

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

**SODYUM KONFIGÜRASYONUNA SAHİP KALAY VE
TUNGSTEN İYONLARININ KONFIGÜRASYON
ORTALAMALI ÇARPITILMIŞ DALGA YAKLAŞIMINDA
ELEKTRON-ÇARPMA İYONLAŞMA TESİR
KESİTLERİNİN HESABI**

**UFUK GÖLÇEK
(Fizikçi, Msc.)**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI
FİZİK PROGRAMI**

**DANIŞMAN
Prof. Dr. Zikri Altun**

İstanbul 2007

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

**SODYUM KONFIGÜRASYONUNA SAHİP KALAY VE
TUNGSTEN İYONLARININ KONFIGÜRASYON
ORTALAMALI ÇARPITILMIŞ DALGA YAKLAŞIMINDA
ELEKTRON-ÇARPMA İYONLAŞMA TESİR
KESİTLERİNİN HESABI**

**UFUK GÖLÇEK
(141101420040231)**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI
FİZİK PROGRAMI**

**DANIŞMAN
Prof. Dr. Zikri Altun**

İstanbul 2007

TEŐEKKÜR

Bu tezin konusunun belirlenmesindeki cesaret verici yaklařımından, zaman sınırı tanımaksızın gösterdiđi özveriden ve yardımlarından dolayı Sayın hocam Prof. Dr. Zikri ALTUN'a; tezin her türlü ařamasında, her zaman yanımda olan, bana ailemden biriymiř gibi destek veren İlhan Yavuz'a ve kadim dostum Ayře YUMAK'a ve çok teőekkür ederim. Benim her zaman yanımda olan, benden maddi ve manevi yardımlarını esirgemeyen annem ve babama sonsuz minnet ve Őükranlarımı sunarım. Yüksek Lisans Eđitimim süresince yetiřmemde emeđi geen bütün hocalarıma Őükranlarımı arz ederim.

Haziran 2007, İstanbul

Ufuk GÖLEK

İÇİNDEKİLER

	<u>SAYFA</u>
ÖZET.....	I
ABSTRACT	II
YENİLİK BEYANI.....	III
SEMBOL LİSTESİ.....	IV
GRAFİK LİSTESİ.....	VI
TABLO LİSTESİ.....	VIII
BÖLÜM I. GİRİŞ ve AMAÇ.....	1
I.1. GİRİŞ ve AMAÇ.....	1
BÖLÜM II. TEORİ.....	3
II.1. GENEL OTOİYONLAŞMA ORAN FORMÜLÜNÜN TÜRETİLMESİ.....	5
II.2. ATOMİK HAL FONKSİYONLARI.....	8
II.3. KONFIGÜRASYON ORTALAMALI TESİR KESİTİ.....	25
BÖLÜM III. SONUÇLAR ve DEĞERLENDİRMELER.....	29
III.1. SODYUM KONFIGÜRASYONUNA SAHİP KALAY VE TUNGSTEN İYONLARININ KONFIGÜRASYON ORTALAMALI ÇARPITILMIŞ DALGA YAKLAŞIMINDA ELEKTRON-ÇARPMA İYONLAŞMA TESİR KESİTLERİNİN HESABI.....	29
KAYNAKLAR.....	34

EKLER	37
EK A	38
ÖZGEÇMİŞ	72

ÖZET

SODYUM KONFIGÜRASYONUNA SAHİP KALAY VE TUNGSTEN İYONLARININ KONFIGÜRASYON ORTALAMALI ÇARPITILMIŞ DALGA YAKLAŞIMINDA ELEKTRON-ÇARPMA İYONLAŞMA TESİR KESİTLERİNİN HESABI

