

T.C.
FIRAT ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
DOKTORA TEZİ



KUANTUM MEKANİKSEL YAKLAŞIM İLE
İYONKÜREDEKİ $O^+ + H_2 \rightarrow OH^+ + H$
REAKSİYONUNUN İNCELENMESİ

MEHMET YAŞAR

Doktora Tezi

Yüksek Enerji ve Plazma Fiziği Anabilim Dalı

Danışman: Doç. Dr. Murat CANYILMAZ

ARALIK-2017

T.C.
FIRAT ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

KUANTUM MEKANİKSEL YAKLAŞIM İLE
İYONKÜREDEKİ $O^+ + H_2 \rightarrow OH^+ + H$
REAKSİYONUNUN İNCELENMESİ

DOKTORA TEZİ

Mehmet YAŞAR

(131114202)

Fizik Anabilim Dalı
Yüksek Enerji ve Plazma Fiziği

Danışman: Doç. Dr. Murat CANYILMAZ

ARALIK – 2017

T.C.
FIRAT ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

KUANTUM MEKANİKSEL YAKLAŞIM İLE
İYONKÜREDEKİ $O^+ + H_2 \rightarrow OH^+ + H$
REAKSİYONUNUN İNCELENMESİ

DOKTORA TEZİ

Mehmet YAŞAR

(131114202)

Tezin Enstitüye Verildiği Tarih: 14.11.2017

Tezin Savunulduğu Tarih: 08.12.2017

Tez Danışmanı:

Doç. Dr. Murat CANYILMAZ (F.Ü)

Diğer Jüri Üyeleri:

Prof. Dr. Mehmet Ali AKSAN (İ.Ü)

Prof. Dr. Niyazi BULUT (F.Ü)

Prof. Dr. Metin KOPARIR (F.Ü)

Yrd. Doç. Dr. Ramazan ATICI (M.A.Ü)

ARALIK - 2017

ÖNSÖZ

İyonküre kimyasının en önemli noktalarından biri olan reaksiyon dinamiği ve çarpışma süreçlerinin araştırıldığı bu doktora tez çalışmasının hazırlanmasında bilgi ve görüşlerinden faydalandığım danışman hocam Doç. Dr. Murat CANYILMAZ'a ve bu çalışmanın yapılması ve hazırlanması noktasında çalışmalarıyla desteğini hiçbir zaman eksik etmeyen Prof. Dr. Niyazi BULUT hocama teşekkürlerimi sunarım. Fikir ve düşünceleriyle yanımda olan Doç. Dr. Esat GÜZEL hocama teşekkür ederim. Hayata gözlerimi açtığım ilk andan bugüne kadar maddi ve manevi desteklerini hiçbir zaman esirgemeyen değerli aileme şükranlarımı sunarım.

Bu çalışmayı hazırlama sürecinde, benden yardımlarını esirgemeyen, Prof. Dr. Osman ÖZCAN ve Prof. Dr. Metin KOPARIR'a gönül dolusu şükranlarımı sunarım.

Bu kutsal vatan toprağı üzerinde özgürce yaşamamızı sağlayan, gözlerini bir an bile olsun kırpmadan dünya hayatını ellerinin tersi ile iten, vatani için canını seve seve vermeyi bir gül bahçesine koşarcasına görerek hakka yürüyen tüm şehitlerimizin aziz hatıraları önünde eğilerek onlara sonsuz saygı, minnet ve şükranlarımı sunarım.

Mehmet YAŞAR

ELAZİĞ – 2017

İÇİNDEKİLER

Sayfa No

ÖNSÖZ.....	II
İÇİNDEKİLER.....	III
ÖZET.....	V
SUMMARY	VI
ŞEKİLLER LİSTESİ ..	VII
TABLolar LİSTESİ.....	IX
KISALTMALAR LİSTESİ ..	X
SEMBOLLER LİSTESİ.....	XI
1. GİRİŞ.....	1
2. İYONKÜRE KİMYASI.....	6
2.1. İyonkürenin Bölgesel Yapısı.....	7
2.1.1. D Bölgesi.....	7
2.1.2. E Bölgesi.....	9
2.1.3. F1 Bölgesi	9
2.1.4. F2 Bölgesi	10
2.2. İyonkürede Sıcaklık	12
2.3. İyonküredeki Kimyasal Süreçler.	14
2.3.1 İyonkürenin Değişimi	14
2.3.2 Güneşin UV İyonlaştırması.	15
2.3.3. Enerjili Parçacıkların Oluşturduğu İyonlaşma ..	18
2.3.4. Yeniden Birleşme ve Bağlanma..	21
2.3.5. İyon–Atom Değişimi ve Yük Transferi (Pozitif İyonlar)	22
3. GAZLARIN KİNETİK TEORİSİ.....	24
3.1. Gaz Kinetik Teorinin Temel Yaklaşımları	25
3.1.1. Moleküler Hipotez ..	25
3.1.2. Klasik Korunum Kanunları.	26

3.1.3.	İstatistiksel Metotlar	27
3.2.	Çarpışma Çeşitleri.....	28
3.2.1.	Reaktif Çarpışmalar	29
3.2.1.1.	Reaksiyon Hız Sabiti....	30
3.2.1.2.	Tesir Kesiti.....	31
3.2.1.3.	Ortalama Serbest Yol.. ..	34
3.2.1.4.	Çarpışma Frekansı	36
3.2.1.5.	Potansiyel Eşik Enerjisi ve Toplam çarpışma Sayısı.....	37
4.	KUANTUM DALGA PAKET METODU.....	41
4.1.	Seviye-Seviye Metodu: RPD Yaklaşımı.....	43
5.	MATERYAL ve METOT.....	46
5.1.	Reaktif Saçılma Olasılıklarının Hesaplanması.....	46
5.1.1.	Reaksiyon Tesir Kesitlerinin Hesaplanması.....	47
5.2.	IRI (International Reference Ionosphere) Program.....	48
5.3.	Gaz Kinetik Teori Modelleri.....	51
6.	BULGULAR.....	52
6.1.	Reaksiyon Dinamiklerinin İyonküredeki Değişimi.....	52
6.2.	Reaksiyon Dinamiklerinin İyonküresel Yoğunluklar İle İlişkisi.....	59
6.3.	Kinetik Teori Model Sonuçları.....	71
6.3.1.	Kinetik Teori Model Sonuçlarıyla İyonküresel Değişkenlerin İlişkisi.....	76
6.3.2.	Kinetik Teori Model Sonuçları ile Kuantum Mekaniksel Dinamiklerin İlişkisi ..	88
7.	TARTIŞMA.....	97
	KAYNAKLAR.....	103
	ÖZGEÇMİŞ.....	112

ÖZET

Bu doktora tez çalışmasında, iyonküre plazmasında genellikle ihmal edilen çarpışma süreçlerinden biri olan O^+ iyonu ile H_2 molekülü arasında meydana gelen reaktif çarpışmaya ait reaksiyon dinamiği ve süreçlerinin değişim ve etkileri araştırıldı.

' $O^+ + H_2 \rightarrow OH^+ + H$ ' reaktif reaksiyonu için reaksiyon dinamikleri ve gaz kinetik teori model sonuçları iyonküresel sıcaklık, yükseklik ve yoğunluk değişkenlerine bağlı olarak hesaplandı. Hesaplamalarda kullanılan parametreler $39^\circ K$, $40^\circ D$ koordinatları, 2009 yılı gündönümü ve ekinoks günleri için yerel zaman 12.00'da elde edildi.

' $O^+ + H_2 \rightarrow OH^+ + H$ ' reaksiyonuna ait çarpışma enerjileri, toplam çarpışma tesir kesitleri ve reaksiyon hız sabiti gibi reaksiyon dinamikleri iyonküresel sıcaklık ve yükseklik artışı ile birlikte azalma göstermiştir. İyonkürenin alt yüksekliklerinden üst yüksekliklerine doğru çıkıldıkça reaksiyona ait gerçekleşme ihtimallerinin azaldığı görüldü. Kuantum mekaniksel bakış açısına göre reaksiyon dinamikleri ile çarpışan parçacıkların yoğunlukları arasında bir etkileşimin olmamasına karşın, bu çalışmada ortaya konan sonuçlardan bir etkinin varlığını söylemek mümkündür. Klasik hesaplama yöntemleri ile hesapladığımız potansiyel eşik enerjisi değerlerinin, kuantum mekaniksel metotla hesapladığımız çarpışma enerjisi verilerinden küçük olduğu ve klasik hesaplamalarla kuantum mekaniksel sonuçların tutarlılığı ortaya konmuş oldu. Potansiyel eşik enerjisinin reaksiyon dinamikleri ile ters orantılı ve iyonküresel sıcaklıkla da doğru orantılı bir şekilde değiştiği gözlenirken, parçacık yoğunlukları ile doğrudan bir ilişkisinin olmadığı görülmüştür. Çarpışma frekansı sıcaklık ve yükseklik artışı ile ters orantılı olarak azalmıştır. Ortalama serbest yolun minimum değerine Eylül ayında ve maksimum değerine ise Aralık ayında ulaşılmıştır. Toplam çarpışma sayısı hem kuantum mekaniksel dinamiklerle hem de parçacık yoğunlukları ile doğru orantılı değişmiştir. Toplam çarpışma sayısının en büyük değeri Haziran ayında en küçük değeri ise Aralık ayında tespit edildi.

Anahtar Kelimeler: İyonküre, Reaktif Çarpışma, Reaksiyon Dinamikleri, Kuantum Mekaniksel Hesaplama

SUMMARY

Investigation of the $O^+ + H_2 \rightarrow OH^+ + H$ Reaction by Quantum Mechanical Approach in the Ionosphere

In this PhD thesis, the effects and variations of the reaction dynamics and processes of the reactive reaction between O^+ ion and H_2 molecule were investigated in the ionospheric plasma where the collisions are generally neglected. Reaction dynamics for ' $O^+ + H_2 \rightarrow OH^+ + H$ ' reactive reaction and gas kinetic theory model results were calculated based on ionospheric temperature, height and density variables. The parameters used in the calculations were obtained for the coordinates of 39°N, 40°E, the solstice and equinox days of 2009 and local time 12.00.

The reaction dynamics such as collision energies, total collision cross sections and reaction rate constant of the ' $O^+ + H_2 \rightarrow OH^+ + H$ ' reaction showed a decrease with increasing ionospheric temperature and height. It has been observed that the probability of realization of the reaction decreases as rises towards from lower to upper heights of the ionosphere. Although there is no interaction between the reaction dynamics and the densities of the colliding particles according to quantum mechanical view, it is possible to say the existence of an effect from the results obtained this study. It has been determined that the values of potential threshold energy calculated by classical calculation methods are smaller than the collision energy calculated by the quantum mechanical method and the consistency of quantum mechanical results with classical calculations has been demonstrated. It was found that the potential threshold energy is inversely proportional to the reaction dynamics and is directly proportionally to the ionospheric temperature, whereas there is no direct relationship with particle densities. The collision frequency decreases inversely proportion with the increasing ionospheric temperature and height. The minimum value of the average free path was reached in September and the maximum value in December. The total number of collisions has been changed directly proportional to both quantum mechanical dynamics and particle densities. The greatest value of the total number of collisions was found in June and the smallest value in December.

Keywords: Ionosphere, Reactive Collision, Reaction Dynamics, Quantum Mechanical Calculation

ŞEKİLLER LİSTESİ

Sayfa No

Şekil 1.1. Dünya iyonküresini etkileyen dış süreçler.....	2
Şekil 2.1. İyonküredeki elektron yoğunluğunun yükseklik ile değişimi.....	6
Şekil 2.2. Nötr gazlar, iyonlar ve moleküllerin yükseklikle değişimi	12
Şekil 2.3. 21 Haziran 2009 tarihinde Elazığ üzerindeki iyonküre için hesaplanmış elektron, iyon ve nötr sıcaklık şekilleri. Şekil (a); yerel zaman için saat 14.00'ı, Şekil (b); yerel zaman için saat 02.00'ı göstermektedir.....	14
Şekil 2.4. İyonkürede Güneş'in UV emilimi.....	15
Şekil 2.5. İyonlaşmış bir bölgenin yükseklikle değişimi.....	17
Şekil 2.6. Elektron ve proton yağıışı sonucu oluşan iyon üretim hızı.....	20
Şekil 3.1. Yüzeyle 1000 km arasındaki gaz yoğunluğunun yükseklikle değişimi.....	28
Şekil 3.2. Genel olarak bir saçılma olayının tasviri.....	32
Şekil 3.3. Potansiyel eşik enerjisinin mesafeye göre değişimi.....	38
Şekil 6.1. Reaksiyon tesir kesitinin iyonküresel yüksekliğe göre değişimi.....	57
Şekil 6.2. Reaksiyon hız sabitinin iyonküresel yüksekliğe göre değişimi.....	57
Şekil 6.3. Reaksiyon tesir kesitinin iyon sıcaklığı ile değişimi.....	58
Şekil 6.4. Reaksiyon hız sabitinin iyon sıcaklığı ile değişimi.....	59
Şekil 6.5. O^+ iyon yoğunluğunun yükseklikle değişimi.....	64
Şekil 6.6. H_2 molekül yoğunluğunun yükseklikle değişimi.....	65
Şekil 6.7. İyon sıcaklığının yükseklikle değişimi.....	66
Şekil 6.8. Reaksiyon hız sabitinin O^+ yoğunluğu ile değişimi.....	67
Şekil 6.9. Reaksiyon tesir kesitinin O^+ yoğunluğuyla değişimi.....	68
Şekil 6.10. Reaksiyon hız sabitinin H_2 yoğunluğu ile değişimi.....	69
Şekil 6.11. Reaksiyon tesir kesitinin H_2 yoğunluğuyla değişimi.....	70
Şekil 6.12. Potansiyel eşik enerjisinin iyonküresel yükseklikle değişimi.....	76
Şekil 6.13. Çarpışma frekansının iyonküresel yükseklikle değişimi.....	77
Şekil 6.14. Toplam çarpışma sayısının iyonküresel yükseklikle değişimi.....	78
Şekil 6.15. Ortalama serbest yolun iyonküresel yükseklikle değişimi.....	79
Şekil 6.16. Çarpışma frekansının iyon sıcaklığı ile değişimi.....	80
Şekil 6.17. Çarpışma frekansının H_2 yoğunluğu ile değişimi	81

Şekil 6.18. Toplam çarpışma sayısının iyon sıcaklığı ile değişimi.....	82
Şekil 6.19. Toplam çarpışma sayısının O^+ yoğunluğu ile değişimi.....	83
Şekil 6.20. Toplam çarpışma sayısının H_2 yoğunluğu ile değişimi.....	83
Şekil 6.21. Ortalama serbest yol ile iyon sıcaklığı değişimi.....	85
Şekil 6.22. Ortalama serbest yolun oksijen yoğunluğu ile olan değişimi.....	85
Şekil 6.23. Potansiyel eşik enerjisinin iyon sıcaklığıyla değişimi.....	86
Şekil 6.24. Potansiyel eşik enerjisinin O^+ yoğunluğu ile değişimi.....	87
Şekil 6.25. Potansiyel eşik enerjisinin H_2 yoğunluğu ile değişimi.....	87
Şekil 6.26. Reaksiyon hız sabitinin çarpışma frekansı ile değişimi.....	89
Şekil 6.27. Reaksiyon hız sabitinin toplam çarpışma sayısı ile değişimi.....	90
Şekil 6.28. Reaksiyon hız sabitinin ortalama serbest yola göre değişimi.....	91
Şekil 6.29. Reaksiyon hız sabitinin potansiyel eşik enerjisi ile değişimi.....	92
Şekil 6.30. Reaksiyon tesir kesitinin çarpışma frekansı ile değişimi.....	93
Şekil 6.31. Reaksiyon tesir kesitinin toplam çarpışma sayısı ile değişimi.....	94
Şekil 6.32. Reaksiyon tesir kesitinin ortalama serbest yol ile değişimi.....	95
Şekil 6.33. Reaksiyon tesir kesitinin potansiyel eşik enerjisi ile değişimi.....	96

TABLÖLAR LİSTESİ

Sayfa No

Tablo 2.1.	Temel atmosferik bileşenlerin ilk iyonlaşma potansiyelleri ve maksimum dalga boyları.....	8
Tablo 6.1	Reaksiyon için çarpışma enerjisi, tesir kesiti ve sıcaklık değerleri.....	53
Tablo 6.2.	Reaksiyon hız sabiti değerleri.....	56
Tablo 6.3.	21 Mart 2009 tarihine ait iyonküresel değerler.....	60
Tablo 6.4.	21 Haziran 2009 tarihine ait iyonküresel değerler.....	61
Tablo 6.5.	23 Eylül 2009 tarihine ait iyonküresel değerler.....	62
Tablo 6.6.	21 Aralık 2009 tarihine ait iyonküresel değerler.....	63
Tablo 6.7.	21 Mart 2009 tarihine ait kinetik teori model sonuçları.....	72
Tablo 6.8.	21 Haziran 2009 tarihine ait kinetik teori model sonuçları.....	73
Tablo 6.9.	23 Eylül 2009 tarihine ait kinetik teori model sonuçları.....	74
Tablo 6.10.	21 Aralık 2009 tarihine ait kinetik teori model sonuçları.....	75

KISALTMALAR LİSTESİ

EUV	: Ekstra ultra viole
UV	: Ultra viole
IMF	: Gezegenler arası manyetik alan
SSN	: Güneş lekesi sayısı
TI	: Zamandan bağımsız
TD	: Zamana bağlı
RCB	: Tepken koordinat tabanlı
RPD	: Reaktant-üretim ayrışması
IRI	: Uluslararası iyonküre referans programı
COSPAR	: Uzay araştırmaları komitesi
CIRA	: Uluslararası atmosfer çalışma grubu
URSI	: Uluslararası radyo bilimleri birliği
TEC	: Toplam elektron içeriği
ISR	: Millstone Hill yapışık saçılma radarı
FLIP	: Plazma fiziksel hemisfer modeli
MLT	: Manyetik yerel zaman
MSISE90	: Kütle ölçüm radar modeli

SEMBOLLER LİSTESİ

$\mathbf{\hat{A}^2}$	: Çarpışma alanı
$\mathbf{eV}$	: Elektron volt
$\mathbf{I_i}$	: Foto iyonlaşma katsayısı
$\mathbf{S_i}$	: İyon üretim hızı
$\mathbf{Z_0}$	: Referans yüksekliği
$\mathbf{Le}$	: Kayıp hızı
$\mathbf{n}$	: Yoğunluk
$\mathbf{P_i}$	: Net üretim (elektron/iyon)
$\mathbf{n_e}$	: Elektron yoğunluğu
$\mathbf{H}$	: Ölçek yüksekliği
$\mathbf{Te}$	: Elektron sıcaklığı
$\mathbf{Ti}$	: İyon sıcaklığı
$\mathbf{Tn}$	: Nötr sıcaklık
$\mathbf{g}$	: Yer çekimi ivmesi
$\mathbf{m_n}$	: Nötr atom kütlesi
$\mathbf{\chi_v}$	: Güneş ışınının gelme açısı
$\mathbf{\sigma_v}$	: Soğrulma tesir kesiti
$\mathbf{I}$	: Işıma şiddeti
$\mathbf{I_\infty}$	: Güneş akısı
$\mathbf{q_v}$	: Foto iyonlaşma hızı
$\mathbf{q_{vm}}$	: Maksimum iyonlaşma hızı
$\mathbf{W_e}$	: Elektron enerjisi
$\mathbf{W_{ion}}$	: İyon enerjisi
$\mathbf{F_e}$	: Elektron yağış akısı
$\mathbf{\beta_r}$	: Bağlanma katsayısı
$\mathbf{a_r}$	: Birleşme katsayısı
$\mathbf{u^2}$	: Molekül hızının ortalama karesi
$\mathbf{\rho}$	: Kütle yoğunluğu
$\mathbf{P}$	: Gaz basıncı

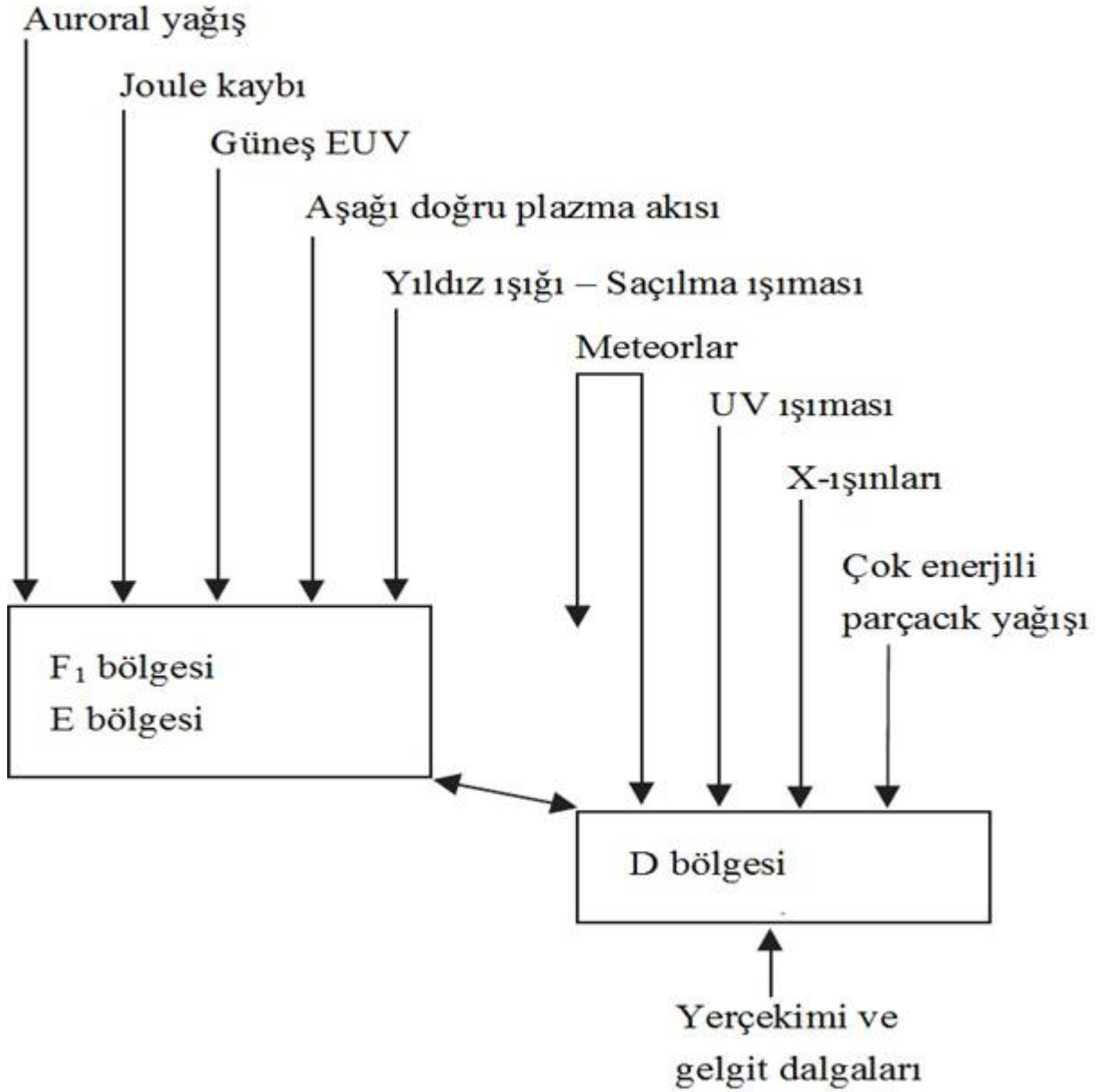
k_{vj}	: Reaksiyon hız sabiti
$f(E,T)$	: Maxwell Boltzman dağılım fonksiyonu
k_B	: Boltzman sabiti
E	: Çarpışma enerjisi
μ	: İndirgenmiş kütle
σ_{vj}	: v ve j durumunda toplam çarpışma tesir kesiti
Le	: Kayıp hızı
$j_{saç}$	: Saçılma olasılığı
j_{gel}	: Gelme olasılığı
λ	: Ortalama serbest yol
$\bar{v}$	: Ortalama hız
ν	: Çarpışma frekansı
g	: Göreli hız
U_0	: Potansiyel eşik enerjisi
Z_{12}	: Toplam çarpışma sayısı
K	: Kelvin

1. GİRİŞ

1920 li yılların başlarında Atlantik'in her iki tarafındaki mühendisler ve bilim adamları, orta ve kısa dalgalar kullanarak, iyonkürenin varlığını ispatlamayı amaçlayan birçok teorik ve deneysel çalışma yapmalarına rağmen ciddi gelişmeler sağlayamamışlardır. İngiltere'de E.V. Appleton ve çalışma arkadaşları, 1920'den sonra geliştirdikleri teoriler ile iyonlaşmış tabakanın kırılma indisini manyeto-iyonik formüllere dayandırarak yaptıkları deneysel sonuçlarla ispatlamışlardır [1-5].

Dünya iyonküresindeki parametreler, manyetik aktivite, Güneş döngüsü, mevsimler, zaman, enlem, boylam ve yükseklik değişkenlerine göre ele alınır. Bu değişkenler, sadece bağlanma, zaman gecikmeleri ve iyonküre-termoküre sistemini oluşturan geri bildirim mekanizmalarından değil aynı zamanda alt iyonküre, manyetoküre, gezegenler arası ortam, Güneşi içeren Dünya-Güneş sistemindeki diğer bölgelerle bağlantılı olarak iyonkürede meydana gelirler. İyonkürede değişimin temel kaynakları, Güneşten gelen EUV, UV ve x ışını yayılımları olmakla birlikte manyetoküreye ait elektrik alan ve parçacık yağışı da önemli bir etkiye sahiptir [6]. Manyetoküre etkisinin şekli ve gücü, temelde Güneş rüzgârının dinamik basıncı ve gezegenler arası manyetik alanın (IMF) yönelimiyle tanımlanır. Mezoküreden yukarı yayılan yerçekimi dalgaları ve gelgitler de direkt olarak alt termoküredeki nötr yoğunlukları etkilerler ve ayrıca onların değişimi sonrasında plazma yoğunluklarını değiştirirler. İyonküredeki ışımayla birleşme, dinamik, elektrodinamik ve kimyasal süreçler gibi farklı dış mekanizmalar plazmanın yoğunluk, sıcaklık ve kayma dağılımlarının tanımlanmasında rol oynarlar [7].

İyonküre D, E, F bölgeleri olarak isimlendirilen ve elektriksel olarak nötr olan iyonlaşmış tabakalardan oluşur. Bu tabakalar, farklı yüksekliklerde farklı oranlardaki bağlanma, iyonlaşma ve tekrar birleşme süreçleri sonucunda ortaya çıkar. Bu süreçler, Güneş ve Güneş kaynaklı olmayan ışınlara bağlı olarak gece ve gündüz değişiklik gösterir. Elektron yoğunluğu iyonküre yapısını belirleyen önemli bir parametredir. Şekil 1.1' de, çeşitli dış süreçlerin oldukça etkili olduğu yükseklikler gösterilmektedir. Güneş ışıması, D bölgesinde baskın UV ve x-ışını dalga boylu yayılımlar, E ve F1 bölgelerinde ise baskın EUV dalga boyu ile fotoelektron enerji kaybı üzerinden ısınmaya ve iyon-elektron üretimine sebebiyet verirler. Bu süreçler tamamıyla Dünyanın gündüz değişimleri iken, gece değişimleri ise, yansıyan Güneş ışıması ve yıldız ışıkları, E bölgesi içi



Şekil 1.1. Dünya iyonküresini etkileyen dış süreçler [6].

iyonlaşmanın önemli kaynaklarıdır. Üst yüksekliklerde, iyonküre için enerji ve momentumun temel kaynağı, parçacık yağışları ve manyetoküresel elektrik alanlardır [7].

Elektrik alan yayılımı ile ilişkili olan Joule ısınması ve Auroral yağıştan dolayı iyonlaşma üretimi, E ve F₁ bölgelerinde en üst seviyededir. Bu manyetoküresel süreçler sadece yüksek enlem iyonküresini değil aynı zamanda, normal ve kısa süreli fırtınalar boyunca alt orta enlemleri de etkilerler. Manyetoküre, D bölgesindeki tüm yüksekliklerde iyonlaşmayı meydana getiren radyasyon kuşaklarından enerjili parçacık yağışları ve orta enlemlerde gece F bölgesinin sürmesine yardımcı olan aşağı doğru plazmaküresel akımlar vasıtasıyla da alt iyonküreyi etkiler. Stratoküre, alt iyonkürede önemli bir etkiye sahiptir

ünkü bu blgeden yukarı doęru yayılan gelgit ve yerekimi dalgaları, daęılma ve kırılmaya uğramalarından dolayı E-F1 blgesi yüksekliklerinde enerjilerinin büyük bir çoęunluęunu depo ederler. Ayrıca, atmosfere giren meteorlardan dolayı fotoiyonlaşma ve molekler iyonlarla yk transferi tarafından iyonlaşan ntr metal atomları oluřturduęu grlr [8].

Alt iyonkrede, baskın iyonlar O_2^+ ve NO^+ , F2 tepe noktası civarında yerini O^+ iyonuna bırakır ve iyonkrenin st tarafında H^+ baskın hale gelir. Tm pratik amalar iin, iyonkre yarı ntr olarak dřnlebilir [9].

İyonkredeki H_2 mevcudiyeti zerine birok arařtırmacı, alıřmalar yapmıř ancak tam anlamıyla tatmin edici bir alıřma ortaya koyamamıřlardır [10-12]. Donahue ve Brinkman, H_2 yoęunluęunun bazı ynlerini tartıřmıř ancak detaylı modellemeler geliřtirememiřlerdir. Dięer taraftan Strobel, yeterli miktarda kaıř akısının saęlanması iin yukarı doęru hidrojen akısını hesaba katmadan yapılan alt iyonkredeki hidrojen srelerini incelemek iin ok sayıda alıřma yrtmřtir. Liu ve Donahue ise bu sreler iin uygun hesaplamalar yaparak 50 km'nin zerinde fotokimyasal hesaplamalar yapmıřlardır. Bu arařtırma Hunten'in 1973 yılında yaptıęı iki ayrı alıřmasını desteklemekle birlikte, 100 km'deki yukarı doęru hidrojen akısının ilerlemesinde molekler hidrojenin nemli bir rol oynadıęını kanıtlamıřtır. Yine 82 km'de H_2 'nin en nemli kaynaęının H ve HO_2 reaksiyonları olduęu ve 76 ile 110 km'ler arasında baskın hidrojen trnn H_2 olduęu gsterilmiřtir [13-19].

O^+ ile H_2 paracıkları arasındaki etkileřime deęinilen bir dięer alıřmada, molekler hidrojen salınımı ile protonkre ve iyonkrenin F2 blgesinin deęiřimi incelenmiř ve neticede deneysel olarak (yapay) 100 kg'lık H_2 salınımının zellikle O^+ yoęunluęunun azalması zerinde ciddi etkisinin olduęu ispatlanmıřtır [20].

Plazma kresel yoęunluklardaki yıllık deęiřimlerin sebeplerinin arařtırıldıęı bir dięer arařtırmada, O^+ iyon yoęunluęundaki deęiřimlerle plazma kresel yoęunluklardaki deęiřimlerin benzerlik arz ettięi tespit edilmiřtir [21].

Dnya iyonkresinde bulunan paracık yoęunlukları zerine birok arařtırma yapılmıř ve bu arařtırmalar neticesinde, gaz oluřum srelerinin atmosferik blgeler zerindeki etkileri ortaya konmuřtur. Bu alıřmanın temelini oluřturan O^+ ve H_2 paracıklarının da atmosferik blgeler zerinde etkilerini gzlemleyen alıřmalara bakıldıęında nemli sonulara ulařılmıřtır.

Dünya ve galaksideki diğer gezegenlerin atmosferlerini oluşturan gazlar üzerine yukarıda da bahsedildiği gibi sayısız araştırmalar yapılmış ve bu çalışmalarda farklı teoriler ve modellemeler ortaya konmuştur. Fen ve mühendislik alanında yaygın bir şekilde kullanılan ve aynı zamanda mevcut çalışmanın temel basamaklarından birini, tarihi milattan önce 400'e yani antik Yunan'a kadar dayanan, gazların kinetik teorisi oluşturur. Democritus ile başlayıp Daniel Bernoulli, Rudolf Julius Emanuel Clausius, Clerk Maxwell'e yine Ludwig Boltzmann'dan Sydney Chapman'a kadar [22-30] sayısız bilim insanının katkılarıyla gazların kinetik teorisi geçmişten günümüze kadar modern gelişimini bilimsel katkılar ışığında devam ettirmiştir. Gazların kinetik teorisi, ortalama serbest yoldan, denge durumundaki bir gaz için moleküllerin hız dağılım fonksiyonuna, gazların taşınım süreçlerinden (difüzyon, termal iletkenlik, viskozite, vb.) 13 ve 20 moment yaklaşımına kadar [29-31], birçok yöntemi içine almaktadır [32].

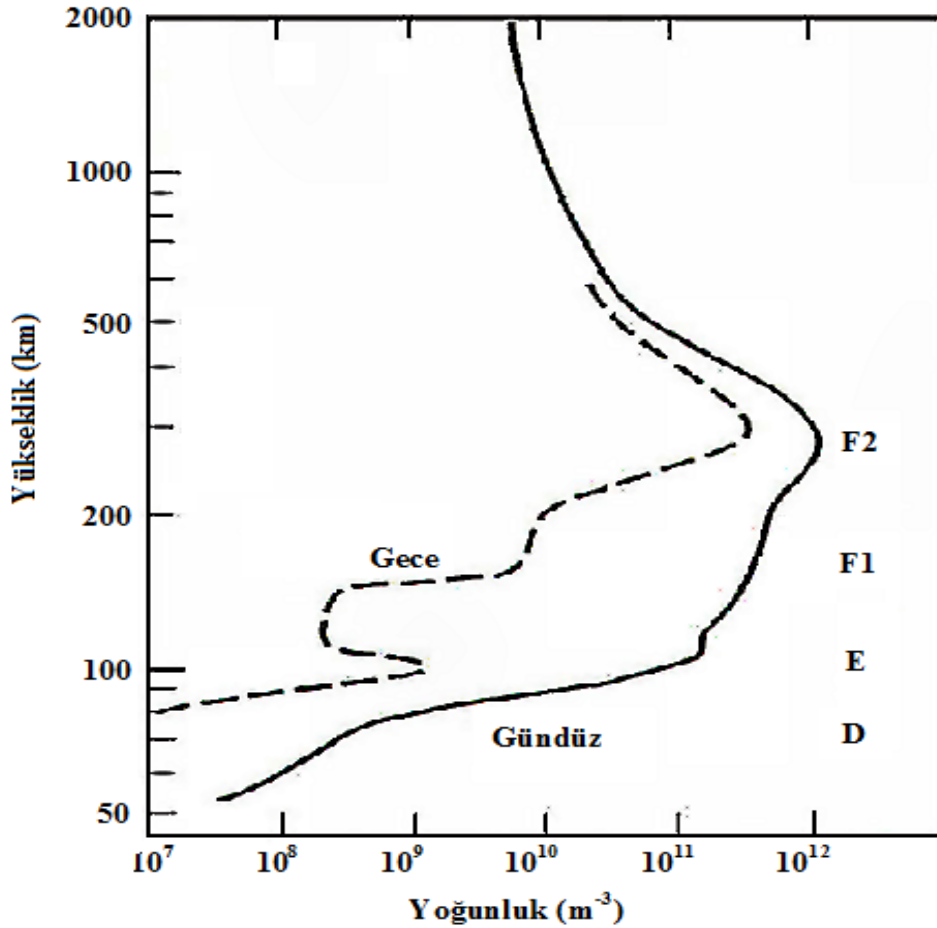
Oksijen iyonu ile hidrojen molekülü arasındaki reaksiyon süreçleri ve dinamiklerinin incelenmesini konu alan bu çalışmada kullanılan bir diğer yöntem ise, kuantum dalga paket metodudur. Zamana bağlı kuantum mekaniksel metotlara, Schrödinger denkleminin zamana bağlı çözümüyle ulaşılır. Saçılma matrisi ile gösterilen kuantum mekaniksel olasılık genliğine, temelde kimyasal reaksiyonların kuantum mekaniksel incelemeleri neticesinde ulaşılmaktadır. Bir başlangıç kuantum durumundan bütün final kuantum durumlarına kadar olan reaksiyon olasılıkları zamana bağlı kuantum mekaniksel metot ile hesaplanır. Burada saçılma matrisine ait tek bir satır hesaplanır. Diğer yandan, bütün başlangıç ve final kuantum durumları arasındaki reaksiyon olasılıklarının hesaplandığı, zamandan bağımsız kuantum metodunda saçılma matrisinin tüm elemanları hesaplanır [33]. Son yıllarda saçılma problemlerinin incelenmesinde zamana bağlı kuantum metodu yaygın olarak kullanılmaktadır. Zamana bağlı Schrödinger denkleminin çözümü noktasında geliştirilen pek çok metottan biri olan son yıllarda yaygın olarak kullanılan kuantum reel dalga paket metodudur. Bu yöntemle iki parçacık arasında meydana gelen reaktif reaksiyonun, toplam çarpışma tesir kesitleri, reaksiyon hız sabitleri ve çarpışma enerjileri hesaplanmıştır. Bu tez çalışmasında alt iyonküredeki reaksiyon süreçleri için önemli bir molekül olan H_2 ile orta ve üst iyonkürede meydana gelen birçok kimyasal süreçte temel yapı taşlarından biri olan O^+ iyonu arasında meydana gelen reaktif reaksiyona ($O^+ + H_2$) ait dinamikler kuantum reel dalga paketi metodu yöntemi ile hesaplanıp, iyonküresel şartlarla eşleştirilmiş ve son olarak elde edilen veriler kinetik teori tabanlı modellerde kullanılarak, Dünya iyonküresi içindeki etki ve sonuçlarına ulaşılmıştır.

Yapılan tez çalışması ile ilk defa yukarıda da bahsi geçen farklı hesaplama yöntemleri ile elde edilen verilere kinetik teori tabanlı modellemeler uygulanmış ve iyonküre kimyasına farklı bir bakış açısı getirilmesi hedeflenmiştir.



2. İYONKÜRE KİMYASI

İyonküre, Güneş ve kozmik ışınlar tarafından iyonlaşmış atom, molekül ve nötr bileşenlerden oluşmuş Dünya atmosferinin içinde bir plazma tabakasıdır. Yaklaşık olarak yer yüzeyinin 50 km'lik yüksekliğinden başlar ve manyetokürenin dışına, yani 1000 km'ye kadar uzanır. İçerdiği elektron, atom, iyon, nötr atom ve molekül yoğunluklarına göre; D, E ve F bölgeleri diye kısımlara ayrılan iyonküre ile ilgili ilk bilgiler radyo dalgalarının kullanılması sırasında elde edilmiştir [34]. İyonküre bölgelerinin elektron yoğunluğuna bağlı olarak gündüz ve gece yükseklikle değişimleri Şekil 2.1'de verilmiştir.



Şekil 2.1. İyonküredeki elektron yoğunluğunun yükseklik ile değişimi [35].

İyonlaşma iyonkürenin her bölgesinde aynı değildir. Bunun temel sebebi güneş ışınımı ile taşınan enerjinin iyonkürenin her bölgesinde aynı olmamasıdır. Yükseklikle iyonlaşma miktarı değişmektedir. Bir başka neden de iyonküredeki tek atomlu gazların oranının yükseklik arttıkça artmasıdır. İyonkürenin Güneş'e göre olan konumu zamanla değiştiğinden iyonlaşma miktarı zamana göre de değişmektedir. Gündüzleri Güneş ışınları ile atomlar ve moleküller elektron ve iyonlarına ayrılırlar, dolayısıyla gündüzleri serbest elektron miktarı daha fazladır. Güneş lekesi sayısı (Sun Spot Number - SSN) ve Güneş patlamaları Güneş ışınım seviyesini dolayısıyla iyonlaşmayı ve iyonküredeki serbest elektron miktarını önemli ölçüde etkiler.

İyonküre, 1300 Å dan daha küçük dalga boyuna sahip morötesi (UV) ışınların nötr atmosfer gazlarını iyonlaştırması sonucunda oluşur. İyonkürenin temel oluşumu, 1026 Å dalga boylu UV ışınının atmosfer tarafından emilerek nötr bileşenlerin iyonlaşmasına dayanmaktadır [36].

2.1. İyonkürenin Bölgesel Yapısı

2.1.1. D Bölgesi

D bölgesi, yer iyonküresinin anlaşılması en zor ve en karmaşık bölgesidir. Kimyası, aşırı derecede karmaşıktır ve elektronları, su bileşenli ve negatif iyonları içerir. D bölgesindeki iyonlaşmanın temel kaynağı, NO molekülünün Lyman- α ($\lambda = 121,5 \text{ nm}$) ve Güneş x-ışınları (0,2 ile 0,8 nm aralığında) tarafından meydana gelen iyonlaşmasıdır. Ayrıca manyetoküresel parçacık yağışı ve galaksideki kozmik ışınlar tarafından meydana gelen iyonlaşma da önemli bir rol oynar.

Güneş'ten yayılan x-ışınları, tüm atom ve moleküllerin iyonlaşmasına sebep olurlar ve sırasıyla en önemli temel iyonlar, N_2 ve O_2 gibi atmosferin baskın nötr bileşenlerinden oluşurlar. Bunlara ilaveten, Lyman- α çizgisi NO gibi küçük nötr bileşeni iyonlaştırır.

Başlangıç pozitif iyonları, N_2^+ , O_2^+ ve NO^+ 'dır ve bunlardan sonra gelen O^+ iyonudur. Kararsız N_2^+ iyonu, aşağıda verilen yük değişim reaksiyonu vasıtasıyla hızlı bir şekilde O_2^+ 'ya dönüştürülür:



Bu süreçler, genel pozitif iyonlar olarak NO^+ ve O_2^+ 'yı serbest hale getirir. Ancak alt D bölgesinde baskın iyonlar pozitif hidrat iyonlarıdır. Bu hidrat iyonları, $H^+(H_2O)_n$ kümesinin yanında H_3O^+ , $H_5O_2^+$ 'yı içerirler.

Nötr bir atomu veya molekülü iyonlaştırmak için, iyonlaşma potansiyelinin üzerinde enerjiye sahip bir fotonun soğrulması gerekir. Tablo 2.1, verilen nötr parçacıkları iyonlaştıran fotonların dalga boyları ve ilk iyonlaşma potansiyelleri ile, Güneş spektrumunun EUV (17 ile 175 nm) kısmı ve x-ışınının (0,1 ile 17 nm) iyonküredeki iyonlaşmanın genel kaynağı olduğunu göstermektedir [35].

Tablo 2.1. Temel atmosferik bileşenlerin ilk iyonlaşma potansiyelleri ve maksimum dalga boyları [9].

	İyonlaşma Potansiyeli (eV)	Maksimum Dalga Boyu (nm)
NO	9,25	134
O_2	12,08	102,7
H_2O	12,60	98,5
O_3	12,80	97
H	13,59	91,2
O	13,61	91,1
CO_2	13,79	89,9
N	14,54	85,3
H_2	15,41	80,4
N_2	15,58	79,6
Ar	15,75	78,7
N_e	21,56	57,5
H_e	24,58	50,4

D bölgesindeki negatif iyon bileşeninin, pozitif iyon bileşenine benzer olarak karmaşık ve fakir olduğu bilinir. Negatif iyon değişimindeki ilk aşama, elektron bağlanma sürecidir:



Bu reaksiyon, NO_3^- , NO_2^- ve CO_3^- gibi oldukça karmaşık negatif iyonlar olan daha ileri reaksiyonlar tarafından takip edilir.

2.1.2. E Bölgesi

E bölgesi temelde, EUV spektrumunun 80 nm ile 102,7 nm kısmı tarafından şekillendirilen bir Chapman tabakasıdır. Bu bölgedeki temel başlangıç iyonu, N_2^+ ve O^+ 'nın üretimiyle O_2^+ iyonudur. N_2^+ iyonları hızlı bir şekilde yük değişim reaksiyonu ile diğer iyonlara dönüştürülür:



Oksijen iyonları aşağıdaki reaksiyonlar tarafından ortadan kaldırılır:



Bu reaksiyonların neticesinde, gündüz E bölgesindeki genel iyonlar O_2^+ ve NO^+ 'dır (normal şartlar altında NO^+ yoğunluğu O_2^+ yoğunluğundan bir miktar daha büyüktür). E bölgesindeki toplam iyon yoğunluğu (veya elektron yoğunluğu) temelde Chapman tabakası ile ilişkilidir. Gündüz vakti F1 bölgesinin altında baskın iyon NO^+ olurken, yaklaşık 170 km üzerinde O^+ yoğunluğu hızlı bir şekilde diğer tüm iyonların önüne geçer [35].

2.1.3. F1 Bölgesi

F1 bölgesi de bir Chapman tabakasıdır. İyonlaştırıcı güneş akısının < 91 nm'den küçük olduğu EUV spektral bölgesidir. F1 bölgesinin temel başlangıç iyonu, bazen N_2^+ 'nin katkısıyla birlikte O^+ 'dır.

Oksijen iyonunun yeniden birleşimi, aşırı derecede yavaştır ve böylece O^+ iki aşamalı bir süreçle yeniden birleşir. İlk olarak, atom-iyon iç değişim reaksiyonları (2.4) eşitliğinin merkezine oturur. Bunu NO^+ ve O_2^+ 'nin ayrıştırıcı yeniden birleşme süreci izler.

Alt F1 bölgesinde (140 km civarı) O^+ 'nın yaşam süresi, oldukça kısadır (sadece birkaç saniye). Bunun sonucunda NO^+ moleküler iyonu baskın hale gelir. Yaklaşık olarak 180 km de O^+ hızlı bir şekilde baskın olur ve genel iyon haline gelir [37].

2.1.4. F2 Bölgesi

F2 bölgesinin temel iyonu, 200 ile 400 km'lik aralıktaki pik yoğunluğuyla O^+ iyonudur. Bu bölge açıkça bir Chapman tabakası değildir çünkü F1 bölgesinin üzerindeki atmosfer çoğu iyonlaştırıcı ışın için optiksel bakımdan incedir. F2 tepesinin değişimine, ambipolar difüzyon ve iyon kaynağı arasındaki etkileşimler neden olur.

F2 bölgesindeki baskın iyonlaşma kaynağı, atomik oksijenin foto iyonlaşmasıdır:



Oksijenin foto iyonlaşma katsayısı yaklaşık $I_i \approx 10^{-7} s^{-1}$ ve iyon üretim hızı:

$$S_i = I_i n_o = I_i n_{o0} \exp\left(-\frac{z-z_0}{H_0}\right) \quad (2.6)$$

Burada n_{o0} , z_0 referans yüksekliğindeki nötr oksijen yoğunluğu ve H_0 ölçek yüksekliğidir [37].

