 ^c	1,168(-03)	5,440(12)	1,639(13) ^a 5,474(11) ^b 7,378(13) ^c
3d	² D _{3/2}	2s3p3d(² S)	² D ^b _{3/2}	1,1965	1,1958 ^a 1,1982 ^b 1,1965 ^c	3,218(-01)	1,500(15)	6,170(15) ^a 3,111(13) ^b 7,644(15) ^c
3d	² D _{5/2}	2s3p3d(² S)	² F ^b _{5/2}	1,1966	1,2069 ^a 1,2084 ^b 1,2081 ^c	4,083(-01)	1,900(15)	1,546(15) ^a 1,704(15) ^b 2,202(15) ^c
3p	² P _{3/2}	2s3p ² (³ P)	² P _{1/2}	1,1982	1,2058 ^a 1,2090 ^b 1,2069 ^c	2,135(-01)	9,920(14)	1,167(15) ^a 8,748(14) ^b 1,315(15) ^c
3s	² S _{1/2}	2s3s3p(² S)	⁴ P _{3/2}	1,1988	1,2071 ^a 1,2097 ^b 1,2082 ^c	2,923(-01)	1,356(15)	1,417(15) ^a 1,420(15) ^b 1,517(15) ^c
3p	² P _{1/2}	2s3p ² (³ P)	⁴ P _{1/2}	1,1988	1,2052 ^a 1,2086 ^b 1,2063 ^c	3,126(-01)	1,452(15)	1,755(15) ^a 1,297(15) ^b 2,052(15) ^c
3p	² P _{3/2}	2s3p ² (¹ D)	² D _{5/2}	1,1990	1,2067 ^a 1,2098 ^b 1,2079 ^c	4,804(-01)	2,230(15)	2,126(15) ^a 1,645(15) ^b 2,305(15) ^c
3p	² P _{3/2}	2s3p ² (³ P)	⁴ P _{3/2}	1,1991	1,2066 ^a 1,2097 ^b 1,2076 ^c	1,741(-01)	8,080(14)	3,948(13) ^a 7,490(13) ^b 1,935(15) ^c
3s	² S _{1/2}	2s3s3p(² S)	⁴ P _{1/2}	1,2007	1,2089 ^a 1,2113 ^b 1,2099 ^c	5,509(-02)	2,540(14)	2,778(14) ^a 2,702(14) ^b 3,230(14) ^c
3p	² P _{1/2}	2s3s ² (² S)	² S _{1/2}	1,2343	1,2432 ^a 1,2428 ^b 1,2438 ^c	4,762(-03)	2,080(13)	2,054(13) ^a 1,567(13) ^b 2,074(13) ^c

Tablo 4.4. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)		gf	gA_r (s ⁻¹)	
Alt seviye	Üst seviye			Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Bu çalışma	Diğer çalışmalar
3d	² D _{3/2}	2s3s3p(² S)	² P _{3/2}	1,2343	1,2439 ^a 1,2438 ^b 1,2447 ^c	1,206(-03)	5,280(12)	5,374(12) ^a 4,148(12) ^b 5,716(12) ^c
3d	² D _{3/2}	2s3s3p(² S)	² P _{1/2}	1,2361	1,2457 ^a 1,2451 ^b 1,2465 ^c	1,205(-03)	5,260(12)	4,521(12) ^a 3,265(12) ^b 5,064(12) ^c
3d	² D _{3/2}	2s3s3p(² S)	² P _{3/2}	1,2397	1,2493 ^a 1,2480 ^b 1,2500 ^c	1,871(-04)	8,120(11)	6,832(11) ^a 1,149(11) ^b 8,012(11) ^c
3d	² D _{3/2}	2s3s3p(² S)	⁴ P _{5/2}	1,2411	1,2504 ^a 1,2495 ^b 1,2514 ^c	5,825(-06)	2,520(10)	4,161(10) ^a 5,712(09) ^b 3,691(10) ^c
3p	² P _{3/2}	2s3p(³ P)	⁴ P _{1/2}	1,2430	1,2505 ^a 1,2567 ^b 1,2518 ^c	6,462(-05)	2,800(11)	2,169(11) ^a 3,334(11) ^b 4,816(11) ^c
3d	² D _{5/2}	2s3s3p(² S)	² P _{3/2}	1,2453	1,2545 ^a 1,2551 ^b 1,2554 ^c	1,609(-03)	6,920(12)	4,405(12) ^a 9,497(12) ^b 4,016(12) ^c
3d	² D _{5/2}	2s3s3p(² S)	² P _{1/2}	1,2507	1,2600 ^a 1,2594 ^b 1,2608 ^c	1,064(-04)	4,520(11)	9,280(11) ^a 5,400(11) ^b 8,908(11) ^c
3d	² D _{5/2}	2s3s3p(² S)	⁴ P _{5/2}	1,2521	1,2612 ^a 1,2609 ^b 1,2622 ^c	1,381(-05)	5,870(10)	3,266(10) ^a 8,232(11) ^b 6,246(10) ^c
3p	² P _{3/2}	2s3s(² S)	² S _{1/2}	1,2813	1,2916 ^a 1,2938 ^b 1,2922 ^c	3,029(-04)	1,230(12)	5,519(12) ^a 2,972(12) ^b 9,772(12) ^c
3d	² D _{3/2}	2s3s3p(² S)	² P _{1/2}	1,2837	1,2936 ^a 1,2965 ^b 1,2946 ^c	5,735(-05)	2,320(11)	4,984(10) ^a 1,150(10) ^b 1,075(12) ^c
3d	² D _{3/2}	2s3s3p(² S)	⁴ P _{3/2}	1,2886	1,2984 ^a 1,2999 ^b 1,2994 ^c	4,848(-04)	1,950(12)	2,683(12) ^a 2,688(12) ^b 3,762(12) ^c
3d	² D _{3/2}	2s3s3p(² S)	⁴ P _{1/2}	1,2907	1,3006 ^a 1,3018 ^b 1,3013 ^c	5,992(-05)	2,400(11)	3,900(11) ^a 4,537(11) ^b 5,940(11) ^c
3d	² D _{5/2}	2s3s3p(² S)	⁴ P _{3/2}	1,3005	1,3100 ^a 1,3123 ^b 1,3111 ^c	1,981(-04)	7,800(11)	9,619(11) ^a 8,357(11) ^b 1,357(12) ^c
3d	² D _{3/2}	2s3p3d(² S)	² P _{3/2}	1,6251	1,6453 ^a 1,6542 ^b 1,6445 ^c	5,601(-06)	1,420(10)	4,448(09) ^a 1,378(10) ^b 7,460(09) ^c

a,b,c Safronova ve ark., 2009b

Tablo 4.5. W⁶³⁺ iyonunun 2p⁵3l3l' ve 3s seviyeleri arasındaki elektrik dipol (E1) geçişleri için dalgaboyları, λ (Å), ağırlıklı salınıcı şiddetleri, gf ve ağırlıklı geçiş olasılıkları, gA_r (s⁻¹)

Geçişler				λ (Å)		gf	gA_r (s ⁻¹)	
Alt seviye	Üst seviye			Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Bu çalışma	Diğer çalışmalar
3s	² S _{1/2}	2p ⁵ 3d ² (¹ S)	² P _{1/2}	1,0906	1,0999 ^a 1,0989 ^b 1,1000 ^c	2,490(-06)	1,396(10)	6,627(09) ^a 5,575(10) ^b 1,152(10) ^c
3s	² S _{1/2}	2p ⁵ 3d ² (¹ D)	² P _{3/2}	1,0938	1,1029 ^a 1,1014 ^b 1,1030 ^c	1,167(-04)	6,520(11)	5,948(11) ^a 6,306(11) ^b 6,084(11) ^c

Tablo 4.5. (Devamı)

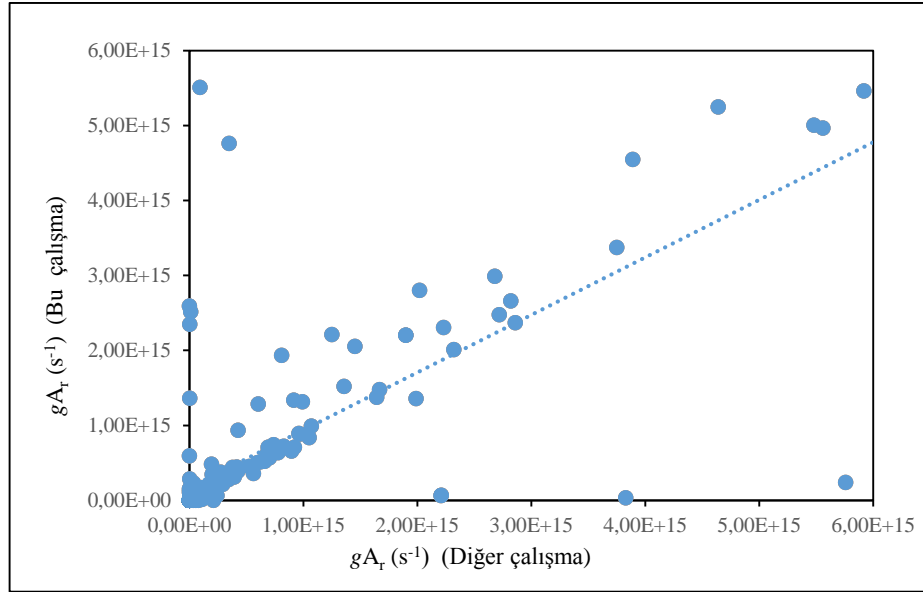
Geçişler				λ (Å)		gf	gA_r (s^{-1})	
Alt seviye	Üst seviye			Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Bu çalışma	Diğer çalışmalar
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53d^2(^3P)$	$^4D_{3/2}$	1,1028	1,1120 ^a 1,1108 ^b 1,1121 ^c	8,610(-05)	4,720(11)	4,907(11) ^a 4,221(11) ^b 4,388(11) ^c
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53d^2(^3P)$	$^2P_{3/2}$	1,0993	1,1089 ^a 1,1080 ^b 1,1092 ^c	1,256(-04)	6,920(11)	7,291(11) ^a 5,958(11) ^b 5,928(11) ^c
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53d^2(^3F)$	$^4G_{1/2}$	1,1026	1,1118 ^a 1,1107 ^b 1,1118 ^c	1,733(-09)	9,500(06)	5,179(07) ^a 1,592(06) ^b 3,316(08) ^c
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53d^2(^3P)$	$^4D_{1/2}$	1,1078	1,1171 ^a 1,1168 ^b 1,1174 ^c	2,934(-05)	1,594(11)	2,316(11) ^a 2,149(11) ^b 2,118(11) ^c
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53d^2(^3F)$	$^2D_{3/2}$	1,1082	1,1174 ^a 1,1173 ^b 1,1182 ^c	1,968(-04)	1,068(12)	2,987(11) ^a 1,146(12) ^b 3,707(08) ^c
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53p^2(^1S)$	$^2P_{1/2}$	1,1469	1,1559 ^a 1,1517 ^b 1,1562 ^c	2,229(-02)	1,130(14)	1,293(14) ^a 3,193(13) ^b 1,699(14) ^c
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53s3d(^1S)$	$^4D_{3/2}$	1,1826	1,1943 ^a 1,1927 ^b 1,1946 ^c	4,239(-01)	2,020(15)	3,412(15) ^a 5,683(15) ^b 2,802(15) ^c
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53p^2(^3P)$	$^2D_{3/2}$	1,1857	1,3872 ^a 1,3960 ^b 1,3873 ^c	8,067(-01)	3,828(15)	1,485(13) ^a 1,680(13) ^b 3,089(13) ^c
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53s3d(^1S)$	$^4D_{1/2}$	1,1885	1,1959 ^a 1,1940 ^b 1,1962 ^c	8,494(-04)	2,000(12)	2,666(15) ^a 4,084(15) ^b 2,346(15) ^c
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53s3d(^1S)$	$^4F_{3/2}$	1,1885	1,1995 ^a 1,1971 ^b 1,1993 ^c	8,494(-04)	4,000(12)	1,638(13) ^a 2,130(13) ^b 2,252(12) ^c
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53p^2(^3P)$	$^4P_{1/2}$	1,1922	1,2017 ^a 1,1989 ^b 1,2019 ^c	8,644(-04)	4,060(12)	6,105(12) ^a 1,357(13) ^b 1,557(14) ^c
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53p^2(^3P)$	$^4D_{3/2}$	1,1925	1,2021 ^a 1,1990 ^b 1,2024 ^c	1,285(-01)	6,040(14)	9,970(14) ^a 5,908(14) ^b 1,282(15) ^c
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53p^2(^3P)$	$^4D_{1/2}$	1,2321	1,2440 ^a 1,2439 ^b 1,2444 ^c	5,348(-04)	2,360(12)	4,351(12) ^a 3,514(12) ^b 4,966(12) ^c
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53d^2(^1S)$	$^2P_{3/2}$	1,2398	1,2520 ^a 1,2611 ^b 1,2524 ^c	6,400(-04)	2,776(12)	2,263(12) ^a 1,725(12) ^b 1,072(12) ^c
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53d^2(^3P)$	$^2P_{1/2}$	1,2451	1,2685 ^a 1,2777 ^b 1,2685 ^c	1,428(-04)	6,140(11)	2,816(11) ^a 1,802(11) ^b 2,510(11) ^c
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53d^2(^3F)$	$^2D_{3/2}$	1,2528	1,2675 ^a 1,2768 ^b 1,2675 ^c	4,708(-04)	2,000(12)	1,796(10) ^a 9,170(09) ^b 1,949(08) ^c
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53d^2(^3F)$	$^4D_{3/2}$	1,2584	1,2702 ^a 1,2790 ^b 1,2703 ^c	1,568(-05)	6,600(10)	1,740(10) ^a 3,477(09) ^b 1,008(10) ^c
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53s^2(^1S)$	$^2P_{1/2}$	1,2736	1,2822 ^a 1,2822 ^b 1,2825 ^c	1,448(-02)	5,960(13)	1,098(12) ^a 2,526(14) ^b 8,940(11) ^c
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53p^2(^3P)$	$^2P_{3/2}$	1,3094	1,3235 ^a 1,3301 ^b 1,3238 ^c	2,948(-03)	1,148(13)	1,609(13) ^a 8,270(12) ^b 6,752(12) ^c

Tablo 4.5. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)		gf	gA_r (s^{-1})	
Alt seviye	Üst seviye			Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Bu çalışma	Diğer çalışmalar
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53s3d(^1S)$	$^2P_{1/2}^b$	1,3486	1,3629 ^a 1,3728 ^b 1,3631 ^c	1,494(00)	5,480(15)	5,151(15) ^a 4,938(15) ^b 5,006(15) ^c
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53p^2(^1S)$	$^2P_{3/2}$	1,3160	1,3274 ^a 1,3330 ^b 1,3276 ^c	3,079(-04)	1,188(12)	4,823(11) ^a 3,956(11) ^b 8,128(11) ^c
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53p^2(^3P)$	$^2S_{1/2}$	1,3198	1,3311 ^a 1,3362 ^b 1,3313 ^c	1,004(-02)	3,840(13)	2,954(13) ^a 1,877(13) ^b 2,902(13) ^c
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53s3d(^1S)$	$^2P_{3/2}^b$	1,3495	1,3638 ^a 1,3736 ^b 1,3639 ^c	3,234(00)	1,184(16)	1,099(16) ^a 1,043(16) ^b 1,074(16) ^c
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53s3d(^1S)$	$^2D_{3/2}^b$	1,3545	1,3684 ^a 1,3774 ^b 1,3683 ^c	1,458(-02)	5,320(13)	1,125(14) ^a 9,062(13) ^b 1,167(14) ^c
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53p^2(^1D)$	$^2P_{1/2}$	1,3611	1,3765 ^a 1,3873 ^b 1,3768 ^c	1,091(-01)	3,920(14)	3,733(14) ^a 3,024(14) ^b 3,100(14) ^c
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53s3d(^1S)$	$^2D_{3/2}^a$	1,3674	1,3812 ^a 1,3911 ^b 1,3812 ^c	2,295(-03)	8,200(12)	2,289(12) ^a 2,067(13) ^b 7,296(12) ^c
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53s3d(^1S)$	$^2P_{1/2}^a$	1,3693	1,3834 ^a 1,3930 ^b 1,3834 ^c	5,359(-02)	1,906(14)	1,306(14) ^a 1,617(14) ^b 1,973(14) ^c
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53s3d(^1S)$	$^4P_{1/2}$	1,3723	1,3863 ^a 1,3956 ^b 1,3859 ^c	5,990(-03)	2,120(13)	1,055(13) ^a 2,079(13) ^b 2,132(13) ^c
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53p^2(^1D)$	$^2P_{3/2}$	1,3767	1,3889 ^a 1,3974 ^b 1,3891 ^c	2,142(-02)	7,560(13)	9,650(13) ^a 1,148(14) ^b 1,097(14) ^c
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53p^2(^1D)$	$^2P_{1/2}$	1,3771	1,3893 ^a 1,3977 ^b 1,3893 ^c	1,279(-03)	4,500(12)	3,577(12) ^a 1,467(12) ^b 1,520(12) ^c
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53p^2(^3P)$	$^4P_{3/2}$	1,4346	1,1571 ^a 1,1533 ^b 1,1575 ^c	1,920(-03)	6,240(12)	7,030(13) ^a 3,429(13) ^b 5,848(13) ^c
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53s^2(^1S)$	$^2P_{3/2}$	1,4849	1,5014 ^a 1,5108 ^b 1,5011 ^c	1,727(-01)	5,240(14)	3,911(14) ^a 3,732(14) ^b 4,512(14) ^c

^{a,b,c} Safronova ve ark., 2009b

Şekil 4.2.'de elektrik dipol geçişlerinin, ağırlıklı geçiş olasılıklarının Safronova ve arkadaşlarının (2009b) RMBPT kodu sonuçlarıyla karşılaştırılması gösterilmektedir. Geçiş olasılıklarının uyumunun bir miktar az olduğu bu grafikten de görülmektedir.



Şekil 4.2. W^{63+} iyonunun E1 geçişlerine ait ağırlıklı geçiş olasılıklarının RMBPT kodu sonuçları (Safronova ve ark., 2009b) ile karşılaştırılması

W^{63+} iyonunun CV-2 çalışmasından elde edilen seviyeler arasındaki yasaklı geçişleri için 12422 E2 ve M1, ve 13409 E3 ve M2 geçişi elde edildi. Tablo 4.6. $2p^53l3l'$ ve $3l$ ($l, l' = 0, 1, 2$) seviyeleri arasındaki yasaklı geçişler için dalgaboyu, ağırlıklı salınıcı şiddeti ve geçiş oranlarını göstermektedir. Tablo 4.6.'da sunulan çoğu geçiş ilk defa bu çalışmayla elde edildi. Bu nedenle sadece birkaç geçiş Safronova ve arkadaşlarının (2009b) HULLAC, COWAN ve RMBPT kodlarıyla elde ettiği sonuçlarla karşılaştırılabildi. $3d \ ^2D_{5/2} - 2p^53p3d \ ^2D_{5/2}$ geçişi için dalgaboyu $1,21 \text{ \AA}$ bulundu. Safronova ve arkadaşlarına (2009b) göre dalgaboyları HULLAC, COWAN ve RMBPT kodlarına göre sırasıyla $1,2184 \text{ \AA}$, $1,2221 \text{ \AA}$ ve $1,2198 \text{ \AA}$ 'dur. Bu geçişin ağırlıklı geçiş olasılığı $3,46(12) \text{ s}^{-1}$ 'dir. Safronova ve arkadaşlarına (2009b) göre ise $1,446(13) \text{ s}^{-1}$, $9,470(12) \text{ s}^{-1}$ ve $1,406(13) \text{ s}^{-1}$ 'dir. $3p \ ^2P_{3/2} - 2p^53d^2 \ ^2P_{1/2}$ geçişi için dalgaboyu $1,14 \text{ \AA}$ bulundu. Safronova ve ark. (2009b)'na göre dalgaboyları $1,3350 \text{ \AA}$, $1,3353 \text{ \AA}$ ve $1,3348 \text{ \AA}$ 'dur. Bu geçişin ağırlıklı geçiş olasılığı $1,62(11) \text{ s}^{-1}$ olarak elde edildi. Safronova ve ark. (2009b)'na göre ise $1,043(12) \text{ s}^{-1}$, $2,363(12) \text{ s}^{-1}$ ve $8,566(11) \text{ s}^{-1}$ 'dir. $3s \ ^2S_{1/2} - 2p^53p3d \ ^2D_{3/2}$ geçişi için dalgaboyu $1,13 \text{ \AA}$ elde edilirken, Safronova ve ark. (2009b)'na göre dalgaboyları $1,1256 \text{ \AA}$, $1,1299 \text{ \AA}$ ve $1,1269 \text{ \AA}$ olarak belirlendi. Bu geçişin ağırlıklı geçiş olasılığı bu çalışmada $7,12(10) \text{ s}^{-1}$ olarak bulunurken, Safronova ve ark.(2009b)'na göre $1,498(10) \text{ s}^{-1}$, $4,636(11) \text{ s}^{-1}$ ve $1,834(09) \text{ s}^{-1}$ 'dir. Bu birkaç geçiş için dalgaboylarında uyumun iyi olduğu

görülmektedir. Ağırlıklı geçiş olasılığı değerleri de karşılaştırma değerlerine yakındır. Ağırlıklı geçiş olasılıkları için Safronova ve ark. (2009b)'nin üç çalışmasından elde edilen sonuçlar karşılaştırıldığında onlar arasında da fark olduğu görülmektedir. Ağırlıklı salınıcı şiddetlerinde ise karşılaştırma değeri yoktur. Ayrıca bu iyonda enerji seviyeleri ve elektrik dipol geçişlerde olduğu gibi yasaklı geçişlerde de bazı seviye geçişleri için birden fazla değer ortaya çıkmaktadır.

Tablo 4.6. W^{63+} iyonunun yasaklı geçişlerinin (E2, M1 ve M2) dalgaboyları, λ (Å), ağırlıklı salınıcı şiddetleri, gf ve ağırlıklı geçiş olasılıkları, gA_r (s^{-1})

Geçişler				Geçiş Türü	λ (Å)	gf	gA_r (s^{-1})
Alt seviye	Üst seviye		Bu çalışma		Bu çalışma	Bu çalışma	
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53p3d$	$^4S_{3/2}$	E2	1,12	1,35(03)	7,16(12)
				M1			2,97(07)
3p	$^2P_{3/2}$	$2p^53p^2$	$^2P_{3/2}$	E2	1,40	1,68(03)	5,76(13)
				M1			6,32(07)
3p	$^2P_{1/2}$	$2p^53p^2$	$^4P_{3/2}$	E2	1,46	1,64(03)	5,12(12)
				M1			5,92(10)
3p	$^2P_{1/2}$	$2p^53p^2$	$^4S_{3/2}$	E2	1,40	1,27(03)	4,32(12)
				M1			3,58(06)
3d	$^2D_{3/2}$	$2p^53p3d$	$^2G_{7/2}$	E2	1,47	2,63(03)	8,16(12)
3d	$^2D_{5/2}$	$2p^53p3d$	$^4G_{9/2}$	E2	1,46	3,17(03)	9,89(12)
3d	$^2D_{5/2}$	$2p^53p3d$	$^2P_{1/2}$	E2	1,45	6,27(04)	1,98(12)
3p	$^2P_{1/2}$	$2p^53p^2$	$^2D_{5/2}$	E2	1,40	1,74(03)	5,92(12)
3d	$^2D_{3/2}$	$2p^53p3d$	$^4P_{1/2}$	E2	1,40	5,56(04)	1,90(12)
				M1			2,44(07)
3d	$^2D_{3/2}$	$2p^53p3d$	$^2F_{7/2}$	E2	1,40	2,21(03)	7,54(12)
3p	$^2P_{3/2}$	$2p^53p^2$	$^2D_{5/2}$	E2	1,46	1,66(03)	3,45(12)
				M1			7,26(09)
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53s3p$	$^2D_{3/2}$	E2	1,46	1,05(03)	3,27(12)
				M1			2,46(10)
3d	$^2D_{5/2}$	$2p^53p3d$	$^4F_{9/2}$	E2	1,40	2,22(03)	7,53(12)
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53s3p$	$^2D_{5/2}$	E2	1,21	9,78(04)	4,45(12)
3d	$^2D_{3/2}$	$2p^53p3d$	$^4G_{7/2}$	E2	1,21	1,26(03)	5,75(12)
3d	$^2D_{3/2}$	$2p^53p3d$	$^4P_{3/2}$	E2	1,46	8,89(04)	2,78(12)
				M1			2,42(10)
3d	$^2D_{3/2}$	$2p^53p3d$	$^2D_{3/2}$	E2	1,21	5,82(04)	2,66(12)
				M1			1,76(10)
3d	$^2D_{3/2}$	$2p^53p3d$	$^2S_{1/2}$	E2	1,21	2,88(04)	1,32(12)
				M1			6,12(09)
3d	$^2D_{5/2}$	$2p^53p3d$	$^2G_{9/2}$	E2	1,21	1,44(03)	6,53(12)
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53s3p$	$^2D_{3/2}$	E2	1,21	5,60(04)	2,57(12)
				M1			1,11(10)
3d	$^2D_{5/2}$	$2p^53p3d$	$^2F_{5/2}$	E2	1,46	1,17(03)	3,65(12)
				M1			5,02(10)
3d	$^2D_{5/2}$	$2p^53p3d$	$^2F_{7/2}$	E2	1,21	1,04(03)	4,78(12)
				M1			6,06(10)
3d	$^2D_{5/2}$	$2p^53p3d$	$^2D_{5/2}$	E2	1,21	7,60(04)	3,46(12)
3d	$^2D_{5/2}$	$2p^53p3d$	$^2P_{3/2}$	E2	1,46	7,04(04)	2,20(12)
				M1			3,58(10)
3p	$^2P_{3/2}$	$2p^53p^2$	$^2P_{3/2}$	E2	1,39	6,25(04)	2,16(12)
				M1			2,68(05)
3p	$^2P_{3/2}$	$2p^53p^2$	$^2P_{1/2}$	E2	1,46	2,34(04)	7,26(12)
				M1			2,42(10)

Tablo 4.6. (Devamı)

Geçişler				Geçiş Türü	λ (Å)	gf	gA_r (s ⁻¹)
Alt seviye	Üst seviye		Bu çalışma		Bu çalışma	Bu çalışma	
3p	² P _{1/2}	2p ⁵ 3p ²	⁴ D _{3/2}	E2	1,21	2,27(04)	1,03(12)
				M1			7,28(10)
3d	² D _{3/2}	2p ⁵ 3p3d	⁴ D _{3/2}	E2	1,47	3,76(04)	1,17(12)
				M1			5,52(10)
3d	² D _{3/2}	2p ⁵ 3p3d	⁴ P _{3/2}	E2	1,40	2,53(04)	8,60(11)
				M1			2,95(07)
3d	² D _{3/2}	2p ⁵ 3p3d	⁴ D _{5/2}	E2	1,21	2,43(04)	1,12(12)
				M1			1,25(11)
3d	² D _{5/2}	2p ⁵ 3p3d	⁴ F _{7/2}	E2	1,21	3,24(04)	1,47(12)
				M1			1,75(11)
3p	² P _{1/2}	2p ⁵ 3s3d	⁴ D _{3/2}	E2	1,20	1,44(04)	6,64(11)
				M1			3,33(10)
3s	² S _{1/2}	2p ⁵ 3s3p	⁴ S _{3/2}	E2	1,40	1,44(04)	4,92(11)
				M1			2,06(08)
3d	² D _{3/2}	2p ⁵ 3p3d	⁴ D _{1/2}	E2	1,47	7,55(05)	2,34(11)
				M1			3,48(10)
3p	² P _{1/2}	2p ⁵ 3d ²	² D _{5/2}	E2	1,12	1,25(04)	6,66(11)
3p	² P _{1/2}	2p ⁵ 3s3d	² F _{5/2}	E2	1,39	1,67(04)	5,72(11)
3p	² P _{3/2}	2p ⁵ 3s3d	² F _{5/2}	E2	1,45	1,63(04)	5,15(11)
				M1			3,98(09)
3p	² P _{3/2}	2p ⁵ 3d ²	² P _{1/2}	E2	1,14	3,18(05)	1,62(11)
3d	² D _{3/2}	2p ⁵ 3p3d	⁴ D _{1/2}	E2	1,21	3,37(05)	1,54(11)
				M1			5,74(10)
3p	² P _{3/2}	2p ⁵ 3d ²	² F _{5/2}	E2	1,15	3,90(05)	1,97(11)
				M1			6,96(07)
3p	² P _{3/2}	2p ⁵ 3d ²	⁴ D _{7/2}	E2	1,15	4,70(05)	2,37(11)
3d	² D _{5/2}	2p ⁵ 3p3d	² P _{1/2}	E2	1,42	1,70(05)	5,66(10)
3p	² P _{3/2}	2p ⁵ 3s3d	² D _{3/2}	E2	1,44	3,29(05)	1,06(11)
				M1			1,68(09)
3d	² D _{5/2}	2p ⁵ 3p3d	⁴ G _{7/2}	E2	1,22	3,86(05)	1,73(11)
				M1			2,21(09)
3s	² S _{1/2}	2p ⁵ 3p3d	² D _{3/2}	E2	1,13	1,36(05)	7,12(10)
3p	² P _{3/2}	2p ⁵ 3s3d	² F _{7/2}	E2	1,44	4,07(05)	1,31(11)
3d	² D _{3/2}	2p ⁵ 3p3d	² P _{3/2}	E2	1,39	1,62(05)	5,64(10)
				M1			6,80(06)
3p	² P _{3/2}	2p ⁵ 3s3d	⁴ P _{1/2}	E2	1,46	8,36(06)	2,62(10)
				M1			7,48(07)
3d	² D _{3/2}	2p ⁵ 3p3d	² F _{5/2}	E2	1,40	2,28(05)	7,80(10)
				M1			9,90(07)
3s	² S _{1/2}	2p ⁵ 3p3d	⁴ D _{5/2}	E2	1,13	1,37(05)	7,40(10)
3p	² P _{1/2}	2p ⁵ 3s3d	² P _{3/2}	E2	1,19	1,01(05)	4,72(10)
				M1			1,23(10)
3p	² P _{3/2}	2p ⁵ 3d ²	² F _{7/2}	E2	1,15	1,83(05)	9,12(10)
3p	² P _{3/2}	2p ⁵ 3d ²	⁴ D _{3/2}	E2	1,16	8,67(06)	4,32(10)
				M1			8,24(06)
3p	² P _{3/2}	2p ⁵ 3d ²	² F _{5/2}	E2	1,16	1,23(05)	6,12(10)
				M1			1,38(06)
3d	² D _{5/2}	2p ⁵ 3d ²	² S _{1/2}	M2	1,37	7,59(07)	2,52(11)
3s	² S _{1/2}	2p ⁵ 3s3d	² D _{5/2}	M2	1,36	9,91(08)	6,84(11)
3p	² P _{1/2}	2p ⁵ 3p3d	⁴ P _{3/2}	M2	1,32	0,00	4,24(11)
3d	² D _{3/2}	2p ⁵ 3d ²	⁴ D _{5/2}	M2	1,36	2,17(06)	6,18(11)
3d	² D _{3/2}	2p ⁵ 3d ²	² P _{1/2}	M2	1,34	0,00	1,87(11)
3d	² D _{3/2}	2p ⁵ 3d ²	⁴ D _{7/2}	M2	1,17	6,67(08)	7,04(11)
3s	² S _{1/2}	2p ⁵ 3s3d	² P _{3/2}	M2	1,18	0,00	3,42(11)
3d	² D _{5/2}	2p ⁵ 3d ²	² F _{5/2}	M2	1,19	6,44(10)	4,27(11)
3p	² P _{3/2}	2p ⁵ 3p3d	² F _{7/2}	M2	1,36	7,27(07)	5,35(11)
3d	² D _{3/2}	2p ⁵ 3d ²	² F _{7/2}	M2	1,17	3,49(06)	4,94(11)

Na benzeri tungsten iyonunda kendiliğinden iyonlaşma oranlarını hesaplamak için 3s, 3p, 3d, 4s, 4p, 4d, 4f, 2s3s3p, 2p⁵3s3d, 2p⁵3p², 2p⁵3p3d, 2p⁵3p4p, 2p⁵3p4d, 2p⁵3d², 2p⁵3d4p, 2p⁵3d4d, 2p⁵3d4f konfigürasyon seti dikkate alındı. Tablo 4.7.'de bu seviyeler arasındaki ışımali geçiş (elektrik dipol) ve kendiliğinden iyonlaşma geçiş olasılıkları ve dalgaboyları verilmektedir. Dalgaboyları Safronova ve ark. (2009b)'nın HULLAC kodu sonuçlarıyla karşılaştırılırken, ağırlıklı geçiş olasılıkları ve ağırlıklı kendiliğinden iyonlaşma oranları COWAN kodu sonuçlarıyla karşılaştırılmaktadır. Karşılaştırmalar sonucunda genel olarak tüm geçişlerde dalgaboylarının iyi uyum içerisinde olduğu görülmektedir. Ağırlıklı geçiş olasılıkları ise (¹S)3s ²S_{1/2}-2p⁵3p² (³P) ²P_{3/2}, (¹S)4s ²S_{1/2}-2p⁵3p4p (¹S) ²P_{3/2}, (¹S)4f ²F_{7/2}-2p⁵3d4f (¹S) ²G_{9/2} seviyeleri hariç uyumludur.