Sodyum konfigürasyonuna sahip Mg^+ , Ar^{7+} , Kr^{25+} , Sn^{39+} , Xe^{43+} ve W^{63+} iyonları için elektron çarpmalı iyonlaşma tesir kesitlerini hesap ettik. Doğrudan iyonlaşma tesir kesitleri 2s, 2p, 3s kabukları için hesaplandı. Hesaplamalar bağımsız süreç (independent process) ve konfigürasyon ortalamalı çarpıtılmış dalga (configuration-average distorted-wave) yaklaşımında yapıldı. İyonlaşmaya uyarılmalı oto-iyonlaşma süreçlerinin katkıları için $2s^2 2p^5 3snl$ ve $2s 2p^6 3snl$ şeklinde ifade edilen uyarılmış konfigürasyonlar göz önüne alındı. Bu konfigürasyonlarda n kuantum sayısı için 3, 4, 5, 6 değerleri alındı. Bu uyarılmış konfigürasyonlar için ışına ile bozulmalarını alan uygun dallanma oran katsayıları hesaplandı. Uyarılmalı oto-iyonlaşma kanallarının katkılarının özellikle ağır iyonlar için baskın oldukları hesaplamalarımızda da ortaya çıkmış oldu. Bütün süreçler iyonlaşma ve uyarılma enerjileri yarı-rölativistik çerçevede hesaplandı. Tesir kesitler grafik olarak, enerjiler ise tablolarda sunulmuştur.

Haziran, 2007

Ufuk GÖLÇEK

ABSTRACT

CALCULATIONS of ELECTRON-IMPACT IONIZATION CROSS-SECTIONS of Na-LIKE Sn³⁹⁺ and W⁶³⁺ BY CONFIGURATION-AVERAGE DISTORTED WAVE APPROXIMATION

We have calculated electron impact ionization cross-sections for the Sodium-like ions Mg⁺, Ar⁷⁺, Kr²⁵⁺, Sn³⁹⁺, Xe⁴³⁺, and W⁶³⁺. The direct ionization cross-sections of 2s, 2p, and 3s were calculated. The calculations are done in an independent process and configuration-average distorted-wave approximation. The contribution from excitation-autoionization from $2s^2 2p^5 3snl$ and $2s 2p^6 3snl$ excited configuration were taken into account. the quantum number n in these configurations were taken to be 3, 4, 5, and 6. we have included the appropriate branching ratios for the radiation damping of these autoionizing levels. excitation-autoionization contributions are found quite large particularly for heavy ions. We have calculated ionization and excitation energies for all processes in a semi-relativistic framework. The results for cross-sections are presented in plots and values for energies are presented in tabels in the thesis.

June, 2007

Ufuk GÖLÇEK

YENİLİK BEYANI

SODYUM KONFIGÜRASYONUNA SAHİP KALAY VE TUNGSTEN İYONLARININ KONFIGÜRASYON ORTALAMALI ÇARPITILMIŞ DALGA YAKLAŞIMINDA ELEKTRON-ÇARPMA İYONLAŞMA TESİR KESİTLERİNİN HESABI

Plazma reaktörlerinin plazmaya bakan yüzeylerinde kullanılan ağır metallerin ışımaya özelliklerinin araştırılması hem temel hem de pratik öneme sahip güncel bir konudur. Bu elementlerin ışımaya özellikleri ile ilgili yapılan deney sonuçlarının anlaşılması için teorik hesaplamalar önemlidir. Bu hesaplamaların başında, elektron – iyon (atom) çarpışması sonucunda iyonun valans veya valans altı kabuklarından bir veya daha fazla elektronun uyarılması veya iyonlaşması veya elektronların iyonlara yakalanması gibi atomik süreçlere ait tesir kesit ve oran katsayılarının hesabı gelmektedir. Bu tür hesaplar özel teorik ve pratik kabiliyet gerektiren hesaplardır. Tokamak deneylerinde gözlenen pek çok ağır elementin iyon basamaklarını içeren atomik süreçleri karakterize edecek tesir kesit ve oran katsayılarına ait deneysel verilerin bulunmamasından dolayı teorik hesaplamaları önem kazanmaktadır. Biz bu tezimizde Na konfigürasyonuna sahip Mg^+ , Ar^{7+} , Kr^{25+} , Sn^{39+} , Xe^{43+} , ve W^{63+} iyonlarına elektron çarpması sonucu meydana gelen doğrudan ve uyarılmalı iyonlaşma süreçleri için tesir kesiti hesaplarını yaptık. Hesaplamalar bağımsız süreç (independent process) ve konfigürasyon ortalamalı çarpıtılmış dalga (configuration-average distorted-wave) yaklaşımında yapılmıştır. İyonlaşmadan önce elektron çarpması sonucu uyarılan iyonlar için gerekli dallanma oranları rölativistik etkileri içerecek şekilde hesaplanmıştır. Bu hesaplamalar literatürde Cowan ismi ile bilinen program paketi kullanılarak yapılmıştır.