Oksijen iyonları, N_2 ve O_2 'yi içeren iki aşamalı bir süreç tarafından kaybolurlar. İlk aşama, atom-iyon değişimidir (2.4 reaksiyonundan görüleceği gibi):



k_{O_2} ve k_{N_2} ; kayıp katsayılarıdır. Değişim süreçlerini oldukça hızlı olan ayrıştırıcı yeniden birleşim izler:



Kayıp hızı hesaplandığında (2.7) reaksiyonunun hesabına mükemmel bir şekilde uyum gösteren ayrıştırıcı yeniden birleşme süreçleri oldukça hızlıdır:

$$L_e n_e = k_{O_2} n_e n_{O_2} + k_{N_2} n_e n_{N_2} = n_e (k_{O_2} n_{O_2} + k_{N_2} n_{N_2}) \quad (2.9)$$

Burada L_e kayıp hızı, n yoğunluk ve k sabit bir katsayıdır. Net elektron (veya iyon) üretim hızı, üretim hızından kayıp hızını çıkararak elde edilir:

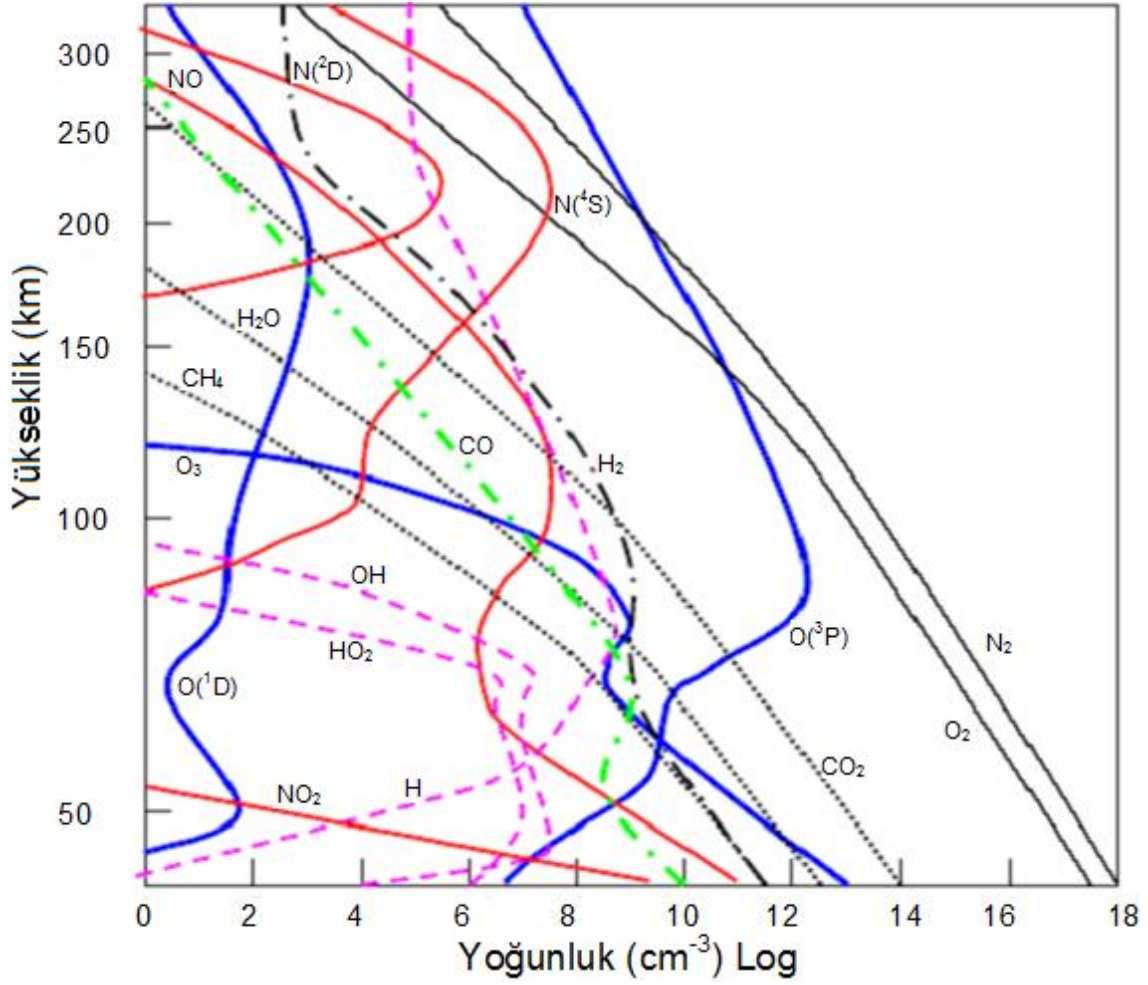
$$P_i = S_i - L_e n_e = I_i n_{o0} \exp\left(-\frac{z-z_0}{H_0}\right) - n_e [k_{O_2} n_{O_{20}} \exp\left(-\frac{z-z_0}{H_{O_{20}}}\right) + k_{N_2} n_{N_{20}} \exp\left(-\frac{z-z_0}{H_{N_{20}}}\right)] \quad (2.10)$$

Fotokimyasal denge şartları altında, net üretim yoktur ($P_i = 0$). Parçacıkların termodinamik dengede oldukları varsayılarak (yani bütün türler aynı sıcaklıkta), elektron yoğunluk şekli elde edilebilir:

$$n_e = \frac{I_i n_{o0} \exp\left(-\frac{z-z_0}{H_0}\right)}{k_{O_2} n_{O_{20}} \exp\left(-\frac{z-z_0}{H_{O_{20}}}\right) + k_{N_2} n_{N_{20}} \exp\left(-\frac{z-z_0}{H_{N_{20}}}\right)} \quad (2.11)$$

Bu elektron yoğunluk eğrisinin yükseklik ile belirsiz bir şekilde arttığı kolayca görülür. Bütün sıcaklıklar eşit olduğunda ölçek yükseklikleri parçacık kütleleri ile ters orantılıdır, bunun sonucunda $H_0 = 1,75 H_{N_2} = 2H_{O_2}$ 'dir. Yükseklik arttığı zaman, payda paydan çok daha hızlı bir şekilde azalır ve böylece elektron yoğunluğu yükseklik ile artar [9].

Yükseklığe bağlı olarak atmosferdeki nötr gazların, iyonların ve elektronların yoğunluk değişimleri Şekil 2.2'de gösterilmektedir. Şekilde yükseklik artıkça nötr gaz atomlarının ve moleküllerinin yoğunluklarının genellikle azaldığı görülmektedir. OH, HO₂, NO₂ gibi ağır moleküller alt iyonkürede yer almakla beraber yaklaşık 100 km'den sonra görülmemektedir. Yani bunlar maksimum yoğunluklarını D bölgesinde göstermektedir. CO₂, CO, H₂O, CH₄, O₂ ve N₂ yoğunlukları yükseklikle ters orantılı bir biçimde azalmaktadır. N(²D), N(⁴S), O(³P), O₂, N₂, O(¹D), H₂, N(⁴D) gibi atom ve moleküller 300 km'de yani F2 bölgesi ve yukarısında mevcuttur [38-50].



Şekil 2.2. Nötr gazlar, iyonlar ve moleküllerin yükseklikle değişimi [44].

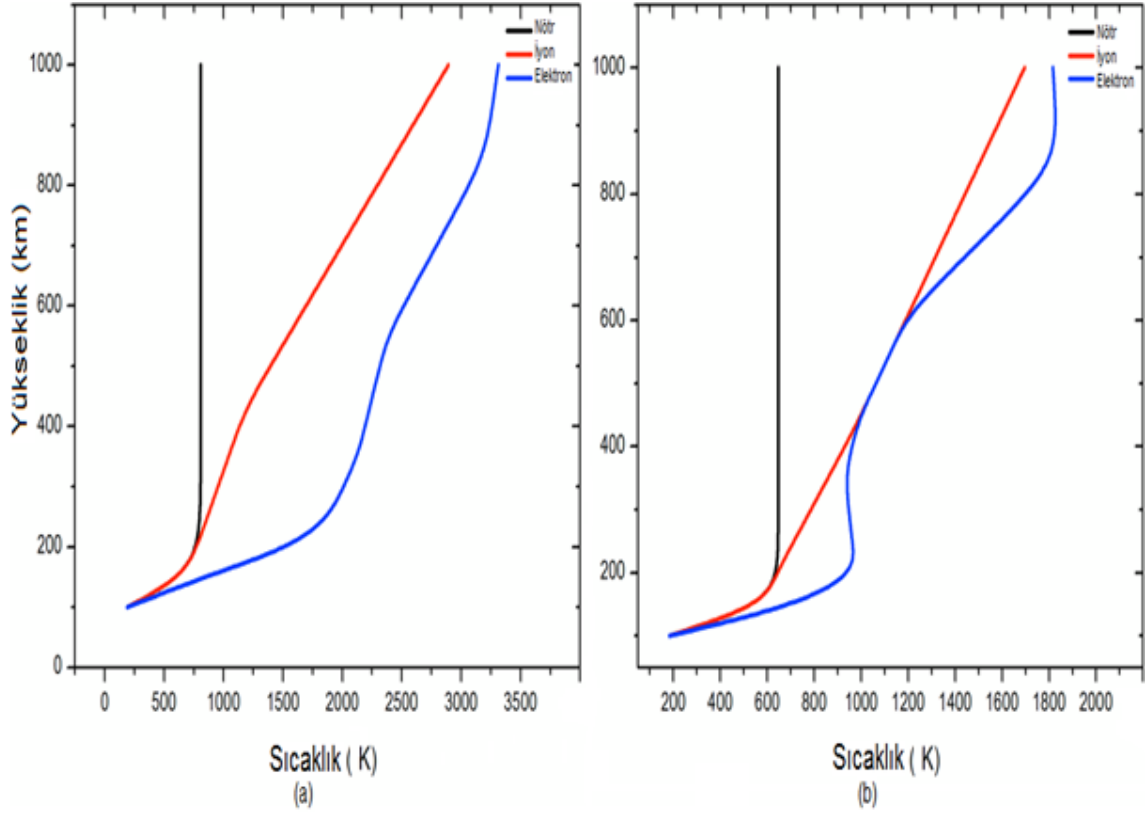
2.2. İyonkürede Sıcaklık

Atmosferin 120 km üzerindeki sıcaklık değişimi, Güneş UV ışımalarının emilmesi sonucunda meydana gelen bölgesel enerjiye bağlıdır ve ısı iletim vasıtasıyla enerji alt yüksekliklere doğru iletilir. Kızılötesi ışıma tarafından oluşan ısı enerji kaybının önemi yoktur. Güneş ışımaları ile nötr atmosferin ısınması birkaç yolla olabilir [51]. İlk olarak, atom ve moleküllerin iyonlaşma enerjileridir. Hapsolan enerji, fotonun enerjisi kadar bir enerjiyle ışıma yapabilir. Başka gazlarla çarpışması neticesinde kinetik enerji şeklinde açığa çıkabilir. İkincisi, sonradan ortaya çıkan moleküler bağlanma enerjisi ile oksijen molekülünün foto ayrışmasını kapsar. Her iki yolda, nötr gazın ısı işlemi olduğu için atmosferdeki ısının üretilmesi sayısal gaz yoğunluğuna bağlılık gösterir. Benzer şekilde yoğunluk yükseklikle hızlı bir düşüş gösterir. Bu durumun tersine nötr gazın termal iletkenliği, sürekli olarak gaz yoğunluğundan bağımsızdır [52].

F2 bölgesi ve üst iyonküredeki iyonların yoğunluk eğrilerinin teorik hesaplamaları, hem plazma taşınımı hem de elektron etkilerinin değerlendirilmesi için, iyon sıcaklıkları hakkında bilgi sağlar. iyonlaşmış gazlar ve nötrler arasındaki farklı enerji alış verişi şekilleri, nötr gaz sıcaklıklarına plazma sıcaklığının denk olmasıyla, ısı dengeyi oluşturmaya sağlar. Enerji üretimi olmadığında, yeniden birleşme olayları, ısı kayıpları, iyonlar ve nötr gazlar arasındaki termal denge durumunda meydana gelecektir.

1962'deki radar ölçümleri iyon ve elektronlar arasında termal dengesizliğin varlığını ortaya koymuştur [53]. Sonrasında Spencer'in roket ölçümleri [54], 150 km altındaki sonuçların tutarsız olduğunu ancak fotoelektron ısı tahmininin doğru yapıldığını ortaya koydu. Üst yüksekliklerde nötr sıcaklık elektron sıcaklığından küçüktür (Şekil 2.3). Hanson, bölgesel enerji üretiminin düşük olduğu üst yüksekliklerde $T_e > T_n$ 'in oluşumu için elektron gazındaki ısı iletiminin önemliliğine vurgu yapmıştır [55]. Buna bağlı olarak büyük miktarlarda fotoelektronun üst atmosfere kaçtığını ve taşınımının manyetik kuvvet çizgileri boyunca olduğunu ortaya koydu. Fotoelektron kaçıışı sonucunda bölgesel anormalliklerin meydana gelmesi elektron sıcaklığının artmasına sebep olur [56].

Şekil 2.3'de 21 Haziran 2009 tarihli yerel zaman 12.00 ve 02.00 için Elazığ bölgesi koordinatlı gece ve gündüz iyonküresine ait, elektron, iyon ve nötr bileşenlerin sıcaklık değerlerinin iyonküresel yüksekliğe bağlı olarak değişimi verilmiştir.



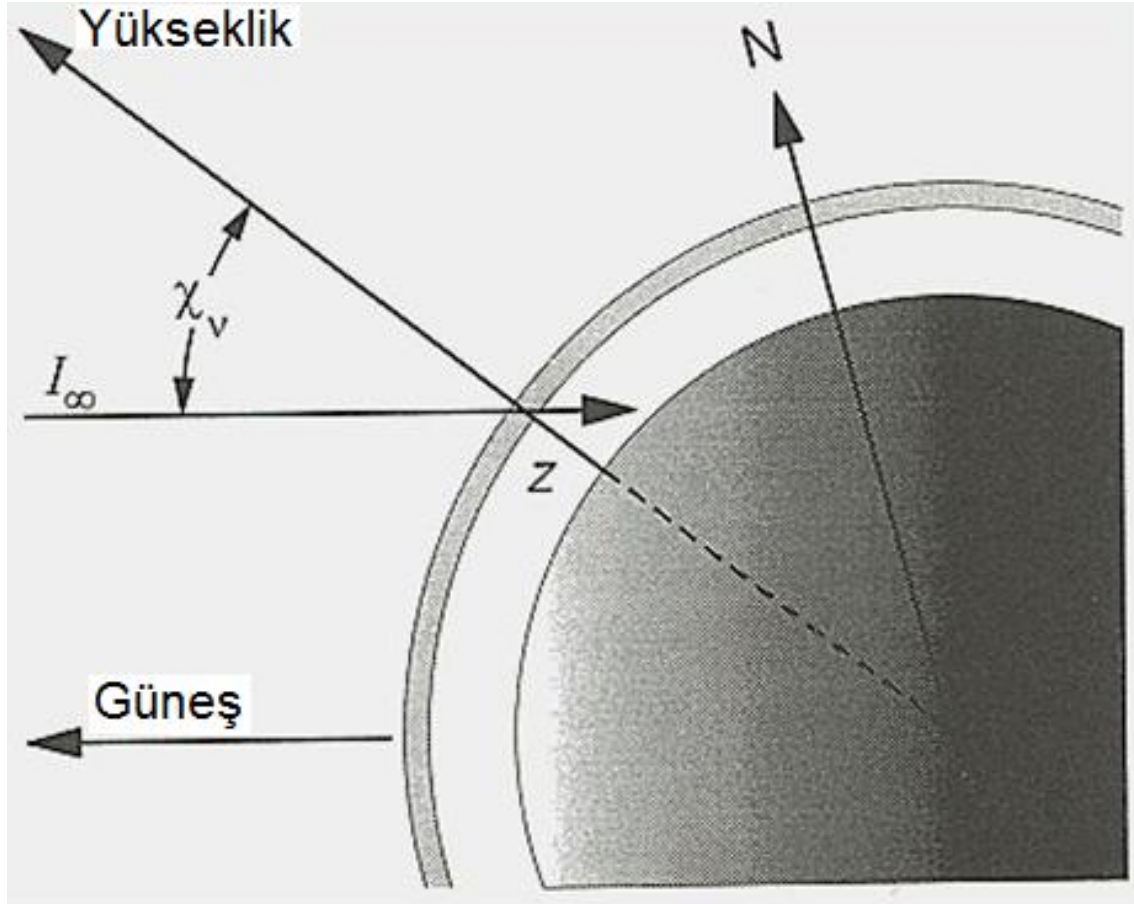
Şekil 2.3. 21 Haziran 2009 tarihinde Elazığ üzerindeki iyonküre için hesaplanmış elektron, iyon ve nötr sıcaklık şekilleri. Şekil (a); yerel zaman için saat 14.00'ı, Şekil (b); yerel zaman için saat 02.00'ı göstermektedir [57].

2.3. İyonküredeki Kimyasal Süreçler

2.3.1. İyonkürenin Değişimi

İyonküre, manyetoküre plazmasının temelini oluşturur ve tamamen iyonlaşmış manyetoküre plazmasından nötr atmosfere kadar bir geçiş bölgesidir. Bu bölgeler, nötr parçacıklar ve plazma karışımından oluştuğu için Coulomb ve özellikle nötr çarpışmalara katkı sağlayan elektriksel iletkenliğe sahip tabakalardır. Elektriksel iletkenliği belirleyen esas özellik parçacık yoğunluklarıdır ve dolayısı ile parçacıkların iyonlaşma süreçleridir.

Plazma yoğunluğunun yüksekliğe bağlı olarak nasıl değiştiği ve iyonküredeki iyonlaşmanın nasıl meydana geldiği ilgi çekici ilk noktalardır. İyonlaşmanın iki ana kaynağı vardır; manyetoküreden gelen enerjili parçacık yağıışı ve Güneş'in yaydığı UV ışınlarıdır. İyonküredeki UV Emilimi Şekil 2.4'de gösterilmiştir [58].



2.3.2. Güneşin UV İyonlaştırması

İyonlaşmanın oluşması için, Güneş fotonlarının iyonküredeki atomların iyonlaşma enerjilerinden daha yüksek enerjilere sahip olmaları gerekir. Fotonlar yüksek ya da UV spektral aralığından gelebilirler.

İyonküre yatay olarak yapılır. Baskın değişimi, z yüksekliği ile oluşur ve nötr atmosfer yoğunluğunun, $n_n(z)$, değişimi ile tanımlanır. Tek bileşenli izotermal bir atmosferde, yoğunluk barometrik kanuna göre yükseklikle değişir;

$$n_n(z) = n_0 \exp(-z/H) \quad (2.12)$$

H, m_n kütesine sahip atomun bulunduđu izotermal atmosfer için ölçek yüksekliđidir;

$$H = k_B T_n / m_n g \quad (2.13)$$

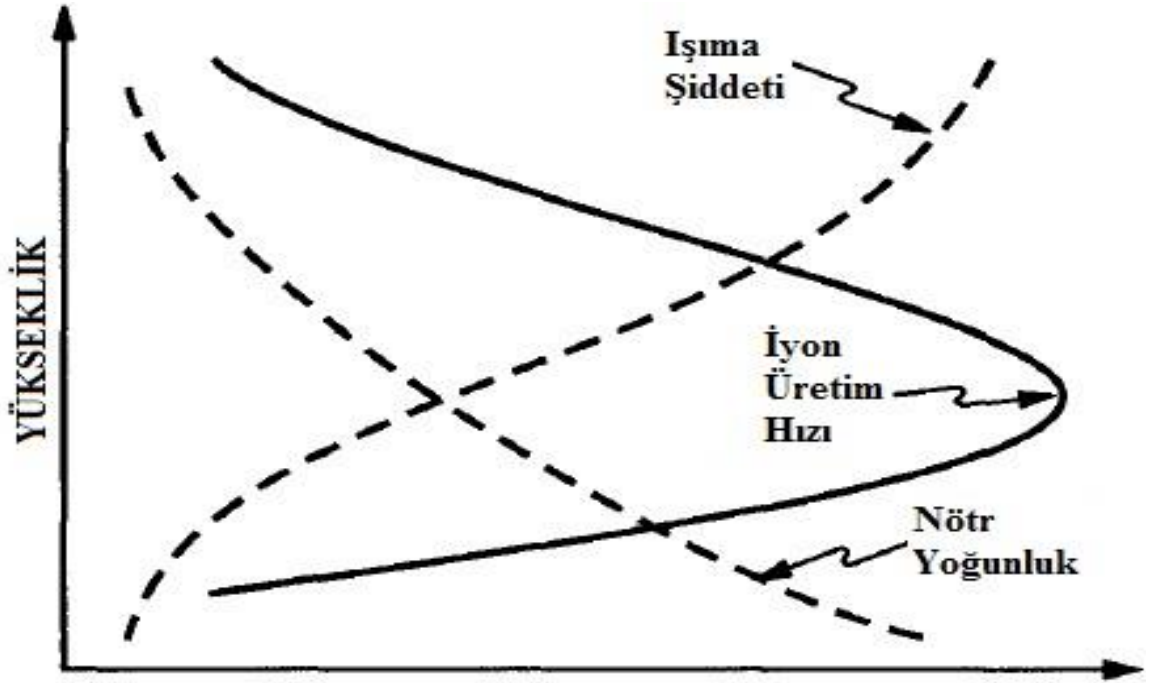
burada g yerçekimi ivmesi, m_n nötr atom kütlesi, n_0 $z=0$ da referans yüksekliğindeki yoğunluk ve T_n sıcaklıktır. Bir χ_v geliş açısı ile z yüksekliğinde iyonküreye gelen güneşin UV ışını, n_n yoğunluğuna sahip atomlara çarpar ve iyonlaşmadan dolayı enerji kaybeder. Bu yükseklikte ışıma kısmen emilir. Atomlarla ışımanın etkileşimi, eğimli ışın yolu yani $z/\cos\chi_v$ boyunca gerçekleşir. Işın yolu $dz/\cos\chi_v$ boyunca z yüksekliği ile ışıma şiddetindeki, I , azalma aşağıdaki gibidir:

$$-dI = -\sigma_v n_n \frac{dz}{\cos\chi_v} I \quad (2.14)$$

Burada σ_v , ışımanın soğrulma tesir kesitidir. Denklem (2.14), ışıma şiddetindeki diferansiyel azalmanın, atmosferdeki ışıma yol uzunluğuna, soğrulma tesir kesitine, soğurulan nötr gaz parçacıklarının sayı yoğunluğuna ve durum yoğunluğuna bağlıdır. Barometrik denklemi (2.14) ile birleştirerek;

$$I(z) = I_\infty \exp\left[-\frac{\sigma_v n_0 H}{\cos\chi_v} \exp(-z/H)\right] \quad (2.16)$$

denklemi elde edilir. Burada, I_∞ , atmosferin girişindeki güneş akısıdır. $I(z)$ için yapılan çözüm, Şekil 2.5’de çizilen yükseklikle üstel olarak artan ışıma şiddetini verir [59].



Şekil 2.5. İyonlaşmış bir bölgenin yükseklikle değişimi [58].

Özel bir yükseklikte birim hacim başına fotoiyonlaşma hızı, $q_v(z)$, dz yükseklik aralığında soğurulan ışının tesir kesiti, ışıma şiddeti, nötr yoğunluk ve foto iyonlaşma etkisi, κ_v , ile doğru orantılı bir şekilde değişir;

$$q_v(z) = \frac{\kappa_v \cos \chi_v dI}{dz} = \kappa_v \sigma_v n_n I \quad (2.17)$$

(2.12) ve (2.16) denklemleri ışın şiddeti ve nötr yoğunluğun açıkça yüksekliğe bağlı olduğunu gösterirler ve bu denklemler birleştirilirse aşağıdaki üretim fonksiyonu gibi yazılır;

$$q_v(z) = \kappa_v \sigma_v n_0 I_\infty \exp\left[-\frac{z}{H} - \frac{\sigma_v n_0 H}{\cos \chi_v} \exp(-z/H)\right] \quad (2.19)$$

Şekil 2.5’de gösterildiği gibi, yoğunluk yükseklikle azalırken, Güneş şiddeti artmaktadır. Böylece özel bir z_m yüksekliğinde iyonlaşma belirgin bir şekilde maksimum olacaktır [60]. Bu yüksekliğin değeri, denklem (2.19)’un yardımıyla hesaplanabilir;

$$z_m = z_0 + H \ln\left(\frac{1}{\cos \chi_v}\right) \quad (2.21)$$

$$z_0 = H \ln(\sigma_v n_0 H) \quad (2.22)$$

Burada z_0 , güneş ışımalarının dik geldiği açılar için ($\chi_v = 0$) maksimum iyonlaşma yüksekliğidir ve nötr bileşenlerin yoğunluk seviyesine, ölçek yüksekliğine, iyon kütesine ve yer çekimine bağlı bir sabittir. İyonlaşma hızının maksimum değeri, q_{vm} ;

$$q_{vm} = q_{v0} \cos \chi_v \quad (2.23)$$

$$q_{v0} = \kappa_v I_\infty (eH)^{-1} \quad (2.24)$$

Burada q_{v0} , dikine geliş açısında maksimum iyonlaşma hızıdır. Maksimum iyonlaşma yüksekliği, z_m , yüksekliğin daralmasıyla sınırlandırılır. Z_m , χ_v 'ye bağlıdır. χ_v , coğrafi enlem ve boylamın fonksiyonu olduğu için, iyonkürede ki fotoiyonlaşma tabakası, mevsim, günün saati ve coğrafi enleme güçlü bir bağlılık gösterir [61].

2.3.3. Enerjili Parçacıkların Oluşturduğu İyonlaşma

Fotoiyonlaşmaya ilaveten, iyonküredeki iyonlaşmanın diğer bir kısmı da atmosfere çarpan yeterli derecede enerjiye sahip parçacıkların elektronlarla etkileştiği bölgelerde gerçekleşir. Bu tür parçacıklar manyetik alan çizgilerini izlediklerinden, bu tip iyonlaşmaların, fotoiyonlaşmanın önemini kaybettiği Auroral bölgelerdeki yüksek manyetik enlemlerde baskın hale gelmesi beklenir. Fotoiyonlaşmanın sona erdiği gece boyunca, parçacık etkisinden dolayı iyonküredeki iyonlaşma devam eder.

Manyetoküreden manyetik alan çizgileri boyunca atmosfer içine elektron yağışından kaynaklanan iyonlaşma, çarpışmaların etkisiyle oluşur. Elektron enerjisinin iyon enerjisinden ($W_e > W_{ion}$) daha büyük olması gerekir, burada W_{ion} , bir atom ya da molekülden bir elektron çıkarmak için gerekli olan iyonlaşma enerjisidir. Oksijen atomları için, iyonlaşma enerjisi yaklaşık 13,61 eV'dir. Özel bir yükseklikte birim hacimdeki çarpışma iyonlaşma hızı, $q_e(z)$, beklenen elektron yağışının enerji kaybıyla, $dW_e(z)$, orantılıdır. Ayrıca, birim yükseklikteki çarpışma sayısı, herhangi bir yükseklikteki bir parçacığın ne kadar zamanda yok olacağını tanımlayan elektron yağışının eğim açısına bağlıdır [62].

Ancak, iyonlaşma etkisinin sabit olduğu ve elektronların nötr atmosfere dik bir şekilde çarptığı düşünülürse, iyonlaşma hızının yükseklikle değişimi üzerine oldukça iyi bir fikir edinilebilir. Sadece dikine hareket eden bir elektron için, birim yükseklikteki çarpışmaların sayısı, ortalama serbest yol uzunluğunun tersiyle verilir, enerji kaybı;

$$dW_e(z) = \kappa_e W_{ion} \sigma_n n_n dz \quad (2.25)$$

ile verilir. Yüksekliğe bağlı enerji kaybı, parçacık yağışının asıl enerjisine bağlı değildir. Birim yükseklik aralığı dz olan çarpışma iyonlaşma hızı, elektron yağış akımı, F_e , tarafından üretilir;

$$q_e(z) = F_e dW_e/dz \quad (2.26)$$

2.12 ve 2.25 denklemleri 2.26'da yazılırsa;

$$q_e(z) = \kappa_e F_e W_{ion} \sigma_n n_0 \exp(-z/H) \quad (2.27)$$

denklemini elde edilir. Çarpışma iyonlaşma hızının yüksekliğe bağlı grafiği basitçe nötr yoğunluğun yükseklikle değişimiyle tanımlanır. Parçacık enerjisinden bağımsız, iyon üretim hızı, azalan yükseklikle üstel bir şekilde artmaktadır [58].

Ancak, elektron yağış enerjisi, yükseklik en düşük seviyeye ulaştığında başlar. W_e enerjili bir elektron, çarpışmalarla tüm enerjisinin tükendiği sadece bir z_s durma yüksekliğine kadar nüfuz edebilir. Bunun sonucunda, daha fazla enerjiye sahip elektronlar atmosferin daha derinlerine etki eder ve çok fazla enerji dağılımı olduğundan dolayı çarpışmalar vasıtasıyla daha çok elektron-iyon çifti üretilir.

Durma yüksekliği enerji kaybının integrali alınarak hesaplanır;

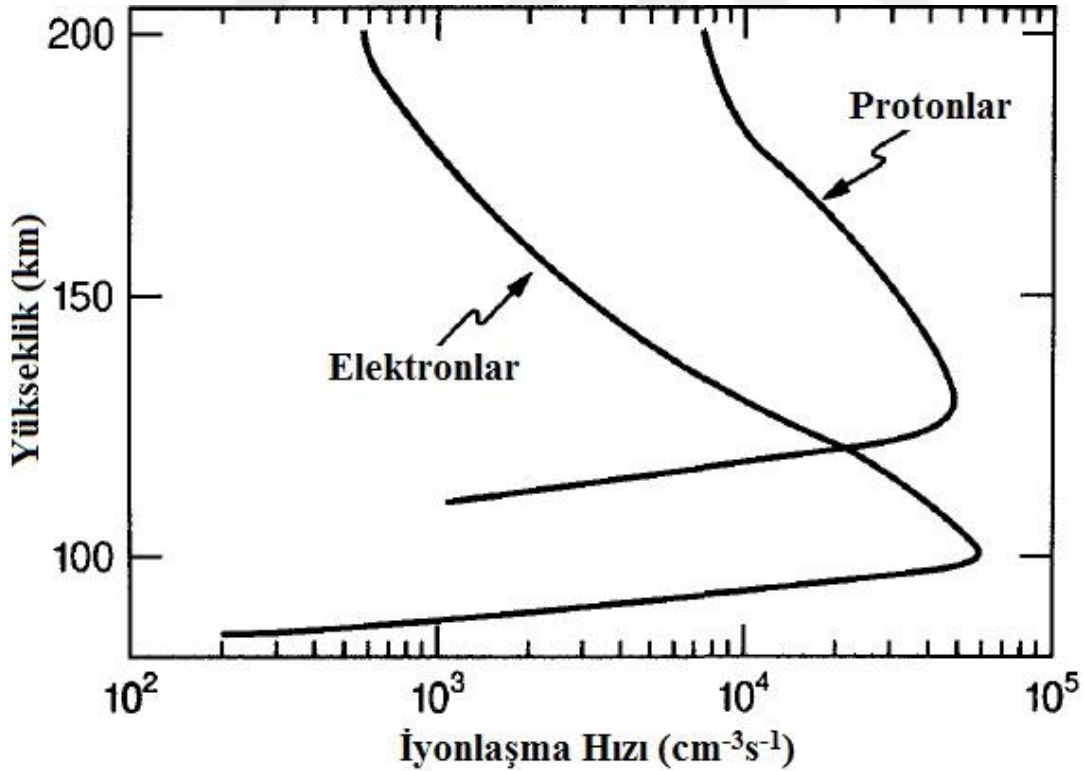
$$W_e = \int_0^{W_e} dW_e = \int_{\infty}^{z_s} \kappa_e W_{ion} \sigma_n n_0 \exp(-z/H) dz \quad (2.28)$$

Alt yüksekliklere erişen çok daha enerjili parçacığı gösteren z_s için çözüm yapılırsa;

$$z_s = H \ln(\kappa_e \sigma_n n_0 H W_{ion} / W_e) \quad (2.29)$$

Bu durma yüksekliğinde enerjili parçacıklar, sahip oldukları enerjilerinin büyük bir kısmını depo ederler ve böylece elektron-iyon çiftlerinin büyük bir kısmını oluştururlar. İdeal bir atmosferde, 1keV enerjiye sahip elektronlar yaklaşık 150 km'lik bir yükseklikte durdurulurken, 300 keV enerjili elektronlar yaklaşık 70 km'ye kadar nüfuz ederler. Üstel iyonlaşma hız grafiğinden dolayı, iyonlaşma maksimumu yüksek enerjili elektronlar için oldukça belirgindir.

Şekil 2.6 gerçek iyonlaşma hız profilinin şeklini göstermektedir. Burada, elektronun etiketlendiği iyonlaşma hız grafiği, iyonlaşma etkisinin gerçeğe yakın şekli, atmosferik yoğunluk ve bileşenler kullanılarak, yaklaşık 10 keV enerjili elektron yağışının roket gözlemlerinden hesaplanmıştır. Şekil 2.6'dan da anlaşılacağı gibi, iyonlar, aynı enerjiye sahip elektronlardan daha üst yüksekliklerde durdurulurlar, çünkü onların enerjiye bağlı hareketlilikleri düşüktür. İyon yağışı 130 km'nin üzerindeki yüksekliklerde çarpışmadan dolayı iyonlaşmaya büyük katkı sağlarken, elektronlar 100 km civarında ölçülen iyonlaşmadan sorumludurlar [58].



Şekil 2.6. Elektron ve proton yağışı sonucu oluşan iyon üretim hızı [58].

2.3.4. Yeniden Birleşme ve Bağlanma

İyonkürede ki Güneşin UV ışımasından ya da enerjili parçacıklar tarafından oluşturulan iyonlaşma üretimi, eğer durmadan devam ederse, üst atmosferin tamamen iyonlaşmasına sebep olacaktır. Ancak, gerçekte iki süreç iyonlaşmayı etkisizleştirir ve dengedeki gözlenen değerini sınırlandırır. Bu süreçler, nötr atomların değişimi için elektronlar ve iyonların yeniden birleşimi ve moleküller yada nötr atomlar ile elektronların bağlanmasıyla negatif iyonların oluşumudur. Bu iki süreç, sırasıyla bağlanma ve yeniden birleşme katsayıları olan β_r ve a_r gibi iki katsayı ile tanımlanabilir. Bu katsayılar kaç tane elektron ve iyonun birim saniyede birleştiğini ve kaç tane elektronun birim saniyede nötr parçacıklar ile bağlandığını tanımlar.

Yeniden birleşme ve bağlanma, iyonlaşmanın etkisini azalttığından dolayı, iyonlaşmaya negatif katkı sağlarlar. Yeniden birleşme, birleşen hem iyonların hem de elektronların yoğunlukları ile orantılı iken bağlanma sadece nötr parçacıklar ile bağlanmaya uygun elektronların yoğunluğuyla orantılıdır. Denge olan iyonküre plazması nötr olarak kabul edilir, $n_i \approx n_e$, elektron yoğunluğu için süreklilik denklemi;

$$\frac{dn_e}{dt} = q_{v,e} - a_r n_e^2 - \beta_r n_e \quad (2.30)$$

Sağ taraftaki ilk terim, $q_{v,e}$, parçacık yağışıyla çarpışmalar ve Güneşin UV ışımasından dolayı iyonlaşmadır. Bu terim elektron yoğunluğunun kaynağı gibi hareket ederken, diğer iki terim iyonlaşmanın azaldığının bir göstergesidir. β_r ve a_r katsayıları, değişen yüksekliklerdeki farklı iyonküresel bileşenlerden sorumlu karmaşık fotokimyasal süreçlerin sayısını içerir.

Denge durumunda yoğunluğun zamana bağıllılığı sıfırdır. Bu yüzden, (2.30) denkleminin sol tarafı sıfır olur, denge şartlarında iyonküredeki elektron yoğunluğu bulunur. Alt yüksekliklerde, yeniden birleşme bağlanmadan çok daha önemlidir ve $\beta_r = 0$ olarak elde edilir;

$$n_e = \left(\frac{q_{v,e}}{a_r}\right)^{1/2} = \frac{q_{v,e}}{\beta_r} \quad (2.31)$$

Bunun sonucunda, alt iyonküredeki dengedeki elektron yoğunluğu, yeniden birleşim katsayısı ve iyon üretim hızı arasındaki oranın karekökü ile orantılıdır. Böylece üst yüksekliklerde elektron yoğunluğu, iyon üretim hızı ile orantılıdır [58].

2.3.5. İyon – Atom Değişimi ve Yük Transferi (Pozitif İyonlar)

Bu bölümde iyonkürenin iyonik ve elektronik yapısı ile ilgili olarak iyon atom değişimi ve yük transfer süreçlerinin önemine değinilecektir. Özellikle oluşumları oldukça hızlı olan ve reaksiyona girmeleri neticesinde çeşitli iyon türlerinin meydana geldiği bu süreçleri kontrol eden reaksiyon mekanizmaları gösterilecektir. İyon türlerinin doğası, elektron yoğunluğu ve elektronun yeniden birleşme hızı ile önemli ölçüde ilgilidir. 80 km ile 150 km lik yükseklik aralıklarında gerçekleşmesi olası bu tür pek çok süreç, aktivasyon enerjisinin normal sıcaklıklarda gerçekleşen süreçlerde dahi çok büyük olduğu, reaksiyonların hayli endotermik (ısı alan) olduğu, nötr parçacıkların sadece izlenebilen yoğunluklarda var olması gibi çeşitli sebeplerden dolayı ihmal edilebilirler. Karma süreçlerde önemli oldukları düşünülen reaksiyonlar aşağıdaki gibidir:

- (1) $O^+ + O_2 \rightarrow O + O_2^+$
- (2) $N_2^+ + O \rightarrow N_2 + O^+$
- (3) $N_2^+ + O_2 \rightarrow N_2 + O_2^+$
- (4) $N_2^+ + NO \rightarrow N_2 + NO^+$
- (5) $O_2^+ + NO \rightarrow O_2 + NO^+$
- (6) $O^+ + NO \rightarrow O + NO^+$
- (7) $O^+ + N_2 \rightarrow NO^+ + N$
- (8) $O^+ + NO \rightarrow O_2^+ + N$
- (9) $O_2^+ + N \rightarrow NO^+ + O$
- (10) $N_2^+ + O_2 \rightarrow NO + NO^+$
- (11) $O_2^+ + N_2 \rightarrow NO + NO^+$
- (12) $N_2^+ + O \rightarrow N + NO^+$

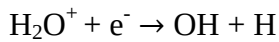
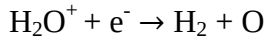
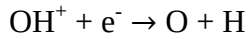
Ancak, bu reaksiyonlardan ikisi (10 ve 11), iki çift bant parçalanmasını içerir ve böylece büyük aktivasyon enerjilerine sahip olmaları beklenir. Aslında Talrose ve arkadaşları, (10) numaralı reaksiyon süreci için 7 kcal/mole'e sahip bir aktivasyon enerjisi

buldular. Potansiyel bariyerini aşan çarpışmalar için iletim katsayısı bir bütün olarak kabul edilirse, 200 K sıcaklıkta $10^{-16} \text{ cm}^3\text{sec}^{-1}$ reaksiyon hızı için üst bir limit elde edilir. Bu tahminler (10) süreci için olandan yeteri kadar küçük ve (11) süreci için 90 km'nin üzerinde iyonkürenin her bir bölgesinde ihmal edilebilir olsa da, (11) reaksiyonu 90 km'nin altındaki yüksekliklerde iyon kopma kinetiğinde ele alınmalıdır. (11) sürecinin hız sabitini ölçmek için Galli ve arkadaşları, bir elektronik geçiş içeren özellik vasıtasıyla baskı altına alınan (12) sürecini tartışan Bates'in sonucunda üç kat daha büyük olan 2.1×10^{-13} seviyesinde üst limiti elde ettiler. Her bir çarpışmada bir reaksiyon gerçekleşiyorsa yani, klasik çarpışma tesir kesiti ile reaksiyon tesir kesitinin eşit olduğu varsayıldığında, her bir çarpışma için meydana gelen reaksiyonun değeri $10^{-9} \text{ cm}^3\text{sec}^{-1}$ mertebesinde ise, (1 ve 9) süreçlerinin her biri için hız sabitinin en büyük değerine ulaşır [63].

F bölgesine H_2 ve H_2O yoğunluklarının büyük miktarlarda ilave edildiği varsayıldığında, O^+ ile H_2 ve H_2O arasındaki iyon-atom değişim reaksiyonları, elektron kayıp süreçlerinde (1) ve (7) süreçlerine alternatif sağlarlar. Bu reaksiyonlar [64];



sonrasında moleküler iyonların ayrıştırıcı yeniden birleşimi (13) ve (14) reaksiyonları vasıtasıyla gerçekleşir;



Elbette O ve O_2 'nin büyük yoğunluklara sahip oldukları bölgelerde H_2O^+ ve OH^+ arasında gerçekleşmesi olası çok sayıda reaksiyon vardır [65].

3. GAZLARIN KİNETİK TEORİSİ

Gazların kinetik teorisinin başlangıcı, milattan önce 400 civarında antik Yunan'a kadar dayanır. Democritus, maddenin atom olarak adlandırdığı bölünemeyen küçük parçacıklardan oluştuğu hipotezini öne sürdü. Farklı materyallerin atomlarının değişik şekil ve ölçülere sahip olduğu varsayıldı. Böylece atomların özelliklerini koruyan küçük bir maddeyi simgelediği anlaşıldı. Yaklaşık iki yüz yıl öncesine kadar birçok tahminden sadece biri olarak görülen teori temelde uzmanlar tarafından doğrulanmamıştı [32].

Moleküler hipotezin 18. yy. da modern fiziğe giriş yapması beraberinde birçok ispat ve teoriyi getirdi. 1738'de Daniel Bernoulli, Boyle's kanununu açıkladı [66]. Bu temel çalışmada Bernoulli, gaz molekül hızının ortalama karesi, u^2 , gaz kütle yoğunluğu ρ ve gaz basıncı, p , olmak üzere $p = \rho u^2 / 3$ formülünü buldu. Bernoulli'nin çalışması, modern gaz kinetik teorisinin başlangıcı olarak kabul edilebilir.

Kinetik teori, Rudolf Julius Emanuel Clausius'un ortalama serbest yol (mean free path) ilkesini bulduğu 1858 yılında yeni bir şekle dönüştü [67]. Clausius'un çalışması, modern gaz kinetik teorisinin kurucusu olarak düşünülen James Clerk Maxwell'i oldukça etkiledi. 1859'da Maxwell, denge durumundaki bir gaz için moleküllerin hız dağılım fonksiyon teorisini buldu ve bir gaz karışımında farklı kütleye sahip moleküllerin ortalama moleküler enerjilerinin eş bölüşüm prensibini kabul etti [68]. Kendi hız dağılım kavramını ve ortalama serbest yol yaklaşımını birleştiren Maxwell, gazların iletim katsayıları (difüzyon katsayısı, termal iletkenlik ve viskozite) için de yeni formüller buldu [69]. Günümüzde bu çalışmalar gaz kinetik teorisinin temel taşlarından bir kaçı olarak görülürler.

Diğer bir önemli çalışma, 1872 de Ludwig Boltzmann tarafından bulunan parçacık iletiminin temel integral-diferansiyel denklemidir. Boltzmann çalışmasında, bir gazın dış etkenlerden etkilenmediği sürece Maxwell hız dağılımını basitleştirmek için herhangi bir başlangıç dağılım fonksiyonuna sebep olan moleküler çarpışmayı gösteren H-teoremini bulmuştur [70]. Boltzmann, düzensiz gazları çalışmış ve tüm şartlarda tatmin edici olan dağılım fonksiyonunun uzaysal (spatial) ve geçici (temporal) değişimleri için Boltzmann denklemini türetmiştir.

1905 de Leiden Üniversitesinde teorik fizik profesörü olan Hendrik Antoon Lorentz, bir elektron gazındaki elektriksel iletim problemine Boltzmann taşınım teorisini uyguladı [71]. 1917 de David Enskog doktora tezinde, dengesiz gazın detaylı matematiksel

teorisini geliřtirdi [72]. Enskog'dan bağımsız olarak, Sydney Chapman'da benzer sonuçlar elde etti. [73-74]. Son derece başarılı bu metot modern gaz kinetik teorisinin temelidir. 1949 da Harold Grad, dikey (ortogonal) polinomların serileri içinde çözümü genişleterek Boltzmann denkleminin yeni bir çözüm metodunu geliřtirdi [75]. Bu metot, 1950'li yılların sonundan itibaren geniş bir şekilde kullanılmaya başlanılan Grad'ın 13 moment yaklaşımına götüřdü. Bilgisayar teknolojisindeki ilerlemelerle yakın geçmişte 20 moment yaklaşımı pek çok uygulama için kullanılmaya başlandı.

Klasik gaz kinetik teori, mekanik ve statikğin birleřiminden oluşur. Moleküllerin hareketinin, onların kendi yönlerinden deęil de olasılıklar tarafından tayin edildięini söyler. Bu yaklaşım, viskozite, termal iletkenlik, difüzyon katsayısı gibi taşınım özelliklerinin yanında durum denklemi, sıcaklık ve basınç tanımlarının gelişmesine öncülük eden gazların kinetik teorisidir.

Gaz kinetik teorisinin tarihi, anlaşılmıř ve anlaşılmamıř fantastik keřiflerin tamamını kapsamaktadır. Bugün, gaz kinetik teori fen ve mühendislięin çeřitli alanlarında genişçe kullanılan bir araçtır [76-77].

3.1. Gaz Kinetik Teorisinin Temel Yaklaşımları

Gazların kinetik teorisi üç temel yaklaşıma dayandırılır. Bunlar, moleküler hipotez, klasik korunum kanunları ve istatistiksel metotların uygulanmasıdır [32].

