

Załącznik nr 2

do wniosku dr Jarosława Ruczkowskiego
o przeprowadzenie postępowania habilitacyjnego

Autoreferat (w języku polskim)

Spis treści

1	Imię i nazwisko	1
2	Posiadane dyplomy, stopnie naukowe	1
3	Informacje o dotychczasowym zatrudnieniu w jednostkach naukowych	1
4	Przebieg pracy naukowej	1
4.1	Przed uzyskaniem stopnia naukowego doktora	1
4.2	Po uzyskaniu stopnia naukowego doktora	2
5	Wskazanie osiągnięcia stanowiącego podstawę postępowania habilitacyjnego	4
5.1	Wykaz prac stanowiących jednotematyczny cykl publikacji:	4
5.2	Omówienie celu naukowego w.w. prac i osiągniętych wyników wraz z omówieniem ich ewentualnego wykorzystania	5
5.2.1	Wstęp	5
5.2.2	Półempiryczny opis struktury atomu	6
5.2.3	Parametryzacje przejść promienistych w atomie	6
5.2.4	Opis pakietu programów do półempirycznej analizy struktury atomu i przejść promienistych	8
5.2.5	Omówienie prac stanowiących jednotematyczny cykl publikacji	11
5.2.6	Podsumowanie	14
5.3	Plany naukowe na przyszłość	14

1 Imię i nazwisko

Jarosław Ruczkowski

2 Posiadane dyplomy, stopnie naukowe

- magister fizyki - specjalność: fizyka stosowana
Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu, Wydział Matematyki, Fizyki i Chemii, 1988 r.
Tytuł pracy magisterskiej : *Własności węgla warstwowych*
Promotor : dr Jerzy Wieczorek
- doktor nauk fizycznych w zakresie fizyki
Uniwersytet Adama Mickiewicza w Poznaniu, Wydział Fizyki, 2000 r.
Tytuł rozprawy doktorskiej : *Ilościowe określenie efektów oddziaływania konfiguracji w strukturze subtelnej i nadsubtelnej prazeodymu*
Promotor : prof. dr hab. Ewa Stachowska (w ramach grantu KBN, praca z wyróżnieniem)

3 Informacje o dotychczasowym zatrudnieniu w jednostkach naukowych

- 01.10.1988 – 30.09.1989 – asystent stażysta
Zakład Fizyki Atomowej, Instytut Fizyki Politechniki Poznańskiej,
- 01.10.1989 – 30.06.1990 – asystent
Zakład Fizyki Atomowej, Instytut Fizyki Politechniki Poznańskiej,
- 01.01.1991 – 30.09.1991 – starszy referent techniczny
Zakład Fizyki Atomowej, Instytut Fizyki Politechniki Poznańskiej,
- 01.10.1991 – 31.01.2000 – asystent
Zakład Fizyki Atomowej, Instytut Fizyki Politechniki Poznańskiej,
po utworzeniu Wydziału Fizyki Technicznej w roku 1997 - Katedra Fizyki Atomowej
- 01.02.2000 – 28.02.2014 – adiunkt
Katedra Fizyki Atomowej, Wydział Fizyki Technicznej Politechniki Poznańskiej,
w roku 2006 Katedra Fizyki Atomowej zmieniła nazwę na: Katedra Inżynierii i Metrologii Kwantowej,
- od 01.03.2014 – asystent
Zakład Automatyki i Robotyki, Instytut Automatyki i Inżynierii Informatycznej, Wydział Elektryczny Politechniki Poznańskiej.

4 Przebieg pracy naukowej

4.1 Przed uzyskaniem stopnia naukowego doktora

W październiku 1988 roku podjąłem pracę w Zakładzie Fizyki Atomowej Instytutu Fizyki Politechniki Poznańskiej, kierowanym przez profesora Jerzego Dembczyńskiego. Przedmiotem mojej działalności

naukowej od samego początku było badanie, metodami półempirycznymi, struktury subtelnej i nadsubtelnej atomów złożonych oraz ilościowe określanie efektów występujących tam oddziaływań. W badaniach tych współpracowałem bezpośrednio z pracownikami Zakładu Fizyki Atomowej : prof. Jerzym Dembczyńskim, prof. Ewą Stachowską, dr Magdaleną Elantkowską oraz dr Gustawem Szawiołą. Ponadto, przy współpracy z mgr inż. Arletą Stachowską, włączyłem się w rozwijanie oprogramowania do półempirycznej analizy struktury atomu, a po jej odejściu z Zakładu, w połowie lat 90-tych, całkowicie przejąłem rolę osoby odpowiedzialnej za to zadanie.

W latach 1991–93 uczestniczyłem w pracach związanych z interpretacją wyników pomiarów struktury nadsubtelnej oraz przesunięć izotopowych w atomie europu [1].

W połowie lat 90-tych rozpocząłem realizację autorskiej koncepcji opracowania bardziej zintegrowanego pakietu programów wykorzystywanego do badań w Zakładzie. Wynikało to z rozszerzenia dotychczas używanych programów do analizy struktury subtelnej o nowe oddziaływania, dla których odpowiednie formuły na współczynniki kątowe, w oparciu o algebrę Racah, były wyprowadzane przez dr M. Elantkowską. Odrębne dotąd programy, realizujące obliczenia dla poszczególnych typów konfiguracji, wraz z zupełnie nowymi podprogramami dla obliczeń oddziaływań międzykonfiguracyjnych, zostały włączone jako procedury do jednego programu generującego macierz współczynników kątowych struktury subtelnej. Obsługa programu została maksymalnie uproszczona a dominującą rolę przejęły odpowiednio opracowane algorytmy. Część tych prac była realizowana w ramach projektu KBN Nr 0T11F01008p01 i wiązała się z implementacją pakietu na komputerach dużej mocy w Poznańskim Centrum Superkomputerowo-Sieciowym. Formuły analityczne oraz wyniki zastosowań pakietu były sukcesywnie publikowane [2–5]. W okresie późniejszym opracowany został analogiczny program dla macierzy współczynników kątowych struktury nadsubtelnej.

W tym samym czasie, wraz z pracownikami Zakładu, rozpocząłem współpracę z dr Safą Bouazza, z Uniwersytetu w Reims. Podczas jego pobytu w Poznaniu, oraz w okresie późniejszym, wspólne prace dotyczyły analizy struktury subtelnej i nadsubtelnej atomów hafnu i cyrkonu [6, 7]. Dr Bouazza otrzymał, używany w tym czasie przez nas, pakiet programów do analizy struktury subtelnej i nadsubtelnej, który w kolejnych latach wykorzystywał w swoich samodzielnych badaniach.

Wraz z całym zespołem Zakładu uczestniczyłem w pracach, które zaowocowały pierwszą w świecie obserwacją jonów prazeodymu uwieczonych w pułapce Paula [8].

W kolejnych latach, we współpracy z ośrodkiem w Dubnej, uczestniczyłem w pracach związanych z analizą struktury nadsubtelnej atomu europu [9, 10].

Współpraca z prof. G.H. Guthöhrleinem z Uniwersytetu Sił Zbrojnych w Hamburgu, rozpoczęta na początku lat 90-tych, zaowocowała zainteresowaniem analizą struktury atomu prazeodymu. Wynikało to z dużej ilości, niepublikowanych wcześniej, nowych danych dotyczących poziomów energii oraz rozszczepień nadsubtelnych. Analiza półempiryczna tych danych stanowiła jednocześnie znaczącą pomoc w rozstrzygnięciu wątpliwości dotyczących interpretacji wyników eksperymentu. Zaobserwowana wówczas, bardzo duża efektywność ścisłego powiązania badań doświadczalnych z analizą półempiryczną skłoniła mnie do wyznaczenia badań nad strukturą atomu prazeodymu jako tematu przyszłej rozprawy doktorskiej.

4.2 Po uzyskaniu stopnia naukowego doktora

Po uzyskaniu stopnia naukowego doktora, od 1 lutego 2000 roku zatrudniony zostałem na stanowisku adiunkta w Katedrze Fizyki Atomowej na Wydziale Fizyki Technicznej.

W okresie tym opracowałem algorytm i stworzyłem program do obliczeń uwzględniających w oddziaływaniach nadsubtelnych efekty niediagonalne względem liczby kwantowej J . Umożliwia on interpretację bardzo precyzyjnych wyników doświadczalnych uzyskanych np. metodą podwójnego rezonansu optyczno-mikrofalowego. Idea programu wykorzystuje analogię do diagonalizacji macierzy energii struktury subtelnej. Macierz struktury nadsubtelnej zawiera oprócz elementów diagonalnych, również elementy niediagonalne względem liczby kwantowej J . Jej bezpośrednia diagonalizacja oraz dopasowanie doświadczalnych i wyliczanych interwałów struktury nadsubtelnej pozwala analizować wyniki z dokładnością obliczeń do 1 Hz i w ten sposób uzyskać tzw. skorygowane stałe struktury

nadsztywnej (aż do oddziaływań magnetycznych oktopolowych i elektrycznych heksadekapolowych). Powstały program włączony w strukturę dotychczas istniejącego oprogramowania wykorzystywany jest w celu uzyskania skorygowanych stałych struktury nadsztywnej, stanowi też efektywne narzędzie umożliwiające wyznaczenie wartości wyższych momentów jądrowych. Pierwsze zastosowania programu dla atomu lantanu, przedstawione zostały w przeglądowej pracy dotyczącej atomów lantanu, tytanu i hafnu [11].

W dalszych latach uczestniczyłem w pracach związanych z analizą struktury sztywnej i nadsztywnej jonu prazeodymu [12] oraz atomu europu [13]. Dostępność nowych danych dotyczących struktury sztywnej i nadsztywnej atomu prazeodymu pozwoliła mi kontynuować prace związane z tą tematyką [14]. Prace te związane były również z rozszerzeniem możliwości obliczeniowych pakietu programów poprzez włączenie oddziaływania z konfiguracjami do czterech otwartych podpowłok oraz pełniejszym uwzględnieniem oddziaływań drugiego rzędu, zarówno w strukturze sztywnej jak i nadsztywnej. Zmodyfikowany pakiet został wykorzystany w pracy dotyczącej analizy struktury sztywnej i nadsztywnej atomu skandu w szerokiej bazie konfiguracji [15], w której zawarto również przewidywane wartości stałych struktury nadsztywnej dla poziomów w szerokim zakresie energetycznym jako istotną pomoc w planowaniu i interpretacji prac doświadczalnych. W pracy dotyczącej precyzyjnych pomiarów dla atomu chromu, dzięki znajomości doświadczalnych interwałów struktury nadsztywnej, dokonana została diagonalizacja macierzy struktury nadsztywnej i uzyskano "skorygowane" wartości stałych struktury nadsztywnej, w tym stałe oddziaływań magnetycznych oktopolowych [16]. W 2008 roku uczestniczyłem w półempirycznej analizie wyników doświadczalnych dotyczących struktury nadsztywnej jonu lantanu [17, 18].