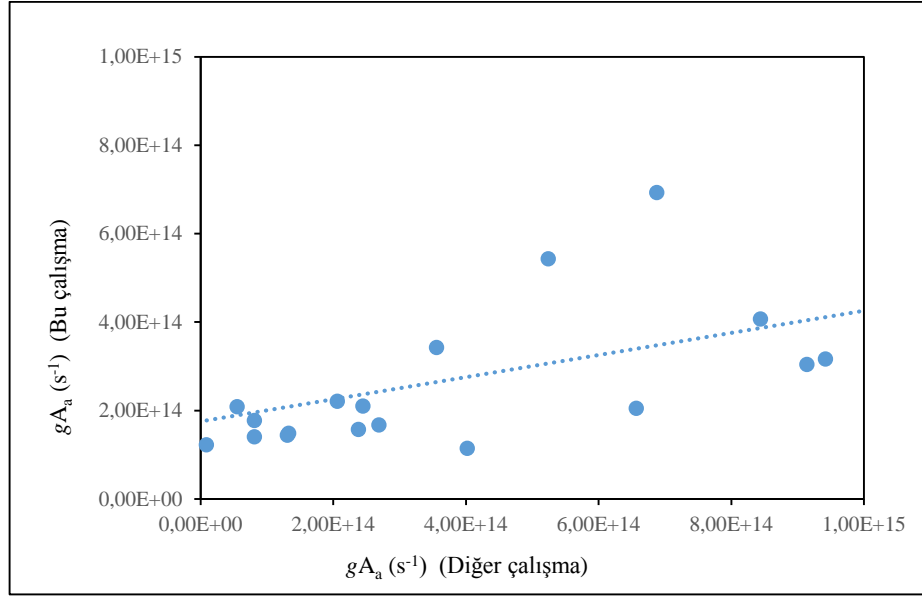
Tablo 4.7. W⁶³⁺ iyonunun ağırlıklı kendiliğinden iyonlaşma oranları, gA_a (s⁻¹) ve elektrik dipol (E1) geçişlerinin dalgaboyları, λ (Å) ve ağırlıklı geçiş olasılıkları, gA_r (s⁻¹)

Geçişler		gA _r ^b (s ⁻¹)		λ ^a (Å)		gA _a ^b (s ⁻¹)		
Alt seviye	Üst seviye	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	
(¹ S)3d	² D _{3/2} 2p ⁵ 3d ² (¹ G)	² F _{5/2}	1,70(16)	1,53(16)	1,3472	1,3647	4,71(15)	1,24(15)
(¹ S)3s	² S _{1/2} 2p ⁵ 3p ² (¹ D)	² P _{1/2}	5,43(14)	2,88(14)	1,3731	1,3765	9,14(14)	3,04(14)
(¹ S)3s	² S _{1/2} 2p ⁵ 3p ² (³ P)	² P _{3/2}	5,11(13)	2,03(15)	1,3887	1,1979	5,52(13)	2,08(14)
(¹ S)3s	² S _{1/2} 2p ⁵ 3s3d(¹ S)	⁴ D _{3/2}	4,68(15)	5,57(15)	1,1908	1,1943	8,90(12)	1,22(14)
(¹ S)3d	² D _{3/2} 2p ⁵ 3d ² (³ F)	⁴ G _{5/2}	2,61(15)	2,96(15)	1,1864	1,1951	6,57(14)	2,05(14)
(¹ S)3d	² D _{3/2} 2p ⁵ 3d4d(¹ S)	⁴ G _{5/2}	1,72(15)	1,86(15)	0,9300	0,9397	1,31(14)	1,44(14)
(¹ S)3d	² D _{5/2} 2p ⁵ 3d ² (³ F)	² D _{5/2}	2,05(16)	1,83(16)	1,3464	1,3639	4,02(14)	1,14(14)
(¹ S)3d	² D _{5/2} 2p ⁵ 3d ² (¹ G)	² F _{7/2}	1,30(16)	1,57(16)	1,1826	1,1957	1,50(15)	9,79(14)
(¹ S)4s	² S _{1/2} 2p ⁵ 3p4p(¹ S)	² P _{3/2}	3,58(14)	2,87(15)	1,2234	1,3634	2,45(14)	2,10(14)
(¹ S)4d	² D _{3/2} 2p ⁵ 3d4d(¹ S)	² F _{5/2}	1,05(16)	1,18(16)	1,3459	1,3617	6,88(14)	6,93(14)
(¹ S)4d	² D _{5/2} 2p ⁵ 3d4d(¹ S)	² F _{7/2}	2,36(16)	2,10(16)	1,3463	1,3606	8,44(14)	4,07(14)
(¹ S)3p	² P _{1/2} 2p ⁵ 3p3d(¹ S)	² D _{3/2}	1,14(16)	1,02(16)	1,3503	1,3648	1,38(15)	4,45(14)
(¹ S)3p	² P _{1/2} 2p ⁵ 3p3d(¹ S)	⁴ F _{3/2}	4,59(15)	6,43(15)	1,1868	1,1981	2,69(14)	1,67(14)
(¹ S)3p	² P _{1/2} 2p ⁵ 3p4d(¹ S)	² D _{3/2}	4,55(15)	3,66(15)	1,0354	1,0450	8,12(13)	1,40(14)
(¹ S)3p	² P _{3/2} 2p ⁵ 3p3d(¹ S)	² P _{3/2}	1,10(16)	9,52(15)	1,3471	1,3635	2,38(14)	1,57(14)
(¹ S)3p	² P _{3/2} 2p ⁵ 3p3d(¹ S)	² D _{5/2}	1,22(16)	9,98(15)	1,3478	1,1928	5,24(14)	5,43(14)
(¹ S)3p	² P _{3/2} 2p ⁵ 3p4d(¹ S)	² D _{5/2}	2,07(15)	1,88(15)	1,0355	1,0448	1,33(14)	1,48(14)
(¹ S)4p	² P _{1/2} 2p ⁵ 3d4p(¹ S)	² D _{3/2}	5,63(15)	6,23(15)	1,3436	1,3600	3,56(14)	3,42(14)
(¹ S)4p	² P _{3/2} 2p ⁵ 3d4p(¹ S)	² D _{5/2}	2,53(15)	1,24(16)	1,3454	1,1928	2,06(14)	2,21(14)
(¹ S)4f	² F _{5/2} 2p ⁵ 3d4f(¹ S)	² G _{7/2}	1,86(16)	1,91(16)	1,3544	1,3589	9,42(14)	3,16(14)
(¹ S)4f	² F _{7/2} 2p ⁵ 3d4f(¹ S)	² G _{9/2}	1,75(15)	1,96(16)	1,3554	1,1923	8,11(13)	1,77(14)

^{a, b} Safronova ve ark., 2009b

Şekil 4.3.'te kendiliğinden iyonlaşma oranlarının Safronova ve ark. (2009b)'nın COWAN kodu sonuçlarıyla karşılaştırılması gösterilmektedir. Tablo 4.7. ve Şekil 4.3.

incelendiğinde kendiliğinden iyonlaşma oranları, bazı seviyelerde oldukça uyumlu olduğu halde, bazı seviyelerde karşılaştırma değeriyle iki katı kadar fark vardır. $2p^53s3d (^1S)$, $2p^53p3d (^1S)$ seviyelerinde ise daha fazla uyumsuzluk görülmektedir.



Şekil 4.3. W^{63+} iyonunun ağırlıklı kendiliğinden iyonlaşma oranlarının COWAN kodu sonuçları (Safronova ve ark., 2009b) ile karşılaştırılması

4.2.2. Sodyum benzeri altın için hesaplama sonuçları (Au^{68+})

Sodyum benzeri altına ait enerji seviyeleri, dalgaboyları, salınıcı şiddetleri ve geçiş olasılıkları gibi ışınım parametrelerini içeren deneysel ve teorik çalışmaların bir kısmı Tablo 2.1.'de verilmektedir. Bu sonuçlar elektron ışını iyon tuzağı (EBIT) gibi deneysel ve çok konfigürasyonlu Dirac-Fock (MCDF) (Parpia ve ark., 1996), relativistik çok referanslı Møller-Plesset (MR-MP) algoritması (Vilkas ve ark., 1999) ve FAC (Gu, 2008) gibi teorik yöntemlerle elde edildi. Au^{68+} iyonuna ait bu veriler sadece en düşük birkaç seviyeye aittir. Daha yüksek seviyelere ait mevcut kaynaklarda veri bulunmamaktadır. Kendiliğinden iyonlaşma oranları da bu çalışmayla ilk defa elde edilmektedir.

Tablo 4.8.'de, hesaplanan enerji seviyeleri ve mevcut kaynaklardaki verilerle karşılaştırılması verilmektedir. Enerji seviyeleri taban hal olan $1s^22s^22p^63s^2S_{1/2}$ seviyesine göre cm^{-1} birim sistemine göre verilmektedir. VV konfigürasyon setiyle

yapılan hesaplamalarda 45, CV konfigürasyon setiyle yapılan hesaplamalarda 514 enerji seviyesi elde edildi. Tablo 4.8.'de sonuçların ilk 45 seviyesi ve özellikle karşılaştırma değeri olanlar verilmektedir.

Mevcut diğer çalışmalarda Au⁶⁸⁺ iyonu ile ilgili sadece birkaç çalışma mevcuttur (Kim ve ark., 1991; Vilkas ve ark., 2007; Hu ve ark., 2011a; Gillaspay ve ark., 2013; Sapirstein ve Cheng, 2015) ve bunlarla karşılaştırıldığında elde edilen sonuçların uyumlu olduğu görülmektedir. Vilkas ve ark. (2007)'nin kullandığı MR-MP yöntemi, relativistik Dirac-Coulomb-Breit (DCB) Hamiltonyenine dayanmaktadır. Bu Hamiltonyen, çok konfigürasyon etkileşim açılımı ve yüksek dereceden QED etkilerini (ışımali düzeltmeler, Lamb kayması, polarizasyon gibi) içerir. Hu ve arkadaşlarının (2011a) kullandığı MCDF yöntemiyle yapılan sonuçlar Breit etkileşimi, QED düzeltmeleri ve belirli kütle kayması katkılarının hepsini içerir.

Au⁶⁸⁺ için sonuçlar değerlendirildiğinde, öz ve değerlik elektronları arasındaki karşılıklı etkileşimin dikkate alınmasıyla, 3p seviyelerinin enerjilerinde bir artış; 3d seviyelerinin enerjilerinde ise bir azalma olduğu görülmektedir. Ayrıca bu hesaplamalara QED ve Breit katkıları eklendiğinde enerji seviyelerinde bir miktar azalma olmaktadır. 3p seviyeleri için en iyi uyum, CV+Breit+QED hesabından elde edilirken, 3d seviyeleri için VV+Breit+QED hesabından elde edilmektedir.

Elde edilen sonuçların ayrıca MR-MP (Vilkas ve ark., 2007) değerleri ile bir yüzde fark hesabı yapıldı. Yüzde farklar incelendiğinde 0,06-3,82 aralığında olduğu görülmektedir. 3d seviyeleri için VV+Breit+QED çalışmasıyla yapılan yüzde farkları daha iyidir. 3d ²D_{3/2}, ²D_{5/2} seviyeleri için sırasıyla yüzde fark 0,26 ve 0,45'tir.

Tablo 4.8. Au⁶⁸⁺ iyonunun düşük enerji seviyeleri, E (cm⁻¹)

Sıra	Seviyeler	Bu çalışma				Diğer çalışmalar	Fark(%)
		VV	VV+Breit+QED	CV	CV+Breit+QED		
1	3s ² S _{1/2}	0	0	0	0	0	0,00
2	3p ² P _{0/1/2}	1175954	1145951	1433967	1401520	1428506 ^a 1428326 ^b 1428702 ^c 1428564 ^d 1429101 ^e	1,88

Tablo 4.8. (Devamı)

Sıra	Seviyeler	Bu çalışma				Diğer çalışmalar	Fark(%)
		VV	VV+Breit+QED	CV	CV+Breit+QED		
3	3p $^2P_{3/2}$	5491097	5455982	5580176	5546229	5542749 ^a 5542881 ^b 5543006 ^c 5548584 ^d 5543326 ^e	0,06
4	3d $^2D_{3/2}$	7207647	7160502	6952287	6905174	7179829 ^a	3,82
5	3d $^2D_{5/2}$	8190953	8143272	7917892	7870315	8106367 ^a	2,91
6	4s $^2S_{1/2}$	30840613	30811453	31704090	31674995	-	-
7	4p $^2P_{1/2}$	31408852	31367052	32270112	32228402	-	-
8	4p $^2P_{3/2}$	33117573	33074930	33980018	33937424	-	-
9	4d $^2D_{3/2}$	33751964	33704093	34615916	34568120	-	-
10	4d $^2D_{5/2}$	34171923	34123843	35035958	34987946	-	-
11	4f $^2F_{5/2}$	34493517	34445283	35357306	35309152	-	-
12	4f $^2F_{7/2}$	34674374	34626119	35538186	35490008	-	-
13	5s $^2S_{1/2}$	44539293	44500470	45403526	45364771	-	-
14	5p $^2P_{1/2}$	44847827	44802603	45711627	45666479	-	-
15	5p $^2P_{3/2}$	45693118	45647821	46556943	46511707	-	-
16	5d $^2D_{3/2}$	45994531	45946492	46858975	46811009	-	-
17	5d $^2D_{5/2}$	46210339	46162196	47074779	47026706	-	-
18	5f $^2F_{5/2}$	46368677	46320469	47232877	47184744	-	-
19	5f $^2F_{7/2}$	46461995	46413771	47326215	47278064	-	-
20	5g $^2G_{7/2}$	46482016	46433859	47346523	47298441	-	-
21	5g $^2G_{9/2}$	46536397	46488240	47400901	47352818	-	-
22	6s $^2S_{1/2}$	51786740	51743836	52651152	52608318	-	-
23	6p $^2P_{1/2}$	51974835	51928242	52839110	52792590	-	-
24	6p $^2P_{3/2}$	52451813	52405354	53315989	53269596	-	-
25	6d $^2D_{3/2}$	52615941	52567844	53480476	53432452	-	-
26	6d $^2D_{5/2}$	52740910	52692754	53605435	53557351	-	-
27	6f $^2F_{5/2}$	52830296	52782107	53694670	53646554	-	-
28	6f $^2F_{7/2}$	52884495	52836295	53748879	53700751	-	-
29	6g $^2G_{7/2}$	52897453	52849296	53762029	53713946	-	-
30	6g $^2G_{9/2}$	52928985	52880827	53793559	53745474	-	-
31	6h $^2H_{9/2}$	52929359	52881204	53794011	53745928	-	-
32	6h $^2H_{11/2}$	52950210	52902054	53814862	53766779	-	-
33	7s $^2S_{1/2}$	56076421	56031506	56940918	56896074	-	-
34	7p $^2P_{1/2}$	56203673	56156415	57068129	57020944	-	-
35	7p $^2P_{3/2}$	56497683	56450661	57362006	57315051	-	-
36	7d $^2D_{3/2}$	56593174	56545051	57457752	57409702	-	-
37	7d $^2D_{5/2}$	56671848	56623690	57536414	57488327	-	-
38	7f $^2F_{5/2}$	56726960	56678784	57591432	57543327	-	-
39	7f $^2F_{7/2}$	56761150	56712964	57625623	57577510	-	-
40	7g $^2G_{7/2}$	56769744	56721588	57634352	57586268	-	-
41	7g $^2G_{9/2}$	56789610	56741453	57654215	57606130	-	-
42	7h $^2H_{9/2}$	56789941	56741785	57654593	57606510	-	-
43	7i $^2I_{11/2}$	56802973	56754817	57667625	57619542	-	-
44	7h $^2H_{11/2}$	56803084	56754929	57667737	57619653	-	-
45	7i $^2I_{13/2}$	56812320	56764165	57676972	57628889	-	-

^a Vilkas ve ark., 2007; ^b Sapirstein ve Cheng., 2015; ^c Gillaspay ve ark., 2013; ^d Hu ve ark., 2011a; ^e Kim ve ark., 1991

Sodyum benzeri altının CV+Breit+QED çalışmasından elde edilen seviyeler arasındaki elektrik dipol geçişler için 34663 geçiş elde edildi. Tablo 4.9. bu geçişler

için dalgaboyu, ağırlıklı salınıcı şiddeti ve ışmalı geçiş oranlarını göstermektedir. Mevcut kaynaklarda sadece 3s-3p geçişlerine ait dalgaboyu verisi bulunmaktadır. Geçiş olasılıkları için ise sadece 3s $^2S_{1/2}$ - 3p $^2P_{1/2}$ geçişine ait karşılaştırma değeri bulunmaktadır (Vilkas ve ark., 2007). Bu geçişin geçiş olasılığı $4,829(10) s^{-1}$ bulundu. Vilkas ve ark. (2007)'na göre bu değer $4,95(10) s^{-1}$ 'dir. Ağırlıklı salınıcı şiddeti için ise mevcut kaynaklarda 3s-3p ve 3p-3d geçişlerine ait veri bulunmaktadır. Bu seviyelerde ağırlıklı salınıcı şiddeti karşılaştırma değerleriyle uyum içerisindedir. Diğer geçişlere ait tüm veriler bu çalışmayla ilk defa elde edildi (Konan ve Özdemir, 2016b).

Tablo 4.9. Au⁶⁸⁺ iyonunun elektrik dipol (E1) geçişleri için dalgaboyları, λ (Å), ağırlıklı salınıcı şiddetleri, gf ve geçiş olasılıkları, A_r (s^{-1})

Geçişler				λ (Å)		gf		A_r (s^{-1})
Alt seviye	Üst seviye		Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	
3s	$^2S_{1/2}$	3p	$^2P_{1/2}$	71,3511	69,991 ^a 70,025 ^a 69,99 ^b 70,030 ^b 69,974 ^c 69,973 ^d 69,994 ^e 69,96 ^f 70,009 ^f	0,0737	0,0650 ^g	4,829(10)
3s	$^2S_{1/2}$	3p	$^2P_{3/2}$	18,0303	18,066 ^a 18,030 ^a 18,040 ^c 18,032 ^d 18,0408 ^e	0,6202	0,6317 ^g	3,181(12)
3p	$^2P_{1/2}$	3d	$^2D_{3/2}$	18,1697	-	0,4402	0,4535 ^g	2,223(12)
3p	$^2P_{3/2}$	3d	$^2D_{3/2}$	73,5865	-	0,0213	0,0255 ^g	6,545(09)
3p	$^2P_{3/2}$	3d	$^2D_{5/2}$	43,0277	-	0,3396	0,3798 ^g	2,039(11)
3p	$^2P_{1/2}$	4s	$^2S_{1/2}$	3,3032	-	0,0743	-	2,272(13)
3p	$^2P_{3/2}$	4s	$^2S_{1/2}$	3,8272	-	0,3534	-	8,047(13)
3s	$^2S_{1/2}$	4p	$^2P_{1/2}$	3,1029	-	0,2466	-	8,544(13)
3d	$^2D_{3/2}$	4p	$^2P_{1/2}$	3,9489	-	0,1148	-	2,455(13)
4s	$^2S_{1/2}$	4p	$^2P_{1/2}$	180,6990	-	0,1042	-	1,065(10)
3s	$^2S_{1/2}$	4p	$^2P_{3/2}$	2,9466	-	0,2589	-	4,972(13)
3d	$^2D_{3/2}$	4p	$^2P_{3/2}$	3,6993	-	0,0105	-	1,281(12)
3d	$^2D_{5/2}$	4p	$^2P_{3/2}$	3,8363	-	0,1284	-	1,455(13)
4s	$^2S_{1/2}$	4p	$^2P_{3/2}$	44,2003	-	0,8836	-	7,542(11)
3p	$^2P_{1/2}$	4d	$^2D_{3/2}$	3,0151	-	0,7234	-	1,327(14)
3p	$^2P_{3/2}$	4d	$^2D_{3/2}$	3,4457	-	0,2183	-	3,067(13)
4p	$^2P_{1/2}$	4d	$^2D_{3/2}$	42,7402	-	0,8080	-	7,376(11)
4p	$^2P_{3/2}$	4d	$^2D_{3/2}$	158,5548	-	0,0434	-	2,876(09)
3p	$^2P_{3/2}$	4d	$^2D_{5/2}$	3,3965	-	1,8210	-	1,755(14)
4p	$^2P_{3/2}$	4d	$^2D_{5/2}$	95,1907	-	0,6670	-	8,183(10)
3d	$^2D_{3/2}$	4f	$^2F_{5/2}$	3,5206	-	3,8580	-	3,460(14)
3d	$^2D_{5/2}$	4f	$^2F_{5/2}$	3,6445	-	0,2838	-	2,375(13)
4d	$^2D_{3/2}$	4f	$^2F_{5/2}$	134,9470	-	0,2865	-	1,749(10)
4d	$^2D_{5/2}$	4f	$^2F_{5/2}$	311,3269	-	0,0087	-	9,999(07)

Tablo 4.9. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)		gf		A_r (s^{-1})
Alt seviye	Üst seviye		Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	
3d	$^2D_{5/2}$	4f	$^2F^{\circ}_{7/2}$	3,6206	-	5,6630	-	3,602(14)
4d	$^2D_{5/2}$	4f	$^2F^{\circ}_{7/2}$	199,1784	-	0,2776	-	5,835(09)
3p	$^2P^{\circ}_{1/2}$	5s	$^2S_{1/2}$	2,2746	-	0,0124	-	7,999(12)
3p	$^2P^{\circ}_{3/2}$	5s	$^2S_{1/2}$	2,5114	-	0,0730	-	3,858(13)
4p	$^2P^{\circ}_{1/2}$	5s	$^2S_{1/2}$	7,6125	-	0,1277	-	7,351(12)
4p	$^2P^{\circ}_{3/2}$	5s	$^2S_{1/2}$	8,7509	-	0,5589	-	2,434(13)
3s	$^2S_{1/2}$	5p	$^2P^{\circ}_{1/2}$	2,1898	-	0,0617	-	4,288(13)
3d	$^2D_{3/2}$	5p	$^2P^{\circ}_{1/2}$	2,5799	-	0,0199	-	9,991(12)
4s	$^2S_{1/2}$	5p	$^2P^{\circ}_{1/2}$	7,1472	-	0,2620	-	1,711(13)
4d	$^2D_{3/2}$	5p	$^2P^{\circ}_{1/2}$	9,0103	-	0,2527	-	1,038(13)
5s	$^2S_{1/2}$	5p	$^2P^{\circ}_{1/2}$	331,4468	-	0,1484	-	4,505(09)
3s	$^2S_{1/2}$	5p	$^2P^{\circ}_{3/2}$	2,1500	-	0,0879	-	3,169(13)
3d	$^2D_{3/2}$	5p	$^2P^{\circ}_{3/2}$	2,5248	-	0,0016	-	4,224(11)
3d	$^2D_{5/2}$	5p	$^2P^{\circ}_{3/2}$	2,5879	-	0,0236	-	5,885(12)
4s	$^2S_{1/2}$	5p	$^2P^{\circ}_{3/2}$	6,7400	-	0,2572	-	9,443(12)
4d	$^2D_{3/2}$	5p	$^2P^{\circ}_{3/2}$	8,3727	-	0,0237	-	5,631(11)
4d	$^2D_{5/2}$	5p	$^2P^{\circ}_{3/2}$	8,6777	-	0,2862	-	6,338(12)
5s	$^2S_{1/2}$	5p	$^2P^{\circ}_{3/2}$	87,1888	-	1,1450	-	2,513(11)
3p	$^2P^{\circ}_{1/2}$	5d	$^2D_{3/2}$	2,2022	-	0,2011	-	6,913(13)
3p	$^2P^{\circ}_{3/2}$	5d	$^2D_{3/2}$	2,4234	-	0,0525	-	1,492(13)
4p	$^2P^{\circ}_{1/2}$	5d	$^2D_{3/2}$	6,8575	-	0,5987	-	2,123(13)
4p	$^2P^{\circ}_{3/2}$	5d	$^2D_{3/2}$	7,7678	-	0,2131	-	5,889(12)
4f	$^2F^{\circ}_{5/2}$	5d	$^2D_{3/2}$	8,6942	-	0,0827	-	1,823(12)
5p	$^2P^{\circ}_{1/2}$	5d	$^2D_{3/2}$	87,3721	-	1,0930	-	2,387(11)
5p	$^2P^{\circ}_{3/2}$	5d	$^2D_{3/2}$	334,1107	-	0,0568	-	8,488(08)
3p	$^2P^{\circ}_{3/2}$	5d	$^2D_{5/2}$	2,4108	-	0,4762	-	9,110(13)
4p	$^2P^{\circ}_{3/2}$	5d	$^2D_{5/2}$	7,6398	-	1,7210	-	3,278(13)
4f	$^2F^{\circ}_{5/2}$	5d	$^2D_{5/2}$	8,5342	-	0,0045	-	6,800(10)
4f	$^2F^{\circ}_{7/2}$	5d	$^2D_{5/2}$	8,6680	-	0,1053	-	1,558(12)
5p	$^2P^{\circ}_{3/2}$	5d	$^2D_{5/2}$	194,1751	-	0,8957	-	2,641(10)
3d	$^2D_{3/2}$	5f	$^2F^{\circ}_{5/2}$	2,4826	-	0,6440	-	1,161(14)
3d	$^2D_{5/2}$	5f	$^2F^{\circ}_{5/2}$	2,5436	-	0,0448	-	7,703(12)
4d	$^2D_{3/2}$	5f	$^2F^{\circ}_{5/2}$	7,9261	-	3,0920	-	5,471(13)
4d	$^2D_{5/2}$	5f	$^2F^{\circ}_{5/2}$	8,1989	-	0,2384	-	3,943(12)
5d	$^2D_{3/2}$	5f	$^2F^{\circ}_{5/2}$	267,5695	-	0,5144	-	7,988(09)
5d	$^2D_{5/2}$	5f	$^2F^{\circ}_{5/2}$	632,7607	-	0,0153	-	4,252(07)
3d	$^2D_{5/2}$	5f	$^2F^{\circ}_{7/2}$	2,5376	-	0,9323	-	1,207(14)
4d	$^2D_{5/2}$	5f	$^2F^{\circ}_{7/2}$	8,1366	-	4,6570	-	5,864(13)
5d	$^2D_{5/2}$	5f	$^2F^{\circ}_{7/2}$	397,8393	-	0,4934	-	2,599(09)
4f	$^2F^{\circ}_{5/2}$	5g	$^2G_{7/2}$	8,3408	-	7,8910	-	9,458(13)
4f	$^2F^{\circ}_{7/2}$	5g	$^2G_{7/2}$	8,4685	-	0,2943	-	3,421(12)
5f	$^2F^{\circ}_{5/2}$	5g	$^2G_{7/2}$	879,5267	-	0,1256	-	1,354(08)
5f	$^2F^{\circ}_{7/2}$	5g	$^2G_{7/2}$	4907,3980	-	0,0008	-	2,854(04)
4f	$^2F^{\circ}_{7/2}$	5g	$^2G_{9/2}$	8,4297	-	10,3100	-	9,676(13)
5f	$^2F^{\circ}_{7/2}$	5g	$^2G_{9/2}$	1337,7205	-	0,1070	-	3,990(07)
3p	$^2P^{\circ}_{1/2}$	6s	$^2S_{1/2}$	1,9529	-	0,0027	-	2,323(12)
3p	$^2P^{\circ}_{3/2}$	6s	$^2S_{1/2}$	2,1249	-	0,0335	-	2,471(13)
4p	$^2P^{\circ}_{1/2}$	6s	$^2S_{1/2}$	4,9068	-	0,0227	-	3,150(12)
4p	$^2P^{\circ}_{3/2}$	6s	$^2S_{1/2}$	5,3559	-	0,1154	-	1,341(13)
5p	$^2P^{\circ}_{1/2}$	6s	$^2S_{1/2}$	14,4054	-	0,1859	-	2,987(12)
3s	$^2S_{1/2}$	6p	$^2P^{\circ}_{1/2}$	1,8942	-	0,0250	-	2,326(13)
3d	$^2D_{3/2}$	6p	$^2P^{\circ}_{1/2}$	2,1792	-	0,0060	-	4,215(12)
4s	$^2S_{1/2}$	6p	$^2P^{\circ}_{1/2}$	4,7354	-	0,0675	-	1,004(13)
4d	$^2D_{3/2}$	6p	$^2P^{\circ}_{1/2}$	5,4871	-	0,0400	-	4,427(12)

Tablo 4.9. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)		gf		A_r (s^{-1})
Alt seviye	Üst seviye		Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	
5d	$^2D_{3/2}$	6p	$^2P_{1/2}$	16,7180	-	0,4009	-	4,783(12)
6s	$^2S_{1/2}$	6p	$^2P_{1/2}$	542,6779	-	0,1962	-	2,221(09)
3s	$^2S_{1/2}$	6p	$^2P_{3/2}$	1,8772	-	0,0436	-	2,065(13)
3d	$^2D_{3/2}$	6p	$^2P_{3/2}$	2,1568	-	0,0005	-	1,724(11)
3d	$^2D_{5/2}$	6p	$^2P_{3/2}$	2,2027	-	0,0104	-	3,568(12)
4s	$^2S_{1/2}$	6p	$^2P_{3/2}$	4,6308	-	0,0923	-	7,176(12)
4d	$^2D_{3/2}$	6p	$^2P_{3/2}$	5,3472	-	0,0045	-	2,639(11)
4d	$^2D_{5/2}$	6p	$^2P_{3/2}$	5,4700	-	0,0616	-	3,435(12)
5s	$^2S_{1/2}$	6p	$^2P_{3/2}$	12,6505	-	0,2692	-	2,805(12)
5d	$^2D_{3/2}$	6p	$^2P_{3/2}$	15,4833	-	0,0402	-	2,794(11)
5d	$^2D_{5/2}$	6p	$^2P_{3/2}$	16,0182	-	0,4803	-	3,121(12)
6s	$^2S_{1/2}$	6p	$^2P_{3/2}$	151,2224	-	1,4030	-	1,023(11)
3p	$^2P_{1/2}$	6d	$^2D_{3/2}$	1,9219	-	0,0764	-	3,451(13)
3p	$^2P_{3/2}$	6d	$^2D_{3/2}$	2,0883	-	0,0226	-	8,632(12)
4p	$^2P_{1/2}$	6d	$^2D_{3/2}$	4,7161	-	0,1759	-	1,319(13)
4p	$^2P_{3/2}$	6d	$^2D_{3/2}$	5,1295	-	0,0564	-	3,575(12)
4f	$^2F_{5/2}$	6d	$^2D_{3/2}$	5,5178	-	0,0131	-	7,198(11)
5p	$^2P_{1/2}$	6d	$^2D_{3/2}$	12,8767	-	0,5567	-	5,598(12)
5p	$^2P_{3/2}$	6d	$^2D_{3/2}$	14,4493	-	0,2188	-	1,748(12)
5f	$^2F_{5/2}$	6d	$^2D_{3/2}$	16,0059	-	0,2051	-	1,335(12)
6p	$^2P_{1/2}$	6d	$^2D_{3/2}$	156,2836	-	1,3530	-	9,238(10)
6p	$^2P_{3/2}$	6d	$^2D_{3/2}$	614,0399	-	0,0683	-	3,019(08)
3p	$^2P_{3/2}$	6d	$^2D_{5/2}$	2,0829	-	0,2159	-	5,531(13)
4p	$^2P_{3/2}$	6d	$^2D_{5/2}$	5,0969	-	0,4974	-	2,129(13)
4f	$^2F_{5/2}$	6d	$^2D_{5/2}$	5,4800	-	0,0007	-	2,726(10)
4f	$^2F_{7/2}$	6d	$^2D_{5/2}$	5,5348	-	0,0195	-	7,078(11)
5p	$^2P_{3/2}$	6d	$^2D_{5/2}$	14,1932	-	1,7430	-	9,621(12)
5f	$^2F_{5/2}$	6d	$^2D_{5/2}$	15,6922	-	0,0113	-	5,121(10)
5f	$^2F_{7/2}$	6d	$^2D_{5/2}$	15,9254	-	0,2666	-	1,169(12)
6p	$^2P_{3/2}$	6d	$^2D_{5/2}$	347,5185	-	1,0970	-	1,010(10)
3d	$^2D_{3/2}$	6f	$^2F_{5/2}$	2,1394	-	0,2234	-	5,426(13)
3d	$^2D_{5/2}$	6f	$^2F_{5/2}$	2,1845	-	0,0155	-	3,619(12)
4d	$^2D_{3/2}$	6f	$^2F_{5/2}$	5,2415	-	0,7097	-	2,872(13)
4d	$^2D_{5/2}$	6f	$^2F_{5/2}$	5,3595	-	0,0519	-	2,010(12)
5d	$^2D_{3/2}$	6f	$^2F_{5/2}$	14,6294	-	2,8080	-	1,459(13)
5d	$^2D_{5/2}$	6f	$^2F_{5/2}$	15,1061	-	0,2235	-	1,089(12)
5g	$^2G_{7/2}$	6f	$^2F_{5/2}$	15,7527	-	0,0675	-	3,024(11)
6d	$^2D_{3/2}$	6f	$^2F_{5/2}$	467,0665	-	0,7157	-	3,647(09)
6d	$^2D_{5/2}$	6f	$^2F_{5/2}$	1121,0295	-	0,0210	-	1,860(07)
3d	$^2D_{5/2}$	6f	$^2F_{7/2}$	2,1820	-	0,3317	-	5,810(13)
4d	$^2D_{5/2}$	6f	$^2F_{7/2}$	5,3439	-	1,0580	-	3,088(13)
5d	$^2D_{5/2}$	6f	$^2F_{7/2}$	14,9834	-	4,3190	-	1,604(13)
5g	$^2G_{7/2}$	6f	$^2F_{7/2}$	15,6194	-	0,0022	-	7,385(09)
5g	$^2G_{9/2}$	6f	$^2F_{7/2}$	15,7532	-	0,0854	-	2,871(11)
6d	$^2D_{5/2}$	6f	$^2F_{7/2}$	697,3475	-	0,6814	-	1,168(09)
4f	$^2F_{5/2}$	6f	$^2G_{7/2}$	5,4334	-	1,0950	-	3,091(13)
4f	$^2F_{7/2}$	6f	$^2G_{7/2}$	5,4873	-	0,0395	-	1,092(12)
5f	$^2F_{5/2}$	6f	$^2G_{7/2}$	15,3158	-	6,8460	-	2,433(13)
5f	$^2F_{7/2}$	6f	$^2G_{7/2}$	15,5379	-	0,2599	-	8,977(11)
6f	$^2F_{5/2}$	6f	$^2G_{7/2}$	1483,8732	-	0,2384	-	9,026(07)
4f	$^2F_{7/2}$	6f	$^2G_{9/2}$	5,4778	-	1,4210	-	3,159(13)
5f	$^2F_{7/2}$	6f	$^2G_{9/2}$	15,4621	-	9,0160	-	2,515(13)
6f	$^2F_{7/2}$	6f	$^2G_{9/2}$	2235,9966	-	0,2045	-	2,729(07)
5g	$^2G_{7/2}$	6h	$^2H_{9/2}$	15,5099	-	13,2700	-	3,678(13)

Tablo 4.9. (Devamı)