3.1.1. Moleküler Hipotez

Moleküler hipotez, maddenin molekül olarak adlandırılan küçük ayrı birimlerden oluştuęunu, moleküllerin kimyasal özellikleri aynı olan bir maddenin küçük nicelikleri olduęunu, verilen bir maddenin tüm moleküllerinin benzerlik taşıdığını, madde hallerinin (katı, sıvı, gaz) ve düzenlerinin temelde farklılık gösterdięini kabul eder. Gazlar, çok düşük yoğunluklara sahip olmaları, birbirleri içinde hızlı bir şekilde difüzyon etmeleri, sıkıştırılabilme özellikleri ve her hangi bir kabı tamamen doldurmaları ile katı ve sıvılardan farklıdır. Bu faktörler, bir gazdaki moleküllerin birbirlerinden oldukça uzaklařtıklarını (moleküller arasındaki ortalama mesafenin moleküllerin ölçülerinden çok daha büyük olduęunu söyler) ve gazların doldurduęu uzay boyunca hareket ettiklerini gösterir. Bir gazdaki moleküller bağımsız bir şekilde hareket ederler. İki ya da daha fazlası birbirlerini

etkileyecek kadar yaklaşıp kadar düz bir çizgi boyunca hareket ederler. İdeal (mükemmel) gaz kinetik teori uygulanabilir. İdeal gaz aşağıdaki varsayımlarla tanımlanabilir:

- a) Moleküller nokta benzeridirler yani tek atomludur.
- b) Moleküller sadece merkezleri aralarındaki mesafe ortalama ayrılma mesafelerine göre çok çok küçük olduğunda birbirlerine kuvvet uygulayabilirler.
- c) Etkileşen her bir molekül küresinin dışı klasik mekanik kanunlarına uyar yani hareketleri rölativistik olmayan denklemle tanımlanır.

Mükemmel gazda ısı enerjisi moleküllerin rastgele çevrimsel enerjisi olarak tanımlanabilir. Ancak, moleküller bağımsız iç seviyelerinde (titreşim ve dönme kinetik enerjisi ya da titreşim potansiyel enerjisi) enerji depolayabilen yapılara sahiptirler. Klasik kinetik teori, bağımsız seviyelerin tümünde kinetik enerjinin nasıl parçalara ayrıldığının özel tahminini yapsa da sonuçlar basit moleküllerin haricinde yapılan gözlemlerle uyuşmaz. Bu kusur klasik gaz kinetik teorisinin sınırlarını açıkça göstermektedir [32].

3.1.2. Klasik Korunum Kanunları

Rölativistik doğrulamalar, kuantum mekaniksel ve mükemmel olmayan gaz etkileri klasik gaz kinetik teori içinde genellikle ele alınmaz. Burada istisnai olan, kuantum mekaniksel etkilerin göz önüne alındığı çarpışma tesir kesiti ve özel ısınma hesaplamalarıdır. Atom ve moleküllerin iç yapıları temelde iki farklı yolla kinetik teoriye dahil edilirler. Moleküllerin sadece öteleme (translational) hareketlerinin incelendiği gaz kinetik teorisinin bu aşamalarında, kuantum mekaniksel etkiler önemsizdirler. Bu problemlerde iç moleküler yapı (kuantum mekaniği tarafından oluşturulan) sadece iç moleküler kuvvetin kesin doğası tanımlanıncaya kadar önemlidir. Diğer yandan, gaz kinetik teorideki moleküller arası güç kanunlarının yarı deneysel ifadelerdeki gibi alındığı kabul edilebilir. Atomik ve moleküler yapının kuantum mekaniksel teorisi bu yarı deneysel güç kanununun sağlanmasında bir metot sağlar. Kuantum mekaniksel etkinin, bağımsız iç seviyelerde enerjinin depolandığı düşünülen herhangi bir gaz kinetik problemde hesaba katılması gerekir. Moleküler dolanım ve elektronların hareketi ve titreşimi, tümüyle kuantum teorisi ile incelenmelidir ayrıca klasik metotlar sadece yeterli yüksek sıcaklıklarda doğrudurlar [32].

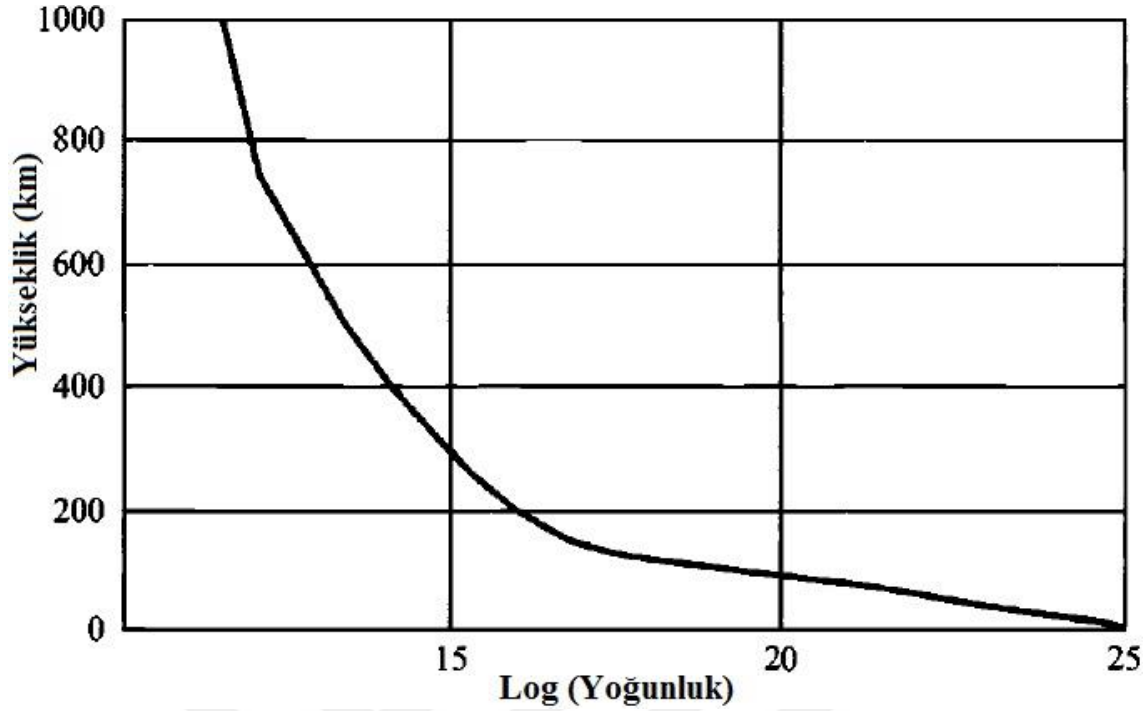
3.1.3. İstatistiksel Metotlar

Kinetik gaz teorisi, dinamiksel metotlara ilaveten istatistiksel yaklaşımı da kullanan istatistiksel bir teoridir. Tek bir parçacık hareketinin dinamiksel tanımı, bağımsız çevrimsel seviyelerin her biri için iki integral sabitli ikinci dereceden bir diferansiyel denklemi olan hareketin rölativistik olmayan denklemi tarafından verilir. Bu integral sabiti özelleştirilir ve parçacık üstünde etkin olan tüm güçler, bütün zaman ve uzaysal konumlarda bilinirse, baştan sona gelecekteki dinamiksel davranış hareketin denklemiyle tanımlanır.

N tane parçacıktan oluştuğu düşünülen bir gazın (her biri üç çevrimsel seviyeli), $6N$ integral sabitli hareketin N tane vektör denklemi vardır. Esas problem engelleyici derecede büyük sayılı tipik N gazları içindir. Makroskobik olarak ölçülemeyecek kadar her bir örnek içinde çok büyük sayıda molekül vardır.

Bu noktayı aydınlatmak için Şekil 3.1, dünya atmosferinde yüzey ile 1000 km arasındaki yüksekliğin fonksiyonu olarak gaz yoğunluğunu göstermektedir [78]. Yüzeydeki her bir metreküpde yaklaşık 10^{25} mertebesinde molekülün var olduğu görülebilir. $\geq 10^{25}$ mertebesinde denklemler kolay değildir zaten buna ihtiyaç da duyulmaz. Moleküler hareket ile ilgili sadece gazın makroskobik özelliklerini, gözlemlerin tahminini ve anlaşılmasını yeteri kadar bilmeye ihtiyaç duyarız. Bu niceliklerin ölçümü, makroskobik olarak ölçülemeyecek kadar küçük hacimdeki bireysel parçacık hareketinin anlık seviyeleri üzerinde ortalama bir zaman alınarak yapılır.

Bu ortalama nicelikler basınç, hız, kütle vb. olabilir. Gaz kinetik teori istatistiksel metotlar vasıtasıyla oldukça büyük sayıdaki bireysel moleküllerin tanımını içerir. Bu tanımlama anlamlıdır, çünkü makroskobik olarak ölçülemeyecek kadar küçük herhangi bir hacim içinde çok büyük sayıda molekül bulunur [32].



Şekil 3.1. Yüzeyle 1000 km arasındaki gaz yoğunluğunun yükseklikle değişimi

3.2. Çarpışma Çeşitleri

Gazların birbirleriyle olan etkileşimi; elastik, inelastik ve reaktif çarpışma olmak üzere üçe ayrılır. İki parçacığın çarpışmasında, sadece kinetik enerjileri ve lineer momentumları değişiyorsa (her birinin toplamı korunumludur) bu çarpışma elastiktir. Eğer çarpışan parçacıkların biri veya ikisinin iç enerjilerinde bir değişim meydana geliyorsa, çarpışma inelastiktir. Reaktif çarpışmalar ise, yeni türlerin oluştuğu (inelastik çarpışmalarda bu sınıfa dahildir) etkileşimlerdir. Reaktif çarpışmalar üst atmosfer kimyasının temelini oluştururlar. Elastik çarpışmalar atmosferdeki iyonlaşmış ve nötr bileşenlerin, difüzyon, viskozite ve iletim gibi taşınım özelliklerini etkilerler. Auroral ve fotoelektron taşınmasının açısal dağılımları, temelde elastik saçılmalara bağlıdır. Tüm farklı bileşenler arasında meydana gelen çarpışmalar atmosferik çarpışmalar ile ilgili uzmanların ilgisini çekmiştir. Bunlar, iyon-iyon, elektron-iyon ve elektron-elektron çarpışmalarının yanında nötrler ile elektronlar, nötrler ile iyonlar ve moleküller ile çeşitli nötr atomlar arasındaki çarpışmaları kapsar. Çift parçacıklı çarpışmalar termokürede baskındırlar, atomik oksijenin yeniden birleşimini içeren üç gövdeli reaksiyonda önemlilik arz eden tek reaksiyondur. Ayrıca üç

tarafli etkileşimler de atmosferik bileşen bakımından yoğun olan mezoküredeki kimyasal reaksiyonlara katkı sağlar.

Atmosferdeki atom ve moleküller, sıcaklık tarafından karakterize edilen geliş güzel bir harekete sahiptirler. İyon ve elektronlar elektrik ve manyetik alandan kaynaklanan direkt bir harekete sahiptirler. Atom, molekül ve iyonlar her türün sahip olduğu karakteristik potansiyel alan tarafından çevrelenmişlerdir. Bu durum çarpışma olasılığının, karşılaşma geometrisinin yanında parçacıklar arasındaki görelî hıza da bağılı olduğunu gösterir [79].

3.2.1. Reaktif Çarpışmalar

Bu tip çarpışmalar, $O^+ + H_2 \rightarrow OH^+ + H$ ve $O^+ + N_2 \rightarrow NO^+ + N$ gibi yeni türlerin oluştuğu reaksiyonları içerir. Reaktif çarpışmaların pek çoğu üst atmosferde meydana gelir. Reaktif çarpışmaların karmaşıklığı tesir kesitinin kuantum mekaniksel olarak hesaplanmasındaki zorluktandır. Reaktif saçılmaya uygulanan dalga teorisindeki önemli farklılık kendilerini daha fazla koruyamayan parçacıklardır. Klasik olarak bir dalğanın sanal (imajiner) kısmının matematiksel tanımı sönüm ya da soğurulma durumları ile alakalıdır. Reaktif saçılmanın kısmi dalga tanımı karmaşık bir saçılma potansiyeli ile ilişkilidir.

Reaktif çarpışmalara en uygun yaklaşım, özellikle orta seviyeli karmaşıklıklar, tepkimeye girenlerin titreşim ve elektronik seviyelerini niteleyen eğriler ya da potansiyel enerji yüzeylerinin vasıtası ile sağlanır. Enerji korunumuna bağılı reaksiyon olasılığı olan kuantum mekaniksel tabanlı kavramlar, sınır seviyelerinin ayrışma enerjilerine ve nükleer ayrılmaya ya da itme seviyeleri gibi potansiyel eğri detaylarına, spin ve simetri kombinasyonlarına olanak verir. Sonuç olarak, reaktif çarpışmaların teorik analizlerinin başarısı reaksiyona katkı sağlayan seviyeler arasındaki korelasyonun bilinmesi ve potansiyel eğrilerinin detaylandırılması ve doğrulanmasına bağılıdır. Teorik analizlerin yanında deneysel çalışmalar da mevcuttur. Deneysel çalışma yapan bilim insanları hareketsiz gazları tercih ederken, teorisyenler basit atomik ve moleküler sistemler arasındaki reaktif çarpışmaları tercih etmektedir. Üst atmosferin doğal yapısı içindeki parçacıklar beraberinde, hem deneyçiler hem de teorisyenler için zorluklar getirmiştir. Laboratuvar deneylerinde çarpışan parçacıkların görelî enerjisi belirlenirken, atmosferdeki reaktif çarpışmalar genellikle ortam sıcaklığında meydana gelir ancak sürekli değildir. İçerilen yoğunluklara bağılı olarak, bu durum çarpışmadaki reaksiyona giren parçacıklara

uygun herhangi bir kombinasyonu ya da özel bir molekülün titreşim sıcaklığını, elektron ya da elektron sıcaklığını veya nötr gaz sıcaklığına işaret eder. Sonuç olarak bu ifade reaktif çarpışma olasılıklarının nitelendirilmesi için çarpışan çiftlerin hızları veya enerjilerindeki dağılımını hesaba katan bir niceliğin tanımlanmasında kullanışlıdır. Bu nicelik ise reaksiyon hız sabitidir [79].

3.2.1.1. Reaksiyon Hız Sabiti

Genel anlamda reaksiyona giren parçacıkların ya da ürünlerin yoğunluklarındaki değişim termal hız sabiti olarak tanımlanır. Herhangi bir $A+BC \rightarrow AB+C$ reaksiyonu için termal hız sabiti yazılacak olursa [80]:

$$-\frac{d[n_A]}{dt} = -\frac{d[n_{BC}]}{dt} = k(T)[n_A][n_{BC}] \quad (3.1)$$

denklemini ile verilir. Diğer yandan, kuantum mekaniksel bakışta $A + BC(v, j) \rightarrow AB(v', j' + C)$ biçiminde tek tek kuantum durumları dikkate alınarak;

$$-\frac{d[n_A]}{dt} = -\frac{d[n_{BC}(v, j)]}{dt} = \sum_{v', j'} k_{vj, v' j'}(T)[n_A][n_{BC}(v, j)] = k_{vj}(T)[n_A][n_{BC}(v, j)] \quad (3.2)$$

şeklinde yazılabilir. Burada $k_{vj}(T)$, v ve j kuantum durumunda reaksiyon hız sabitini ifade eder. Herhangi bir sıcaklık değerinde, bir kimyasal reaksiyonun oluşum hızı reaksiyon hız sabiti olarak ifade edilir. Bu sebeple, hız sabitinin özellikle serbest radikalleri içeren reaksiyonlarda deneysel olarak belirlenmesi zordur [33]. Maxwell Boltzman dağılımına göre termal hız sabiti, tüm hız vektörleri (veya enerjileri) üzerinden toplam tesir kesitlerinin birleştirilmesi ile elde edilir;

$$k(T) = \int E \sigma(E) f(E, T) dE \quad (3.3)$$

Burada $f(E, T)$, Maxwell Boltzman dağılımını ifade eder. Herhangi bir başlangıç kuantum durumunda (v, j) $A+BC$ reaktif saçılması için reaksiyon hız sabiti;

$$k_{vj}(T) = \left(\frac{8k_B T}{\pi\mu_a}\right)^{1/2} (k_B T)^2 \int E e^{-\frac{E}{k_B T}} \sigma_{vj}(E) dE \quad (3.4)$$

ifadesi ile gösterilir. Burada E çarpışma enerjisini, μ_a indirgenmiş kütleyi, k_B Boltzmann sabitini ve σ_{vj} toplam tesir kesitini ifade eder [81].

3.2.1.2. Tesir Kesiti

Şekil 3.2’de genel bir saçılma olayı gösterilmiştir. Bu şekilde, hedeften saçılan parçacıkları gözlemlemek için bir detektörün (r, θ, ϕ) noktasında olduğu varsayılarak, detektörün etkin yüzey alanı dS olmak üzere;

$$d\Omega = \frac{dS}{r^2} = \sin\theta d\theta d\phi \quad (3.5)$$

şeklindedir. Bu alanın gördüğü katı açı $d\Omega$ olarak ifade edilir. Diferansiyel tesir kesiti, hedeften saçılarak hedeften r kadar uzaklıkta bulunan ve sabit θ açısına yerleştirilmiş bir detektörün etkin yüzeyine ulaşan parçacık sayısının gelen parçacık sayısına oranına denir.

Diferansiyel tesir kesiti denklem (3.6);

$$\sigma(\theta) = \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\text{Birim zamanda } d\Omega \text{ açısı içine saçılan parçacık sayısı}}{\text{Birim zamanda gelen parçacık sayısı}} \quad (3.6)$$

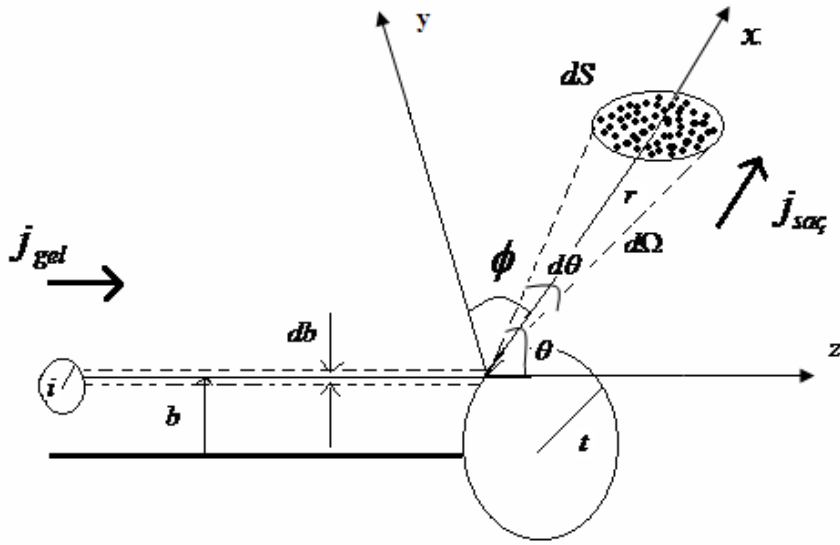
ile verilir. Diferansiyel tesir kesiti kuantum mekaniksel olarak, bir kuantum durumunda saçılan bir parçacığın, katı açı başına gözlenmesi olasılığıdır ve ayrıca birim katı açı başına saçılan akı miktarının gelen akıya oranı olarak ifade edilir;

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{j_{saç}}{j_{gel}} \quad (3.7)$$

Burada j_{gel} ve $j_{saç}$ sırasıyla gelen ve saçılan olasılık akılarını ifade eder. Tüm katı açıları üzerinden diferansiyel tesir kesitinin integrali alınacak olursa;

$$\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{d\sigma}{d\Omega} \sin\theta d\theta d\phi = 2\pi \int_0^\pi \sigma(\theta) \sin\theta d\theta \quad (3.8)$$

toplam tesir kesiti elde edilir. Bir saçılma olayının gerçekleşmesi durumunda, gönderilen parçacığın hedefe yaklaştığı minimum mesafe etki (impact) parametresi olarak ifade edilir. Etki parametresinin (b) değişmesi durumunda saçılma açısı da değişim gösterecektir. Klasik olarak, hedef kürenin merkezinden ($b=0$), gelen kürenin merkezine ($b=t+i$) kadar olan mesafe etki parametresi olarak tanımlanır.



Şekil 3.2. Genel olarak bir saçılma olayının tasviri [82].

Herhangi bir kimyasal reaksiyon için, ψ_i giriş kanalında sistemin asimptotik davranışını, ψ_f ise çıkış kanalında sistemin asimptotik davranışını temsil eden dalga fonksiyonu olmak üzere saçılma matrisi;

$$S_{f,i} = \langle \psi_f | \psi_i \rangle \quad (3.9)$$

şeklinde verilir. Kuantum mekaniksel bakışta bir olayın gerçekleşme ihtimalinin ölçüsü tesir kesiti olarak ifade edilir. Tek kanallı bir saçılma olayında saçıcıya olan uzaklık r olmak üzere, saçılan (küresel bir dalga) ve gelen (düzlem dalga) dalga cinsinden;

$$\Psi = \Psi_{gel} + \Psi_{saç} = e^{ikz} + f(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (3.10)$$

olarak toplam dalga fonksiyonu yazılabilir. Burada k dalga sayısı ve $f(\theta, \phi)$ saçılma genliğidir. Olasılık akı yoğunluğu yazılacak olursa;

$$j = \frac{i\hbar}{2\mu} [\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*] = \frac{\hbar k}{\mu} |\Psi|^2 \quad (3.11)$$

denklemleri ile verilir. Bu koşullarda her bir katı açı başına saçılan akı $j_{saç} = \frac{\hbar k}{\mu} |f(\theta, \phi)|^2$ ve gelen akı $j_{gel} = \frac{\hbar k}{\mu}$ 'dür. Buradan diferansiyel tesir kesiti;

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta, \phi)|^2 \quad (3.12)$$

olarak hesaplanır [83,84]. Çoklu kanal saçılma olayında, Ψ_i , (herhangi bir i . kanala gelen bir parçacığı temsil eden dalga fonksiyonu);

$$\Psi_i \approx \sum_f \frac{1}{(4\pi v_f)^{\frac{1}{2}}} (e^{-ik_f r \delta_{if}} - S_{if} e^{ik_f r}) \quad (3.13)$$

olarak ifade edilir. N tane açık kanala sahip bir sistem için Ψ_i dalga fonksiyonunun kavuşmaz davranışının belirlenmesinde, N tane S_{if} katsayısının bilinmesi gereklidir. Böylelikle bütün sistemin dalga fonksiyonunun tanımlanması için $N \times N$ tane S_{if} katsayılarının bilinmesi yeterlidir. Bir E enerjisinde sistemin saçılma matrisini bu sabitler meydana getirirler. Dalga fonksiyonunun bütün asimptotik davranışını saçılma matrisi tanımlar ve herhangi bir $i \rightarrow f$ geçişinde olasılık genliği olarak ifade edilir. Sonuç olarak $i \rightarrow f$ geçişi için reaksiyon olasılığı;

$$P_{i \rightarrow f}^{J,\Omega}(E) = |S_{i \rightarrow f}^{J,\Omega}(E)|^2 \quad (3.14)$$

denklemleriyle hesaplanır [85]. Gittikçe artan (kümülatif) reaksiyon olasılıkları, bireysel kuantum seviyeleri arasındaki reaksiyon olasılıklarının tüm başlangıç ($i \equiv v, j$) ve ürün ($f \equiv v, j$) kuantum durumları üzerinden toplanmasıyla elde edilir;

$$P^{J,\Omega}(E) = \sum_{i,f} P_{i \rightarrow f}^{J,\Omega}(E) \quad (3.15)$$

Belli başlangıç kuantum durumu için toplam reaksiyon olasılıkları, bireysel kuantum seviyeleri arasındaki reaksiyon olasılıklarının sadece ürün kuantum durumları üzerinden toplanmasıyla elde edilir [33];

$$P_i^{J,\Omega}(E) = \sum_f P_{i \rightarrow f}^{J,\Omega}(E) \quad (3.16)$$

Toplam açısal momentum kuantum sayısı J değeri ve herhangi bir başlangıç kuantum durumunda ($i \equiv v, j$) kısmi diferansiyel tesir kesiti;

$$\sigma_{vj}^J(E) = \frac{1}{(2j+1)} [P_{vj}^{J,\Omega=0}(E) + 2 \sum_{\Omega=1}^{\Omega_{max}} P_{vj}^{J,\Omega}(E)] \quad (3.17)$$

şeklinde verilir. Burada J toplam açısal momentum kuantum sayısını, Ω helisite kuantum sayısını ve v ve j başlangıç titreşim ve dönme kuantum sayılarını ifade etmektedir. Belli bir başlangıç kuantum durumu için toplam reaksiyon tesir kesitleri, kısmi diferansiyel tesir kesitlerinin tüm J durumları üzerinden toplanmasıyla da elde edilir [82];

$$\sigma_{vj}(E) = \frac{\pi}{k_{vj}^2} \sum_J (2J + 1) \sigma_{vj}^J(E) \quad (3.18)$$

3.2.1.3. Ortalama Serbest Yol

Ortalama serbest yol, tek bir molekülün ardışık iki çarpışması arasındaki kat ettiği mesafedir. Bir molekülün v hızı ile hareket ettiği ve $s=0$ mesafesinde diğer bir molekül ile çarpışmaya maruz kaldığını varsayalım. $P_{yol}(s)$ bu molekülün ikinci bir çarpışmaya uğramaksızın bir s mesafesinde kendini koruma olasılığını ifade eder. Çoklu çarpışmalar ihmal edildiğinden dolayı, $P_{yol}(0) = 1$ 'dir. Bir molekülün s ve $s+ds$ mesafesi arasında bir çarpışmaya uğrama olasılığı ads 'dir. Tek bir parçacığın birim mesafe başına çarpışma olasılığı, 'a' niceliği ile ifade edilir. Çarpışma olasılık yoğunluğu olarak da ifade edilebilen, a , molekülün geçmişteki çarpışmalarından bağımsızdır. Ancak, genelde a , parçacığın hızına bağlıdır (oldukça hızlı parçacıkların büyük mesafeler kat ettiği ve böylece aynı zaman aralıklarında birçok molekülle karşılaştığı) ve $a(v)$ olarak yazılır [32].

Parametre 'a' nın yardımıyla, parçacığın hayatta kalma olasılığının (P_{yol}) fonksiyonel şekli türetilebilir. Bir çarpışmaya uğramadan $s+ds$ aralığında parçacığın hayatta kalma

olasılığı 0'dan s'ye ve s'den s+ds'e kadar sıralı aralıklarda çarpışmanın olmama olasılığına denk olmalıdır:

$$P_{yol}(s+ds) = P_{yol}(s) (1-ads) \quad (3.19)$$

Denklemin sol tarafı Taylor serisi içinde genişletilebilir. Bu lineer genişleme P_{yol} için aşağıdaki diferansiyel denklemi verir:

$$\frac{dP_{yol}}{ds} = -aP_{yol} \quad (3.20)$$

Diferansiyel denklemin çözümü ($P_{yol}(0) = 1$ alarak);

$$P_{yol}(s) = e^{-as} \quad (3.21)$$

şeklinde yazılabilir.

Son denklem, s mesafe aralığında çarpışmanın oluşmama olasılığını verir. Bu olasılığa bağlı olan ifadelerden birinde s+ds ve s aralığında bir molekülün sıralı iki çarpışması arasındaki serbest yolun olasılığı elde edilebilir. Bu olasılık $f_{yol}(s)ds$ ile ifade edilir. $f_{yol}(s)ds$, 0'dan s aralığına kadar çarpışmanın oluşmama olasılığına denk olmalıdır;

$$f_{yol}(s)ds = e^{-as}ads \quad (3.22)$$

$f_{yol}(s)$, serbest yol dağılımıdır. Bu dağılım fonksiyonlarından biri kullanılarak ortalama serbest yol, λ , türetilebilir:

$$\lambda = \int_0^{\infty} ds s f_{path}(s) = \int_0^{\infty} ds s a e^{-as} = \frac{1}{a} \quad (3.23)$$

Ortalama serbest yol, parçacıklar için (verilen bir hız ile) çarpışmalar arasındaki ortalama mesafedir. Aynı zamanda çarpışma tesir kesitinin parçacık yoğunluğuyla çarpımı ile ters orantılıdır [32]:

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}\sigma_{vj}n} \quad (3.24)$$

3.2.1.4. Çarpışma Frekansı

Sadece tek bir çeşit molekülden oluşan bir gazı ele alalım. Tek bir molekül (molekül 1 olarak alınsın) ve onun birim zaman başına çarpışma sayılarını hesaplayalım. Moleküllerin ortalama yoğunluğu n ile gösterilirsin, diğer tüm moleküllerin aynı $\bar{v}$ hızı ile hareket ettikleri varsayılın ve 1 moleküline göre diğerlerinin görelî hızı $\bar{g}$ olarak kabul edilsin (burada $\bar{v}$ ve $\bar{g}$ sırasıyla moleküllerin ortalama ve görelî hızlarını ifade eder). Sabit molekül, σ_{vj} 'nin etki hedef alanını temsil eder. Bu tesir kesiti, plazma fiziksel veya kuantum mekaniksel metotlarla elde edilen toplam tesir kesiti ya da momentum transfer kesitine yakın olan ters güç etkileşim potansiyeli durumundaki molekülün toplam saçılma tesir kesitidir. 1 molekülü ile dt zamanında çarpışmaların sayısı ele alınacak olursa, 1 molekülü ile $t=0$ anında çarpışan bu moleküller, $\sigma_{vj}\bar{g} dt$ hacimli ve $\bar{g} dt$ uzunluğuna olan dairesel bir silindire sahiptirler. dt zamanında 1 molekülünün çarpışma sayısı, çarpışan moleküllerin yoğunluğu ile silindir hacminin çarpımına eşittir, $n\sigma_{vj}\bar{g} dt$ [32].

Öncelikle, birim zamanda tek bir molekülün çarpışma sayısı olarak ifade edilen, ν , çarpışma frekansı olarak tanımlanır;

$$\nu = n\sigma_{vj}\bar{g} \quad (3.25)$$

Ortalama görelî hız, $\bar{g}$, hesaplanacaktır. Görelî hız, başta ifade edilen 1 molekülü ve bir diğer rastgele seçilen 2 molekülü arasındaki hızdır. Tüm moleküllerin aynı $\bar{v}$ hızı ile hareket ettikleri varsayımından yola çıkarak, görelî hızın karesi aşağıdaki gibi yazılabilir:

$$g_{12}^2 = v_1^2 + v_2^2 - 2v_1v_2\cos\theta = \bar{v}^2 + \bar{v}^2 - 2\bar{v}^2\cos\theta \quad (3.26)$$

θ iki hız vektörü arasındaki açıdır. Ortalama görelî hız;

$$\bar{g}^2 = \langle g_{12}^2 \rangle_\theta = 2\bar{v}^2 - 2\bar{v}^2 \langle \cos\theta \rangle_\theta = 2\bar{v}^2 \quad (3.27)$$

olarak ifade edilir.

Bu sonuç (3.25) denkleminin içine konulabilir ve böylece çarpışma frekansı (birim zamandaki tek bir molekülün çarpışma sayısı) temel gaz parametrelerinde daha iyi açıklanabilir:

$$\nu = \sqrt{2} n \sigma_{vj} \bar{v} \quad (3.28)$$

Burada ortalama hız, $\bar{v}$;

$$\bar{v} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}} \quad (3.29)$$

olarak ifade edilir ve bu denklem çarpışma frekansı denkleminde yerine konursa:

$$\nu = 4n\sigma_{vj} \sqrt{\frac{kT}{\pi m}} \quad (3.30)$$

denklemini elde edilir. Bu ifadeden hareketle çarpışma frekansının terimlerinde ortalama serbest yol tekrar ifade edilebilir:

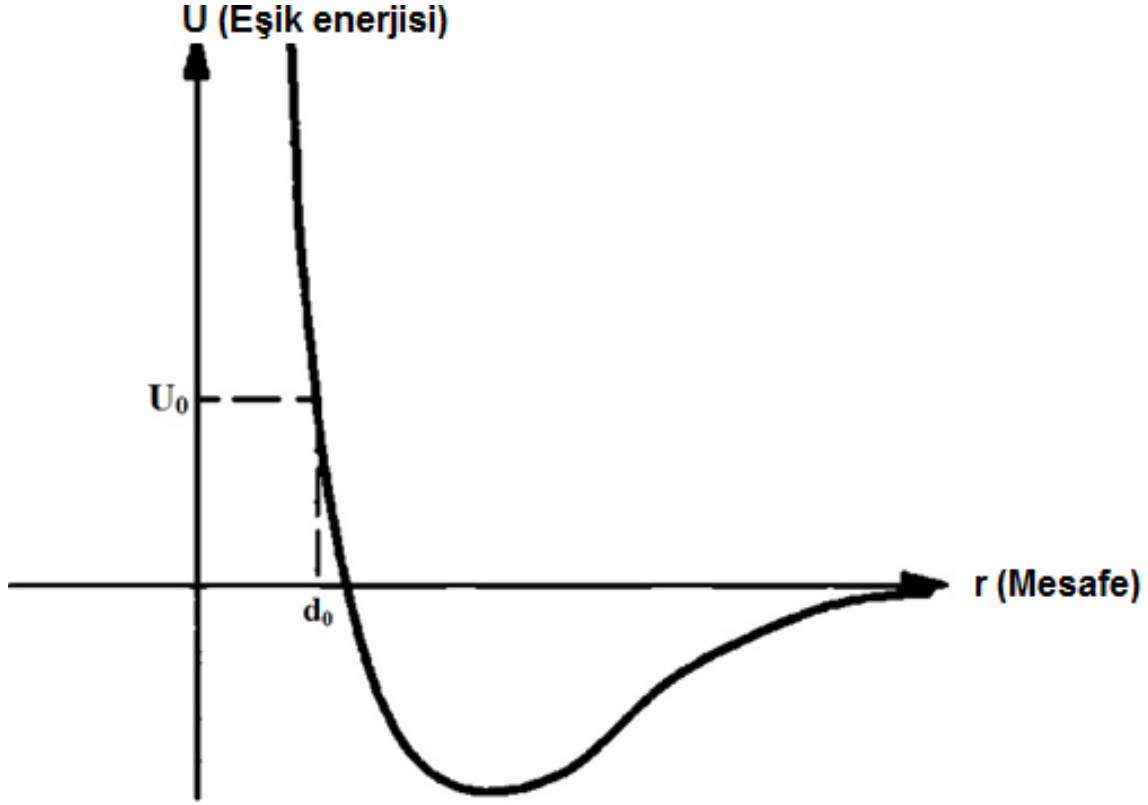
$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2} n \sigma_{vj}} \quad (3.31)$$

Yukarıdaki sonuç, molekülün ortalama serbest yolunun sadece molekülün saçılma tesir kesiti ile gaz yoğunluğuna bağlı olduğunu ve ortalama molekül hızından bağımsız olduğunu söyleyen çok önemli bir sonuçtur [32].

3.2.1.5. Potansiyel Eşik Enerjisi ve Toplam Çarpışma Sayısı

Sabit olmayan bir molekülün değişiminin gösterilmesinde çok basit bir model kullanılır. Şekil 3.3, reaktif çarpışmalar için moleküller arası potansiyeli göstermektedir [32]. Çarpışan moleküllerin merkezi birbirlerinden uzaklaştığında potansiyel zayıf bir şekilde çekici (negatif) iken, birbirlerine yaklaştıklarında güçlü bir şekilde itici olduğu görülmektedir. Çarpışan moleküllerin merkezi bir d_0 (reaksiyon mesafesi) mesafesi içinde birbirlerine yaklaştığında geçen moleküler bileşenler değişime uğrarlar. Bu değişimin

meydana gelmesi için moleküllerin U_0 (aktivasyon enerjisi) potansiyel eşik enerjisini aşmaları gerekir. Bu modeldeki kimyasal bir reaksiyon, tesir kesitine bağlı görelî bir hızla basit bir çarpışma olarak açıklanabilir:



Şekil 3.3. Potansiyel eşik enerjinin mesafeye göre değişimi [32].

$$\sigma(g) = \sigma_0 H(g - g_0) \quad (3.32)$$

$H(g)$ birim seviye fonksiyonudur ve hız eşiği, g_0 , potansiyel enerji eşiğinin aşılmasında gerekli olan görelî hareketin hızıdır:

$$g_0 = \sqrt{\frac{2U_0}{\mu^*}} \Rightarrow U_0 = \frac{4kT\mu^*}{\pi m} \quad (3.33)$$

Burada μ^* , indirgenmiş kütle ve m ise tek bir parçacığa ait kütledir.

Bu ifadenin ardından birim hacim ve birim zamandaki reaktif çarpışmaların sayısı, Z_{12} , hesaplanabilir:

$$Z_{12} = 4\pi\kappa_{12}\sigma_{vj}n_1n_2 \left(\frac{m^*}{2\pi kT}\right)^{3/2} \int_{g_0}^{\infty} dg g^3 e^{-\frac{\mu^* g^2}{2kT}} \quad (3.34)$$

Bu denklem hem tersinir hem de ileri reaksiyonlar için geçerlidir. Tersinir reaksiyonlar iki benzer molekülün çarpışmasını içerirken, ileri reaksiyonlar farklı moleküllerin çarpışmasını içerir. Sonuç olarak ileri reaksiyonlar için, $\kappa_{12} = 1$, tersinir reaksiyonlar için $\kappa_{12} = 1/2$ 'dir. (3.34)'deki integral çözülerek denklem tekrardan yazılırsa:

$$Z_{12} = \kappa_{12}\sigma_{vj}n_1n_2 \sqrt{\frac{8kT}{\pi\mu^*}} e^{-\frac{\mu^* g_0^2}{2kT}} \left(1 + \frac{\mu^* g_0^2}{2kT}\right) \quad (3.35)$$

olur. Eşik hızı, U_0 potansiyel eşik enerjisi terimlerinde ifade edilebilir:

$$Z_{12} = \kappa_{12}\sigma_{vj}n_1n_2 \sqrt{v_1^2 + v_2^2} e^{-\frac{U_0}{kT}} \left(1 + \frac{U_0}{kT}\right) \quad (3.36)$$

Kinetik teori tabanlı reaksiyon hız sabiti hesabı da aşağıdaki gibidir:

$$k_{vj} = \frac{Z_{12}}{\kappa_{12}n_1n_2} = \sigma_{vj} \sqrt{\frac{8kT}{\pi\mu^*}} e^{-\frac{U_0}{kT}} \left(1 + \frac{U_0}{kT}\right) \quad (3.37)$$

Reaksiyon hız sabiti, k_{vj} , parçacık yoğunluğundan bağımsız olmakla birlikte, reaksiyona giren moleküllerin fiziksel özelliklerinin ve sıcaklıklarının güçlü bir fonksiyonudur.

Hız sabiti, ortalama moleküler kinetik enerji ve potansiyel eşik enerjisinin oranına yakın olan $a = U_0/kT$ gibi yönsüz bir büyüklüğün fonksiyonudur. Bu oran büyürse (eşik potansiyeli ortalama moleküler kinetik enerjiden daha büyükse), reaksiyon hız sabiti aşağıdaki gibidir [32]:

$$k_{vj} = \sigma_{vj} \sqrt{\frac{8kT}{\pi\mu^*}} a e^{-a} \quad (3.38)$$

Eşik potansiyelinin ortalama moleküler kinetik enerjiye oranla küçük olduğu bir diğer durum olan $a \ll 1$ için, reaksiyon hız sabiti ise:

$$k_{vj} = \sigma_{vj} \sqrt{\frac{8kT}{\pi\mu^*}} \quad (3.39)$$

şeklindedir. Bu durumda birçok molekül potansiyel eşiği geçebilir ve reaksiyon hız sabiti yalnızca zayıf bir şekilde gaz sıcaklığına, $k_{vj} \propto \sqrt{T}$, bağlı olur [32].



4. KUANTUM DALGA PAKET METODU

Reaktif saçılma için dalga paket yaklaşımının artan popülaritesine, ölçeklendirme kanunları ve zamana bağlılığın kolay anlaşılması geniş bir şekilde katkı sağlamıştır [86]. Dalga paket kavramının orijinali, konumunun simgelenmesindeki sınırlama ile koherent bir seviyenin süper pozisyonu olarak 1926 da Schrödinger tarafından ortaya koyuldu [87]. Seviyeler, elektronik, titreşimli ya da dönmeli olabilir ancak moleküler dalga paket metodunda, dalga paketi, Born-Oppenheimer yaklaşımı altında belirli elektronik seviyelerde hareket eden koherent çekirdekleri temsil eder. Bu orijinal çalışmaların formülleri Manz tarafından 1926-1996 yılları arasında moleküler dalga paket teorisinin kapsamlı tarihsel incelenmesi yapıldığından dolayı, moleküler dalga paket teorisi büyük ilerleme göstermiştir [88].

Bir reaktif saçılmada, Hamiltonyenin tamamı, H , farklı düzenleme kanalları, v , içinde bölümlere ayrılmaya ihtiyaç duyar;

$$H = H_0^v + V^v \quad (4.1)$$

Böylece, $H_0^v = T^v(R) + h^v(q)$, asimtotik Hamiltonyendir, V^v , etkileşim potansiyeli ve $T^v(R)$, R , serbest çevrim derecesinde kinetik enerji operatörüdür, $h^v(q)$, q serbest iç derecesinde iç Hamiltonyendir. Sonsuza giden R 'yi iki kısma ayıran sınırlarda etkileşim potansiyelinin yok olmasıyla birlikte sistemin öz fonksiyonu basitçe bir düzlem dalganın üretimidir ve iç Hamiltonyenin $h^v(q)$ öz fonksiyonu $\chi_n(q)$ 'dir [89];

$$\psi_{n,E}^v(R, q) = u_k^v(R) \chi_n^v(q) \quad (4.2)$$

burada $\chi_n^v(q)$, E_n ile ilişkilidir;

$$h^v(q) \chi_n^v(q) = E_n \chi_n^v(q) \quad (4.3)$$

ve çevrimsel dalga direkt olarak aşağıdaki gibi yazılır;

$$u_k^v(R) = \frac{e^{ikR}}{\sqrt{2\pi}} \quad (4.4)$$

burada $k = \sqrt{2\mu(E - E_n)/\hbar^2}$, μ , çevrimsel hareketin indirgenmiş kütlesidir. Tüm Hamiltonyenin H öz değer fonksiyonu $\psi_{n,E}^{v,\pm}$, Moller operatörü $\Omega_{\pm}$, vasıtasıyla asimtotik dalga fonksiyonu ile ilişkilidir [90];

$$\psi_{n,E}^{v,\pm} = \Omega_{\pm} \psi_{n,E}^v \quad (4.5)$$

S matris operatörünün tanımı olan, $S = \Omega_{-}^{\dagger} \Omega_{+}$, ‘a’ reaksiyona girenlerin i başlangıç seviyesinden β üretiminin ‘f’ final seviyesine saçılması için olasılık genliği, S operatörünün matris elementi olarak yazılır [90];

$$S_{\beta f, ai} = \langle \psi_{f,E}^{\beta} | S | \psi_{i,E}^a \rangle = \langle \psi_{f,E}^{\beta} | \Omega_{-}^{\dagger} \Omega_{+} | \psi_{i,E}^a \rangle = \langle \psi_{f,E}^{\beta,-} | \psi_{i,E}^{a,+} \rangle \quad (4.6)$$

S matris elemanının hesaplanmasında genellikle iki metot vardır. İlki $\psi_{f,E}^{\beta,-}$ ve $\psi_{i,E}^{a,+}$ saçılma matrislerinin elde edilmesi için tüm Hamiltonyenin (H) öz değerlerini çözen zamandan bağımsız ‘TI’ (time-independent) metodudur. TI metodunun tek bir işletiminde, S matrisinin tamamı özel bir E enerjisinde elde edilir. TI metodu özellikle soğuk çarpışma problemleri gibi düşük enerjili durumlar için uygundur. Ancak, TI metodu, temel fonksiyonların sayısı N ’e kıyasla N^3 ile ilişkili olarak kötü ölçeklendirilmesinden dolayı pekte iyi bir şöhrete sahip değildir. Alternatif olarak, zamana bağlı metot (TD) ya da dalga paket metodu, N^2 ’nin iyi bir ölçeklendirmesine sahiptir ve Schrödinger’in zamana bağlı birinci seviye denkleminin çözülmesiyle uygulanır.

Tipik bir dalga paket metodunda S matrisinin hesaplanmasını içeren üç aşama vardır. Birincisi, tanımlı iç kuantum seviyesinin bir başlangıç dalga paketi ψ_i , saçılma koordinatında bir Gaussian şekilli dalga paketi normali ile reaksiyona girenlerin bölgesinde başlar ve bu çarpışma enerjisinin menziline tanımlar. Sonrasında dalga paketi, reaksiyon bitene kadar yeterli bir zaman diliminde ilerletilir. Sonuçta, seviye-seviye S -matris elementi reaktif saçılmalar için elde edilir. Zamana bağlı metotta, S -matris elemanı dalga paket korelasyon fonksiyonu ile yeniden ifade edilir [91];

$$S_{\beta f, ai} = \frac{(2\pi\hbar)^{-1}}{a_f^*(E)a_i(E)} \int_0^{\infty} e^{iEt/\hbar} \langle \psi_f | e^{-iHt/\hbar} | \psi_i \rangle dt \quad (4.7)$$

burada ψ_f , final dalga paketi, $a_i(E)$ ve $a_f(E)$ başlangıç ve final dalga paketlerinde içerilen normalize edilmiş öz fonksiyonların enerji genlikleridir. Görüldüğü gibi S matris elementi, ilerleyen başlangıç dalga paketi $C_{fi}(t) = \langle \psi_f | \psi_i(t) \rangle$ ve final dalga paketi arasındaki zaman korelasyon fonksiyonunun $C_{fi}(t)$ Fourier dönüşümü ile elde edilir.

Başlangıç ve final dalga paketleri, çoğunlukla seviye-seviye reaktif saçılmalarda zorlu koordinat problemlerinde ortaya çıkan kendi Jakobi koordinatlarında ifade edilir. Ya ürünün Jakobi koordinatı [92-95] ya da başlangıç dalga paketinin ilerlemesi için reaksiyona girenin Jakobi koordinatı seçilebilir. Ayrıca başka iki metot daha vardır fakat her ikisi de tepken koordinat tabanlı metot (reactant coordinate based), RCB, olarak isimlendirilir:

Bu metotlardan birincisi, koordinat dönüşümünde interpolasyon şemasını sağlamak içindir [96-100] ve ikincisi ortanca koordinata hem üretim hem de tepken dalga paketlerinin iz düşümleri ile gerçekleştirilir [99,101]. Alternatif olarak tepken-üretim bağlanmayı önleyici (reactant-product decoupling), RPD, metodunda [102-104], hem tepken hem de üretim koordinatları kullanılır ayrıca bunlar karışık bir emilim potansiyeli ile ayrılır ve birleşirler [89].