Haziran, 2007

Prof. Dr. Zikri ALTUN

Ufuk GÖLÇEK

SEMBOL LİSTESİ

\hat{H}	: Çok parçacıklı sistemin Hamiltoniyeni
E	: Çok parçacıklı sistemin toplam enerjisi
$\Psi(\vec{r}, t)$: Çok parçacıklı bir sistemin t anındaki dalga fonksiyonu
$a_{\vec{k}, \lambda}^\dagger$: Yaratma operatörü
$a_{\vec{k}, \lambda}$: Yok etme operatörü
$\hat{e}_{\vec{k}, \lambda}$: Polarizasyon vektörü
\vec{k}	: Yayılma vektörü
$h = 2\pi\hbar$: Planck sabiti
Z	: Atom numarası
\vec{A}	: Vektör potansiyeli
ϕ	: Skaler potansiyel
\vec{B}	: Manyetik alan vektörü
\vec{E}	: Elektrik alan vektörü
c	: Işık hızı
e	: Elektronun yükü
m	: Elektronun kütlesi
λ	: Fotonun dalgaboyu
$\varphi(\vec{r}, t)$: Tek parçacığı temsil eden dalga fonksiyonu
f_i	: Tek elektron operatörü
g_{ij}	: İki elektron operatörü
$u_\alpha(q_1)$: q_1 uzay ve spin koordinatına sahip ve α kuantum sayılı elektron spin orbitali
$J_{\lambda\mu}$: Doğrudan elektron-elektron etkileşme terimi

$K_{\lambda\mu}$: Elektron-elektron deęiş tokuř (exchange) etkileřmesi
q_a	: Dolu kabuklardaki elektron sayıları
n	: Asal kuantum sayısı
l	: Yörünge kuantum sayısı
m_l	: Manyetik kuantum sayısı
m_s	: Spin kuantum sayısı
P_{nl}	: n asal kuantum sayısına sahip l açısıl momantumlu Legendre Polinomu
G_I	: İlk hale ait istatistik aęırlık
G_F	: Son hale ait istatistik aęırlık
\bar{A}_a	: Oto-iyonlaşma oranı
ρ_f	: Son hal yoğunluęu
σ	: Tesir Kesiti
\bar{p}	: İndirgenmiř dipol momenti
\hat{D}_{nl}	: Tek-elektron Operatörü
δ_{ij}	: Kronocker-Delta fonksiyonu
ε	: İyondan kopan elektronun Kinetik Enerjisi
a_0	: Bohr yarıçapı
$R^k(ab; cd)$: Slater İntegrali
$-i\vec{\nabla}$: Elektronun Momentum Operatörü
λ_{ij}	: Lagrange Çarpanı
A_k	: Normalizasyon sabiti
E_{av}	: Bir atomu temsil eden toplam halin ortalama enerjisi
$\chi_i(m_s)$: m_s spin kuantum sayısına sahip i . elektron spin orbitalinin spin dalga fonksiyonu

GRAFİK LİSTESİ

SAYFA

GRAFİK III.1 Mg ¹⁺ iyonu için 3s, 2p ve 2s kabuklarına ait konfigürasyon ortalamalı doğrudan iyonlaşma σ_{3s} , σ_{2p} , σ_{2s} kısmi tesir kesitleri, konfigürasyon ortalamalı toplam tesir kesidi ve doğrudan ve uyarılmalı kısmi tesir kesitlerinin toplamı.....	66
GRAFİK III.2 Ar ⁷⁺ iyonu için 3s, 2p ve 2s kabuklarına ait konfigürasyon ortalamalı doğrudan iyonlaşma σ_{3s} , σ_{2p} , σ_{2s} kısmi tesir kesitleri, konfigürasyon ortalamalı toplam tesir kesidi ve doğrudan ve uyarılmalı kısmi tesir kesitlerinin toplamı.....	67
GRAFİK III.3 Kr ²⁵⁺ iyonu için 3s, 2p ve 2s kabuklarına ait konfigürasyon ortalamalı doğrudan iyonlaşma σ_{3s} , σ_{2p} , σ_{2s} kısmi tesir kesitleri, konfigürasyon ortalamalı toplam tesir kesidi ve doğrudan ve uyarılmalı kısmi tesir kesitlerinin toplamı.....	68
GRAFİK III.4 Sn ³⁹⁺ iyonu için 3s, 2p ve 2s kabuklarına ait konfigürasyon ortalamalı doğrudan iyonlaşma σ_{3s} , σ_{2p} , σ_{2s} kısmi tesir kesitleri, konfigürasyon ortalamalı toplam tesir kesidi ve doğrudan ve uyarılmalı kısmi tesir kesitlerinin toplamı.....	69
GRAFİK III.5 Xe ⁴³⁺ iyonu için 3s, 2p ve 2s kabuklarına ait konfigürasyon ortalamalı doğrudan iyonlaşma σ_{3s} , σ_{2p} , σ_{2s} kısmi tesir kesitleri, konfigürasyon ortalamalı toplam tesir kesidi ve doğrudan ve uyarılmalı kısmi tesir kesitlerinin	