Geçişler		λ (Å)		gf		A_r (s^{-1})	
Alt seviye	Üst seviye	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	
5g	$^2G_{9/2}$	6h	$^2H^o_{9/2}$	15,6418	-	0,3021	8,236(11)
6f	$^2G^o_{7/2}$	6h	$^2H^o_{9/2}$	3126,7245	-	0,0806	5,502(06)
5g	$^2G_{9/2}$	6h	$^2H^o_{11/2}$	15,5910	-	16,3400	3,736(13)}
6f	$^2G^o_{9/2}$	6h	$^2H^o_{11/2}$	4693,8116	-	0,0658	1,661(06)
3p	$^2P^o_{1/2}$	7s	$^2S_{1/2}$	1,8020	-	0,0000	8,662(09)
3p	$^2P^o_{3/2}$	7s	$^2S_{1/2}$	1,9474	-	0,0247	2,169(13)
4p	$^2P^o_{1/2}$	7s	$^2S_{1/2}$	4,0539	-	0,0044	8,933(11)
4p	$^2P^o_{3/2}$	7s	$^2S_{1/2}$	4,3557	-	0,0570	1,001(13)
5p	$^2P^o_{1/2}$	7s	$^2S_{1/2}$	8,9050	-	0,0303	1,272(12)
5p	$^2P^o_{3/2}$	7s	$^2S_{1/2}$	9,6299	-	0,1690	6,079(12)
6p	$^2P^o_{1/2}$	7s	$^2S_{1/2}$	24,3695	-	0,2378	1,335(12)
6p	$^2P^o_{3/2}$	7s	$^2S_{1/2}$	27,5750	-	1,0330	4,530(12)
3s	$^2S_{1/2}$	7p	$^2P^o_{1/2}$	1,7537	-	0,0123	1,338(13)
3d	$^2D_{3/2}$	7p	$^2P^o_{1/2}$	1,9954	-	0,0017	1,410(12)
4s	$^2S_{1/2}$	7p	$^2P^o_{1/2}$	3,9454	-	0,0274	5,869(12)
4d	$^2D_{3/2}$	7p	$^2P^o_{1/2}$	4,4538	-	0,0110	1,850(12)
5s	$^2S_{1/2}$	7p	$^2P^o_{1/2}$	8,5791	-	0,0717	3,248(12)
5d	$^2D_{3/2}$	7p	$^2P^o_{1/2}$	9,7944	-	0,0606	2,105(12)
6s	$^2S_{1/2}$	7p	$^2P^o_{1/2}$	22,6622	-	0,2969	1,928(12)
6d	$^2D_{3/2}$	7p	$^2P^o_{1/2}$	27,8669	-	0,5355	2,300(12)
7s	$^2S_{1/2}$	7p	$^2P^o_{1/2}$	800,8308	-	0,2572	1,338(09)
3s	$^2S_{1/2}$	7p	$^2P^o_{3/2}$	1,7447	-	0,0277	1,517(13)
3d	$^2D_{3/2}$	7p	$^2P^o_{3/2}$	1,9837	-	0,0001	4,668(10)
3d	$^2D_{5/2}$	7p	$^2P^o_{3/2}$	2,0225	-	0,0077	3,140(12)
4s	$^2S_{1/2}$	7p	$^2P^o_{3/2}$	3,9001	-	0,0499	5,475(12)
4d	$^2D_{3/2}$	7p	$^2P^o_{3/2}$	4,3962	-	0,0014	1,236(11)
4d	$^2D_{5/2}$	7p	$^2P^o_{3/2}$	4,4789	-	0,0307	2,551(12)
5s	$^2S_{1/2}$	7p	$^2P^o_{3/2}$	8,3680	-	0,1030	2,453(12)
5d	$^2D_{3/2}$	7p	$^2P^o_{3/2}$	9,5201	-	0,0079	1,459(11)
5d	$^2D_{5/2}$	7p	$^2P^o_{3/2}$	9,7197	-	0,1145	2,022(12)
6s	$^2S_{1/2}$	7p	$^2P^o_{3/2}$	21,2462	-	0,2942	1,087(12)
6d	$^2D_{3/2}$	7p	$^2P^o_{3/2}$	25,7559	-	0,0582	1,462(11)
6d	$^2D_{5/2}$	7p	$^2P^o_{3/2}$	26,6120	-	0,7149	1,683(12)
7s	$^2S_{1/2}$	7p	$^2P^o_{3/2}$	238,6766	-	1,6500	4,830(10)
3p	$^2P^o_{1/2}$	7d	$^2D_{3/2}$	1,7855	-	0,0217	1,137(13)
3p	$^2P^o_{3/2}$	7d	$^2D_{3/2}$	1,9281	-	0,0143	6,424(12)
4p	$^2P^o_{1/2}$	7d	$^2D_{3/2}$	3,9712	-	0,0565	5,970(12)
4p	$^2P^o_{3/2}$	7d	$^2D_{3/2}$	4,2603	-	0,0276	2,539(12)
4f	$^2F^o_{5/2}$	7d	$^2D_{3/2}$	4,5248	-	0,0036	2,953(11)
5p	$^2P^o_{1/2}$	7d	$^2D_{3/2}$	8,5155	-	0,1459	3,354(12)
5p	$^2P^o_{3/2}$	7d	$^2D_{3/2}$	9,1760	-	0,0630	1,248(12)
5f	$^2F^o_{5/2}$	7d	$^2D_{3/2}$	9,7800	-	0,0331	5,777(11)
6p	$^2P^o_{1/2}$	7d	$^2D_{3/2}$	21,6586	-	0,5101	1,813(12)
6p	$^2P^o_{3/2}$	7d	$^2D_{3/2}$	24,1540	-	0,2346	6,707(11)
6f	$^2F^o_{5/2}$	7d	$^2D_{3/2}$	26,5735	-	0,3454	8,157(11)
7p	$^2P^o_{1/2}$	7d	$^2D_{3/2}$	257,2297	-	1,6260	4,097(10)
7p	$^2P^o_{3/2}$	7d	$^2D_{3/2}$	1056,5146	-	0,0755	1,128(08)
3p	$^2P^o_{3/2}$	7d	$^2D_{5/2}$	1,9252	-	0,1458	4,372(13)
4p	$^2P^o_{3/2}$	7d	$^2D_{5/2}$	4,2461	-	0,2636	1,625(13)
4f	$^2F^o_{5/2}$	7d	$^2D_{5/2}$	4,5087	-	0,0002	1,136(10)
4f	$^2F^o_{7/2}$	7d	$^2D_{5/2}$	4,5458	-	0,0084	4,546(11)
5p	$^2P^o_{3/2}$	7d	$^2D_{5/2}$	9,1103	-	0,5621	7,529(12)
5f	$^2F^o_{5/2}$	7d	$^2D_{5/2}$	9,7054	-	0,0019	2,300(10)
5f	$^2F^o_{7/2}$	7d	$^2D_{5/2}$	9,7941	-	0,0547	6,334(11)

Tablo 4.9. (Devamı)

Geçişler			λ (Å)		gf		A_r (s ⁻¹)	
Alt seviye	Üst seviye		Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	
6p	² P _{3/2} ^o	7d	² D _{5/2}	23,7038	-	1,8900	-	3,740(12)
6f	² F _{5/2} ^o	7d	² D _{5/2}	26,0296	-	0,0196	-	3,222(10)
6f	² F _{7/2} ^o	7d	² D _{5/2}	26,4021	-	0,4725	-	7,536(11)
7p	² P _{3/2} ^o	7d	² D _{5/2}	577,1130	-	1,2330	-	4,117(09)
3d	² D _{3/2}	7f	² F _{5/2} ^o	1,9748	-	0,1003	-	2,860(13)
3d	² D _{5/2}	7f	² F _{5/2} ^o	2,0132	-	0,0076	-	2,084(12)
4d	² D _{3/2}	7f	² F _{5/2} ^o	4,3525	-	0,2738	-	1,607(13)
4d	² D _{5/2}	7f	² F _{5/2} ^o	4,4335	-	0,0208	-	1,175(12)
5d	² D _{3/2}	7f	² F _{5/2} ^o	9,3177	-	0,7048	-	9,026(12)
5d	² D _{5/2}	7f	² F _{5/2} ^o	9,5088	-	0,0547	-	6,730(11)
5g	² G _{7/2}	7f	² F _{5/2} ^o	9,7610	-	0,0095	-	1,105(11)
6d	² D _{3/2}	7f	² F _{5/2} ^o	24,3257	-	-2,6620	-	5,001(12)
6d	² D _{5/2}	7f	² F _{5/2} ^o	25,0880	-	0,2190	-	3,869(11)
6f	² G _{7/2} ^o	7f	² F _{5/2} ^o	26,1139	-	0,1749	-	2,852(11)
7d	² D _{3/2}	7f	² F _{5/2} ^o	748,3597	-	0,9075	-	1,801(09)
7d	² D _{5/2}	7f	² F _{5/2} ^o	1818,1775	-	0,0262	-	8,801(06)
3d	² D _{5/2}	7f	² F _{7/2} ^o	2,0118	-	0,1673	-	3,446(13)
4d	² D _{5/2}	7f	² F _{7/2} ^o	4,4268	-	0,4384	-	1,865(13)
5d	² D _{5/2}	7f	² F _{7/2} ^o	9,4780	-	1,1130	-	1,033(13)
5g	² G _{7/2}	7f	² F _{7/2} ^o	9,7285	-	0,0003	-	2,719(09)
5g	² G _{9/2}	7f	² F _{7/2} ^o	9,7802	-	0,0149	-	1,300(11)
6d	² D _{5/2}	7f	² F _{7/2} ^o	24,8746	-	4,2340	-	5,705(12)
6f	² G _{7/2} ^o	7f	² F _{7/2} ^o	25,8828	-	0,0057	-	7,084(09)
6f	² G _{9/2} ^o	7f	² F _{7/2} ^o	26,0958	-	0,2311	-	2,830(11)
7d	² D _{5/2}	7f	² F _{7/2} ^o	1121,2936	-	0,8465	-	5,614(08)
4f	² F _{5/2} ^o	7g	² G _{7/2}	4,4889	-	0,3482	-	1,441(13)
4f	² F _{7/2} ^o	7g	² G _{7/2}	4,5257	-	0,0125	-	5,105(11)
5f	² F _{5/2} ^o	7g	² G _{7/2}	9,6140	-	1,3510	-	1,219(13)
5f	² F _{7/2} ^o	7g	² G _{7/2}	9,7010	-	0,0501	-	4,436(11)
6f	² F _{5/2} ^o	7g	² G _{7/2}	25,3826	-	6,3050	-	8,160(12)
6f	² F _{7/2} ^o	7g	² G _{7/2}	25,7366	-	0,2429	-	3,058(11)
6h	² H _{9/2} ^o	7g	² G _{7/2}	26,0394	-	0,0652	-	8,023(10)
7f	² F _{5/2} ^o	7g	² G _{7/2}	2328,8073	-	0,3427	-	5,269(07)
4f	² F _{7/2} ^o	7g	² G _{9/2}	4,5216	-	0,4619	-	1,507(13)
5f	² F _{7/2} ^o	7g	² G _{9/2}	9,6824	-	1,7920	-	1,275(13)
6f	² F _{7/2} ^o	7g	² G _{9/2}	25,6057	-	8,4070	-	8,553(12)
6h	² H _{9/2} ^o	7g	² G _{9/2}	25,9054	-	0,0014	-	1,349(09)
6h	² H _{11/2} ^o	7g	² G _{9/2}	26,0461	-	0,0831	-	8,170(10)
7f	² F _{7/2} ^o	7g	² G _{9/2}	3493,9871	-	0,2926	-	1,599(07)
5g	² G _{7/2}	7h	² H _{9/2} ^o	9,7011	-	1,6090	-	1,140(13)
5g	² G _{9/2}	7h	² H _{9/2} ^o	9,7526	-	0,0359	-	2,517(11)
6f	² G _{7/2} ^o	7h	² H _{9/2} ^o	25,6900	-	11,7200	-	1,185(13)
6f	² G _{9/2} ^o	7h	² H _{9/2} ^o	25,8998	-	0,2696	-	2,681(11)
7g	² G _{7/2}	7h	² H _{9/2} ^o	4940,2810	-	0,1521	-	4,156(06)
6h	² H _{9/2} ^o	7i	² I _{11/2}	25,8157	-	19,9300	-	1,662(13)
6h	² H _{11/2} ^o	7i	² I _{11/2}	25,9554	-	0,3068	-	2,531(11)
7h	² H _{9/2} ^o	7i	² I _{11/2}	7673,3036	-	0,0651	-	6,145(05)
5g	² G _{9/2}	7h	² H _{11/2} ^o	9,7401	-	1,9850	-	1,163(13)
6f	² G _{9/2} ^o	7h	² H _{11/2} ^o	25,8119	-	14,5300	-	1,212(13)
7g	² G _{9/2}	7h	² H _{11/2} ^o	7394,9982	-	0,1237	-	1,257(06)
6h	² H _{11/2} ^o	7i	² I _{13/2}	25,8926	-	23,6800	-	1,683(13)
7h	² H _{11/2} ^o	7i	² I _{13/2}	10827,6336	-	0,0543	-	2,207(05)

^aGillaspy ve ark., 2009; ^bRalchenko ve ark., 2008; ^cKim ve ark. 1991; ^dSeely ve Wagner, 1990; ^eGillaspy ve ark., 2013; ^fVilkas ve ark., 2007; ^gTheodosiou ve Curtis, 1988

Au⁶⁸⁺ iyonunun CV+Breit+QED çalışmasından elde edilen seviyeler arasındaki yasaklı geçişleri için 51006 E2 ve M1, ve 57537 E3 ve M2 geçişi elde edildi. Bu geçişler için dalgaboyu, ağırlıklı salınıcı şiddeti ve geçiş oranları Tablo 4.10.'da verilmektedir. Bu veriler bu çalışmayla ilk defa elde edildi. Bu nedenle karşılaştırma yapılamadı.

Tablo 4.10. Au⁶⁸⁺ iyonunun yasaklı geçişlerinin (E2, M1 ve M2) dalgaboyları, λ (Å), ağırlıklı salınıcı şiddetleri, gf ve geçiş olasılıkları, A_r (s⁻¹)

Geçişler				Geçiş Türü	λ (Å)	gf	A_r (s ⁻¹)
Alt Seviye	Üst Seviye						
3s	² S _{1/2}	3d	² D _{3/2}	E2	14,48	3,03(-05)	2,41(08)
				M1			1,99(00)
3s	² S _{1/2}	3d	² D _{5/2}	E2	12,71	7,06(-05)	4,86(08)
3s	² S _{1/2}	4s	² S _{1/2}	M1	3,16	0,00	7,77(00)
3s	² S _{1/2}	4d	² D _{3/2}	E2	2,89	3,88(-03)	7,73(11)
				M1			1,59(-01)
3s	² S _{1/2}	4d	² D _{5/2}	E2	2,86	5,67(-03)	7,71(11)
3s	² S _{1/2}	5s	² S _{1/2}	M1	2,20	0,00	6,88(01)
3s	² S _{1/2}	5d	² D _{3/2}	E2	2,14	9,21(-04)	3,37(11)
				M1			7,22(-01)
3s	² S _{1/2}	5d	² D _{5/2}	E2	2,13	1,48(-03)	3,63(11)
3s	² S _{1/2}	6s	² S _{1/2}	M1	1,90	0,00	1,63(02)
3s	² S _{1/2}	6d	² D _{3/2}	E2	1,87	3,61(-04)	1,72(11)
				M1			1,10(00)
3s	² S _{1/2}	6d	² D _{5/2}	E2	1,87	6,15(-04)	1,96(11)
3s	² S _{1/2}	7s	² S _{1/2}	M1	1,76	0,00	2,46(02)
3s	² S _{1/2}	7d	² D _{3/2}	E2	1,74	2,09(-04)	1,15(11)
				M1			1,20(00)
3s	² S _{1/2}	7d	² D _{5/2}	E2	1,74	3,80(-04)	1,40(11)
3p	² P _{1/2}	3p	² P _{3/2}	E2	24,13	8,97(-06)	2,57(07)
				M1			6,29(08)
3p	² P _{1/2}	4p	² P _{1/2}	M1	3,24	0,00	1,26(-03)
3p	² P _{1/2}	4p	² P _{3/2}	E2	3,07	1,08(-03)	1,91(11)
				M1			2,35(09)
3p	² P _{1/2}	4f	² F _{5/2}	E2	2,95	9,21(-03)	1,18(12)
3p	² P _{1/2}	5p	² P _{1/2}	M1	2,26	0,00	1,10(-03)
3p	² P _{1/2}	5p	² P _{3/2}	E2	2,22	2,82(-04)	9,56(10)
				M1			1,75(09)
3p	² P _{1/2}	5f	² F _{5/2}	E2	2,18	4,95(-04)	1,15(11)
3p	² P _{1/2}	6p	² P _{1/2}	M1	1,95	0,00	2,59(-04)
3p	² P _{1/2}	6p	² P _{3/2}	E2	1,93	3,29(-05)	1,48(10)
				M1			1,23(09)
3p	² P _{1/2}	6f	² F _{5/2}	E2	1,91	3,36(-06)	1,02(09)
3p	² P _{1/2}	7p	² P _{1/2}	M1	1,80	0,00	8,25(-06)
3p	² P _{1/2}	7p	² P _{3/2}	E2	1,79	9,52(-04)	4,96(11)
				M1			9,24(08)
3p	² P _{1/2}	7f	² F _{5/2}	E2	1,78	1,12(-03)	3,94(11)
3p	² P _{3/2}	4p	² P _{1/2}	E2	3,75	1,64(-03)	3,88(11)
				M1			2,94(09)
3p	² P _{3/2}	4p	² P _{3/2}	E2	3,52	1,41(-03)	1,90(11)
				M1			9,89(-02)
3p	² P _{3/2}	4f	² F _{5/2}	E2	3,36	2,41(-03)	2,37(11)
				M1			1,73(00)
3p	² P _{3/2}	4f	² F _{7/2}	E2	3,34	1,47(-02)	1,10(12)

Tablo 4.10. (Devamı)

Geçişler				Geçiş Türü	λ (Å)	gf	A_r (s ⁻¹)
Alt Seviye	Üst Seviye						
3p	² P _{3/2} ^o	5p	² P _{1/2} ^o	E2	2,49	3,70(-04)	1,99(11)
				M1			1,97(09)
3p	² P _{3/2} ^o	5p	² P _{3/2} ^o	E2	2,44	4,02(-04)	1,13(11)
				M1			4,93(00)
3p	² P _{3/2} ^o	5f	² F _{5/2} ^o	E2	2,40	5,68(-05)	1,10(10)
				M1			4,66(00)
3p	² P _{3/2} ^o	5f	² F _{7/2} ^o	E2	2,40	4,08(-04)	5,93(10)
3p	² P _{3/2} ^o	6p	² P _{1/2} ^o	E2	2,12	2,42(-04)	1,80(11)
				M1			1,20(09)
3p	² P _{3/2} ^o	6p	² P _{3/2} ^o	E2	2,10	2,68(-04)	1,02(11)
				M1			1,50(01)
3p	² P _{3/2} ^o	6f	² F _{5/2} ^o	E2	2,08	2,31(-06)	5,94(08)
				M1			6,41(00)
3p	² P _{3/2} ^o	6f	² F _{7/2} ^o	E2	2,08	2,29(-05)	4,43(09)
3p	² P _{3/2} ^o	7p	² P _{1/2} ^o	E2	1,94	7,27(-04)	6,43(11)
				M1			7,14(08)
3p	² P _{3/2} ^o	7p	² P _{3/2} ^o	E2	1,93	9,17(-04)	4,10(11)
				M1			2,58(01)
3p	² P _{3/2} ^o	7f	² F _{5/2} ^o	E2	1,92	6,07(-05)	1,83(10)
				M1			6,89(00)
3p	² P _{3/2} ^o	7f	² F _{7/2} ^o	E2	1,92	3,99(-04)	9,02(10)
3d	² D _{3/2}	3d	² D _{5/2}	E2	103,61	3,07(-08)	3,18(03)
				M1			9,70(06)
3d	² D _{3/2}	4s	² S _{1/2}	E2	4,04	3,58(-04)	7,33(10)
				M1			3,38(01)
3d	² D _{3/2}	4d	² D _{3/2}	E2	3,61	9,07(-04)	1,16(11)
				M1			1,74(00)
3d	² D _{3/2}	4d	² D _{5/2}	E2	3,56	3,78(-04)	3,32(10)
				M1			9,87(07)
3d	² D _{3/2}	5s	² S _{1/2}	E2	2,60	6,74(-05)	3,33(10)
				M1			8,80(01)
3d	² D _{3/2}	5d	² D _{3/2}	E2	2,51	1,79(-04)	4,76(10)
				M1			1,79(-01)
3d	² D _{3/2}	5d	² D _{5/2}	E2	2,49	8,26(-05)	1,48(10)
				M1			6,93(07)
3d	² D _{3/2}	5g	² G _{7/2}	E2	2,48	9,42(-03)	1,28(12)
3d	² D _{3/2}	6s	² S _{1/2}	E2	2,19	1,61(-05)	1,12(10)
				M1			1,21(02)
3d	² D _{3/2}	6d	² D _{3/2}	E2	2,15	5,25(-05)	1,90(10)
				M1			2,88(00)
3d	² D _{3/2}	6d	² D _{5/2}	E2	2,14	2,66(-05)	6,44(09)
				M1			4,62(07)
3d	² D _{3/2}	6g	² G _{7/2}	E2	2,14	5,23(-03)	9,55(11)
3d	² D _{3/2}	7s	² S _{1/2}	E2	2,00	4,70(-06)	3,92(09)
				M1			1,30(02)
3d	² D _{3/2}	7d	² D _{3/2}	E2	1,98	1,76(-07)	7,49(07)
				M1			5,89(00)
3d	² D _{3/2}	7d	² D _{5/2}	E2	1,98	5,07(-09)	1,44(06)
				M1			3,20(07)
3d	² D _{3/2}	7g	² G _{7/2}	E2	1,97	3,51(-03)	7,51(11)
3d	² D _{5/2}	4s	² S _{1/2}	E2	4,20	5,71(-04)	1,08(11)
3d	² D _{5/2}	4d	² D _{3/2}	E2	3,75	4,04(-04)	4,80(10)
				M1			1,31(08)
3d	² D _{5/2}	4d	² D _{5/2}	E2	3,69	1,58(-03)	1,29(11)
				M1			1,44(-01)
3d	² D _{5/2}	5s	² S _{1/2}	E2	2,67	1,24(-04)	5,80(10)
3d	² D _{5/2}	5d	² D _{3/2}	E2	2,57	8,27(-05)	2,09(10)
				M1			9,00(07)
3d	² D _{5/2}	5d	² D _{5/2}	E2	2,55	3,51(-04)	5,99(10)
				M1			6,58(-01)

Tablo 4.10. (Devamı)

Geçişler				Geçiş Türü	λ (Å)	gf	A_r (s ⁻¹)
Alt Seviye	Üst Seviye						
3d	² D _{5/2}	5g	² G _{7/2}	E2	2,54	1,08(-03)	1,40(11)
				M1			8,21(-01)
3d	² D _{5/2}	5g	² G _{9/2}	E2	2,53	1,35(-02)	1,40(12)
3d	² D _{5/2}	6s	² S _{1/2}	E2	2,24	6,90(-05)	4,61(10)
3d	² D _{5/2}	6d	² D _{3/2}	E2	2,19	3,77(-05)	1,31(10)
				M1			5,78(07)
3d	² D _{5/2}	6d	² D _{5/2}	E2	2,19	1,66(-04)	3,85(10)
				M1			3,58(00)
3d	² D _{5/2}	6g	² G _{7/2}	E2	2,18	5,71(-04)	1,00(11)
				M1			2,10(00)
3d	² D _{5/2}	6g	² G _{9/2}	E2	2,18	7,21(-03)	1,01(12)
3d	² D _{5/2}	7s	² S _{1/2}	E2	2,04	1,16(-04)	9,31(10)
3d	² D _{5/2}	7d	² D _{3/2}	E2	2,02	4,96(-05)	2,03(10)
				M1			3,76(07)
3d	² D _{5/2}	7d	² D _{5/2}	E2	2,02	2,23(-04)	6,11(10)
				M1			6,73(00)
3d	² D _{5/2}	7g	² G _{7/2}	E2	2,01	2,90(-04)	5,98(10)
				M1			2,99(00)
3d	² D _{5/2}	7g	² G _{9/2}	E2	2,01	3,74(-03)	6,17(11)
3s	² S _{1/2}	3p	² P _{3/2}	M2	18,03	0,00	1,07(06)
3s	² S _{1/2}	4p	² P _{3/2}	M2	2,95	0,00	6,52(08)
3s	² S _{1/2}	4f	² F _{5/2}	M2	2,83	1,93(-05)	2,10(04)
3s	² S _{1/2}	5p	² P _{3/2}	M2	2,15	0,00	7,73(08)
3s	² S _{1/2}	5f	² F _{5/2}	M2	2,12	2,24(-07)	9,13(02)
3s	² S _{1/2}	6p	² P _{3/2}	M2	1,88	0,00	6,56(08)
3s	² S _{1/2}	6f	² F _{5/2}	M2	1,86	1,19(-06)	7,51(03)
3s	² S _{1/2}	7p	² P _{3/2}	M2	1,74	0,00	5,56(08)
3s	² S _{1/2}	7f	² F _{5/2}	M2	1,74	3,86(-07)	9,96(03)
3p	² P _{1/2}	3d	² D _{3/2}	M2	18,17	0,00	2,68(04)
3p	² P _{1/2}	3d	² D _{5/2}	M2	15,46	1,22(-09)	4,72(05)
3p	² P _{1/2}	4d	² D _{3/2}	M2	3,02	0,00	6,54(07)
3p	² P _{1/2}	4d	² D _{5/2}	M2	2,98	8,11(-06)	4,44(08)
3p	² P _{1/2}	5d	² D _{3/2}	M2	2,20	0,00	6,29(07)
3p	² P _{1/2}	5d	² D _{5/2}	M2	2,19	1,04(-06)	4,52(08)
3p	² P _{1/2}	6d	² D _{3/2}	M2	1,92	0,00	4,10(07)
3p	² P _{1/2}	6d	² D _{5/2}	M2	1,92	3,19(-09)	3,12(08)
3p	² P _{1/2}	7d	² D _{3/2}	M2	1,79	0,00	1,55(07)
3p	² P _{1/2}	7d	² D _{5/2}	M2	1,78	2,46(-04)	1,30(08)
3p	² P _{3/2}	3d	² D _{3/2}	M2	73,59	6,66(-13)	8,51(-02)
3p	² P _{3/2}	3d	² D _{5/2}	M2	43,03	7,04(-12)	1,59(04)
3p	² P _{3/2}	4s	² S _{1/2}	M2	3,83	0,00	6,16(08)
3p	² P _{3/2}	4d	² D _{3/2}	M2	3,45	7,94(-06)	1,08(02)
3p	² P _{3/2}	4d	² D _{5/2}	M2	3,40	5,45(-06)	2,19(09)
3p	² P _{3/2}	5s	² S _{1/2}	M2	2,51	0,00	6,81(08)
3p	² P _{3/2}	5d	² D _{3/2}	M2	2,42	4,25(-07)	9,41(01)
3p	² P _{3/2}	5d	² D _{5/2}	M2	2,41	3,42(-07)	2,24(09)
3p	² P _{3/2}	5g	² G _{7/2}	M2	2,40	1,76(-05)	9,87(04)
3p	² P _{3/2}	6s	² S _{1/2}	M2	2,12	0,00	6,06(08)
3p	² P _{3/2}	6d	² D _{3/2}	M2	2,09	3,10(-07)	4,60(01)
3p	² P _{3/2}	6d	² D _{5/2}	M2	2,08	1,63(-07)	1,81(09)
3p	² P _{3/2}	6g	² G _{7/2}	M2	2,08	6,66(-06)	7,53(04)
3p	² P _{3/2}	7s	² S _{1/2}	M2	1,95	0,00	6,32(08)
3p	² P _{3/2}	7d	² D _{3/2}	M2	1,93	6,45(-05)	1,64(01)
3p	² P _{3/2}	7d	² D _{5/2}	M2	1,93	4,43(-05)	1,67(09)
3p	² P _{3/2}	7g	² G _{7/2}	M2	1,92	9,38(-07)	5,00(04)
3d	² D _{3/2}	4p	² P _{1/2}	M2	3,95	0,00	8,16(06)

Tablo 4.10. (Devamı)

Geçişler				Geçiş Türü	λ (Å)	gf	A_r (s ⁻¹)
Alt Seviye	Üst Seviye						
3d	² D _{3/2}	4f	² F _{5/2}	M2	3,52	3,10(-06)	7,38(08)
3d	² D _{3/2}	4f	² F _{7/2}	M2	3,50	1,78(-06)	9,69(08)
3d	² D _{3/2}	5p	² P _{1/2}	M2	2,58	0,00	6,34(06)
3d	² D _{3/2}	5p	² P _{3/2}	M2	2,52	3,06(-07)	1,17(03)
3d	² D _{3/2}	5f	² F _{5/2}	M2	2,48	4,73(-08)	4,91(08)
3d	² D _{3/2}	5f	² F _{7/2}	M2	2,48	1,64(-08)	6,64(08)
3d	² D _{3/2}	6p	² P _{1/2}	M2	2,18	0,00	3,71(06)
3d	² D _{3/2}	6p	² P _{3/2}	M2	2,16	7,21(-08)	7,08(02)
3d	² D _{3/2}	6f	² F _{5/2}	M2	2,14	2,63(-07)	3,08(08)
3d	² D _{3/2}	6f	² F _{7/2}	M2	2,14	1,25(-07)	4,27(08)
3d	² D _{3/2}	7p	² P _{1/2}	M2	2,00	0,00	1,45(06)
3d	² D _{3/2}	7p	² P _{3/2}	M2	1,98	5,79(-06)	4,78(02)
3d	² D _{3/2}	7f	² F _{5/2}	M2	1,97	4,80(-06)	1,90(08)
3d	² D _{3/2}	7f	² F _{7/2}	M2	1,97	2,65(-06)	2,73(08)
3d	² D _{5/2}	4p	² P _{1/2}	M2	4,11	1,11(-06)	8,34(07)
3d	² D _{5/2}	4p	² P _{3/2}	M2	3,84	9,98(-07)	1,37(08)
3d	² D _{5/2}	4f	² F _{5/2}	M2	3,64	1,91(-06)	4,03(02)
3d	² D _{5/2}	4f	² F _{7/2}	M2	3,62	4,95(-06)	5,98(09)
3d	² D _{5/2}	5p	² P _{1/2}	M2	2,65	1,10(-07)	8,62(07)
3d	² D _{5/2}	5p	² P _{3/2}	M2	2,59	1,51(-07)	1,27(08)
3d	² D _{5/2}	5f	² F _{5/2}	M2	2,54	4,87(-08)	1,45(03)
3d	² D _{5/2}	5f	² F _{7/2}	M2	2,54	9,16(-08)	4,03(09)
3d	² D _{5/2}	6p	² P _{1/2}	M2	2,23	9,48(-08)	6,64(07)
3d	² D _{5/2}	6p	² P _{3/2}	M2	2,20	7,52(-08)	1,05(08)
3d	² D _{5/2}	6f	² F _{5/2}	M2	2,18	9,60(-08)	2,42(03)
3d	² D _{5/2}	6f	² F _{7/2}	M2	2,18	2,25(-07)	2,62(09)
3d	² D _{5/2}	6h	² H _{9/2}	M2	2,18	2,96(-06)	4,30(04)
3d	² D _{5/2}	7p	² P _{1/2}	M2	2,03	3,36(-06)	5,39(07)
3d	² D _{5/2}	7p	² P _{3/2}	M2	2,02	3,13(-06)	1,09(08)
3d	² D _{5/2}	7f	² F _{5/2}	M2	2,01	5,33(-07)	2,77(03)
3d	² D _{5/2}	7f	² F _{7/2}	M2	2,01	1,37(-06)	1,83(09)
3d	² D _{5/2}	7h	² H _{9/2}	M2	2,01	3,76(-06)	5,47(04)

Na benzeri altın iyonunda kendiliğinden iyonlaşma oranlarını hesaplamak için $2p^53s3p$, $2p^53s3d$, $2p^53p^2$, $2p^53p3d$ ve $2p^53d^2$ konfigürasyon seti dikkate alındı. Tablo 4.11.'de bu seviyeler arasındaki ışımali geçiş (elektrik dipol) ve kendiliğinden iyonlaşma geçiş olasılıkları ve dalgaboyları verilmektedir. Mevcut kaynaklarda Na benzeri Au için kendiliğinden iyonlaşma oranlarına (A_a) ait veri bulunmadığından A_a verileri yenidir. Bu seviyeler arası E1 geçişleri de bu çalışmayla ilk defa elde edildi.

Tablo 4.11. Au⁶⁸⁺ iyonunun kendiliğinden iyonlaşma oranları, A_a (s⁻¹) ve elektrik dipol (E1) geçişlerinin dalgaboyları, λ (Å) ve geçiş olasılıkları, A_r (s⁻¹)

Geçişler				A_r (s ⁻¹)	λ (Å)	A_a (s ⁻¹)
Alt seviye	Üst seviye					
4f	² F _{7/2}	2p ⁵ 3p3d	⁴ G _{9/2}	1,678(09)	1,9597	1,11(13)
3d	² D _{5/2}	2p ⁵ 3d ²	² G _{7/2}	3,030(10)	1,1962	1,57(13)
3d	² D _{5/2}	2p ⁵ 3d ²	⁴ F _{7/2}	1,352(14)	1,1829	4,14(13)
3d	² D _{5/2}	2p ⁵ 3d ²	² F _{7/2}	4,476(14)	1,1676	4,07(14)

Tablo 4.11. (Devamı)

Geçişler				$A_r (s^{-1})$	$\lambda (\text{\AA})$	$A_a (s^{-1})$
Alt seviye	Üst seviye					
3d	$^2D_{5/2}$	$2p^53d^2$	$^4D^{\circ}_{7/2}$	1,406(13)	1,1819	2,60(13)
3p	$^2P^{\circ}_{3/2}$	$2p^53p3d$	$^2F_{5/2}$	2,811(11)	1,2346	1,49(14)
3p	$^2P^{\circ}_{3/2}$	$2p^53p3d$	$^4D_{5/2}$	7,673(13)	1,1872	1,71(14)
3p	$^2P^{\circ}_{3/2}$	$2p^53p3d$	$^2D_{5/2}$	7,940(13)	1,1741	9,71(13)
3d	$^2D_{3/2}$	$2p^53d^2$	$^4G^{\circ}_{5/2}$	5,852(14)	1,0030	1,12(14)
3d	$^2D_{3/2}$	$2p^53d^2$	$^2F^{\circ}_{5/2}$	3,838(15)	1,1631	8,71(14)
3d	$^2D_{3/2}$	$2p^53d^2$	$^4D^{\circ}_{5/2}$	1,947(13)	1,1670	1,20(13)
3p	$^2P^{\circ}_{1/2}$	$2p^53p3d$	$^2D_{3/2}$	3,918(15)	1,1693	1,23(13)
3p	$^2P^{\circ}_{1/2}$	$2p^53p3d$	$^2P_{3/2}$	1,518(09)	1,1185	6,83(13)
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53s3d$	$^4D^{\circ}_{3/2}$	1,869(15)	1,0030	2,83(13)
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53p^2$	$^2D^{\circ}_{3/2}$	8,808(09)	1,2515	1,44(14)
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53s3d$	$^2P^{\circ}_{3/2}$	3,992(15)	1,1662	1,24(13)
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53p^2$	$^2P^{\circ}_{3/2}$	8,579(11)	1,1304	4,36(14)
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53d^2$	$^2P^{\circ}_{3/2}$	2,703(11)	1,0646	2,15(13)
3p	$^2P^{\circ}_{1/2}$	$2p^53p3d$	$^4D_{1/2}$	4,452(13)	1,1923	2,04(13)
3p	$^2P^{\circ}_{1/2}$	$2p^53s3p$	$^2P_{1/2}$	4,396(11)	1,2291	2,88(13)
3p	$^2P^{\circ}_{1/2}$	$2p^53p3d$	$^2P_{1/2}$	3,123(11)	1,1318	2,83(13)
3p	$^2P^{\circ}_{1/2}$	$2p^53s3p$	$^2S_{1/2}$	2,020(12)	1,2158	4,43(14)
3p	$^2P^{\circ}_{1/2}$	$2p^53p3d$	$^2S_{1/2}$	3,950(15)	1,1695	9,20(13)
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53p^2$	$^4D^{\circ}_{1/2}$	1,465(09)	1,0480	1,84(14)
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53d^2$	$^4D^{\circ}_{1/2}$	5,649(11)	1,0940	3,79(13)
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53s3d$	$^4P^{\circ}_{1/2}$	2,103(13)	1,1873	1,03(13)
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53s3d$	$^2P^{\circ}_{1/2}$	1,626(14)	1,1847	1,27(14)
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53p^2$	$^2P^{\circ}_{1/2}$	2,767(12)	1,1912	4,59(14)
3s	$^2S_{1/2}$	$2p^53d^2$	$^2P^{\circ}_{1/2}$	1,588(10)	1,0762	9,07(13)

4.3. Magnezyum (Mg) Benzeri Tungsten ve Altın İyonları (W^{62+} , Au^{67+}) için Yapılan Atomik Yapı Hesaplamaları

Magnezyum benzeri iyonlar $1s^22s^22p^63s^2$ elektronik konfigürasyonuna sahiptir. Magnezyum benzeri iyonlar son yörüngesinde sadece iki elektron olduğundan atomik yapı hesaplamaları için genellikle uygun model oluştururlar.