4.1. Seviye-Seviye Metodu: RPD Yaklaşımı

Seviye-seviye bilgisinin; tepken Jakobi koordinatlarında oluşturulan başlangıç dalga fonksiyonu ilk olarak ürün Jakobi koordinatı içinde dönüştürülür. Çıkarımı için dalga yayılımında ürün Jakobi koordinatlarının kullanımı uzun bir zamandan beri yapılmaktaydı. Sonrasında dalga fonksiyon yayılımı ve ürün kararlı seviye bilgisi hesaplandı. Daha sonra, RPD metodu özellikle direkt reaktif saçılma süreçleri için öne sürüldü [104]. Son zamanlarda çok kullanılan RCB metodu, özellikle orta düzey karmaşıklıkları içeren reaktif saçılma süreçleri için Roncero ve diğerleri [98, 99, 101] ve Sun ve diğerleri tarafından ileri sürüldü. RCB metodu, etkisini açıkça gösteren ve kullanım için uygun olan $N + NO \rightarrow N_2 + O$, $O + O_2$, $H + O_2$ vb. gibi reaksiyonlarla uygulanmıştır [89].

Seviye-seviye bilgisinin etkili bir şekilde çıkarımı için Peng ve Zhang [104] tarafından öne sürülen RPD metodu, soğrulma potansiyelinin yardımı ile sürekli olarak tepkenden ürün koordinatlarına zaman içinde tepkimeye giren dönüşümsüz kısmın dönüşümünü sağlar. Tamamen zamana bağlı dalga fonksiyonu, ürün ve tepken bileşenlerine ayrılır ve her bir bileşenin hesabı, ayrı ayrı ayarlama kanallarına karşılık gelen Jakobi koordinatları

kullanılarak yapılabilir. RPD metodu, kuantum reaktif saçılmalarda koordinat seçim problemlerini oldukça geniş bir perspektifte çözüme kavuşturmaktadır.

Nüfuz anında RPD şeması tüm ürün ($\psi_p, p = 1, 2, 3, \dots$) ve tepken bileşeninin (ψ_r) toplamı içinde tamamen zamana bağlı (TD) dalga fonksiyonuna ayrılır:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_r(t)\rangle = H |\psi_r(t)\rangle - i \sum_p V_p |\psi_r(t)\rangle \quad (4.8)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_p(t)\rangle = H |\psi_p(t)\rangle + i V_p |\psi_r(t)\rangle \quad (4.9)$$

Burada $-iV_p$, p ürün ayarı girişinden $\psi_r(t)$ dalga fonksiyonunu engellemede kullanılan negatif imajiner (soğurma) potansiyeldir. $\psi_r(t)$ için çözüm, $\psi_p(t)$ için olanlardan bağımsızdır ayrıca birbirlerinden de bağımsızdır. Sonuç olarak, $\psi_r(t)$, tepken Jakobi koordinatlarında yayılabilir;

$$\psi_r(t + \Delta) = e^{-V_p \Delta / \hbar} e^{-(i/\hbar) H \Delta} \psi_r(t) \quad (4.10)$$

Her bir üretim dalga fonksiyonu, ψ_p , yukarıdaki denklem vasıtası ile sağlanan bir kaynak teriminin, ξ_p , haricinde normal bir dalga paketi yayılımındaki gibi kendi koordinatlarında yayılabilir:

$$\psi_p(t + \Delta) = e^{-(i/\hbar) H \Delta} \psi_p(t) + \xi_p(t) = e^{-(i/\hbar) H \Delta} \psi_p(t) + (1 - e^{-\frac{V_p \Delta}{\hbar}}) \psi_r(t + \Delta) \quad (4.11)$$

Sonuçta, $\psi_p(t)$ 'nin Fourier dönüşümünden final seviye bilgisi (reaksiyon olasılıkları ya da seviye-seviye S matrisi gibi) çıkarabilir.

RPD yaklaşımı Althorpe ve arkadaşları [105, 106] tarafından ileri sürüldüğü gibi bariyerli direkt tepkenler üzerinde çok etkilidir. Bu durumda soğurma potansiyeli, başlangıçta seçilen toplam reaksiyon olasılık hesaplanmasındaki gibi bariyerden sonra sağa uygulanabilir ve bir ürün kanalında soğurulmuş dalga paketi için sürekli ilerlemenin devam etmesinde de çok fazla kullanılabilirliğe sahip değildir. Özellikle, Althorpe ve arkadaşları, reaksiyona giren dalga paketinin soğurulmasının çoklu ilerleme aşamalarından sonra gerçekleşebildiğini fark ettiler [107, 108].

Orijinal RPD yaklaşımında, kaynak terimi $\xi_p(t) = +(1 - e^{-\frac{V_p \Delta}{\hbar}})\psi_r$, korunur ve her bir ilerleme zamanı aşamasında tepkenden Jakobi ürün koordinatlarına dönüştürülür. Çoklu seviye tepken-ürün dekuplaj (bağlantının kesildiği) (MRPD) şemasını kullanarak, her bir M zamanında kaynak terimi dönüştürülür ve korunabilir [109-111];

$$\psi_r(t + \Delta) = e^{-\frac{V_p M \Delta}{\hbar}} e^{-\left(\frac{i}{\hbar}\right) H \Delta} \psi_r(t), \text{ mod}((t + \Delta) - t_0, M \Delta) = 0 \quad (4.12)$$

$$\psi_p(t + \Delta) = e^{-\left(i/\hbar\right) H \Delta} \psi_p(t) + (1 - e^{-\frac{V_p M \Delta}{\hbar}}) \psi_r(t + \Delta) \quad (4.13)$$

Burada t_0 , dalga fonksiyonu dönüşümü için başlangıç noktasıdır. Bir diğer zaman aşamasında, soğrulma potansiyeli, V_p , olmadan $\psi_r(t)$ ve $\psi_p(t)$ için standart yarıлма-operatörü ilerlemesi gerçekleşir. Bu yönde, bir M faktörü ile tepken koordinatlarından ürün koordinatlarına dalga fonksiyonunun dönüşümü için hesaplama zamanı kesilebilir.

Direkt reaktif saçılma süreçlerinin seviye-seviye hesabında RPD metodu, son zamanlarda bilgisayar kaynakları tarafından sınırlandırılmış dört atomlu reaksiyonunun kararlı seviye bilgisinin çıkarımında önemli bir yere sahiptir. Dört atomlu reaksiyon uygulamaları RPD metodu kullanılarak başarılı olmuştur [89].

5. MATERYAL ve METOT

İyonküredeki reaksiyon süreçleri iyonkürenin şekillenmesinde en önemli faktörlerden biridir. İyonküre kimyası üzerine yapılan çalışmaların birçoğunda çarpışma etkisi genellikle ihmal edilir, ancak iyonkürenin oluşumu ve değişimi göz önüne alındığında meydana gelen reaksiyonlar ve bu reaksiyonların oluşumundaki çarpışmaların da dikkatle incelenmesi gerekir. Halen daha günümüzde iyonkürenin karmaşık kimyasal yapısının tam olarak çözüme kavuşturulamamasının temel nedenlerinden biri de bu çarpışma süreçlerinin ihmal edilmeleridir.

İyonküre üzerine yapılan birçok çalışmada yaygın bir şekilde kullanılan IRI (International Reference Ionosphere) programı, kullanılmaya başlandığı ilk yıllardan bugüne kadar sürekli olarak geliştirilmiştir. Dünyanın herhangi bir bölgesinde enlem, boylam ve zamana bağlı olarak temel iyonküresel niceliklere ulaşmak bu program ile mümkündür.

Gezegenlerin atmosferlerinde, yıldızlararası bölgelerde kısacası evrende meydana gelen saçılma karakteristiklerinin incelenmesinde klasik fiziğin yetersiz kaldığı noktalarda devreye kuantum mekaniksel hesaplama teknikleri girmektedir. Bu çalışmada oksijen iyonu ile hidrojen molekülü arasında gerçekleşen reaktif çarpışmaya ait çarpışma enerjileri, toplam çarpışma tesir kesiti ve reaksiyon hız sabiti nicelikleri kuantum mekaniksel hesaplama yöntemi ile elde edilmiştir.

Bu tez çalışmasının konusu olan reaksiyona ait hesaplanan reaksiyon dinamikleri ile iyonküresel sıcaklık değerlerinin eşleştirilmesi sonucunda her bir iyonküresel yükseklik değerine karşılık parçacıkların yoğunluk değerlerine ulaşılmış ve neticede elde edilen iyonküresel verilerle kuantum mekaniksel sonuçlar gaz kinetik teori tabanlı çarpışma modellerine uygulanmıştır.

5.1. Reaktif Saçılma Olasılıklarının Hesaplanması

Zamana bağlı kuantum mekaniksel hesaplamalarda reaktif saçılma için genelde potansiyel enerji yüzeyinin üzerinde gelen atom ile hedef molekül arasında etkileşmenin oluşmadığı asimptotik bölgede bir başlangıç dalga paketi tanımlanmalıdır. Bu dalga paketinin sayısal ya da analitik olarak çıkış kanalı koordinatlarına dönüştürülmesi gerekir.

Sonrasında bir başlangıç momentumunun verilmesiyle dalga paketinin güçlü etkileşme bölgesine doğru hareket etmesi sağlanır. Zamana bağlı Schrödinger denkleminin, zamana bağlı yayılım metotlarından birinin kullanılmasıyla, çıkış kanalı koordinatları cinsinden yinelenen zaman adımları tarafından çözülmesi sağlanır [33].

Çok sayıda teknik, dalga paketinin analizi için geliştirilmiştir. Toplam reaktif saçılma ihtimalleri, geçiş bölgesinden (transition state) hemen sonra analiz çizgisi çıkış kanalının hemen girişine yerleştirilerek dalga paketinin çözülmesi ile hesaplanır [112, 113].

Kuantum seviyeleri arasındaki reaktif saçılma ihtimallerini, saçılma matrisi elemanlarının mutlak karesi verir;

$$P_{v'j',vj}^{J=0}(E) = \left| S_{v'j',vj}^{J=0}(E) \right|^2 \quad (5.1)$$

Kuantum durumu, v, j , için toplam reaksiyon ihtimalleri, tüm ürün dönme ve titreşim durumları üzerinden $P_{v'j',vj}^{J=0}(E)$ ihtimallerinin toplanmasıyla elde edilir [33];

$$P_{vj}^{J=0}(E) = \sum_{v'} \sum_{j'} P_{v'j',vj}^{J=0}(E) \quad (5.2)$$

5.1.1. Reaksiyon Tesir Kesitlerinin Hesaplanması

Toplam açısal momentum kuantum sayısı (J) değeri ve herhangi bir başlangıç kuantum durumu (v, j) için;

$$\sigma_{vj}^J(E) = \frac{1}{(2j+1)} \left[P_{vj}^{JK=0}(E) + 2 \sum_{K=1}^{K_{\max}} P_{vj}^{JK}(E) \right] \quad (5.3)$$

kısmi tesir kesiti elde edilir. Helisite kuantum sayısı (K), $J=0$ durumu için sıfırdır. Helisite kuantum sayısı ihmal edilirse, kısmi tesir kesiti, herhangi bir başlangıç kuantum durumu için (v, j, J) doğrudan $P_{vj}^{J=0}$ reaksiyon ihtimallerinden hesaplanabilir. Bütün J değerleri üzerinden kısmi tesir kesitlerinin toplanmasıyla, toplam tesir kesiti hesaplanır [33];

$$\sigma_{vj}(E) = \frac{\pi}{k_{vj}^2} \sum_{J=0}^{J_{\max}} (2J+1) \sigma_{vj}^J(E) \quad (5.4)$$

5.2. IRI (International Reference Ionosphere) Program

Son elli yılda başlayan, uzaya başarılı uydu fırlatma hareketliliği, uzay şartlarının doğal görünümü ile bizlere bilgi vermekle birlikte başlayan teknolojik değişim halen daha gelişimini sürdürmektedir. Bu noktada uzay araçlarına çevresel faktörlerin etkisinin değerlendirilmesi ve araç tasarımlarının geliştirilmesi için bir takım tahminler gerekiyordu. Bu durum, ilk zamanlarda nötr yoğunlukların Güneş etkili değişimlerinin yanlış hesaplanmaları ile sıkıntılı bir hal aldı. Güneşin maksimuma ulaştığı zamanlarda yoğunlukların oldukça büyük seviyelere ulaştığının anlaşılması, Skylab uzay istasyonunun en umut vaat edici uzay aracının yeniden yörüngeye girmesine yol açtı. 1960'ların ortasına gelindiğinde üst atmosfer (termoküre) ve iyonküre için uluslararası standart bir modele ihtiyaç duyuldu. Bu görevi üstlenen uluslararası camia, devletler düzeyinde işlevi olan tüm uzay uçuşlarının yapıldığı bir uzay birliği, kısa adı COSPAR (Committee on Space Research), olan yeni bir komiteyi kurdu. Bu komitenin aldığı ilk karar, uzaydaki uyduların yaşam ömürlerinin tahmin edilmesi noktasında üst atmosfer için bir model geliştirmektir. COSPAR komitesi uluslararası referans atmosfer (CIRA) çalışma grubunu kurdu ve CIRA-1961 ile başlayan sürekli olarak yenilenen model geliştirildi [114]. COSPAR tarafından da talep edildiği gibi bu model, halen daha gelişmeye devam eden termokürenin teorik olarak çözümlenmesinden olası olduğu kadar kaçınılarak tamamen yeryüzü ve uzay gözlemlerine bağlı geliştirilen deneysel bir modeldi. CIRA projesinin büyük bir başarı kazanmasıyla COSPAR, 1968 yılında iyonküre için IRI'yı (International Reference Ionosphere) kurarak benzer bir çalışmayı başlatmış oldu. Bundan sonra URSI (International Union of Radio Science) IRI projesinin ortak destekleyicisi oldu. COSPAR ve URSI'li IRI projesi genel uluslararası birlikten ayrıldı. IRI'nın gelişimi, yıllık IRI çalıştaylarından ve IRI çalışma gruplarının oluşturduğu bu iki grup arasında meydana gelen sinerjiden büyük bir fayda sağladı.

IRI çalışma grubu, gerekli iyonküresel verileri kullanan uzay teknikleri ve farklı yüzeylere sahip ortamların yanında küresel bir temsiliyete sahip şu an 58 uzmandan oluşan yıllardır büyüyen büyük bir ekibe sahiptir. Bu kapsamlı teknik IRI projesi için büyük bir kazanımdır. Modele ilavelerin tartışıldığı ve karara bağlandığı yıllık IRI toplantıları, uzay

araştırmalarındaki ilerlemelerin konu edildiği bu çalıştaylardan seçilen makalelerin yayınlanması, en baştan bu yana uygun olan IRI Fortran kodlarının erişime açık olması ve nihayetinde direkt çevrim içi hesaplamaları için web yüzü gibi ihtiva edilen merkezler IRI'nın başarı kazanmasındaki diğer araçlardır. Elbette her beş yılda bir modelin yenilenen yüzü de sürekli ilerleme sürecinde önemli olan bir diğer ayrıntıdır.

Deneyssel bir model olan IRI iyonküresel plazmayı şekillendiren süreçlerin teorik olarak çözümlemelerine bağlı olmama gibi bir avantaja sahiptir [115]. Deneyssel modellerin dezavantajı veri tabanlarına olan bağılılıklarıdır. Veri tabanları tarafından iyi bir şekilde kapsanmayan bölge ve zaman periyotları, bu alanlardaki modelin güvenilirliğinin azalmasıyla sonuçlanacaktır. 2008/2009'daki en son güneş minimumu boyunca oluşan şartların daha evvelki minimumdan oldukça farklı olması bu duruma bir örnektir [116].

IRI modelinin en son sürümü, IRI 2012, pek çok önemli ilerlemeleri ve birazdan değinilecek yeni ilaveleri içermektedir. Bu değişimler sadece elektron yoğunluğunun yeniden tanımlanmasını değil aynı zamanda elektron sıcaklığı ve iyon bileşimlerini de içermektedir. Bu ilerlemeler, son genel model olan IRI 2007'den bu yana modelleme çabalarının sonuçlarını oluşturmaktadır.

İyonkürenin elektron yoğunluk grafiği, F2 tepesi yüksekliği $hmF2$ de maksimum değere ulaşır. Bu nokta, elektron yoğunluğunu, alt taraf ve üst taraf olmak üzere iki kısma ayırır. F1 ve F2 yükseklikleri arasındaki bölge, HF radyo dalga yayılımı üzerindeki etkisi ve iyonküre toplam elektron içeriğine (TEC) ihmal edilemeyecek derecedeki katkısından dolayı özel ilgi alanıdır. IRI 2012, bu bölge için yeni bir model içermektedir. IRI 2012 ile model, ilk zamanlar için Auroral E bölgesinde fırtına etkisinin tanımını ve auroranın oval sınırlarının yeniden belirlenmesini içermektedir.

IRI, elektron sıcaklığı, T_e , için iki seçenek sunmaktadır. Elektron sıcaklığının Güneş aktivitesi kaynaklı değişimlerinin modellenmesindeki zorlukların bazı sebepleri vardır:

(I) iyonküresel parametrelerin pek çoğu Güneş aktivitesi ile artarken, elektron sıcaklığı T_e , mevsimlere, günün saatlerine, enlem ya da yüksekliğe bağlı olarak değişebilir. Bunun nedeni, T_e 'nin, manyetik alan çizgileri boyunca ısı iletimi, iyon ve nötrler ile çarpışmalar vasıtası ile soğuma ve Güneşin EUV parlamasının sebep olduğu fotoelektronların sağladığı ısıl denge tarafından tanımlanmasından dolayıdır. Bu üç faktör, iyon ve elektron yoğunlukları ile nötr yoğunluk, nötr sıcaklık ve EUV akısındaki artıştan dolayı güneş aktivitesi ile artış gösterir. Üç faktör de birbirine eşit olduğundan dolayı, hepsinde de T_e , artabilir, azabilir ya da değişmeyebilir.

(II) Özellikle düşük elektron yoğunluğu sisteminde çeşitli veri setleri arasında tutarsızlıklar ortaya çıkar çünkü birçok T_e ölçüm teknikleri yeterli sayıdaki elektron sayısının mevcudiyetine kritik bir şekilde bağlıdır. Birçok araştırmacı, Millstone Hill yapışık saçılma radarının (ISR) birçok yılını kapsayan deneysel modelin, alan çizgili hemisfer arası plazma fiziksel (FLIP) modelin yardımı ve geniş veri tabanına sahip uydularla elektron sıcaklığının karmaşık Güneş aktiviteli davranışını çalışmıştır. Bu çalışmalar, IRI modelinin son sürümünü içeren ve şu an Güneş aktivitesi değişimlerini tanımlayan T_e için yeni bir modeli ortaya çıkardı [117-121].

İyon bileşimi, IRI gelişim hareketlerinin çok küçük bir noktasını oluşturmaktadır. Parametrelerinin pek çoğunda olduğu gibi, IRI kullanıcıları iyon bileşimi için iki seçenek arasında tercih yapabilir. Eski sürüm, iyonkürenin üst yüksekliklerindeki roketleri içeren Rusya roket ölçümlerinin derlemesinin kullanılmasıyla üst ve alt iyonkürede ki bir takım çalışmalara dayanır [122,123]. Modeller, Güneş aktivitesi, mevsimler, enlem ve güneşin zenit açısının bir fonksiyonu olarak küme iyonları ve O_2^+ , NO^+ , He^+ , N^+ , H^+ , O^+ 'nın yüzdelik bileşimlerini verirler. Sınırlandırılmış veri tabanları düşünüldüğünde, modellerin oldukça iyi bir şekilde çalıştığı ve iyonkürede ki iyon dağılımının ilk tahminlerini IRI kullanıcılarına sundukları görülmektedir. 2003 yılında geliştirilen yeni bir üst sürüm IRI 2007'den bu yana tavsiye edilen bir seçenek olarak bu programın içinde bulunmaktadır [124]. Bu yeni model, uydu iyon kütle spektrometre ölçümleri (interkozmoz-24, AE-C, AE-E) ile elde edilen düzgün bir küresel kapsama alanının avantajlarına sahiptir. Eski modele kıyasla, yeni model yıllar süren değişimlerin çok detaylı tanımlamalarını sağlamakla birlikte alt iyonküre için çok uygun olan güneşin zenit açısının yerine günlük değişimlerin tanımlanmasında çok daha uygun olan Manyetik Yerel Zamanı (MLT) kullanır [122]. IRI 2012 ile, iyonkürenin alt bölgeleri için yeni bir iyon bileşim modeli tanıtıldı. Richards ve diğerlerinin (2010) modeli, alt iyonkürede ki fotokimyanın kanıtlanmış ölçümlerini ve model hesaplamaları arasındaki kıyaslamaları iyi bir şekilde kurarak elde etmektedir. Richards ve diğerleri (2010), IRI elektron yoğunluğu ile FLIP modeli fotokimyası ile elde edilen iyon yoğunluklarını normalleştirerek, alt iyonkürede O^+ ve moleküler iyon bileşimlerinin yeni bir tanımını elde ettiler [125]. AE-C iyon yoğunluk ölçümleri ile onların kıyaslamaları iyi bir kabul göstermekle birlikte ayrıca Danilov & Smirnova'nın (1995) eski modeli üzerine yeni bir model kazandırdıklarının da altı çizilmelidir [126,127].

5.3. Gaz Kinetik Teori Modelleri

1858 yılında Rudolf Clausius tarafından bulunan ortalama serbest yol kavramı, gaz kinetik teorisinin gelişimine yeni bir yol kazandırdı [10]. Ortalama serbest yol, bir parçacığın sıralı iki çarpışması arasında kat ettiği mesafedir. Bir bakıma bu çarpışmalar boyunca kat ettiği düşünülen mesafe olasılığıdır. Bu tez çalışmasında, O^+ iyonu ile H_2 parçacıklarının reaksiyonu sırasında oksijen iyonunun ortalama serbest yolu hesaplandı. Çünkü burada hareketli olan parçacık oksijen iyonudur, hidrojen molekülü ise olduğu yerde dönme ve titreşim hareketleri yapmaktadır. O^+ iyonunun iki sıralı çarpışma arasında kat ettiği mesafe olan ortalama serbest yol denklem (3.24)'ten hesaplandı.

Hareketli O^+ iyonunun hareketsiz olan H_2 molekülüne 1 saniyedeki çarpışma sayısı olarak ifade ettiğimiz çarpışma frekansı, ν , mevcut kesit alanında olduğu varsayılan H_2 molekülünün sayısına eşittir. Bu tez çalışmasında 2009 yılına ait dört farklı ekinoks ve gün dönümü tarihleri için iyon-nötr çarpışma frekansı verileri, daha önce ifade ettiğimiz denklem (3.25) kullanılarak bulundu.

O^+ ve H_2 parçacıkları arasında meydana gelen reaktif saçılma dışarıdan herhangi bir ısıya ihtiyaç duymadan gerçekleşen bir reaksiyondur. Kuantum mekaniksel olarak durum böyle olsa da, klasik bakışta bu reaksiyonun gerçekleşmesi için aşılması gereken bir potansiyel enerji eşiği bulunmaktadır. Bu enerji eşiği potansiyel enerji bariyeri olarak adlandırılmaktadır. Bu enerji aralıkları daha önce ifade edilen denklem (3.33)'ten hesaplandı.

Bariyer enerji sınırını geçerek bir reaksiyonun oluşumunu sağlayan parçacıklar arasında birim zamanda meydana gelen toplam çarpışma sayısı denklem (3.36) ve bir kereye mahsus olmak üzere (3.37)'den bulundu. Üç farklı hesaplama tekniğinin kullanıldığı bu çalışmada gaz kinetik teori modelleri kullanılarak esas sonuçlara ulaşılmış ve bu sonuçlara bulgular bölümünde geniş bir şekilde yer verilmiştir.

6. BULGULAR

Bu tez çalışmasının temelini, iyonkürede meydana gelen ' $O^+ + H_2 \rightarrow OH^+ + H$ ' reaktif reaksiyona ait çarpışma enerjisi, tesir kesiti ve hız sabiti gibi kuantum dalga paketi metoduyla hesaplanan reaksiyon dinamiklerinin iyonküresel sıcaklıkla eşleştirilerek çarpışmanın meydana geldiği her bir yükseklik aralığındaki, ortalama serbest yol, çarpışma frekansı ve toplam çarpışma sayısı gibi gaz kinetik teori denklemlerinden elde edilen sonuçların iyonküredeki değişim ve etkisinin araştırılması oluşturmaktadır.

Hesaplamalar 21 Mart, 21 Haziran, 23 Eylül ve 21 Aralık 2009 yılı yerel saat 12.00 ve 39⁰ kuzey enlemi ve 40⁰ doğu boylam değerleri için yapıldı. Bu şartlar için yoğunluk değerleri ise IRI-2012 ve MSIS-E 90 programlarından elde edilmiştir.

6.1. Reaksiyon Dinamiklerinin İyonküredeki Değişimi

Mevcut çalışmanın ilk aşamasında, çarpışma enerjisi, tesir kesiti ve hız sabiti gibi reaksiyon dinamikleri, kuantum dalga paket metodu ile hesaplandı. Ardından elektron volt biriminde hesaplanan çarpışma enerjisi değerleri Kelvin cinsinden sıcaklık verilerine dönüştürüldü (1 Kelvin= $8,621738 \times 10^{-5}$ eV). Belirlenen sıcaklık değerleri ile reaksiyonun meydana geldiği iyonküredeki yükseklik aralıklarını tespit edildi.

Tablo 6.1'de, ' $O^+ + H_2 \rightarrow OH^+ + H$ ' reaksiyona ait kuantum dalga paket metoduyla hesaplanan ve 0,0002 ile 0,1 eV enerji aralığında değişen çarpışma enerjilerinin Kelvin cinsinden sıcaklık eşdeğerleri ile toplam tesir kesiti değerleri verildi.

Tablo 6.2'de ise 50 ile 1600 K sıcaklık değerleri arasında değişen reaksiyon hız sabiti değerleri verilmiştir.

Tablo 6.1. Reaksiyon için çarpışma enerjisi, tesir kesiti ve sıcaklık değerleri

Çarpışma Enerjisi (eV)	Tesir Kesiti ($\text{\AA}^2$)	Sıcaklık (K)
0,00024	581,135141301624	2,7
0,00124	535,44357524493	14,3
0,00224	481,40462049813	25,9
0,00324	272,526760797163	37,5
0,00424	239,593434759584	49,2
0,00524	196,240958186317	60,8
0,00624	173,825064066657	72,4
0,00724	197,470660598654	84
0,00824	192,402542647475	95,6
0,00924	178,2806957359	107,2
0,01024	175,277044651719	118,3
0,01124	181,231642198236	130,4
0,01224	176,383231633844	142
0,01324	174,601973391085	153,6
0,01424	169,341577748925	165,2
0,01524	163,986357051033	176,8
0,01624	158,650683801903	188,4
0,01724	156,06777025879	200
0,01824	146,121617160173	211,6
0,01924	142,166127555105	223,2
0,02024	146,407953988823	234,8
0,02124	145,768717275461	246,4
0,02224	139,051212728467	258
0,02324	136,809711775623	269,6
0,02424	134,654744095379	281,2
0,02524	133,141186117271	292,8
0,02624	128,341212144734	304,5
0,02724	124,350601171862	316,1
0,02824	121,782013570293	327,7
0,02924	121,233532766564	339,3
0,03024	119,632604852579	350,9
0,03124	114,690005957018	362,5
0,03224	110,553522982259	374,1
0,03324	107,024094657176	385,7
0,03424	105,592578181098	397,3
0,03524	103,268825294972	408,9
0,03624	98,9550506930189	420,5
0,03724	97,5142034651533	432,1
0,03824	97,3271652936618	443,7
0,03924	96,289711243239	455,3
0,04024	95,2461021206149	466,9
0,04124	93,6686250519077	478,5
0,04224	90,3592406841876	490,1
0,04324	88,9585424050216	501,7
0,04424	87,1650794136103	513,3
0,04524	84,4452770576128	524,9
0,04624	81,8624690325586	536,5
0,04724	81,4302770521447	548,1

‘Tablo 6.1’in devamı’

Çarpışma Enerjisi (eV)	Tesir Kesiti ($\text{\AA}^2$)	Sıcaklık (K)
0,04824	80,6792902858254	559,8
0,04924	77,9589506742875	571,4
0,05024	75,6177436539847	583
0,05124	74,0346270002307	594,6
0,05224	73,0272887793843	606,2
0,05324	71,7109752005188	617,8
0,05424	70,9639645663849	629,4
0,05524	70,3156025368269	641
0,05624	68,8017060534988	652,6
0,05724	67,4456873217586	664,2
0,05824	66,6719406949315	675,8
0,05924	65,3449147170807	687,4
0,06024	64,4332328817273	699
0,06124	63,7880503960237	710,6
0,06224	63,5348004020457	722,2
0,06324	62,0893481238131	733,8
0,06424	61,7109342988258	745,4
0,06524	61,4251595515961	757
0,06624	60,5220336528312	768,6
0,06724	59,664859210385	780,2
0,06824	58,9760406960466	791,8
0,06924	58,7924168866365	803,4
0,07024	58,6464036530393	815,1
0,07124	58,3197107920456	826,7
0,07224	57,7173923774577	838,3
0,07324	56,8954426544764	849,9
0,07424	56,4627133889072	861,5
0,07524	56,123079731795	873,1
0,07624	55,594672047373	884,7
0,07724	54,9231432668533	896,3
0,07824	54,5965357805631	907,9
0,07924	54,2812700951948	919,5
0,08024	53,9699194350293	931,1
0,08124	53,7454708467189	942,7
0,08224	53,7624443084045	954,3
0,08324	53,6887830686909	965,9
0,08424	53,3288906104973	977,5
0,08524	53,0500214549567	989,1
0,08624	52,5453540961321	1000,7
0,08724	52,2090938411409	1012,3
0,08824	51,8616474011675	1023,9
0,08924	51,5450688801321	1035,5
0,09024	51,2038274942491	1047,1
0,09124	50,7107454103642	1058,7
0,09224	50,3831112223171	1070,4
0,09324	49,9333126940994	1082
0,09424	49,5531584890466	1093,6
0,09524	49,0911384677001	1105,2

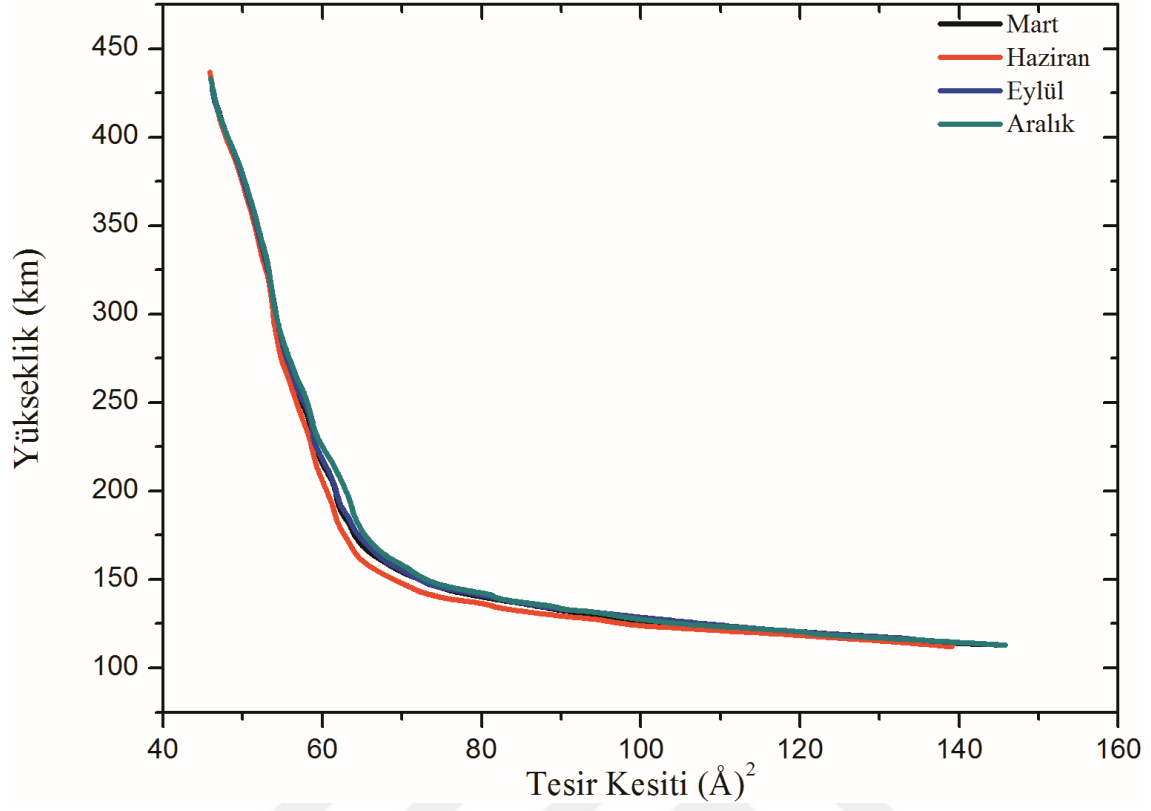
‘Tablo 6.1’in devamı’

Çarpışma Enerjisi (eV)	Tesir Kesiti ($\text{\AA}^2$)	Sıcaklık (K)
0,09624	48,5496384813943	1116,8
0,09724	47,8911010274835	1128,4
0,09824	47,2333784846989	1140
0,09924	46,9319779809725	1151,6
0,10024	46,5579082952147	1163,2
0,10124	46,3094281295302	1174,8
0,10224	46,120268040095	1186,4
0,10324	45,9508100075323	1198
0,10424	45,8662712206049	1209,6
0,10524	45,7663812796322	1221,2
0,10624	45,612016788541	1232,8
0,10724	45,2929923953051	1244,4
0,10824	44,8163123239306	1256
0,10924	44,5220080423222	1267,6
0,11024	44,4891015843094	1279,2
0,11124	44,37574991145	1290,8
0,11224	44,1545385069619	1302,4
0,11324	44,2508391169044	1314
0,11424	44,4209476463848	1325,7
0,11524	44,3146616346323	1337,3
0,11624	44,1780138183926	1348,9
0,11724	43,9254764785448	1360,5
0,11824	43,3848871211666	1372,1
0,11924	42,9951476199105	1383,7
0,12024	42,9359042363327	1395,3
0,12124	42,8951471766001	1406,9
0,12224	42,6603966830002	1418,5
0,12324	42,5454995995054	1430,1
0,12424	42,4590716299512	1441,7
0,12524	41,9636959833707	1453,3
0,12624	41,5531752923235	1464,9
0,12724	41,0511919761307	1476,5
0,12824	40,54180841472	1488,1
0,12924	40,705215564673	1499,7
0,13024	41,0470189752801	1511,3
0,13124	41,0165551859688	1522,9
0,13224	40,7484678431182	1534,5
0,13324	40,4259276437817	1546,1
0,13424	39,9599404569289	1557,7
0,13524	39,5270085734466	1569,3
0,13624	38,9798232840954	1581
0,13724	38,7061802663242	1592,6
0,13824	38,7228592375146	1604,2
0,13924	38,8445549139352	1615,8
0,14024	38,6567472132095	1627,4
0,14124	38,6028227290981	1639
0,14224	38,376608940015	1650,6
0,14324	37,9246344721254	1662,2

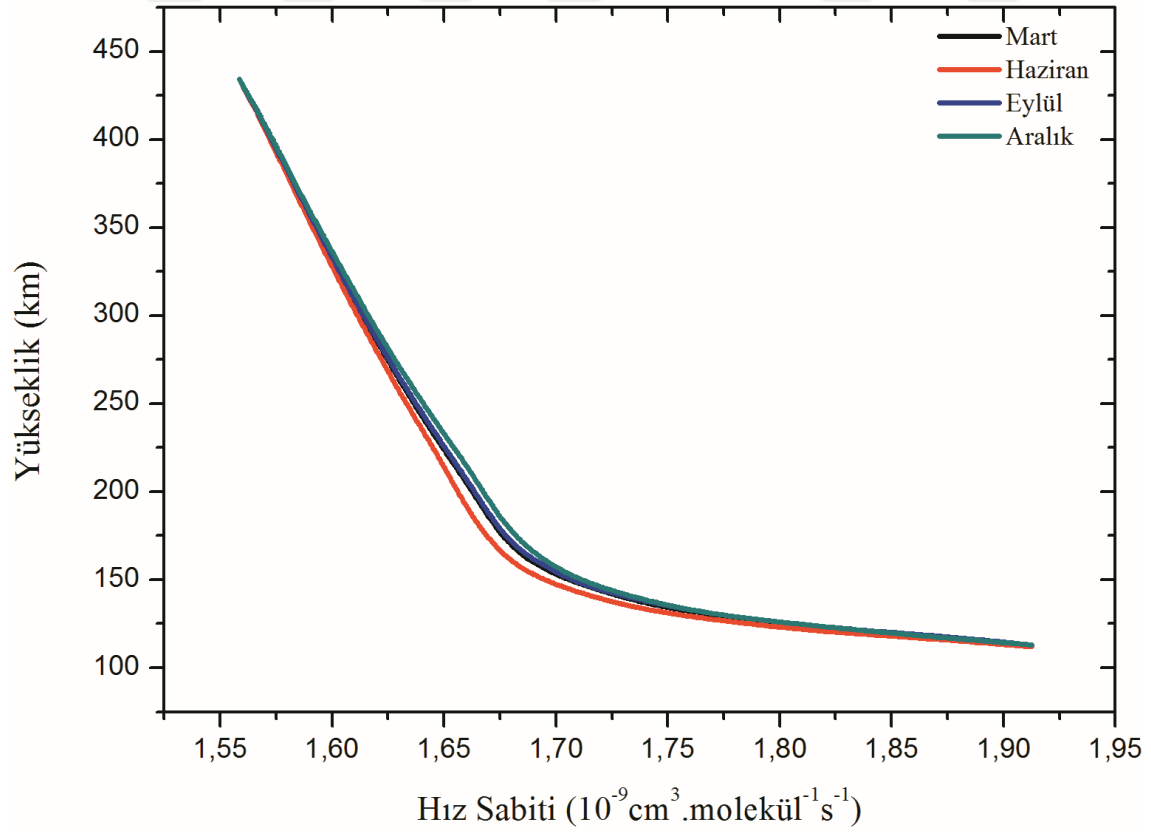
Tablo 6.2. Reaksiyon hız sabiti değerleri

Sıcaklık (K)	Reaksiyon Hız Sabiti (cm ³ .molekül ⁻¹ .s ⁻¹)
50	2,043756706E-9
100	2,030381702E-9
150	1,995763815E-9
200	1,954105581E-9
250	1,912511067E-9
300	1,873756069E-9
350	1,838683904E-9
400	1,807329113E-9
450	1,779391825E-9
500	1,754464762E-9
550	1,73213895E-9
600	1,71202776E-9
650	1,693788697E-9
700	1,677149053E-9
750	1,66185569E-9
800	1,647690463E-9
850	1,634488627E-9
900	1,622095866E-9
950	1,610379528E-9
1000	1,599224761E-9
1050	1,588538701E-9
1100	1,57824129E-9
1150	1,568264511E-9
1200	1,558537164E-9
1250	1,549009032E-9
1300	1,539640327E-9
1350	1,530386308E-9
1400	1,521215846E-9
1450	1,512107759E-9
1500	1,503029829E-9
1550	1,493966633E-9
1600	1,484911124E-9

‘ $O^+ + H_2 \rightarrow OH^+ + H$ ’ reaksiyonuna ait, kuantum dalga paketi metodu yöntemi ile hesaplanan toplam çarpışma tesir kesiti ve reaksiyon hız sabiti verilerinin iyonküredeki sıcaklıkla eşleştirilerek yüksekliğe göre değişimleri Şekil 6.1 ve Şekil 6.2’de verilmiştir.



Şekil 6.1. Reaksiyon tesir kesitinin iyonküresel yüksekliğe göre değişimi

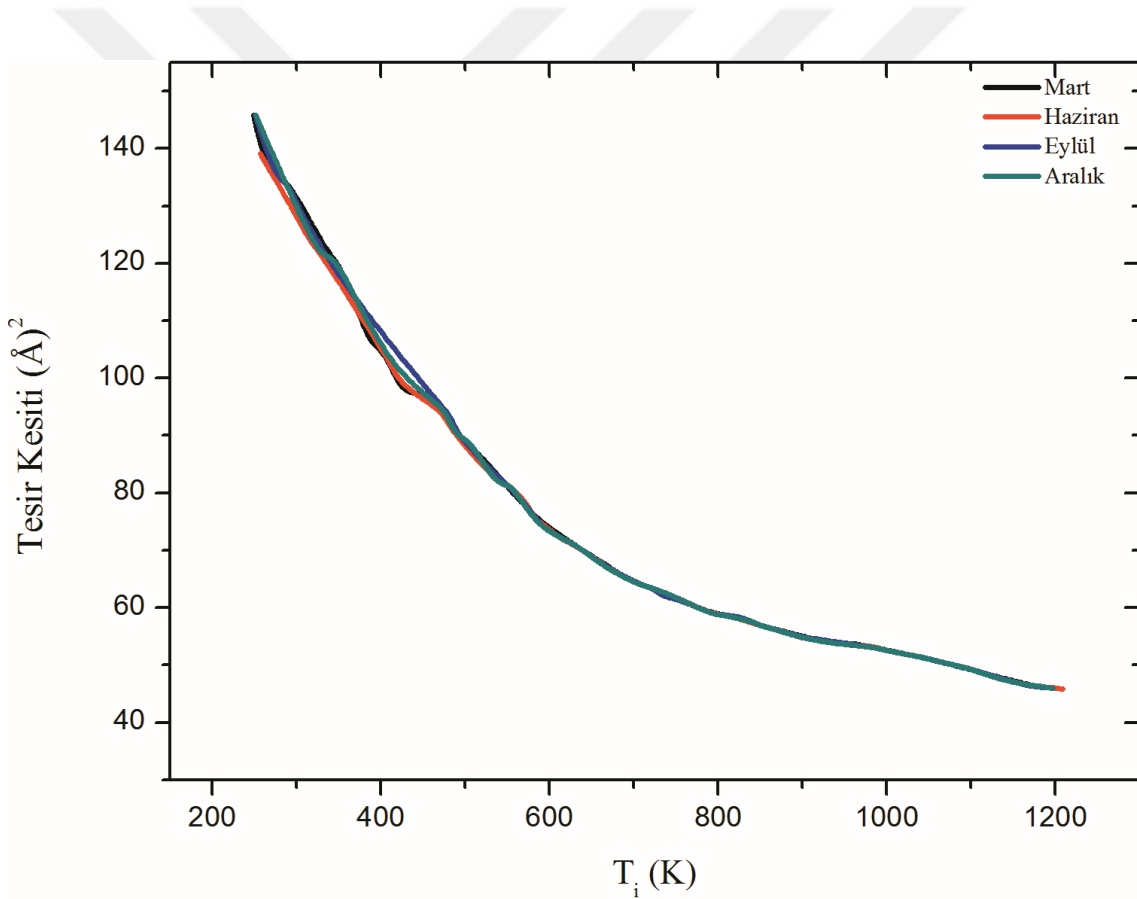


Şekil 6.2. Reaksiyon hız sabitinin iyonküresel yüksekliğe göre değişimi

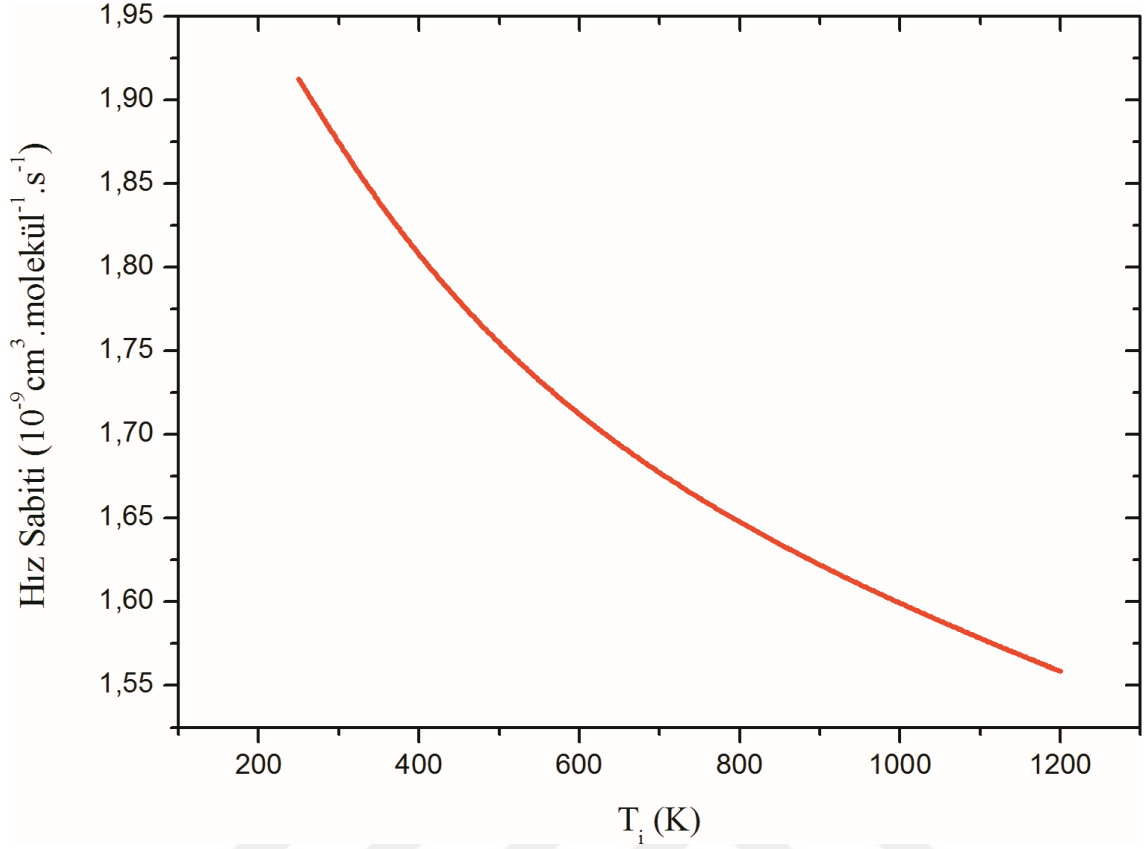
Hem Şekil 6.2’den hem de Şekil 6.3’den toplam çarpışma tesir kesiti ve reaksiyon hız sabitinin yükseklik ile ters orantılı bir şekilde değiştiği görülmektedir. Her iki reaksiyon dinamiği alt yüksekliklerde maksimum değerlerine ulaşmıştır. Yaklaşık olarak 175 km civarına kadar yükseklikle ters orantılı olarak sert bir şekilde düşüş gösteren bu dinamikler, 175 km’den sonra yine yükseklikle ters orantılı bir şekilde sert düşüş yerini yumuşak bir azalmaya bırakmıştır.

Ayrıca dört farklı gün için, yükseklikle olan değişimde büyük bir farklılığın olmadığı dikkat edilmesi gereken diğer bir husustur.

Toplam çarpışma tesir kesiti ve reaksiyon hız sabiti verilerinin iyonküredeki iyon sıcaklığıyla değişimleri sırasıyla Şekil 6.3 ve Şekil 6.4’de verildi.