W latach 2003–2014 byłem głównym wykonawcą lub wykonawcą projektów badawczych finansowanych przez MNiSW i NCN zatytułowanych "Weryfikacja modelu oddziaływań nadsztywnych w atomie w tym hipotezy istotnego wpływu splątania stanów jądra i powłoki elektronowej" (MNiI 2 P03B 056 24) oraz "Kompletny pakiet programów do opisu struktury atomów złożonych oraz określenie jej atrybutów na podstawie baz danych doświadczalnych" (MNiSW N519 033 32/4065). Projekty te przyczyniły się dalszej rozbudowy pakietu programów, w szczególności procedur obliczeniowych dla struktury nadsztywnej. W pracy dotyczącej atomu lantanu wykazano że bezpośrednia diagonalizacja macierzy struktury nadsztywnej pozwala na poprawne rozdzielanie przyczynków do rozszczepień nadsztywnych, pochodzących od kolejnych rzędów oddziaływań (magnetycznego dipolowego, elektrycznego kwadrupolowego, itd.) [19]. Analizowana była również analogia pomiędzy metodami parametryzacji uwzględniającymi wzbudzenia "zamknięta powłoka → otwarta powłoka" i "otwarta powłoka → pusta powłoka". Realizacja projektu "Procedura komputerowego projektowania nuklearnego wzorca częstotliwości" (NCN N519 650740) stanowiła kontynuację rozwoju oprogramowania i jego aplikacji dla różnych pierwiastków [20, 21]. W pracy będącej podsumowaniem projektu zaproponowano metodę poszukiwania, za pomocą badań struktury nadsztywnej, izomerowego stanu jądra toru, potencjalnego kandydata do nuklearnego wzorca częstotliwości [22].

W 2012 roku zaproponowałem wykorzystanie precyzyjnie określonych funkcji falowych do opisu przejść elektrycznych dipolowych. Cykl publikacji związany z tym zagadnieniem [23–30] stanowi moje osiągnięcie będące podstawę ubiegania się o stopień naukowy doktora habilitacyjnego i zostanie przedstawiony w sekcji 5.2.

W 2014 roku odbyłem krótkoterminowy pobyt naukowy na zaproszenie prof. Safy Bouazza z Uniwersytetu w Reims, podczas którego przedstawiłem wspomnianą wyżej metodę parametryzacji mocy oscylatorów oraz przekazałem opracowany przeze mnie pakiet programów służących temu celowi. Poza pracami, które powstały w wyniku odnowienia współpracy z prof. S. Bouazza [25, 26], pakiet ten został wykorzystany w innych pracach, których prof. Bouazza był współautorem [31–33].

Wieloletnie prace związane z rozwojem autorskiego oprogramowania do analizy struktury atomu zaowocowały unikatowym w skali światowej pakietem. Podczas konferencji "Sensitivity, Error and Uncertainty Quantification for Atomic, Plasma, and Material Data" w 2015 roku, Alexander Kramida z National Institute of Standards and Technology (NIST) podczas swojego wykładu wymienił go obok KODU COWANA i innych uznanych pakietów [34]. Bardzo cenna jest moja autorska koncepcja spójno-

ści pakietu, dzięki czemu dane wprowadzone raz do zbioru wejściowego, wraz z uzyskanymi na dowolnym etapie wynikami obliczeń, przekazywane są pomiędzy poszczególnymi programami, minimalizując możliwości pomyłek, usprawniając jednocześnie proces analizy w znaczący sposób, aż do prezentacji wyników, w formie gotowej do publikacji, włącznie. Nieoceniona jest tu rola wielu niewielkich programów pomocniczych rozwijanych niezależnie od głównych elementów pakietu. Należy podkreślić, że jest to efekt pracy zespołowej, gdzie główne idee związane z opisem struktury atomu są autorstwa prof. Jerzego Dembczyńskiego oraz dr Magdaleny Elantkowskiej, formuły analityczne zostały wypracowane przez dr Magdaleny Elantkowską, natomiast algorytmy oraz stworzenia oprogramowania jest moim autorskim wkładem. Wspólny był również wkład pracy związany z testowaniem poprawności formuł oraz programów. Poprawność formuł opisujących parametry pierwszego rzędu rachunku zaburzeń została sprawdzona poprzez porównanie z wynikami obliczeń uzyskiwanymi z wykorzystaniem programu COWAN CODE, który używa innego typu sprzęgania pomiędzy elektronami [35, 36]. W przypadku parametrów opisujących oddziaływania w II rzędzie rachunku zaburzeń, opracowałem szereg programów dokonujących odpowiednich sumowań iloczynów parametrów I rzędu, których poprawność została potwierdzona wcześniej.

Niedawno szczegółowy opis stosowanych metod parametryzacji struktury subtelnej i nadsubtelnej atomu, wraz z jawnym przedstawieniem formuł analitycznych stosowanych w obliczeniach współczynników kątowych został zaprezentowany w cyklu publikacji [37–42]. Opublikowane zostały również wyniki badań struktury jonu tantalu [43].

W 2014 roku rozpocząłem współpracę z dr Andrzejem Sikorskim z Instytutu Automatyki i Inżynierii Informatycznej Wydziału Elektrycznego Politechniki Poznańskiej, dotyczącą optymalizacji procedur wyznaczania funkcji własnych (program ATOM). Współpraca ta pozwoliła na znaczne przyspieszenie obliczeń, co zostało częściowo wykorzystane w analizie struktury subtelnej i nadsubtelnej atomu terbu [44]. W 2016 roku dr Sikorski uzyskał grant Microsoft Azure for Research, którego plan naukowy, przewidujący obliczenia dużej skali dla atomów ziem rzadkich, został opracowany z moim udziałem. Optymalizacja procedur oraz dostosowanie ich do architektury Microsoft Azure umożliwi wykonanie obliczeń bez stosowania ograniczeń liczby stanów SL dla rdzenia $4f^N$. Pozwoli również odpowiedzieć na pytanie jak stosowane dotąd ograniczenia wpływały na wyniki uzyskiwane w analizie struktury subtelnej i nadsubtelnej.

W 2016 roku nawiązałem współpracę z Ruohong Li oraz Jensem Lassenem z laboratorium TRIUMF w Vancouver. W roku 2017 ukazała się wspólna praca dotycząca laserowej rezonansowej spektroskopii jonizacyjnej antymonu [45].

5 Wskazanie osiągnięcia stanowiącego podstawę postępowania habilitacyjnego

Jako osiągnięcie naukowe wynikające z art. 16 ust. 2 ustawy z dnia 14 marca 2003r. o stopniach naukowych i tytule naukowym (Dz. U. nr 65, poz. 595 ze zm.) wskazuję jednotematyczny cykl publikacji pt. *Półempiryczne wyznaczanie parametrów przejść promienistych w atomie*.

5.1 Wykaz prac stanowiących jednotematyczny cykl publikacji:

Podano Impact Factor czasopisma dla roku opublikowania pracy, za wyjątkiem prac opublikowanych po 2015 roku

H1) **J. Ruczkowski**, M. Elantkowska, J. Dembczyński,
An alternative method for determination of oscillator strengths: The example of Sc II,
J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **145** (2014) 20-42; IF=2.645

H2) **J. Ruczkowski**, M. Elantkowska, J. Dembczyński,
Semi-empirical calculations of oscillator strengths and hyperfine constants for Ti II,
J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **149** (2014) 168-183; IF=2.645

- H3) **J. Ruczkowski**, S. Bouazza, M. Elantkowska, J. Dembczyński,
Semi-empirical analysis of oscillator strengths for Nb II,
J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **155** (2015) 1-9; IF=2.859
- H4) S. Bouazza, **J. Ruczkowski**, M. Elantkowska, J. Dembczyński,
Hyperfine structure, lifetime and oscillator strength of V II,
J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **166** (2015) 55-63; IF=2.859
- H5) **J. Ruczkowski**, M. Elantkowska, J. Dembczyński,
Semi-empirical analysis of the fine structure and oscillator strengths for atomic strontium,
J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **170** (2016) 106-116; IF(2015)=2.859
- H6) **J. Ruczkowski**, M. Elantkowska, J. Dembczyński,
Semi-empirical determination of radiative lifetimes for Sc II and Ti II,
J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **176** (2016) 6-11; IF(2015)=2.859
- H7) **J. Ruczkowski**, M. Elantkowska, J. Dembczyński,
Semi-empirical determination of radiative parameters for Ag II,
Mon. Not. R. Astron. Soc. **459** (2016) 3768-3782; IF(2015)=4.952
- H8) **J. Ruczkowski**, M. Elantkowska, J. Dembczyński,
Semi-empirical determination of radiative parameters for atomic nickel,
Mon. Not. R. Astron. Soc. **464** (2017) 1127-1136; IF(2015)=4.952

5.2 Omówienie celu naukowego w.w. prac i osiągniętych wyników wraz z omówieniem ich ewentualnego wykorzystania

5.2.1 Wstęp

Obserwowane linie widmowe, emitowane przez atomy lub jony, opisują trzy wielkości : częstotliwość, natężenie oraz kształt linii [46]. Związane są one bezpośrednio z wielkościami opisującymi strukturę atomu. Różnica energii pomiędzy poziomami elektronowymi wyznacza częstotliwość przejścia (długość fali). Prawdopodobieństwa przejść (moce oscylatorów) mają wpływ na obserwowane natężenie linii. Czasy życia poziomów wzbudzonych determinują naturalną szerokość linii widmowych. Są one również związane z prawdopodobieństwami przejść.

Jednocześnie, na linie widmowe mają wpływ warunki zewnętrzne, w których znajduje się emiter. Częstotliwość przejścia może ulec zmianie na skutek przesunięcia poziomów energetycznych wywołanego występowaniem pola elektrycznego lub magnetycznego. Natężenie linii zależne jest od obsadzenia stanów, podlegającego zmianom spowodowanym zderzeniami lub obecnością promieniowania. Profil linii może ulec poszerzeniu pod wpływem ruchu emitera. Dlatego też badania spektroskopowe dostarczają informacji niezbędnych do opisu struktury atomu jak i służą do różnego rodzaju diagnostyki. W ostatnich latach szczególnym zainteresowaniem cieszą się badania związane z diagnostyką plazmy w reaktorach fuzji termojądrowej [47].

Dokładne dane dotyczące prawdopodobieństw przejść (mocy oscylatorów) oraz czasów życia są szczególnie istotne w astrofizyce do prawidłowego określenia składu chemicznego atmosfer gwiazd. Rozpowszechnienie pierwiastków we Wszechświecie zależne jest od procesów, które doprowadziły do ich powstania. Najobficiej występujący wodór powstał w wyniku pierwotnej nukleosyntezy w początkowych fazach ewolucji Wszechświata. Cięższe pierwiastki, do grupy żelazowców włącznie, powstały w wyniku procesów zachodzących w gwiazdach. Pozostałe pierwiastki powstały na skutek procesów wychwytu neutronów na różnych etapach ewolucji gwiazd oraz w wyniku wybuchów supernowych [48,49]. Wyznaczenie zawartości pierwiastka, w stosunku do wodoru, oraz analiza tej zawartości dla różnych pierwiastków, pozwala na weryfikację zarówno modeli atmosfer gwiazd i ich ewolucji, jak również ewolucji galaktyk i całego Wszechświata.

5.2.2 Półempiryczny opis struktury atomu

Drogą do poznania struktury atomu, mechanizmów oddziaływania pomiędzy poszczególnymi elektronami oraz oddziaływania powłoki elektronowej z jądrem atomu jest znalezienie możliwie jak najdokładniejszej funkcji falowej opisującej stan atomu. Znajomość dokładnej funkcji falowej pozwala w konsekwencji na określanie, zgodnie z regułami mechaniki kwantowej, wartości oczekiwanych obserwabli, to jest przewidywanych wartości atrybutów struktury atomu, które są mierzalne, a zatem możliwa jest doświadczalna ich weryfikacja.