Mg benzeri tungsten ve altın iyonları için yapılan enerji seviyeleri ve ışımali geçiş parametreleri hesaplamalarında kullanılan konfigürasyonlar Tablo 4.12.'de verilmektedir. Hesaplamalarda dikkate alınan konfigürasyon setleri için, VV konfigürasyon seti sadece 3s yörüngesinden uyarılmaları içerirken, CV konfigürasyon seti 2p özünden de uyarılmaları içeren konfigürasyonlardan oluşmaktadır.

Mg benzeri iyonlarda kendiliğinden iyonlaşma seviyeleri, $1s^22s^22p^63s$ seviyesinin üstündeki seviyeler olarak düşünüldü.

Tablo 4.12. Mg benzeri tungsten ve altın iyonlarının enerji seviyeleri ve ışımali geçiş parametreleri hesaplamalarında kullanılan konfigürasyonlar

Konfigürasyonlar	
W⁶²⁺	<p>VV 3s², 3s3p, 3s3d, 3s4s, 3s4p, 3s4d, 3s4f, 3s5s, 3s5p, 3p², 3p3d, 3p4s, 3p4p, 3d², 4s², 4s4p, 4s4d</p> <p>CV 3s², 3s3p, 3s3d, 3s4s, 3s4p, 3s4d, 3s4f, 3s5s, 3s5p, 3p², 3p3d, 3p4s, 3p4p, 3d², 2p⁵3s²3p, 2p⁵3s3p², 2p⁵3p³, 2p⁵3s²3d, 2p⁵3s²4s, 2p⁵3s3p3d, 2p⁵3p²3d, 2p⁵3d³, 2p⁵3s3d², 2p⁵3s3p4s, 4s², 4s4p, 4s4d</p>
Au⁶⁷⁺	<p>VV 3s², 3s3p, 3s3d, 3s4s, 3s4p, 3s4d, 3s4f, 3s5s, 3s5p, 3s5d, 3s5f, 3s5g, 3s6s, 3s6p, 3s6d, 3s6f, 3s6g, 3s6h, 3s7s, 3s7p, 3s7d, 3s7f, 3s7g, 3s7h, 3s7i, 3p², 3p3d, 3p4s, 3p4p, 3p4d, 3p4f, 3p5s, 3p5p, 3p5d, 3p5f, 3p5g, 3p6s, 3p6p, 3p6d, 3p6f, 3p6g, 3p6h, 3p7s, 3p7p, 3p7d, 3p7f, 3p7g, 3p7h, 3p7i, 3d², 3d4s, 3d4p, 3d4d, 3d4f, 3d5s, 3d5p, 3d5d, 3d5f, 3d5g, 3d6s, 3d6p, 3d6d, 3d6f, 3d6g, 3d6h, 3d7s, 3d7p, 3d7d, 3d7f, 3d7g, 3d7h, 3d7i</p> <p>CV 3s², 3s3p, 3s3d, 3s4s, 3s4p, 3s4d, 3s4f, 3s5s, 3s5p, 3s5d, 3s5f, 3s5g, 3s6s, 3s6p, 3s6d, 3s6f, 3s6g, 3p², 3p3d, 3p4s, 3p4p, 3p4d, 3p4f, 3p5s, 3d², 3d4s, 3d4p, 3d4d, 3d4f, 2p⁵3s²3p, 2p⁵3s3p², 2p⁵3p³, 2p⁵3s²3d, 2p⁵3s²4s, 2p⁵3s3p3d, 2p⁵3p²3d, 2p⁵3d³, 2p⁵3s3d², 2p⁵3s3p4s</p>

4.3.1. Magnezyum benzeri tungsten için hesaplama sonuçları (W⁶²⁺)

Magnezyum benzeri tungstene ait enerji seviyeleri, dalgaboyları, salınıcı şiddetleri, geçiş olasılıkları gibi ışımali parametrelerini ve kendiliğinden iyonlaşma oranlarını içeren deneysel ve teorik çalışmaların bir kısmı Tablo 2.1.'de verilmektedir. Bu sonuçlar, gözlem sonuçlarının bir analizinin yanı sıra, FAC (Gu, 2008), COWAN (Cowan, 1981), HULLAC (Safronova ve ark., 2002a, 2002b), RMBPT (Safronova ve ark., 2002a, 2002b), GRASP (Dyall ve ark., 1989), ve MR-MP (Vilkas ve ark., 1999) kodları ile hesaplanmış ve deneysel (EBIT) olarak çalışılmıştır. Ayrıca W²⁺'den W⁷³⁺'e kadar olan tungsten iyonlarının enerji seviyeleri ve ışımali geçiş bilgisi ve tungsten spektroskopisindeki son gelişmeler üzerine iki derleme yayımlandı (Kramida ve Shirai, 2009; Kramida, 2011).

W⁶²⁺ iyonu için hesaplanan enerji seviyeleri ve mevcut kaynaklardaki verilerle karşılaştırılması Tablo 4.13.'te verilmektedir. Enerji seviyeleri taban hal olan 1s²2s²2p⁶3s² ¹S₀ seviyesine göre cm⁻¹ birim sistemine göre verilmektedir. VV konfigürasyon setiyle yapılan hesaplamalarda 78, CV konfigürasyon setiyle yapılan

hesaplamalarda 698 enerji seviyesi elde edildi. Tablo 4.13.'te sonuçların ilk 78 seviyesi ve özellikle karşılaştırma değeri olanlar verilmektedir.

Mevcut kaynaklarda W^{62+} iyonu ile ilgili bazı farklı çalışmalar mevcuttur (Ralchenko ve ark., 2008; Safronova ve ark., 2009a; Clementson ve Beiersdorfer, 2010; Clementson ve ark., 2011; Hao ve Kang, 2015; Santana, 2016; Aggarwall ve Keenan, 2016) ve bunlarla karşılaştırıldığında elde edilen sonuçların uyumlu olduğu görülmektedir. Safronova ve arkadaşlarının (2009a) çalışmalarında üç farklı kodla hesaplama yapılmıştır. Tabloda COWAN, RMBPT, HULLAC çalışmaları sırasıyla a, b ve c şeklinde gösterilmektedir. HULLAC kodu, konfigürasyon karışım katsayılarını içererek, parametrik potansiyel yönteminin relativistik versiyonunu kullanarak, ara çiftlenim seviye enerjilerini hesaplar. RMBPT kodu relativistik çok parçacık pertürbasyon teorisine dayanır. Aynı zamanda Breit etkilerini ve ikinci dereceden korelasyon düzeltmelerini içerir. Aggarwall ve Keenan (2016) yaptıkları çalışmada GRASP ve FAC kodlarıyla hesaplama yapmışlardır. Bu sonuçlar Tablo 4.13.'te sırasıyla h ve ı şeklinde gösterilmektedir. GRASP kodu, Dirac-Coulomb Hamiltonyenini temel alan çok konfigürasyonlu Dirac-Fock (MCDF) yöntemine dayanır. FAC kodu relativistik konfigürasyon etkileşme yöntemini (RCIM) kullanır. RCIM genelde MCDF yöntemini izleyerek, korelasyon ve relativistik etkileri de içeren sonuçlar verir. Spin-yörünge etkileşimi, kütle kayması ve diğer önemli relativistik etkileri içeren standart Coulomb-Dirac Hamiltonyenini kullanır. Mevcut kaynaklardaki MR-MP yöntemi (Vilkas ve ark., 1999) ise relativistik Dirac-Coulomb-Breit (DCB) Hamiltonyenine dayanmaktadır. Bu Hamiltonyen, çok konfigürasyon etkileşim açılımı ve yüksek dereceden QED etkilerini (ışınmalı düzeltmeler, Lamb kayması, polarizasyon gibi) içerir.

W^{62+} için sonuçlar değerlendirildiğinde, öz ve değerlik elektronları arasındaki karşılıklı etkileşimin dikkate alınmasıyla, 3s3d ve 3s4s seviyeleri hariç, enerji seviyesi değerlerinde ciddi bir düzelme olduğu görüldü. Örneğin, 3s3p 3P_0 seviyesi için enerji değeri VV hesabında $981,694 \text{ cm}^{-1}$ iken, CV hesabında $1150,612 \text{ cm}^{-1}$ 'e çıkmıştır. Ayrıca bu hesaplamalara QED ve Breit katkıları eklendiğinde enerji seviyelerinde bir azalma gözlemlendi. Örneğin CV hesabında 3s3p 3P_0 seviyesi için $1150,612 \text{ cm}^{-1}$ olan

enerji değeri, Breit ve QED katkılarıyla (CV+Breit+QED) $1125,621 \text{ cm}^{-1}$ olarak bulundu. Korelasyon etkileri, QED ve Breit relativistik katkılarının hesaba katıldığı CV+Breit+QED çalışmasının sonuçları genel olarak diğer çalışmalarla çok daha uyumludur. Düşük seviyelerdeki bu uyum yüksek seviyelere doğru gidildikçe biraz azalmaktadır. Bu seviyelerde VV+Breit+QED çalışması karşılaştırma değerine daha yakın gözükmektedir.

Elde edilen sonuçların ayrıca HULLAC (Safronova ve ark., 2009a) değerleri ile bir yüzde fark hesabı yapıldı. Yüzde farklar incelendiğinde genellikle 0,0028-4,33 aralığında olduğu görülmektedir. Yüzde farkın en fazla olduğu seviyeler $3d^2$ seviyeleridir. $3d^2$ seviyeleri hariç enerji seviyeleri sıralaması da aynıdır. Sadece sıra sütununda ‘*’ ile işaretlenen 31. ve 32. seviyelerin sırası diğer çalışmalara göre yer değiştirmiştir. Enerji seviye sıralaması FAC ve GRASP (Aggarwall ve Keenan, 2016) sonuçlarıyla karşılaştırıldığında farklıdır.

Tablo 4.13. W^{62+} iyonunun düşük enerji seviyeleri, $E (10^3 \text{ cm}^{-1})$

Sıra	Seviyeler	Bu çalışma				Diğer çalışmalar	Fark (%)
		VV	VV+Breit +QED	CV	CV+Breit +QED		
1	$3s^2 \quad ^1S_0$	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000 ^{abcdghk}	0,00
2	$3s3p \quad ^3P^o_0$	981,694	958,330	1150,612	1125,621	1149,816 ^a 1126,449 ^b 1136,079 ^c 1126,000 ^d 1126,001 ^e 1136,823 ^h 1123,863 ⁱ 1123,870 ^k	0,92
3	$3s3p \quad ^3P^o_1$	1115,118	1091,709	1282,913	1257,904	1271,524 ^a 1252,154 ^b 1267,584 ^c 1251,400 ^e 1251,601 ^e 1264,689 ^h 1251,312 ⁱ 1257,790 ^k	0,76
4	$3p^2 \quad ^3P_0$	2463,898	2416,664	2800,061	2749,676	2706,827 ^a 2687,591 ^b 2721,583 ^c 2686,083 ^e 2716,218 ^h 2688,915 ⁱ 2686,320 ^k	1,03

Tablo 4.13. (Devamı)

Sıra	Seviyeler	Bu çalışma				Diğer çalışmalar	Fark (%)
		VV	VV+Breit +QED	CV	CV+Breit +QED		
5	3s3p $^3P^o_2$	4076,319	4049,769	4124,988	4099,002	4125,356 ^a 4104,094 ^b 4109,447 ^c 4104,000 ^d 4099,761 ^e 4109,893 ^h 4099,885 ⁱ 4101,040 ^k	0,25
6	3s3p $^1P^o_1$	4381,745	4355,048	4428,647	4402,512	4399,741 ^a 4402,930 ^b 4414,698 ^c 4398,500 ^f 4398,230 ^g 4414,436 ^h 4403,714 ⁱ 4402,790 ^k	0,27
7	3p ² 1D_2	5416,143	5365,637	5613,692	5565,492	5583,677 ^a 5535,299 ^b 5557,115 ^c 5531,919 ^g 5554,760 ^h 5532,297 ⁱ 5535,560 ^k	0,15
8	3p ² 3P_1	5427,587	5378,555	5634,250	5582,822	5585,086 ^a 5551,449 ^b 5572,679 ^c 5546,257 ^g 5573,931 ^h 5550,041 ⁱ 5546,450 ^k	0,18
9	3s3d 3D_1	5859,377	5824,493	5867,509	5832,468	5772,978 ^a 5826,700 ^b 5842,706 ^c 5827,000 ^d 5827,458 ^g 5844,104 ^h 5825,932 ⁱ 5829,630 ^k	0,17
10	3s3d 3D_2	5948,832	5912,885	5982,119	5944,539	5862,612 ^a 5930,433 ^b 5954,313 ^c 5930,400 ^f 5929,879 ^g 5950,824 ^h 5931,367 ⁱ 5938,530 ^k	0,16
11	3s3d 3D_3	6567,790	6532,560	6563,703	6528,353	6451,470 ^a 6497,864 ^b 6514,682 ^c 6498,000 ^d 6500,187 ^g 6513,897 ^h 6496,317 ⁱ 6502,520 ^k	0,20

Tablo 4.13. (Devamı)

Sıra	Seviyeler	Bu çalışma				Diğer çalışmalar	Fark (%)
		VV	VV+Breit +QED	CV	CV+Breit +QED		
12	3s3d 1D_2	6705,743	6669,921	6710,708	6674,564	6551,650 ^a 6638,292 ^b 6656,792 ^c 6638,000 ^d 6638,017 ^e 6655,535 ^h 6637,044 ⁱ 6643,040 ^k	0,26
13	3p3d $^3F^o_2$	7042,748	6983,289	7209,842	7148,790	7032,922 ^a 7040,920 ^b 7073,000 ^c 7041,379 ^e 7070,013 ^h 7037,761 ⁱ 7040,630 ^k	1,07
14	3p3d $^3D^o_1$	7304,728	7245,389	7483,528	7422,524	7268,523 ^a 7319,021 ^b 7355,779 ^c 7318,593 ^e 7352,751 ^h 7320,543 ⁱ 7323,290 ^k	0,90
15	3p3d $^3P^o_2$	7883,989	7824,220	8045,783	7984,399	7832,965 ^a 7864,742 ^b 7891,697 ^c 7864,271 ^e 7893,043 ^h 7861,504 ⁱ 7865,440 ^k	1,17
16	3p3d $^3F^o_3$	7912,905	7853,101	8075,786	8014,381	7860,956 ^a 7888,737 ^b 7923,446 ^c 7888,490 ^e 7917,360 ^h 7885,789 ⁱ 7891,630 ^k	1,14
17	3p ² 3P_2	8549,057	8495,777	8646,701	8594,622	8607,162 ^a 8587,871 ^b 8608,270 ^c 8578,755 ^e 8606,906 ^h 8585,990 ⁱ 8585,230 ^k	0,15
18	3p ² $^1S^o_0$	8700,540	8647,090	8799,464	8747,235	8743,883 ^a 8742,077 ^b 8760,103 ^c 8732,730 ^e 8762,656 ^h 8741,312 ⁱ 8740,330 ^k	0,14
19	3p3d $^3D^o_2$	10154,692	10093,045	10210,123	10148,980	10089,709 ^a 10123,675 ^b 10148,690 ^c 10119,844 ^e 10150,131 ^h 10121,335 ⁱ 10123,760 ^k	0,0028

Tablo 4.13. (Devamı)

Sıra	Seviyeler	Bu çalışma				Diğer çalışmalar	Fark (%)
		VV	VV+Breit+QED	CV	CV+Breit+QED		
20	3p3d $^3P^o_0$	10229,559	10167,923	10286,156	10225,013	10155,694 ^a 10204,774 ^b 10225,388 ^c 10200,729 ^g 10231,819 ^h 10202,947 ⁱ 10205,770 ^k	0,0036
21	3p3d $^3P^o_1$	10239,994	10178,356	10294,364	10233,224	10168,492 ^a 10798,476 ^b 10235,181 ^c 10201,785 ^g 10236,494 ^h 10207,578 ⁱ 10209,290 ^k	0,019
22	3p3d $^1F^o_3$	10245,123	10183,480	10301,017	10239,855	10205,024 ^g 10233,454 ^h 10204,451 ⁱ 10208,320 ^k	-
23	3p3d $^3F^o_4$	10757,733	10695,755	10807,263	10745,835	10675,321 ^a 10703,303 ^b 10725,535 ^c 10699,423 ^g 10724,737 ^h 10696,600 ⁱ 10702,170 ^k	0,18
24	3p3d $^1D^o_2$	10854,205	10792,237	10898,592	10837,167	10794,267 ^g 10821,646 ^h 10793,444 ⁱ 10797,610 ^k	-
25	3p3d $^3D^o_3$	11022,816	10960,850	11060,742	10999,262	10913,152 ^a 10948,353 ^b 10978,314 ^c 10943,842 ^g 10974,455 ^h 10945,956 ⁱ 10952,020 ^k	0,19
26	3p3d $^1P^o_1$	11120,814	11058,926	11159,853	11098,454	11000,873 ^a 11050,425 ^b 11076,381 ^c 11045,655 ^g 11077,202 ^h 11048,484 ⁱ 11052,190 ^k	0,19
27	3d ² 3F_2	11836,314	11766,049	12370,163	12299,524	11655,640 ^a 11764,712 ^b 11801,741 ^c 11766,013 ^g 11800,382 ^h 11763,357 ⁱ 11766,400 ^k	4,21
28	3d ² $^3P^o_0$	12038,448	11968,204	12571,900	12501,277	11830,419 ^a 11979,693 ^b 12012,701 ^c 11980,328 ^g 12017,508 ^h 11980,132 ⁱ 11973,580 ^k	4,06

Tablo 4.13. (Devamı)

Sıra	Seviyeler		Bu çalışma				Diğer çalışmalar	Fark (%)
			VV	VV+Breit +QED	CV	CV+Breit +QED		
29	3d ²	³ F ₃	12506,303	12435,693	13040,385	12969,404	12301,781 ^a 12403,203 ^b 12432,187 ^c 12404,222 ^g 12435,070 ^h 12398,736 ⁱ 12405,010 ^k	4,32
30	3d ²	³ P ₂	12597,107	12526,517	13130,875	13059,911	12383,832 ^a 12501,277 ^b 12531,285 ^c 12502,152 ^g 12534,503 ^h 12498,004 ⁱ 12500,460 ^k	4,21
31*	3d ²	³ P ₁	12635,158	12564,560	13169,031	13098,060	12413,004 ^a 12545,045 ^b 12567,072 ^c 12519,659 ^g 12552,214 ^h 12515,749 ⁱ 12542,990 ^k	4,22
32*	3d ²	¹ G ₄	12635,846	12565,231	13169,928	13098,941	12411,383 ^a 12518,342 ^b 12560,665 ^c 12545,582 ^g 12578,266 ^h 12541,735 ⁱ 12525,610 ^k	4,28
33	3d ²	³ F ₄	13253,116	13182,179	13787,192	13715,884	13012,810 ^a 13114,392 ^b 13146,237 ^c 13115,090 ^g 13143,753 ^h 13108,012 ⁱ 13117,580 ^k	4,33
34	3d ²	¹ D ₂	13325,649	13254,742	13858,972	13787,690	13077,950 ^a 13198,696 ^b 13224,202 ^c 13199,058 ^g 13228,822 ^h 13192,949 ⁱ 13195,290 ^k	4,26
35	3d ²	¹ S ₀	13555,058	13484,226	14086,849	14015,637	13265,374 ^a 13431,171 ^b 13452,476 ^c 13430,789 ^g 13464,230 ^h 13427,797 ⁱ 13421,370 ^k	4,18
36	3s4s	³ S ₁	25873,159	25851,586	25878,642	25857,151	25830,363 ^h 25819,664 ⁱ	-
37	3s4s	¹ S ₀	25985,820	25964,089	25992,846	25971,254	25942,954 ^h 25932,550 ⁱ	-
38	3s4p	³ P ₀	26472,749	26441,316	27005,345	26973,553	26428,058 ^h 26412,388 ⁱ	-
39	3s4p	³ P ₀ ¹	26488,482	26457,145	27021,075	26989,378	26437,452 ^h 26421,595 ⁱ	-
40	3p4s	³ P ₀ ¹	27102,787	27057,759	27636,480	27591,079	27173,899 ^h 27151,611 ⁱ	-

Tablo 4.13. (Devamı)

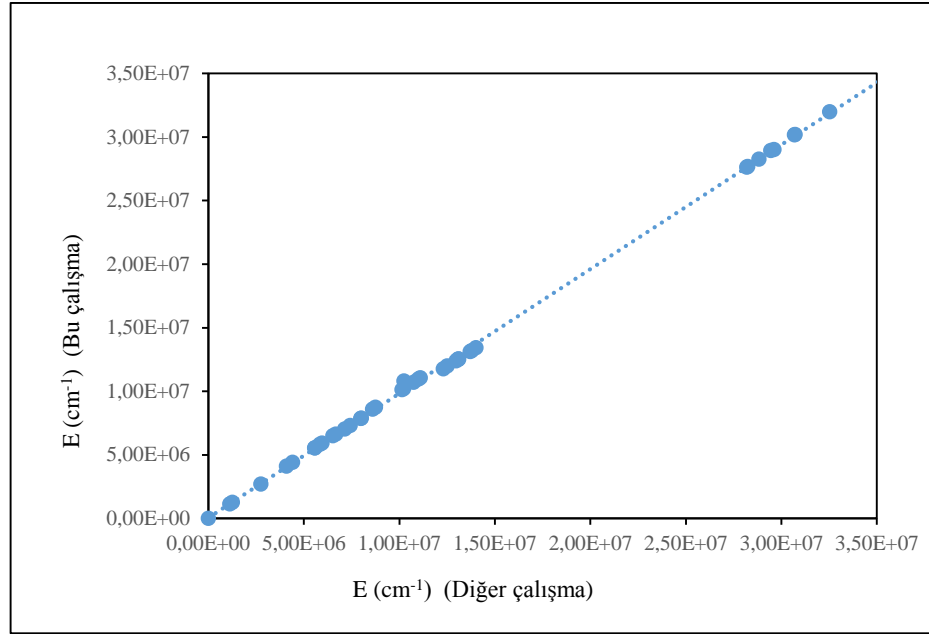
Sıra	Seviyeler	Bu çalışma				Diğer çalışmalar	Fark (%)
		VV	VV+Breit+QED	CV	CV+Breit+QED		
41	3p4s $^3P^o_0$	27114,940	27069,582	27648,708	27602,977	27187,561 ^h 27164,626 ⁱ	-
42	3p4p 3D_1	27652,809	27597,622	28186,735	28131,172	27680,699 ^h 27652,452 ⁱ	-
43	3s4p $^3P^o_2$	27680,365	27648,591	28213,730	28181,576	27609,237 ^a 27619,457 ^b 27632,906 ^c 27634,960 ^h 27620,091 ⁱ	1,98
44	3s4p $^1P^o_1$	27731,873	27699,583	28265,080	28232,409	27655,303 ^a 27669,012 ^b 27685,514 ^c 27686,910 ^h 27671,283 ⁱ	1,97
45	3p4p 3P_0	27944,199	27887,804	28475,824	28418,984	27847,291 ^h 27819,571 ⁱ	-
46	3s4d 3D_2	28326,819	28291,400	28860,581	28824,793	28265,719 ^h 28247,251 ⁱ	-
47	3s4d 3D_1	28332,481	28296,713	28866,261	28830,123	28221,172 ^a 28258,189 ^b 28275,011 ^c 28278,339 ^h 28259,497 ⁱ	1,96
48	3s4d 1D_2	28604,746	28567,653	29138,634	29101,164	28543,135 ^h 28524,699 ⁱ	-
49	3s4d 3D_3	28613,312	28577,785	29147,238	29111,339	28547,678 ^h 28529,506 ⁱ	-
50	3p4p 3P_1	28975,053	28918,877	29508,114	29451,550	28940,576 ^a 28932,956 ^b 28961,942 ^c 28964,208 ^h 28936,883 ⁱ	1,69
51	3s4f $^3F^o_2$	28985,462	28949,882	29518,993	29483,044	28910,733 ^h 28893,109 ⁱ	-
52	3p4p 1D_2	29007,096	28959,736	29540,600	29492,808	30764,734 ^h 30758,759 ⁱ	-
53	3s4f $^3F^o_3$	29014,374	28971,514	29547,822	29504,650	28935,402 ^h 28917,723 ⁱ	-
54	3s4f $^3F^o_4$	29109,621	29074,024	29643,164	29607,199	28987,756 ^a 29021,055 ^b 29037,236 ^c 29037,887 ^h 29020,185 ⁱ	1,96
55	3s4f $^1F^o_3$	29167,855	29132,260	29701,329	29665,365	29086,971 ^h 29068,798 ⁱ	-
56	3p4s $^3P^o_2$	30199,567	30151,175	30733,289	30684,524	30165,147 ^a 30166,779 ^b 30185,574 ^c 30187,461 ^h 30166,621 ⁱ	1,65
57	3p4s $^1P^o_1$	30242,341	30193,976	30775,919	30727,180	30198,927 ^a 30203,000 ^b 30224,279 ^c 30224,870 ^h 30204,064 ⁱ	1,66
58	3p4p 3S_1	30808,336	30750,099	31340,996	31282,397	30753,156 ^h 30727,214 ⁱ	-
59	3p4p 3D_2	30822,759	30764,548	31355,638	31297,067	28890,424 ^h 28963,242 ⁱ	-

Tablo 4.13. (Devamı)

Sıra	Seviyeler	Bu çalışma				Diğer çalışmalar	Fark (%)
		VV	VV+Breit+QED	CV	CV+Breit+QED		
60	3p4p ¹ P ₁	31935,645	31877,027	32469,538	32410,547	31921,277 ^h 31895,719 ⁱ	-
61	3p4p ³ D ₃	31935,950	31877,342	32470,022	32411,043	31904,729 ^h 31879,259 ⁱ	-
62	3p4p ³ P ₂	32052,972	31994,733	32586,098	32527,476	31975,334 ^a 31979,937 ^b 32007,034 ^c 32007,048 ^h 31982,061 ⁱ	1,62
63	3p4p ¹ S ₀	32166,949	32108,778	32699,363	32640,801	32108,401 ^h 32083,414 ⁱ	-
64	3s5s ³ S ₁	37378,607	37349,914	37912,583	37883,518	37320,035 ^h 37305,011 ⁱ	-
65	3s5s ¹ S ₀	37422,940	37394,240	37956,645	37927,573	37362,283 ^h 37347,677 ⁱ	-
66	3s5p ³ P ₀	37700,754	37667,111	38234,507	38200,496	37613,966 ^h 37596,715 ⁱ	-
67	3s5p ³ P ₀ ₁	37705,275	37671,624	38239,020	38205,002	37618,169 ^h 37600,830 ⁱ	-
68	3s5p ³ P ₀ ₂	38284,015	38250,459	38817,785	38783,854	38219,134 ^h 38202,136 ⁱ	-
69	3s5p ¹ P ₀ ₁	38297,667	38264,096	38831,383	38797,436	38222,635 ^h 38205,461 ⁱ	-
70	4s ² ¹ S ₀	52094,604	52051,108	52628,234	52584,369	-	-
71	4s4p ³ P ₀	52560,631	52507,107	53094,784	53040,889	-	-
72	4s4p ³ P ₀ ₁	52634,641	52581,114	53168,793	53114,895	-	-
73	4s4p ³ P ₀ ₂	53731,408	53677,697	54265,564	54211,481	-	-
74	4s4p ¹ P ₀ ₁	53913,850	53860,135	54448,001	54393,915	-	-
75	4s4d ³ D ₁	54410,285	54352,952	54944,440	54886,735	-	-
76	4s4d ³ D ₂	54445,139	54387,802	54979,293	54921,585	-	-
77	4s4d ³ D ₃	54711,640	54654,159	55245,795	55187,942	-	-
78	4s4d ¹ D ₂	54786,953	54729,475	55321,106	55263,257	-	-

^{a,b,c}Safronova ve ark., 2009a; ^dClementson ve ark., 2011; ^eRalchenko ve ark., 2008; ^fClementson ve Beiersdorfer, 2010; ^gSantana, 2016; ^{h,i}Aggarwall ve Keenan, 2016; ^kHao ve Kang, 2015

Şekil 4.4.'te enerji seviyelerinin RMBPT kodu (Safronova ve ark., 2009a) sonuçlarıyla karşılaştırılması gösterilmektedir. Şekilden sonuçların birbiriyle uyumu görülmektedir.



Şekil 4.4. W^{62+} iyonunun enerji seviyelerinin RMBPT kodu sonuçları (Safronova ve ark., 2009a) ile karşılaştırılması

W^{62+} iyonunun CV+Breit+QED çalışmasından elde edilen seviyeler arasındaki elektrik dipol geçişleri için 60493 geçiş elde edildi. Geçişler çok fazla olduğu için, Tablo 4.14.'te yalnızca geçiş olasılığı $10^5 s^{-1}$ 'den büyük olan geçişlere ait parametreler (dalgaboyu, ağırlıklı salınıcı şiddeti ve geçiş olasılığı) verilmektedir. Diğer geçişlere ait daha geniş veriler Özdemir ve arkadaşları (2013) tarafından yayımlanan çalışmada verilmektedir. Tablo 4.14.'te Safronova ve arkadaşlarının (2009a) RMBPT, HULLAC ve COWAN kodu sonuçları sırasıyla b, c ve d şeklinde gösterilmektedir.

Elde edilen dalgaboyları ve geçiş olasılıkları karşılaştırma değerleriyle genel olarak iyi uyum içerisinde. Sadece a (Safronova ve Safronova, 2010) ve m (Hao ve Kang, 2015) sonuçlarıyla karşılaştırıldığında $3p3d$ seviyesi ile $3p^2$ ve $3d^2$ seviyeleri arası birkaç geçişte fark vardır. Örneğin $3p^2 \ ^3P_1 - 3p3d \ ^3P^o_2$ seviyesinin dalgaboyu, b, c ve d (Safronova ve ark., 2009a) ile gösterilen karşılaştırma değerleriyle çok iyi uyum sağlarken, a ve m (Safronova ve Safronova, 2010; Hao ve Kang, 2015) sonuçlarının iki katı kadardır. Bu geçiş gibi birkaç seviyede daha a ve m (Safronova ve Safronova, 2010; Hao ve Kang, 2015) sonuçları birbirleriyle uyumlu ancak diğer karşılaştırma değerleri ve bu çalışmada elde edilen değerlerden farklıdır. Aynı durum geçiş olasılıklarında da mevcuttur. Ağırlıklı salınıcı şiddetleri için ise çoğu değerler

arasındaki uyum oldukça iyi iken, $3s3d\ ^3D_1 - 3p3d\ ^3P^o_2$ seviyeleri arası ve $3p^2\ ^1D_2 - 3p3d\ ^3D^o_3$ seviyeleri arası gibi birkaç geçişte 10'un katı kadar fark ortaya çıkmaktadır.