Şekil 6.3. Reaksiyon tesir kesitinin iyon sıcaklığı ile değişimi



Şekil 6.4. Reaksiyon hız sabitinin iyon sıcaklığı ile değişimi

İyon sıcaklığı artarken hem toplam çarpışma tesir kesiti hem de reaksiyon hız sabitinin azaldığı her iki grafikten görülmektedir. Yani sıcaklıkla tesir kesiti ve hız sabiti arasında ters orantılı bir etkileşmenin olduğu Şekil 6.3 ve Şekil 6.4’den anlaşılmaktadır.

Ters orantılı değişim dört gün içinde birebir benzerlik göstermiştir.

6.2. Reaksiyon Dinamiklerinin İyonküresel Yoğunluklar İle İlişkisi

Çalışmanın ikinci aşmasında, ‘ $O^+ + H_2 \rightarrow OH^+ + H$ ’ reaksiyonu için kuantum dalga paket metoduyla hesaplanan çarpışma enerjilerinin Kelvin biriminden sıcaklık değerlerine karşılık gelen iyon sıcaklıkları için, iyonküresel yükseklikler belirlenerek her bir yükseklik aralığındaki O^+ ve H_2 parçacıklarına ait yoğunluk değerlerine ulaşıldı.

Tablo 6.3, Tablo 6.4, Tablo 6.5 ve Tablo 6.6 da sırasıyla 21 Mart, 21 Haziran, 23 Eylül ve 21 Aralık 2009 tarihli yerel saat 12’ye ait ekinoks ve gün dönümleri için iyonküresel sıcaklık ve yükseklik verilerine bağlı reaktif çarpışmaya giren O^+ iyonu ile H_2 molekülü yoğunluk değerleri verildi.

Tablo 6.3. 21 Mart 2009 tarihine ait iyonküresel değerler

Yükseklik (km)	Ti (K)	O ⁺ Yoğunluğu (cm ⁻³)	H ₂ Yoğunluğu (cm ⁻³)
113	249,2	118,89	3,51e+06
114	259,3	117,99	3,41e+06
115	270,4	117,2	2,64e+06
116	282,3	116,35	2,40e+06
117	295,1	115,75	1,87e+06
120	338	230,64	1,50e+06
121	353,2	347,1	1,209e+06
123	383,1	469,08	9,62e+05
124	395,6	592,25	8,75e+05
125	408,4	719,34	8,30e+05
126	420,7	851,83	6,83e+05
127	432,7	989,04	6,33e+05
128	444,2	1255,9	5,14e+05
129	455,3	1403,27	4,52e+05
130	466,1	1684,54	4,01e+05
131	476,5	1974,15	3,2e+05
132	486,6	2272,39	2,91e+05
135	514,7	3359,04	1,61e+05
139	548	5649,08	1,27e+05
142	570,1	7770,5	8,15e+04
144	583,7	9441,18	7,13e+04
152	629,4	19526,26	1,92e+04
157	652,3	28854,59	1,35e+04
163	675	35684,25	9,78e+03
167	687,8	49843,2	7,35e+03
176	710,9	82060,32	4,41e+03
181	721	118411,2	3,51e+03
189	734	180309,6	2,73e+03
198	744,9	248051,16	2,06e+03
205	756,4	298351,8	1,74e+03
217	779,2	364390,44	1,36e+03
230	803,8	413554,38	1,10e+03
242	826,6	436191,56	9,49e+02
254	849,3	440814,58	8,80e+02
266	872,1	433367,89	8,48e+02
291	919,5	394204,26	7,72e+02
297	930,9	382190,4	7,58e+02
303	942,2	368907,94	7,44e+02
309	953,6	355709,86	7,30e+02
315	965	342344,84	7,03e+02
346	1023,8	274345,17	6,32e+02
352	1035,2	262313,26	6,2e+02
358	1046,5	250426,68	6,17e+02
370	1069,3	228256,51	6,06e+02
423	1174,2	151174,5	4,93e+02
428	1185,8	145495,35	4,84e+02

Tablo 6.4. 21 Haziran 2009 tarihine ait iyonküresel değerler

Yükseklik (km)	Ti (K)	O ⁺ Yoğunluğu (cm ⁻³)	H ₂ Yoğunluğu (cm ⁻³)
112	256,7	132,21	4,31e+06
113	266	131,43	3,51e+06
116	300,1	128,62	2,05e+06
117	313,7	255,76	1,87e+06
118	328,2	254,74	1,63e+06
120	359,8	382,05	1,50e+06
121	376,4	511,52	1,209e+06
123	409,1	649,5	9,62e+05
124	422,5	787,32	8,75e+05
127	462,2	1369,4	6,33e+05
128	474,5	1532,96	5,14e+05
129	486,2	1843,14	4,52e+05
134	538,7	3693,36	1,74e+05
135	548	4220,37	1,61e+05
136	556,9	4761,9	1,52e+05
138	573,8	5888,52	1,36e+05
139	581,8	6473,61	1,27e+05
141	596,8	8029,01	8,63e+04
142	603,9	8835,75	8,15e+04
144	617,2	10685,4	5,94e+04
146	629,6	12622,17	4,73e+04
150	651,6	17721,04	2,7e+04
161	697	31438,18	1,08e+04
170	722,2	63873,28	6,28e+03
182	744,7	110554,68	3,42e+03
192	756,9	175248,7	2,44e+03
215	791,1	305861,64	1,38e+03
228	814,8	355096,56	1,12e+03
247	849,5	393526,85	8,90e+02
266	884,1	394255,13	8,09e+02
272	895,1	389384,87	7,94e+02
279	907,8	381771	7,65e+02
298	942,5	353321,1	7,36e+02
304	953,4	343124,37	7,22e+02
317	977,1	318334,5	7,08e+02
323	988,1	306348	6,82e+02
330	1000,8	292466,46	6,69e+02
336	1011,8	280943,63	6,57e+02
349	1035,5	256431,6	6,20e+02
355	1046,4	245422,4	6,09e+02
374	1081,1	213203,25	5,75e+02
381	1093,9	202449	5,64e+02
393	1116	184811,62	5,33e+02
399	1127,2	176764,91	5,23e+02
417	1162,3	154297,9	4,94e+02
437	1209	133010,85	4,66e+02

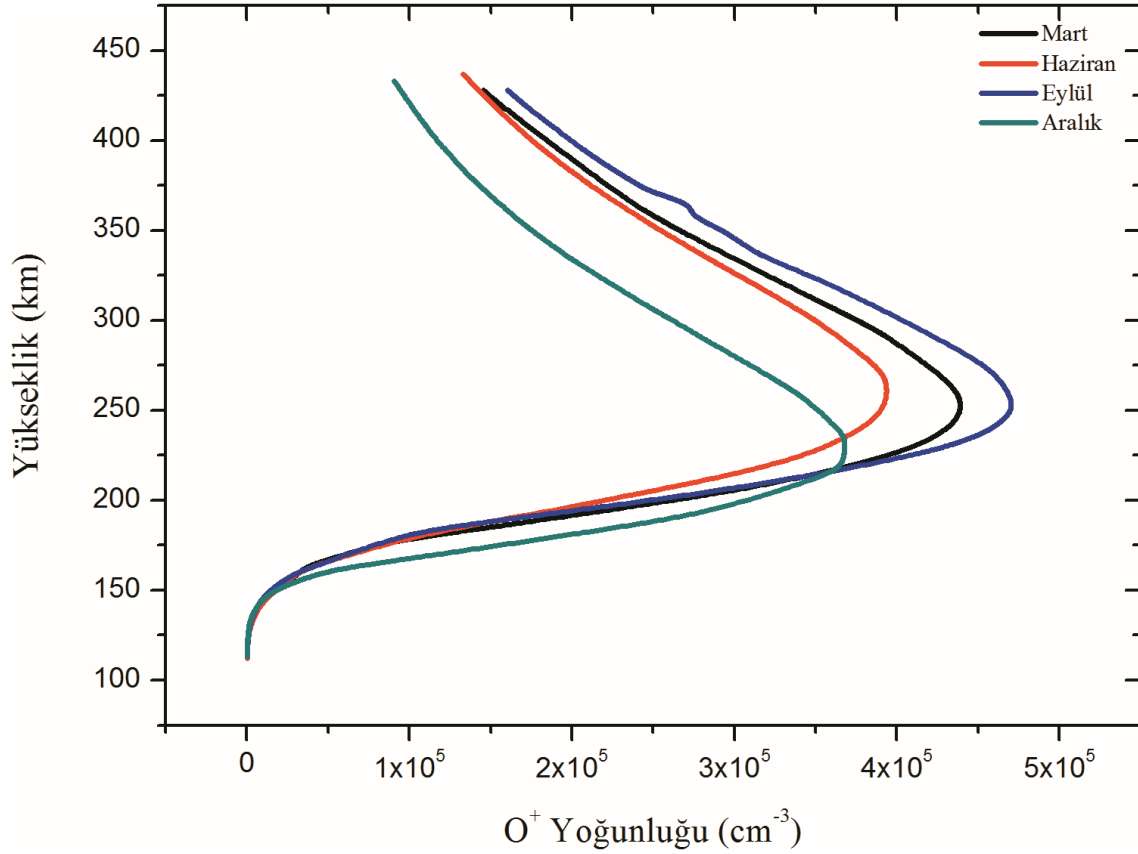
Tablo 6.5. 23 Eylül 2009 tarihine ait iyonküresel değerler

Yükseklik (km)	Ti (K)	O ⁺ Yoğunluğu (cm ⁻³)	H ₂ Yoğunluğu (cm ⁻³)
113	250,9	119,57	3,51e+06
115	270,3	117,78	2,64e+06
116	281,2	117,01	2,08e+06
117	293,1	116,4	1,87e+06
118	305,7	232,02	1,63e+06
122	362,1	468,04	1,09e+06
131	470,8	1927,05	3,2e+05
132	481	2207,11	2,91e+05
133	490,8	2492,99	2,26e+05
134	500,2	2917,2	1,74e+05
137	526,7	4107,6	1,6e+05
140	550,5	5799,45	1,05e+05
143	572	7749,66	6,59e+04
146	591,4	10285	4,73e+04
148	603,3	12382,4	3,66e+04
151	619,6	15874,65	2,6e+04
153	629,5	18565,9	1,99e+04
158	651,7	27149,8	1,21e+04
161	663,2	33971,04	9,67e+03
178	710,3	86463,3	3,97e+03
184	721,4	114060,36	3,22e+03
192	733,1	181082,24	2,42e+03
202	745,8	266207,86	1,86e+03
214	768,8	350058,48	1,45e+03
226	791,8	414639,96	1,18e+03
232	803,3	438023,4	1,09e+03
238	814,8	454982,94	9,93e+02
244	826,3	465014,32	9,20e+02
250	837,8	470595,15	8,86e+02
256	849,3	470743,94	8,37e+02
268	872,3	463478,18	8,24e+02
280	895,4	447080,94	7,79e+02
323	977,8	354236,86	6,92e+02
335	1000,8	316117,44	6,54e+02
347	1023,9	298674,6	6,30e+02
353	1035,4	285447,03	6,18e+02
359	1046,9	272945,2	6,06e+02
365	1058,4	272945,2	5,95e+02
371	1069,9	249008,58	5,85e+02
377	1081,4	237635,71	5,74e+02
383	1093	226996,18	5,64e+02
389	1104,6	216593,92	5,41e+02
395	1116,2	206670,75	5,31e+02
418	1162,9	173242,65	5,02e+02
423	1174	166707,72	4,92e+02
428	1185,7	160438,33	4,83e+02

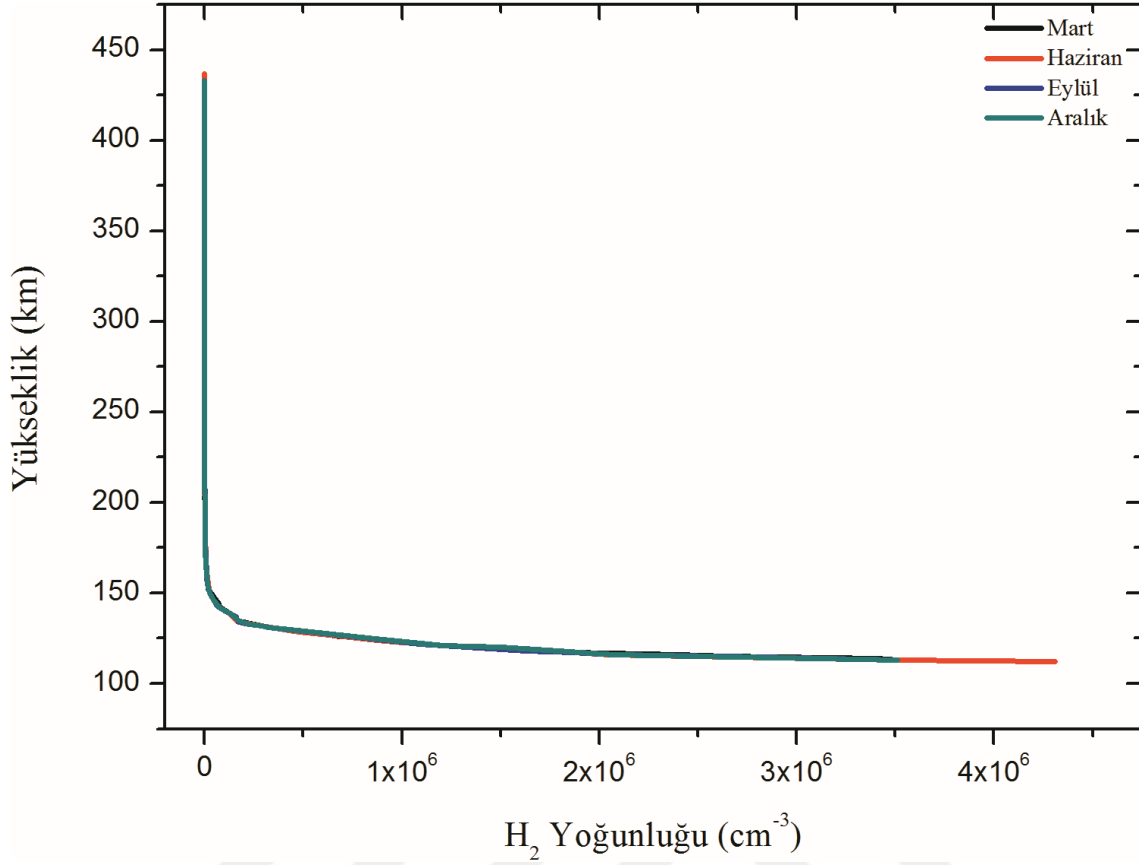
Tablo 6.6. 21 Aralık 2009 tarihine ait iyonküresel değerler

Yükseklik (km)	Ti (K)	O ⁺ Yoğunluğu (cm ⁻³)	H ₂ Yoğunluğu (cm ⁻³)
113	251,6	94,219	3,51e+06
116	284,9	89,991	2,08e+06
119	324,3	175,294	1,68e+06
120	338,4	175,678	1,50e+06
121	352,1	265,788	1,209e+06
125	404,4	572,328	8,30e+05
130	458,6	1257,48	4,01e+05
131	468,4	1496,04	3,2e+05
132	477,9	1743,68	2,91e+05
133	487,1	2001,06	2,26e+05
135	504,5	2777,28	1,74e+05
136	512,7	3188,7	1,61e+05
139	535,9	4901,52	1,27e+05
141	550,1	6295,2	8,63e+04
142	556,9	7103,6	8,15e+04
144	569,7	9103,9	5,94e+04
146	581,7	11576,66	4,73e+04
148	592,9	14431,82	3,66e+04
150	603,4	18045,44	2,8e+04
153	617,9	24853,4	1,89e+04
156	631	33512,38	1,5e+04
161	650,1	51119,91	1,08e+04
165	663,2	79129,2	8,19e+03
174	687	148474,35	4,72e+03
187	710,9	243746,64	2,83e+03
195	721,3	291946,48	2,21e+03
215	756,2	361133,5	1,37e+03
221	768,1	367058,5	1,25e+03
233	791,9	368733,39	1,05e+03
239	803,8	365095,8	9,95e+02
256	837,5	344387,38	8,56e+02
262	849,4	334188,72	8,39e+02
268	861,3	323362,42	8,08e+02
285	895	290384,25	7,63e+02
303	930,7	256154,7	7,34e+02
309	942,6	244547,46	7,07e+02
332	988,2	203163,8	6,68e+02
338	1000,1	193510,8	6,56e+02
350	1023,9	175348,69	6,44e+02
356	1035,8	166837,02	6,20e+02
373	1069,5	145170,24	5,74e+02
379	1081,5	138377,28	5,63e+02
385	1093,4	131820	5,52e+02
402	1127,6	115203,2	5,22e+02
413	1150,5	105821,64	5,03e+02
433	1197,1	90841,96	4,75e+02

Alt yüksekliklerden başlayarak üst iyonküreye doğru çıkıldıkça varlığını gittikçe arttırarak baskın bir bileşen haline gelen O^+ iyonu ile iyonkürenin başlangıcında oldukça yoğun bir biçimde görülen ve bir çok reaksiyonda anahtar bir bileşen olan H_2 molekülünün yükseklikle değişimleri Şekil 6.5 ve Şekil 6.6’da verildi.



Şekil 6.5. O^+ iyon yoğunluğunun yükseklikle değişimi



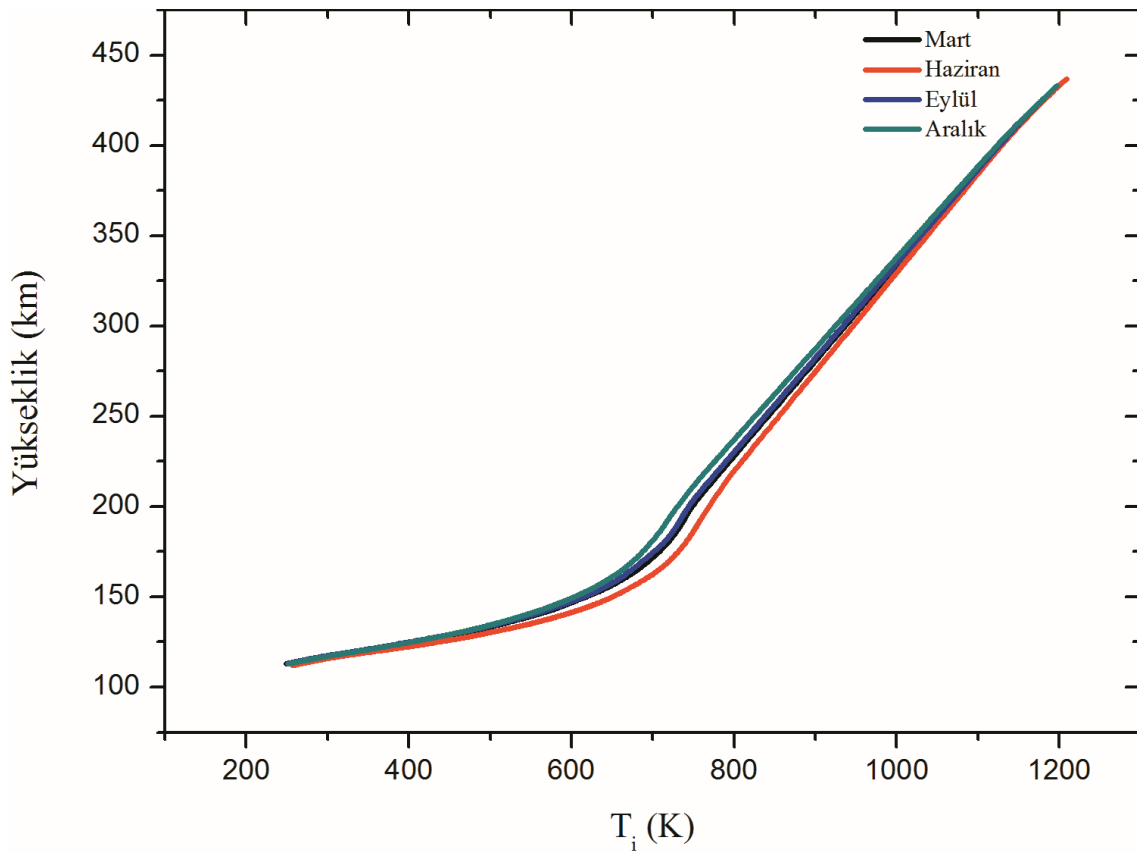
Şekil 6.6. H₂ molekül yoğunluğunun yükseklikle değişimi

Üst iyonkürede oksijen iyonu yoğunluğu genellikle elektron yoğunluğuna yakın değerler alır. Şekil 6.5'ten görüleceği gibi, O^+ iyon yoğunluğu iyonkürenin alt yüksekliklerinde oldukça düşük olmakla birlikte 140 km civarında yaşam süresi oldukça kısadır. Üst yüksekliklere doğru çıkıldıkça yoğunluk değerinde artış görülmektedir. Yaklaşık olarak 180 km de O^+ hızlı bir biçimde baskın olur ve genel iyon haline gelir. F2 bölgesinin temel iyonu, 200 ile 400 km lik aralıkta baskın bileşen O^+ iyonudur. Dört gün içinde maksimum O^+ yoğunluğu Mart ayı için 254. km de, Haziran ayı için 266. km de, Eylül ayı için 256. km de ve Aralık ayı için 233. km yüksekliklerde tespit edilmiştir. Buradan da anlaşılabacağı üzere maksimum yoğunluklar içinde en düşük O^+ yoğunluğu Aralık ayında görülürken, en yüksek yoğunluk değeri Eylül ayında tespit edilmiştir.

Hidrojen molekül yoğunluğu 60 km'nin altında 10^{10} cm^{-3} mertebesinde başlayarak üst yüksekliklere doğru azalmaktadır. Şekil 6.6'dan anlaşılabacağı gibi 150 km den sonra yoğunluk değeri ani bir düşüş göstermektedir. Bu yükseklikten sonra hidrojen molekülü farklı reaksiyon süreçleri ile yerini serbest atom, iyon ve moleküllere bırakmaktadır.

Dört gün için gösterilen grafikten de anlaşılacağı üzere aylar arasında herhangi bir fark bulunmamaktadır.

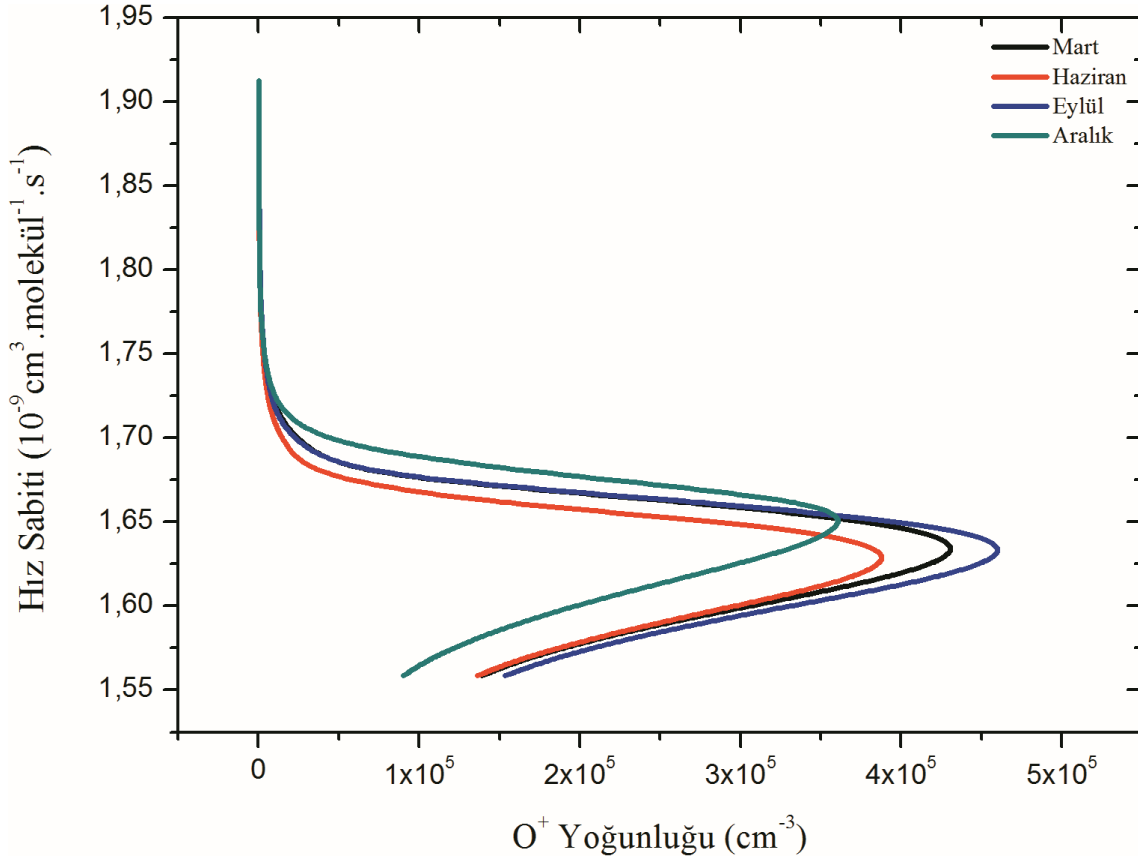
' $O^+ + H_2$ ' reaksiyonunda hidrojen molekülü sabit olarak dururken hareketli olan parçacık O^+ iyonudur. Reaksiyon sırasında hareketsiz olarak olduğu yerde sadece titreşim ve dönme hareketi yapan H_2 molekülüne O^+ iyonu çarparak reaktif bir saçılma meydana getirmektedir. Dolayısıyla oksijen iyonu hareketli olduğundan dolayı iyon sıcaklığı baz alınmıştır. İyon sıcaklığının yüksekliğe bağlı olarak değişimini gösteren grafik Şekil 6.7'de verildi.



Şekil 6.7. İyon sıcaklığının yükseklikle değişimi

Şekil 6.7'den, dört gün için yüksekliğe bağlı olarak iyon sıcaklığı değerlerinde bir farklılık olmadığı görülmektedir. Burada, 130 ile 200 km arasında iyon sıcaklığında daha büyük bir artış olmuştur.

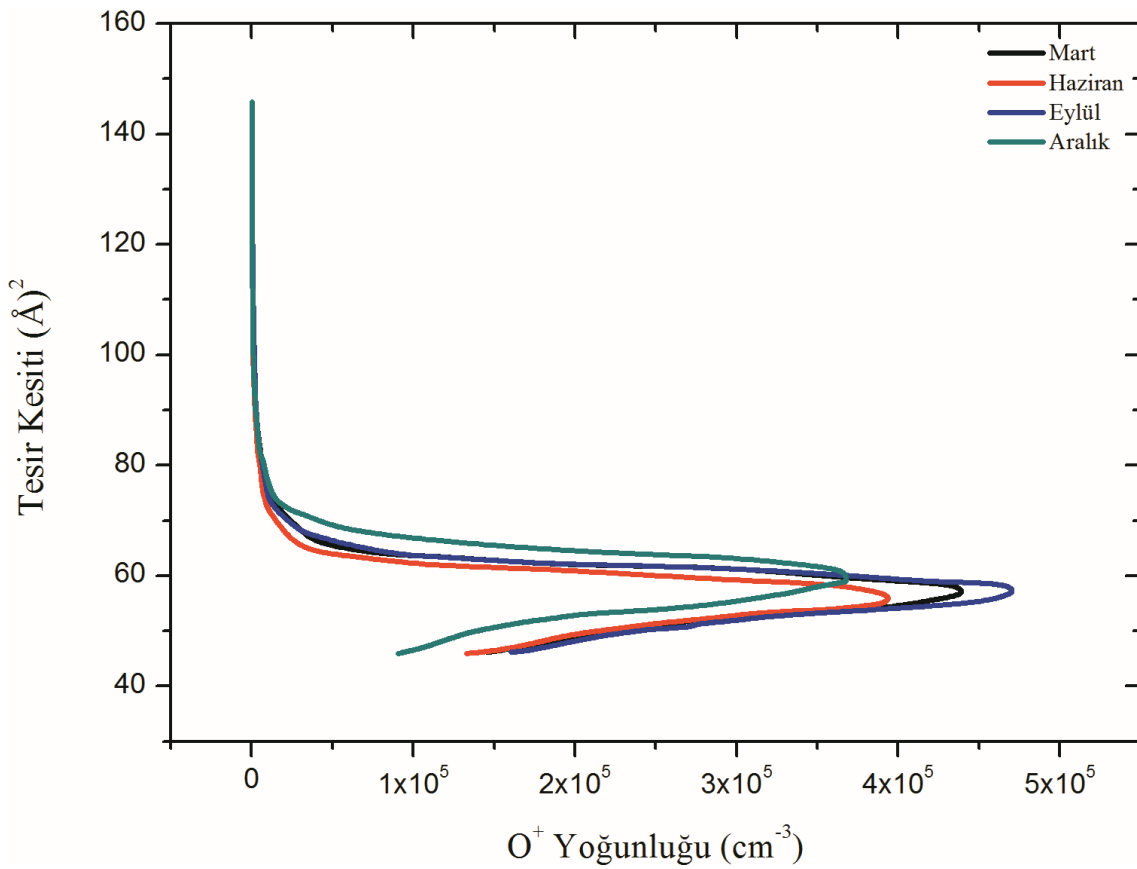
Şekil 6.8 ve Şekil 6.9'da O^+ iyon yoğunluğunun reaksiyon hız sabiti ve toplam çarpışma tesir kesiti değerleriyle olan ilişkisi verilmiştir.



Şekil 6.8. Reaksiyon hız sabitinin O^+ yoğunluğu ile değişimi

Oksijen iyon yoğunluğu ile reaksiyon hız sabiti arasındaki doğru orantılı değişimin, iyon yoğunluğunun maksimum değerine ulaşınca kadar devam ettiği, yoğunluk değerindeki artışın yerini azalmaya bırakması ile birlikte hız sabitinde neredeyse bir değişimin olmadığı Şekil 6.8'den görülmektedir. Ayrıca O^+ iyon yoğunluğunun minimum seviyelere inmesiyle beraber iyon yoğunluğundan bağımsız olarak hız sabitinde büyük bir artışın olduğu tespit edilmiştir.

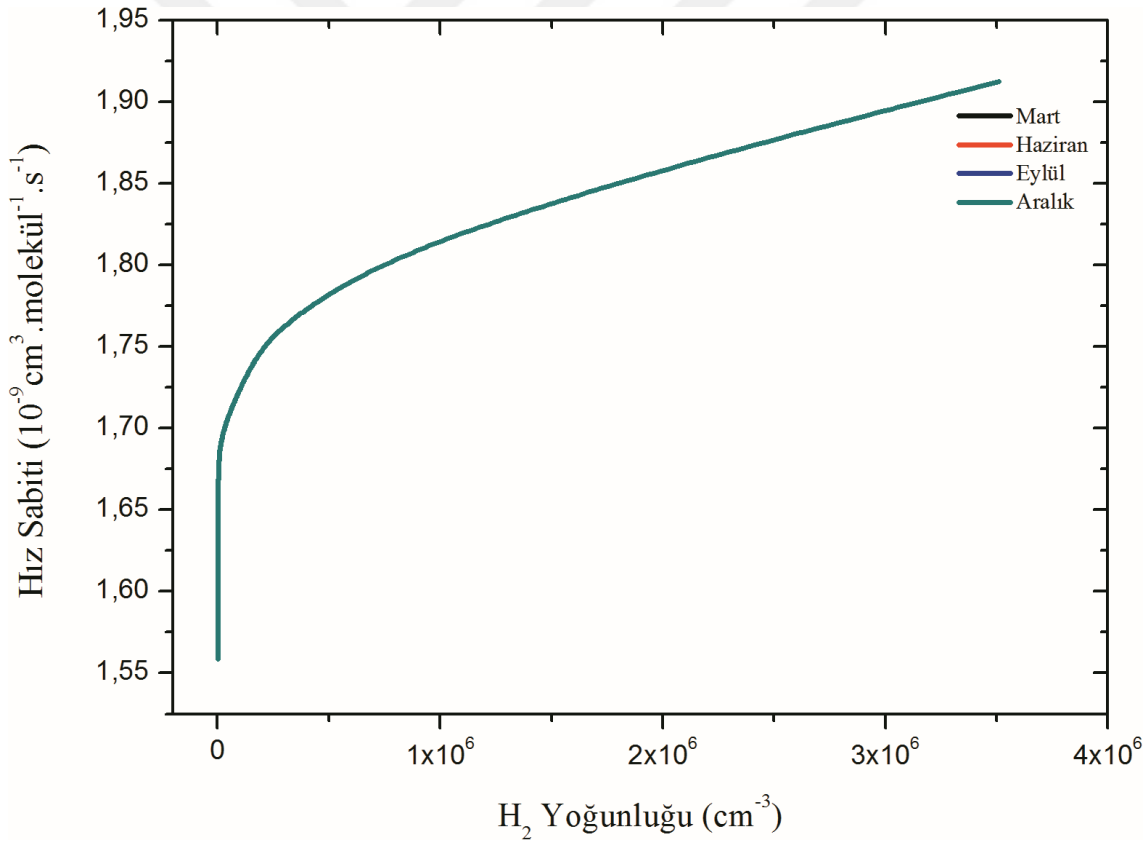
Günler arasında büyük bir farklılık olmamakla birlikte, değişimdeki en yüksek pik noktasına Eylül ayında en düşük pik noktasına ise Aralık ayında rastlanmıştır.



Şekil 6.9. Reaksiyon tesir kesitinin O^+ yoğunluğuyla değişimi

Şekil 6.8'e benzer olarak Şekil 6.9'da, reaksiyon tesir kesiti ile oksijen yoğunluğu arasında bazı noktalar arasında doğru bazı noktalar arasında ters orantılı bazı noktalarda ise hiçbir etkileşimin olmadığı görülmektedir. Oksijen iyon yoğunluğu bakımından oldukça fakir olan alt yüksekliklerde yoğunlukla tesir kesiti arasında her hangi bir etkileşim söz konusu değildir. Buna karşın iyon yoğunluğundaki küçük oranlı artış ile birlikte tesir kesitinde çok az bir düşüş görülürken, iyon yoğunluğunun maksimum noktaya ulaşmasının ardından azalışa geçmesiyle birlikte tesir kesitinin de doğru orantılı olarak azaldığı tespit edilmiştir. Bahsedilen bu değişimlerin dört gün içinde aynı olduğu ayrıca en büyük tepe noktasına Eylül ayında en düşük tepe noktasına ise Aralık ayında ulaşılmıştır.

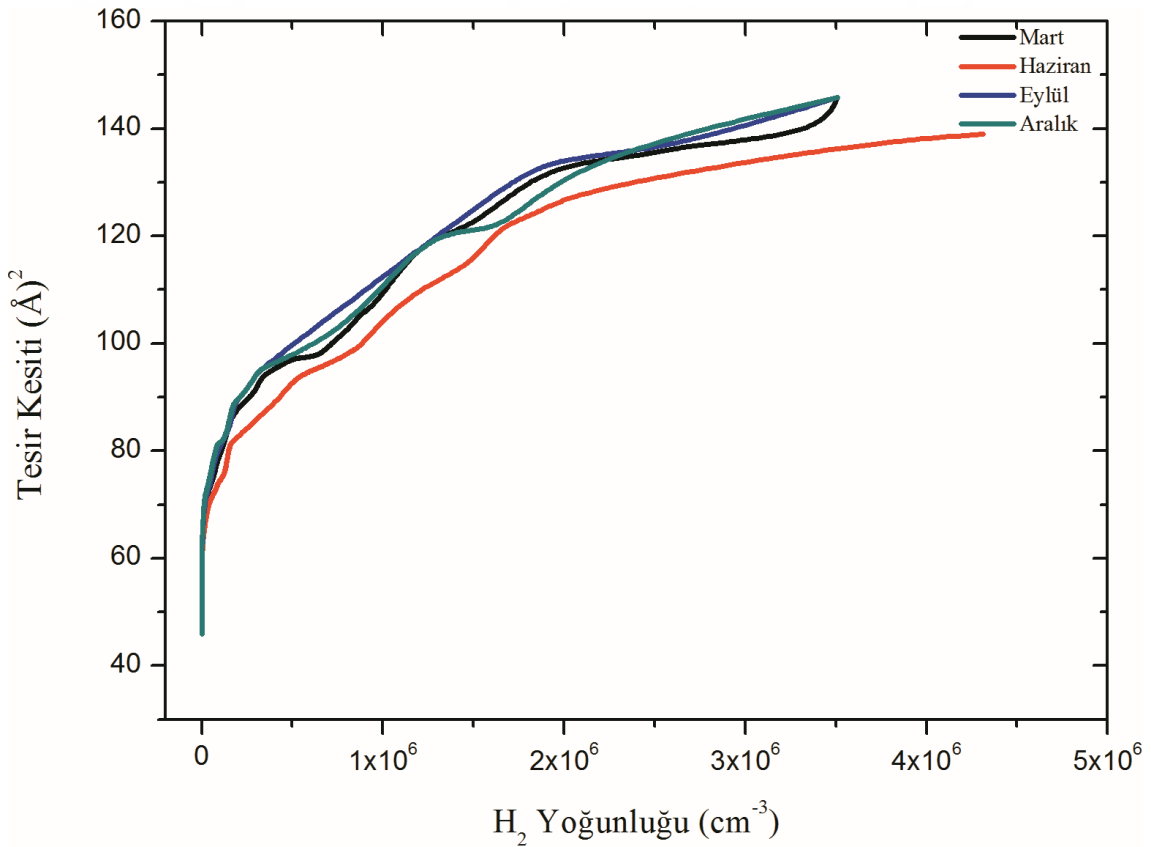
Şekil 6.10 ve Şekil 6.11'de H_2 molekül yoğunluğunun reaksiyon hız sabiti ve toplam çarpışma tesir kesiti parametreleriyle olan değişimi verilmiştir.



Şekil 6.10. Reaksiyon hız sabitinin H_2 yoğunluğu ile değişimi

H₂ yoğunluğunun oldukça düşük olduğu noktalarda reaksiyon hız sabitinin yoğunluğa bağlı olmadan arttığı, diğer yandan yoğunluk değerinin artmaya başlamasından itibaren hız sabiti değerinde de doğrusal bir artış olduğu gözlenmiştir. Reaksiyon hız sabiti değerinin $1,70 \times 10^{-9} \text{ cm}^3 \cdot \text{molekül}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ olduğu noktadan itibaren iki parametre arasında doğrusal bir ilişkinin olduğundan bahsetmek mümkündür.

Tesir kesitinin H₂ yoğunluğunun oldukça yüksek olduğu alt yüksekliklerde hiperbolik olarak arttığı buna karşın, yoğunluğun keskin bir biçimde azalmaya başladığı üst yüksekliklere doğru ise net bir şekilde azaldığı Şekil 6.11'den anlaşılmaktadır. Yine aylar arası değişimlerde belirgin bir fark olmadığı görülmektedir.



Şekil 6.11. Reaksiyon tesir kesitinin H₂ yoğunluğuyla değişimi

6.3. Kinetik Teori Model Sonuçları

O^+ iyonu ile H_2 molekülü arasında gerçekleşen reaktif çarpışmaya ait hesaplanan toplam tesir kesiti değerleri ile bu parçacıklara ait iyonküresel yoğunlukların kinetik teori modellerinde yerine konulmasıyla, denklem (3.33)'den potansiyel eşik enerji (U_0), denklem (3.24)'den ortalama serbest yol (λ), denklem (3.25)'den çarpışma frekansı (ν) ve denklem (3.36) ile bir kereye mahsus olmak üzere (3.37)'den elde edilen toplam çarpışma sayısı ($Z_{O^+H_2}$) verileri hesaplanmıştır.

Bu hesaplamalar yapılırken birbirinden farklı birimlere sahip olan değişkenler için her bir adımda boyut analizi yapılmıştır. Doğru sonuçlara ulaşabilmek için farklı birimlere sahip olan bu veriler aynı birim sistemine dönüştürüldü.

İlk olarak potansiyel eşik enerjisi, U_0 , erg cinsinden hesaplandı. Bu hesaplamalar yapılırken Boltzmann sabiti, k 'nın değeri $1,3807 \times 10^{-16}$ erg/ 0K olarak alındı.

Reaktif çarpışmada, hareketli olarak kabul edilen O^+ iyonunun ortamda bulunan ve hareketsiz kabul edilen her bir H_2 molekülüne çarpma sayısı olarak ifade edilen çarpışma frekansı hesabında, O^+ iyonuna ait ortalama hız, $\bar{v}$, cm/s ve n , H_2 molekülüne ait yoğunluk değerleri cm^{-3} birimleri cinsinden hesaba katılmıştır. Bu işlemler neticesinde çarpışma frekansı, s^{-1} biriminden elde edilmiştir.

O^+ iyonu için elde edilen ortalama serbest yol değerleri (λ) hesaplanırken, daha önce Tablo 6.1'de verilen tesir kesiti verileri ($\text{\AA}^2$)'den cm^2 'ye çevrilerek ($1\text{\AA}^2 = 10^{-16} cm^2$) sonuçlar cm cinsinden hesaplandı.

Ortamda bulunan tüm O^+ iyonları ve H_2 molekülleri arasında gerçekleşen çarpışmaların toplamı olarak adlandırılan $Z_{O^+H_2}$, $cm^{-3}.s^{-1}$ biriminden elde edildi.

Dört farklı gün için hesaplanan tüm bu değerlerin, iyonküresel yükseklik ve sıcaklık aralıklarına göre değişimleri sırasıyla Tablo 6.7, Tablo 6.8, Tablo 6.9 ve Tablo 6.10'da verilmiştir.