toplamı.....	70
GRAFİK III.6 W^{63+} iyonu için 3s, 2p ve 2s kabuklarına ait konfigürasyon ortalamalı doğrudan iyonlaşma σ_{3s} , σ_{2p} , σ_{2s} kısmi tesir kesitleri, konfigürasyon ortalamalı toplam tesir kesidi ve doğrudan ve uyarılmalı kısmi tesir kesitlerinin toplamı.....	71

TABLO LİSTESİ

	<u>SAYFA</u>
TABLO III.1 İyonlaşma Enerjileri.....	41
TABLO III.2 Mg ¹⁺ İyonu İçin Gelen Elektronun Enerjileri	42
TABLO III.3 Mg ¹⁺ İyonunun 3s Valans Kabuğuna Ait Kısmi Tesir Kesiti.....	43
TABLO III.4 Mg ¹⁺ İyonunun 2p Valans Kabuğuna Ait Kısmi Tesir Kesiti.....	44
TABLO III.5 Mg ¹⁺ İyonunun 2s Valans Kabuğuna Ait Kısmi Tesir Kesiti.....	45
TABLO III.6 Ar ⁷⁺ İyonu İçin Gelen Elektronun Enerjileri	46
TABLO III.7 Ar ⁷⁺ İyonunun 3s Valans Kabuğuna Ait Kısmi Tesir Kesiti.....	47
TABLO III.8 Ar ⁷⁺ İyonunun 2p Valans Kabuğuna Ait Kısmi Tesir Kesiti.....	48
TABLO III.9 Ar ⁷⁺ İyonunun 2s Valans Kabuğuna Ait Kısmi Tesir Kesiti.....	49
TABLO III.10 Kr ²⁵⁺ İyonu İçin Gelen Elektronun Enerjileri	50
TABLO III.11 Kr ²⁵⁺ İyonunun 3s Valans Kabuğuna Ait Kısmi Tesir Kesiti.....	51
TABLO III.12 Kr ²⁵⁺ İyonunun 2p Valans Kabuğuna Ait Kısmi Tesir Kesiti.....	52
TABLO III.5 Kr ²⁵⁺ İyonunun 2s Valans Kabuğuna Ait Kısmi Tesir Kesiti.....	53
TABLO III.12 Sn ³⁹⁺ İyonu İçin Gelen Elektronun Enerjileri	54
TABLO III.3 Sn ³⁹⁺ İyonunun 3s Valans Kabuğuna Ait Kısmi Tesir Kesiti.....	55

TABLO III.4 Sn ³⁹⁺ İyonunun 2p Valans Kabuğuna Ait Kısmi Tesir	
Kesiti.....	56
TABLO III.5 Sn ³⁹⁺ İyonunun 2s Valans Kabuğuna Ait Kısmi Tesir	
Kesiti.....	57
TABLO III.12 Xe ⁴³⁺ İyonu İçin Gelen Elektronun Enerjileri	58
TABLO III.3 Xe ⁴³⁺ İyonunun 3s Valans Kabuğuna Ait Kısmi Tesir	
Kesiti.....	59
TABLO III.4 Xe ⁴³⁺ İyonunun 2p Valans Kabuğuna Ait Kısmi Tesir	
Kesiti.....	60
TABLO III.5 Xe ⁴³⁺ İyonunun 2s Valans Kabuğuna Ait Kısmi Tesir	
Kesiti.....	61
TABLO III.12 W ⁶³⁺ İyonu İçin Gelen Elektronun Enerjileri	62
TABLO III.3 W ⁶³⁺ İyonunun 3s Valans Kabuğuna Ait Kısmi Tesir	
Kesiti.....	63
TABLO III.4 W ⁶³⁺ İyonunun 2p Valans Kabuğuna Ait Kısmi Tesir	
Kesiti.....	64
TABLO III.5 W ⁶³⁺ İyonunun 2s Valans Kabuğuna Ait Kısmi Tesir	
Kesiti.....	65