Tablo 4.14. W^{62+} iyonunun elektrik dipol (E1) geçişleri için dalgaboyları, λ (Å), ağırlıklı salınıcı şiddetleri, gf ve geçiş olasılıkları, A_r (s^{-1})

Geçişler				λ (Å)		gf		A_r (s^{-1})	
Alt Seviye	Üst Seviye			Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar
$3s^2\ ^1S_0$	$3s3p$	$3p^o_1$	$3p^o_1$	79,497	79,86 ^b 78,89 ^c 78,73 ^d 79,90 ^e 79,91 ^f 79,91 ^g 79,94 ^h 79,07 ^k 79,909 ^m	5,37(-02)	5,33(-02) ^k	1,89(10)	1,80(10) ^b 2,67(10) ^c 2,14(10) ^d 1,82(10) ^e 1,81(10) ^h 1,81(10) ⁱ 1,89(10) ^k 1,81(10) ^m
$3s3p$	$3p^o_1$	$3p^2$	$3p^o_1$	67,034	69,665 ^a 68,89 ^k 69,707 ^m	1,01(-01)	9,33(-02) ^a 9,54(-02) ^k	1,50(11)	1,28(11) ^a 1,34(11) ^k 1,28(11) ^m
$3s^2\ ^1S_0$	$3s3p$	$3p^o_1$	$3p^o_1$	22,714	22,712 ^a 22,71 ^b 22,65 ^c 22,73 ^d 22,80 ^g 22,74 ^h 22,65 ^k 22,713 ^m	5,98(-01)	5,97(-01) ^a 6,08(-01) ^k	2,58(12)	2,57(12) ^a 2,57(12) ^b 3,28(12) ^c 2,59(12) ^d 2,55(12) ^h 2,57(12) ⁱ 2,63(12) ^k 2,57(12) ^m
$3p^2\ ^3P_0$	$3s3p$	$3p^o_1$	$3p^o_1$	60,502	-	9,12(-04)	-	5,54(08)	-
$3s3p$	$3p^o_1$	$3p^2$	$3p^o_1$	23,214	23,347 ^a 23,31 ^k 23,267 ^m	1,92(-01)	1,93(-01) ^a 1,93(-01) ^k	4,76(11)	4,72(11) ^a 4,75(11) ^k 4,78(11) ^m
$3s3p$	$3p^o_2$	$3p^2$	$3p^o_1$	68,190	69,87 ^b 69,07 ^c 69,17 ^d 69,137 ^m	1,24(-01)	-	3,57(10)	3,17(10) ^b 3,61(10) ^c 3,57(10) ^d 3,26(10) ^m
$3s3p$	$3p^o_1$	$3p^2$	$3p^o_1$	85,987	-	4,99(-02)	-	9,01(09)	-
$3s3p$	$3p^o_0$	$3p^2$	$3p^o_1$	22,436	22,599 ^a 22,60 ^b 22,54 ^c 22,52 ^d 22,54 ^k 22,605 ^m	2,80(-01)	2,76(-01) ^a 2,81(-01) ^k	1,24(12)	1,20(12) ^a 1,20(12) ^b 1,29(12) ^c 1,27(12) ^d 1,23(12) ^k 1,21(12) ^m
$3s3p$	$3p^o_1$	$3p^2$	$3p^o_1$	23,122	23,260 ^a 23,26 ^b 23,23 ^c 23,15 ^d 23,21 ^k 23,272 ^m	1,56(-01)	1,58(-01) ^a 1,60(-01) ^k	6,53(11)	6,50(11) ^a 6,50(11) ^b 5,90(11) ^c 6,39(11) ^d 6,64(11) ^k 6,39(11) ^m
$3s3p$	$3p^o_2$	$3p^2$	$3p^o_1$	67,394	-	1,12(-01)	-	5,50(10)	-
$3s3p$	$3p^o_1$	$3p^2$	$3p^o_1$	84,724	-	1,43(-02)	-	4,45(09)	-
$3s3p$	$3p^o_0$	$3s3d$	$3p^o_1$	21,246	21,275 ^a 21,28 ^b 21,25 ^c 21,63 ^d 21,24 ^k 21,247 ^m	2,25(-01)	2,23(-01) ^a 2,26(-01) ^k	1,11(12)	1,09(12) ^a 1,09(12) ^b 1,16(12) ^c 1,05(12) ^d 1,11(12) ^k 1,10(12) ^m

Tablo 4.14. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)		gf		A_r (s ⁻¹)	
Alt Seviye	Üst Seviye			Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar
3s3p	³ P ₀₁	3s3d	³ D ₁	21,860	21,860 ^a 21,86 ^b 21,86 ^c 22,21 ^d 21,84 ^k 21,836 ^m	1,13(-01)	1,08(-01) ^a 1,10(-01) ^k	5,29(11)	5,03(11) ^a 5,03(11) ^b 4,62(11) ^c 5,30(11) ^d 5,13(11) ^k 4,49(11) ^m
3s3p	³ P ₀₂	3s3d	³ D ₁	57,688	-	3,45(-03)	-	2,31(09)	-
3s3p	¹ P ₀₁	3s3d	³ D ₁	69,932	-	1,17(-02)	-	5,34(09)	-
3s3p	³ P ₀₁	3s3d	³ D ₂	21,337	21,375 ^a 21,38 ^b 21,34 ^c 21,69 ^d 21,34 ^k 21,323 ^m	9,49(-01)	9,36(-01) ^a 9,57(-01) ^k	2,78(12)	2,73(12) ^a 2,73(12) ^b 2,81(12) ^c 2,82(12) ^d 2,80(12) ^k 2,79(12) ^m
3s3p	³ P ₀₂	3s3d	³ D ₂	54,185	-	1,90(-03)	-	8,67(08)	-
3s3p	¹ P ₀₁	3s3d	³ D ₂	64,850	-	9,57(-03)	-	3,04(09)	-
3s3p	³ P ₀₂	3s3d	³ D ₃	41,163	41,775 ^a 41,78 ^b 41,58 ^c 42,97 ^d 41,637 ^m	4,62(-01)	4,55(-01) ^a	2,60(11)	2,48(11) ^a 2,48(11) ^b 2,52(11) ^c 2,33(11) ^d 2,51(11) ^m
3s3p	³ P ₀₁	3s3d	¹ D ₂	18,462	18,566 ^a 18,55 ^k 18,520 ^m	5,30(-02)	5,55(-02) ^a 5,53(-02) ^k	2,08(11)	2,15(11) ^a 2,14(11) ^k 2,25(11) ^m
3s3p	³ P ₀₂	3s3d	¹ D ₂	38,827	39,46 ^b 39,26 ^c 40,73 ^d 39,237 ^m	8,83(-02)	-	7,82(10)	7,32(10) ^b 7,89(10) ^c 6,73(10) ^d 7,39(10) ^m
3s3p	¹ P ₀₁	3s3d	¹ D ₂	44,013	44,735 ^a 44,511 ^m	3,09(-01)	3,03(-01) ^a	2,13(11)	2,02(11) ^a 2,09(11) ^m
3p ²	¹ D ₂	3p3d	³ F ₀₂	63,159	-	9,63(-02)	-	3,22(10)	-
3p ²	³ P ₁	3p3d	³ F ₀₂	63,858	-	3,65(-03)	-	1,20(09)	-
3s3d	³ D ₁	3p3d	³ F ₀₂	75,969	-	1,09(-01)	-	2,53(10)	-
3s3d	³ D ₂	3p3d	³ F ₀₂	83,039	-	5,03(-02)	-	9,75(09)	-
3s3d	³ D ₃	3p3d	³ F ₀₂	161,177	-	2,68(-06)	-	1,38(05)	-
3s3d	¹ D ₂	3p3d	³ F ₀₂	210,870	-	1,27(-04)	-	3,82(06)	-
3s ²	¹ S ₀	3p3d	³ D ₀₁	13,473	13,60 ^k	5,72(-06)	2,98(-07) ^k	7,02(07)	3,58(06) ^k
3p ²	³ P ₀	3p3d	³ D ₀₁	21,400	-	4,63(-01)	-	2,25(12)	-
3p ²	¹ D ₂	3p3d	³ D ₀₁	53,849	-	6,77(-03)	-	5,20(09)	-
3p ²	³ P ₁	3p3d	³ D ₀₁	54,357	21,471 ^a 56,57 ^b 56,08 ^c 59,68 ^d 56,279 ^m	2,43(-02)	2,74(-01) ^a	1,83(10)	1,32(12) ^a 1,59(10) ^b 1,57(10) ^c 1,37(10) ^d 1,59(10) ^m
3s3d	³ D ₁	3p3d	³ D ₀₁	62,891	22,819 ^a	2,75(-02)	3,48(-01) ^a	1,55(10)	1,49(12) ^a
3s3d	³ D ₂	3p3d	³ D ₀₁	67,660	23,372 ^a 23,429 ^m	1,25(-01)	1,29(-01) ^a	6,10(10)	5,22(11) ^a 5,25(11) ^m
3s3d	¹ D ₂	3p3d	³ D ₀₁	133,697	-	2,26(-03)	-	2,82(08)	-
3p ²	¹ D ₂	3p3d	³ P ₀₂	41,341	21,794 ^a 21,833 ^m	4,96(-02)	5,15(-01) ^a	3,87(10)	1,45(12) ^a 1,30(12) ^m
3p ²	³ P ₁	3p3d	³ P ₀₂	41,639	21,871 ^a 43,23 ^b 43,12 ^c 44,62 ^d 21,846 ^m	3,03(-01)	2,59(-01) ^a	2,33(11)	7,20(11) ^a 2,08(11) ^b 2,22(11) ^c 1,94(11) ^d 7,37(11) ^m
3s3d	³ D ₁	3p3d	³ P ₀₂	46,470	23,272 ^a 23,283 ^m	7,17(-06)	3,57(-01) ^a	4,44(06)	8,76(11) ^a 8,81(11) ^m

Tablo 4.14. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)		gf		A_r (s ⁻¹)	
Alt Seviye	Üst Seviye			Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar
3s3d	³ D ₂	3p3d	³ P ₀₂	49,023	23,848 ^a 23945 ^m	1,28(-02)	1,10(-01) ^a	7,12(09)	2,57(11) ^a 2,46(11) ^m
3s3d	³ D ₃	3p3d	³ P ₀₂	68,679	73,16 ^b 72,62 ^c 72,49 ^d 23,25 ^{&} 23,23 ⁺ 23,20 [*] 73,350 ^m	1,96(-01)	-	5,56(10)	4,20(10) ^b 4,33(10) ^c 4,70(10) ^d 4,31(11) ^{&} 4,39(11) ⁺ 4,33(11) [*] 4,22(10) ^m
3s3d	¹ D ₂	3p3d	³ P ₀₂	76,346	-	3,64(-02)	-	8,35(09)	-
3p ²	¹ D ₂	3p3d	³ F ₀₃	40,835	42,491 ^a 21,41 ^b 21,36 ^c 21,75 ^d 42,509 ^m	2,83(-01)	2,76(-01) ^a	1,62(11)	1,45(11) ^a 3,58(11) ^b 3,79(11) ^c 2,94(11) ^d 1,43(11) ^m
3s3d	³ D ₂	3p3d	³ F ₀₃	48,313	-	4,44(-03)	-	1,82(09)	-
3s3d	³ D ₃	3p3d	³ F ₀₃	67,294	71,90 ^b 70,98 ^c 71,13 ^d 26,97 ^{&} 26,85 ⁺ 26,91 [*] 71,969 ^m	1,59(-01)	-	3,35(10)	2,52(10) ^b 2,62(10) ^c 2,82(10) ^d 3,16(10) ^{&} 3,20(10) ⁺ 2,72(10) [*] 2,53(10) ^m
3s3d	¹ D ₂	3p3d	³ F ₀₃	74,637	-	2,29(-01)	-	3,92(10)	-
3s3p	³ P ₀₁	3p ²	³ P ₂	13,630	13,62 ^k	2,30(-05)	5,78(-05) ^k	1,66(08)	4,15(08) ^k
3s3p	³ P ₀₂	3p ²	³ P ₂	22,244	22,303 ^a 22,298 ^m	6,77(-01)	6,80(-01) ^a	1,83(12)	1,82(12) ^a 1,82(12) ^m
3s3p	¹ P ₀₁	3p ²	³ P ₂	23,854	23,895 ^a 23,905 ^m	7,93(-01)	7,89(-01) ^a	1,86(12)	1,84(12) ^a 1,85(12) ^m
3p3d	³ F ₀₂	3p ²	³ P ₂	69,164	-	1,88(-04)	-	5,25(07)	-
3p3d	³ D ₀₁	3p ²	³ P ₂	85,317	-	1,15(-03)	-	2,11(08)	-
3p3d	³ P ₀₂	3p ²	³ P ₂	163,875	-	1,59(-04)	-	7,93(06)	-
3p3d	³ F ₀₃	3p ²	³ P ₂	172,343	-	1,27(-04)	-	5,70(06)	-
3s3p	³ P ₀₁	3p ²	¹ S ₀	13,352	13,34 ^k	3,42(-04)	3,65(-04) ^k	1,28(10)	1,37(10) ^k
3s3p	¹ P ₀₁	3p ²	¹ S ₀	23,016	23,046 ^a 23,050 ^m	2,85(-01)	2,85(-01) ^a	3,59(12)	3,57(12) ^a 3,58(12) ^m
3p3d	³ D ₀₁	3p ²	¹ S ₀	75,488	-	3,68(-06)	-	4,32(06)	-
3p ²	¹ D ₂	3p3d	³ D ₀₂	21,817	21,79 ^b 21,78 ^c 22,14 ^d	5,31(-01)	-	1,49(12)	1,45(12) ^b 1,55(12) ^c 1,48(12) ^d
3p ²	³ P ₁	3p3d	³ D ₀₂	21,900	21,87 ^b 21,85 ^c 22,23 ^d	2,78(-01)	-	7,75(11)	7,20(11) ^b 7,85(11) ^c 7,52(11) ^d
3s3d	³ D ₁	3p3d	³ D ₀₂	23,167	-	3,50(-01)	-	8,71(11)	-
3s3d	³ D ₂	3p3d	³ D ₀₂	23,784	-	1,07(-01)	-	2,53(11)	-
3s3d	³ D ₃	3p3d	³ D ₀₂	27,620	23,253 ^a 27,58 ^b 27,52 ^c 27,50 ^d 23,274 ^m	1,66(-03)	1,75(-01) ^a	2,92(09)	4,31(11) ^a 3,10(09) ^b 3,07(09) ^c 2,73(09) ^d 4,37(11) ^m
3s3d	¹ D ₂	3p3d	³ D ₀₂	28,782	24,037 ^a 24,096 ^m	4,78(-04)	5,85(-01) ^a	7,71(08)	1,35(12) ^a 1,35(12) ^m
3p ²	³ P ₂	3p3d	³ D ₀₂	64,335	45,236 ^a 45,178 ^m	2,24(-02)	1,89(-01) ^a	7,22(09)	1,23(11) ^a 1,22(11) ^m
3p ²	³ P ₁	3p3d	³ P ₀₀	21,542	21,490 ^a 21,462 ^m	1,09(-01)	1,02(-01) ^a	1,58(12)	1,47(12) ^a 1,50(12) ^m
3s3d	³ D ₁	3p3d	³ P ₀₀	22,766	22,841 ^a 22,847 ^m	1,53(-01)	1,55(-01) ^a	1,97(12)	1,98(12) ^a 2,01(12) ^m

Tablo 4.14. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)		gf		A_r (s ⁻¹)	
Alt Seviye	Üst Seviye			Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar
3s ² 1S ₀	3p3d	3p ⁰ ₁	3p ⁰ ₁	97,72	97,69 ^k	8,24(-06)	8,72(-06) ^k	1,92(08)	2,03(08) ^k
3p ² 3P ₀	3p3d	3p ⁰ ₁	3p ⁰ ₁	13,363	21,592 ^a 21,558 ^m	1,02(-04)	4,36(-01) ^a	1,28(09)	2,08(12) ^a 2,09(12) ^m
3p ² 1D ₂	3p3d	3p ⁰ ₁	3p ⁰ ₁	21,424	-	1,14(-02)	-	5,52(10)	-
3p ² 3P ₁	3p3d	3p ⁰ ₁	3p ⁰ ₁	21,504	21,47 ^b 21,45 ^c 21,85 ^d 21,441 ^m	2,84(-01)	-	1,37(12)	1,32(12) ^b 1,34(12) ^c 1,26(12) ^d 1,31(12) ^m 1,49(12) ^m
3s3d 3D ₁	3p3d	3p ⁰ ₁	3p ⁰ ₁	22,723	22,823 ^m	3,52(-01)	-	1,52(12)	-
3s3d 3D ₂	3p3d	3p ⁰ ₁	3p ⁰ ₁	23,317	-	1,32(-01)	-	5,40(11)	-
3s3d 1D ₂	3p3d	3p ⁰ ₁	3p ⁰ ₁	28,101	-	3,29(-03)	-	9,27(09)	-
3p ² 3P ₂	3p3d	3p ⁰ ₁	3p ⁰ ₁	61,028	-	2,22(-02)	-	1,33(10)	-
3p ² 1S ₀	3p3d	3p ⁰ ₁	3p ⁰ ₁	67,295	-	8,42(-03)	-	4,14(09)	-
3p ² 1D ₂	3p3d	1F ^o ₃	1F ^o ₃	21,393	-	1,99(-01)	-	4,15(11)	-
3s3d 3D ₂	3p3d	1F ^o ₃	1F ^o ₃	23,281	-	1,50(00)	-	2,64(12)	-
3s3d 3D ₃	3p3d	1F ^o ₃	1F ^o ₃	26,943	22,469 ^a 22,467 ^m	2,53(-02)	5,25(-01) ^a	3,32(10)	9,90(11) ^a 9,97(11) ^m
3s3d 1D ₂	3p3d	1F ^o ₃	1F ^o ₃	28,048	23,202 ^a 23,232 ^m	5,62(-02)	3,68(-01) ^a	6,81(10)	6,50(11) ^a 6,72(11) ^m
3p ² 3P ₂	3p3d	1F ^o ₃	1F ^o ₃	60,782	42,364 ^a 42,232 ^m	5,13(-03)	8,30(-01) ^a	1,32(09)	4,41(11) ^a 4,49(11) ^m
3s3d 3D ₃	3p3d	3F ^o ₄	3F ^o ₄	23,711	23,779 ^a 23,78 ^b 23,75 ^c 23,69 ^d 23,802 ^m	1,22(00)	1,24(00) ^a	1,62(12)	1,62(12) ^a 1,62(12) ^b 1,65(12) ^c 1,65(12) ^d 1,63(12) ^m
3p ² 1D ₂	3p3d	1D ^o ₂	1D ^o ₂	18,969	-	4,69(-04)	-	1,74(09)	-
3p ² 3P ₁	3p3d	1D ^o ₂	1D ^o ₂	19,032	43,228 ^a 43,122 ^m	1,09(-03)	2,92(-01) ^a	4,02(09)	2,08(11) ^a 2,10(11) ^m
3s3d 3D ₁	3p3d	1D ^o ₂	1D ^o ₂	19,981	-	2,95(-03)	-	9,87(09)	-
3s3d 3D ₂	3p3d	1D ^o ₂	1D ^o ₂	20,439	-	2,78(-02)	-	8,90(10)	-
3s3d 3D ₃	3p3d	1D ^o ₂	1D ^o ₂	23,208	-	1,76(-01)	-	4,36(11)	-
3s3d 1D ₂	3p3d	1D ^o ₂	1D ^o ₂	24,023	-	5,86(-01)	-	1,36(12)	-
3p ² 3P ₂	3p3d	1D ^o ₂	1D ^o ₂	44,592	-	1,92(-01)	-	1,29(11)	-
3p ² 1D ₂	3p3d	3D ^o ₃	3D ^o ₃	18,403	21,412 ^a 21,432 ^m	2,74(-05)	1,72(-01) ^a	7,72(07)	3,58(11) ^a 3,68(11) ^m
3s3d 3D ₂	3p3d	3D ^o ₃	3D ^o ₃	19,784	23,391 ^a 23,465 ^m	2,54(-04)	1,49(00) ^a	6,20(08)	2,59(12) ^a 2,66(12) ^m
3s3d 3D ₃	3p3d	3D ^o ₃	3D ^o ₃	22,367	-	5,19(-01)	-	9,89(11)	-
3s3d 1D ₂	3p3d	3D ^o ₃	3D ^o ₃	23,123	-	3,66(-01)	-	6,53(11)	-
3p ² 3P ₂	3p3d	3D ^o ₃	3D ^o ₃	41,586	-	8,56(-01)	-	4,72(11)	-
3s ² 1S ₀	3p3d	1P ^o ₁	1P ^o ₁	9,010	9,028 ^k	5,10(-04)	4,59(-04) ^a	1,40(10)	1,25(10) ^a
3p ² 3P ₀	3p3d	1P ^o ₁	1P ^o ₁	11,978	-	2,70(-04)	-	4,19(09)	-
3p ² 1D ₂	3p3d	1P ^o ₁	1P ^o ₁	18,074	-	4,83(-03)	-	3,29(10)	-
3p ² 3P ₁	3p3d	1P ^o ₁	1P ^o ₁	18,130	-	6,69(-04)	-	4,53(09)	-
3s3d 3D ₁	3p3d	1P ^o ₁	1P ^o ₁	18,990	-	7,18(-04)	-	4,43(09)	-
3s3d 3D ₂	3p3d	1P ^o ₁	1P ^o ₁	19,403	-	8,80(-03)	-	5,20(10)	-
3s3d 1D ₂	3p3d	1P ^o ₁	1P ^o ₁	22,605	22,665 ^a 22,680 ^m	4,34(-01)	4,29(-01) ^a	1,89(12)	1,85(12) ^a 1,88(12) ^m
3p ² 3P ₂	3p3d	1P ^o ₁	1P ^o ₁	39,939	-	3,56(-02)	-	4,97(10)	-
3p ² 1S ₀	3p3d	1P ^o ₁	1P ^o ₁	42,531	43,321 ^a 43,147 ^m	2,05(-01)	1,98(-01) ^a	2,53(11)	2,35(11) ^a 2,38(11) ^m
3s3p 3P ^o ₁	3d ²	3F ₂	3F ₂	9,057	9,491 ^k	3,39(-06)	1,12(-05) ^k	5,52(07)	1,66(08) ^k
3s3p 3P ^o ₂	3d ²	3F ₂	3F ₂	12,194	-	2,35(-05)	-	2,11(08)	-
3s3p 1P ^o ₁	3d ²	3F ₂	3F ₂	12,663	-	2,04(-04)	-	1,70(09)	-
3p3d 3F ^o ₂	3d ²	3F ₂	3F ₂	19,415	21,169 ^a 21,161 ^m	6,13(-01)	5,45(-01) ^a	2,17(12)	1,62(12) ^a 1,61(12) ^m

Tablo 4.14. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)		gf		A_r (s ⁻¹)	
Alt Seviye	Üst Seviye			Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar
3p3d	³ D ₀₁	3d ²	³ F ₂	20,505	-	6,05(-01)	-	1,92(12)	-
3p3d	³ P ₀₂	3d ²	³ F ₂	23,174	-	1,29(-03)	-	3,22(09)	-
3p3d	³ F ₀₃	3d ²	³ F ₂	23,336	-	4,20(-04)	-	1,03(09)	-
3p3d	³ D ₀₂	3d ²	³ F ₂	46,500	-	3,47(-02)	-	2,15(10)	-
3p3d	³ P ₀₁	3d ²	³ F ₂	48,396	22,494 ^a 22,495 ^m	3,80(-02)	3,15(-01) ^a	2,17(10)	2,30(12) ^a 2,28(12) ^m
3p3d	¹ F ₀₃	3d ²	³ F ₂	48,552	-	2,97(-02)	-	1,68(10)	-
3p3d	¹ D ₀₂	3d ²	³ F ₂	68,383	-	6,23(-04)	-	1,78(08)	-
3p3d	³ D ₀₃	3d ²	³ F ₂	76,908	-	1,29(-03)	-	2,92(08)	-
3p3d	¹ P ₀₁	3d ²	³ F ₂	83,259	-	1,06(-05)	-	2,05(06)	-
3s3p	³ P ₀₁	3d ²	³ P ₀	8,894	9,30 ^k	4,26(-06)	6,42(-06) ^k	3,60(08)	4,95(08) ^k
3s3p	¹ P ₀₁	3d ²	³ P ₀	12,348	-	1,74(-07)	-	7,63(06)	-
3p3d	³ D ₀₁	3d ²	³ P ₀	19,690	-	2,61(-01)	-	4,49(12)	-
3p3d	³ P ₀₁	3d ²	³ P ₀	44,091	21,456 ^a 21,496 ^m	2,46(-02)	2,27(-01) ^a	8,47(10)	3,30(12) ^a 3,38(12) ^m
3p3d	¹ P ₀₁	3d ²	³ P ₀	71,285	-	1,18(-06)	-	1,56(06)	-
3s3p	³ P ₀₂	3d ²	³ F ₃	11,273	-	5,80(-05)	-	4,35(08)	-
3p3d	³ F ₀₂	3d ²	³ F ₃	17,180	-	1,29(-04)	-	4,18(08)	-
3p3d	³ P ₀₂	3d ²	³ F ₃	20,060	43,869 ^a 43,848 ^m	3,59(-01)	3,52(-01) ^a	8,51(11)	1,74(11) ^a 1,77(11) ^m
3p3d	³ F ₀₃	3d ²	³ F ₃	20,182	22,151 ^a 22,150 ^m	5,20(-01)	4,56(-01) ^a	1,22(12)	8,84(11) ^a 8,90(11) ^m
3p3d	³ D ₀₂	3d ²	³ F ₃	35,456	-	4,43(-01)	-	3,36(11)	-
3p3d	¹ F ₀₃	3d ²	³ F ₃	36,636	-	6,85(-02)	-	4,86(10)	-
3p3d	³ F ₀₄	3d ²	³ F ₃	44,973	58,83 ^b 58,59 ^c 61,19 ^d 58,745 ^m	2,42(-02)	-	1,14(10)	4,88(09) ^b 4,88(09) ^c 4,58(09) ^d 4,91(09) ^m
3p3d	¹ D ₀₂	3d ²	³ F ₃	46,899	22,034 ^a 22,026 ^m	4,65(-02)	3,11(-01) ^a	2,02(10)	6,10(11) ^a 6,27(11) ^m
3p3d	³ D ₀₃	3d ²	³ F ₃	50,758	-	2,62(-02)	-	9,70(09)	-
3s3p	³ P ₀₁	3d ²	³ P ₂	8,473	8,873 ^k	2,41(-04)	3,01(-04) ^k	4,49(09)	5,11(09) ^k
3s3p	³ P ₀₂	3d ²	³ P ₂	11,160	-	1,26(-07)	-	1,36(06)	-
3s3p	¹ P ₀₁	3d ²	³ P ₂	11,551	-	1,01(-06)	-	1,01(07)	-
3p3d	³ F ₀₂	3d ²	³ P ₂	16,917	-	2,49(-03)	-	1,16(10)	-
3p3d	³ D ₀₁	3d ²	³ P ₂	17,739	43,624 ^a 43,626 ^m	1,62(-03)	1,13(-01) ^a	6,87(09)	2,21(11) ^a 2,11(11) ^m
3p3d	³ P ₀₂	3d ²	³ P ₂	19,702	-	4,89(-01)	-	1,68(12)	-
3p3d	³ F ₀₃	3d ²	³ P ₂	19,820	21,680 ^a 21,692 ^m	1,51(-01)	1,31(-01) ^a	5,13(11)	3,72(11) ^a 3,70(11) ^m
3p3d	³ D ₀₂	3d ²	³ P ₂	34,353	-	1,53(-01)	-	1,73(11)	-
3p3d	³ P ₀₁	3d ²	³ P ₂	35,377	-	2,38(-01)	-	2,54(11)	-
3p3d	¹ F ₀₃	3d ²	³ P ₂	35,460	-	3,05(-02)	-	3,25(10)	-
3p3d	¹ D ₀₂	3d ²	³ P ₂	44,989	21,568 ^a 21,570 ^m	3,51(-03)	4,30(-01) ^a	2,31(09)	1,23(12) ^a 1,22(12) ^m
3p3d	³ D ₀₃	3d ²	³ P ₂	48,528	64,39 ^b 64,39 ^c 67,34 ^d 64,562 ^m	1,87(-02)	-	1,06(10)	4,16(09) ^b 3,42(09) ^c 4,13(09) ^d 3,92(09) ^m
3p3d	¹ P ₀₁	3d ²	³ P ₂	50,983	-	3,32(-02)	-	1,71(10)	-
3s3p	³ P ₀₀	3d ²	³ P ₁	8,353	8,74 ^k	7,81(-05)	9,41(-05) ^k	2,49(09)	2,73(09) ^k
3s3p	³ P ₀₁	3d ²	³ P ₁	8,446	8,83 ^k	4,14(-05)	4,93(-05) ^k	1,29(09)	1,40(09) ^k
3s3p	³ P ₀₂	3d ²	³ P ₁	11,112	-	1,46(-05)	-	2,64(08)	-
3s3p	¹ P ₀₁	3d ²	³ P ₁	11,500	-	3,71(-06)	-	6,24(07)	-
3p3d	³ F ₀₂	3d ²	³ P ₁	16,809	-	5,84(-06)	-	4,60(07)	-

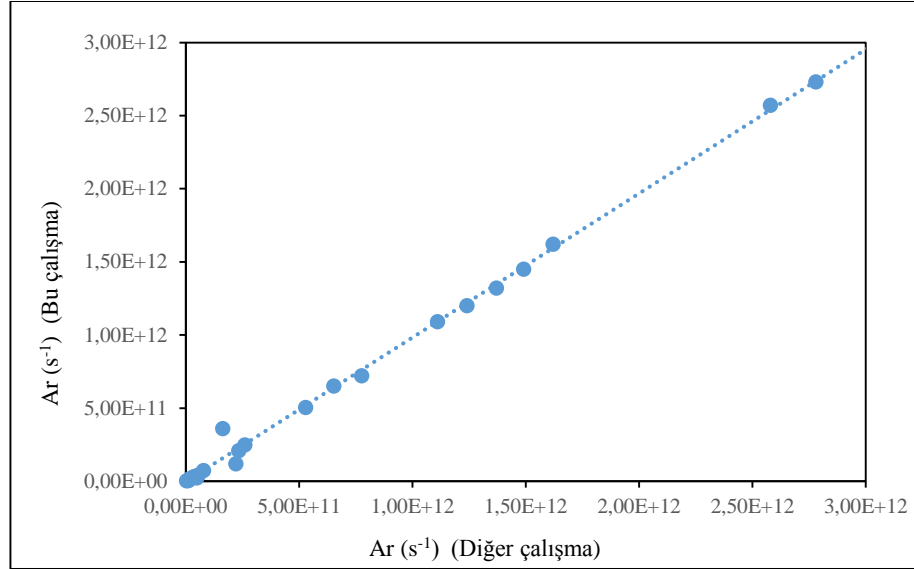
Tablo 4.14. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)		gf		A_r (s ⁻¹)	
Alt Seviye	Üst Seviye			Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar
3p3d	³ D ^o ₁	3d ²	³ P ₁	17,620	42,807 ^a 42,854 ^m	6,50(-05)	9,93(-02) ^a	4,66(08)	1,20(11) ^a 1,14(11) ^m
3p3d	³ P ^o ₂	3d ²	³ P ₁	19,556	-	3,86(-01)	-	2,25(12)	-
3p3d	³ D ^o ₂	3d ²	³ P ₁	33,909	-	2,18(-02)	-	4,23(10)	-
3p3d	³ P ^o ₀	3d ²	³ P ₁	34,806	22,841 ^a	1,29(-01)	1,95(-01) ^a	2,38(11)	8,30(11) ^a
3p3d	³ P ^o ₁	3d ²	³ P ₁	34,906	-	1,23(-01)	-	2,26(11)	-
3p3d	¹ D ^o ₂	3d ²	³ P ₁	44,230	21,366 ^a 21,373 ^m	2,17(-02)	3,38(-01) ^a	2,48(10)	1,65(12) ^a 1,63(12) ^m
3p3d	¹ P ^o ₁	3d ²	³ P ₁	50,010	-	5,40(-03)	-	4,80(09)	-
3p3d	³ F ^o ₃	3d ²	¹ G ₄	19,667	-	8,87(-01)	-	1,70(12)	-
3p3d	¹ F ^o ₃	3d ²	¹ G ₄	34,976	46,167 ^a 46,167 ^m	8,06(-01)	8,54(-01) ^a	4,88(11)	2,98(11) ^a 3,05(11) ^m
3p3d	³ F ^o ₄	3d ²	¹ G ₄	42,497	41,475 ^a 55,10 ^b 54,49 ^c 57,24 ^d 41,410 ^m	1,16(-01)	2,74(-01) ^a	4,77(10)	1,18(11) ^a 2,09(10) ^b 2,14(10) ^c 1,86(10) ^d 1,19(11) ^m
3p3d	³ D ^o ₃	3d ²	¹ G ₄	47,626	-	3,20(-02)	-	1,05(10)	-
3p3d	³ F ^o ₃	3d ²	³ F ₄	17,539	21,600 ^a 21,577 ^m	7,67(-03)	7,63(-01) ^a	1,85(10)	1,21(12) ^a 1,26(12) ^m
3p3d	¹ F ^o ₃	3d ²	³ F ₄	28,769	-	4,52(-03)	-	4,05(09)	-
3p3d	³ F ^o ₄	3d ²	³ F ₄	33,670	41,48 ^b 41,31 ^c 42,61 ^d	3,36(-01)	-	2,20(11)	1,18(11) ^b 1,19(11) ^c 1,13(11) ^d
3p3d	³ D ^o ₃	3d ²	³ F ₄	36,810	43,237 ^a 43,174 ^m	1,10(00)	6,35(-01) ^a	6,02(11)	2,59(11) ^m
3s3p	³ P ^o ₁	3d ²	¹ D ₂	7,981	8,358 ^k	3,56(-05)	4,07(-05) ^k	7,46(08)	7,77(08) ^k
3s3p	³ P ^o ₂	3d ²	¹ D ₂	10,321	-	3,63(-04)	-	4,55(09)	-
3s3p	¹ P ^o ₁	3d ²	¹ D ₂	10,655	-	5,89(-04)	-	6,93(09)	-
3p3d	³ F ^o ₂	3d ²	¹ D ₂	15,063	-	2,51(-04)	-	1,48(09)	-
3p3d	³ D ^o ₁	3d ²	¹ D ₂	15,711	-	9,15(-06)	-	4,95(07)	-
3p3d	³ P ^o ₂	3d ²	¹ D ₂	17,232	-	1,83(-05)	-	8,23(07)	-
3p3d	³ F ^o ₃	3d ²	¹ D ₂	17,321	-	2,21(-05)	-	9,87(07)	-
3p3d	³ D ^o ₂	3d ²	¹ D ₂	27,482	41,663 ^a 41,708 ^m	2,91(-03)	4,25(-01) ^a	5,14(09)	3,26(11) ^a 3,10(11) ^m
3p3d	³ P ^o ₁	3d ²	¹ D ₂	28,134	-	3,35(-03)	-	5,65(09)	-
3p3d	¹ F ^o ₃	3d ²	¹ D ₂	28,186	-	1,71(-03)	-	2,88(09)	-
3p3d	¹ D ^o ₂	3d ²	¹ D ₂	33,892	-	5,26(-01)	-	6,12(11)	-
3p3d	³ D ^o ₃	3d ²	¹ D ₂	35,863	-	1,25(-01)	-	1,30(11)	-
3p3d	¹ P ^o ₁	3d ²	¹ D ₂	37,185	46,549 ^a 46,659 ^m	2,24(-01)	1,05(-01) ^a	2,16(11)	1,79(11) ^a 1,76(11) ^m
3s3p	³ P ^o ₁	3d ²	¹ S ₀	7,838	8,197 ^k	4,34(-05)	2,94(-05) ^k	4,71(09)	2,92(09) ^k
3s3p	¹ P ^o ₁	3d ²	¹ S ₀	10,402	-	9,26(-04)	-	5,71(10)	-
3p3d	³ D ^o ₁	3d ²	¹ S ₀	15,167	-	2,08(-03)	-	6,03(10)	-
3p3d	³ P ^o ₁	3d ²	¹ S ₀	26,438	-	1,34(-06)	-	1,29(07)	-
3p3d	¹ P ^o ₁	3d ²	¹ S ₀	34,280	42,004 ^a 42,401 ^m	1,98(-01)	1,60(-01) ^a	1,13(12)	6,03(11) ^a 6,31(11) ^m

^aSafronova ve Safronova, 2010; ^{b,c,d}Safronova ve ark., 2009a; ^{e,f}Ralchenko ve ark., 2008; ^gKramida ve Shirai, 2009; ^hHu ve ark., 2011b; ⁱZou ve Fischer, 2001; ^{&,+,*}Safronova ve ark., 2009a; ^kAggarwall ve Keenan, 2016; ^mHao ve Kang, 2015

Şekil 4.5.'te elektrik dipol geçişlerinin, geçiş olasılıklarının Safronova ve arkadaşlarının (2009a) RMBPT kodu sonuçlarıyla karşılaştırılması gösterilmektedir. Şekil 4.5. incelendiğinde, geçiş olasılıkları Safronova ve arkadaşları (2009a)

tarafından verilen çalışma sonuçları ile uyum içerisindedir. Sadece $3p3d-3d^2$ seviyeleri arası bazı geçiş olasılıklarında bir miktar uyumsuzluk görülmektedir.



Şekil 4.5. W^{62+} iyonunun E1 geçişlerine ait geçiş olasılıklarının RMBPT kodu sonuçları (Safronova ve ark., 2009a) ile karşılaştırılması

W^{62+} iyonunun CV+Breit+QED çalışmasından elde edilen seviyeler arasındaki yasaklı geçişleri için 198164 geçiş (E2, M1 ve M2 toplamı) elde edildi. Sadece $3s3p$ ve $3p^2$ içeren E2, M1 ve M2 geçişlerine ait dalgaboyları, λ (Å), ağırlıklı salınıcı şiddetleri, gf ve geçiş olasılıkları, A_r (s^{-1}) Tablo 4.15.'te verilmektedir. Tablo aynı zamanda $10^{-1} s^{-1}$ 'den büyük geçiş olasılıklarını içerecek şekilde düzenlenmiştir. Bu iyonun yasaklı geçişleri için dalgaboyları ve geçiş oranları ayrıca çok konfigürasyonlu Hartree-Fock (MCHF) (Fischer, 2000) koduyla hesaplanıp, Konan ve arkadaşları (2014a) tarafından yayımlanan çalışmada verilmektedir.

E2 geçişlerinde dalgaboyu ve geçiş olasılıkları, $3p^2 \ ^3P_0 - 3p^2 \ ^3P_2$ ve $3p^2 \ ^3P_2 - 3p^2 \ ^1S_0$ geçişleri hariç karşılaştırma değerleriyle iyi uyum içerisindedir. M1 geçişlerinin dalgaboyu ve geçiş olasılıkları çok uyumludur. M2 geçişlerinde ise dalgaboyu ve geçiş olasılıklarının uyumu bazı geçişlerde çok iyi iken, bazılarında iyi değildir. E2, M1 ve M2 geçişleri için ağırlıklı salınıcı şiddetlerinin karşılaştırma değeri mevcut kaynaklarda bulunmamaktadır ve bu çalışmayla ilk defa elde edilmektedir.