Funkcje falowe opisujące pojedyncze atomy, względnie jony, zgodnie z prawami fizyki kwantowej są przedstawiane jako funkcje zależne od współrzędnych kątowych (liczb kwantowych) oraz od współrzędnych radialnych. Separowalność funkcji falowej na część zależną od zmiennych kątowych i część radialną pozwala na ścisłe wyliczenie części kątowych na podstawie reguł fizyki kwantowej (teorii momentów pędu w atomie złożonym). Część radialna natomiast, w obliczeniach teoretycznych *ab initio*, wymaga przyjęcia odpowiedniego modelu (np. postaci potencjału pola elektrycznego, w którym poruszają się elektrony). Alternatywą dla obliczeń *ab initio*, jest zastosowanie metod półempirycznych, które wykorzystują istniejące bazy danych doświadczalnych.

Zgodnie z równaniem Schrödingera, energia całkowita stanu elektronowego $|\gamma J\rangle$ jest wartością własną operatora Hamiltona

$$\hat{H} |\gamma J\rangle = E |\gamma J\rangle, \quad (1)$$

Hamiltonian ten opisuje przewidywane przez mechanikę kwantową oddziaływania pierwszego i wyższych rzędów rachunku zaburzeń.

Funkcje własne są kombinacją liniową wszystkich stanów oddziałujących konfiguracji:

$$|\gamma J\rangle = \sum_i c_i |\psi_i SLJ\rangle \quad (2)$$

gdzie c_i są amplitudami funkcji własnej.

Po zdefiniowaniu wybranego układu funkcji bazy oraz hamiltonianu elementy macierzy energii określone są następująco:

$$H_{ij} = \langle \psi_i SLJ | \hat{H} | \psi_j S'L'J \rangle \quad (3)$$

Elementy macierzowe wszystkich operatorów są diagonalne względem liczby kwantowej J , dlatego macierz energii można rozdzielić na podmacierze odpowiadające możliwym wartościom J . Rząd poszczególnych podmacierzy określony jest przez liczbę stanów o identycznej wartości całkowitego momentu pędu J . Dla każdej podmacierzy konstruuje się tzw. wyznacznik sekularny postaci:

$$\begin{vmatrix} H_{11} - E_J & H_{12} & H_{13} & \dots & H_{1j} \\ H_{21} & H_{22} - E_J & \dots & \dots & H_{2j} \\ H_{31} & H_{32} & H_{33} - E_J & \dots & H_{3j} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ H_{i1} & \dots & \dots & \dots & H_{ij} - E_J \end{vmatrix} = 0 \quad (4)$$

Powyższy wyznacznik po rozwinięciu jest wielomianem stopnia i niewiadomej E_J . Każdy pierwiastek wielomianu przybliża jedną z możliwych wartości własnych hamiltonianu. W iteracyjnej procedurze dopasowania doświadczalnych i wyliczanych wartości energii wyznacza się parametry radialne oraz amplitudy funkcji własnych c_i . Uzyskane w ten sposób funkcje własne można użyć na przykład do parametryzacji struktury nadsubtelnej lub prawdopodobieństw przejść.

5.2.3 Parametryzacje przejść promienistych w atomie

Dla przejść elektrycznych dipolowych pomiędzy poziomami $|\gamma J\rangle$ i $|\gamma' J'\rangle$, zależności pomiędzy prawdopodobieństwem przejścia A , siłą linii \mathbf{S} oraz mocą oscylatora gf są następujące [35, 50]:

$$A_{\gamma\gamma'} = 2.0261 \times 10^{-6} \frac{\sigma^3}{g_\gamma} \mathbf{S} = 0.667 \times \frac{\sigma^2}{g_\gamma} gf, \quad (5)$$

gdzie $\sigma = |E(\gamma) - E(\gamma')|/hc$ jest liczbą falową (w cm^{-1}), $g_\gamma = (2J + 1)$ oraz $g = (2J' + 1)$ dotyczą odpowiednio początkowego i końcowego stanu. Prawdopodobieństwo przejścia wyrażone jest w s^{-1} , siła linii - w jednostkach atomowych, natomiast moc oscylatora jest bezwymiarowa.

Siła linii opisywana jest poprzez element zredukowany \mathbf{P}^1 reprezentujący elektryczny moment dipolowy:

$$\mathbf{S} = \left| \langle \gamma J \parallel \mathbf{P}^1 \parallel \gamma' J' \rangle \right|^2, \quad (6)$$

W przybliżeniu wielokonfiguracyjnym, funkcje falowe $|\gamma J\rangle$ i $|\gamma' J'\rangle$ są kombinacją liniową funkcji stanów bazy $|\psi SLJ\rangle$ oraz $|\psi' S'L'J'\rangle$:

$$|\gamma J\rangle = \sum_i c_i |\psi SLJ\rangle, \quad |\gamma' J'\rangle = \sum_j c'_j |\psi' S'L'J'\rangle. \quad (7)$$

Siła linii może być zatem zapisana jako:

$$\mathbf{S}_{\gamma\gamma'} = \left| \sum_i \sum_j c_i c'_j \langle \psi SLJ \parallel \mathbf{P}^1 \parallel \psi' S'L'J' \rangle \right|^2, \quad (8)$$

gdzie zredukowany element macierzowy operatora tensorowego \mathbf{P}^1 może być zapisany jako iloczyn części kątovej i radialnej. Część radialna zdefiniowana jest jako: $\int_0^\infty R_{nl}(r)rR_{n'l'}(r)dr$.

Element macierzowy operatora przejścia można zapisać w dwóch formach: "in length" oraz "in velocity" [51], które są stosowane w obliczeniach teoretycznych *ab initio* [52–54].

W 1963 roku Mendlowitz zaproponował półempiryczną metodę określenia względnych sił linii dla jonu wanadu V III [55]. Współczynniki kątovej macierzy operatora przejścia zostały policzone w sprzężeniu LS przy użyciu algebry Racah a następnie przetransformowane do sprzężenia pośredniego z wykorzystaniem funkcji falowych uzyskanych w wyniku półempirycznej analizy struktury subtelnej. Ze względu na zastosowanie przybliżenia jednokonfiguracyjnego, w obliczeniach występował tylko jeden parametr radialny, którego wartość dla uproszczenia przyjęto równą jedności. Pozwalało to więc jedynie na określenie względnych wartości siły linii i prawdopodobieństw przejść. Analogiczne podejście zostało zastosowane dla jonów Ni II, Ti II oraz Ti III [56–58].

W połowie lat 70-tych Kurucz [59] i Biemont [60] przedstawili metodę określania bezwzględnych wartości mocy oscylatorów z wykorzystaniem półempirycznych funkcji falowych oraz parametrów radialnych przejść obliczonych teoretycznie przy użyciu skalowanej metody Thomasa-Fermiego-Diraca [61, 62].

W 2012 roku zaproponowałem wykorzystanie precyzyjnie określonych funkcji falowych, uzyskanych za pomocą własnego pakietu programów, do opisu przejść elektrycznych dipolowych [23].

Współczynniki kątovej elementu macierzowego $\langle \psi SLJ \parallel \mathbf{P}^1 \parallel \psi' S'L'J' \rangle$ wyliczane są ściśle, na podstawie formuł zawartych w monografii B.G. Wybourne [63] lub wyprowadzonych przez dr M. Elantkowską. Całki radialne traktowane są jako parametry w procedurze dopasowania, metodą najmniejszych kwadratów, do doświadczalnych wartości mocy oscylatorów gf . W odróżnieniu do podejścia stosowanego przez Mendlowitza, procedura ta umożliwia określenie wartości parametrów radialnych i wyznaczenie bezwzględnych wartości siły linii i prawdopodobieństw przejść. Zaproponowana metoda różni się także od podejścia Kurucza i Biemonta sposobem wyznaczenia całki radialnej. Należy również zwrócić uwagę, że pomimo zastosowania do wyznaczenia funkcji falowej tej samej metody półempirycznej, uzyskiwane wyniki zależą ściśle od przyjętego modelu oddziaływań.

Wprowadzając nową wielkość SR_{gf} , gdzie $(SR_{gf})^2 = gf$, możemy wyrazić wartości SR_{gf} jako kombinację liniową:

$$SR_{gf} = \sum_{nl, n'l'} \left(303.76 \sigma \times 10^{-8} \right)^{1/2} \sum_i \sum_j c_i c'_j \langle \psi SLJ \parallel \mathbf{P}^1 \parallel \psi' S'L'J' \rangle, \quad (9)$$

gdzie sumowanie $nl, n'l'$ przebiega po wszystkich możliwych rodzajach przejść.

W procedurze obliczeń przyjmuje się, że wartości SR_{gf} mogą być zarówno dodatnie, jak i ujemne, w zależności od wartości całek przejść mających dominujący wkład. Należy zwrócić uwagę, że ze względu na zastosowanie przybliżenia wielokonfiguracyjnego, w sumowaniu po stanach bazy i, j we wzorze (9) występują czynniki związane z wieloma parametrami przejść, które mogą dawać wkłady o różnych znakach. Dlatego też wpływ opisywanych przez Cowana [35, 64] tzw. "cancellation effects" są szczególnie istotne i prawidłowy opis przejść możliwy jest jedynie przy użyciu właściwych funkcji falowych.

W pierwszym kroku obliczeń brane są pod uwagę jedynie przejścia pomiędzy poziomami, dla których dominująca amplituda wektora własnego zbliżona jest do jedności oraz doświadczalna wartość mocy oscylatora gf została wyznaczona z dużą dokładnością. Pozwala to na precyzyjne wyznaczenie wartości głównych parametrów przejść. Z analizy przejść, dla których obserwuje się porównywalne udziały dwóch parametrów, możliwe jest określenie ich względnych znaków. W kolejnym etapie procedury dopasowania przeprowadza się obliczenia dla przejść pomiędzy poziomami, dla których obserwuje się istotne mieszanie konfiguracji. Na każdym etapie obliczeń możliwe jest ustalenie uzyskanej wcześniej wartości parametru radialnego oraz analiza wkładów poszczególnych parametrów do wyliczanej wartości mocy oscylatora.

Oprócz porównania wyliczanych i doświadczalnych wartości mocy oscylatorów możliwe jest określenie ich wartości dla wszystkich możliwych przejść pomiędzy poziomami w rozważanym układzie konfiguracji.

Czas życia stanu wzbudzonego $|\gamma J\rangle$ jest opisany jako odwrotność sumy prawdopodobieństw $A_{\gamma\gamma'}$ dla wszystkich możliwych przejść na poziomy o niższej energii $|\gamma' J'\rangle$:

$$\tau_{\gamma} = \frac{1}{\sum_{\gamma'} A_{\gamma\gamma'}}. \quad (10)$$

Poprzez dokonanie odpowiednich sumowań możliwe jest określenie czasów życia dla badanych poziomów. Porównanie wyliczanych i doświadczalnych wartości czasów życia stanowi test poprawności parametryzacji mocy oscylatorów i może być wykonywane na każdym etapie obliczeń.