Tablo 6.7. 21 Mart 2009 tarihine ait kinetik teori model sonuçları

Yükseklik (km)	Ti (K)	U ₀ (erg) E-17	λ (km)	ν (s ⁻¹)	Z _{O⁺H₂} (cm ⁻³ s ⁻¹)
113	249,2	490,45748	5770193	0,00429	1,03490151552736
114	259,3	510,33558	6095088	0,00405	0,97092089531695
115	270,4	532,1818	6236708	0,00315	0,750170597841517
116	282,3	555,60252	6382810	0,00288	0,68086805057831
117	295,1	580,79456	6488832	0,00227	0,533541076750696
120	338	665,22725	3576371	0,00177	0,831027178774111
121	353,2	695,14279	2408218	0,00144	1,01683163523976
123	383,1	753,98982	1991918	0,00107	1,01875054837852
124	395,6	778,59141	1599048	9,76e-4	1,17295914623407
125	408,4	803,78345	1346159	9,2e-4	1,34286586624566
126	420,7	827,99143	1186339	7,36e-4	1,27264151035099
127	432,7	851,60896	1036855	6,82e-4	1,36863335428945
128	444,2	874,24243	818108	5,6e-4	1,42708473058205
129	455,3	896,08865	740080	4,93e-4	1,40448340892984
130	466,1	917,34444	623263	4,38e-4	1,49699617893605
131	476,5	937,81297	540786	3,47e-4	1,39207922622857
132	486,6	957,69106	487017	3,08e-4	1,42050482023564
135	514,7	1012,9955	341540	1,69e-4	1,1525742008714
139	548	1078,5341	217388	1,28e-4	1,47389269364035
142	570,1	1122,0297	165076	8,06e-5	1,27044628378388
144	583,7	1148,7963	140071	6,92e-5	1,32538666544052
152	629,4	1238,7397	72167	1,81e-5	0,719332635767472
157	652,3	1283,8099	50371	1,26e-5	0,737700030134581
163	675	1328,4864	42032	9e-6	0,651506329970894
167	687,8	1353,6784	30703	6,69e-6	0,676619274964593
176	710,9	1399,1422	19104	3,98e-6	0,663320790677974
181	721	1419,0202	13292	3,18e-6	0,764165504923136
189	734	1444,6059	8932	2,44e-6	0,892390329690946
198	744,9	1466,0585	6532	1,84e-6	0,927529689176816
205	756,4	1488,692	5456	1,56e-6	0,945166221265047
217	779,2	1533,5653	4599	1,2e-6	0,889523043666545
230	803,8	1581,9812	4112	9,74e-7	0,817200931718536
242	826,6	1626,8546	3931	8,45e-7	0,748022671431442
254	849,3	1671,5311	3987	7,75e-7	0,693194157335825
266	872,1	1716,4044	4111	7,46e-7	0,656425506688172
291	919,5	1809,6936	4673	6,75e-7	0,539849507528801
297	930,9	1832,1303	4848	6,63e-7	0,514115257765691
303	942,2	1854,3701	5043	6,52e-7	0,487991871928714
309	953,6	1876,8068	5229	6,44e-7	0,464610605384069
315	965	1899,2435	5440	6,23e-7	0,43258808822833
346	1023,8	2014,9694	7028	5,57e-7	0,310081956730272
352	1035,2	2037,406	7395	5,46e-7	0,290682856039289
358	1046,5	2059,6459	7798	5,43e-7	0,275832877723077
370	1069,3	2104,5192	8695	5,3e-7	0,245605897450989
423	1174,2	2310,9758	14284	4,15e-7	0,127460067588825
428	1185,8	2333,8061	14902	4,08e-7	0,120531413364432

Tablo 6.8. 21 Haziran 2009 tarihine ait kinetik teori model sonuçları

Yükseklik (km)	Ti (K)	U ₀ (erg) E-16	λ (km)	ν (s ⁻¹)	Z _{O⁺H₂} (cm ⁻³ s ⁻¹)
112	256,7	505,21844	5439524	0,0051	1,36816198414205
113	266	523,52203	5561456	0,004	1,10934747426973
116	300,1	590,6352	6057945	0,0024	0,631785608815044
117	313,7	617,40174	3144267	0,0021	1,13523979514456
118	328,2	645,93959	3223440	0,0019	0,98729154096092
120	359,8	708,13243	2282202	0,0017	1,34361810167283
121	376,4	740,80336	1768336	0,0013	1,42953417473992
123	409,1	805,16114	1490910	0,001	1,40652168523631
124	422,5	831,53406	1283543	9,45e-4	1,51014582868252
127	462,2	909,66874	766694	6,88e-4	1,91295363473554
128	474,5	933,87671	696426	5,57e-4	1,73266428638088
129	486,2	956,90381	600439	4,78e-4	1,78889577123228
134	538,7	1060,2305	330745	1,75e-4	1,31594411087633
135	548	1078,5341	290980	1,63e-4	1,39592094363311
136	556,9	1096,0505	260290	1,53e-4	1,48519256122232
138	573,8	1129,3118	217835	1,32e-4	1,61175693650824
139	581,8	1145,0568	204281	1,23e-4	1,61610306544039
141	596,8	1174,5788	168229	8,29e-5	1,35061112515527
142	603,9	1188,5525	154978	7,77e-5	1,39276212657842
144	617,2	1214,7286	130503	5,62e-5	1,21866417614163
146	629,6	1239,1334	111642	4,47e-5	1,14570715209514
150	651,6	1282,4322	82018	2,51e-5	0,905630298194431
161	697	1371,7852	49366	9,76e-6	0,62246608117782
170	722,2	1421,382	24641	5,69e-6	0,738120899737231
182	744,7	1465,6649	14657	3,06e-6	0,686221411461868
192	756,9	1489,676	9289	2,19e-6	0,778786483787076
215	791,1	1556,986	5543	1,21e-6	0,754577120804614
228	814,8	1603,6306	4801	9,96e-7	0,717529252825494
247	849,5	1671,9247	4466	7,84e-7	0,625938660886368
266	884,1	1740,0219	4562	7,1e-7	0,568221903813232
272	895,1	1761,6713	4675	6,93e-7	0,54751871154404
279	907,8	1786,6665	4797	6,68e-7	0,517765102144577
298	942,5	1854,9606	5266	6,45e-7	0,462421659450148
304	953,4	1876,4132	5420	6,36e-7	0,443214101595897
317	977,1	1923,0578	5890	6,27e-7	0,404908832506334
323	988,1	1944,7072	6153	6,04e-7	0,375485928139605
330	1000,8	1969,7024	6507	5,9e-7	0,350524505984334
336	1011,8	1991,3519	6817	5,79e-7	0,330359104671188
349	1035,5	2037,9965	7565	5,46e-7	0,28420625756723
355	1046,4	2059,4491	7957	5,36e-7	0,266803185765221
374	1081,1	2127,7431	9393	5,01e-7	0,216916808704214
381	1093,9	2152,9352	9968	4,91e-7	0,201680133769869
393	1116	2196,4308	11145	4,59e-7	0,172180041792331
399	1127,2	2218,4738	11812	4,46e-7	0,160199547617037
417	1162,3	2287,5551	13920	4,16e-7	0,130391046826097
437	1209	2379,4667	16391	3,94e-7	0,106533893391819

Tablo 6.9. 23 Eylül 2009 tarihine ait kinetik teori model sonuçları

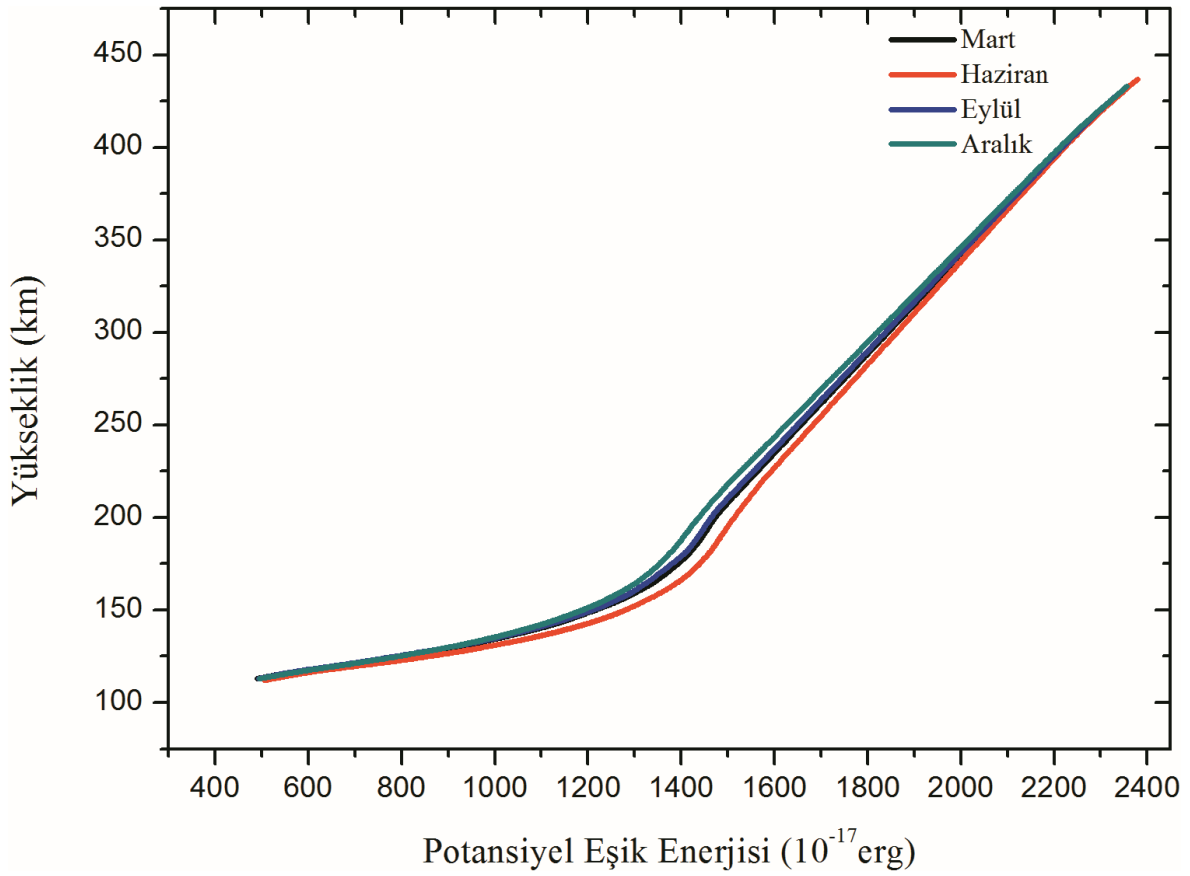
Yükseklik (km)	Ti (K)	U ₀ (erg) E-16	λ (km)	ν (s ⁻¹)	Z _{O⁺H₂} (cm ⁻³ s ⁻¹)
113	250,9	493,8033	5737377	0,0043	1,04436482682724
115	270,3	531,98498	6205996	0,0031	0,753743631850929
116	281,2	553,43758	6346808	0,0024	0,592275624954778
117	293,1	576,8583	6452597	0,0022	0,534715958832757
118	305,7	601,65671	3358214	0,0019	0,914608243188124
122	362,1	712,65913	1862908	0,0012	1,19993448467473
131	470,8	926,59464	544828	3,51e-4	1,37346193748201
132	481	946,66954	483706	3,17e-4	1,42197473223589
133	490,8	965,9572	443922	2,4e-4	1,21551984497235
134	500,2	984,4576	385341	1,83e-4	1,08838659325258
137	526,7	1036,613	288294	1,64e-4	1,37269287740528
140	550,5	1083,4544	211751	1,06e-4	1,25385960150693
143	572	1125,7692	165520	6,52e-5	1,02621956752729
146	591,4	1163,9509	131329	4,52e-5	0,943950493451403
148	603,3	1187,3716	110588	3,48e-5	0,876084472203132
151	619,6	1219,4521	87843	2,46e-5	0,794012003983399
153	629,5	1238,9365	75900	1,88e-5	0,708945824884996
158	651,7	1282,629	53534	1,12e-5	0,621846653119384
161	663,2	1305,2625	43645	8,92e-6	0,614921940007384
178	710,3	1397,9613	18131	3,58e-6	0,628913298500885
184	721,4	1419,8075	13799	2,91e-6	0,675458353225383
192	733,1	1442,8346	8894	2,16e-6	0,793959157744164
202	745,8	1467,8298	6087	1,66e-6	0,899322290444721
214	768,8	1513,0968	4720	1,29e-6	0,91798806158965
226	791,8	1558,3637	4089	1,04e-6	0,875073941749852
232	803,3	1580,9972	3883	9,65e-7	0,857417287275442
238	814,8	1603,6306	3747	8,83e-7	0,815116125445168
244	826,3	1626,2641	3687	8,19e-7	0,772941491316868
250	837,8	1648,8976	3681	7,86e-7	0,750699759937262
256	849,3	1671,5311	3733	7,37e-7	0,70408722888281
268	872,3	1716,798	3844	7,25e-7	0,682243118585874
280	895,4	1762,2618	4072	6,8e-7	0,61687301203455
323	977,8	1924,4355	5293	6,13e-7	0,440550438681832
335	1000,8	1969,7024	6020	5,77e-7	0,370375630884369
347	1023,9	2015,1662	6455	5,55e-7	0,336528731217105
353	1035,4	2037,7997	6796	5,44e-7	0,31532865375918
359	1046,9	2060,4331	7155	5,33e-7	0,295332566392977
365	1058,4	2083,0666	7224	5,21e-7	0,2887523751585
371	1069,9	2105,7001	7970	5,12e-7	0,258722966424947
377	1081,4	2128,3336	8427	5e-7	0,241387838555602
383	1093	2151,1638	8890	4,9e-7	0,2260410434239
389	1104,6	2173,9941	9404	4,69e-7	0,20604276920121
395	1116,2	2196,8244	9966	4,57e-7	0,191839827090762
418	1162,9	2288,736	12398	4,23e-7	0,148809757695096
423	1174	2310,5822	12953	4,14e-7	0,140259572007683
428	1185,7	2333,6093	13514	4,07e-7	0,132630291578979

Tablo 6.10. 21 Aralık 2009 tarihine ait kinetik teori model sonuçları

Yükseklik (km)	Ti (K)	U ₀ (erg) E-16	λ (km)	ν (s ⁻¹)	Z _{O⁺H₂} (cm ⁻³ s ⁻¹)
113	251,6	495,18099	7281103	0,0043	0,824087801899366
116	284,9	560,71965	8252380	0,0025	0,458499139127681
119	324,3	638,26389	4684354	0,0019	0,69605119926799
120	338,4	666,0145	4695262	0,0017	0,633366084262125
121	352,1	692,97785	3144959	0,0014	0,777414201597568
125	404,4	795,91094	1691943	9,15e-4	1,06317835028983
130	458,6	902,58348	825883	4,39e-4	1,12059994508028
131	468,4	921,87113	701793	3,5e-4	1,06354793049001
132	477,9	940,56834	612264	3,16e-4	1,11977473403941
133	487,1	958,67512	553053	2,39e-4	0,971982432813729
135	504,5	992,92055	404755	1,84e-4	1,04062771170138
136	512,7	1009,0592	359785	1,68e-4	1,09199828168913
139	535,9	1054,7198	249220	1,27e-4	1,27136264229917
141	550,1	1082,6672	195076	8,75e-5	1,11824069021742
142	556,9	1096,0505	174485	8,24e-5	1,18794138873243
144	569,7	1121,2425	140898	5,87e-5	1,08445427857976
146	581,7	1144,86	114233	4,58e-5	1,07628154576156
148	592,9	1166,9031	93593	3,506e-5	1,02620951014255
150	603,4	1187,5684	75883	2,66e-5	0,976835795592144
153	617,9	1216,1063	56108	1,79e-5	0,90240307843432
156	631	1241,8887	42049	1,42e-5	0,965733527724991
161	650,1	1279,48	23432	1e-5	1,04378572909546
165	663,2	1305,2625	18737	7,55e-6	1,21312442993037
174	687	1352,1039	10307	4,29e-6	1,29357562533125
187	710,9	1399,1422	6431	2,55e-6	1,26437787417525
195	721,3	1419,6107	5391	2e-6	1,18651540526218
215	756,2	1488,2984	4508	1,22e-6	0,900660677771653
221	768,1	1511,7191	4501	1,11e-6	0,829422709391939
233	791,9	1558,5605	4598	9,25e-7	0,69250159531844
239	803,8	1581,9812	4658	8,81e-7	0,652579551024092
256	837,5	1648,3072	5030	7,59e-7	0,530674636482198
262	849,4	1671,7279	5259	7,39e-7	0,501066750448403
268	861,3	1695,1486	5477	7,11e-7	0,466603620157771
285	895	1761,4745	6270	6,66e-7	0,392349158219162
303	930,7	1831,7367	7233	6,42e-7	0,333628577509263
309	942,6	1855,1574	7608	6,19e-7	0,307465497498458
332	988,2	1944,904	9278	5,91e-7	0,243915279628704
338	1000,1	1968,3248	9834	5,79e-7	0,227338668849618
350	1023,9	2015,1662	10996	5,67e-7	0,201962947833078
356	1035,8	2038,5869	11628	5,46e-7	0,18493427941208
373	1069,5	2104,9128	13672	5,02e-7	0,147969801839096
379	1081,5	2128,5304	14472	4,91e-7	0,137874850282236
385	1093,4	2151,9511	15309	4,8e-7	0,128495964767378
402	1127,6	2219,2611	18125	4,46e-7	0,104225894060938
413	1150,5	2264,3312	20135	4,25e-7	0,0913193624831237
433	1197,1	2356,046	23956	4,01e-7	0,073934428581665

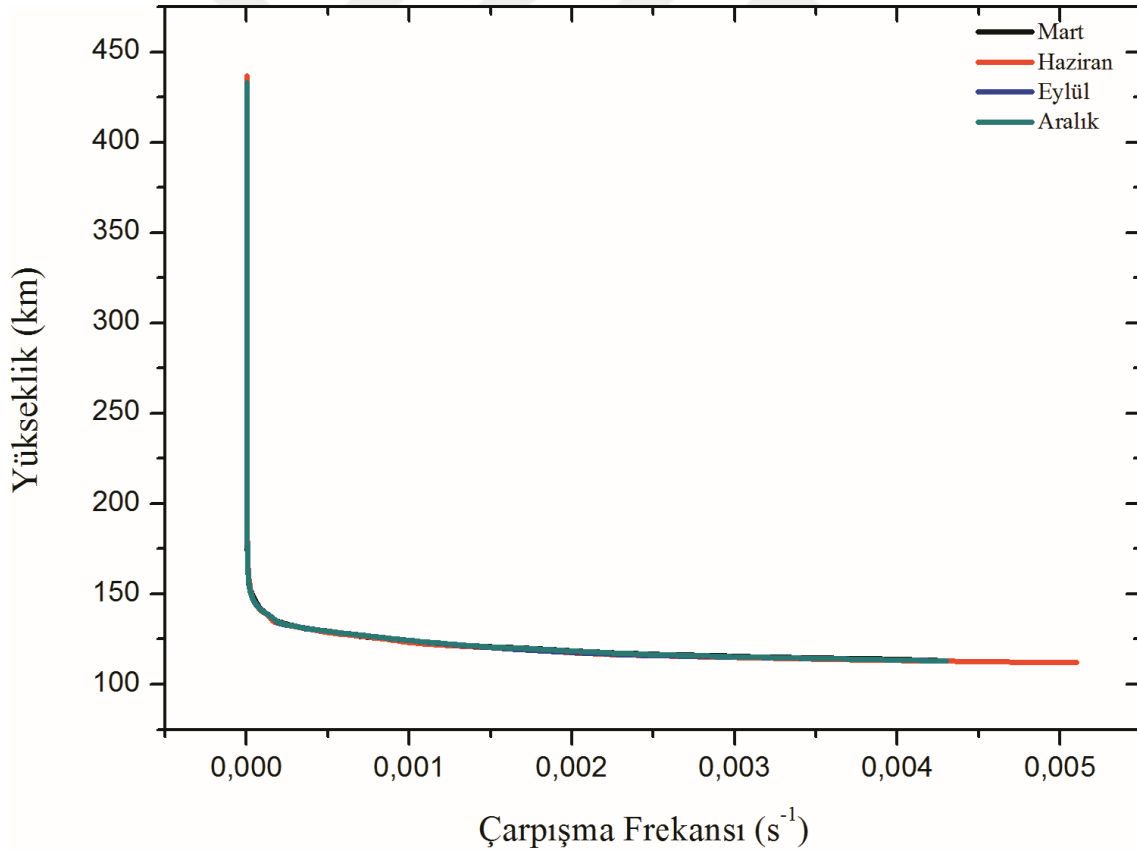
6.3.1. Kinetik Teori Model Sonuçlarıyla İyonküresel Değişkenlerin İlişkisi

İyonküresel parametrelerle kuantum mekaniksel niceliklerin kinetik teori denklemlerinde yerlerine konulmasıyla ulaşılması planlanan teorik sonuçlar elde edilmişti. Potansiyel eşik enerjisi, çarpışma frekansı, toplam çarpışma sayısı ve ortalama serbest yol sonuçlarının iyonküresel yükseklikle değişimlerini gösteren grafikler sırasıyla Şekil 6.12, Şekil 6.13, Şekil 6.14 ve Şekil 6.15’de verildi.



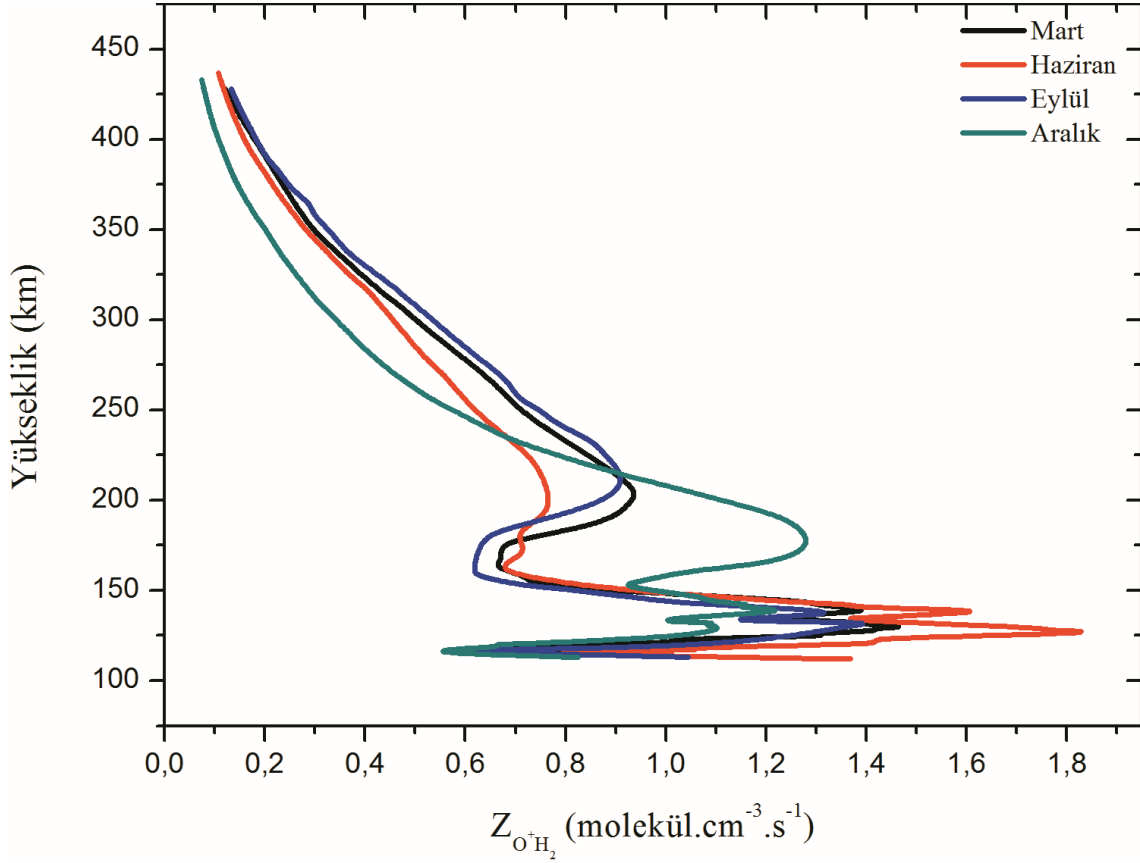
Şekil 6.12. Potansiyel eşik enerjisinin iyonküresel yükseklikle değişimi

Kuantum mekaniksel olarak, O^+ iyonu ile H_2 molekülü arasında reaktif çarpışmanın gerçekleşebilmesi için her hangi bir enerji ihtiyacı bulunmamaktadır yani reaksiyon kendiliğinden gerçekleşmektedir. Buna karşın klasik bakışta, reaksiyonun gerçekleşebilmesi için gerekli minimum enerji basamağı olan potansiyel eşik enerjisinin yükseklikle doğru orantılı arttığı görülmektedir. Yaklaşık 110 km ile 175. km'ler arasında eğride bir yassılaşma görülmektedir. Potansiyel eşik enerjisi sıcaklıkla doğru orantılı olarak değişim göstermektedir. 110 ile 175. km'ler arasındaki 60 km'lik dilimdeki sıcaklık farkı ile sonrasındaki 240 km'lik aralıktaki sıcaklık farkı neredeyse birbirine denktir. Bu iki bölge arasındaki yükseklik farkına rağmen sıcaklıktaki değişimin benzer olması eğrideki farklılaşmanın eşik enerjisi lehine dönüşünün sebebi olarak düşünülebilir. Aylık bazda değişime bakıldığında, günler arasında bir farklılığın olmadığı hemen hemen benzer oldukları sadece Haziran ayında artışın biraz daha fazla olduğu görülmektedir.



Şekil 6.13. Çarpışma frekansının iyonküresel yükseklikle değişimi

Oksijen iyonunun hidrojen molekülüne çarpma sayısı olarak ifade ettiğimiz çarpışma frekansının artan yükseklikle beraber azaldığı şekilden açıkça görülmektedir. Çarpışma frekansı en yüksek değerine alt iyonkürede ulaşırken, yükseklik artışı ile beraber yani üst iyonkürede minimuma düşmüştür. Bu durumun sebebi olarak, H_2 molekül yoğunluğunun alt yüksekliklerde maksimum, üst yüksekliklerde ise oldukça düşük olması gösterilebilir. Yine aylar arasındaki ilişkiye bakıldığında bir fark olmadığı görülmektedir.

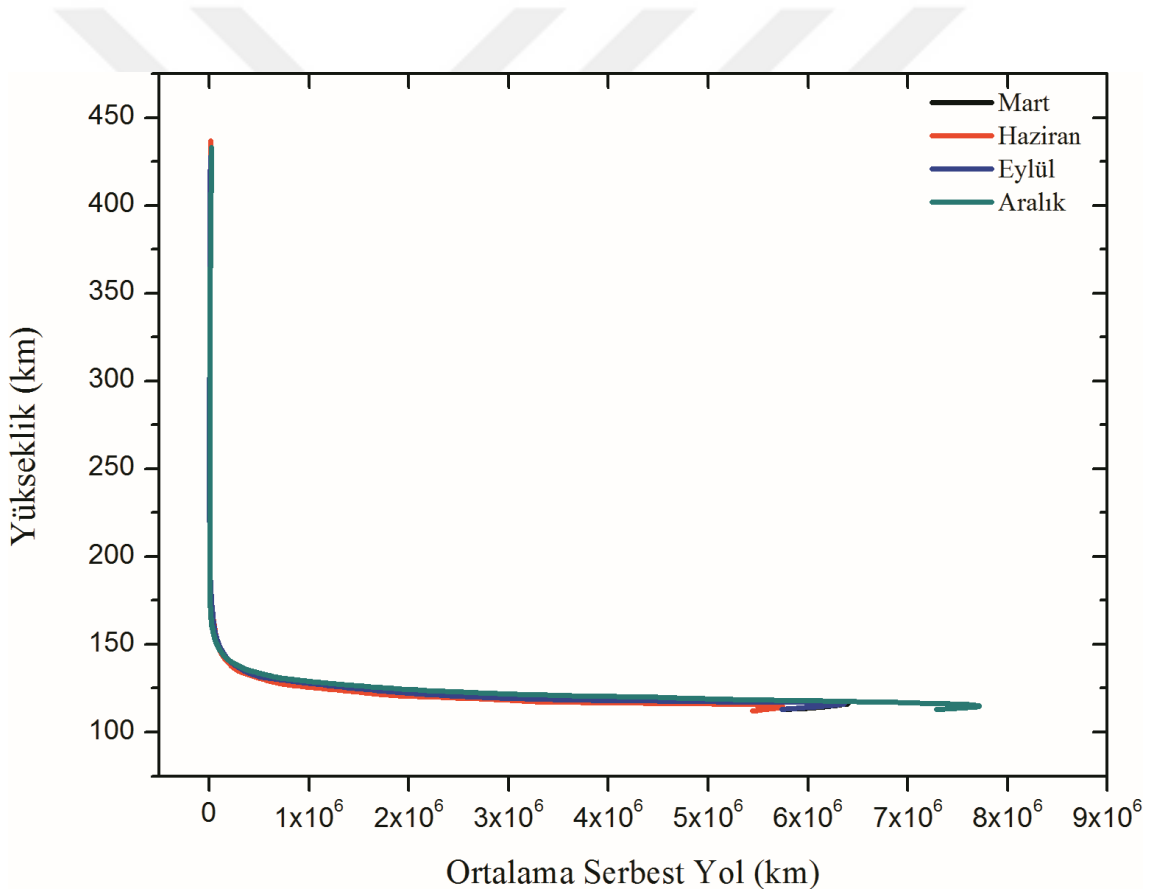


Şekil 6.14. Toplam çarpışma sayısının iyonküresel yükseklikle değişimi

Toplam arpıřma sayısının, Z_{O+H_2} , iyonkresel ykseklikle deęiřimine bakıldıęında doęru ve ters orantılı eęilimlerin olduęu řekil 6.14'den anlařılmaktadır.

Her bir ay iin bařlangı ykseklięinin ~113. km olduęu gz nne alınırsa, zellikle alt iyonkre olarak nitelendirebileceęimiz yksekliklerde karıřıklıklar olduęu st yksekliklere yani F blgesine doęru ıkıldıka toplam arpıřma sayısının ykseklik arttıka azaldıęı grlmektedir.

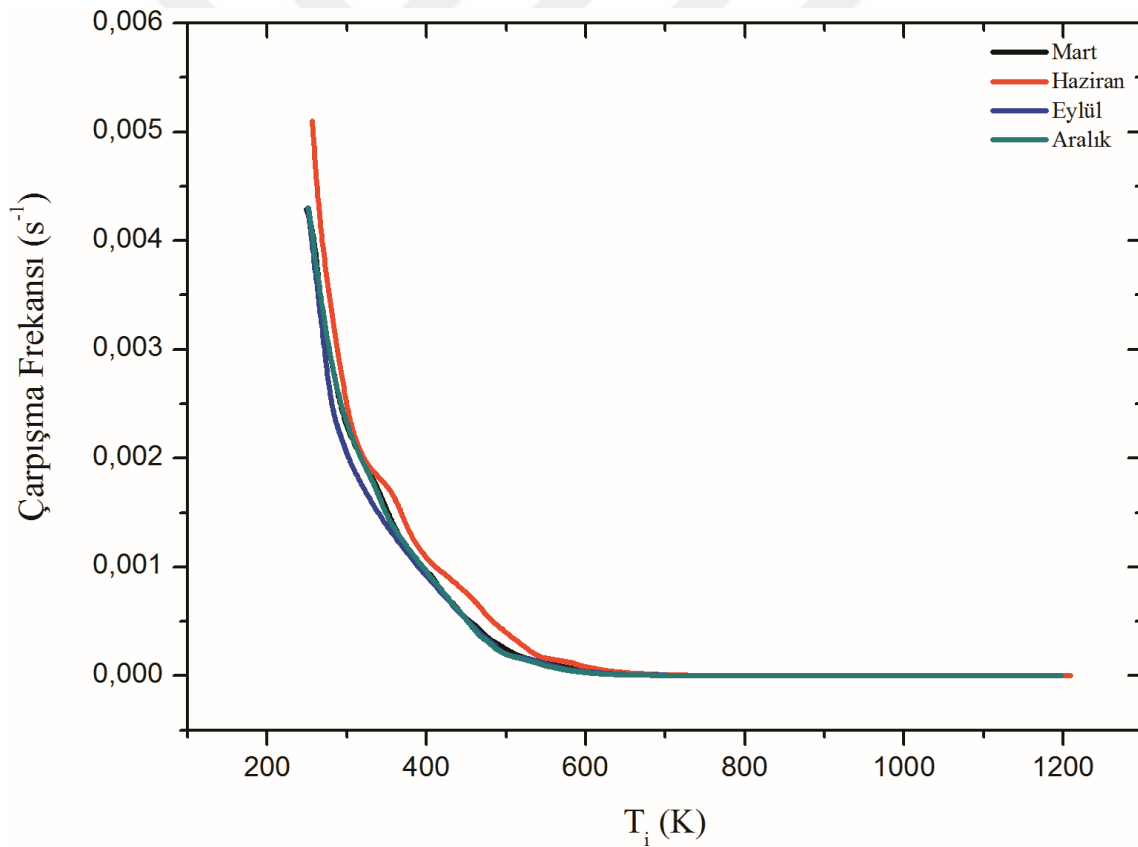
Z_{O+H_2} 'nin ykseklikle deęiřiminde drt ay iin benzerlik ve farklılıklar sz konusudur. Aylık bazda drt gn iin benzer deęiřimlerin olduęu, yalnız Aralık ayı iin ~150 ile 170. km'ler arasında artan ykseklikle beraber doęru orantılı bir deęiřimin olduęu gzlenmektedir.



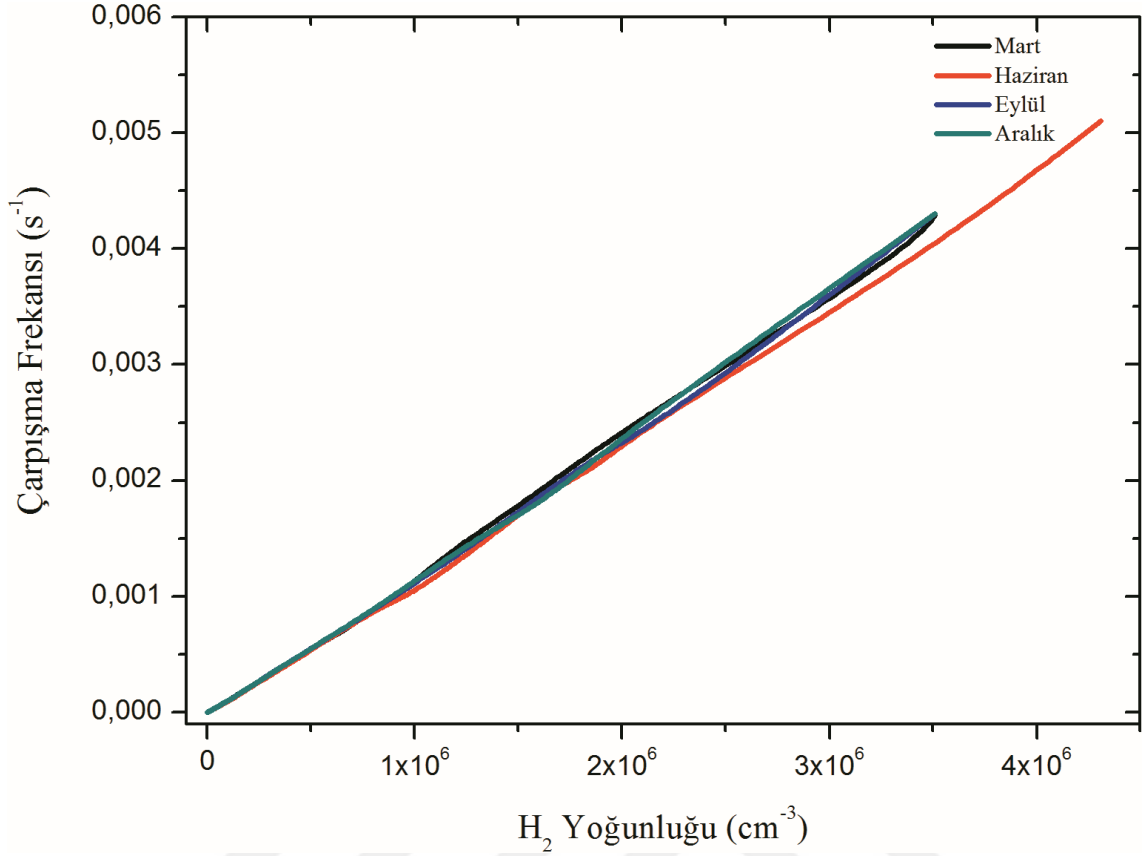
řekil 6.15. Ortalama serbest yolun iyonkresel ykseklikle deęiřimi

Bir parçacığın ardışık iki çarpışması esnasında kat ettiği mesafe olarak tanımlanan ortalama serbest yolun, λ , iyonküresel yükseklikle değişimini gösteren grafiğe bakıldığında ters ve doğru orantılı değişimlerin olduğu anlaşılmaktadır. Dört gün için ortak olarak tanımladığımız başlangıç yüksekliği olan 113. km'den ~117. km'ye kadar yükseklikle küçük bir artışın olduğu tespit edildi. Mart, Haziran ve Eylül ayları için 240 ile 250. km'lere, Aralık ayı içinde 221. km'ye kadar ortalama serbest yolun yükseklikle ters orantılı olarak şiddetli bir şekilde düştüğü, bu yüksekliklerden sonra şiddetli düşüşün yerini yumuşak bir artışa bıraktığı görülmektedir.

Oksijen iyonunun hidrojen molekülüne çarpma sayısı olarak ifade ettiğimiz çarpışma frekansının, ν , iyon sıcaklığı, T_i ve H_2 molekül yoğunluğu ile olan ilişkisi Şekil 6.16 ve Şekil 6.17'de verildi.



Şekil 6.16. Çarpışma frekansının iyon sıcaklığı ile değişimi

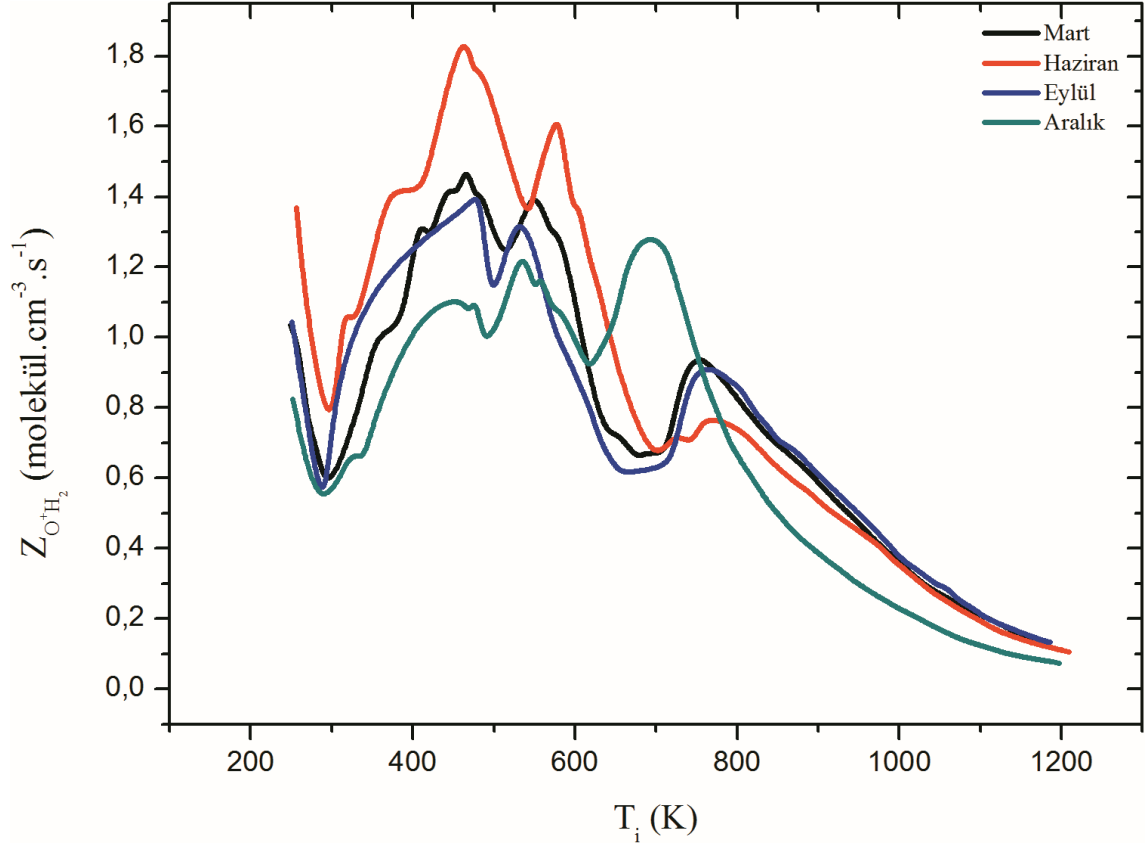


Şekil 6.17. Çarpışma frekansının H_2 yoğunluğu ile değişimi

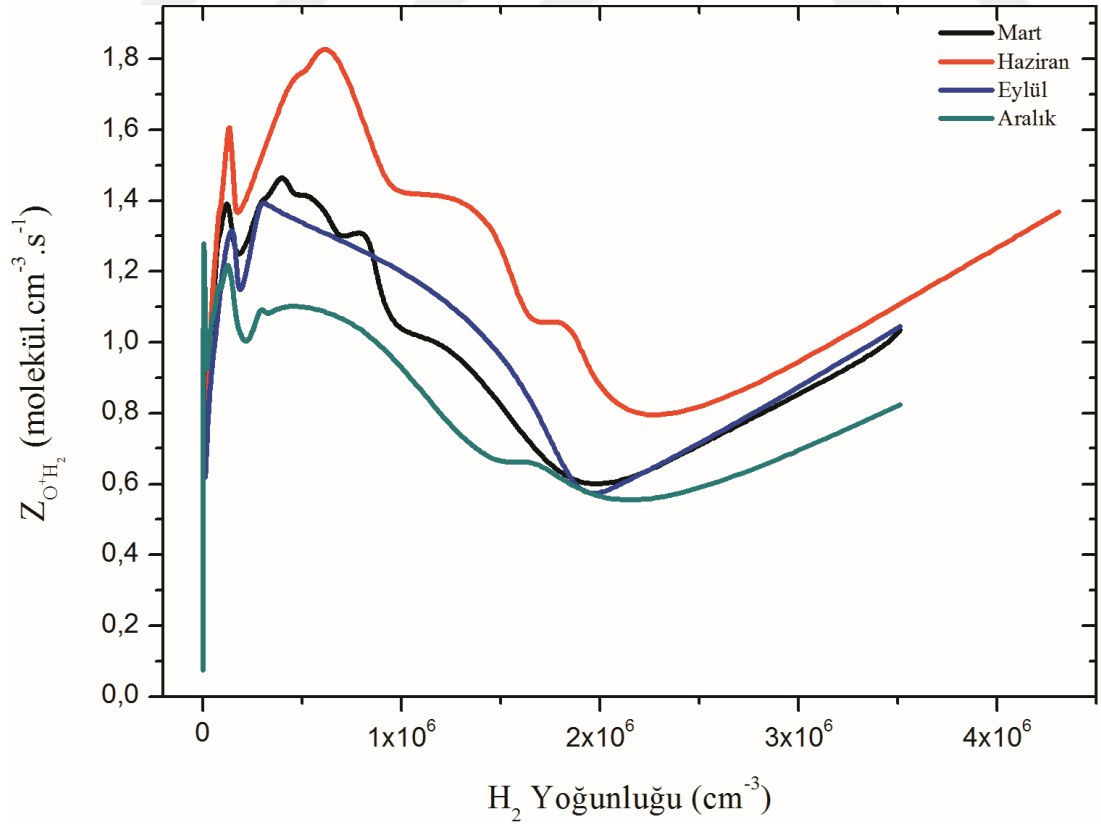
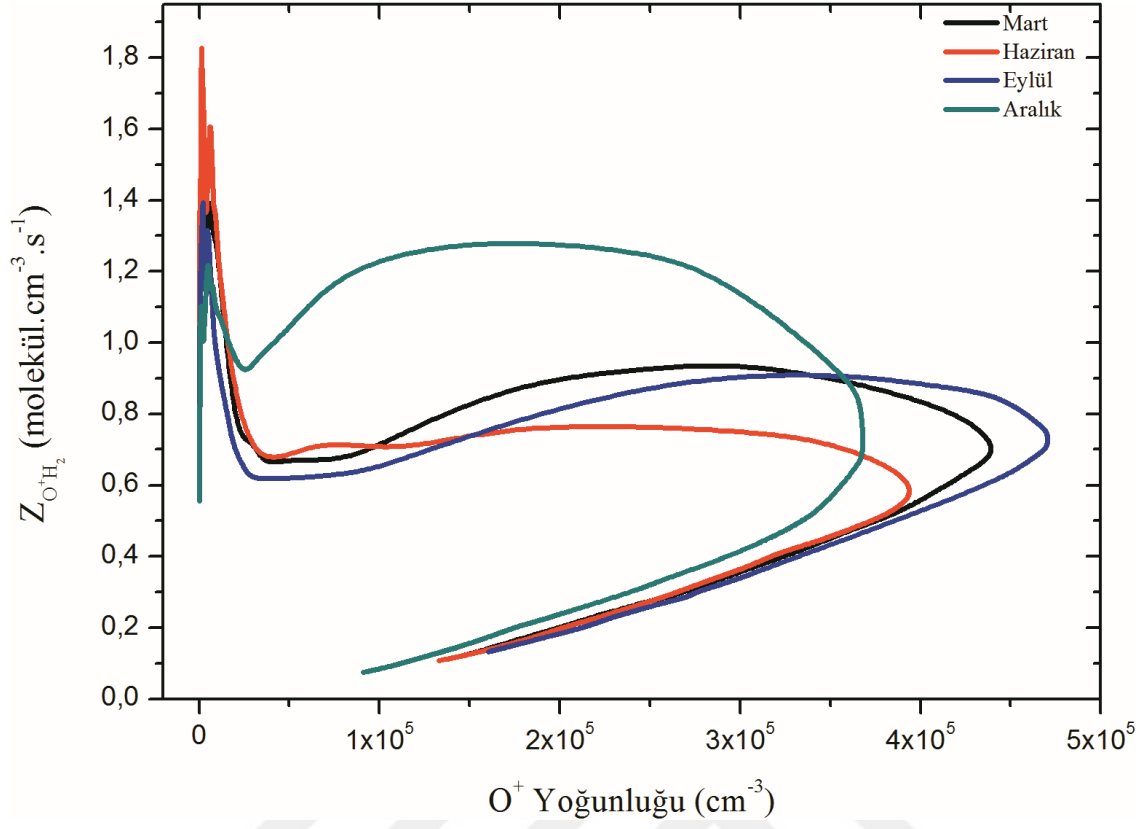
Daha öncede ifade edildiği gibi, çarpışma frekansı, toplam kesir kesitine, parçacık yoğunluğuna ve parçacığın ortalama hızına bağlı olarak değişmektedir. Klasik söylemlerin dışına çıkılarak gerçekten de sadece yukarıda bahsi edilen kavramlara bağlı olarak mı değişmekte yoksa bunların dışında da diğer faktörlerle doğrudan ya da dolaylı olarak her hangi bir değişime uğrayıp uğramadığını görmek için farklı grafikler de çizildi. Parçacığın sahip olduğu ortalama hız sıcaklığa bağlı olarak değiştiğinden dolayı çarpışma frekansının da sıcaklıkla bir ilişkisi var mı diye bakıldığında, her hangi bir etkileşimin olmadığı ve etkileşimin aylar arasında benzerlik arz ettiği Şekil 6.16'dan görülmektedir. Hatta artan sıcaklıkla ters orantılı olarak azaldığı da ifade edilebilir.

Çarpışma frekansı ile H_2 molekülü arasında lineer bir değişimin olduğu Şekil 6.17'den görülmektedir. Grafiğin bu şekilde çıkması beklenen bir durumdur. Günlere bakıldığında değişimin aynı olduğu anlaşılmaktadır.

Toplam arpıřma sayısı olarak ifade edilen, $Z_{O^+H_2}$ 'nin, iyonkuredeki iyon sıcaklıęı, O^+ iyonu ve H_2 molekl yoęunluęu ile olan etkileřimi sırasıyla řekil 6.18, řekil 6.19 ve řekil 6.20'de verildi.



řekil 6.18. Toplam arpıřma sayısının iyon sıcaklıęı ile deęiřimi



Şekil 6.18'den, sıcaklık sürekli olarak artış gösterirken, Z_{O+H_2} 'de ise iniş ve çıkışlar görülmektedir. Sıcaklığın yaklaşık olarak 250 ile 800 Kelvin olduğu bölgeler arasında, toplam çarpışma sayısındaki değişim zaman zaman artış zaman zaman azalış göstermiş buna karşın 800 Kelvin'den sonra sıcaklık artışına rağmen çarpışma sayısı doğrusal olarak azalmıştır. Yani sıcaklığın artmaya devam ettiği iyonkürenin üst yüksekliklerinde çarpışma sayısı düşüş göstermektedir.

Yine aylar arasındaki değişime bakıldığında, değişimlerin nerdeyse aynı olduğu yalnızca Aralık ayında ~600 ile 700 Kelvin'lik küçük bir sıcaklık aralığında bir farklılaşma olduğu tespit edilmiştir.

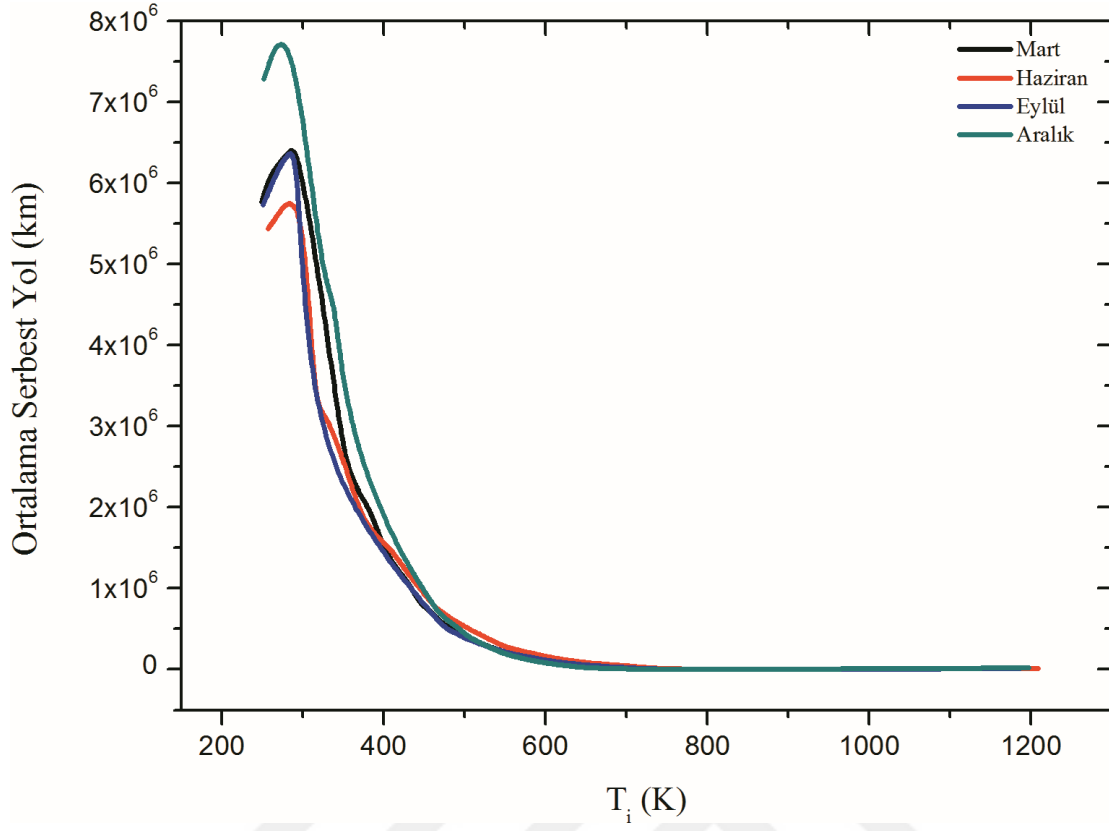
Toplam çarpışma sayısı oksijen iyonu yoğunluğunun oldukça düşük olduğu bölgelerde yoğunluktan bağımsız olarak artmış ve en büyük değerine ulaşmıştır. Sonrasında bu artış eğilimi yerini azalışa bırakarak başlangıç seviyesine dönmüştür. Bu seviyeden sonra O^+ yoğunluğu artarak en yüksek seviyeye ulaşana kadar Z_{O+H_2} değeri de artmış ve akabinde yoğunluk düştükçe Z_{O+H_2} 'nin de azaldığı Şekil 6.19'dan görülmektedir.