Tablo 4.15. W^{62+} iyonunun yasaklı geçişlerinin (E2, M1, ve M2) dalgaboyları, λ (Å), ağırlıklı salıncı şiddetleri, gf ve geçiş olasılıkları, A_r (s^{-1})

Geçişler				Geçiş Türü	λ (Å)		gf	A_r (s^{-1})	
Alt Seviye	Üst Seviye		Bu çalışma		Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	
3s3p	$^3P^o_0$	3s3p	$^3P^o_1$	M1	755,95	782,10 ^b	0,000	3,03(04)	2,60(04) ^a 2,72(04) ^b 2,66(04) ^c
3s3p	$^3P^o_0$	3s3p	$^3P^o_2$	E2	33,63	33,63 ^b	2,501(-06)	2,95(06)	2,91(06) ^a 2,91(06) ^b 2,91(06) ^c
3s3p	$^3P^o_1$	3s3p	$^3P^o_2$	E2	35,20	35,15 ^b	3,604(-06)	3,88(06)	3,86(06) ^a 3,85(06) ^b 3,86(06) ^c
				M1				2,22(08)	2,19(08) ^a 2,18(08) ^b 2,20(08) ^c
3s3p	$^3P^o_0$	3s3p	$^1P^o_1$	M1	30,52	30,51 ^b	0,000	1,70(08)	1,67(08) ^a 1,66(08) ^b 1,68(08) ^c
3s3p	$^3P^o_1$	3s3p	$^1P^o_1$	E2	31,80	31,75 ^b	3,251(-06)	7,15(06)	7,10(06) ^a 7,08(06) ^b 7,08(06) ^c
				M1				8,21(07)	8,13(07) ^a 8,11(07) ^b 8,14(07) ^c
3s3p	$^3P^o_2$	3s3p	$^1P^o_1$	E2	329,48	-	1,809(-09)	3,71(01)	3,49(01) ^a 3,63(01) ^c
				M1				1,71(05)	1,63(05) ^a 1,67(05) ^c
3p ²	3P_0	3p ²	1D_2	E2	35,51	-	2,891(-06)	3,06(06)	-
3p ²	3P_0	3p ²	3P_1	M1	35,30	-	0,000	2,79(08)	-
3p ²	1D_2	3p ²	3P_1	E2	5770,27	-	3,127(-13)	2,09(-05)	-
				M1				3,20(01)	
3p ²	3P_0	3p ²	3P_2	E2	17,11	34,923 ^c	2,144(-09)	9,77(03)	3,58(06) ^c
3p ²	1D_2	3p ²	3P_2	E2	33,01	-	7,085(-06)	8,67(06)	-
				M1				1,89(08)	
3p ²	3P_1	3p ²	3P_2	E2	33,20	-	3,500(-06)	4,24(06)	-
				M1				2,31(08)	
3p ²	1D_2	3p ²	1S_0	E2	31,43	-	2,494(-06)	1,68(07)	-
3p ²	3P_1	3p ²	1S_0	M1	31,60	-	0,000	5,22(08)	-
3p ²	3P_2	3p ²	1S_0	E2	655,25	31,314 ^c	7,275(-10)	1,13(01)	1,81(07) ^c
3s3p	$^3P^o_1$	3p ²	1D_2	M2	23,21	23,31 ^b 13,631 ^c	3,956(-12)	1,55(05)	1,69(05) ^b 1,01(04) ^c
3s3p	$^3P^o_2$	3p ²	1D_2	M2	68,19	22,298 ^c	6,843(-14)	1,28(02)	5,59(05) ^c
3s3p	$^1P^o_1$	3p ²	1D_2	M2	85,99	23,906 ^c	1,247(-13)	1,74(02)	1,70(05) ^c
3s3p	$^3P^o_1$	3p ²	3P_1	M2	23,12	23,21 ^b 23,272 ^c	0,000	5,05(04)	3,69(05) ^b 3,63(05) ^c
3s3p	$^3P^o_2$	3p ²	3P_1	M2	67,39	69,189 ^c	1,399(-16)	7,53(-01)	8,94(-01) ^c
3s3p	$^1P^o_1$	3p ²	3P_1	M2	84,72	-	0,000	4,64(02)	-
3s3p	$^3P^o_0$	3p ²	3P_2	M2	13,39	13,39 ^b 22,599 ^c	0,000	2,72(02)	7,77(02) ^b 1,91(05) ^c
3s3p	$^3P^o_1$	3p ²	3P_2	M2	13,63	13,62 ^b 23,267 ^c	5,809(-12)	2,42(06)	1,09(04) ^b 1,94(05) ^c
3s3p	$^3P^o_2$	3p ²	3P_2	M2	22,24	69,137 ^c	4,836(-14)	5,67(05)	1,29(01) ^c
3s3p	$^1P^o_1$	3p ²	3P_2	M2	23,85	-	3,933(-13)	2,84(04)	-
3s3p	$^3P^o_2$	3p ²	1S_0	M2	21,51	21,552 ^c	0,000	9,89(05)	9,83(05) ^c

^aZou ve Fischer, 2001; ^bAggarwall ve Keenan, 2016; ^cHao ve Kang, 2015

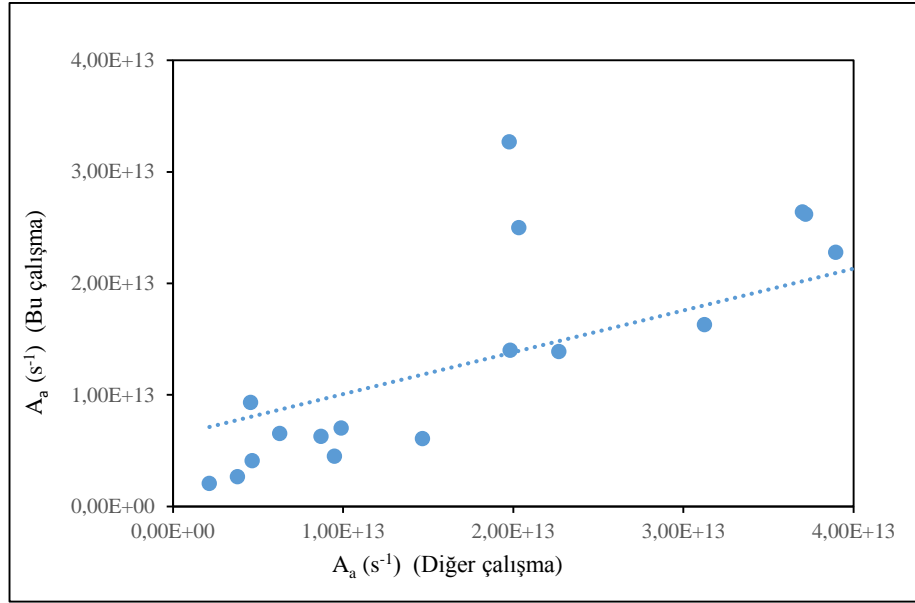
Mg benzeri tungsten için, kendiliğinden iyonlaşma oranları hesaplamaları, Tablo 4.12.'de verilen CV+Breit+QED konfigürasyon setine 4s5p, 4s5d, 4s5f, 4s5g, 4s6d, 4p4f, 4p5p, 4p5g, 4p6g, 4d², 4d4f, 4d5g, 4f², 4f5s, 4f5d, 4f5f, 4f6d, 4f6f konfigürasyonları eklenerek yapıldı. Tablo 4.16.'da bu seviyeler arasındaki ışımali geçiş (elektrik dipol) ve kendiliğinden iyonlaşma geçiş olasılıkları ve dalgaboyları verilmektedir. Geçiş olasılıkları mevcut kaynaklardaki verilerle (Safronova ve ark., 2009a) karşılaştırma yapabilmek için ağırlıklı geçiş oranına (gA_r) çevrildi.

Tablo 4.16. W^{62+} iyonunun kendiliğinden iyonlaşma oranları, A_a (s^{-1}) ve elektrik dipol (E1) geçişlerinin dalgaboyları, λ (Å) ve ağırlıklı geçiş olasılıkları, gA_r (s^{-1})

Geçişler				gA_r (s^{-1})		λ (Å)		A_a (s^{-1})	
Alt seviye	Üst seviye		Bu çalışma	Diğer çalışmalar ^a	Bu çalışma	Diğer çalışmalar ^a	Bu çalışma	Diğer çalışmalar ^a	
3d4d	³ F ₄	4d4f	¹ H ₅	2,30(15)	2,32(15)	4,4041	4,4044	8,85(13)	3,05(13)
3d5d	³ F ₄	4f5d	³ G ₅	2,29(15)	2,00(15)	4,3967	4,3919	2,03(13)	2,50(13)
3s4s	³ S ₁	4s5p	³ P ₂	1,09(14)	1,35(14)	2,5922	2,5959	3,12(13)	1,63(13)
3p4f	³ G ₄	4d4f	³ H ₅	2,77(14)	1,12(15)	4,1194	3,7009	1,46(13)	6,08(12)
3s5g	¹ G ₄	4p5g	¹ F ₃	2,51(14)	3,37(14)	3,5714	3,5763	3,79(12)	2,65(12)
3p5f	³ F ₂	4s5f	³ F ₃	2,08(13)	1,05(14)	4,5617	4,0307	3,89(13)	2,28(13)
3d5s	³ D ₂	4f5s	³ F ₃	1,64(15)	1,56(15)	4,2832	4,2894	2,26(13)	1,39(13)
3s6g	¹ G ₄	4p6g	¹ F ₃	3,10(14)	3,30(14)	3,5730	3,5757	2,13(12)	2,05(12)
3d5d	³ F ₃	4f5d	³ D ₃	4,46(10)	5,31(14)	4,3610	4,2846	6,27(12)	6,55(12)
3d6d	³ G ₄	4f6d	³ H ₅	2,65(15)	2,53(15)	4,2799	4,2831	9,87(12)	7,04(12)
3p4s	³ P ₀	4s5d	³ D ₂	1,40(14)	2,86(14)	2,6591	2,6693	3,71(13)	2,62(13)
3d4p	³ D ₀	4p5p	³ D ₂	2,17(09)	1,68(14)	3,0031	3,0023	4,55(12)	9,31(12)
3d4f	³ G ₅	4f ²	³ H ₆	2,59(12)	4,07(15)	4,4465	4,4106	1,97(13)	3,27(13)
3p5g	¹ H ₅	4d5g	¹ I ₆	1,15(15)	1,02(15)	4,0608	4,0848	3,69(13)	2,64(13)
3d5f	³ G ₃	4f5f	³ H ₄	1,54(15)	1,58(15)	4,2821	4,2870	8,68(12)	6,28(12)
3p6d	³ P ₂	4s6d	³ D ₃	1,06(14)	1,10(14)	4,0041	4,0227	1,98(13)	1,40(13)
3d6f	³ G ₃	4f6f	³ H ₄	1,59(15)	1,58(15)	4,2803	4,2843	4,65(12)	4,09(12)
4s4f	³ F ₄	4s5g	³ G ₅	7,47(14)	7,72(14)	9,9159	9,9137	9,47(12)	4,50(12)

^aSafronova ve ark., 2009a

Şekil 4.6.'da kendiliğinden iyonlaşma oranlarının Safronova ve arkadaşlarının (2009a) sonuçlarıyla karşılaştırılması gösterilmektedir. Tablo 4.16. ve Şekil 4.6. incelendiğinde kendiliğinden iyonlaşma oranlarında bazı uyumsuzluklar olduğu görülmektedir. Bu seviyeler için enerji seviyeleri ve ışımali geçiş olasılıkları (A_r) değerlerinin mevcut kaynaklardaki verilerle (Safronova ve ark., 2009a) uyumu, kendiliğinden iyonlaşma oranlarına göre daha iyidir.



Şekil 4.6. W^{62+} iyonunun kendiliğinden iyonlaşma oranlarının COWAN kodu sonuçları (Safronova ve ark., 2009a) ile karşılaştırılması

4.3.2. Magnezyum benzeri altın için hesaplama sonuçları (Au^{67+})

Magnezyum benzeri altına ait enerji seviyeleri, dalgaboyları, salınıcı şiddetleri ve geçiş olasılıkları gibi ışımaya parametrelerini kapsayan deneysel ve teorik çalışmaların bir kısmı Tablo 2.1.'de verilmektedir. Mevcut kaynaklardaki sonuçlar elektron ışını iyon tuzağı (EBIT) ile deneysel ve MR-MP (Vilkas ve ark., 1999), FAC (Gu, 2008) ve çok konfigürasyonlu Dirac-Hartree-Fock (MCDHF) (Jönsson ve ark., 2013) ile teorik olarak elde edilmiştir. Au^{67+} iyonu için kendiliğinden iyonlaşma oranlarına ait veriler mevcut kaynaklarda bulunmamaktadır.

Tablo 4.17.'de hesaplanan enerji seviyeleri ve bunların mevcut kaynaklardaki verilerle karşılaştırılması verilmektedir (Vilkas ve ark., 2007; Hamasha ve Alshaiub, 2012; Hu ve ark., 2014; Santana, 2016). Enerji seviyeleri taban hal olan $1s^22s^22p^63s^2\ ^1S_0$ seviyesine göre, karşılaştırma değerleri ile uyumlu olacak şekilde eV birim sisteminde verilmektedir. VV konfigürasyon setiyle yapılan hesaplamalarda 141, CV konfigürasyon setiyle yapılan hesaplamalarda 801 enerji seviyesi elde edildi. Tablo 4.17.'de sonuçların ilk 141 seviyesi ve özellikle karşılaştırma değeri olanlar verilmektedir.

Mevcut kaynaklarda Au⁶⁷⁺ iyonu ile ilgili bazı farklı çalışmalar bulunmaktadır (Vilkas ve ark.2007; Hamasha ve Alshaiub, 2012; Hu ve ark., 2014; Santana, 2016). Mevcut kaynaklardaki MR-MP yöntemi relativistik Dirac-Coulomb-Breit (DCB) Hamiltonyenine dayanmaktadır. Bu Hamiltonyen, çok konfigürasyon etkileşim açılımı ve yüksek dereceden QED etkilerini (ışıklı düzeltmeler, Lamb kayması, polarizasyon gibi) içerir. MCDHF yöntemi, Dirac-Coulomb Hamiltonyenini temel alır. QED ve Breit katkıları sonradan relativistik konfigürasyon etkileşimi (RCI) hesaplamalarıyla eklenir. Au⁶⁷⁺ için mevcut kaynaklardaki diğer bir hesap FAC kodunun relativistik konfigürasyon etkileşim yöntemi RCIM ile yapılmıştır. RCIM genelde MCDHF yöntemini izleyerek, korelasyon ve relativistik etkileri de içerecek şekilde sonuç verir. Spin-yörünge etkileşimi, kütle kayması ve diğer önemli relativistik etkileri içeren standart Coulomb-Dirac Hamiltonyenini kullanır.

Au⁶⁷⁺ için sonuçlar değerlendirildiğinde, öz ve değerlik elektronları arasındaki karşılıklı etkileşimin dikkate alınmasıyla, 3s3d ve 3s4s seviyeleri hariç enerji seviyesi değerlerinde ciddi bir düzelme olduğu görülmektedir. Örneğin, 3s3p ³P₀ seviyesi için enerji değeri VV hesabında 124,78 eV iken, CV hesabında 158,24 eV'a çıkmıştır. Ayrıca bu hesaplamalara QED ve Breit katkıları eklendiğinde, enerji seviyelerinde 3-4 eV civarında bir azalma olmuştur. CV hesabında 3s3p ³P₀ seviyesi için 158,24 eV olan enerji değeri Breit ve QED katkılarıyla (CV+Breit+QED) 154,35 eV olarak bulunmuştur. Sonuç olarak, korelasyon etkileri, QED ve Breit katkılarının hesaba katıldığı CV+Breit+QED çalışmasının sonuçları diğer çalışmalarla çok daha uyumludur. Yüksek seviyelere doğru gidildikçe bu sonuçlar ile karşılaştırma değeri arasında 100 eV'luk bir fark oluşmuştur. Sadece 3d², 3s4p, 3p4s, 3p4p seviyeleri için VV+Breit+QED sonuçları daha iyi gözükmemektedir.

Elde edilen sonuçların ayrıca FAC hesap sonuçları (Hamasha ve Alshaiub, 2012) ile bir yüzde fark hesabı yapılmaktadır. Yüzde farklar incelendiğinde 3s3p, 3p², 3s3d ve 3p3d seviyeleri için 0,00-1,05 aralığında (3p² ³P₀ seviyesi hariç), 3d² seviyeleri için 5,49-5,78 aralığında, 3s4p, 3p4s, 3p4p seviyeleri için ise 2,33-2,88 aralığındadır. 3d², 3s4p, 3p4s, 3p4p seviyeleri için VV+Breit+QED çalışmasıyla yapılan yüzde farklar daha iyidir. 3d² seviyelerinde yüzde fark 0,14-0,60 aralığında ve 3s4p, 3p4s, 3p4p

seviyeleri için yüzde fark 0,04-0,53 aralığındadır. Bu değerler tabloda en son sütunda ‘*’ ile gösterildi.

Tablo 4.17. Au⁶⁷⁺ iyonunun düşük enerji seviyeleri, E (eV)

Sıra	Seviyeler	Bu Çalışma				Diğer Çalışmalar	Fark (%)
		VV	VV+Breit +QED	CV	CV+Breit +QED		
1	3s ² ¹ S ₀	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00 ^{a,b,c,d}	0,00
2	3s3p ³ P ₀	124,78	121,23	158,24	154,35	154,91 ^a 155,32 ^b 155,10 ^c 155,41 ^d	0,36
3	3s3p ³ P ₀₁	143,15	139,59	176,51	172,62	172,45 ^a 172,59 ^b 172,43 ^c 172,69 ^d	0,09
4	3p ² ³ P ₀	311,10	303,98	391,79	383,90	369,79 ^a 369,56 ^b 369,34 ^c 369,77 ^d	3,81
5	3s3p ³ P ₀₂	653,76	649,59	663,88	659,82	659,37 ^a 659,38 ^b 659,93 ^c 659,41 ^d	0,07
6	3s3p ¹ P ₀₁	694,57	690,37	704,53	700,45	700,22 ^a 699,46 ^b 700,15 ^c 699,50 ^d	0,03
7	3p ² ¹ D ₂	825,79	818,13	870,76	863,35	855,47 ^a 855,60 ^b 855,85 ^c 855,73 ^d	0,92
8	3p ² ³ P ₁	822,87	815,06	875,53	867,50	858,54 ^a 858,15 ^b 858,59 ^c 858,29 ^d	1,04
9	3s3d ³ D ₁	896,22	890,59	897,26	891,58	891,52 ^a 891,80 ^b 891,80 ^c 891,93 ^d	0,00
10	3s3d ³ D ₂	908,01	902,26	915,55	909,34	907,39 ^a 907,10 ^b 907,35 ^c 907,23 ^d	0,21
11	3s3d ³ D ₃	1015,72	1010,02	1014,79	1009,07	1003,94 ^a 1004,58 ^b 1004,67 ^c 1004,71 ^d	0,51
12	3s3d ¹ D ₂	1033,57	1027,81	1034,23	1028,42	1022,70 ^a 1022,87 ^b 1023,14 ^c 1022,99 ^d	0,55
13	3p3d ³ F ₀₂	1034,93	1025,66	1075,77	1066,11	1058,20 ^a 1058,88 ^b 1058,73 ^c 1059,12 ^d	0,74
14	3p3d ³ D ₀₁	1070,77	1061,52	1113,28	1103,63	1096,93 ^a 1096,74 ^b 1096,72 ^c 1096,98 ^d	0,65

Tablo 4.17. (Devamı)

Sıra	Seviyeler		Bu Çalışma				Diğer Çalışmalar	Fark (%)
			VV	VV+Breit +QED	CV	CV+Breit +QED		
15	3p3d	³ P ₀₂	1173,34	1164,00	1212,97	1203,24	1191,69 ^a 1192,27 ^b 1192,22 ^c 1192,50 ^d	0,96
16	3p3d	³ F ₀₃	1177,95	1168,61	1217,67	1207,94	1195,38 ^a 1195,88 ^b 1195,90 ^c 1196,11 ^d	1,05
17	3p ²	³ P ₂	1358,94	1350,52	1382,73	1374,62	1370,63 ^a 1369,65 ^b 1370,90 ^c 1369,72 ^d	0,29
18	3p ²	¹ S ₀	1379,68	1371,24	1403,67	1395,54	1391,93 ^a 1390,69 ^b 1392,03 ^c 1390,76 ^d	0,25
19	3p3d	³ D ₀₂	1576,03	1566,14	1589,41	1579,65	1577,59 ^a 1577,47 ^b 1578,10 ^c 1577,64 ^d	0,13
20	3p3d	³ P ₀₀	1585,81	1575,92	1599,39	1589,63	1588,57 ^a 1588,32 ^b 1588,97 ^c 1588,47 ^d	0,06
21	3p3d	³ P ₀₁	1587,08	1577,19	1600,37	1590,61	1588,68 ^a 1588,31 ^b 1589,45 ^c 1588,49 ^d	0,12
22	3p3d	¹ F ₀₃	1587,89	1578,00	1601,38	1591,62	1589,90 ^a 1588,80 ^b 1589,03 ^c 1588,97 ^d	0,10
23	3p3d	³ F ₀₄	1682,47	1672,51	1694,41	1684,60	1677,26 ^a 1677,76 ^b 1678,47 ^c 1677,92 ^d	0,58
24	3p3d	¹ D ₀₂	1694,88	1684,93	1706,12	1696,31	1690,06 ^a 1690,30 ^b 1691,02 ^c 1690,46 ^d	0,36
25	3p3d	³ D ₀₃	1716,59	1706,64	1726,99	1717,17	1710,19 ^a 1709,95 ^b 1710,78 ^c 1710,10 ^d	0,40
26	3p3d	¹ P ₀₁	1729,26	1719,31	1739,95	1730,14	1724,17 ^a 1723,75 ^b 1724,69 ^c 1723,91 ^d	0,3
27	3d ²	³ F ₂	1807,22	1795,87	1912,60	1901,20	1798,35 ^a 1798,82 ^b 1798,90 ^c 1799,09 ^d	5,71 0,14*
28	3d ²	³ P ₀	1834,95	1823,60	1940,14	1928,75	1827,99 ^a 1827,99 ^b 1828,23 ^c 1828,25 ^d	5,51 0,24*

Tablo 4.17. (Devamı)

Sıra	Seviyeler		Bu Çalışma				Diğer Çalışmalar	Fark (%)
			VV	VV+Breit +QED	CV	CV+Breit +QED		
29	3d ²	³ F ₃	1922,21	1910,80	2027,29	2015,84	1906,03 ^a 1906,96 ^b 1907,09 ^c 1907,22 ^d	5,76 0,25*
30	3d ²	³ P ₂	1934,14	1922,72	2039,16	2027,71	1919,25 ^a 1919,96 ^b 1920,14 ^c 1920,22 ^d	5,65 0,18*
31	3d ²	³ P ₁	1939,49	1928,08	2044,51	2033,05	1921,92 ^a 1922,51 ^b 1926,22 ^c 1922,77 ^d	5,78 0,32*
32	3d ²	¹ G ₄	1939,59	1928,18	2044,76	2033,30	1925,38 ^a 1926,04 ^b 1922,77 ^c 1926,30 ^d	5,60 0,15*
33	3d ²	³ F ₄	2047,13	2035,65	2151,92	2140,40	2023,50 ^a 2024,65 ^b 2024,92 ^c 2024,91 ^d	5,77 0,60*
34	3d ²	¹ D ₂	2056,97	2045,49	2161,62	2150,11	2035,14 ^a 2036,13 ^b 2036,44 ^c 2036,38 ^d	5,64 0,51*
35	3d ²	¹ S ₀	2087,05	2075,59	2191,51	2180,00	2066,39 ^a 2066,78 ^b 2067,37 ^c 2067,03 ^d	5,49 0,44*
36	3s4s	³ S ₁	3769,46	3765,97	3770,13	3766,64	3760,71 ^a	0,15
37	3s4s	¹ S ₀	3784,98	3781,46	3786,03	3782,53	3776,34 ^a	0,16
38	3s4p	³ P ₀	3849,34	3844,33	3954,62	3949,57	3842,16 ^a	2,79 0,04*
39	3s4p	³ P ₀	3850,89	3845,89	3956,18	3951,13	3843,47 ^a	2,80 0,06*
40	3p4s	³ P ₀	3948,33	3941,08	4052,86	4045,57	3945,00 ^a	2,54 0,10*
41	3p4s	³ P ₀	3948,78	3941,51	4053,32	4046,00	3945,48 ^a	2,54 0,11*
42	3p4p	³ D ₁	4000,40	3991,75	4115,70	4106,93	4013,13 ^a	2,33 0,53*
43	3p4p	³ P ₀	4051,59	4042,69	4161,37	4152,37	4035,78 ^a	2,88 0,17*
44	3s4p	³ P ₀	4055,46	4050,35	4160,16	4155,02	4047,03 ^a	2,66 0,08*
45	3s4p	¹ P ₀	4061,71	4056,56	4166,44	4161,25	4052,99 ^a	2,67 0,09*
46	3s4d	³ D ₂	4142,89	4137,15	4247,58	4241,80	-	-
47	3s4d	³ D ₁	4143,43	4137,67	4248,10	4242,30	-	-
48	3s4d	¹ D ₂	4190,40	4184,32	4295,12	4289,02	-	-
49	3s4d	³ D ₃	4192,32	4186,56	4296,93	4291,12	-	-
50	3p4p	³ P ₁	4231,04	4222,15	4337,95	4329,04	-	-
51	3p4p	¹ D ₂	4236,61	4228,03	4343,59	4334,99	-	-
52	3s4f	³ F ₀	4240,86	4235,04	4345,56	4339,70	-	-
53	3s4f	³ F ₃	4244,61	4238,84	4349,36	4343,55	-	-
54	3s4f	³ F ₄	4262,87	4257,10	4367,57	4361,75	-	-
55	3s4f	¹ F ₃	4269,15	4263,34	4373,92	4368,07	-	-
56	3p4d	³ F ₀	4315,42	4305,94	4420,70	4411,18	-	-
57	3p4d	³ D ₀	4318,33	4308,80	4423,64	4414,07	-	-

Tablo 4.17. (Devamı)

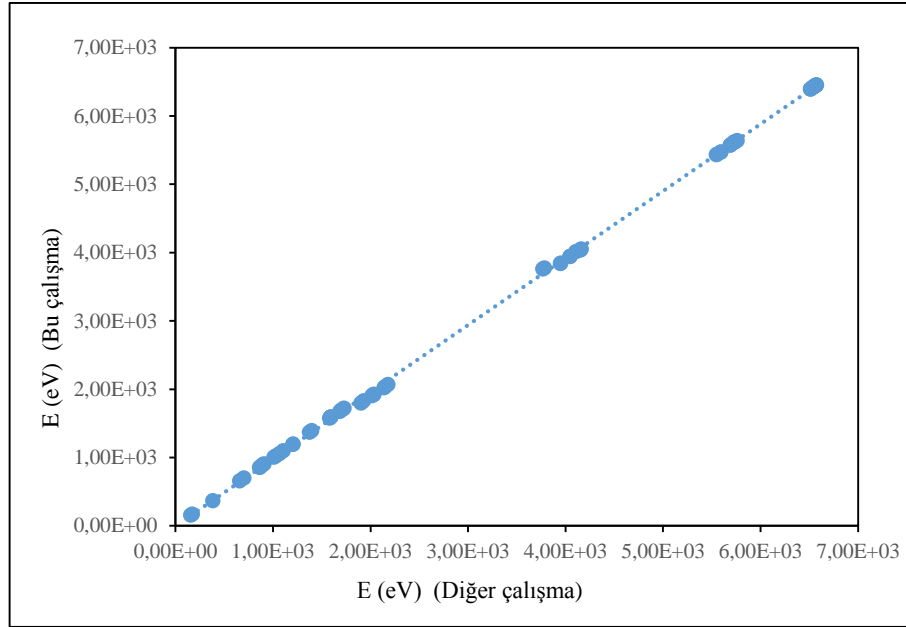
Sıra	Seviyeler	Bu Çalışma				Diğer Çalışmalar	Fark (%)	
		VV	VV+Breit +QED	CV	CV+Breit +QED			
58	3p4d	³ P ₀₂	4367,12	4357,57	4471,78	4462,19	-	-
59	3p4d	¹ F ₀₃	4368,73	4359,22	4473,46	4463,91	-	-
60	3p4f	³ G ₃	4411,13	4401,55	4516,01	4506,39	-	-
61	3p4f	³ D ₂	4421,77	4412,20	4526,67	4517,06	-	-
62	3p4f	³ D ₃	4438,21	4428,64	4542,92	4533,31	-	-
63	3p4f	¹ G ₄	4440,76	4431,18	4545,46	4535,84	-	-
64	3p4s	³ P ₀₂	4460,51	4452,84	4565,05	4557,34	-	-
65	3p4s	¹ P ₀₁	4465,85	4458,18	4570,40	4562,69	-	-
66	3p4p	³ S ₁	4536,59	4527,40	4649,09	4639,81	-	-
67	3p4p	³ D ₂	4538,08	4528,90	4650,46	4641,18	-	-
68	3d4s	³ D ₁	4676,33	4667,13	4780,88	4771,64	-	-
69	3d4s	³ D ₂	4677,44	4668,24	4782,03	4772,79	-	-
70	3p4p	³ D ₃	4732,46	4723,15	4838,90	4829,57	-	-
71	3p4p	¹ P ₁	4734,65	4725,33	4841,16	4831,83	-	-
72	3p4p	³ P ₂	4750,61	4741,36	4857,99	4848,73	-	-
73	3d4p	³ F ₀₂	4749,37	4738,65	4861,72	4850,91	-	-
74	3d4p	³ D ₀₁	4754,09	4743,37	4866,11	4855,30	-	-
75	3p4p	¹ S ₀	4764,96	4755,70	4873,08	4863,83	-	-
76	3d4s	³ D ₃	4797,19	4787,93	4901,85	4892,55	-	-
77	3d4s	¹ D ₂	4799,75	4790,49	4904,50	4895,21	-	-
78	3p4d	³ D ₀₂	4824,84	4814,91	4930,24	4920,27	-	-
79	3p4d	³ F ₀₃	4826,13	4816,14	4932,14	4922,12	-	-
80	3p4d	³ P ₀₁	4830,36	4820,45	4935,53	4925,58	-	-
81	3p4d	³ P ₀₀	4834,27	4824,36	4939,40	4929,45	-	-
82	3p4d	³ D ₀₃	4873,99	4868,34	4980,71	4970,63	-	-
83	3d4p	¹ D ₀₂	4870,92	4860,17	4983,83	4971,47	-	-
84	3p4d	³ F ₀₄	4878,54	4868,61	4983,19	4973,22	-	-
85	3p4d	¹ D ₀₂	4878,05	4868,10	4981,86	4973,39	-	-
86	3d4p	¹ F ₀₃	4878,56	4863,56	4987,85	4977,13	-	-
87	3p4d	¹ P ₀₁	4886,26	4876,31	4991,02	4981,04	-	-
88	3p4f	³ F ₃	4923,25	4913,29	5028,13	5018,13	-	-
89	3p4f	³ F ₂	4930,28	4920,33	5035,19	5025,20	-	-
90	3p4f	³ G ₄	4931,00	4921,05	5035,84	5025,85	-	-
91	3p4f	³ D ₁	4934,45	4924,49	5039,39	5029,40	-	-
92	3p4f	³ G ₅	4945,50	4935,54	5050,14	5040,14	-	-
93	3p4f	¹ F ₃	4948,20	4938,25	5052,93	5042,93	-	-
94	3p4f	³ F ₄	4953,58	4943,63	5058,35	5048,36	-	-
95	3d4p	³ D ₀₂	4955,36	4944,55	5062,38	5051,56	-	-
96	3d4p	³ P ₀₁	4960,08	4949,27	5067,31	5056,48	-	-
97	3d4p	³ F ₀₃	4960,98	4950,17	5068,28	5057,46	-	-
98	3p4f	¹ D ₂	4962,80	4952,85	5067,72	5057,73	-	-
99	3d4p	³ P ₀₀	4962,16	4951,34	5069,47	5058,64	-	-
100	3d4d	³ D ₁	5034,82	5023,39	5140,25	5128,76	-	-
101	3d4d	³ G ₃	5034,92	5023,48	5140,37	5128,89	-	-
102	3d4d	³ F ₂	5051,11	5039,67	5156,08	5144,60	-	-
103	3d4d	³ P ₀	5065,92	5054,48	5170,80	5159,32	-	-
104	3d4p	³ P ₀₂	5075,51	5064,64	5182,59	5171,70	-	-
105	3d4p	³ F ₀₄	5075,68	5064,80	5182,73	5171,85	-	-
106	3d4p	³ D ₀₃	5077,70	5066,83	5184,96	5174,09	-	-
107	3d4p	¹ P ₀₁	5085,48	5074,61	5193,16	5182,29	-	-
108	3d4d	¹ F ₃	5090,39	5078,92	5195,12	5183,61	-	-
109	3d4d	³ D ₂	5093,51	5082,05	5198,33	5186,82	-	-
110	3d4d	³ G ₄	5096,29	5084,82	5201,14	5189,63	-	-
111	3d4d	³ S ₁	5098,14	5086,68	5203,01	5191,50	-	-

Tablo 4.17. (Devamı)

Sıra	Seviyeler	Bu Çalışma				Diğer Çalışmalar	Fark (%)	
		VV	VV+Breit +QED	CV	CV+Breit +QED			
112	3d4f	³ H ^o ₄	5129,54	5118,07	5234,66	5223,15	-	-
113	3d4f	³ F ^o ₂	5137,12	5125,64	5241,88	5230,35	-	-
114	3d4f	³ G ^o ₃	5150,12	5138,63	5254,76	5243,23	-	-
115	3d4f	³ D ^o ₁	5157,51	5146,02	5262,08	5250,55	-	-
116	3d4f	¹ G ^o ₄	5160,15	5148,66	5264,79	5253,26	-	-
117	3d4d	³ F ₃	5159,97	5148,47	5265,18	5253,64	-	-
118	3d4d	³ P ₂	5164,41	5152,91	5269,56	5258,02	-	-
119	3d4f	³ F ^o ₃	5165,07	5153,58	5269,65	5258,12	-	-
120	3d4f	³ H ^o ₅	5166,66	5155,17	5271,68	5260,15	-	-
121	3d4d	¹ G ₄	5167,54	5156,04	5272,65	5261,11	-	-
122	3d4d	³ P ₁	5168,50	5156,99	5273,57	5262,03	-	-
123	3d4f	³ P ^o ₂	5170,98	5159,50	5275,53	5264,00	-	-
124	3d4d	³ D ₃	5202,92	5191,39	5307,56	5295,99	-	-
125	3d4d	³ G ₅	5206,22	5194,69	5310,90	5299,33	-	-
126	3d4d	¹ P ₁	5207,82	5196,29	5312,50	5300,93	-	-
127	3d4d	³ F ₄	5219,76	5208,23	5324,61	5313,04	-	-
128	3d4d	¹ D ₂	5224,92	5213,40	5329,91	5318,34	-	-
129	3d4d	¹ S ₀	5240,28	5228,76	5345,83	5334,28	-	-
130	3d4f	³ G ^o ₄	5258,98	5247,43	5363,73	5352,14	-	-
131	3d4f	³ D ^o ₃	5261,71	5250,16	5366,42	5354,83	-	-
132	3d4f	³ D ^o ₂	5262,77	5251,23	5367,42	5355,83	-	-
133	3d4f	¹ H ^o ₅	5268,83	5257,28	5373,80	5362,21	-	-
134	3d4f	³ H ^o ₆	5269,66	5258,12	5374,42	5362,84	-	-
135	3d4f	³ P ^o ₁	5270,88	5259,34	5375,46	5363,88	-	-
136	3d4f	³ P ^o ₀	5271,90	5260,36	5376,51	5364,92	-	-
137	3d4f	³ F ^o ₄	5273,14	5261,60	5377,72	5366,14	-	-
138	3d4f	¹ D ^o ₂	5285,49	5273,94	5390,00	5378,41	-	-
139	3d4f	¹ F ^o ₃	5292,87	5281,32	5397,50	5385,91	-	-
140	3d4f	³ G ^o ₅	5296,36	5284,80	5401,26	5389,66	-	-
141	3d4f	¹ P ^o ₁	5302,29	5290,74	5406,97	5395,38	-	-

^aHamasha ve Alshaiub, 2012; ^bVilkas ve ark., 2007; ^cHu ve ark., 2014; ^dSantana, 2016

Şekil 4.7.'de enerji seviyelerinin FAC kodu (Hamasha ve Alshaiub, 2012) sonuçlarıyla karşılaştırılması gösterilmektedir. Şekil 4.7.'den uyumun oldukça iyi olduğu görülmektedir.