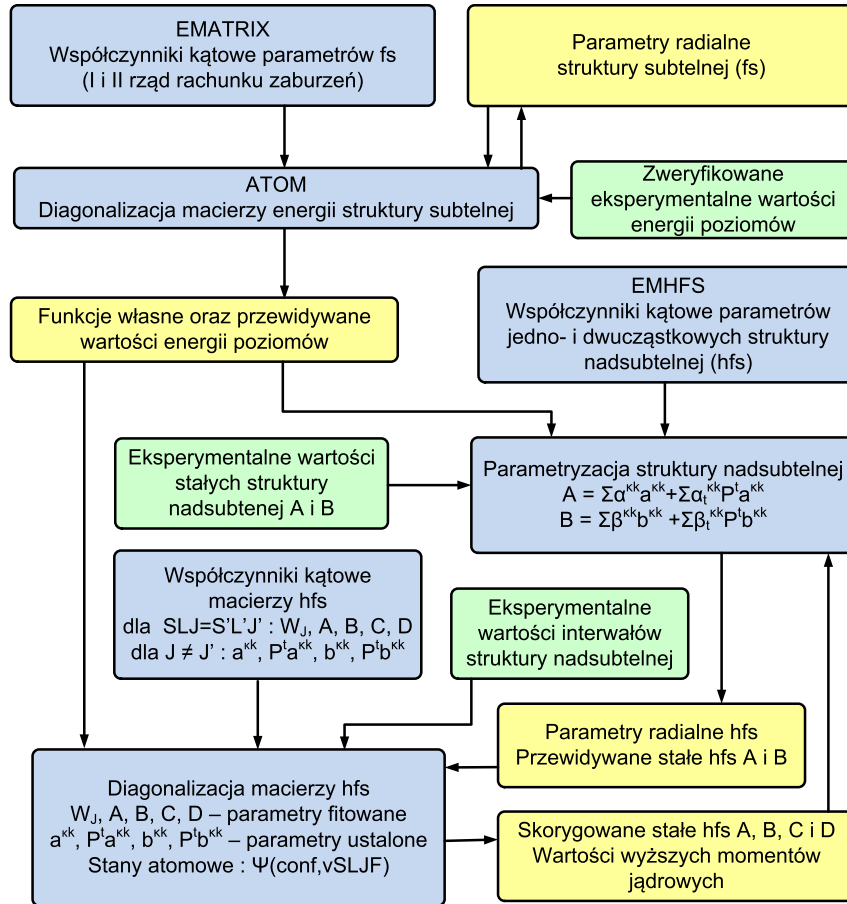
5.2.4 Opis pakietu programów do półempirycznej analizy struktury atomu i przejść promienistych

Schemat głównych procedur obliczeniowych stosowanych w analizie struktury subtelnej i nadsubtelnej przedstawiony jest na rys. 1.

Do konstrukcji macierzy współczynników kątowych operatorów oddziaływań w strukturze subtelnej służy program EMATRIX. Składa się on z programu głównego, pełniącego funkcje sterujące, oraz modułów odpowiedzialnych za obliczenia dla różnych rodzajów konfiguracji oraz za obliczenia elementów oddziaływań międzykonfiguracyjnych. Program korzysta ze stałych zbiorów danych, które powinny być dostępne w procesie generacji. Zbiory te są otwierane automatycznie i mają stałe, zastrzeżone nazwy, jednoznacznie określające ich zawartość. Program składa się z 276 podprogramów, zawiera około 600 formuł i liczy ogółem około 130 tys. linii kodu źródłowego.

W programie głównym deklarowane są konfiguracje elektronowe, dla których generowana będzie macierz. Konfiguracje podaje się zgodnie z tradycyjnie przyjętym opisem spektroskopowym (główna liczba kwantowa n , orbitalna liczba kwantowa l oraz liczba elektronów N na podpowłoce). Program analizuje powyższy zapis, przyporządkowując odpowiednie wartości liczbom kwantowym n, l , itd. Po wczytaniu oznaczeń wszystkich konfiguracji, dla każdej z nich obliczane są elementy macierzowe. W przypadku oddziaływań międzykonfiguracyjnych, każdej parze konfiguracji przyporządkowywany jest w sposób jednoznaczny, wyliczany specjalnym algorytmem kod, który pozwala na przekierowanie obliczeń do właściwych procedur. W trakcie obliczeń do specjalnego zbioru zapisywane są informacje o numeracji parametrów oraz stanów elektronowych, wykorzystywane przez inne programy pakietu.

Po zakończeniu obliczeń dokonywane jest uporządkowanie zbioru elementów macierzowych względem liczby kwantowej J i uzyskaną w ten sposób macierz struktury subtelnej zapisuje do głów-



Rysunek 1: Schemat procedur obliczeniowych parametryzacji struktury subtelnej i nadsubtelnej

tego zbioru wyjściowego. Do zbioru tego dopisywane są także opisy możliwych stanów SL oraz odpowiadające im, obliczone wartości czynnika Landego g_J . Na koniec tworzona jest macierz zbioru wejściowego do diagonalizacji macierzy struktury subtelnej (program ATOM), do której należy wpisać wartości początkowe parametrów radialnych, wartości doświadczalnych poziomów energetycznych i odpowiadające im wartości czynników Landego g_J oraz stałe struktury nadsubtelnej (hfs).

W celu zabezpieczenia zawartości przed przypadkową zmianą oraz zmniejszenia objętości, zbiór elementów macierzowych konwertowany jest na formę binarną przy użyciu programy FSCONV.

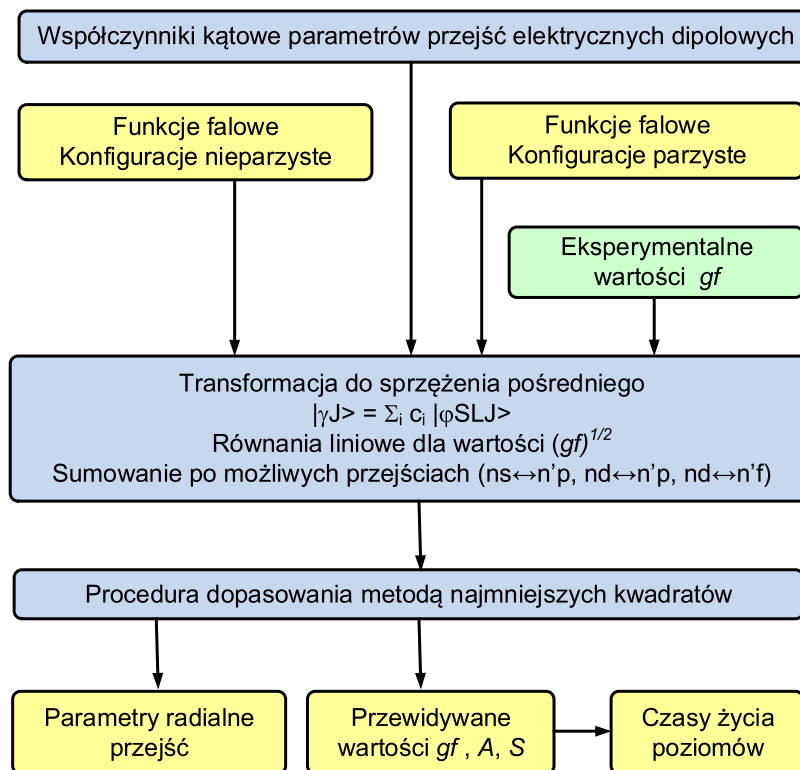
Dla układów zawierających dużą liczbę konfiguracji, przyjmuje się model, w którym parametry radialne oddziaływań tego samego typu, opisywane takimi samymi liczbami kwantowymi, są identyczne. Ponadto dla konfiguracji elektronowych tego samego typu, różniących się jedynie główną liczbą kwantową (tzw. serie rydbergowskie), można wprowadzić zależności pomiędzy parametrami, których czynniki zależne są od tzw. efektywnych liczb kwantowych. Prowadzi to do znaczącej redukcji liczby parametrów niezależnych, ułatwiając procedurę diagonalizacji macierzy oddziaływań struktury subtelnej. Redukcję liczby parametrów niezależnych umożliwia pakiet czterech programów, które ze względu na konieczność zachowania przejrzystości, nie zostały umieszczone na schemacie. W przypadku układów zawierających kilkadziesiąt konfiguracji możliwa jest redukcja liczby parametrów z kilkunastu tysięcy do kilkuset. Jest to niezbędny warunek do efektywnej analizy struktury subtelnej badanego układu.

Do diagonalizacji macierzy energii struktury subtelnej służy program ATOM. W rezultacie iteracyjnej procedury otrzymuje się wartości parametrów radialnych opisujących strukturę subtelną oraz funkcje falowe pozwalające na wyznaczenie innych atrybutów opisujących zarówno poziomy elektronowe jak i przejścia pomiędzy nimi.

Pierwszym etapem obliczeń struktury nadsubtelnej jest generacja macierzy współczynników kątowych parametrów opisujących oddziaływania w strukturze nadsubtelnej (program EMHFS). Struktura programu jest zbliżona do struktury programu EMATRIX. Program składa się z 76 podprogramów, zawiera około 250 formuł i liczy ogółem około 50 tys. linii kodu źródłowego. Kolejne procedury, uwzględniając uzyskane z analizy struktury subtelnej funkcje falowe, pozwalają na uzyskanie równań liniowych opisujących obserwowane doświadczalnie stałe struktury nadsubtelnej. Rozwiązanie nadokreślonego układu równań, metodą najmniejszych kwadratów, umożliwia uzyskanie parametrów radialnych oraz przewidywanych stałych struktury nadsubtelnej.

Analiza struktury nadsubtelnej stanowi ważny test poprawności funkcji falowych, uzyskanych w wyniku parametryzacji struktury subtelnej. Dlatego też bardzo istotna jest możliwość szybkiej zbiorczej analizy rezultatów otrzymanych w obu tych procedurach. W tym celu opracowałem program, który na podstawie kilku zbiorów wyjściowych pozwala przedstawić te wyniki w formie jednej tabeli.

Wystarczająca ilość bardzo dokładnych danych dotyczących struktury nadsubtelnej, zawierająca informacje o interwałach struktury nadsubtelnej, pozwala na wyznaczenie skorygowanych stałych struktury nadsubtelnej poprzez bezpośrednią diagonalizację macierzy hfs . Procedura ta umożliwia uwzględnienie wpływu oddziaływań niediagonalnych względem liczby kwantowej J na wartości interwałów struktury nadsubtelnej. Diagonalna część macierzy hfs zawiera współczynniki odpowiadające poszczególnym wkładom do energii podpoziomu struktury nadsubtelnej E_F : energii środka ciężkości W_J oraz doświadczalnym stałym hfs A, B, C i D. Traktowane są one jako wolne parametry w procedurze dopasowania doświadczalnych i wyliczanych wartości energii E_F . Numeryczna dokładność wartości energii E_F wynosi 1 Hz. Różnice pomiędzy wartościami E_F and $E_{F\pm 1}$ są równe eksperymentalnie określonym wartościom interwałów struktury nadsubtelnej. Wartości parametrów niediagonalnych względem liczby kwantowej J są ustalone. W efekcie uzyskuje się skorygowane wartości stałych struktury nadsubtelnej, które można użyć do określenia wartości parametrów radialnych hfs oraz wartości momentów jądrowych.



Rysunek 2: Schemat procedur obliczeniowych parametryzacji przejść promienistych

Algorytmny oraz około 90% kodów źródłowych wszystkich programów wchodzących w skład pakietu do analizy struktury subtelnej i nadsubtelnej, którego główne elementy przedstawiono na rys. 1, za wyjątkiem programów FSCONV oraz ATOM, są efektem mojej wieloletniej pracy.

Schemat głównych procedur obliczeniowych parametryzacji przejść promienistych przedstawiony jest na rys. 2.