BÖLÜM I

GİRİŞ ve AMAÇ

I.1 GİRİŞ ve AMAÇ

Elektronların iyonlara çarpmaları sonucunda meydana gelen iyonlaşma süreçleri laboratuvar ve astrofizik plazmalarda görülen en dinamik atomik süreçler arasındadır [1,2,3,4]. Bu süreçler plazmadaki parçacık dağılımının ve plazma dinamiğinin anlaşılmasında büyük öneme sahiptir [5,6,7,8]. Literatürde astrofizik ve laboratuvar plazmaları ile ilgili yapılan deneysel araştırmalar açısından öneme sahip iyonlar için yeteri derecede atomik veriler bulunmamaktadır. Bu iyonların çarpışmalı iyonlaşma süreçlerini karakterize eden tesir kesitleri ve oranlarına ait mevcut verilerin çoğu da modern teorik yöntemlerle elde edilebilecek duyarlılıklardan yoksundurlar. Plazma içerisinde verilen bir element hemen hemen bütün iyon basamaklarında bulunabilir. Aynı element farklı iyon basamaklarında elektron çarpması sonucu iyonlaşabilir. Dolayısıyla bir element için elektron çarpması sonucu iyonlaşmasını karakterize eden toplam tesir kesitleri için bu elementin plazmada bulunabilecek bütün iyon basamakları için hesap yapılmalıdır [4,9]. Biz bu tezimizde esas olarak rölativistik etkileri göz önüne alan yüksek duyarlılığa sahip elektron çarpışmalı tesir kesit hesabı yapmayı amaç edindik. Bu amaca yönelik olarak hesaplamaları rölativistik etkileri tatmin edici şekilde dikkate alan Breit-Pauli yaklaşımını [10,11] kullandık. Özel olarak hesaplar sodyum konfigürasyonuna sahip Mg^{1+} , Ar^{7+} , Kr^{25+} , Sn^{39+} , Xe^{43+} , ve W^{63+} iyonların elektron çarpışmalı kısmi ve toplam tesir kesitleri için yapıldı. Sodyum konfigürasyonuna sahip herhangi bir iyon $1s^2 2s^2 2p^5 3s$ şeklinde bir elektron konfigürasyonuna sahiptir. Biz bu çalışmamızda her iyon için 2s, 2p ve 3s kabuklarından iyonlaşma süreçlerine ait kısmi tesir kesitlerini hesapladık. Hesaplamalar bağımsız süreç (independent process) [12-19] ve konfigürasyon ortalamalı çarpıtılmış dalga (configuration-average distorted-wave) [20-24] yaklaşımında yapıldı. Yüksek enerjilerde doğrudan iyonlaşma tesir kesitleri için Younger tesir kesit formülü kullanıldı [25-29]. Yüksek enerjilerde uyarılmalı

tesir kesitleri için benzer şekilde ampirik bir formül kullanılmıştır. Bu formüller sonuçlar ve deęerlendirmeler kısmında verilmiştir. Bu tezimizin sonuçları bir makale yayınlanmak üzere hazırlanmaktadır. İyonlaşma enerjileri ve gelen elektron için kullanılan enerji deęerleri tablolarda verilmiştir. Ayrıca rakamsal büyüklükleri göstermek için gelen ve iyonlaşan elektron enerjilerinin fonksiyonu olarak kısmi tesir kesitleri tablolar halinde sunulmuştur. Kısmi ve toplam elektron çarpışmalı tesir kesitleri için elde edilen sonuçlar grafiklerle ve enerji hesapları da tablolar da verilmiştir.