Şekil 4.7. Au⁶⁷⁺ iyonunun enerji seviyelerinin FAC kodu sonuçları (Hamasha ve Alshaiub, 2012) ile karşılaştırılması

Magnezyum benzeri altının (Au⁶⁷⁺) CV+Breit+QED çalışmasından elde edilen seviyeler arasındaki elektrik dipol geçişler için 80660 geçiş elde edildi. Tablo 4.18. bu geçişler için dalgaboyu, ağırlıklı salıncı şiddeti ve ışmalı geçiş oranlarını göstermektedir. Mevcut kaynaklardaki sonuçlar *jj*-çiftleniminde olduğundan bu tabloda seviyeler *jj*-çiftlenimi gösteriminde verildi. Mevcut kaynaklarda kısıtlı sayıda veri olduğundan, GRASP kodunu (Dyall ve ark., 1989) kullanarak çok konfigürasyonlu Dirac-Fock hesabı ile bir çalışma yaparak bu çalışmadan elde edilen AUTOSTRUCTURE sonuçları karşılaştırıldı. GRASP kodunda *3snl*, *3pnl* ve *3dnl* ($n=3-4$ ve $l=0-3$) konfigürasyonları dikkate alındı.

Tablo 4.18. incelendiğinde, dalgaboyları, ağırlıklı salıncı şiddetleri ve geçiş olasılıkları, Hamasha ve Alshaiub (2012) çalışma sonuçları ile çok iyi uyum içerisindedir. Şekil 4.8.'de, elektrik dipol geçişlerinin geçiş olasılıkları FAC kodu (Hamasha ve Alshaiub, 2012) sonuçlarıyla karşılaştırılmaktadır. Şekilden $(3p_{3/2}4d_{5/2})_{J=2} - (3p_{3/2}^2)_{J=2}$ seviyeleri arası geçişi hariç, geçiş olasılıkları Hamasha ve Alshaiub (2012) tarafından verilen sonuçlarla uyumlu olduğu görülmektedir. Au⁶⁷⁺ iyonu için daha kapsamlı sonuçlar Konan ve arkadaşlarının (2014b) sunduğu çalışmada verilmektedir.

Tablo 4.18. Au⁶⁷⁺ iyonunun elektrik dipol (E1) geçişleri için dalgaboyları, λ (Å), ağırlıklı salıncı şiddetleri, gf ve geçiş olasılıkları, A_r (s⁻¹)

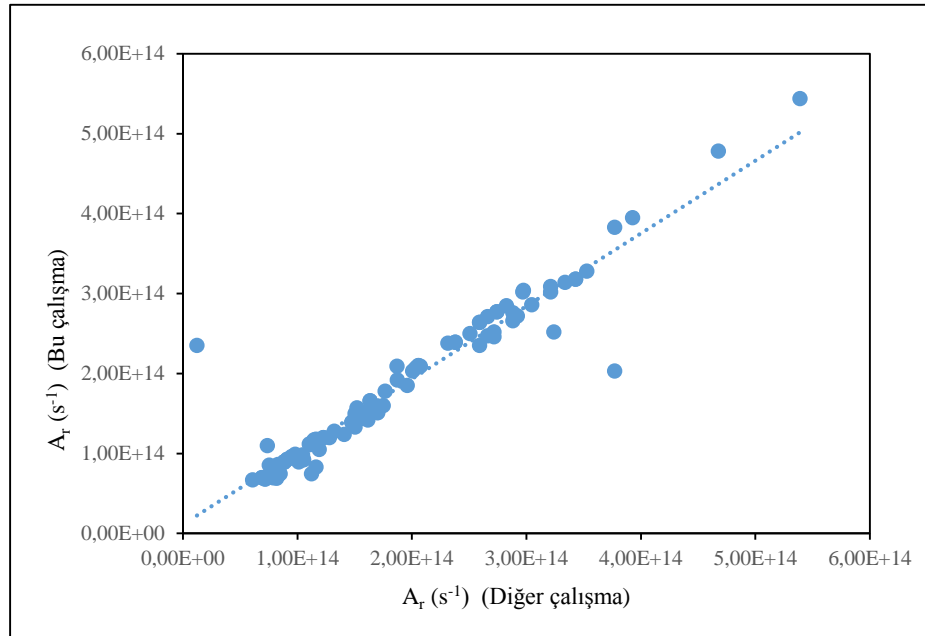
Geçişler				λ (Å)		gf		A_r (s ⁻¹)	
Alt Seviye	J	Üst Seviye	J	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar ^a
3s _{1/2} 3p _{3/2}	1	3s _{1/2} 4s _{1/2}	0	4,0228*	4,0310	0,1745*	0,1651	7,192(13)*	6,780(13)
				4,0301 ⁺		0,1643 ⁺		6,747(13) ⁺	
3s _{1/2} 3p _{1/2}	0	3s _{1/2} 4d _{3/2}	1	3,0330*	3,1174	0,3333*	0,3165	8,057(13)*	7,240(13)
				3,1167 ⁺		0,3095 ⁺		7,086(13) ⁺	
3s _{1/2} 3p _{1/2}	1	3s _{1/2} 4d _{3/2}	2	3,0469*	3,1320	0,8917*	0,8803	1,281(14)*	1,200(14)
				3,1313 ⁺		0,8699 ⁺		1,184(14) ⁺	
3s _{1/2} 3p _{3/2}	1	3s _{1/2} 4d _{5/2}	2	3,4550*	3,5654	1,1840*	1,2163	1,323(14)*	1,280(14)
				3,5639 ⁺		1,2147 ⁺		1,276(14) ⁺	
3s _{1/2} 3p _{3/2}	2	3s _{1/2} 4d _{5/2}	3	3,4144*	3,5230	2,1400*	2,0799	1,749(14)*	1,600(14)
				3,5215 ⁺		2,0520 ⁺		1,577(14) ⁺	
3s _{1/2} 3d _{3/2}	1	3s _{1/2} 4f _{5/2}	2	3,5958*	3,7170	2,8320*	2,8188	2,922(14)*	2,720(14)
				3,7191 ⁺		0,0294 ⁺		2,838(12) ⁺	
3s _{1/2} 3d _{3/2}	2	3s _{1/2} 4f _{5/2}	3	3,6103*	3,7307	3,4320*	3,6441	2,509(14)*	2,500(14)
3s _{1/2} 3d _{5/2}	2	3s _{1/2} 4f _{7/2}	3	3,7125*	3,8359	4,4080*	4,4199	3,048(14)*	2,860(14)
				3,8356 ⁺		4,3735 ⁺		2,832(14) ⁺	
3s _{1/2} 3d _{5/2}	3	3s _{1/2} 4f _{7/2}	4	3,6981*	3,8213	6,3310*	6,2683	3,431(14)*	3,180(14)
				3,8211 ⁺		6,1996 ⁺		3,147(14) ⁺	
3s _{1/2} 3p _{1/2}	1	3p _{1/2} 4p _{1/2}	0	3,1154*	3,2097	0,1096*	0,1322	7,533(13)*	8,560(13)
				3,2087 ⁺		0,1309 ⁺		8,481(13) ⁺	
3s _{1/2} 3p _{3/2}	2	3p _{3/2} 4p _{1/2}	1	3,1152*	3,2027	0,2661*	0,3086	6,098(13)*	6,690(13)
				3,2015 ⁺		0,3065 ⁺		6,650(13) ⁺	
3p _{1/2} 3p _{3/2}	1	3p _{1/2} 4s _{1/2}	0	3,9008*	4,0169	0,1870*	0,1671	8,199(13)*	6,910(13)
				4,0160 ⁺		0,1662 ⁺		6,874(13) ⁺	
3p _{1/2} ²	0	3p _{1/2} 4d _{3/2}	1	3,0764*	3,1448	0,6476*	0,6986	1,521(14)*	1,570(14)
				3,1442 ⁺		0,6914 ⁺		1,555(14) ⁺	
3p _{1/2} 3p _{3/2}	1	3p _{1/2} 4d _{5/2}	2	3,4491*	3,5419	1,4150*	1,3486	1,586(14)*	1,440(14)
				3,5404 ⁺		1,3320 ⁺		1,418(14) ⁺	
3p _{1/2} 3p _{3/2}	2	3p _{1/2} 4d _{5/2}	3	3,4435*	3,5378	1,5280*	1,5771	1,228(14)*	1,200(14)
				3,5365 ⁺		1,5128 ⁺		1,153(14) ⁺	
3p _{1/2} 3p _{3/2}	1	3p _{3/2} 4d _{3/2}	0	3,0524*	3,1260	0,1601*	0,1720	1,146(14)*	1,170(14)
				3,1253 ⁺		0,1702 ⁺		1,163(14) ⁺	
3p _{1/2} 3p _{3/2}	1	3p _{3/2} 4d _{3/2}	1	3,0553*	3,1295	0,3986*	0,4238	9,494(13)*	9,620(13)
				3,1287 ⁺		0,4193 ⁺		9,524(13) ⁺	
3p _{1/2} 3p _{3/2}	2	3p _{3/2} 4d _{3/2}	3	3,0548*	3,1315	0,8119*	0,8874	8,291(13)*	8,630(13)
3p _{3/2} ²	0	3p _{3/2} 4d _{5/2}	1	3,4580*	3,5599	0,9136*	0,8577	1,699(14)*	1,510(14)
				3,5585 ⁺		0,8466 ⁺		1,487(14) ⁺	
3p _{3/2} ²	2	3p _{3/2} 4d _{5/2}	2	3,4452*	3,5468	0,6564*	1,0350	0,738(14)*	1,100(14)
				3,5453 ⁺		1,0210 ⁺		1,084(14) ⁺	
3p _{3/2} ²	2	3p _{3/2} 4d _{5/2}	3	3,4479*	3,5480	2,8890*	3,1470	2,316(14)*	2,380(14)
				3,5465 ⁺		3,0352 ⁺		2,300(14) ⁺	
3p _{1/2} 3d _{3/2}	1	3p _{1/2} 4f _{5/2}	2	3,7260*	3,7384	2,7690*	2,8338	2,661(14)*	2,710(14)
				3,7385 ⁺		2,8188 ⁺		2,691(14) ⁺	
3p _{1/2} 3d _{3/2}	2	3p _{1/2} 4f _{5/2}	3	3,7232*	3,7068	4,6740*	4,4547	3,213(14)*	3,090(14)
				3,7069 ⁺		4,4299 ⁺		3,072(14) ⁺	
3p _{1/2} 3d _{5/2}	2	3p _{1/2} 4f _{7/2}	3	3,7232*	3,8291	4,6740*	4,6460	3,213(14)*	3,020(14)
				3,8291 ⁺		4,5953 ⁺		2,987(14) ⁺	
3p _{1/2} 3d _{5/2}	3	3p _{1/2} 4f _{7/2}	4	3,7256*	3,8311	6,2500*	6,2251	3,337(14)*	3,140(14)
				3,8310 ⁺		6,1569 ⁺		3,109(14) ⁺	
3p _{3/2} 3d _{3/2}	0	3p _{3/2} 4f _{5/2}	1	3,6045*	3,7185	0,9575*	0,9592	1,639(14)*	1,540(14)
				3,7185 ⁺		0,9537 ⁺		1,534(14) ⁺	
3p _{3/2} 3d _{3/2}	1	3p _{3/2} 4f _{5/2}	1	3,6055*	3,7191	0,8623*	0,8646	1,475(14)*	1,390(14)
3p _{3/2} 3d _{3/2}	1	3p _{3/2} 4f _{5/2}	2	3,6099*	3,7239	1,9140*	1,9186	1,959(14)*	1,850(14)
				3,7235 ⁺		0,0793 ⁺		7,635(12) ⁺	
3p _{3/2} 3d _{3/2}	2	3p _{3/2} 4f _{5/2}	2	3,5984*	3,7111	1,0160*	1,0131	10,460(13)*	9,820(13)
				3,7111 ⁺		1,0070 ⁺		9,754(13) ⁺	

Tablo 4.18. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)		gf		A_r (s ⁻¹)	
Alt Seviye	J	Üst Seviye	J	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar ^a
3p _{3/2} 3d _{3/2}	2	3p _{3/2} 4f _{5/2}	3	3,7048*	3,7194	3,9120*	3,5736	2,716(14)*	2,460(14)
				3,7194 ⁺		3,5558 ⁺		2,449(14) ⁺	
3p _{3/2} 3d _{3/2}	3	3p _{3/2} 4f _{5/2}	4	3,7220*	3,7232	5,3860*	5,1583	2,882(14)*	2,760(14)
3p _{3/2} 3d _{5/2}	1	3p _{3/2} 4f _{7/2}	2	3,7260*	3,8424	2,7690*	2,7347	2,661(14)*	2,470(14)
				3,8423 ⁺		2,7059 ⁺		2,445(14) ⁺	
3p _{3/2} 3d _{5/2}	2	3p _{3/2} 4f _{7/2}	3	3,7048*	3,8199	3,9120*	3,8608	2,716(14)*	2,520(14)
				3,8197 ⁺		3,8178 ⁺		2,493(14) ⁺	
3p _{3/2} 3d _{5/2}	3	3p _{3/2} 4f _{7/2}	4	3,7220*	3,8374	5,3860*	5,2889	2,882(14)*	2,660(14)
3p _{3/2} 3d _{5/2}	4	3p _{3/2} 4f _{7/2}	5	3,6950*	3,8086	7,9410*	7,8471	3,527(14)*	3,280(14)
				3,8084 ⁺		7,7595 ⁺		3,244(14) ⁺	
3p _{1/2} 3d _{3/2}	1	3d _{3/2} 4d _{3/2}	0	3,0571*	3,1374	0,1547*	0,1652	1,104(14)*	1,120(14)
				3,1367 ⁺		0,1636 ⁺		1,109(14) ⁺	
3p _{1/2} 3d _{3/2}	1	3d _{3/2} 4d _{3/2}	1	3,0803*	3,1623	0,4182*	0,4455	9,799(13)*	9,910(13)
				3,1616 ⁺		0,4409 ⁺		9,808(13) ⁺	
3p _{1/2} 3d _{3/2}	2	3d _{3/2} 4d _{3/2}	3	3,0517*	3,1317	1,0970*	1,1585	1,123(14)*	1,130(14)
				3,1310 ⁺		1,1468 ⁺		1,115(14) ⁺	
3p _{3/2} 3d _{3/2}	0	3d _{3/2} 4d _{5/2}	1	3,4423*	3,5528	0,4402*	0,4110	8,261(13)*	7,240(13)
				3,5510 ⁺		0,4055 ⁺		7,150(13) ⁺	
3p _{3/2} 3d _{3/2}	1	3d _{3/2} 4d _{5/2}	1	3,4432*	3,5533	0,4206*	0,3954	7,889(13)*	6,970(13)
3p _{3/2} 3d _{3/2}	1	3d _{3/2} 4d _{5/2}	2	3,4477*	3,5584	0,9394*	0,8766	1,054(14)*	9,240(13)
				3,5565 ⁺		0,0289 ⁺		3,050(12) ⁺	
3p _{3/2} 3d _{3/2}	3	3d _{3/2} 4d _{5/2}	4	3,4480*	3,5560	2,4120*	2,5520	1,504(14)*	1,500(14)
3p _{1/2} 3d _{5/2}	2	3d _{5/2} 4d _{3/2}	1	3,0547*	3,1350	0,4722*	0,5008	1,125(14)*	1,130(14)
				3,1343 ⁺		0,4957 ⁺		1,122(14) ⁺	
3p _{3/2} 3d _{3/2}	2	3d _{3/2} 4d _{5/2}	3	3,4403*	3,5502	1,7500*	1,6402	1,409(14)*	1,240(14)
				3,5487 ⁺		1,6172 ⁺		1,224(14) ⁺	
3p _{1/2} 3d _{5/2}	2	3d _{5/2} 4d _{3/2}	2	3,0578*	3,1385	0,6213*	0,6581	8,864(13)*	8,920(13)
				3,1378 ⁺		0,6515 ⁺		8,827(13) ⁺	
3p _{1/2} 3d _{5/2}	3	3d _{5/2} 4d _{3/2}	4	3,0590*	3,1398	1,4010*	1,4733	1,110(14)*	1,110(14)
3p _{3/2} 3d _{5/2}	1	3d _{5/2} 4d _{5/2}	0	3,4401*	3,5496	0,3022*	0,2842	1,703(14)*	1,510(14)
				3,5482 ⁺		0,2806 ⁺		1,487(14) ⁺	
3p _{3/2} 3d _{5/2}	1	3d _{5/2} 4d _{5/2}	1	3,4722*	3,5846	0,6455*	0,6051	1,190(14)*	1,050(14)
				3,5830 ⁺		0,5970 ⁺		1,034(14) ⁺	
3p _{3/2} 3d _{5/2}	2	3d _{5/2} 4d _{5/2}	2	3,4231*	3,5317	0,8881*	0,8364	1,011(14)*	8,950(13)
				3,5303 ⁺		0,8260 ⁺		8,841(13) ⁺	
3p _{3/2} 3d _{5/2}	2	3d _{5/2} 4d _{5/2}	3	3,4443*	3,5549	1,0590*	0,9914	8,506(13)*	7,480(13)
				3,5534 ⁺		0,9787 ⁺		7,386(13) ⁺	
3p _{3/2} 3d _{5/2}	3	3d _{5/2} 4d _{5/2}	3	3,4644*	3,5755	1,0050*	0,9493	7,981(13)*	7,080(13)
				3,5740 ⁺		0,9370 ⁺		6,990(13) ⁺	
3p _{3/2} 3d _{5/2}	3	3d _{5/2} 4d _{5/2}	4	3,4480*	3,5584	2,4120*	2,2784	1,504(14)*	1,330(14)
				3,5570 ⁺		2,2445 ⁺		1,315(14) ⁺	
3p _{3/2} 3d _{5/2}	4	3d _{5/2} 4d _{5/2}	5	3,4300*	3,5389	3,1330*	2,9233	1,615(14)*	1,420(14)
				3,5374 ⁺		2,8859 ⁺		1,399(14) ⁺	
3d _{3/2} ²	0	3d _{3/2} 4f _{5/2}	1	3,7325*	3,7461	1,8610*	1,9073	2,970(14)*	3,020(14)
3d _{3/2} ²	2	3d _{3/2} 4f _{5/2}	2	3,7242*	3,7356	2,1170*	2,1648	2,036(14)*	2,070(14)
				3,7356 ⁺		2,1523 ⁺		2,058(14) ⁺	
3d _{3/2} ²	2	3d _{3/2} 4f _{5/2}	3	3,7099*	3,7225	6,7560*	6,9425	4,678(14)*	4,780(14)
				3,7226 ⁺		6,9079 ⁺		4,750(14) ⁺	
3d _{3/2} 3d _{5/2}	1	3d _{3/2} 4f _{7/2}	2	3,8374*	3,8440	2,6270*	2,6477	2,380(14)*	2,390(14)
				3,8440 ⁺		2,6188 ⁺		2,364(14) ⁺	
3d _{3/2} 3d _{5/2}	2	3d _{3/2} 4f _{7/2}	2	3,8311*	3,8367	0,7601*	0,7704	6,908(13)*	6,980(13)
				3,8367 ⁺		0,7619 ⁺		6,905(13) ⁺	
3d _{3/2} 3d _{5/2}	2	3d _{3/2} 4f _{7/2}	3	3,8381*	3,8442	3,2050*	3,2323	2,073(14)*	2,090(14)
3d _{3/2} 3d _{5/2}	3	3d _{3/2} 4f _{7/2}	3	3,8240*	3,8285	1,2540*	1,2744	8,171(13)*	8,290(13)
3d _{3/2} 3d _{5/2}	3	3d _{3/2} 4f _{7/2}	4	3,7163*	3,8347	4,8270*	4,6623	2,591(14)*	2,350(14)
				3,8346 ⁺		4,6151 ⁺		2,326(14) ⁺	
3d _{3/2} 3d _{5/2}	4	3d _{3/2} 4f _{7/2}	5	3,8423*	3,8462	4,8830*	4,9467	2,006(14)*	2,030(14)
				3,8462 ⁺		4,9005 ⁺		2,009(14) ⁺	
3d _{3/2} 3d _{5/2}	1	3d _{5/2} 4f _{5/2}	0	3,7212*	3,7316	0,6176*	0,6341	2,975(14)*	3,040(14)

Tablo 4.18. (Devamı)

Geçişler				λ (Å)		gf		A_r (s ⁻¹)	
Alt Seviye	J	Üst Seviye	J	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar ^a
3d _{3/2} 3d _{5/2}	1	3d _{5/2} 4f _{5/2}	1	3,7224* 3,7331 ⁺	3,7330	1,2820* 1,3064 ⁺	1,3139	2,058(14)* 2,084(14) ⁺	2,100(14)
3d _{3/2} 3d _{5/2}	2	3d _{5/2} 4f _{5/2}	1	3,7164* 3,7262 ⁺	3,7261	0,5480* 0,5559 ⁺	0,5590	8,832(13)* 8,902(13) ⁺	8,950(13)
3d _{3/2} 3d _{5/2}	1	3d _{5/2} 4f _{5/2}	2	3,7314* 3,7427 ⁺	3,7426	0,9504* 0,9688 ⁺	0,9746	9,106(13)* 9,227(13) ⁺	9,280(13)
3d _{3/2} 3d _{5/2}	2	3d _{5/2} 4f _{5/2}	2	3,7254* 3,7358 ⁺	3,7357	1,7010* 1,7338 ⁺	1,7407	1,635(14)* 1,657(14) ⁺	1,660(14)
3d _{5/2} ²	2	3d _{5/2} 4f _{7/2}	2	3,8406* 3,8438 ⁺	3,8439	3,0330* 3,0383 ⁺	3,0692	2,743(14)* 2,743(14) ⁺	2,770(14)
3d _{3/2} 3d _{5/2}	2	3d _{5/2} 4f _{5/2}	3	3,7265* 3,7373 ⁺	3,7372	2,7310* 2,7938 ⁺	2,8131	1,874(14)* 1,906(14) ⁺	1,920(14)
3d _{3/2} 3d _{5/2}	3	3d _{5/2} 4f _{5/2}	3	3,7133* 3,7225 ⁺	3,7224	1,6830* 1,7126 ⁺	1,7195	1,163(14)* 1,178(14) ⁺	1,180(14)
3d _{3/2} 3d _{5/2}	3	3d _{5/2} 4f _{5/2}	4	3,7163* 3,7260 ⁺	3,7260	4,8270* 4,9113 ⁺	4,9401	2,591(14)* 2,622(14) ⁺	2,640(14)
3d _{3/2} 3d _{5/2}	4	3d _{5/2} 4f _{5/2}	5	3,7245* 3,7332 ⁺	3,7331	8,6280* 8,7415 ⁺	8,8050	3,772(14)* 3,803(14) ⁺	3,830(14)
3d _{5/2} ²	0	3d _{5/2} 4f _{7/2}	1	3,8560* 3,8608 ⁺	3,8608	1,8900* 1,8860 ⁺	1,9081	2,826(14)* 2,814(14) ⁺	2,850(14)
3d _{5/2} ²	2	3d _{5/2} 4f _{7/2}	3	3,8317* 3,8357 ⁺	3,8357	6,0530* 6,0720 ⁺	6,1026	3,929(14)* 3,910(14) ⁺	3,950(14)
3d _{5/2} ²	2	3d _{5/2} 4f _{7/2}	2	3,8406* 3,8438 ⁺	3,8439	3,0330* 3,0383 ⁺	3,0692	2,743(14)* 2,743(14) ⁺	2,770(14)
3d _{5/2} ²	4	3d _{5/2} 4f _{7/2}	4	3,8436* 3,8158*	3,8453	3,5230* 12,9400*	3,5582	1,767(14)* 5,390(14)*	1,780(14)
3d _{5/2} ²	4	3d _{5/2} 4f _{7/2}	5	3,8193 ⁺	3,8192	12,9481 ⁺	13,0736	5,383(14) ⁺	5,440(14)

* AUTOSTRUCTURE ; ⁺ GRASP; ^a Hamasha ve Alshaiub, 2012Şekil 4.8. Au⁶⁷⁺ iyonunun E1 geçişlerine ait geçiş olasılıklarının FAC kodu sonuçları (Hamasha ve Alshaiub, 2012) ile karşılaştırılması

Au⁶⁷⁺ iyonunun CV+Breit+QED çalışmasından elde edilen seviyeler arasındaki yasaklı geçişleri için 133626 E2 ve M1, ve 128866 E3 ve M2 geçişi elde edildi. Tablo 4.19. yasaklı geçişler (E2, M1 ve M2) için dalgaboyu, ağırlıklı salınıcı şiddeti ve geçiş oranlarını göstermektedir. Mevcut kaynaklardaki sonuçlar *jj*-çiftleniminde olduğundan bu tabloda yine seviyeler *jj*-çiftlenimi gösteriminde verilmektedir. E2 geçişleri incelendiğinde dalgaboyları, ağırlıklı salınıcı şiddeti ve geçiş olasılıkları mevcut kaynaklardaki sonuçlarla (Vilkas ve ark., 2007; Hamasha, 2013) iyi uyum içerisindedir. Sadece 3p3d-3d4f seviyeleri arası bazı geçişlerde ağırlıklı salınıcı şiddeti karşılaştırma değerinden üç kat kadar farklıdır. M1 ve M2 geçişlerinde ise dalgaboyları ve geçiş olasılıkları uyumlu olmasına rağmen, ağırlıklı salınıcı şiddetlerinin uyumlu olmadığı görülmektedir. Sonuçlar incelendiğinde, düşük seviyelere ait değerler MR-MP ile elde edilen sonuçlarla (Vilkas ve ark., 2007) oldukça uyumludur.

Tablo 4.19. Au⁶⁷⁺ iyonunun yasaklı geçişlerinin (E2, M1 ve M2) dalgaboyları, λ (Å), ağırlıklı salınıcı şiddetleri, gf ve geçiş olasılıkları, A_r (s⁻¹)

Geçişler				Geçiş türü	λ (Å)		gf		A_r (s ⁻¹)	
Alt seviye	J	Üst seviye	J		Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar
3s _{1/2} 3p _{1/2}	0	3s _{1/2} 3p _{3/2}	2	E2	24,53	24,597 ^a	4,62(-06)	-	1,02(07)	9,97(06) ^a
3s _{1/2} 3p _{3/2}	1	3s _{1/2} 3p _{3/2}	2	E2	25,45	25,470 ^a	6,73(-06)	-	1,38(07)	1,36(07) ^a
3p _{1/2} 3d _{5/2}	2	3d _{5/2} 4f _{5/2}	2	E2	2,99	3,0567 ^b	5,39(-03)	1,40(-03) ^b	0,80(12)	1,00(12) ^b
3p _{1/2} 3p _{3/2}	1	3p _{3/2} 4f _{5/2}	1	E2	2,98	3,0507 ^b	3,83(-03)	3,83(-03) ^b	9,59(11)	9,16(11) ^b
3p _{1/2} 3d _{3/2}	1	3d _{3/2} 4f _{5/2}	1	E2	3,38	3,0684 ^b	4,58(-03)	3,78(-03) ^b	8,91(11)	8,94(11) ^b
3p _{1/2} 3d _{5/2}	2	3d _{5/2} 4f _{5/2}	2	E2	2,99	3,0641 ^b	5,39(-03)	5,33(-03) ^b	8,06(11)	7,57(11) ^b
3p _{1/2} 3p _{3/2}	1	3p _{3/2} 4f _{5/2}	1	E2	2,98	3,0539 ^b	3,83(-03)	4,88(-03) ^b	9,59(11)	6,99(11) ^b
3p _{1/2} 3d _{3/2}	1	3d _{3/2} 4f _{5/2}	1	E2	3,38	3,0839 ^b	4,58(-03)	4,97(-03) ^b	8,91(11)	6,98(11) ^b
3s _{1/2} 3p _{1/2}	1	3p _{1/2} 4d _{3/2}	1	E2	2,90	2,9949 ^b	2,37(-03)	2,65(-03) ^b	6,30(11)	6,56(11) ^b
3p _{1/2} 3d _{3/2}	2	3d _{3/2} 4f _{5/2}	2	E2	3,37	3,0458 ^b	4,23(-03)	5,81(-03) ^b	4,97(11)	5,97(11) ^b
3s _{1/2} 3d _{5/2}	3	3d _{5/2} 4d _{3/2}	3	E2	2,92	2,9929 ^b	3,77(-03)	2,36(-03) ^b	4,21(11)	5,85(11) ^b
3s _{1/2} 3p _{3/2}	2	3p _{3/2} 4d _{3/2}	2	E2	2,91	2,9797 ^b	2,99(-03)	2,31(-03) ^b	4,72(11)	5,79(11) ^b
3s _{1/2} 3d _{3/2}	1	3d _{3/2} 4d _{5/2}	1	E2	2,88	2,9614 ^b	2,39(-03)	2,21(-03) ^b	6,41(11)	5,61(11) ^b
3s _{1/2} 3p _{3/2}	1	3p _{3/2} 4d _{5/2}	1	E2	2,92	2,9701 ^b	2,74(-03)	2,22(-03) ^b	7,14(11)	5,61(11) ^b
3s _{1/2} 3d _{5/2}	2	3d _{5/2} 4d _{5/2}	2	E2	2,93	2,9802 ^b	2,29(-03)	2,16(-03) ^b	3,57(11)	5,41(11) ^b
3p _{3/2} 3d _{5/2}	2	3d _{5/2} 4f _{7/2}	2	E2	2,98	3,4658 ^b	2,10(-03)	6,48(-03) ^b	3,17(11)	5,14(11) ^b
3s _{1/2} 3d _{5/2}	3	3d _{5/2} 4d _{3/2}	3	E2	2,92	2,9961 ^b	3,77(-03)	3,39(-03) ^b	4,21(11)	5,04(11) ^b
3s _{1/2} 3p _{3/2}	1	3s _{1/2} 3p _{3/2}	2	M1	25,45	25,470 ^a	6,73(-06)	-	5,75(08)	5,59(08) ^a
3p _{1/2} 3p _{3/2}	1	3p _{1/2} 4p _{1/2}	0	M1	3,10	3,9029 ^b	0,00	7,09(-06) ^b	2,42(09)	3,11(09) ^b
3p _{1/2} 3p _{3/2}	1	3p _{3/2} 4p _{3/2}	0	M1	3,77	3,1813 ^b	0,00	2,52(-06) ^b	2,51(09)	1,66(09) ^b
3p _{3/2} 3d _{5/2}	2	3d _{5/2} 4p _{1/2}	2	M1	3,11	3,9206 ^b	6,69(-04)	1,35(-05) ^b	1,14(09)	1,18(09) ^b
3p _{1/2} 3p _{3/2}	2	3p _{3/2} 4p _{3/2}	3	M1	3,13	3,2025 ^b	3,61(-04)	1,27(-05) ^b	1,63(09)	1,18(09) ^b
3p _{3/2} 3d _{5/2}	3	3d _{5/2} 4p _{1/2}	3	M1	3,13	3,9397 ^b	8,10(-04)	1,54(-05) ^b	1,25(09)	9,45(08) ^b
3p _{3/2} 3d _{5/2}	1	3d _{5/2} 4p _{1/2}	2	M1	3,14	3,9634 ^b	3,10(-04)	1,05(-05) ^b	1,13(09)	8,91(08) ^b
3p _{3/2} 3d _{5/2}	4	3p _{3/2} 4d _{3/2}	3	M1	3,77	3,9516 ^b	2,26(-04)	1,25(-05) ^b	1,80(08)	7,62(08) ^b
3s _{1/2} 3p _{1/2}	1	3s _{1/2} 4p _{3/2}	1	M1	3,81	3,1955 ^b	1,14(-03)	2,48(-06) ^b	4,55(08)	5,40(08) ^b

Tablo 4.19. (Devamı)

Geçişler				Geçiş türü	λ (Å)		gf		A_r (s ⁻¹)	
Alt seviye	J	Üst seviye	J		Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar	Bu çalışma	Diğer çalışmalar
3s _{1/2} 3p _{3/2}	1	3s _{1/2} 4p _{1/2}	1	M1	3,11	3,9450 ^b	6,35(-04)	3,61(-06) ^b	7,31(08)	5,17(08) ^b
3s ²	0	3s _{1/2} 3p _{3/2}	2	M2	18,79	18,803 ^a	0,00	-	7,25(05)	7,37(05) ^a
3p _{1/2} ²	0	3s _{1/2} 3p _{3/2}	2	M2	44,93	42,781 ^a	0,00	-	7,41(01)	7,51(01) ^a
3d _{3/2} 3d _{5/2}	4	3d _{3/2} 4f _{7/2}	5	M2	3,72	3,8462 ^b	8,90(-07)	7,95(-05) ^b	4,75(09)	3,26(09) ^b
3d _{5/2} ²	4	3d _{5/2} 4f _{5/2}	5	M2	3,82	3,8192 ^b	9,88(-07)	6,21(-05) ^b	2,73(09)	2,58(09) ^b
3d _{5/2} ²	4	3d _{5/2} 4f _{7/2}	6	M2	3,85	3,8495 ^b	4,54(-06)	6,30(-05) ^b	2,22(09)	2,18(09) ^b
3d _{3/2} 3d _{5/2}	3	3d _{3/2} 4f _{7/2}	5	M2	3,71	3,8274 ^b	1,24(-06)	2,20(-05) ^b	1,01(09)	9,10(08) ^b
3d _{3/2} 3d _{5/2}	2	3d _{5/2} 4f _{5/2}	0	M2	3,72	3,7247 ^b	0,00	1,16(-06) ^b	6,01(08)	5,59(08) ^b
3d _{3/2} 3d _{5/2}	4	3d _{5/2} 4f _{7/2}	6	M2	3,72	3,7318 ^b	1,78(-06)	1,39(-05) ^b	5,54(08)	5,11(08) ^b
3d _{3/2} 3d _{5/2}	3	3d _{5/2} 4f _{7/2}	5	M2	3,82	3,6859 ^b	2,50(-06)	1,14(-05) ^b	2,01(08)	5,09(08) ^b

^aVilkas ve ark., 2007; ^bHamasha, 2013

Mg benzeri altın iyonunda kendiliğinden iyonlaşma oranlarını hesaplamak için, Tablo 4.12.'de verilen konfigürasyon setinden farklı olarak 3s², 3s3p, 3s3d, 3s4s, 3s4p, 3s4d, 3s4f, 3p², 3p3d, 3p4s, 3d², 3d4s, 3d4f, 4s5p, 4s5d, 4s5f, 4s5g, 4s6d, 4p4f, 4p5p, 4p5g, 4p6g, 4d², 4d4f, 4d5g, 4f², 4f5s, 4f5d, 4f5f, 4f6d, 4f6f konfigürasyon seti dikkate alındı. 10¹³'den büyük kendiliğinden iyonlaşma oranları Tablo 4.20.'de verildi. Bu tabloda yeni seviyelere ait elektrik dipol geçişlerinin dalgaboyları ve geçiş olasılıkları da verilmektedir. Mevcut kaynaklarda Mg benzeri Au için bu kendiliğinden iyonlaşma oranlarına (A_a) ait veri bulunmadığından A_a verileri yenidir. Yine bu seviyeler arası E1 geçiş verileri de yenidir.