Do generacji macierzy współczynników kątowych opisujących przejścia elektryczne dipolowe służy program EM-TRANSITIONS. Program TRANSITIONS-EQ, wykorzystując funkcje własne struktury subtelnej, tworzy równania liniowe dla wartości SR_{gf} opisujące przejścia pomiędzy poziomami. Wartości parametrów radialnych przejść określa się w procedurze dopasowania metoda najmniejszych kwadratów. Szereg programów pomocniczych, służących do pobierania do zbioru wejściowego wartości mocy oscylatorów z dostępnych baz danych, analizy wkładów poszczególnych parametrów przejść do wartości SR_{gf} , konwersji wyliczanych wartości mocy oscylatorów na siłę linii, prawdopodobieństwa przejść oraz obliczeń czasów życia, nie został przedstawiony na schemacie.

5.2.5 Omówienie prac stanowiących jednotematyczny cykl publikacji

H1) An alternative method for determination of oscillator strengths: The example of Sc II

W pracy tej po raz pierwszy przedstawiono półempiryczną metodę parametryzacji mocy oscylatorów dla przejść elektrycznych dipolowych, stosując przybliżenie wielokonfiguracyjne.

Wybór jonu skandu motywowany był jego prostą strukturą elektronową, w której występują dwa elektrony na otwartych powłokach, oraz dostępnością dużej liczby danych dotyczących stałych struktury nadsubtelnej [65–68] oraz mocy oscylatorów [69–71].

W pracy przedstawiono szczegółowo metodę parametryzacji struktury subtelnej mającą na celu uzyskanie funkcji falowych opisujących stany elektronowe oraz weryfikację poprawności tych funkcji na podstawie analizy struktury nadsubtelnej. Jest to zagadnienie szczególnie istotne, ponieważ opis przejść elektronowych stanowi najbardziej czuły test na poprawność funkcji falowych.

W opisie struktury subtelnej i nadsubtelnej uwzględniono oddziaływania występujące zarówno w pierwszym jak i drugim rzędzie rachunku zaburzeń. Obliczenia przeprowadzono dla 73 konfiguracji nieparzystych oraz takiej samej liczby konfiguracji parzystych. W analizie struktury subtelnej konfiguracji nieparzystych użytych zostało 246 niezależnych parametrów, z których 36 traktowanych zostało jako wolne parametry w procedurze dopasowania do 75 doświadczalnych poziomów energii. W analogicznych obliczeniach dla konfiguracji parzystych użyto 516 parametrów niezależnych, w tym 57 wolnych, oraz 93 doświadczalnych wartości energii. Weryfikację poprawności funkcji falowych przeprowadzono na podstawie jednoczesnej parametryzacji struktury nadsubtelnej dla obu parzystości. Takie podejście umożliwiło lepsze określenie parametrów radialnych oraz zapewniło większą dokładność przewidywań dotyczących stałych struktury nadsubtelnej. W procedurze dopasowania dla 97 wyliczanych i doświadczalnych wartości mocy oscylatorów wyznaczono wartości parametrów radialnych przejść. Dokonano również porównania z wartościami mocy oscylatorów uzyskanymi z wykorzystaniem półempirycznych funkcji falowych oraz teoretycznie wyliczonych parametrów radialnych przejść [59, 72].

Przeprowadzone obliczenia potwierdziły, że głównym czynnikiem decydującym o zgodności wyliczanych i doświadczalnych wartości mocy oscylatorów jest funkcja falowa.

Podane zostały przywidywane wartości stałych struktury nadsubtelnej dla wszystkich poziomów w zakresie energii do około $95\,000\text{ cm}^{-1}$, również tych nie obserwowanych doświadczalnie. Obliczono również wartości mocy oscylatorów dla wszystkich możliwych przejść z analizowanych poziomów. Przedstawiono też możliwość określenia wartości mocy oscylatorów dla przejść z poziomów nie obserwowanych dotąd doświadczalnie.

H2) Semi-empirical calculations of oscillator strengths and hyperfine constants for Ti II

W pracy zastosowano metodę półempirycznej parametryzacji mocy oscylatorów dla przejść elektrycznych dipolowych dla jonu tytanu. Był to kolejny etap weryfikacji skuteczności metody dla układu

konfiguracji z trzema elektronami na otwartych powłokach. Wykorzystane zostały najnowsze dane dotyczące poziomów energetycznych, prawdopodobieństw przejść oraz stałych struktury nadsubtelnej [73–77].

Obliczenia przeprowadzono dla 61 konfiguracji nieparzystych oraz takiej samej liczby konfiguracji parzystych. W analizie struktury subtelnej konfiguracji nieparzystych użytych zostało 377 niezależnych parametrów, z których 42 traktowanych zostało jako wolne parametry w procedurze dopasowania do 121 doświadczalnych poziomów energii. W analogicznych obliczeniach dla konfiguracji parzystych użyto 488 parametrów niezależnych, w tym 34 wolnych, oraz 131 doświadczalnych wartości energii. Weryfikację poprawności funkcji falowej przeprowadzono na podstawie jednoczesnej parametryzacji struktury nadsubtelnej dla obu parzystości, w której wykorzystano wartości stałych struktury nadsubtelnej dla 34 poziomów energii.

W procedurze dopasowania dla 461 wyliczanych i doświadczalnych wartości mocy oscylatorów wyznaczono wartości 10 niezależnych parametrów radialnych przejść. Dokonano również porównania z wartościami mocy oscylatorów uzyskanymi z wykorzystaniem półempirycznych funkcji falowych oraz teoretycznie wyliczonych parametrów radialnych [78, 79]. W pracy zamieszczono również graficzne porównanie wartości logarytmów wyliczanych i doświadczalnych mocy oscylatorów, w postaci powszechnie przyjętej w pracach dotyczących tej tematyki.

W materiałach uzupełniających do pracy, dostępnych on-line, podano przewidywane wartości stałych struktury nadsubtelnej dla wszystkich poziomów o zakresie energii do około $84\,000\text{ cm}^{-1}$, również tych nie obserwowanych doświadczalnie. Zamieszczone zostały również przewidywane wartości mocy oscylatorów dla 1340 przejść posortowanych według liczby falowej. Przewidywane wartości stałych struktury nadsubtelnej zostały umieszczone przez R. Kurucz'a w bazie danych (<http://kurucz.harvard.edu/atoms/2201/>, pliki ab220147.dat oraz ab220149.dat).

H3) Semi-empirical analysis of oscillator strengths for Nb II

Praca powstała jako efekt krótkoterminowego wyjazdu naukowego, który odbyłem na zaproszenie prof. Saby Bouazza z Uniwersytetu w Reims. Zaproponowałem w niej wykorzystanie funkcji własnych dla jonu niobu, określonych wcześniejszych i wykorzystanych do parametryzacji struktury nadsubtelnej [80, 81]. Wybór ten uzasadniała ponadto dostępność dokładnych danych dotyczących mocy oscylatorów [82, 83].

Obliczenia przeprowadzono dla układu 11 konfiguracji nieparzystych oraz 17 konfiguracji parzystych. W procedurze dopasowania dla 251 wyliczanych i doświadczalnych wartości mocy oscylatorów wyznaczono wartości 4 niezależnych parametrów radialnych przejść. W materiałach uzupełniających do pracy, dostępnych on-line, podano przewidywane wartości mocy oscylatorów dla 2968 przejść posortowanych według liczby falowej.

H4) Hyperfine structure, lifetime and oscillator strength of V II

Praca powstała przy współpracy z prof. Saby Bouazza z Uniwersytetu w Reims. Wykorzystane zostały funkcje falowe dla jonu wanadu określone wcześniej w pracach dotyczących struktury subtelnej V II [84, 85]. Wybór jonu wanadu uzasadniała ponadto dostępność dokładnych danych dotyczących stałych struktury nadsubtelnej oraz prawdopodobieństw przejść [86–88].

Obliczenia przeprowadzono dla układu 3 konfiguracji nieparzystych oraz 6 konfiguracji parzystych. Przedstawiono porównanie wyliczanych i doświadczalnych wartości stałych struktury nadsubtelnej A dla 20 poziomów. W procedurze dopasowania dla 203 wyliczanych i doświadczalnych wartości mocy oscylatorów wyznaczono wartości 6 niezależnych parametrów radialnych przejść. Podano wartości czasów życia dla 31 poziomów nieparzystych obliczone z użyciem programu COWAN CODE. Dokonano również porównania z wartościami mocy oscylatorów i czasów życia uzyskanymi z wykorzystaniem półempirycznych funkcji falowych oraz teoretycznie wyliczonych parametrów radialnych [78, 79]. W materiałach uzupełniających do pracy, dostępnych on-line, podano przewidywane wartości mocy oscylatorów dla 1093 przejść posortowanych według liczby falowej.

H5) Semi-empirical analysis of the fine structure and oscillator strengths for atomic strontium

Motywacją do podjęcia badań przedstawionych w pracy była dostępność danych dotyczących poziomów energii oraz prawdopodobieństw przejść dla konfiguracji rydbergowskich o głównej liczbie kwantowej aż do $n = 20$ włącznie [89]. Dawało to możliwość analizy zależności wartości parametrów radialnych przejść od liczby kwantowej n .

Obliczenia przeprowadzono dla 61 konfiguracji nieparzystych oraz 81 konfiguracji parzystych. W analizie struktury subtelnej konfiguracji nieparzystych użytych zostało 228 niezależnych parametrów, z których 62 traktowanych zostało jako wolne parametry w procedurze dopasowania do 196 doświadczalnych poziomów energii. W analogicznych obliczeniach dla konfiguracji parzystych użyto 792 parametrów niezależnych, w tym 28 wolnych, oraz 180 doświadczalnych wartości energii.

W procedurze dopasowania dla 86 wartości mocy oscylatorów wyznaczono wartości 26 niezależnych parametrów radialnych przejść. W pracy przedstawiono również wyniki obliczeń czasów życia dla 54 poziomów i dokonano ich porównania z wartościami uzyskanymi doświadczalnie oraz w wyniku obliczeń teoretycznych [79, 90–96].

W materiałach uzupełniających do pracy, dostępnych on-line, podano przewidywane wartości mocy oscylatorów dla 728 przejść posortowanych według liczby falowej.

H6) Semi-empirical determination of radiative lifetimes for Sc II and Ti II

W pracy tej wykorzystano wyniki obliczeń mocy oscylatorów dla jonów skandu oraz tytanu, publikowane wcześniej w pracach H1 oraz H2 [23, 24]. Określenie wartości prawdopodobieństw dla wszystkich możliwych przejść pozwoliło na wyznaczenie czasów życia dla poziomów wzbudzonych. W tym celu opracowano procedury do konwersji wyliczanych mocy oscylatorów na prawdopodobieństwa przejść oraz odpowiednich sumowań koniecznych do wyznaczenia czasów życia. Programy te od tej pory są stosowane do bieżącej kontroli poprawności obliczeń w procedurze parametryzacji mocy oscylatorów.

Określone zostały czasy życia dla 38 poziomów jonu skandu oraz 75 poziomów jonu tytanu. Wyznaczone wartości zostały porównane z dostępnymi wynikami doświadczalnymi oraz teoretycznymi [71, 79, 97–99].

H7) Semi-empirical determination of radiative parameters for Ag II

Motywacją do podjęcia obliczeń mocy oscylatorów dla jonu srebra było opublikowanie krytycznej kompilacji danych dotyczących poziomów energii oraz prawdopodobieństw przejść dla jonu Ag II [100].