BÖLÜM II

TEORİ

II.1 GENEL OTOİYONLAŞMA ORAN FORMÜLÜNÜN TÜRETİLMESİ

Işıma alanı ile etkileşen atomik bir sistem göz önüne alalım. Işıma alanı ve atomik sistemin ortak Hamiltoniyeni aşağıdaki şekilde yazılabilir:

$$\hat{H} = \hat{H}_{ışma} + \hat{H}_{atom} + \hat{H}_{etkileşme} \quad (\text{II.1})$$

Bu Hamiltoniyedeki terimler aşağıda tanımlanmıştır. İlk terim ışıma alanının Hamiltoniyenidir ve

$$\hat{H}_{ışma} = \sum_{\vec{k}, \lambda} \hbar \omega_{\vec{k}} \left(a_{\vec{k}, \lambda}^\dagger a_{\vec{k}, \lambda} + \frac{1}{2} \right) \quad (\text{II.2})$$

şeklinde yazılabilir [30,32]. Burada $a_{\vec{k}, \lambda}$ ve $a_{\vec{k}, \lambda}^\dagger$, sırasıyla, yayılma vektörü \vec{k} , polarizasyon vektörü $\hat{e}_{\vec{k}, \lambda}$, lineer momentumu $\hbar \vec{k}$ ve enerjisi $\hbar \omega_{\vec{k}}$ olan fotona ait yok etme ve yaratma operatörleridirler. Işıma alanına ait Hamiltoniyen ikinci kuantalaşma formalizmi çerçevesinde kolaylıkla türetilebilir. (II.1)'deki ikinci terim atomik Hamiltoniyendir ve bu terimin N elektronlu bir atom için relativistik olmayan ifadesi

$$\hat{H}_{atom} = \sum_{i=1}^N \left[\frac{P_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_i} \right] + \sum_{i>j=1}^N \frac{e^2}{r_{ij}} \quad (\text{II.3})$$

şeklinde verilebilir. Bu Hamiltoniyen yazılırken atomik çekirdeğin hareketsiz olduğu kabul edilmiştir. Elektronların kinetik enerjileri ile çekirdekte olan Coulomb etkileşmelerinden kaynaklanan potansiyel enerjileri aynı toplam birleştirilmiştir. Bu Hamiltoniyendeki ikinci terim elektronların kendi aralarındaki itici Coulomb etkileşmesinden kaynaklanan potansiyeli temsil etmektedir. (II.1) denklemindeki son terim atomla ışınım alanı (elektromagnetik alan) arasındaki etkileşmeyi temsil etmektedir. Işınım alanının elektrik ve magnetik alan bileşenleri, $\vec{A}(\vec{r},t)$ vektör potansiyeli ve $\phi(\vec{r},t)$ skaler potansiyeli temsil etmek üzere cgs birim sisteminde

$$\vec{B}(\vec{r},t) = \vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{r},t) \text{ ve } \vec{E}(\vec{r},t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}(\vec{r},t)}{\partial t} - \vec{\nabla} \phi(\vec{r},t) \quad (\text{II.4})$$

şeklinde yazılacakları hatırlanırsa [33] ışınım alanı ile atom arasındaki etkileşme

$$\hat{H}_{\text{etkileşme}} = \sum_{i=1}^N \left\{ -\frac{e_i}{2m_i c} (\vec{p}_i \cdot \vec{A}(\vec{r}_i, t) + \vec{A}(\vec{r}_i, t) \cdot \vec{p}_i) + \frac{e_i^2}{2m_i c^2} \vec{A}^2(\vec{r}_i, t) + e_i \phi(\vec{r}_i, t) \right\} \quad (\text{II.5})$$

şeklinde ifade edilebilir [30,31]. Coulomb ayarı (enine ayar)

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A}(\vec{r}, t) = 0 \quad (\text{II.6})$$

kullanılırsa

$$\vec{p}_i \cdot \vec{A}(\vec{r}, t) = \vec{A}(\vec{r}_i, t) \cdot \vec{p}_i \quad (\text{II.7})$$

olacağından bu ifade

$$\hat{H}_{\text{etkileşme}} = \sum_{i=1}^N \left\{ -\frac{e_i}{m_i c} \vec{p}_i \cdot \vec{A}(\vec{r}_i, t) + \frac{e_i^2}{2m_i c^2} \vec{A}^2(\vec{r}_i, t) + e_i \phi(\vec{r}_i, t) \right\} \quad (\text{II.8})$$