Tablo 4.20. Au⁶⁷⁺ iyonunun kendiliğinden iyonlaşma oranları, A_a (s⁻¹) ve elektrik dipol (E1) geçişlerinin dalgaboyları, λ (Å) ve geçiş olasılıkları, A_r (s⁻¹)

Geçişler				A _r (s ⁻¹)	λ (Å)	A _a (s ⁻¹)
Alt seviye	Üst seviye					
3d ²	¹ G ₄	4d4f	¹ H ₅	1,70(11)	1,9002	6,35(13)
3s4s	¹ S ₀	4s5p	¹ P ₀	1,85(13)	2,2091	5,56(13)
3d4s	¹ D ₂	4s5f	¹ F ₀	1,08(14)	2,6334	5,15(13)
3d4f	³ D ₃	4f ²	¹ G ₄	2,39(14)	3,7971	4,44(13)
3p4s	³ P ₀	4s5d	³ D ₁	1,02(13)	2,2550	3,92(13)
3p4s	³ P ₀	4s5d	³ D ₃	1,04(14)	2,4758	3,61(13)
4d ²	³ P ₂	4f5s	¹ F ₀	1,21(12)	8,9995	3,27(13)
3s4s	³ S ₁	4s5p	³ P ₀	2,83(13)	2,2035	3,01(13)
3s4s	³ S ₁	4s5p	³ P ₀	4,84(13)	2,2442	2,88(13)
3d4s	³ D ₂	4s5f	³ F ₀	9,45(13)	2,5742	2,73(13)
3p4s	³ P ₀	4s5d	³ D ₂	1,75(13)	2,4887	2,63(13)
3p4s	¹ P ₀	4s6d	¹ D ₂	3,18(13)	2,1383	2,58(13)
3d4f	³ H ₅	4f ²	¹ I ₆	1,73(14)	3,6808	2,51(13)
3d4s	³ D ₁	4s5f	³ F ₀	8,63(13)	2,5737	2,43(13)
3s4s	³ S ₁	4s5p	³ P ₀	3,29(13)	2,2437	2,29(13)
3d4s	³ D ₃	4s5f	³ F ₀	1,13(14)	2,6329	2,28(13)
3d4f	³ G ₅	4f ²	³ H ₆	5,39(14)	3,8120	2,06(13)

Tablo 4.20. (Devamı)

Geçişler				A_r (s ⁻¹)	λ (Å)	A_a (s ⁻¹)
Alt seviye	Üst seviye					
3p4s	³ P ₁ ^o	4s6d	³ D ₁	2,29(13)	1,9666	2,03(13)
3p4s	³ P ₂ ^o	4s6d	³ D ₃	3,53(13)	2,1365	2,03(13)
3d4f	³ D ₃ ^o	4f5f	¹ G ₄	1,23(13)	2,6309	2,00(13)
3d ²	¹ G ₄	4d4f	³ H ₅ ^o	1,05(12)	1,9113	1,93(13)
3d4f	¹ P ₁ ^o	4f5f	¹ S ₀	1,11(14)	2,6371	1,87(13)
3s4p	³ P ₁ ^o	4s5d	¹ D ₂	1,79(13)	2,2150	1,65(13)
3p4s	³ P ₁ ^o	4s6d	³ D ₂	6,83(13)	1,9665	1,41(13)
3d4f	¹ F ₃ ^o	4s5g	¹ G ₄	1,26(10)	2,9298	1,38(13)
4d4f	³ H ₅ ^o	4d5g	³ I ₆	8,67(13)	8,5160	1,29(13)
3d4f	³ G ₄ ^o	4s5g	³ G ₃	1,03(09)	2,9135	1,03(13)
4p4f	³ G ₄	4f6d	³ H ₅ ^o	1,59(13)	5,1683	1,03(13)

BÖLÜM 5. SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu çalışmada, yüksek iyonlaşmış büyük atom numaralı atomlardan tungsten (W, Z=74) ve altın (Au, Z=79) için atomik yapı hesaplamaları yapıldı. Her iki atomun sodyum benzeri (W^{63+} ve Au^{68+}) ve magnezyum benzeri (W^{62+} ve Au^{67+}) elektronik yapıları için enerji seviyeleri, ışımali geçişler ve kendiliğinden iyonlaşma oranlarını hesaplamak için Badnell (2011) tarafından geliştirilen AUTOSTRUCTURE atomik yapı kodu kullanıldı. Hesaplamalarda, elektronlar arası korelasyon, kuantum elektrodinamik (QED) ve relativistik katkıların hesaplamalar üzerindeki etkileri incelendi.

Elektronlar arası korelasyonun etkisi, dört iyon için de valans ve öz korelasyonları dikkate alınarak incelendi. Valans-valans korelasyonunda son alt tabakadan elektronlar 7h ve 7i'ye kadar uyarıldı. Öz-valans korelasyonunda ise, son alt tabakanın yanı sıra 2s veya 2p dolu alt tabakadan (öz) da üst tabakalara uyarılmalar dikkate alındı. Bu uyarılmaları içeren konfigürasyonlar seçilirken (özellikle öz tabakalardan uyarılmalarda) hesap sonuçlarının doğru elde edilebilmesi için bazı kısıtlamalar yapıldı ve öz uyarılmaları ancak 2s ve 2p alt tabakalarından belirli sayıda konfigürasyonlarla yetinildi. Hesaplama sonuçları valans-valans korelasyonu ve öz-valans korelasyonu bakımından karşılaştırıldığında, genelde öz-valans sonuçlarının diğer çalışma sonuçları ile daha uyumlu olduğu görüldü. Fakat bazı durumlarda da (W^{63+} iyonunda) 3d tabakasını içeren konfigürasyonlar dikkate alındığında yüksek seviyelerde valans-valans korelasyonuna göre hesaplamalar daha iyi sonuç vermektedir.

Relativistik ve kuantum elektrodinamik (QED) katkıları, yüksek Z'li atomlar için önemli olduğundan hesaplamalarda dikkate alındı. Dikkate alınan iyonlar için Breit relativistik etkileri (elektronlar arası manyetik etkileşim ve elektron-elektron etkileşiminin gecikme etkileri) ve QED (öz-enerji ve vakum polarizasyonu) katkıları

korelasyon etkileri ile beraber belirli bir sistem içinde olmak üzere valans-valans ve öz-valans korelasyonları için ayrı ayrı hesaplamalara katıldı ve bu katkılarla beraber sonuçların önemli ölçüde diğer çalışmalarla uyumu daha iyi sağlandı.

Işımalı ve kendiliğinden iyonlaşma geçiş parametrelerini hesaplamak için öz-valans korelasyonu ve QED ve Breit katkıları dikkate alınarak elde edilen enerji seviyeleri arasındaki geçişler incelendi. Işımalı geçişler, izinli (elektrik dipol (E1)) ve yasaklı geçişler (elektrik kuadrupol (E2), manyetik dipol (M1) ve manyetik kuadrupol (M2)) olmak üzere ayrı ayrı hesaplandı. Bu geçişlerden elde edilen dalgaboyları, geçiş olasılıkları ve salıncı şiddetleri mevcut diğer çalışmalar ile karşılaştırıldı. Genellikle literatürde çalışılan iyonlar için elektrik dipol geçişlerine ait veriler vardır ve bunlar daha çok düşük enerji seviyeleri arasındaki geçişlere aittir. Yasaklı geçişler için ise çok az mevcut veri vardır. Bu bakımdan W^{63+} ve Au^{68+} iyonları için elde edilen veriler yenidir. Kendiliğinden iyonlaşma oranları için de literatürde veri oldukça azdır. Sonuçların karşılaştırıldığı durumlarda ise uyum gözlenmektedir. Hatta kendiliğinden iyonlaşma oranları hesaplamalarında aynı geçişe ait birden fazla değer elde edilen durumlar da ortaya çıktı. Bu durum diğer çalışma sonuçlarında da (Safronova ve ark., 2009b) mevcuttur.

Ağır atomların, özellikle iyonlaşmış ve uyarılmış seviyelere ait spektroskopik parametrelerin belirlenmesinde literatürde eksiklikler vardır. Teorik ve deneysel yöntemlerle verilen sonuçların çoğu düşük uyarılmış seviyeler içindir. Enerji, dalgaboyları, ışmalı geçiş oranları, salıncı şiddetleri ve kendiliğinden iyonlaşma oranları birçok uygulama için temel niceliklerdir. Hem atomik özelliklerin belirlenmesinde hem de deneysel verilerin yorumlanmasında önemli bir rol almaktadır. Astrofizik, plazma fiziği, termonükleer füzyon araştırmaları, lazerle izotop ayırma ve lazer sistemlerinin geliştirilmesi gibi alanlarda bu spektroskopik verilerin kesin bilgisine ihtiyaç vardır. Tungsten ve altın iyonlarının ışmalı ve ışmasız geçiş bilgisi bu alanlarda çok önemlidir. Bu nedenle bu çalışmada elde edilen spektroskopik verilerin gelecekte bu alanlarda yapılacak çalışmalar için yararlı bilgiler sağlayacağı düşünülmektedir. Yüksek yüklü iyonların çalışılması teknolojide çok büyük öneme sahip olduğundan, sonraki çalışmalarda tungsten ve altın gibi özellikle periyodik

tablonun 6. satırındaki atomların yüksek iyonlaşmış halleri ile benzer atomik yapı hesaplamaları devam ettirilecektir.

KAYNAKLAR

- Aggarwal, K. M. Keenan, F. P. 2016. Radiative rates for E1, E2, M1, and M2 transitions in S-like to F-like tungsten ions (W LIX to WLXVI). *Atom. Data Nucl. Data.*, 111-112: 187-279.
- Amusia, M. Chernysheva, Y. 1997. *Computation of Atomic Process: A Handbook for ATOM Programs*. 1. Edition, Institute of Physics Publishing, Bristol, 301-306.
- Angert, N. 1991. Ion beams at GSI. *Nucl. Tracks Rad. Meas.*, 19(1-4): 871-874.
- Arimondo, E. Clark, C. W., Martin, W. C. 2010. Colloquium: Ettore Majorana and the birth of autoionization. *Rev. Mod. Phys.*, 82: 1947-1958.
- Aygün, E. Zengin, M. 1998. *Atom ve Molekül Fiziği*, 5. Baskı, Özkan Matbaacılık, Ankara, 102-106.
- Aymar, M. Greene, C. H., Luc-Koenig, E. 1996. Multichannel Rydberg spectroscopy of complex atoms. *Rev. Mod. Phys.*, 68(4): 1015-1123.
- Azuma, T. Nakamura, N., Yamada, C. 2009. Proceedings of 14th international conference on the physics of highly charged ions (HCI 2008). *J. Phys. Conf. Ser.*, 163(1): 011001-2.
- Badnell, N. R. 1986. Dielectronic recombination of Fe^{22+} and Fe^{21+} . *J. Phys. B-At Mol. Opt.*, 19: 3827-3835.
- Badnell, N. R. 1997. On the effects of the two-body non-fine-structure operators of the Breit-Pauli Hamiltonian. *J. Phys. B-At Mol. Opt.*, 30: 1-11.
- Badnell, N. R. 2011. A Breit-Pauli distorted wave implementation for AUTOSTRUCTURE. *Comput. Phys. Commun.*, 182: 1528-1535.
- Bar-Shalom, A. Klapisch, M., Oreg, J. 2001. *J. Quant. Spectrosc. Ra.* 71: 169-188.
- Beiersdorfer, P. Lepson, J. K., Schneider, M. B., Bode M. P. 2012a. L-shell X-ray emission from neon-like W^{64+} . *Phys. Rev. A*, 86: 012509-11.
- Beiersdorfer, P. May, M. J., Scofield, J. H., Hansen, S. B. 2012b. Atomic physics and ionization balance of high-Z Ions: Critical ingredients for characterizing and understanding high-temperature plasmas. *High Energy Density Physics*, 8: 271-283.
- Beutler, H. 1935. Über absorptions serien von Argon, Krypton und Xenon zu termen zwischen den beiden ionisierungsgrenzen $^2\text{P}_{3/2}$ und $^2\text{P}_{1/2}$. *Z. Phys.*, 93: 177-196.
- Beyer, H. Shevelko, V. 2003. *Introduction to the Physics of the Highly Charged Ions*, in *Atomic and Molecular Physics*. Institute of Physics Publishing, 1-361.

- Biedermann, C. Radtke, R., Seidel, R., Pütterich, T. 2009. Spectroscopy of highly charged tungsten ions relevant to fusion plasmas. *Phys. Scr.*, T134: 014026-6.
- Blume, M. Watson, R. E. 1962. Theory of spin-orbit coupling in atoms. I. derivation of the spin-orbit coupling constant. *Proc. R. Soc. A*, 270: 127-43.
- Brown, G. V. Hansen, S. B., Träbert, E., Beiersdorfer, P., Widmann, K., Chen, H., Chung, H. K., Clementson, J. H. T., Gu, M. F., Thorn, T. B. 2008. Investigation of the $2p_{3/2}$ - $3d_{5/2}$ line emission of Au^{53+} - Au^{69+} for diagnosing high energy density plasmas. *Phys. Rev. E*, 77: 066406-9.
- Chen, M. H. Cheng, K. T. 2011. Relativistic configuration-interaction calculations of the $n = 3$ - 3 transition energies in highly charged tungsten ions. *Phys. Rev. A*, 84: 012513-6.
- Clementson, J. Beiersdorfer, P. 2010. Wavelength measurement of $n = 3$ to $n = 3$ transitions in highly charged tungsten ions. *Phys. Rev. A*. 81: 052509-7.
- Clementson, J. Beiersdorfer, P., Brown, G. V., Gu, M. F., Lundberg, H., Podpaly, Y., Träbert, E. 2011. Tungsten spectroscopy at the Livermore electron beam ion trap facility. *Can. J. Phys.*, 89: 571-580.
- Condon, E. U. Shortley, G. H. 1935. *The Theory of Atomic Spectra*, Cambridge University Press, 1-439.
- Cornwell, J. F. 1997. *Group Theory in Physics: An Introduction*. Techniques of Physics. 4. Edition, Elsevier Science, 1-349
- Cowan, R. D. 1981. *The Theory of Atomic Structure and Spectra*, University of California Press, 1-732.
- Dipti, Das, T., Sharma, L., Srivastava, R. 2014. L-shell electron excitations of Mg-through O-like tungsten ions. *Phys. Scr.*, 89: 085403-14.
- Drake, G. W. F. 1996. *Atomic, Molecular and Optical Physics Handbook*, American Institute of Physics, 1-558.
- Dyall, K. G. Grant I. P., Johnson, C. T., Parpia, F. A., Plummer, E. P. 1989. GRASP:a general-purpose relativistic atomic structure program. *Comput. Phys. Commun.*, 55: 425-56.
- Edlén, B. 1963. Wavelength measurements in the vacuum ultra-violet. *Rep. Prog. Phys.*, 26: 181-212.
- Edlén, B. 1964. *Atomic Spectra Spectroscopy I*. Springer, Berlin, 80–220.
- Eissner, W. Jones, M., Nussbaumer, H. 1974. Techniques for the calculation of atomic structure and radiative data including relativistic corrections. *Comput. Phys. Commun.*, 8: 270-306.
- Erkoç, Ş. Uzer, T. 1996. *Lectures Notes on Atomic and Molecular Physics*, World Scientific Publishing, London, 171-175.
- Fan, J. Zheng, N. W. 2004. Oscillator strengths and transition probabilities for Mg-like ions. *Chem. Phys. Lett.*, 400: 273-278.
- Fang, T. Canizares, C. R. 2000. Probing cosmology with the X-ray forest. *Astrophys. J.*, 539: 532-539.

- Fano, U. 1935. Sullo spettro di assorbimento dei gas nobili presso il limite dello spettro d'arco. *Nuovo Cimento*, 12(3): 154-161.
- Fano, U. 1961. Effects of configuration interaction on intensities and phase shifts. *Phys. Rev.*, 124(6): 1866-1878.
- Feldman, U. Seely, J. F., Landi, E., Ralchenko, Y. 2008. Bright EUV lines emitted by highly ionized tungsten ions as diagnostic indicators of the tungsten transport in ITER core plasmas ($Te > 7$ keV). *Nucl. Fusion*, 48: 045004-8.
- Filevich, J. Marconi, M., Moon, S., Nilsen, J., Scofield, J., Dunn, J., Smith, R., Keenan, R., Hunter, J., Shlyaptsev, V., Rocca, J. 2005. Observation of a multiply ionized plasma with index of refraction greater than one. *Phys. Rev. Lett.*, 94(3): 035005-4.
- Fischer, C. F. Brage, T., Jönsson, P. 1997. *Computational Atomic Structure-An MCHF Approach*, Institute of Physics Publishing, 1-279.
- Fischer, C. F. 2000. The MCHF atomic-structure package, *Comput. Phys. Commun.* 128: 635-636.
- Fischer, C. F. Godefroid, M., Brage, T., Jönsson, P., Gaigalas, G. 2016. Advanced multiconfiguration methods for complex atoms: I. Energies and wave functions, *J. Phys. B-At Mol. Opt.*, 49: 182004-35.
- Fließbach, T. 1991. *Quantenmechanik*. Springer SpektrumVerlag, 1-388.
- Gillaspy, J. D. 2001. Highly charged ions. *J. Phys. B-At Mol. Opt.*, 34: R93-R130.
- Gillaspy, J. D. Draganić, I. N., Ralchenko, Y., Reader, J., Tan, J. N., Pomeroy, J. M., Brewer, S. M. 2009. Measurement of the D-line doublet in high-Z highly charged sodium-like ions. *Phys. Rev. A*, 80: 010501-4.
- Gillaspy, J. D. 2010. Testing QED in sodium-like gold and xenon: Using Atomic Spectroscopy and an EBIT to Probe the Quantum Vacuum. *International Symposium on Electron Beam Ion Sources And Traps*, Stockholm, 232-280.
- Gillaspy, J. D. Osin, D., Ralchenko, Y., Reader, J., Blundell, S. A. 2013. Transition energies of the D lines in Na-like ions. *Phys. Rev. A*, 87: 062503-13.
- Gombas, P. 1956. Statistische behandlung des atoms, *Handbuch der Physik*, 36: 109-231.
- Gu, M. F. 2008. The flexible atomic code, *Can J. Phys.*, 86(5): 675-689.
- Gumberidze, A. 2003. Experimental studies of the ground state QED corrections in H- and He-like Uranium. Johann Wolfgang Goethe University, Department of Physics, Doctorate Thesis.
- Gupta, G. P. Msezane, A. Z. 2009. Large-scale CIV3 calculations of fine-structure energy levels and radiative rates in Al-like copper. *Can J. Phys.*, 87: 895-907.
- Hainfeld, J. F. Slatkin, D. N., Smilowitz, H. M. 2004. The use of gold nanoparticles to enhance radiotherapy in mice. *Phys. Med. Biol.*, 49: N309-15.
- Hamasha, S. Alshaiub, R. 2012. Constructing theoretical M-shell spectra for Mg-like Au through Cl-like Au ions in gold plasma diagnostics. *Phys. Scr.*, 86: 065302-16.

- Hamasha, S. 2013. Energy levels, wavelengths, and transition rates of multipole transitions (E1, E2, M1, M2) in Au⁶⁷⁺ and Au⁶⁶⁺ ions. *Atom. Data Nucl. Data.*, 99: 595-632.
- Hartree, D. 1946–1947. The calculation of atomic structures. *Rep. Prog. Phys.*, 11: 113-143.
- Hao, L. H. Kang, X. P. 2015. Energy levels and spectral lines for $n = 3$ to $n = 3$ transitions in Mg-like tungsten ions. *Acta Phys. Pol. A*, 128 (3): 274-282.
- Hibbert, A. 1975. CIV3-A general program to calculate configuration interaction wave functions and electric-dipole oscillator strengths. *Comp. Phys. Commun.* 9: 141-172.
- Hu, F. Jia-Min, Y., Chuan-Ke, W., Ji-Yan, Z., Gang J., Zheng-He, Z. 2011a. Influence of electron correlation on Au ions. *Acta Phys. Sin.*, 60(10): 103104-6.
- Hu, F. Wang, C., Yang, J., Jiangand, G., Hao, L. 2011b. Multiconfiguration Dirac Fock calculations of transition probabilities of some tungsten ions. *Phys. Scr.*, 84: 015302 -6.
- Hu, F. Mei, M., Han, C., Han, B., Jiang, G., Yang, J. 2014. Accurate multiconfiguration Dirac-Hartree-Fock calculations of transition probabilities for magnesium-like ions. *J. Quant. Spectrosc. Ra.*, 149: 158-167.
- Hylleraas, E. A. 1928. Über den grundzustand des helium atoms. *Z. Phys.*, 48: 469-494.
- Hylleraas, E. 1929. Neue berechnung der energie des heliums im grundzustande, sowie des tiefsten terms von ortho helium. *Z. Phys. A*, 54: 347-366.
- Joachain, C. J. 2014. High-intensity laser-atom interactions. *Europhys. Lett.*, 108(4): 44001-7.
- Johnson, W. R. Blundell, S. A., Sapirstein J. 1988. Many-body perturbation-theory calculations of energy levels along the sodium isoelectronic sequence. *Phys. Rev. A*, 38(6): 2699-2706.
- Johnson, W. R. Liu, Z. W., Sapirstein J. 1996. Transition rates for lithium-like ions, sodium-like ions and neutral alkali-metal atoms. *Atom. Data Nucl. Data.*, 64: 279-300.
- Jönsson, P. Gaigalas, G., Bieroń, J., Fischer, C. F., Grant, I. P. 2013. New version: Grasp2K relativistic atomic structure package. *Comput Phys Commun.*, 184(9): 2197-2203.
- Kim, Y. K. Haik, D. H., Indelicato, P., Desclaux J. P. 1991. Resonance transition energies of Li-, Na-, and Cu-like ions. *Phys. Rev. A*, 44(1): 148-166.
- Kohler, T. Goral, K., Julienne, P. S. 2006. Production of cold molecules via magnetically tunable Feshbach resonances. *Rev. Mod. Phys.*, 78(4): 1311-1361.
- Konan, G. G. Kabakçı, S., Özdemir, L. 2014a. E1, E2 and M1 transitions between $n=3$ levels in magnesium-like tungsten Iran. *J. Sci. Technol.* 38A4: 415-421.
- Konan, G. G. Özdemir, L., Ürer, G. 2014b. Energy levels and strong electric dipole transitions in magnesium-like gold. *J. Quant. Spectrosc. Ra.*, 145: 110-120.

- Konan, G. G. Özdemir, L. 2016a. Electric dipole transition parameters for $2s3l3l'$ - and $2p^53l3l'-3l$ ($l, l'=0, 1, 2$) transitions in W^{63+} . *Chinese J. Phys.*, 54: 433-450.
- Konan, G. G. Özdemir, L. 2016b. Energies and electric dipole transitions for sodium-like gold, *Can. J. Phys.*, 94(11): 1167-1174.
- Konovalova, E. A. Kozlov, M. G. 2015. Correlation, Breit, and QED effects in spectra of Mg-like ions. *Phys. Rev. A*, 92: 042508-7.
- Köksal, F. Gümüş, H. 1999. *Atom ve Molekül Fiziği*, Bilim Yayıncılık, 1-687.
- Kramida, A. E. Shirai, T. 2009. Energy levels and spectral lines of tungsten, W III through W LXXIV. *Atom. Data Nucl. Data.*, 95: 305-474.
- Kramida, A. 2011. Recent progress in spectroscopy of tungsten. *Can. J. Phys.*, 89: 551-570.
- Kuhn, H. G. 1962. *Atomic Spectra*. Longmans, London, 1-472.
- Kusch P. Foley, H. M. 1947. Precision measurement of the ratio of the atomic g values in the $^2P_{3/2}$ and $^2P_{1/2}$ states of gallium. *Phys. Rev.*, 72: 1256-1257.
- Lamb, W. E. Retherford, R. C. 1947. Fine structure of the hydrogen atom by a microwave method. *Phys. Rev.*, 72(3): 241-243.
- Laming, J. M. Feldman, U. 1999. Relationships among the intensities of Li-, Be-, and Na-like resonance lines in collisionally ionized astrophysical plasmas. *Astrophys. J.*, 527: 461-469.
- Landau, L. D. Lifshitz, E. M. 1987. *Quantum Mechanics*. Pergamon Press, Oxford, 1-691.
- Lassettre, E. N. Symposium, G. 1959. Elementary physical processes collision cross-section studies on molecular gases and the dissociation of oxygen and water. *Radiat. Res.*, 1: 530-546.
- Levine, M. A. Marrs, R. E., Henderson, J. R., Knapp, D. A., Schneider, M. B. 1988. The electron beam ion trap: A new instrument for atomic physics measurements. *Phys. Scr.*, T22: 157-163.
- Li, C. K. Séguin, F. H., Frenje, J. A., Rosenberg, M., Zylstra, A. B., Petrasso, R. D., Amendt, P. A., Koch, J. A., Landen, O. L., Park, H. S., Robey, H. F., Towan, R. P. J., Casner, A., Philippe, F., Betti, R., Knauer, J. P., Meyerhofer, D. D., Back, C. A., Kilkenny, J. D., Nikroo A. 2010. Diagnosing indirect-drive inertial-confinement-fusion implosions with charged particles. *Plasma Phys. Contr. F.*, 52: 124027-14.
- Liang, L. Gao, W., Zhou, C. 2013. Energy levels, oscillator strengths, radiative decay rates, and fine structure collision strengths for Kr VII lines. *Can. J. Phys.*, 91: 554-559.
- Majorana, E. 1931a. I presunti termini anomali dell'elio. *Nuovo Cimento*, 8(1): 78-83.
- Majorana, E. 1931b. Teoria dei tripletti P' Incompleti. *Nuovo Cimento*, 8(1): 107-113.
- Miroshnichenko, A. E. Mingaleev, S. F., Flach, S., Kivshar, Y. S. 2005. Nonlinear Fano resonance and bistable wave transmission. *Phys. Rev. E*, 71(3): 036626-8.

- Montenegro, M. Nahar, S. N., Pradhan, A. K., Yu, Y., Hang, H. L. 2009. Monte Carlo simulations and atomic calculations for auger processes in biomedical nanotheranostics. *J. Phys. Chem. A*, 113: 12364-9.
- Nahar, S. N. Pradhan, A. K., Sur C. 2008. Oscillator strength and radiative transition rates for $K\alpha$ lines in gold x-ray spectra: 1s-2p transitions. *J. Quant. Spectrosc. Ra.*, 109: 1951-9.
- Nikolic, C. 2004. Autoionizing states and their relevance in electron-ion recombination. Stockholm University, Department of Physics, Doctorate Thesis.
- Özdemir, L. Günday Konan G., Kabakçı, S. 2013. Energies and radiative transition parameters for Mg-like tungsten. *Acta Phys. Pol. A*, 124(4): 649-657.
- Parpia, F. A. Fischer, C. F., Grant, I. P. 1996. GRASP92: A package for large-scale relativistic atomic structure calculations, *Comput. Phys. Commun.*, 94: 249-271.
- Pinnington, E. H. Ansbacher, W., Kernahan, J. A. 1984. Energy level and lifetime measurements for Kr VII. *J. Opt. Soc. Am. B.*, 1(1): 30-33.
- Podpaly, Y. Clementson, J., Beiersdorfer, P., Williamson, J., Brown, G. V., Gu, M. F. 2009. Spectroscopy of $2s_{1/2}$ - $2p_{3/2}$ transitions in W^{65+} through W^{71+} . *Phys. Rev. A*, 80: 052504-5.
- Pradhan, A. K. Nahar, S. N., Montenegro, M., Yu, Y., Hang, H. L., Sur, C., Mrozik, M., Pitzer, R. 2009. Resonant x-ray enhancement of the auger effect in high Z atoms, molecules and nanoparticles: biomedical applications. *J. Phys. Chem. A*, 113: 12356-63.
- Preval, S. P. Badnell, N. R., O'Mullane, M. G. 2016. Partial and total dielectronic recombination rate coefficients for W^{73+} to W^{56+} . *Phys. Rev. A*, 93: 042703-13.
- Pütterich, T. Neu, R., Dux, R., Whiteford, A. D., O'Mullane, M. G. 2008. Modelling of measured tungsten spectra from ASDEX Upgrade and predictions for ITER. *Plasma Phys. Contr. F.*, 50: 085016-27.
- Ralchenko, Y. Draganić, I. N., Tan, J. N., Gillaspay, J. D., Pomeroy, J. M., Reader, J., Feldman, U., Holland, G. E. 2008. EUV spectra of highly-charged ions W^{54+} - W^{63+} relevant to ITER diagnostics. *J. Phys. B-At Mol. Opt.*, 41: 021003-6.
- Safronova, U. I. Johnson, W. R., Safronova, M. S., Albritton, J. R. 2002a. Relativistic many-body calculations of energies for core-excited states in sodium like ions. *Phys. Rev. A*, 66: 042506-12.
- Safronova, U. I. Johnson W. R., Safronova, M. S., Albritton, J. R. 2002b. Relativistic many-body calculations of transition rates from core-excited states in sodium like ions. *Phys. Rev. A*, 66: 052511-8.
- Safronova, U. I. Safronova, A. S., Beiersdorfer, P. 2009a. Excitation energies, radiative and autoionization rates, dielectronic satellite lines and dielectronic recombination rates for excited states of Mg-like W from Na-like W. *J. Phys. B-At Mol. Opt.*, 42: 165010-17.

- Safronova, U. I. Safronova, A. S., Beiersdorfer, P. 2009b. Excitation energies, radiative and autoionization rates, dielectronic satellite lines, and dielectronic recombination rates for excited states of Na-like W from Ne-like W. *Atom. Data Nucl. Data*, 95: 751-785.
- Safronova, U. I. Safronova, A. S. 2010. Wavelengths and transition rates for $nl-n'l'$ transitions in Be-, B-, Mg-, Al-, Ca-, Zn-, Ag- and Yb-like tungsten ions. *J. Phys. B-At Mol. Opt.*, 43: 074026-15.
- Santana, J. A. 2016. Relativistic MR-MP energy levels: Low-lying states in the Mg isoelectronic sequence, *Atom. Data Nucl. Data.*, 111-112: 87-186.
- Sapirstein, J. Cheng, K. T. 2015. *S*-matrix calculations of energy levels of sodium like ions. *Phys. Rev. A*, 91: 062508-17.
- Schweber, S. S. 1994. *QED and The Man Who Made It: Dyson, Feynman, Schwinger, and Tomonaga*, Princeton University Press, Princeton, 1-365.
- Schwinger, J. 1981. Thomas–Fermi Model: The second correction. *Phys. Rev. A*, 24 (5): 2353-2361.
- Seely, J. F. Wagner, R. A. 1990. QED contributions to the 3s-3p transitions in highly charged Na-like ions. *Phys. Rev. A*, 41: 5246-5249.
- Seely, J. F. Brown, C. M., Feldman, U., Ekberg, J. O., Keane, C. J., MacGowan, B. J., Kania, D. R., Behring, W. E. 1991. Wavelengths and energy levels for the Na I isoelectronic sequence Y^{28+} through U^{81+} . *Atom. Data Nucl. Data*, 47(1): 1-15.
- Shabaev, V. M. Tupitsyn, I. I., Yerokhin, V. A. 2013. Model operator approach to the Lamb shift calculations in relativistic many-electron atoms. *Phys. Rev. A*, 88: 012513-11.
- Sobelman, I. I. 1979. *Atomic Spectra and Radiative Transitions*, Springer, Berlin, 1-463.
- Stohlker, T. Mokler, P. H., Bosch, F., Dunford, R. W., Franzke, F., Klepper, O., Kozhuharov, C., Ludziejewski, T., Nolden, F., Reich, H., Rymuza, P., Stachura, Z., Steck, M., Swiat, P., Warczak, A. 2000. 1s lamb shift in hydrogen like uranium measured on cooled, decelerated ion beams. *Phys. Rev. Lett.*, 85: 3109-12.
- Theodosiou, C. E. Curtis, L. J. 1988. Accurate calculations of 3p and 3d lifetimes in the Na sequence. *Phys. Rev. A*, 38(9): 4435-4445.
- Träbert, E. Hansen, S. B., Brown, G. V., Beiersdorfer, P., Widmann, K., Chung, H. K. 2009. Micro calorimeter observations of L-shell spectra of Ne-through Fe-like Au ions in an EBIT. *J. Phys. Conf. Ser.*, 163: 012010-4.
- Uehling, E. A. 1935. Polarization effects in the positron theory. *Phys. Rev.* 48(1): 55-63.
- Vilkas, M. J. Ishikawa, Y., Koc, K. 1999. Relativistic multireference many-body perturbation theory for quasidegenerate systems: Energy levels of ions of the oxygen isoelectronic sequence. *Phys. Rev. A*, 60(4): 2808-2821.
- Vilkas, M. J. Ishikawa, Y., Träbert, E. 2007. Relativistic multi-reference many-body perturbation theory calculation on Au^{64+} - Au^{69+} ions. *Eur. Phys. J. D*, 41: 77–93.

- Wurden, G. A. Peterson, B. J. 1999. Development of imaging for long-pulse MFE experiments. *Rev. Sci. Instrum.*, 70: 255-9.
- [www.nist.gov/pml/atomic-spectra-database.](http://www.nist.gov/pml/atomic-spectra-database/), Erişim Tarihi: 18.12.2016.
- Xu, M. Jiang, G., Wu, M., Li, X., Bian, G., Hu, F. 2016. Multiconfiguration Dirac-Fock calculations of excitation energies and wavelengths in highly charged tungsten ions. *Can. J. Phys.*, 94: 563-568.
- Yanagibayashi, J. Takano, T., Iwamae, A., Kubo, H., Hasuo, M., Itami, K. 2010. Highly charged tungsten spectra observed from JT-60U plasmas at $T_e \approx 8$ and 14 keV. *J. Phys. B-At Mol. Opt.*, 43: 144013-6.
- Zhang, W. Govorov, A. O., Bryant, G. W. 2006. Semiconductor-metal nanoparticle molecules: hybrid excitons and the nonlinear Fano effect. *Phys. Rev. Lett.*, 97(14): 146804-4.
- Zou, Y. Fischer, C. F. 2001. Multiconfiguration Dirac-Hartree-Fock calculations of the forbidden transitions between $3s^2 \ ^1S_0$, $3s3p \ ^3P_{0,1,2}$, $\ ^1P_1$ states for Mg-like ions. *J. Phys. B-At Mol. Opt.*, 34: 915-931.

ÖZGEÇMİŞ

Gülay GÜNDAY KONAN, 31.07.1983'te İstanbul'da doğdu. İlk, orta ve lise eğitimini İstanbul'da tamamladı. 2001 yılında Plevne Lisesi'nden mezun oldu. 2001'de başladığı Marmara Üniversitesi Fizik Öğretmenliği Bölümü'nü 2006 yılında bitirdi. 2006 ile 2008 yılları arası özel eğitim kurumunda Fizik Öğretmenliği yaptı. 2008 yılında Yıldız Teknik Üniversitesi Fizik Bölümü'nde yüksek lisans eğitimine başladı. 2010 yılında Sakarya Üniversitesi'nde Araştırma Görevlisi olarak çalışmaya başladı. 2011 yılında yüksek lisansı bitirerek aynı yıl Sakarya Üniversitesi Fizik Bölümü'nde Doktora çalışmasına başladı. Halen aynı üniversitede Araştırma Görevlisi olarak görev yapmaktadır. Gülay GÜNDAY KONAN evli ve bir çocuk annesidir.