Obliczenia zostały wykonane w bazie 16 konfiguracji nieparzystych oraz 24 konfiguracji parzystych. W analizie struktury subtelnej konfiguracji nieparzystych użytych zostało 445 niezależnych parametrów, z których 23 traktowanych zostało jako wolne parametry w procedurze dopasowania do 55 doświadczalnych poziomów energii. W analogicznych obliczeniach dla konfiguracji parzystych użyto 724 parametrów niezależnych, w tym 26 wolnych, oraz 43 doświadczalnych wartości energii. Uzyskano średni błąd kwadratowy, odpowiednio 51 cm^{-1} oraz 14 cm^{-1} . Dla konfiguracji nieparzystych wartość ta była porównywalna, a dla układu parzystego - około czterokrotnie mniejsza, od wyniku uzyskanego przez Kalusa i innych [101]. W procedurze dopasowania 237 wyliczanych i doświadczalnych mocy oscylatorów użyto 13 niezależnych parametrów. W pracy tej przedstawiono porównanie wyliczonych i doświadczalnych siły linii, które z punktu widzenia mechaniki kwantowej są bardziej adekwatne niż porównanie logarytmów mocy oscylatorów.

W pracy przedstawiono również wyniki obliczeń czasów życia dla 55 poziomów nieparzystych oraz 38 poziomów parzystych. Dla 15 z tych poziomów dokonano porównania wyliczonych czasów życia z wartościami uzyskanymi doświadczalnie oraz w wyniku obliczeń teoretycznych [102–109]. W materiałach uzupełniających podano wyliczone wartości mocy oscylatorów oraz prawdopodobieństw dla 1103 przejść pomiędzy poziomami elektronowymi.

H8) Semi-empirical determination of radiative parameters for atomic nickel

Motywacją na podjęcia obliczeń mocy oscylatorów dla atomu niklu była dostępność bardzo dużej liczby dokładnych wartości doświadczalnych czasów życia poziomów [110–114] oraz prawdopodobieństw przejść [115, 116]. Praca stanowiła ponadto kontynuację cyklu poświęconego pierwiastkom z grupy żelaza [23, 24, 26, 28], które są przedmiotem szczególnego zainteresowania w badaniach astrofizycznych.

Obliczenia zostały wykonane w bazie 21 konfiguracji nieparzystych oraz 26 konfiguracji parzystych. W analizie struktury subtelnej konfiguracji nieparzystych użytych zostało 409 niezależnych parametrów, z których 38 traktowanych zostało jako wolne parametry w procedurze dopasowania do 153 doświadczalnych poziomów energii. W analogicznych obliczeniach dla konfiguracji parzystych użyto 550 parametrów niezależnych, w tym 26 wolnych, oraz 130 doświadczalnych wartości energii. Uzyskano średni błąd kwadratowy 59 cm^{-1} i 31 cm^{-1} , odpowiedni dla układów konfiguracji nieparzystych i parzystych. Wartości te były porównywalne z wynikami prezentowanymi przez Kurucza [79] oraz około dwukrotnie mniejsze niż otrzymane w analizie opublikowanej przez Litzena i innych [117].

W procedurze dopasowania 582 wyliczanych i doświadczalnych mocy oscylatorów użyto 13 niezależnych parametrów. W celu właściwej oceny jakości dopasowania, podobnie jak w poprzednich pracach, poddano analizie siły linii dla analizowanych przejść. Porównanie wykresów punktowych $\log(\mathbf{S}_{\text{exp}}/\mathbf{S}_{\text{calc}})$ w funkcji \mathbf{S}_{calc} dla obliczeń wykonanych w pracy oraz tych, prezentowanych przez Kurucza [79] pokazuje, że pomimo zbliżonych wyników obliczeń struktury subtelnej uzyskanych przy użyciu tej samej metody półempirycznej, wyniki parametryzacji mocy oscylatorów przedstawione w niniejszej pracy są lepsze. Jest to kolejne potwierdzenie faktu, że najbardziej czułym testem poprawności funkcji falowych jest analiza przejść promienistych. Wskazuje to ponadto, że Hamiltonian użyty w naszych obliczeniach w pełniejszy sposób uwzględnia oddziaływania występujące w atomie. Potwierdza to również, dokonane w pracy, porównanie wyliczanych i doświadczalnych czasów życia dla 75 poziomów.

W pracy oraz materiałach uzupełniających podano wyliczone wartości czasów życia dla 173 poziomów oraz mocy oscylatorów, prawdopodobieństw oraz siły linii dla 3044 przejść pomiędzy poziomami elektronowymi.

5.2.6 Podsumowanie

Właściwy opis przejść promienistych w atomie możliwy jest jedynie z użyciem precyzyjnie określonych funkcji falowych. W analizie struktury subtelnej, w której wyznaczamy amplitudy funkcji falowej, w zależności od ilości dostępnych danych doświadczalnych, należy uwzględnić w jak najpełniejszy sposób efekty wszelkich oddziaływań występujących w atomie. Zastosowanie własnego, unikatowego w skali światowej, zintegrowanego pakietu programów pozwala na określenie amplitud funkcji falowych niezbędnych do właściwego opisu szeregu atrybutów opisujących poziomy energii oraz przejścia między nimi. Przedstawione prace potwierdziły skuteczność półempirycznej metody opisu przejść promienistych w atomie. W przypadku atomów z wieloma elektronami na otwartych powłokach podejście półempiryczne pozwoliło uzyskać w wielu przypadkach lepsze wyniki niż zastosowanie innych metod obliczeniowych.

Obszerne tabele zawierające przewidywane wartości stałych struktury nadsubtelnej, mocy oscylatorów, prawdopodobieństw przejść oraz czasów życia, stanowiące uzupełnienie istniejących baz danych, mogą stać się pomocne w interpretacji widm obserwowanych w badaniach astrofizycznych i dostarczyć motywacji do dalszych prac doświadczalnych i teoretycznych.

5.3 Plany naukowe na przyszłość

Potwierdzenie skuteczności półempirycznej metody opisu przejść promienistych stanowi silną motywację dla mnie do kontynuacji obliczeń dla pierwiastków z grupy żelazowców, dla których w ostatnich latach, przedstawiono wiele bardzo dokładnych danych doświadczalnych dotyczących prawdopodobieństw przejść oraz czasów życia (np. <http://www.as.utexas.edu/~chris/lab.html>). Ten sam ze-

spół badawczy opublikował również dane dotyczące pierwiastków ziem rzadkich. Obliczenia dla tej grupy pierwiastków zostaną podjęte po przeprowadzeniu, zapoczątkowanej w ostatnim czasie, optymalizacji procedur obliczeniowych dla macierzy o wielkich rozmiarach.

Naturalną kontynuacją prac dotyczących parametryzacji przejść promienistych będzie opracowanie analogicznych procedur dla przejść wzbronionych. Intensywne badania dotyczące wyznaczania prawdopodobieństw przejść wzbronionych oraz czasów życia poziomów metastabilnych dla grupy żelazowców prowadzone są od wielu lat [118].

Kolejnym problemem godnym rozważenia, będzie opracowanie metody jednoczesnej parametryzacji struktury subtelnej dla układu zawierającego konfigurację obu parzystości. Pozwoli to na bardziej adekwatne określenie wartości parametrów dla oddziaływań opisywanych przez drugi rząd rachunku zaburzeń.

Literatura

- [1] M. Elantkowska, A. Bernard, J. Dembczynski, and J. Ruczkowski. Hyperfine-structure constants and isotope shift of the levels of the configuration $4f^6 5d 6s^2$ in Eu I. *Z. Phys. D*, 27(2):103–109, 1993.
- [2] J. Dembczyński, G. Szawiola, M. Elantkowska, E. Stachowska, and J. Ruczkowski. Construction of energy matrix for complex atoms in space of $(nd+n's)^{N+2} + \sum_{i,j} nd^{N+2-w_i-w_j} n_i l_i^{w_i} n_j l_j^{w_j}$ (where $w_i + w_j \leq 2$) configurations. *Phys. Scr.*, 54(5):444, 1996.
- [3] J. Dembczynski, E. Stachowska, J. Ruczkowski, and A. Stachowska. Interpretation of experiments in paul trap. *CMST*, 4:43–56, 1998.
- [4] J. Dembczynski, J. Ruczkowski, E. Stachowska, and A. Stachowska. Computer package for fine structure analysis of a free atom. *CMST*, 4:79–97, 1998.
- [5] M. Elantkowska, J. Ruczkowski, and J. Dembczyński. Construction of energy matrix for complex atoms. Part 2. *Phys. Scr.*, 59(1):49, 1999.
- [6] S. Bouazza, J. Dembczynski, E. Stachowska, G. Szawiola, and J. Ruczkowski. Reanalysis and semi-empirical predictions of the hyperfine structure of $^{91}\text{Zr I}$ in the model space $(4d+5s)^4$. *Eur. Phys. J. D*, 4(1):39–46, 1998.
- [7] J. Dembczynski, S. Bouazza, G. Szawiola, and J. Ruczkowski. Semi-empirical predictions of the hyperfine structure of $^{179}\text{Hf I}$ in the model space $(5d+6s)^4$. *J. Phys. II*, 7(9):1175–1183, 1997.
- [8] J. Dembczynski, D. Stefanska, G. Szawiola, B. Furmann, E. Stachowska, A. Jarosz, B. Arcimowicz, A. Buczek, W. Koczorowski, A. Krzykowski, A. Kajoch, M. Elantkowska, J. Ruczkowski, and W. Kowalkiewicz. Observation of Pr^+ ions in Paul trap. *Acta Phys. Pol. A*, 92(3):517–526, 1997.
- [9] Y.P. Gangrsky, D. Karaivanov, B.N. Markov, S. Zemlyanoi, T. Kokalova, K. Marinova, E. Stachowska, J. Dembczynski, J. Ruczkowski, and B. Arcimowicz. Hyperfine structure investigation of the $4f^7 6s^2 \ ^8S_{7/2}$ and $4f^7 6s 6p \ ^6P_{5/2}$ states of unstable europium isotope ^{155}Eu . *Acta Phys. Pol. B*, 30(5):1415–1420, 1999.
- [10] Y.P. Gangrsky, V.D. Karaivanov, B.N. Markov, S.G. Zemlyanoi, T.T. Kokalova, K.P. Marinova, E. Stachowska, J. Dembczynski, J. Ruczkowski, and B. Arcimowicz. Hyperfine splitting and isotope shift in the optical transition $4f^7 6s^2 \ ^8S_{7/2} \rightarrow 4f^7 6s 6p \ ^6P_{5/2}$ of $^{151,153,155}\text{Eu}$ isotopes and electromagnetic moments of ^{155}Eu . *Eur. Phys. J. D*, 11(3):341–345, 2000.
- [11] J. Dembczyński, E. Stachowska, J. Ruczkowski, M. Elantkowska, G. Szawiola, and D. Stefańska. Recent progress in the theory of the complex atomic hyperfine structure. *Hyperfine Interact.*, 127(1–4):49–56, 2000.
- [12] B. Furmann, D. Stefanska, E. Stachowska, J. Ruczkowski, and J. Dembczynski. Hyperfine-structure measurements and new levels evaluation in singly ionized praseodymium. *Eur. Phys. J. D*, 17(3):275–284, 2001.
- [13] E. Stachowska, M. Elantkowska, J. Ruczkowski, and J. Dembczynski. Reanalysis and semi-empirical predictions of the hyperfine structure of eu i in the odd parity multiconfiguration system. *Phys. Scr.*, 65(3):237–247, 2002.
- [14] J. Ruczkowski, E. Stachowska, M. Elantkowska, G.H. Guthohrlein, and J. Dembczynski. Interpretation of the hyperfine structure of the even configuration system of pri. *Phys. Scr.*, 68(2):133–140, 2003.