şeklinde basitleştirilebilir. Eğer atom ile harici elektromagnetik alanın etkileştiği uzayda harici elektromagnetik alana ait herhangi bir kaynak yoksa bu durumda

$\phi(\vec{r}, t) = 0$ olacaktır. Eğer ışınma alanını tanımlayan vektör potansiyeli atomik alanlar yanında yani $\frac{e}{a_0^2}$ ile kıyaslandığında küçük kalıyorsa yukarıdaki etkileşme Hamiltoniyenindeki $\vec{A}^2(\vec{r}, t)$ terimi de ihmal edebiliriz. Atomdaki elektronların özdeş parçacıklar olduğu hatırlanırsa ışınma alanı ile etkileşme Hamiltoniyeni

$$\hat{H}_{\text{etkileşme}} = -\frac{e}{mc} \sum_{i=1}^N \vec{p}_i \cdot \vec{A}(\vec{r}_i, t) \quad (\text{II.9})$$

şeklinde basitleştirilebilir. Bu Hamiltoniyen her elektronun kendi konumunda ayrı ayrı elektromagnetik alanla etkileştiğini işaret etmektedir. Dolayısıyla bundan sonraki formülasyonu bir elektronun elektromagnetik alanla etkileşmesini göz önüne alarak yapacağız. Bu etkileşmenin atom üzerindeki etkileri birinci mertebeden pertürbasyonla hesap edilebilir. Burada pertürbe olmamış haller için atomun etkileşmeden önceki haliyle ışınma alanının etkileşmeden önceki hallerinin çarpımları alınabilir. Bu yaklaşım çerçevesinde kendisine pertürbasyon olarak bakılacak Schrödinger temsilinde ifade edilmiş etkileşme terimi vektör potansiyelinin foton yaratma ve yok etme operatörleri cinsinden

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{V}} \sum_{\vec{k}, \lambda} \omega_{\vec{k}}^{-1/2} (\vec{e}_{\vec{k}\lambda} \cdot \vec{p}) [a_{\vec{k}\lambda} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + a_{\vec{k}, \lambda}^\dagger e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}] \quad (\text{II.10})$$

şeklinde yazılabileceği hatırlanırsa

$$\hat{H}_1 = \left(\frac{e}{mc} \right) \vec{p} \cdot \vec{A}(\vec{r}, t) \quad (\text{II.11})$$

etkileşme terimi

$$\hat{H}_1 = \sqrt{\frac{2\pi e^2 \hbar}{m^2 V}} \sum_{\vec{k}, \lambda} \omega_{\vec{k}}^{-1/2} (\vec{e}_{\vec{k}\lambda} \cdot \vec{p}) [a_{\vec{k}\lambda} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + a_{\vec{k}, \lambda}^\dagger e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}] \quad (\text{II.12})$$

şeklinde yazılabilir. Bu etkileşme terimi de aşağıdaki şekilde iki terimden ibaretmiş gibi düşünülebilir.

$$\hat{H}_1^{(+)} = \sqrt{\frac{2\pi e^2 \hbar}{m^2 V}} \sum_{\vec{k}, \lambda} \omega_{\vec{k}}^{-1/2} (\vec{e}_{\vec{k}\lambda} \cdot \vec{p}) a_{\vec{k}\lambda} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (\text{II.13})$$

$$\hat{H}_1^{(-)} = \sqrt{\frac{2\pi e^2 \hbar}{m^2 V}} \sum_{\vec{k}, \lambda} \omega_{\vec{k}}^{-1/2} (\vec{e}_{\vec{k}\lambda} \cdot \vec{p}) a_{\vec{k}\lambda}^\dagger e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (\text{II.14})$$