Aylar arasındaki ilişkiye bakılacak olunursa, dört gün içinde değişimlerin benzer olduğunu söylenebilir. Ancak, Aralık ayında yarım bir elips olarak tanımlayabileceğimiz eğrinin açıklığı diğer üç aya göre daha fazladır.

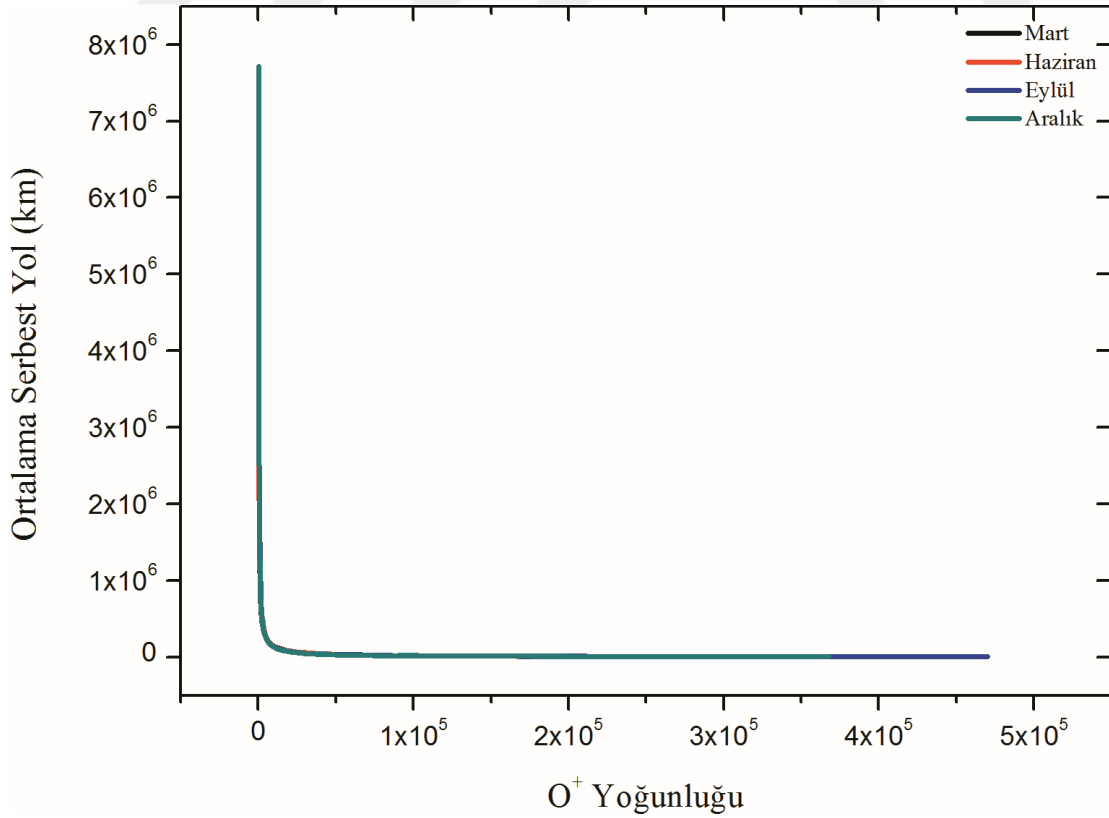
Şekil 6.20'den de anlaşılacağı gibi, H_2 yoğunluğunun maksimum olduğu bölgeden $\sim 2 \times 10^6$ mertebesine düştüğü noktaya kadar, yoğunlukla Z_{O+H_2} arasında doğrusal bir ilişkinin olduğu, yani düşüş eğiliminde olan H_2 yoğunluğu ile Z_{O+H_2} 'nin de azaldığı görülmektedir. Bu mertebeden sonra azalan H_2 yoğunluğuna rağmen Z_{O+H_2} 'nin artmaya başlayarak en yüksek değerine ulaştığı ve tepe değerinden sonra H_2 yoğunluğundaki hafif düşüş ile birlikte keskin bir azalmanın olduğu tespit edilmiştir.

Dört gün için artış ve azalış eğilimlerinin benzer olduğu Şekil 6.20'den görülmektedir.

Ortalama serbest yolun iyonküredeki iyon sıcaklığı ve O^+ yoğunluğu ile olan ilişkisi Şekil 6.21 ve Şekil 6.22'de verildi.



Şekil 6.21. Ortalama serbest yol ile iyon sıcaklığı değişimi



Şekil 6.22. Ortalama serbest yolun oksijen yoğunluğu ile olan değişimi

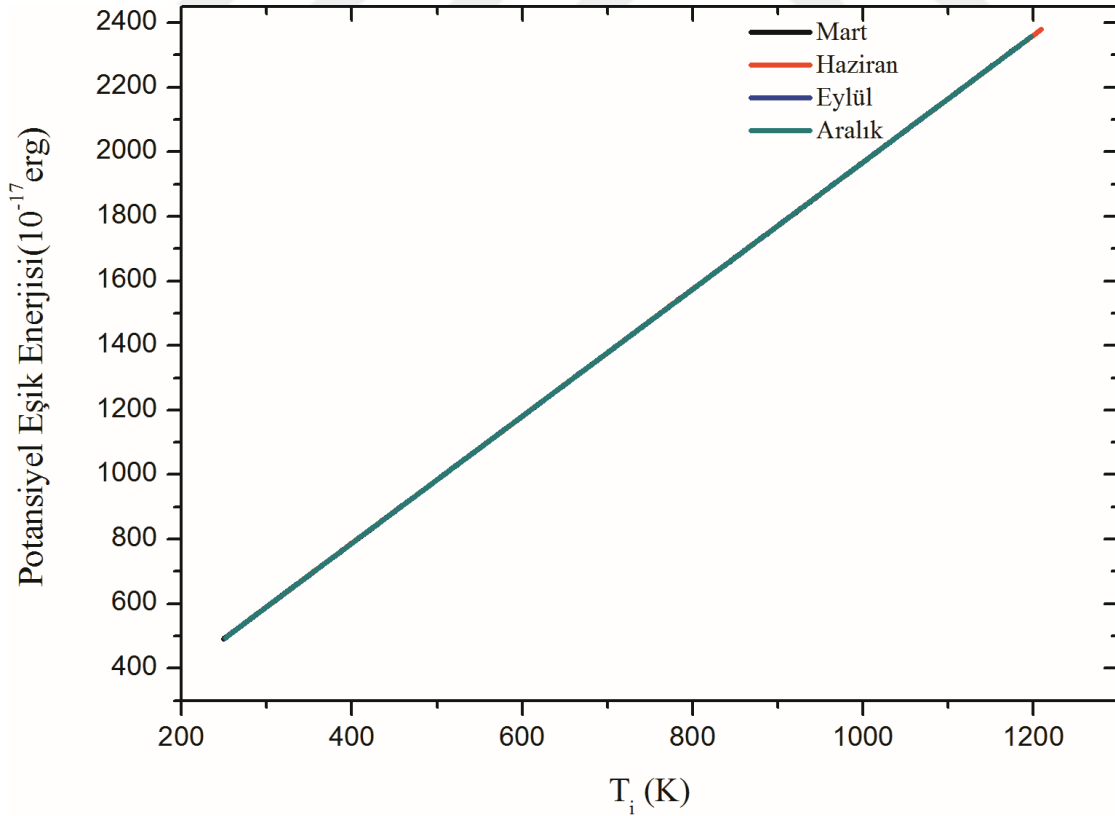
Şekil 6.21, ortalama serbest yolun başlangıç değerinden maksimuma ulaşmaya kadar artan sıcaklıkla doğru orantılı olarak değiştiğini göstermektedir. En büyük değerinden sonra sıcaklıktaki artışa rağmen azalmaya başladığı tespit edilmiştir. Yani sıcaklığın ~300 Kelvin'den 750 ile 850 Kelvin değerine ulaşmasına kadar ortalama serbest yolun ters orantılı olarak azaldığı görülmektedir. Bu sıcaklık aralığından itibaren artan sıcaklıkla beraber ortalama serbest yolunda hafif bir biçimde arttığı gözlenmiştir.

Dört gün için, yukarıda ifade edilen etkileşimler noktasında herhangi bir farklılık yoktur.

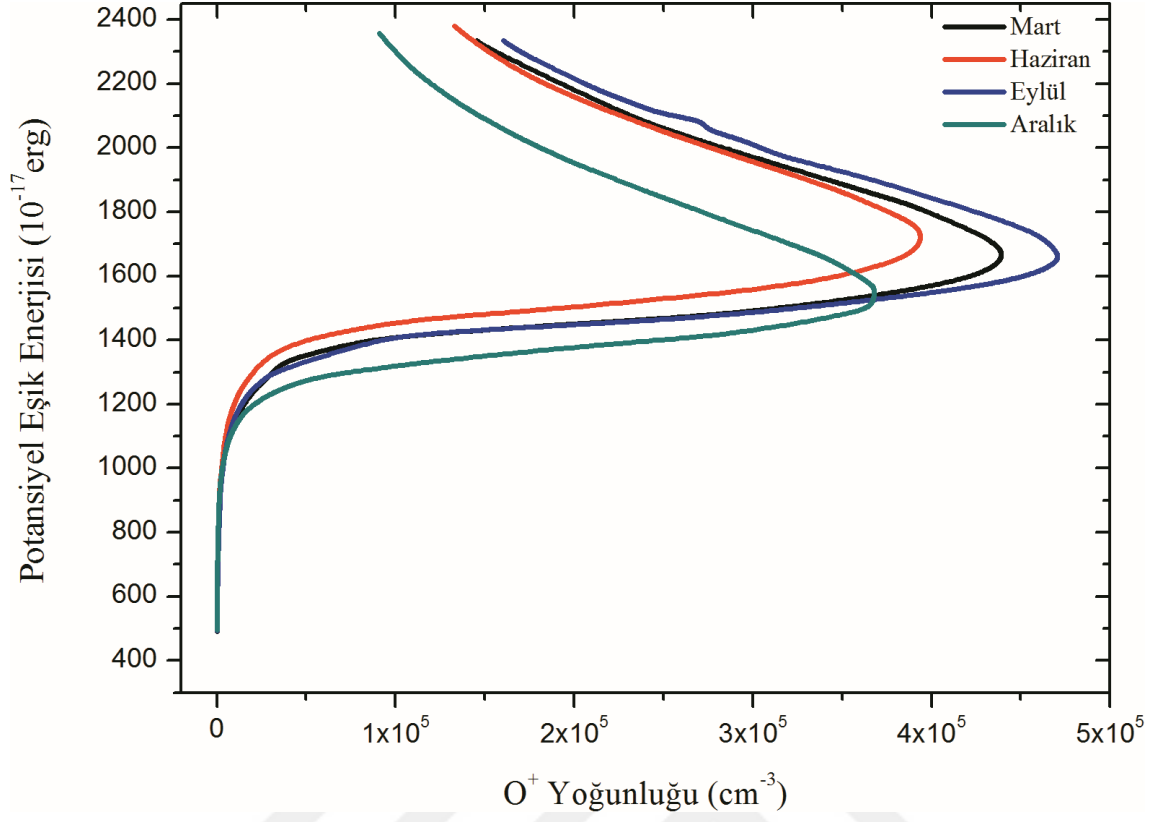
Şekil 6.22'den, oksijen iyon yoğunluğu ile yine aynı parçacığa ait ortalama serbest yol ile olan etkileşime bakıldığında, serbest yol ile yoğunluk arasında ters orantılı bir etkileşim olduğu görülmektedir. Zaten ortalama serbest yolun hesaplandığı denklem (3.24)'den de anlaşılacağı üzere yoğunluk artışı ile ters orantılı olduğu anlaşılmaktadır.

Yine dört ayrı güne bakıldığında aylar arasında herhangi bir farklılığın olmadığı da belirtilmesi gereken bir diğer noktadır.

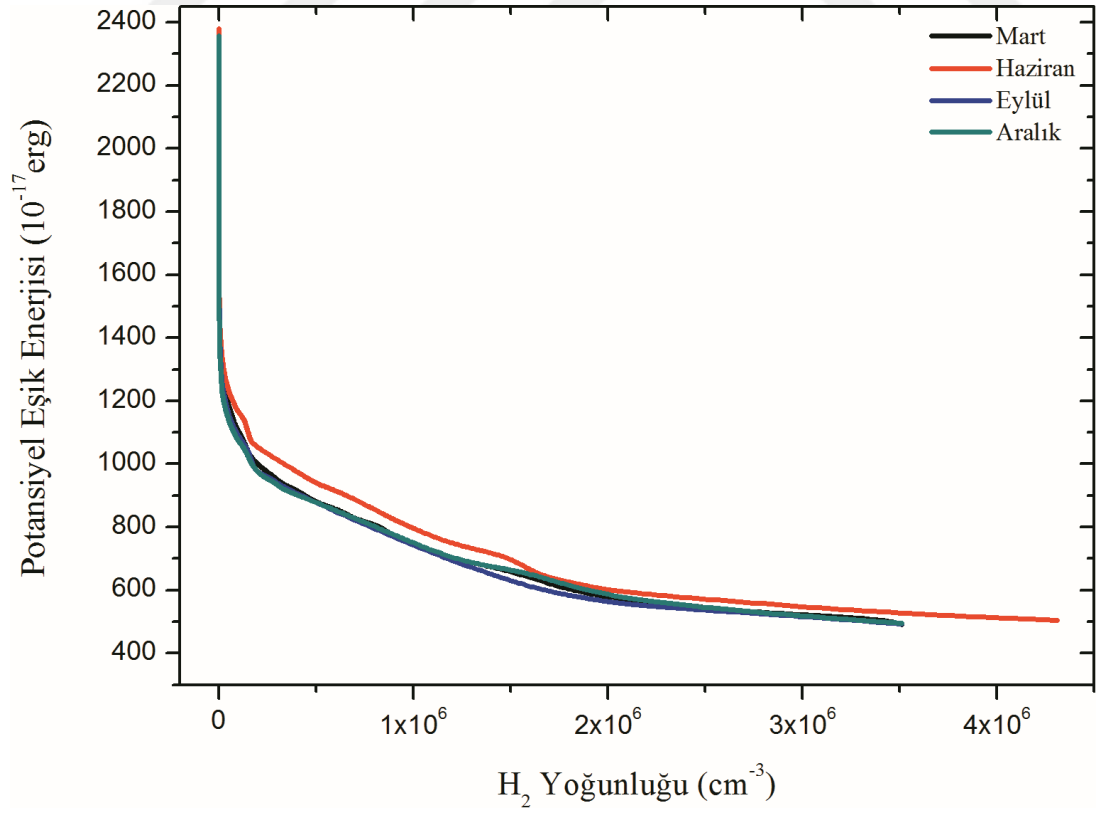
Potansiyel eşik enerjisinin sırasıyla; iyon sıcaklığı, O^+ iyonu ve H_2 molekül yoğunlukları ile olan ilişkileri Şekil 6.23, Şekil 6.24 ve Şekil 6.25'de verildi.



Şekil 6.23. Potansiyel eşik enerjisinin iyon sıcaklığıyla değişimi



Şekil 6.24. Potansiyel eşik enerjisinin O^+ yoğunluğu ile değişimi



Şekil 6.25. Potansiyel eşik enerjisinin H_2 yoğunluğu ile değişimi

Şekil 6.23'den potansiyel eşik enerjisi artarken iyon sıcaklığının da arttığı görülmektedir. Yani potansiyel eşik enerjisi ile iyon sıcaklığı arasında doğru orantılı bir değişim vardır. Aylar arasındaki etkileşime bakıldığında birebir benzerlik olduğu görülmektedir.

Şekil 6.24'den potansiyel eşik enerjisinin O^+ iyon yoğunluğunun oldukça düşük olduğu bölgelerde yoğunluğa bağlı olmadan şiddetli bir biçimde arttığı görülmektedir. F bölgesine doğru çıkıldıkça oksijen iyon yoğunluğu da artmaya başlamış ve potansiyel eşik enerjisindeki şiddetli artış yerini hafif bir artışa bırakmıştır. Yoğunluktaki azalmayla birlikte yani üst yüksekliklere doğru çıkıldıkça potansiyel eşik enerjisi yoğunluktan bağımsız olarak artmaya devam etmiştir.

Dört gün için yukarıda ifade edilen etkileşimler arasında büyük bir fark yoktur.

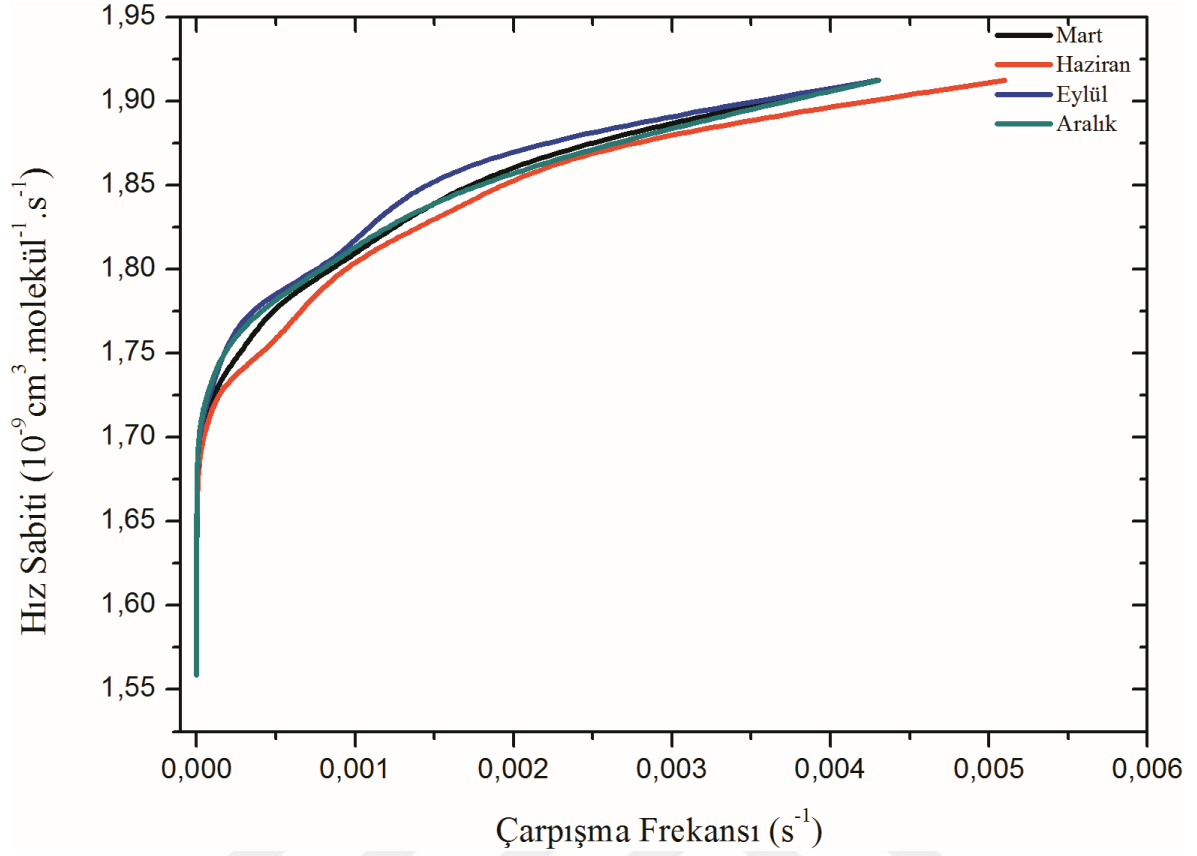
Şekil 6.25'den, H_2 yoğunluğunun maksimum olduğu noktadan azalmaya başlaması ile potansiyel eşik enerjisinde artışın olduğu ayrıca yoğunluğun oldukça düşük olduğu bölgeden itibaren enerjinin bu durumdan etkilenmeden keskin bir yükselme ile artarak devam ettiği görülmektedir. Potansiyel eşik enerjisinin O^+ iyonu ile olan ilişkisinin incelendiği bir önceki şekilde, eşik enerjisi ile yoğunluk arasında ters ve doğru orantılı etkileşimler tespit edilmişti ancak Şekil 6.25'den enerjideki değişimle H_2 yoğunluğu arasında herhangi bir ilişkinin olmadığı anlaşılmaktadır.

Etkileşim noktasında günler arasında herhangi bir farklılığın olmadığı da tespit edilenler arasındadır.

6.3.2. Kinetik Teori Model Sonuçları ile Kuantum Mekaniksel Dinamiklerin İlişkisi

Bu bölümde kuantum dalga paket metodu yöntemi ile elde edilen, reaksiyon hız sabiti ve tesir kesiti verileri ile bu verilere uygulanan gaz kinetik teori modelleri arasındaki ilişkilerin incelendiği grafiklere yer verilmiştir.

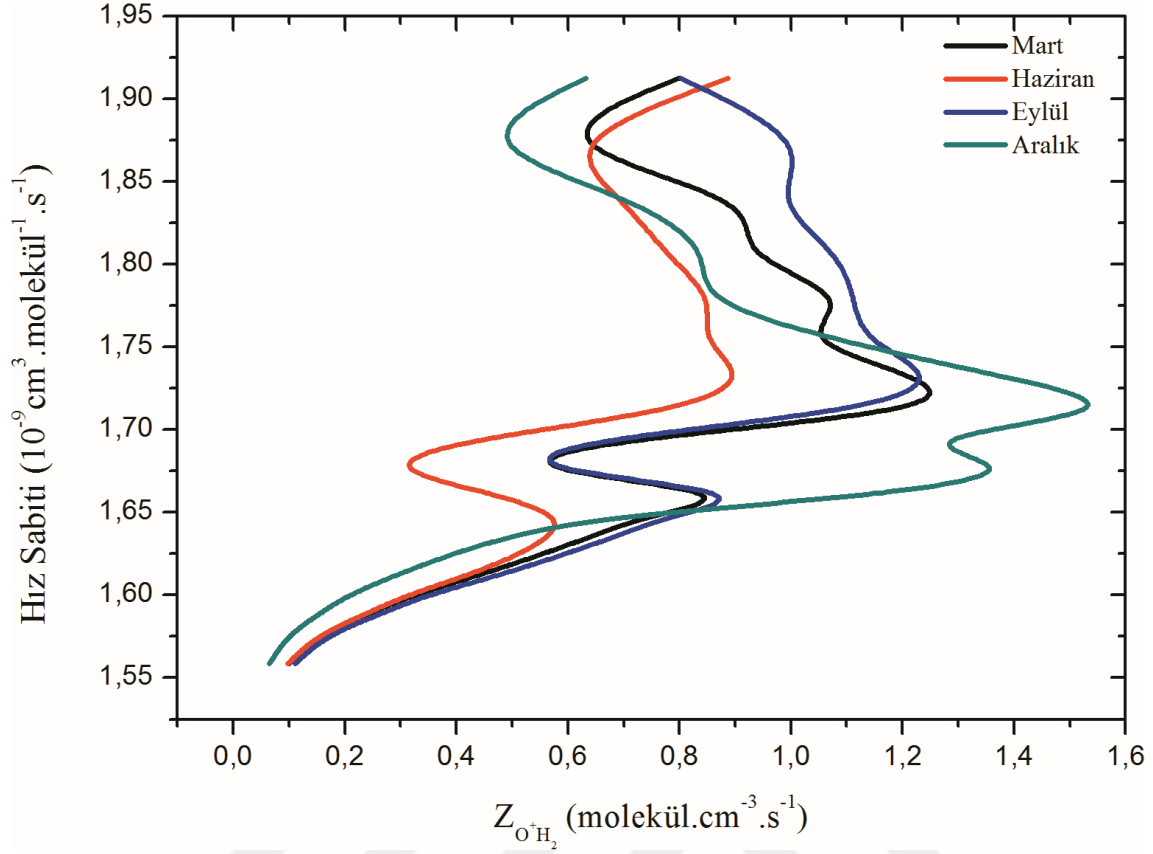
İlk olarak, reaksiyonun oluşum hızı hakkında bize bilgi veren reaksiyon hız sabitinin, çarpışma frekansı, ν , toplam çarpışma sayısı, $Z_{O^+H_2}$, ortalama serbest yol, λ ve potansiyel eşik enerjisi, U_0 gibi kinetik teori modelleri ile olan değişimi sırasıyla; Şekil 6.26, Şekil 6.27, Şekil 6.28 ve Şekil 6.29'da verildi.



Şekil 6.26. Reaksiyon hız sabitinin çarpışma frekansı ile değişimi

Verilen grafikten, reaksiyon hız sabitinin $1,7 \times 10^{-9}$ mertebesine düşünceye kadar çarpışma frekansında da doğru orantılı bir düşüş olduğu, bu seviyeden sonra karşılıklı azalmanın devam ettiği ancak düşme oranlarının aynı olmadığı tespit edildi.

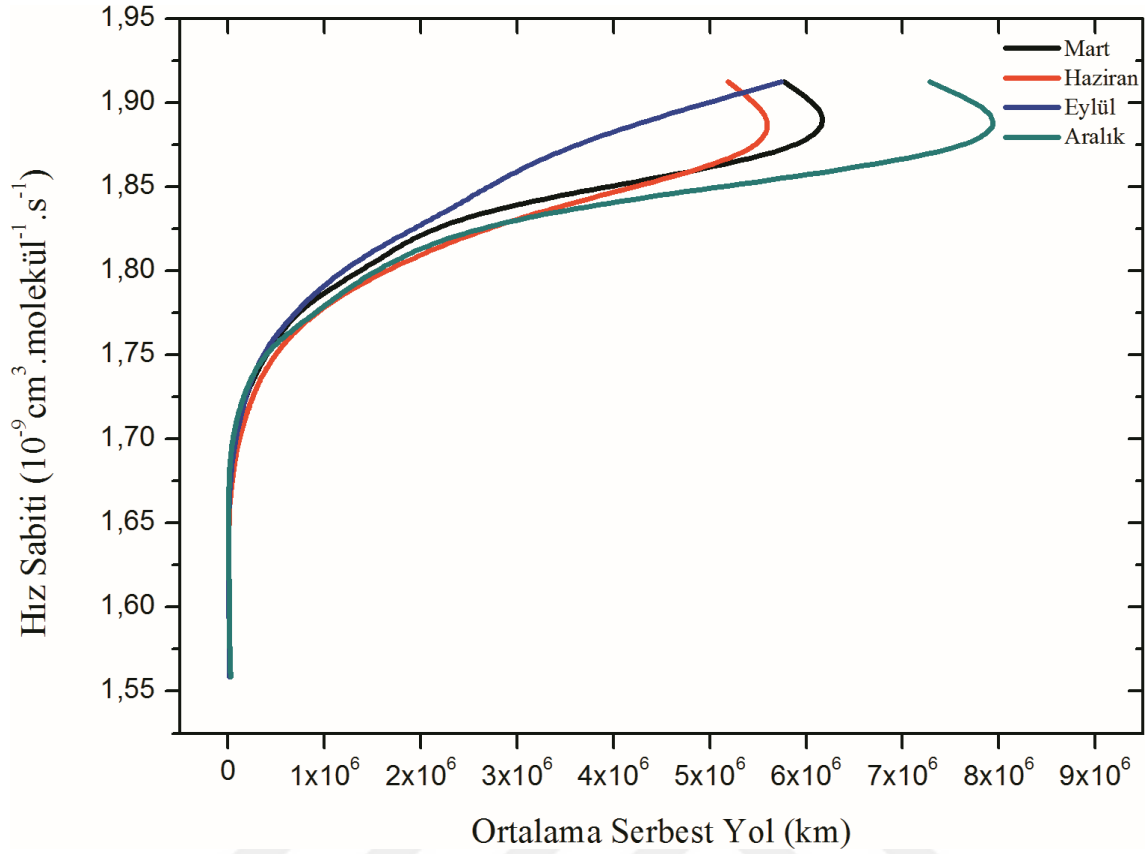
Bu etkileşim oranlarının aylık değişimlerine bakıldığında ise herhangi bir farklılığın olmadığı görülmektedir.



Şekil 6.27. Reaksiyon hız sabitinin toplam çarpışma sayısı ile değişimi

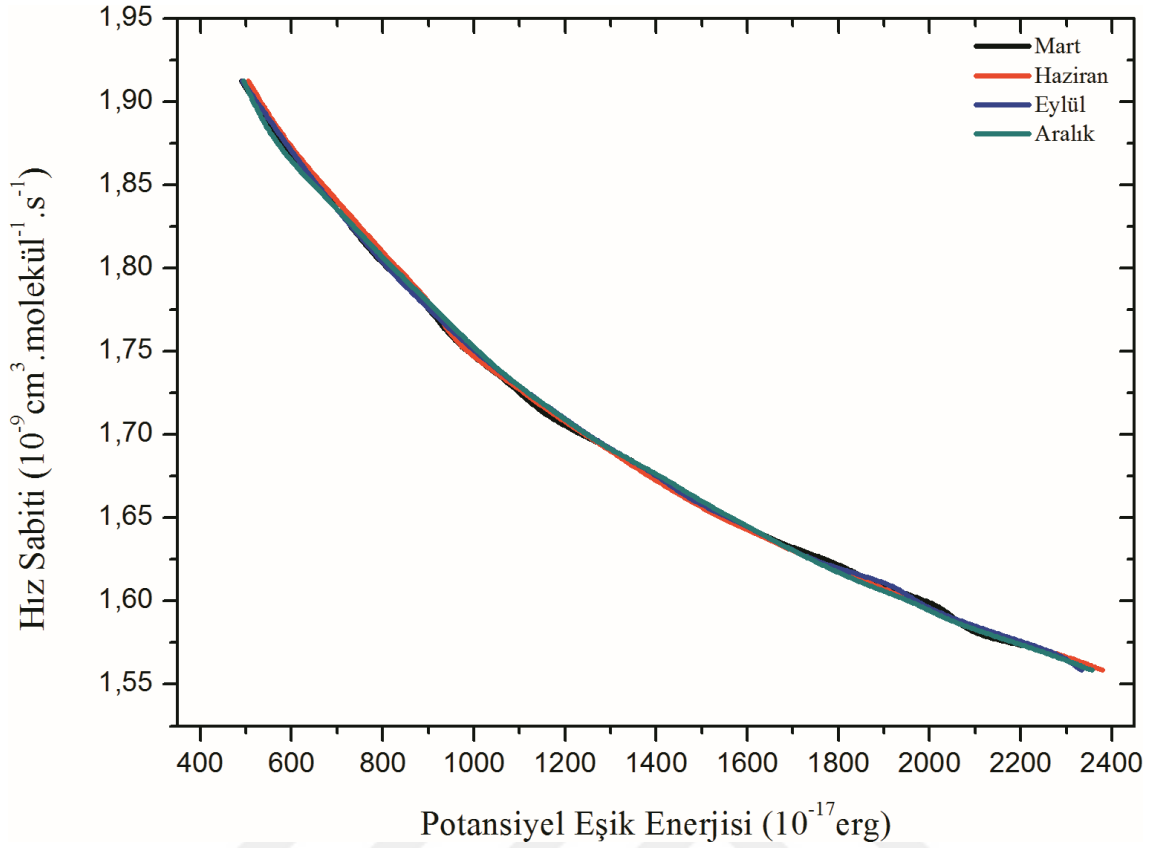
Reaksiyon hız sabiti ile toplam çarpışma sayısı arasındaki ilişkinin incelendiği grafiğe bakıldığında ilgi çekici değişimlere rastlandı. Grafikteki dört ayrı güne ait eğrilerin, iyonküredeki elektron yoğunluğunun yükseklikle olan değişim eğrisiyle benzerlik göstermesi dikkate değer bir durumdur.

Şekil 6.27'den, etkileşimin yer yer doğru yer yer ters orantılı olarak değiştiği görülmektedir. Mart, Haziran ve Eylül aylarında uyumlu bir değişim görülürken, Aralık ayında reaksiyon hız sabitinin $\sim 1,65$ ile $1,75e-9$ arasında değiştiği bölgede farklılaşma olduğu tespit edilmiştir.



Şekil 6.28. Reaksiyon hız sabitinin ortalama serbest yola göre değişimi

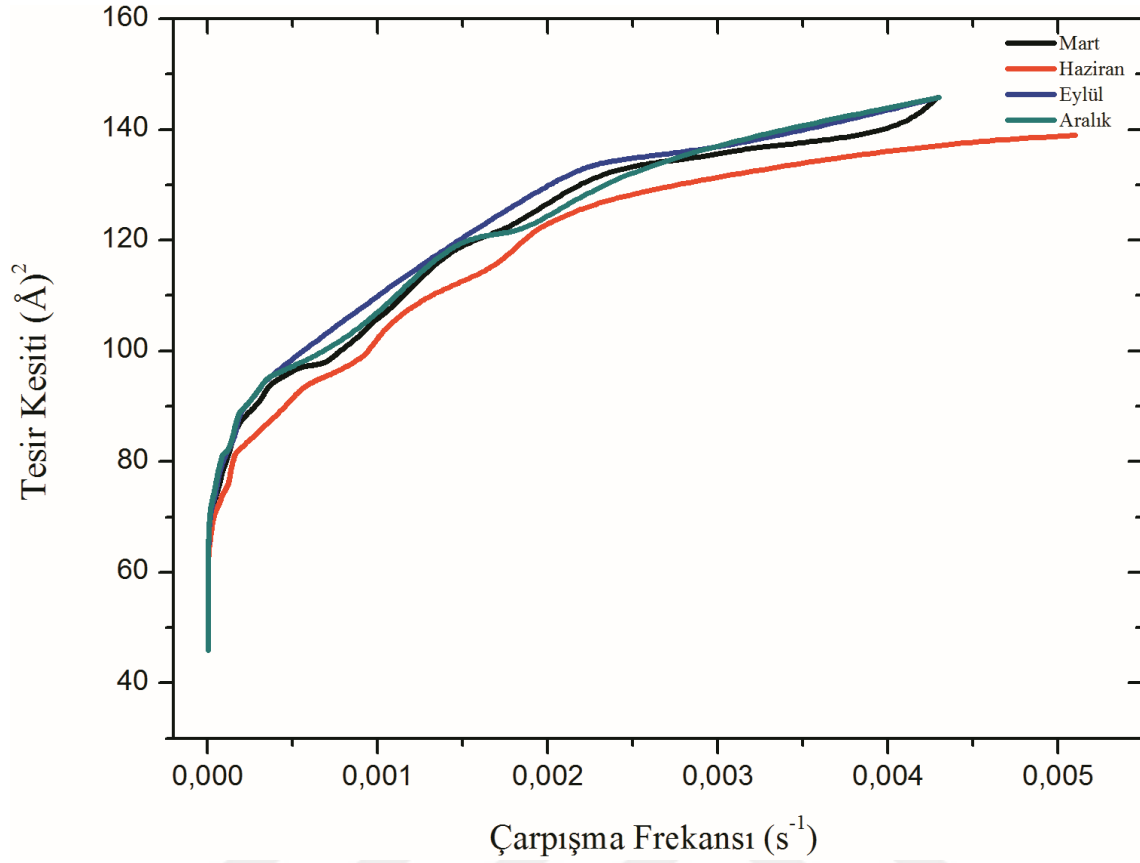
Reaksiyon hız sabitinin ortalama serbest yol ile olan ilişkisinin incelendiği Şekil 6.28'den, başlangıç yükseklikleri civarında Mart, Haziran ve Aralık aylarındaki çok küçük bir aralıkta hız sabiti düşerken ortalama serbest yolda bir artış görülmektedir. Sonrasında hız sabitinin $1,75 \times 10^{-9}$ olduğu seviyeye kadar karşılıklı düşüşün devam ettiği ve bu seviyeden sonra hız sabitinde sert bir düşüş görülürken ortalama serbest yolda yumuşak bir azalmanın olduğu tespit edilmiştir.



Şekil 6.29. Reaksiyon hız sabitinin potansiyel eşik enerjisi ile değişimi

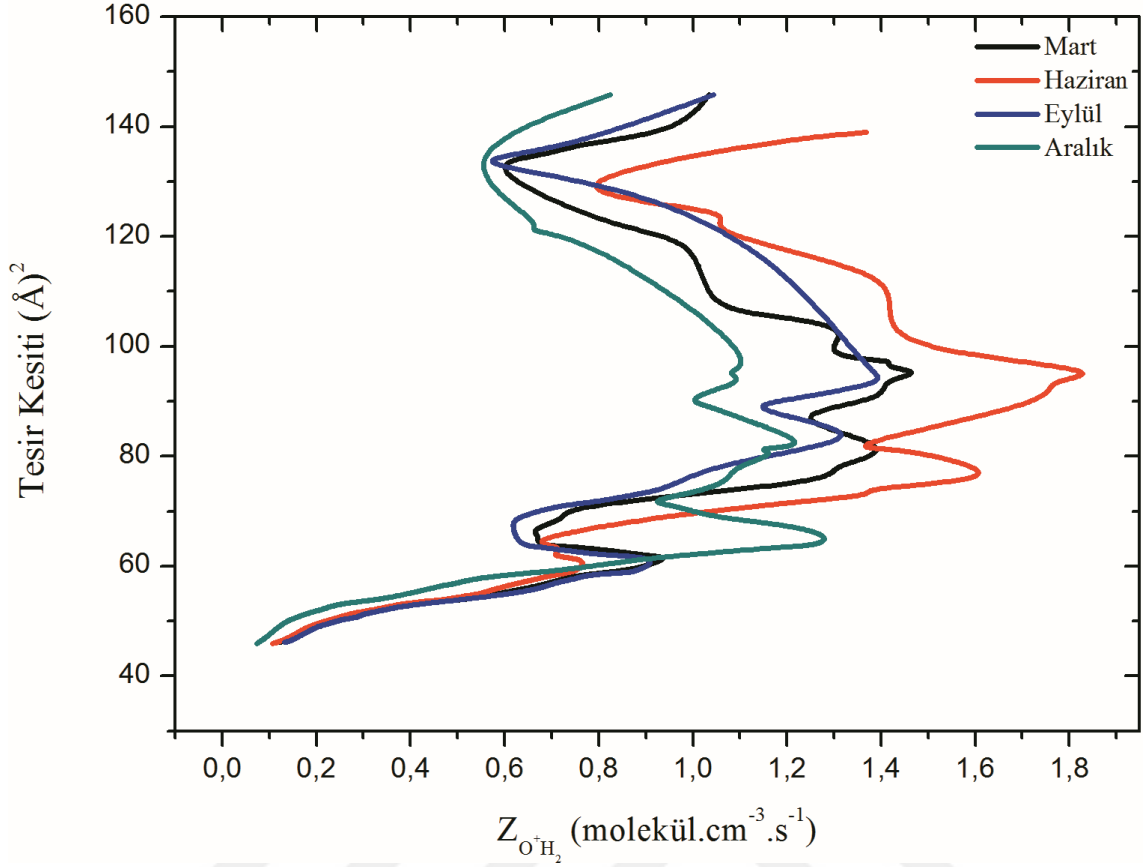
Verilen grafikten, reaksiyon hız sabiti ile potansiyel eşik enerjisi arasında ters orantılı bir etkileşimin olduğu görülmektedir. Daha önce, kuantum mekaniksel bakış açısına göre mevcut reaksiyonun gerçekleşebilmesi için herhangi bir enerji gereksinimine ihtiyaç olmadığı ancak klasik bakış açısına göre çarpışmanın gerçekleşebilmesi için minimum enerji aralığının aşılması gerektiği belirtilmişti. Reaksiyon hız sabitinin klasik bakış açısına göre hesaplanan potansiyel eşik enerjisi ile ters orantılı olarak değiştiğinin gösterildiği bu grafikten kuantum mekaniksel bakış açısı ile uyumluluk olduğu tespit edilmiştir. Yine günler arasındaki ilişkiye bakıldığında, yukarıda bahsi geçen etkileşim için herhangi bir farklılığın olmadığı da Şekil 6.29'dan görülmektedir.

Kuantum mekaniksel yöntemle hesaplanmış bir diğer parametre olan toplam tesir kesiti ile uygulandığı kinetik teori modelleri arasındaki ilişki sırasıyla Şekil 6.30, Şekil 6.31, Şekil 6.32 ve Şekil 6.33'de verildi.



Şekil 6.30. Reaksiyon tesir kesitinin çarpışma frekansı ile değişimi

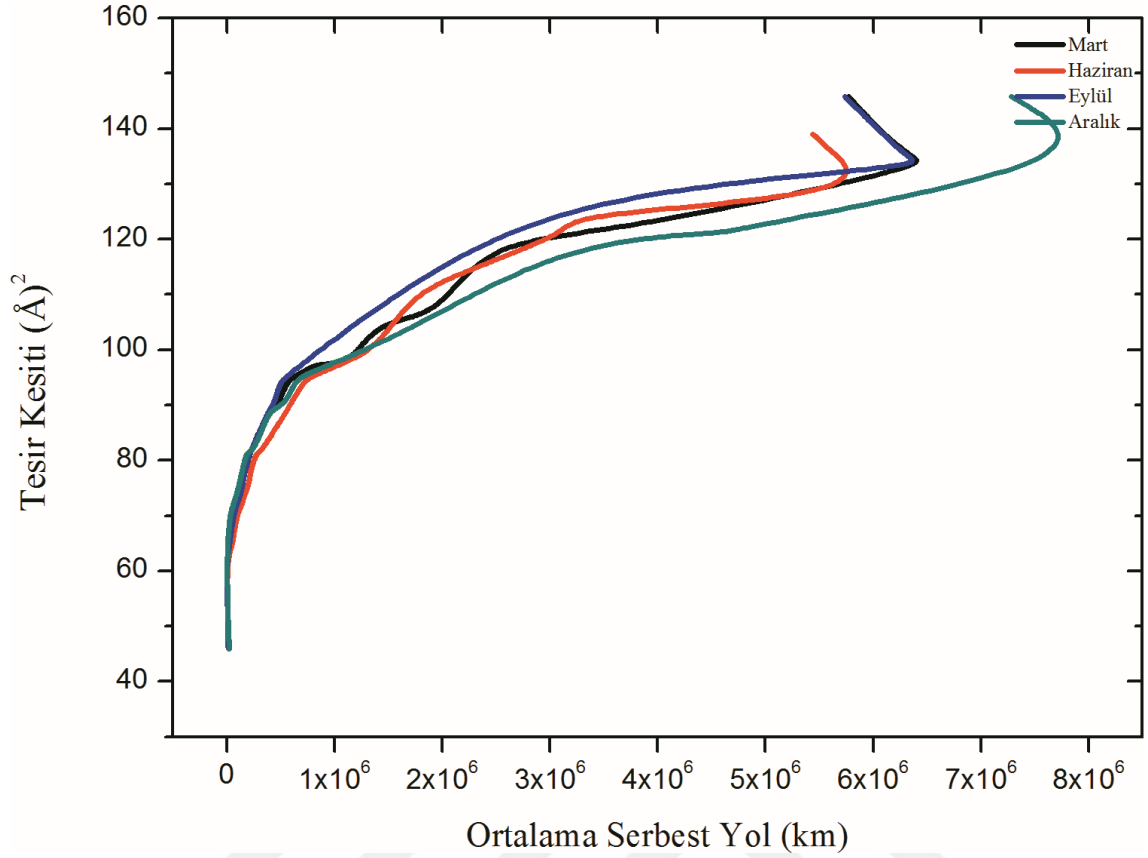
Şekil 6.30'dan, toplam tesir kesitinin $\sim 80 \text{ Å}^2$ olduğu bölgeye düşünceye kadar çarpışma frekansında da doğru orantılı bir düşüş olduğu, bu seviyeden sonra karşılıklı azalmanın devam ettiği ancak düşme oranlarının aynı olmadığı tespit edildi. Bu etkileşim oranlarının aylık değişimlerine bakıldığında ise herhangi bir farklılığın olmadığı görülmüştür.



Şekil 6.31. Reaksiyon tesir kesitinin toplam çarpışma sayısı ile değişimi

Reaksiyon hız sabiti ile toplam çarpışma sayısı arasında ki ilişkinin verildiği Şekil 6.26'a benzer sonuçlar bu grafikte de tespit edildi. Şekil 6.31'in Şekil 6.27'e göre daha karmaşık olmasının sebebi tesir kesiti veri sıklığının hız sabiti veri sıklığına göre daha fazla olmasıdır. Grafikteki dört aya ait eğrilerin, iyonküredeki elektron yoğunluğunun yükseklikle olan değişim eğrisiyle benzerlik gösterdiği ilgi çekici bir durumdur.