- [15] J. Dembczyński, M. Elantkowska, J. Ruczkowski, and D. Stefańska. Semi-empirical predictions of even atomic energy levels and their hyperfine structure for the scandium atom. *At. Data Nucl. Data Tables*, 93(1):149–165, 2007.
- [16] A. Jarosz, D. Stefańska, M. Elantkowska, J. Ruczkowski, A. Buczek, B. Furmann, P. Głowacki, A. Krzykowski, Ła. Piatkowski, E. Stachowska, and J. Dembczyński. High precision investigations of the hyperfine structure of metastable levels in a chromium atom. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 40(13):2785, 2007.
- [17] B. Furmann, J. Ruczkowski, D. Stefańska, M. Elantkowska, and J. Dembczyński. Hyperfine structure in La II odd configuration levels. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 41(21):215004, 2008.
- [18] B. Furmann, M. Elantkowska, D. Stefańska, J. Ruczkowski, and J. Dembczyński. Hyperfine structure in La II even configuration levels. *J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys.*, 41(23):235002, 2008.
- [19] J. Dembczyński, M. Elantkowska, B. Furmann, J. Ruczkowski, and D. Stefańska. Critical analysis of the methods of interpretation in the hyperfine structure of free atoms and ions: case of the model space $(5d+6s)^3$ of the lanthanum atom. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 43(6):065001, 2010.
- [20] B. Arcimowicz, J. Dembczyński, P. Głaowacki, J. Ruczkowski, M. Elantkowska, G.H. Guthöhrlein, and L. Windholz. Progress in the analysis of the even parity configurations of tantalum atom. *Eur. Phys. J.-Spec. Top.*, 222(9):2085–2102, 2013.
- [21] J. Dembczyński, M. Elantkowska, J. Ruczkowski, I.K. Öztürk, A. Er, F. Güzelçimen, Gö. Başar, and S. Kröger. Parametric study of the fine and hyperfine structure for the even parity configurations of atomic niobium. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 48(1):015006, 2015.
- [22] J. Dembczyński, M. Elantkowska, and J. Ruczkowski. Method for detecting the isomeric state $I = (3/2)^+$ in ^{229}Th with laser-induced fluorescence. *Phys. Rev. A*, 92:012519, Jul 2015.
- [23] J. Ruczkowski, M. Elantkowska, and J. Dembczyński. An alternative method for determination of oscillator strengths: The example of Sc II. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 145:20–42, 2014.
- [24] J. Ruczkowski, M. Elantkowska, and J. Dembczyński. Semi-empirical calculations of oscillator strengths and hyperfine constants for Ti II. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 149:168–183, 2014.
- [25] J. Ruczkowski, S. Bouazza, M. Elantkowska, and J. Dembczyński. Semi-empirical analysis of oscillator strengths for Nb II. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 155:1–9, 2015.
- [26] S. Bouazza, J. Ruczkowski, M. Elantkowska, and J. Dembczyński. Hyperfine structure, lifetime and oscillator strength of V II. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 166:55–63, 2015.
- [27] J. Ruczkowski, M. Elantkowska, and J. Dembczyński. Semi-empirical analysis of the fine structure and oscillator strengths for atomic strontium. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 170:106–116, 2016.
- [28] J. Ruczkowski, M. Elantkowska, and J. Dembczyński. Semi-empirical determination of radiative lifetimes for Sc II and Ti II. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 176:6–11, 2016.
- [29] J. Ruczkowski, M. Elantkowska, and J. Dembczyński. Semi-empirical determination of radiative parameters for Ag II. *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, 459:3768–3782, 2016.

- [30] J. Ruczkowski, M. Elantkowska, and J. Dembczyński. Semi-empirical determination of radiative parameters for atomic nickel. *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, 464:1127–1136, 2017.
- [31] S. Bouazza, P. Quinet, and P. Palmeri. Semi-empirical studies of atomic transition probabilities, oscillator strengths and radiative lifetimes in Hf II. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 163:39 – 49, 2015.
- [32] P. Quinet, S. Bouazza, and P. Palmeri. A comparative study between semi-empirical oscillator strength parametrization and relativistic Hartree-Fock methods for computing the radiative parameters in Zr II spectrum. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 164:193 – 206, 2015.
- [33] S. Bouazza. Oscillator strengths and branching fractions of $4d^7 5p-4d^7 5s$ Rh II transitions. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 187:280 – 286, 2017.
- [34] A. Kramida. Critical Evaluation and Estimation of Uncertainties of Atomic Spectral Data at NIST. <http://www.iacs.stonybrook.edu/sites/iacs.stonybrook.edu/files/pages/971/files/kramida.pdf>, 2015.
- [35] R. D. Cowan. *The Theory of Atomic Structure and Spectra*. Berkeley University of California Press, Berkeley, 1981.
- [36] R. D. Cowan. Robert D. Cowan’s Atomic Structure Code. <https://www.tcd.ie/Physics/people/Cormac.McGuinness/Cowan/>, 2007.
- [37] M. Elantkowska, J. Ruczkowski, and J. Dembczyński. Construction of the energy matrix for complex atoms Part I: General remarks. *Eur. Phys. J. Plus*, 130(1):14, 2015.
- [38] M. Elantkowska, J. Ruczkowski, and J. Dembczyński. Construction of the energy matrix for complex atoms Part II: Explicit formulae for inter-configuration interactions. *Eur. Phys. J. Plus*, 130(1):15, 2015.
- [39] M. Elantkowska, J. Ruczkowski, and J. Dembczyński. Construction of the energy matrix for complex atoms Part III: Excitation of two equivalent electrons from a closed shell into an open shell or an empty shell. *Eur. Phys. J. Plus*, 130(4):83, 2015.
- [40] M. Elantkowska, J. Ruczkowski, and J. Dembczyński. Construction of the energy matrix for complex atoms Part IV: Excitation of one electron from a closed shell into an open shell. *Eur. Phys. J. Plus*, 130(8):170, 2015.
- [41] M. Elantkowska, J. Ruczkowski, and J. Dembczyński. Construction of the energy matrix for complex atoms Part V: Electrostatically correlated spin-orbit and electrostatically correlated hyperfine interactions. *Eur. Phys. J. Plus*, 131(2):47, 2016.
- [42] M. Elantkowska, J. Ruczkowski, and J. Dembczyński. Construction of the energy matrix for complex atoms Part VI: Core polarization effects. *Eur. Phys. J. Plus*, 131(12):429, 2016.
- [43] E. Stachowska, J. Dembczyński, L. Windholz, J. Ruczkowski, and M. Elantkowska. Extended analysis of the system of even configurations of Ta II. *At. Data Nucl. Data Tables*, 113:350 – 360, 2017.
- [44] D. Stefanska, M. Elantkowska, J. Ruczkowski, and B. Furmann. Fine- and hyperfine structure investigations of even configuration system of atomic terbium. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 189:441–456, 2017.
- [45] R. Li, J. Lassen, J. Ruczkowski, A. Teigelhöfer, and P. Bricault. Laser resonance ionization spectroscopy of antimony. *Spectrochim. Acta, Part B*, 128:36–44, 2017.

- [46] M. C. E. Huber and R. J. Sandeman. The measurement of oscillator strengths. *Rep. Prog. Phys.*, 49(4):397, 1986.
- [47] C. H. Skinner. Atomic physics in the quest for fusion energy and ITER. *Phys. Scr.*, T134:014022, 2009.
- [48] E. M. Burbidge, G. R. Burbidge, W. A. Fowler, and F. Hoyle. Synthesis of the elements in stars. *Rev. Mod. Phys.*, 29:547–650, Oct 1957.
- [49] P. Scott, N. Grevesse, M. Asplund, A. Jacques Sauval, K. Lind, Y. Takeda, R. Collet, R. Trampedach, and W. Hayek. The elemental composition of the Sun. *Astron. Astrophys.*, 573:A25, 2015.
- [50] I. I. Sobelman. *Atomic Spectra and Radiative Transitions*. Springer-Verlag, Berlin, 1978.
- [51] G. W. F. Drake, editor. *Springer Handbook of Atomic, Molecular, and Optical Physics*. Springer Science+Business Media, Inc., New York, 2006.
- [52] C. Froese Fischer and M.R. Godefroid. Programs for computing LS and LSJ transitions from MCHF wave functions. *Comput. Phys. Commun.*, 64(3):501 – 519, 1991.
- [53] C. Froese Fischer. Evaluating the accuracy of theoretical transition data. *Phys. Scr.*, 2009(T134):014019, 2009.
- [54] P. Jönsson, G. Gaigalas, J. Bieroń, C. Froese Fischer, and I.P. Grant. New version: Grasp2K relativistic atomic structure package. *Comput. Phys. Commun.*, 184(9):2197 – 2203, 2013.
- [55] H. Mendlowitz. Transition Array for $d^3 \rightarrow d^2p$: Vanadium III. *Astrophys. J.*, 138:1277, November 1963.
- [56] H. Mendlowitz. Calculated Line Strengths for the Transition Array for d^2s-d^2p : Application to Ni II. *Astrophys. J.*, 143:573, February 1966.
- [57] H. Mendlowitz. Calculated Line Strengths for the Transitions Between the Configurations $(3d^3 + 3d^24s)$ and $3d^24p$ in Ti II. *Astrophys. J.*, 154:1099, December 1968.
- [58] H. Mendlowitz. Calculated Transition Array for the Configurations $3d^2-3d4p$ in Ti III. *Astrophys. J.*, 158:385, October 1969.
- [59] R. L. Kurucz. Semiempirical calculation of gf values: Sc II $(3d+4s)^2-(3d+4s)4p$, a detailed example. *Smithsonian Astrophysical Observatory Special Report*, 351, 1973.
- [60] E. Biémont. Computation of oscillator strengths by a semi-empirical method for some elements of the iron-group and their solar photospheric abundance. *Sol. Phys.*, 38(1):15–31, 1974.
- [61] B. W. Shore and D. H. Menzel. Generalized Tables for the Calculation of Dipole Transition Probabilities. *Astrophys. J., Suppl. Ser.*, 12:187, September 1965.
- [62] B. Warner. Atomic oscillator strengths-I. Neutral silicon. *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, 139:1, 1968.
- [63] B. G. Wybourne. *Spectroscopic Properties of Rare Earths*. J. Wiley and Sons Inc., New York, 1965.
- [64] R. Cowan. Cancellation effects in computed atomic transition probabilities. *J. Phys. Coll.*, 31(C4):C4–191–C4–201, 1970.