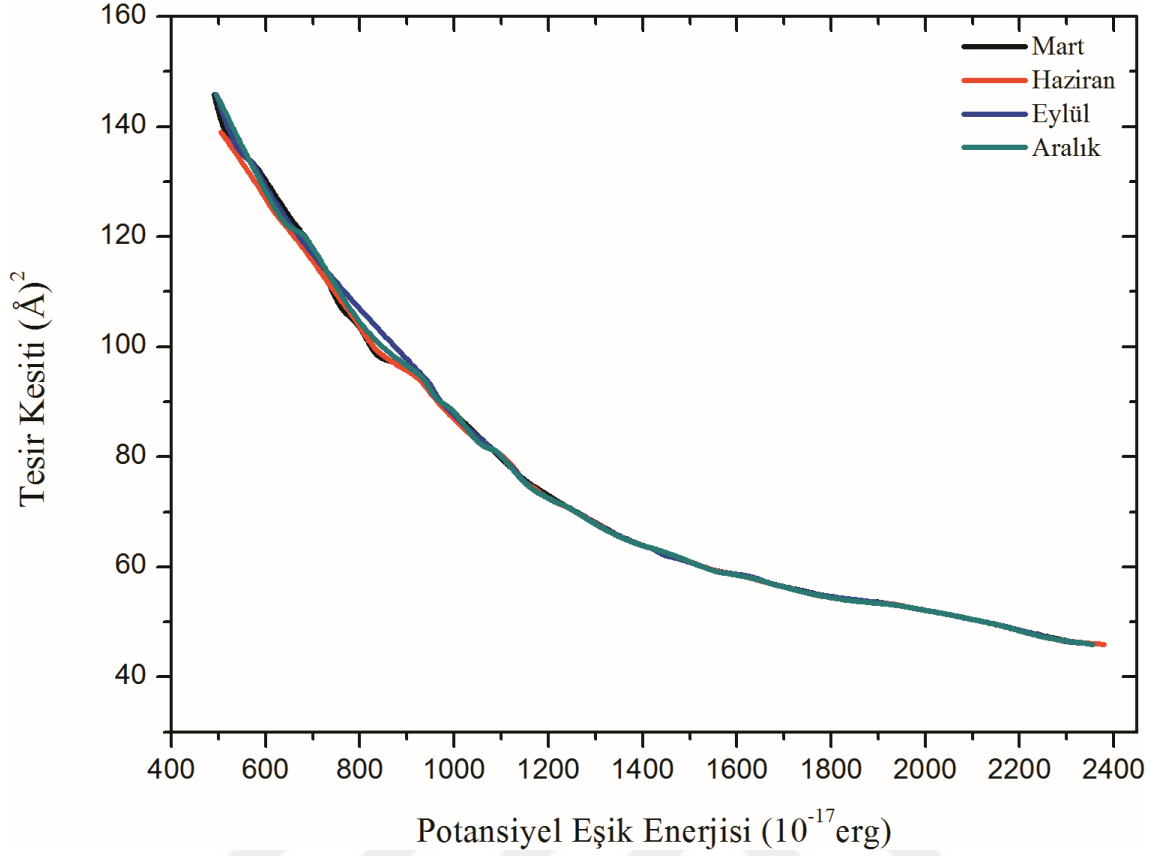
Şekil 6.31'den, etkileşimin bazen doğru bazen de ters orantılı olarak değiştiği görülmektedir. Etkileşim Mart, Haziran ve Eylül aylarında benzerlik arz ederken, Aralık ayında reaksiyon tesir kesitinin sadece ~60 ile 70 (Å)² olduğu aralıkta bir farklılaşmanın olduğu görülebilir.



Şekil 6.32. Reaksiyon tesir kesitinin ortalama serbest yol ile değişimi

Şekil 6.27 ve Şekil 6.31’de ortaya çıkan durumun bir benzerine de Şekil 6.28 ve Şekil 6.32 grafiklerinde rastlandı. Toplam tesir kesitinin ortalama serbest yol ile olan ilişkisinin incelendiği Şekil 6.32’den, başlangıç yükseklikleri civarında dört gün için çok küçük bir aralıkta tesir kesiti azalırken ortalama serbest yolda artış tespit edildi. Sonrasında tesir kesitinin $\sim 90 (\text{\AA})^2$ olduğu bölgeye kadar karşılıklı azalma oranlarının devam ettiği görülmektedir. Ancak bu bölgeden sonra tesir kesitinde şiddetli bir düşüş görülürken ortalama serbest yolda yumuşak bir azalmanın olduğu tespit edilmiştir. Yani düşme oranlarının aynı olmadığı söylenebilir.

Etkileşime aylık bakımdan bakıldığında, herhangi bir farklılaşmanın olmadığı da Şekil 6.32’den görülebilir.



Şekil 6.33. Reaksiyon tesir kesitinin potansiyel eşik enerjisi ile değişimi

Verilen grafikten, tesir kesiti ile potansiyel eşik enerjisi arasında ters orantılı bir etkileşimin olduğu görülmektedir. Kuantum mekaniksel bakış açısına göre çarpışmanın gerçekleşebilmesi için herhangi bir enerji gereksinimine ihtiyaç olmadığı klasik bakış açısına göre çarpışmanın gerçekleşebilmesi için minimum enerji aralığının aşılması gerektiği bilinmektedir.

Bu grafikte toplam tesir kesitinin, klasik bakış açısına göre hesaplanan potansiyel eşik enerjisi ile ters orantılı olarak değişmesi kuantum mekaniksel bakış açısını desteklemektedir.

Yine günler arasındaki korelasyona bakıldığında, yukarıda bahsi geçen ilişki için herhangi bir etkileşimin olmadığı da Şekil 6.33'den görülebilir. Ayrıca dört ay arasında bir farklılığın olmadığı da tespit edilmiştir.

7. TARTIŞMA

İyonküre plazmasını çarpışmalı ve çarpışmasız olarak ikiye ayırabiliriz. İyonküre üzerine yapılan çalışmaların büyük bir bölümünde oldukça karmaşık mekanizmalarından dolayı parçacık çarpışmaları genellikle ihmal edilmiştir. Çarpışmalı plazmaya dahil edilen iyonküre kimyası da halen daha cevaplanmamış bir çok soruyu içinde barındırmaktadır. İyonküreyi oluşturan atom, iyon ve moleküller arasındaki etkileşimlerin, plazmafiziksel (klasik) ya da kuantum mekaniksel yöntemlerle hesaplanmasındaki büyük zorluklar beraberinde atmosferin bu bölgesinin kimyasal yapısının net bir şekilde bilinmemesini getirmiştir. Bu doktora tez çalışması ile temelde iyonküreyi oluşturan parçacık etkileşimlerinin ve reaksiyon dinamiklerinin hesaplanarak iyonküre kimyasına katkı yapması hedeflenmiştir.

$\text{O}^+ + \text{H}_2 \rightarrow \text{OH}^+ + \text{H}$ reaksiyonuna ait dinamikler olan toplam çarpışma tesir kesiti ve reaksiyon hız sabiti verilerinin iyonküresel sıcaklık ve yükseklikle olan değişimlerine bakıldığında ters orantılı bir değişimin olduğu tespit edilmiştir. En genel haliyle, reaksiyonun gerçekleşme ihtimaliyeti olarak tanımlayacağımız tesir kesitinin sıcaklık ve yükseklikle değişiminden hareketle artan yükseklik ve sıcaklıkla beraber reaksiyonun gerçekleşme olasılığının da aynı ölçüde düşüş gösterdiğini söyleyebiliriz. Reaksiyon için bir saniyede birim hacimde girenler kısmından ürünler tarafına geçen parçacık sayısının belirlenme ölçüsü olarak tanımlayacağımız reaksiyon hız sabitinin hem sıcaklık hem de yüksekliğin azalmasıyla artış gösterdiği tespit edildi. Alt yüksekliklerde hem reaksiyonun gerçekleşme ihtimaliyeti hem de oluşma hızının arttığı görüldü.

O^+ iyon yoğunluğunun hız sabiti ve tesir kesiti değerleriyle olan değişimi incelendiğinde, yoğunluğun düşük olduğu alt iyonküreden artarak maksimum değerine ulaştığı yüksekliğe kadar hız sabiti ve tesir kesiti ile arasında ters orantılı bir değişimin olduğu fakat yoğunluğun düşmeye başladığı bölgeden itibaren doğru orantılı bir etkileşim tespit edildi. H_2 yoğunluğu ile hız sabiti ve tesir kesiti ilişkisine bakıldığında yoğunlukla reaksiyon dinamikleri arasında doğru orantılı bir etkileşimin olduğu görüldü.

Kuantum mekaniksel olarak reaksiyona giren parçacık yoğunluklarının hız sabiti ve tesir kesiti gibi reaksiyon dinamiklerinin hesaplanmasında herhangi bir etkisinin olmadığı bilinmektedir. Ancak yukarıda ortaya koyduğumuz sonuçlardan hareketle bir etkinin var olduğundan bahsetmek mümkündür. Bu reaksiyon için hareketsiz kabul ettiğimiz H_2

molekül yoğunluğu etkisinin hareketli kabul ettiğimiz O^+ iyon yoğunluğu etkisinden daha fazla olduğu dikkat çekilmesi gereken bir durumdur.

Ekinoks ve gün dönümü tarihleri için hem O^+ hem de H_2 yoğunluklarının reaksiyon dinamikleri ile olan ilişkilerinde herhangi bir farkın olmadığı sadece eğrilerin yüksekliklerinde küçük farklılıklar tespit edilmiştir. Bunun sebebi de yoğunluk değerlerinin aylara göre değişkenlik arz etmesi ve tesir kesiti hesaplama aralıklarının hız sabiti verilerine göre daha hassas ve küçük olmasından dolayıdır.

O^+ ve H_2 parçacıkları arasında gerçekleşen reaktif çarpışmada kuantum mekaniksel olarak herhangi bir enerji gereksinimine ihtiyaç yoktur ve bu çarpışma ekzotermik bir reaksiyondur. Kinetik teori modellerinde tanımladığımız toplam çarpışma sayısı hesabında potansiyel eşik enerjisi de bulunmaktadır. Burada eşik enerjisini direkt sıfır alabilir ve toplam çarpışma hesabını da bu şekilde yapabiliriz ancak bunu yapmak yerine eğer bir enerji gereksinimine ihtiyaç duyulacaksa bunun ne boyutlarda olacağını görmek istedik. Eşik enerjisinin ifade edildiği grafiklerden de anlaşılabileceği üzere bulunan sonuçların Tablo 6.1’de verilen çarpışma enerjilerinden küçük oldukları tespit edildi. Buda kuantum mekaniksel olarak beklenen sonuçların bizim hesaplamalarımızla örtüştüğünü göstermektedir. Eşik enerjisi, iyonküresel yükseklik ve sıcaklık artışı ile doğrudan ilişkilidir. Sıcaklık ve yükseklik arttıkça eşik enerjisi de artmaktadır.

Diğer taraftan eşik enerjisi ile parçacık yoğunlukları arasında direkt bir etkileşimden bahsedemeyiz. Çizilen grafiklerden de anlaşılabileceği üzere H_2 yoğunluğunun çok çok azaldığı bölgeden itibaren O^+ yoğunluğundaki kuvvetli artışla beraber enerjideki şiddetli yükselişin yerini hafif bir yükselişe bırakması, yoğunluk oranlarındaki artışın enerjiyi dolaylı olarak ters orantılı bir şekilde etkilediğini göstermektedir. Potansiyel eşik enerjisinin kuantum mekaniksel parametrelerle olan etkileşimine bakıldığında, hem toplam çarpışma sayısı hem de reaksiyon hız sabiti ile ters orantılı bir değişim göstermektedir.

Kinetik teori model sonuçlarından çarpışma frekansı ile iyonküresel parametreler arasındaki ilişki incelendiğinde, artan yükseklikle çarpışma frekansının azaldığı görülmektedir. Bunun sebebini artan yükseklikle azalan H_2 molekül yoğunluğu ile açıklamak mümkündür. Yine artan iyon sıcaklığı ile ters orantılı bir şekilde düşüş göstermiştir. Ayrıca çarpışma frekansının en büyük ve en küçük değerlerine Haziran ayında ulaşılmıştır.

Çarpışma frekansının kuantum mekaniksel niceliklerle olan ilişkisi incelendiğinde, büyük oranda doğrusal bir etkileşimden bahsedebiliriz. Çarpışma frekansı arttıkça hem

reaksiyon hız sabiti hem de toplam çarpışma tesir kesiti artış göstermiştir. Bu durumdan hareketle, kuantum mekaniksel bakış açısına göre reaksiyon dinamikleri ile özel bir parametre olan çarpışma frekansı arasında bir etkileşim yoktur ancak bulunan sonuçlar ışığında direkt olmasa bile dolaylı olarak bir etkileşimin olduğu söylenebilir. Çarpışma frekansının reaksiyon dinamikleri olan etkileşiminden, parçacığın enerjisine bağlı olduğu da ayrıca belirtilmelidir.

Ortalama serbest yolun iyonküresel parametrelerle değişimine bakacak olursak başlangıçtan 7-8 km'lik aralıkta küçük bir artış meydana gelmiştir. Bu artışın sebebi alt iyonkürenin O^+ iyon yoğunluğu bakımından oldukça fakir olması ve ölçüm tekniklerindeki yetersizliklerdir. Sonrasında Mart ayı için 117-242. km, Haziran ayı için 118-247. km, Eylül ayı için 117-250. km ve Aralık ayı için 119-221. km ler arasında artan yükseklik, sıcaklık ve yoğunlukla ters orantılı bir şekilde azalırken, bu yüksekliklerden sonra yoğunluğun düşmeye başlaması ile birlikte ortalama serbest yolun arttığı tespit edilmiştir. Serbest yolun en küçük değerine ulaştığı noktayı ideal aralık olarak tanımlayacak olursak, ideal aralığın minimum değerine Eylül ayında, maksimum değerine ise Aralık ayında ulaşılmıştır. Bunun sebebi O^+ yoğunluğundaki mevsimsel farklılıklardır. Ortalama serbest yol yoğunluk artışı ile azalır ve sıcaklıktan bağımsızdır. Artan göreceli hızlar, çarpışma tesir kesitleri ve gaz yoğunlukları serbest yolun azalmasına çarpışma frekansının artmasına sebep olurlar.

Ortalama serbest yolun kuantum mekaniksel parametrelerle olan ilişkisinden bahsedecek olursak, hem hız sabiti hem de tesir kesiti ile başlangıçtan 7-8 km lik aralık haricinde doğru orantılı bir etkileşimin olduğunu söyleyebiliriz. Kuantum mekaniksel olarak reaksiyonun gerçekleşme ihtimaliyeti ve hızı direkt olarak hareketli sayılan O^+ iyonunun sahip olduğu enerji ile ilişkilidir. Daha önceden yapılan çalışmalarda da vurgulandığı üzere, ortalama serbest yolun parçacığın enerjisi ile alakalı olduğu göz önüne alındığında, kuantum mekaniksel bakış açısı ile kinetik teori model sonuçlarından serbest yol yaklaşımının birbirleriyle tutarlılık gösterdiği tespit edilmiştir.

Ortaya konan sonuçlar ışığında gerek alt yüksekliklerde gerekse de üst yüksekliklere doğru çıkıldıkça ortalama serbest yolun oldukça büyük değerlere ulaştığı görüldü. Kuantum mekaniksel çarpışma modeli ile Coulomb çarpışma modeli benzerdir. Kısmen iyonlaşmış iyonküre plazmasında Coulomb çarpışmalarının etkisi azdır ve dolayısıyla Coulomb ortalama serbest yolunun da bu sebepten dolayı geniş olması beklen bir durumdur. Ayrıca üst yüksekliklere doğru çıkıldıkça da serbest yol çok büyür.

Son olarak kinetik teori modellerinden toplam çarpışma sayısının iyonküresel parametrelerle olan ilişkisini inceleyecek olursak, oldukça karmaşık bir etkileşimin olduğunu görürüz. Çarpışma sayısını etkileyen birçok faktör vardır, bunlar; sıcaklık, çarpışan parçacıkların yoğunlukları, toplam çarpışma tesir kesiti, enerji ve reaksiyon hız sabitidir. Toplam çarpışma sayısı artan iyonküresel yükseklik ve sıcaklıkla benzer değişimler göstermiştir. Özellikle alt iyonkürede inişli çıkışlı bir eğilim gösterirken, üst yüksekliklere doğru çıkıldıkça azalma eğilimi göstermiştir. Yükseklik arttıkça azalmanın sebebini çarpışan parçacıkların yoğunluklarındaki azalmaya bağlayabiliriz. Alt iyonküredeki bozukluğun temel sebebi, reaksiyona giren O^+ iyonu ile H_2 molekülünün varlık gösterdikleri yüksekliklerin farklı olmasından kaynaklanmaktadır. H_2 molekülünün zengin olduğu bölgelerde O^+ iyon yoğunluğu fakirdir. Elbette burada azalan tesir kesitinin de etkisi vardır ancak etkileşime giren parçacık yoğunluklarına göre bu faktörün etkisinin daha az olacağını söyleyebiliriz. Çarpışma sayısının parçacık yoğunluklarına göre değişim grafiklerinden de anlaşılabacağı üzere, O^+ iyon yoğunluğu H_2 molekül yoğunluğundan daha etkin bir rol oynamaktadır.

Toplam çarpışma sayısının kuantum mekaniksel parametrelerle olan etkileşiminde benzer değişimlere rastlandı. İlgili grafikler incelendiğinde (Şekil 6.27 ve Şekil 6.31), hız sabiti için çizilen grafikteki eğri sıklığının tesir kesiti için çizilenden daha seyrek olduğu ve şimdiye kadar yapılan tüm çarpışma sayısı hesaplamalarında maksimum değere Haziran ayında ulaşılırken, Şekil 6.27’de Aralık ayında ulaşıldığı görülmektedir. Eğri sıklığının seyrek olması hız sabiti hesabının tesir kesiti hesabına göre daha büyük aralıklarda yapılmasından dolayıdır. Şekil 6.27 için en büyük değere Haziran değil de Aralık ayında ulaşılma sebebi yapılan hesaplama değişikliğinden dolayıdır. Yani toplam çarpışma sayısının esas formülünde tesir kesiti hesaba katılırken, kinetik teori içinde hız sabitine bağlı denklem bir kereye mahsus kullanılarak hem aradaki farkın görülmesi hem de hız sabitine bağlı değişiminde var olduğu gösterilmeye çalışıldı. Çarpışma sayısı hem hız sabiti hem de tesir kesiti ile yer yer doğru yer yerde ters orantılı bir şekilde değişmektedir. Alt bölgelerde hem ters hem de doğru orantılı bir değişim söz konusu iken, üst bölgelerde doğru orantılı bir değişim vardır. Çizilen her iki grafiğe bakıldığında ilgi çekici bir bulguya rastlanmıştır. Veri sıklığının daha az olduğu Şekil 6.27 dikkatle incelendiğinde, Aralık ayı için elde edilen eğri gündüz iyonküresi elektron yoğunluk değişimine benzerken, diğer üç ay için elde edilen eğrilerde gece iyonküresi elektron yoğunluk eğrisine benzerlik göstermektedir.

Ortaya konan hesaplamalar ve çizilen grafikler neticesinde, toplam çarpışma sayısının en büyük değerine Haziran ayında ulaşılırken en küçük değerine ise Aralık ayında erişilmiştir. Çarpışma sayısındaki iniş ve çıkışları dalgalanma olarak tanımlarsak, en fazla dalgalanma Mart ayında görülürken, en az dalgalanma ise Eylül ayında görülmüştür. Yani çarpışma sayısını temel alarak, en düzenli ayı Eylül, en düzensiz ayı Mart olarak tanımlayabiliriz.

Bizim bu çalışmada ele aldığımız mevcut reaksiyonu oluşturan O^+ iyonu ve H_2 molekülü iyonküre için önemli bileşenlerdir. Hidrojen evrende en çok bulunan elementtir. Moleküler halde bulunan hidrojen ise dev gezegenlerin atmosferinde baskın kimyasal bir türdür. Hidrojen atom, iyon ve moleküllerinin çarpışma süreçleri, gezegenlerin atmosfer modellerinin anahtar bileşenini oluşturur. Dünya iyonküresinden başka gezegenlere kadar bol miktarda bulunan serbest ve iyonlaşmış haldeki hidrojenin temel kaynaklarından birinin de moleküler haldeki hidrojen olduğu düşünüldüğünde bu parçacığın reaksiyon süreçlerinin dikkatle incelenmesi gerekmektedir. Diğer yandan reaksiyonun bir diğer bileşeni olan özellikle 200-400 km'ler arasında baskın olan O^+ iyonunun da reaksiyon süreçleri dikkatle incelenmelidir. O^+ için yaklaşık 140 km civarında yaşam süresinin sadece birkaç dakika olduğu bilinmektedir çünkü yoğunluk bu yüksekliklerde düşüktür. Yükseklik arttıkça ve dolayısıyla yoğunlukta yükselerek maksimuma ulaştığında yaşam süresinin de genişleyeceğini söyleyebiliriz. Bu sürenin 10 ile 300 sn arasında değiştiğini varsayarsak sadece O^+ iyonunun 60 eV civarında bir enerjiye sahip olduğunu görürüz. Aynı zamanda hareketsiz kabul ettiğimiz H_2 molekülünün de olduğu yerde titreşim ve dönme hareketlerinden dolayı sahip olduğu enerjide hesaba katıldığında sadece bir reaksiyon için ortaya çıkan enerji ve bu enerjiden dolayı oluşacak ısınmalar reaksiyonun meydana geldiği yüksekliklerde tedirginliklere sebebiyet verecektir. Yine bir saniyede ortalama iki çarpışmanın meydana geldiği göz önüne alınırsa, uzun süreli etkileşimlerde çarpışma sayısı artacağından bölgesel bozulmaları da beraberinde getirecektir.

Bu doktora tez çalışmasıyla, iyonküre üzerine yapılan teorik çalışmalarda genellikle ihmal edilen çarpışma süreçlerinden birinin etkileri araştırılarak diğer pek çok reaksiyon süreci için anahtar bir rol oynaması amaçlanmıştır. Ayrıca bölgesel bozulmalarda sadece yıldırım ve depremlerin değil de burada ortaya konan sonuçlardan hareketle, çarpışmalar neticesinde oluşan ani ısınma ve enerjilerin bulunduğu yüksekliklerde ani bozulmalara sebep olacağı sonucuna varılmıştır.

Elde edilen sonuçlardan, bu tez çalışmasında iyon ve nötr parçacıklar arasında gerçekleşen reaksiyon için bulunan çarpışma frekansı ve ortalama serbest yol verilerinin,

ileride yapılacak olan momentum transferi, viskozite katsayısı, termal ve elektriksel iletkenlik hesaplamalarına katkı sağlayacağını söylemek mümkündür.



KAYNAKLAR

- [1] **Appleton, E.V.**, 1927, The existence of more than one ionised layer in the upper Atmosphere, *Nature*, **120**, 3018, 330.
- [2] **Appleton, E.V.**, 1930, On some measurements of the equivalent height of the atmospheric ionised layer, *Proc. R. Soc. Lond. A.*, **126**, 542-569.
- [3] **Hulburt, E.O.**, 1932, Ionisation in the upper ionosphere, *Nature*, **120**, 3014, 187.
- [4] **Eckersley, T.L.**, 1925, The propagation of radio waves over the Earth, *Nature*, **115**, 2892, 496-497.
- [5] **Ratcliffe, J.A., Farmer, F.T.**, 1935, A new test of the magneto-ionic theory, *Nature*, 831-832.
- [6] **Schunk, R.W. and Sojka, J. J.**, 1995. The lower ionosphere at high latitudes, in the upper mesosphere and lower thermosphere, *Geophys. Monograph*, **87**, 37.
- [7] **Schunk, R. W. and Nagy, A. F.**, 2009. IONOSPHERES; Physics, Plasma Physics, and Chemistry, Cambridge University Press, Cambridge.
- [8] **Kapp, E.**, 1997. On the abundance of metal ions in the lower ionosphere, *J. Geophys. Res.*, **102**, 9667.
- [9] **Gombosi, T. I.**, 1998. Physics of the Space Environment, Cambridge University Press, Cambridge.
- [10] **Bates, D. R. and Nicolet M.**, 1950. The photochemistry of atmospheric water vapor, *J. Geophys. Res.*, **55**, 301-327.
- [11] **Patterson, T. N. L.**, 1966. Atomic and molecular hydrogen in the thermosphere, *Planet. Space. Sci.*, **14**, 417-423.
- [12] **Tinsley, B. A.**, 1969. Reinterpretation of geocoronal observations with increased high/low altitude hydrogen ratio, *Planet. Space. Sci.*, **17**, 769-771.
- [13] **Liu, S. C. and Donahue, T. M.**, 1973. The Aeronomy of Hydrogen in the Atmosphere of the Earth, *J. Atmos. Sci.*, **31**, 1118.
- [14] **Donahue, T. M.**, 1969. Deuterium in the upper atmospheres of Venus and Earth, *J. Geophys. Res.*, **74**, 1128-1137.
- [15] **Brinkman, R. T.**, 1969. Dissociation of water vapor and evolution of oxygen in the terrestrial atmosphere, *J. Geophys. Res.*, **74**, 5355-5368.

- [16] **Brinkman, R. T.**, 1971. Photochemistry and the escape efficiency of terrestrial hydrogen. *Mesospheric Models and Related Experiments*, pp. 89-102, Dordrecht-Holland, Reidel.
- [17] **Strobel, D. F.**, 1972. Minor neutral constituents in the mesosphere and lower thermosphere, *Radio Sci.*, **7**, 1-21.
- [18] **Hunten, D. M.**, 1973a. The escape of H₂ from Titan, *J. Atmos. Sci.*, **30**, 726-732.
- [19] **Hunten, D. M.**, 1973b. The escape of light gases from planetary atmospheres, *J. Atmos. Sci.*, **30**, 1481-1494.
- [20] **Bernhardt, P. A. and Park C. G.**, 1975. Depletion of the f2 region ionosphere and the protonosphere by the release of molecular hydrogen, *Geophys. Res. Lett.*, **2**, 8.
- [21] **Guiter, S. M., Rasmussen C. E., Gombosi, T. I., Sojka, J. J. and Schunk, R. W.**, 1995. What is the source of observed annul variations in plasmaspheric density?, *J. Geophys. Res.*, **100**, 8013-8020.
- [22] **Bernoulli, D.**, 1738. *Hydrodynamica, sive de viribus et motibus fluidorum commentarii*, Argentoria, Strasbourg.
- [23] **Clausius, R.**, 1858. Über die mittlere Lange der Wege, welche bei der Molecularbewegung gasförmigen Körper von den einzelnen Molekülen zurückgelegt werden, nebst einigen anderen Bemerkungen über die mechanischen Warmetheorie, *Ann. Phys.*, **[2], 105**, 239-258.
- [24] **Maxwell, J.C.**, 1860. Illustrations of the dynamical theory of gases. I. On the motions and collisions of perfectly elastic spheres, *Phil. Mag.*, **[4], 19**, 19-32.
- [25] **Maxwell, J.C.**, 1860. Illustrations of the dynamical theory of gases. II. On the process of diffusion of two or more kinds of moving particles among one another, *Phil. Mag.*, **[4], 20**, 21-37.
- [26] **Boltzmann, L.**, 1872. Weitere Studien über das Warmegleichgewicht unter Gasmolekülen, *Sitz. Math.-Naturwiss. Cl Akad. Wiss. Wien*, **66**, 275-370.
- [27] **Lorentz, F.A.**, 1905. The motions of electrons in metallic bodies, *Proc. Amsterdam Acad.*, **7**, 438.
- [28] **Enskog, D.**, 1917. The kinetic theory of phenomena in fairly rare gases, *Ph.D. Thesis*, University of Uppsala, Sweden.
- [29] **Chapman, S.**, 1916. On the law of distribution of velocities, and on the theory of viscosity and thermal conduction, in a non-uniform simple monatomic gas, *Phil. Trans. Roy. Soc, A*, **216**, 279.

- [30] **Chapman, S.**, 1917. On the kinetic theory of a gas, Part II, A composite monatomic gas, diffusion, viscosity and thermal conduction, *Phil. Trans. Roy. Soc, A*, **217**, 115.
- [31] **Grad, H.**, 1949. On the kinetic theory of rarefied gases, *Comm. Pure Appl. Math.*, **2**, 331.
- [32] **Gombosi, T. I.**, 1994. Gaskinetic Theory, Cambridge University Press, Cambridge.
- [33] **Karabulut, E.**, 2010. Zamana Bağlı Dalga Paketi Metodu, *Doktora Ders Semineri*, F.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü, Elazığ.
- [34] **Canyılmaz, M.**, 2008. VLF Yayılımını Kullanarak Yıldırımın Alt İyonküre Üzerine Etkilerinin Araştırılması, *Doktora Tezi*, F.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü, Elazığ.
- [35] **Yaşar, M.**, 2015. İyonkürenin Kimyasal Kinetiği, *Doktora Ders Semineri*, F.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü, Elazığ.
- [36] **Güzel, E.**, 1998. İyonkürenin Isıl Özellikleri, *Doktora Tezi*, F.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü, Elazığ.
- [37] **Holmes, J.C., Johnson, C.Y. and Young, J.M.**, 1965. Ionospheric chemistry, *Space Research*, **5**, 756.
- [38] **Whitten, R., C. and Poppoff, I., G.**, 1971. Fundamentals of Aeronomy, Space Science Text Series, New York, USA.
- [39] **Cook, G.R. and Metzger, P.H.**, 1964. *Chem J., Phys.*, **41**, 321.
- [40] **Wuilleumier, F.**, 1970. *C.R. Acad. Sci , Paris*, **270**, 272.
- [41] **Ratcliffe, J., A.**, 1972. An Introduction to the Ionosphere and Magnetosphere. Cambridge University Press.
- [42] **Wuilleumier, F.**, 1965. *J. Phys.*, **26**, 776.
- [43] **Huffman ,R.E., Tanaka,Y., Larrabee, J.C.**, 1963. *J. Chem. Phys.*, **39**, 902.
- [44] **Rishbeth, H. and Garriot, O., K.**, 1969. Introduction to Ionospheric Physics, pp. 175-186, Academic Pres, New York.
- [45] **Ratcliff, J. A.**, 1972. An Introduction To The Ionosphere And Magnetosphere, pp. 37-62, Cambridge University Press.
- [46] **Samson, J. A. R.**, 1966. *Advan. At. Mol. Phys.*, **2**, 178.
- [47] **Samson, J. A. R.**, 1969. *Phys. Rew. Lett.*, **22**, 693.
- [48] **Lee, P., Weissler, G. L.**, 1953. *Phys. Rev.*, **99**, 540.

- [49] **Aydoğdu, M.**, 1980. Ariel 4 Uyduyuyla Elde Edilen Elektron Yoğunluğu verilerinin 70^0 - 80^0 D ve 60^0 - 70^0 B Boyamları Arasında İncelenmesi, *Doktora Tezi*, E.Ü. Fen Fakültesi, İzmir.
- [50] **Henry , R. J. W.**, 1968. *J. Chem. Phys.*, **48**, 3635.
- [51] **Harris, I. and Priester, W.**, 1963. Heating of upper atmosphere, *Space Research*, **3**, 53-75.
- [52] **Nicolet, M.**, 1960. The Properties and Constitution of Upper Atmosphere, In Physics of Upper Atmosphere, Academic Press., Newyork.
- [53] **Evans, J.V.**, 1962. Diurnal variation of the temperature of the F-region, *J. Geophys. Research*, **67**, 4914-4920.
- [54] **Spencer, N.W., Brace, L.H., Carignan, G.R., Taeusch, D.R. and Niemann, H.**, 1965. Electron and molecular nitrogen temperature and density in the thermosphere, *J.Geophys. Research*, **70**, 2665-2698.
- [55] **Hanson, W.B.**, 1963. Electron temperatures in the upper atmsophere, *Space Research*, **3**, 282-303.
- [56] **Geisler, J.E and Bowhill, S.A.**, 1965. Ionospheric temperatures at sunspot minumum, *J. Atmospheric Terr. Phys.*, **27**, 457-474.
- [57] https://omniweb.gsfc.nasa.gov/vitmo/iri2012_vitmo.html, IRI web program.
- [58] **Baumjohann, W., Treumann, R. A.**, 1997. Basic Space Plasma Physics, Imperial College Press, London.
- [59] **Bittencourt, J. A.**, 1986. Fundamentals of Plasma Physics, Pergamon Press, Oxford.
- [60] **Hargreaves, J. K.**, 1992. The Solar-Terrestrial Environment, Cambridge University Press,Cambridge.
- [61] **Jones, A. V.**, 1974. Aurora, D. Reidel Publ. Co., Dordrecht, Holland.
- [62] **Spitzer, L.**, 1962. Physics of Fully Ionized Gases, Interscience Publishers, New York.
- [63] **Whitten, R.C. and Poppoff, I.G.**, 1964. Ion Kinetics in the Lower Ionosphere, *J.Atmos. Sci.*, **21**, 2.
- [64] **Ferguson, E.E.**, 1973. Rate constants of thermal energy binary ion-molecule reactions of aeronomic interest, *At. Data Nucl. Data Tables*, **12**, 159.
- [65] **Mendillo, M., Hawkins, G.S., Klobuchar, J.A.**, 1975. A Sudden Vanishing of the Ionospheric F Region Due to the Launch of Skylab, *J. Geophys. Res.*, **80**,16.

- [66] **Bernoulli, D.**, 1738. *Hydrodynamica, sive de viribus et motibus fluidorum commentarii*, Argentoria, Strasbourg.
- [67] **Clausius, R.**, 1858. Über die mittlere Länge der Wege, welche bei der Molecularbewegung gasförmigen Körper von den einzelnen Molekülen zurückgelegt werden, nebst einigen anderen Bemerkungen über die mechanischen Wärmetheorie, *Ann. Phys. [2]*, **105**, 239-258.
- [68] **Maxwell, J.C.**, 1860 (read 1859). Illustrations of the dynamical theory of gases. I. On the motions and collisions of perfectly elastic spheres, *Phil. Mag. [4]*, **19**, 19-32.
- [69] **Maxwell, J.C.**, 1860. Illustrations of the dynamical theory of gases. II. On the process of diffusion of two or more kinds of moving particles among one another, *Phil. Mag. [4]*, **20**, 21-37.
- [70] **Boltzmann, L.**, 1872. Weitere Studien über das Wärmegleichgewicht unter Gasmolekülen, *Sitz. Math.-Naturwiss. Cl Akad. Wiss. Wien*, **66**, 275-370.
- [71] **Lorentz, F.A.**, 1905. The motions of electrons in metallic bodies, *Proc. Amsterdam Acad.*, **7**, 438.
- [72] **Enskog, D.**, 1917. The kinetic theory of phenomena in fairly rare gases, *Ph.D. Thesis*, University of Uppsala, Sweden.
- [73] **Chapman, S.**, 1916. On the law of distribution of velocities, and on the theory of viscosity and thermal conduction, in a non-uniform simple monatomic gas, *Phil. Trans. Roy. Soc, A*, **216**, 279.
- [74] **Chapman, S.**, 1917. On the kinetic theory of a gas, Part II, A composite monatomic gas, diffusion, viscosity and thermal conduction, *Phil. Trans. Roy. Soc, A*, **217**, 115.
- [75] **Grad, H.**, 1949. On the kinetic theory of rarefied gases, *Comm. Pure Appl. Math.*, **2**, 331.
- [76] **Brush, S.G.**, 1976. *The kind of motion we call heat*, North-Holland Publ. Co., New York.
- [77] **Garber, E., Brush, S.G. and Everitt, C.W.F.**, 1986. *Maxwell on molecules and gases*, MIT Press, Cambridge, Mass.
- [78] **Banks, P.M. and Kockarts, G.**, 1973. *Aeronomy*, Academic Press, New York.
- [79] **Rees, M. H.**, 1989. *Physics and chemistry of the upper atmosphere*, Cambridge University Press, Cambridge.
- [80] **Jensen F.**, 1999. *Introduction to Computational Chemistry*, John Wiley & Sons.

- [81] **Armağan, i.**, 2006. Zamana Bağlı Schrödinger Denkleminin Reel DalgaFonksiyonları Cinsinden Çözümü ve Reaksiyonuna Uygulanması, Yüksek Lisans Tezi, F. Ü., Fen Bilimleri Enstitüsü, Elazığ.
- [82] **Truong, T. N., Janner, J. J., Bala, P., McCammon, J. A., Kouri, D. J., Lesyng, B., Hoffman, D. K.**, 1992. A Comparative Study of Time Dependent Quantum Mechanical Wave Packet Evolution Methods, *J. Chem. Phys.*
- [83] **Hoffmann, D., Sharafeddin, O., Judson, R. and Kouri, D.**, 1990. Time-Dependent Treatment of Scattering: integral Equation Approaches Using the Time-Dependent Amplitude Density. *J. Chem. Phys.*, **92**: 4167-4177.
- [84] **Kouri, D. and Hoffmann, D.**, 1991. Time-Dependent Integral Equation Approach to Quantum Dynamics of Systems with Time-Dependent Potentials. *Chem. Phys.Lett.*, **186**: 91-99.
- [85] **Kosloff, R. and Tal-Ezer, H.**, 1986. A Direct Relaxation Method for Calculating Eigenfunctions and Eigenvalues of the Schrödinger Equation On a Grid., *Chem. Phys. Lett.*, **127**, 223-230.
- [86] **Mowrey, R. C., Kouri, D. J.**, 1986. Closecoupling wave packet approach to numerically exact moleculesurface scattering calculations, *J. Chem. Phys.*, **84**:6466.
- [87] **Schrödinger, E.**, 1926. Quantisierung als eigenwert problem, *Ann. Phys.*, 79:361.
- [88] **Manz, J.**, 1996. Molecular wavepacket dynamics: thoery for experiments 1926–1996, *In: Nobel symposium book: femtochemistry and femtobiology*, Imperial College Press, London.
- [89] **Fabien Gatti (Ed.), Sun, Z., Zhao, B., Liu, S. and Zhang, D-H.**, 2014. Molecular Quantum Dynamics from Theory to Applications, pp. 81-108, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg.
- [90] **Zhang, J. Z. H.**, 1999. Theory and application of quantum molecular Dynamics, World Scientific, River Edge.
- [91] **Tannor, D. J., Weeks, D. E.**, 1993. Wave packet correlation function formulation of scattering theory: the quantum analog of classical s-matrix theory, *J. Chem. Phys.*, **98**(5): 3884.
- [92] **Hankel, M, Balint-Kurti, G. G., Gray, S. K.**, 2000. Quantum mechanical calculation of product state distributions for the $\text{o}([\text{sup } 1]\text{d}) + \text{h}[\text{sub } 2]\text{oh} + \text{h}$ reaction on the ground electronic state surface, *J Chem. Phys.*, **113**(21): 9658.
- [93] **Judson, R., Kouri, D., Neuhauser, D., Baer, M.**, 1990. Time-dependent wave packet method for the complete determination of s-matrix elements for reactive molecular collisions in three dimensions, *Phys. Rev. A*, **42**(1): 351.

- [94] **Lin, S., Guo, H.**, 2006. Quantum state-to-state cross sections for atom-diatom reactions: a chebyshev real wave-packet approach, *Phys. Rev. A*, **74**(2): 022703.
- [95] **Yuan, K., Cheng, Y., Liu, X., Harich, S., Yang, X., Zhang, D.**, 2006. Experimental and quantum dynamical study on an asymmetric insertion reaction: state-to-state Dynamics of $O(^1D) + HD(^1\Sigma_g^+, v=0, j=0) \rightarrow OH(^2\Pi, v, N) + D(^2S)$, *Phys. Rev. Lett.*, **96**(10): 103202.
- [96] **Gogtas, F., Balint-Kurti, G. G., Offer, A. R.**, 1996. Quantum mechanical three-dimensional wavepacket study of the $LiCHFLiFCH$ reaction, *J. Chem. Phys.*, **104**(20): 7927.
- [97] **Neuhauser, D., Baer, M., Judson, R. S., Kouri, D. J.**, 1990. A time-dependent wave packet approach to atomdiatom reactive collision probabilities: theory and application to the $H + H_2$ ($J=0$) system, *J. Chem. Phys.*, **93**(1): 312.
- [98] **Sun, Z., Lin, X., Lee, S. Y., Zhang, D. H.**, 2009. A reactant-coordinate-based time-dependent wave packet method for triatomic state-to-state reaction dynamics: application to the $H+O_2$ reaction, *J. Phys. Chem. A*, **113**(16): 4145.
- [99] **Sun, Z., Guo, H., Zhang, D. H.**, 2010. Extraction of state-to-state reactive scattering attributes from wave packet in reactant jacobi coordinates, *J. Chem. Phys.*, **132**(8): 084112.
- [100] **Zhang, D. H., Light, J. C.**, 1996. Quantum state-to-state reaction probabilities for the $H + H_2O \rightarrow H_2 + OH$ reaction in six dimensions, *J. Chem. Phys.*, **105**(3): 1291.
- [101] **Gomez-Carrasco, S., Roncero, O.**, 2006. Coordinate transformation methods to calculate stateto-state reaction probabilities with wave packet treatments, *J. Chem. Phys.*, **125**(5): 054102.
- [102] **Althorpe, S. C., Kouri, D. J., Hoffman, D. K.**, 1997. Further partitioning of the reactant-product decoupling equations of state-to-state reactive scattering and their solution by the timeindependent wave-packet method, *J. Chem. Phys.*, **107**(19): 7816.
- [103] **Althorpe, S. C., Kouri, D. J., Hoffman, D. K., Zhang, J. Z. H.**, 1997. Reactantproduct decoupling approach to state-resolved reactive scattering time-independent wavepacket formulation, *J. Chem. Soc. Faraday Trans.*, **93**(5):703.
- [104] **Peng, T., Zhang, J. Z. H.**, 1996. A reactant-product decoupling method for state-to-state reactive scattering, *J. Chem. Phys.*, **105**(14):6072.
- [105] **Althorpe, S. C.**, 2001. Quantum wavepacket method for state-to-state reactive cross sections, *J. Chem. Phys.*, **114**(4):1601.

- [106] Althorpe, S., Fernández-Alonso, F., Bean, B., Ayers, J., Pomerantz, A., Zare, R., Wrede, E., 2002. Observation and interpretation of a time-delayed mechanism in the hydrogen exchange reaction, *Nature*, **416**:67.
- [107] Althorpe, S., Kouri, D., Hoffman, D., 1997. A chebyshev method for calculating state-to-state reaction probabilities from the time-independent wavepacket reactant-product decoupling equations, *J. Chem. Phys.*, **106**:7629.
- [108] Cvitas, M., Althorpe, S., 2011. State-to-state reactive scattering in six dimensions using reactant-product decoupling: $\text{OH} + \text{H}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{H}$ ($J=0$), *J. Chem. Phys.*, **134**:024309.
- [109] Liu, S., Xu, X., Zhang, D., 2011. State-to-state quantum dynamics study of the $\text{OH} + \text{CO} \rightarrow \text{H} + \text{CO}_2$ reaction in full dimensions ($J=0$), *J. Chem. Phys.*, **135**:141108.
- [110] Liu, S., Xu, X., Zhang, D., 2012. Time-dependent wave packet theory for state-to-state differential cross sections of four-atom reactions in full dimensions: application to the $\text{HD} + \text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O} + \text{D}$ reaction, *J. Chem. Phys.*, **136**:144302.
- [111] Liu, S., Chen, J., Zhang, Z., Zhang, D., 2013. A six-dimensional state-to-state quantum dynamics study of the $\text{H} + \text{CH}_4 \rightarrow \text{H}_2 + \text{CH}_3$ reaction ($j=0$), *J. Chem. Phys.*, **138**:011101.
- [112] Neuhauser, D. and Baer, M., 1989. *J.Chem.Phys.*, **90**, 4351.
- [113] Meijer, A.J.H.M., Goldfield, E.M., Gray, S.K., Balint-Kurti, G.G., 1998. Letters, Flux analysis for calculating reaction probabilities with real wave packets, *J.Chem.Phys.*, **293**, 270-276.
- [114] COSPAR, 1961. International Reference Atmosphere, Amsterdam, The Netherlands: North-Holland Publications.
- [115] Immel, T.J., Sagawa, E., England, S.L., Henderson, S.B., Hagan, M.E., Mende, S.B., Frey, H.U., Swenson, C.M. and Paxton, L.J., 2006. Control of equatorial ionospheric morphology by atmospheric tides, *Geophys. Res. Lett.*, **33**, L15108.
- [116] Lühr, H. and Xiong, C., 2010. The IRI2007 model overestimates electron density during the 23/24 solar minimum, *Geophys. Res. Lett.*, **37**, L23101.
- [117] Bilitza, D., Truhlik, V., Richards, P., Abe, T. and Triskova, L., 2007. Solar cycle variation of mid-latitude electron density and temperature: Satellite measurements and model calculations, *Adv. Space Res.*, **39** (5), 779–789.
- [118] Truhlik, V., Bilitza, D. and Triskova, L., 2009. Latitudinal variation of the topside electron temperature at different levels of solar activity, *Adv. Space Res.*, **44** (6), 693–700.

- [119] **Zhang, S.-R., Holt, J.M., Van Eyken, A.P., McCready, M., Amory-Mazaudier, C., Fukao, S. and Sulzer, M.,** 2005. Ionospheric local model and climatology from long-term databases of multiple incoherent scatter radars, *Geophys. Res. Lett.*, **32**, L20102.
- [120] **Richards, P.G.,** 2001. Seasonal and solar cycle variations of the ionospheric peak electron density: comparison of measurement and models, *J. Geophys. Res.*, **106**, 12803–12819.
- [121] **Truhlik, V., Bilitza, D. and Triskova, L.,** 2012. A new global empirical model of the electron temperature with inclusion of the solar activity variations for IRI, *Earth Planets and Space*, **64 (6)**, 531–543.
- [122] **Danilov, A.D. and Yaichnikov, A.P.,** 1985. A new model of the ion composition at 75 to 1000 km for IRI, *Adv. Space Res.*, **5 (7)**, 75–79, 107–108.
- [123] **Danilov, A.D. and Smirnova, N.V.,** 1995. Improving the 75 to 300 km ion composition model of the IRI, *Adv. Space Res.*, **15 (2)**, 171–177.
- [124] **Triskova, L., Truhlik, V. and Smilauer, J.,** 2003. An empirical model of ion composition in the outer ionosphere, *Adv. Space Res.*, **31 (3)**, 653–663.
- [125] **Richards, P.G., Bilitza, D. and Voglozin, D.,** 2010. Ion density calculator (IDC): A new efficient model of ionospheric ion densities, *Radio Sci.*, **45**, RS5007.
- [126] **Danilov, A.D. and Smirnova, N.V.,** 1995. Improving the 75 to 300 km ion composition model of the IRI, *Adv. Space Res.*, **15 (2)**, 171–177.
- [127] **Bilitza D, Altadill D, Zhang Y, Mertens C, Truhlik V, Richards, P., McKinnel, L-A. and Reinisch, B.,** 2014. The International Reference Ionosphere 2012 – a model of international collaboration. *J. Space Weather Space Clim.*, **4**, A07.

ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı : Mehmet YAŞAR
Doğum Tarihi ve Yeri : 26.02.1985 / ELAZIĞ
Adres : Fırat Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü
Telefon : 424223700 / 3592 - 3555

Öğrenim Gördüğü Okullar

İlkokul : Elazığ Gazi İlkokulu
Ortaokul : Elazığ 100. Yıl Orta Okulu
Lise : Elazığ Elazığ Lisesi
Üniversite : Elazığ Fırat Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü

2003 yılında Fırat Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü ile başladığı öğretim hayatına, 2008 yılında tezsiz yüksek lisans (pedagojik formasyon) ile devam etti. Daha sonra 2009 yılında başladığı Fırat Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Yüksek Enerji ve Plazma Fiziği Anabilim dalındaki Tezli Yüksek Lisansını 2012 yılında bitirdi. 20.10.2011 tarihinde Fırat Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümünde Araştırma Görevlisi olarak çalışmaya başlayan Mehmet YAŞAR, halen daha bu görevine devam etmektedir.