- [65] A. Arnesen, R. Hallin, C. Nordling, O. Staaf, L. Ward, B. Jelenkovic, M. Kisielinski, L. Lundin, and S Mannervik. Hyperfine structure measurement in Sc II. *Astron. Astrophys.*, 106(2):327–331, 1982.
- [66] L. Young, W. J. Childs, T. Dinneen, C. Kurtz, H. G. Berry, L. Engström, and K. T. Cheng. Hyperfine structure of Sc II: Experiment and theory. *Phys. Rev. A*, 37:4213–4219, Jun 1988.
- [67] N. B. Mansour, T. Dinneen, L. Young, and K. T. Cheng. Laser-rf double-resonance measurements of the hyperfine structure in Sc II. *Phys. Rev. A*, 39:5762–5767, Jun 1989.
- [68] P. Villemoes, R. van Leeuwen, A. Arnesen, F. Heijkenskjöld, A. Kastberg, M. O. Larsson, and S. A. Kotochigova. Experimental and theoretical study of the hyperfine structure in the lower configurations in ^{45}Sc II. *Phys. Rev. A*, 45:6241–6252, May 1992.
- [69] A. W. Weiss. unpublished, 1964.
- [70] W. L. Wiese and J. R. Fuhr. Atomic transition probabilities for scandium and titanium (a critical data compilation of allowed lines). *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 4(2):263–352, 1975.
- [71] J. E. Lawler and J. T. Dakin. Absolute transition probabilities in Sc I and Sc II. *J. Opt. Soc. Am. B*, 6(8):1457–1466, Aug 1989.
- [72] R. L. Kurucz and E. Peytremann. A table of semi-empirical gf-values. Parts 1, 2, and 3. Special report, Smithsonian Astrophysical Observatory, Cambridge, Mass., 1975.
- [73] N. Berrah-Mansour, C. Kurtz, L. Young, D. R. Beck, and D. Datta. Laser-rf double-resonance measurements of the hyperfine structure in ^{49}Ti II. *Phys. Rev. A*, 46:5774–5780, Nov 1992.
- [74] J. C. Pickering, A. P. Thorne, and R. Perez. Oscillator strengths of transitions in Ti II in the visible and ultraviolet regions. *Astrophys. J., Suppl. Ser.*, 132(2):403, 2001.
- [75] Z. Nouri, S. D. Rosner, R. Li, T. J. Scholl, and R. A. Holt. Measurements of isotope shifts and hyperfine structure in Ti II. *Phys. Scr.*, 81(6):065301, 2010.
- [76] E. B. Saloman. Energy levels and observed spectral lines of neutral and singly ionized titanium, Ti I and Ti II. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 41(1):013101–013101–116, 2012.
- [77] M. P. Wood, J. E. Lawler, C. Sneden, and J. J. Cowan. Improved Ti II log(gf) values and abundance determinations in the photospheres of the sun and metal-poor star HD 84937. *Astrophys. J., Suppl. Ser.*, 208(2):27, 2013.
- [78] R. L. Kurucz. Including all the lines. *Can. J. Phys.*, 89(4):417–428, 2011.
- [79] R. L. Kurucz. [Online]. Available: <http://kurucz.harvard.edu/atoms>, 2011.
- [80] S. Bouazza. The second spectrum of niobium: I. Accurate fine structure study of even-parity levels. *Phys. Scr.*, 87(3):035302, 2013.
- [81] S. Bouazza. The second spectrum of niobium: II. Accurate fine structure study of odd-parity levels. *Phys. Scr.*, 87(3):035303, 2013.
- [82] H. Nilsson and S. Ivarsson. Experimental oscillator strengths and hyperfine constants in Nb II. *Astron. Astrophys.*, 492(2):609–616, 2008.
- [83] H. Nilsson, H. Hartman, L. Engström, H. Lundberg, C. Sneden, V. Fivet, P. Palmeri, P. Quinet, and E. Biémont. Transition probabilities of astrophysical interest in the niobium ions Nb^+ and Nb^{2+} . *Astron. Astrophys.*, 511:A16, 2010.

- [84] S. Bouazza, R. A. Holt, D. S. Rosner, and N. M. R. Armstrong. Fine structure analysis of the configuration system of V II. Part I: Even-parity levels. *J. Mod. Phys.*, 5:497, 2014.
- [85] S. Bouazza, R. A. Holt, D. S. Rosner, and N. M. R. Armstrong. Fine structure analysis of the configuration system of V II. Part II: Odd-parity levels. *J. Mod. Phys.*, 5:511, 2014.
- [86] N. M. R. Armstrong, S. D. Rosner, and R. A. Holt. Measurements of hyperfine structure in ^{51}V II. *Phys. Scr.*, 84(5):055301, 2011. and references therein.
- [87] A. P. Thorne, J. C. Pickering, and J. I. Semeniuk. The spectrum and term analysis of V II. *Astrophys. J., Suppl. Ser.*, 207(1):13, 2013.
- [88] M. P. Wood, J. E. Lawler, E. A. Den Hartog, C. Sneden, and J. J. Cowan. Improved V II $\log(gf)$ values, hyperfine structure constants, and abundance determinations in the photospheres of the sun and metal-poor star HD 84937. *Astrophys. J., Suppl. Ser.*, 214(2):18, 2014.
- [89] J. E. Sansonetti and G. Nave. Wavelengths, transition probabilities, and energy levels for the spectrum of neutral strontium (SrI). *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 39(3):033103, 2010.
- [90] H. J. Andrä, H.-J. Plöhn, W. Wittmann, A. Gaupp, Jr. John O. Stoner, and M. Gaillard. Lifetimes of levels in neutral strontium (Sr I). *J. Opt. Soc. Am.*, 65(12):1410–1412, Dec 1975.
- [91] W. Gornik. Lifetime measurements of highly excited levels of Sr I using stepwise excitation by two pulsed dye lasers. *Z. Phys. A At. Nuclei*, 283(3):231–234, 1977.
- [92] P. Grafström, Jiang Zhan-Kui, G. Jönsson, C. Levinson, H. Lundberg, and S. Svanberg. Natural radiative lifetimes in the interacting $5snd^{1,3}D_2$ sequences in Sr. *Phys. Rev. A*, 27:947–949, Feb 1983.
- [93] G. Jönsson, C. Levinson, A. Persson, and C.-G. Wahlström. Natural radiative lifetimes in the 1P_1 and 1F_3 sequences of Sr I. *Z. Phys. A*, 316(3):255–258, 1984.
- [94] R. Drozdowski, M. Ignaciuk, J. Kwela, and J. Heldt. Radiative lifetimes of the lowest 3P_1 metastable states of Ca and Sr. *Z. Phys. D At. Mol. Clust*, 41(2):125–131, 1997.
- [95] M. Yasuda, T. Kishimoto, M. Takamoto, and H. Katori. Photoassociation spectroscopy of ^{88}Sr : Reconstruction of the wave function near the last node. *Phys. Rev. A*, 73:011403, Jan 2006.
- [96] H. G. C. Werij, Chris H. Greene, C. E. Theodosiou, and Alan Gallagher. Oscillator strengths and radiative branching ratios in atomic Sr. *Phys. Rev. A*, 46:1248–1260, Aug 1992.
- [97] J. R. Roberts, T. Andersen, and G. Sørensen. Determination of atomic lifetimes and absolute oscillator strengths for neutral and ionized titanium. *Astrophys. J.*, 181:567–586, April 1973.
- [98] G. C. Marsden, E. A. Den Hartog, J. E. Lawler, J. T. Dakin, and V. D. Roberts. Radiative lifetimes of even- and odd-parity levels in Sc I and Sc II. *J. Opt. Soc. Am. B*, 5:606, 1988.
- [99] A. Bizzarri, M. C. E. Huber, A. Noels, N. Grevesse, S. D. Bergeson, P. Tsekeris, and J. E. Lawler. Ti-II transition probabilities and radiative lifetimes in Ti^+ and the solar titanium abundance. *Astron. Astrophys.*, 273:707, June 1993.
- [100] A. Kramida. A critical compilation of energy levels, spectral lines, and transition probabilities of singly ionized silver, Ag II. *J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol.*, 118:168–198, 2013.
- [101] G. Kalus, U. Litzén, F. Launay, and W.-Ü L. Tchang-Brillet. Revised and extended analysis of the Ag II spectrum and term system. *Phys. Scr.*, 65:46–55, 2002.

- [102] E. Biémont, E. H. Pinnington, J. A. Kernahan, and G. Rieger. Beam-Laser measurements and relativistic Hartree-Fock calculations of the lifetimes of the $4d^9 5p$ levels in Ag II. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 30:2067–2073, 1997.
- [103] R. E. Irving, S. T. Maniak, D. J. Beideck, P. Bengtsson, L. J. Curtis, R. Hellborg, G. Kalus, and I. Martinson. Lifetimes of the $4d^9 5p$ levels in Ag II. *Phys. Scr.*, 51:351–353, 1995.
- [104] L. Mølhave and G. Sørensen. Beam-foil studies of excited states in phosphorus and silver. In *Proceedings of the Second European Conference on Beam-Foil Spectroscopy and Connected Topics*. Lyon, France, 1971.
- [105] G. L. Plekhotkina. Radiative lifetimes of Ag I and Ag II. *Opt. Spectrosc.*, 51:106, 1981.
- [106] C. E. Theodosiou. Lifetimes of singly excited states in Cu^+ and Ag^+ . *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 3:1107–1112, 1986.
- [107] K. Blagoev, N. Dimitrov, A. Benhalla, P. Bogdanovich, A. Momkauskaite, and Z. B. Rudzikas. Two-electron transitions between $nd^8 (n+1)s^2$ and $nd^9 (n+1)p$ configurations in the spectra of Cu^+ , Ag^+ , Au^+ , Zn^{2+} , Cd^{2+} , Hg^{2+} . *Phys. Scr.*, 41:213–216, 1990.
- [108] P. Bogdanovich and I. Martinson. Calculation of transition probabilities and lifetimes of the $4d^9 5p$ levels in Ag II. *Phys. Scr.*, 60:217–221, 1999.
- [109] J. Campos, M. Ortiz, R. Mayo, E. Biémont, P. Quinet, K. Blagoev, and G. Malcheva. Radiative parameters for some transitions in the spectrum of Ag II. *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, 363:905–910, 2005.
- [110] J. Heldt, H. Figger, K. Siomos, and H. Walther. Lifetime measurements of some levels belonging to the $3d^8 4s(a^2 F) 4p$ configuration of Ni I. *Astron. Astrophys.*, 39:371, 1975.
- [111] U. Becker, H. Kerkhoff, M. Schmidt, and P. Zimmermann. A test of the absolute Ni(I) gf-value scale by using mean lives of selected levels for the configurations $3d^8 4s 4p$ and $3d^9 4p$. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 25:339–343, 1981.
- [112] S. D. Bergeson and J. E. Lawler. Radiative lifetimes in Ni I. *J. Opt. Soc. Am. B*, 10:794, 1993.
- [113] S. Johansson, U. Litzén, H. Lundberg, and Z. Zhang. Experimental f-value and isotopic structure for the Ni I line blended with [O I] at 6300 Å. *Astrophys. J.*, 584:L107–L110, 2003.
- [114] X. Shang, Q. Wang, F. Zhang, C. Wang, and Z.-W. Dai. Radiative lifetime measurements for some levels in Mn I and Ni I by time-resolved laser spectroscopy. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 163:34–38, 2015.
- [115] M. E. Wickliffe and J. E. Lawler. Atomic transition probabilities in Ni I. *Astrophys. J., Suppl. Ser.*, 110:163–166, 1997.
- [116] M. P. Wood, J. E. Lawler, C. Sneden, and J. J. Cowan. Improved Ni I $\log(gf)$ values and abundance determinations in the photospheres of the sun and metal-poor star HD 84937. *Astrophys. J., Suppl. Ser.*, 211:20, 2014.
- [117] U. Litzén, J. W. Brault, and A. P. Thorne. Spectrum and term system of neutral nickel, Ni I. *Phys. Scr.*, 47:628–673, 1993.
- [118] S. Johansson, A. Derkach, M. P. Donnelly, H. Hartman, A. Hibbert, H. Karlsson, M. Kock, Z. S. Li, D. S. Leckrone, U. Litzén, H. Lundberg, S. Mannervik, L.-O. Norlin, H. Nilsson, J. Pickering, T. Raassen, D. Rostohar, P. Royen, A. Schmitt, M. Johanning, C. M. Sikström, P. L. Smith, S. Svanberg, and G. M. Wahlgren. The FERRUM Project: New f -value Data for Fe II and Astrophysical Applications. *Phys. Scr.*, T100:71, 2002.