Atom ve elektromagnetik alanın etkileşmeden önceki hal fonksiyonları sırasıyla Φ_a ve $|n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle$ şeklinde gösterileceklerdir. Burada n_i ile kastedilen şeyin \vec{k}_i yayılma vektörüne ve λ_i dalgaboyuna sahip fotonların sayısı olduğu anlaşılmalıdır. Böylece 1. mertebeden pertürbasyon kullanılarak $\hat{H}_1^{(+)}$ ve $\hat{H}_1^{(-)}$ etkileşmelerine ait matris elemanlarını hesaplayabiliriz. Bu etkileşmeler sonucunda foton yaratma ve yok etme operatörlerinin özelliklerine göre ışıma alanı ya bir foton kazanacak ya da bir foton kaybedecektir. Burada etkileşme esnasında kazanılan ve kaybedilen fotonun \vec{k} yayılma vektörü ve λ dalgaboyuna sahip olduğu kabul edilecektir. Diğer taraftan bu etkileşme sonucunda atomdaki değişikliğin bir elektronunun yörünge değişikliği şeklinde olacağı düşünülürse ve elektron spin orbitallerinin geçiş olmadan önceki ve sonraki halleri de sırasıyla φ_a ve φ_b ile gösterilirse bu matris elemanları aşağıdaki şekilde yazılabilir:

$$\langle \Phi_b; n'_1, n'_2, \dots, n'_i, \dots | \hat{H}_1^{(+)} | \Phi_a; n_1, n_2, \dots, n_i, \dots \rangle = \langle \varphi_b; n_{k\lambda} + 1 | \hat{H}_1^{(+)} | \varphi_a; n_{k\lambda} \rangle \quad (\text{II.15})$$

$$\langle \Phi_b; n'_1, n'_2, \dots, n'_i, \dots | \hat{H}_1^{(-)} | \Phi_a; n_1, n_2, \dots, n_i, \dots \rangle = \langle \varphi_b; n_{k\lambda} - 1 | \hat{H}_1^{(-)} | \varphi_a; n_{k\lambda} \rangle \quad (\text{II.16})$$

Bu integrallerde (II.13) ve (II.14) ifadeleri kullanılırsa

$$\begin{aligned} \langle \varphi_b; n_{\vec{k}\lambda} - 1 | \hat{H}_1^{(-)} | \varphi_a; n_{\vec{k}\lambda} \rangle &= \sqrt{\frac{2\pi e^2 \hbar}{m^2 V}} \omega_{\vec{k}}^{-1/2} \langle \varphi_b; n_{\vec{k}\lambda} - 1 | (\vec{e}_{\vec{k}\lambda} \cdot \vec{p}) a_{\vec{k}\lambda} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} | \varphi_a; n_{\vec{k}\lambda} \rangle \\ &= \sqrt{\frac{2\pi e^2 \hbar n_{\vec{k}\lambda}}{m^2 V}} \omega_{\vec{k}}^{-1/2} \langle \varphi_b | (\vec{e}_{\vec{k}\lambda} \cdot \vec{p}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} | \varphi_a \rangle \end{aligned} \quad (\text{II.17})$$

ve

$$\langle \varphi_b; n_{\vec{k}\lambda} + 1 | \hat{H}_1^{(+)} | \varphi_a; n_{\vec{k}\lambda} \rangle = \sqrt{\frac{2\pi\hbar e^2 (n_{\vec{k}\lambda} + 1)}{m^2 V}} \omega_{\vec{k}}^{-1/2} \langle \varphi_b | (\vec{e}_{\vec{k}\lambda} \cdot \vec{p}) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} | \varphi_a \rangle \quad (\text{II.18})$$

sonuçları kolayca bulunabilir. Bu sonuçları uygularken $\vec{k} \cdot \vec{r} \ll 1$ olduğu yani dipol yaklaşımı kabul edilecektir. Diğer bir deyişle atom tarafından soğurulacak veya yayımlanacak fotonun dalgaboyunun atomik boyutlar yanında bu kabulü haklı çıkaracak boyutlarda olduğu kabul edilecektir. Dipol yaklaşımı çerçevesinde

$$\left[\vec{r}, \hat{H}_{atom} \right] = \left(\frac{i\hbar}{m} \right) \vec{p} \quad (\text{II.19})$$

komütasyon bağıntısı hatırlanırsa ve

$$\omega_{ba} = \frac{(E_b - E_a)}{\hbar} \quad (\text{II.20})$$

tanımı yapılırsa

$$\vec{e}_{\vec{k}\lambda} \cdot \langle \varphi_b | \vec{p} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} | \varphi_a \rangle = \vec{e}_{\vec{k}\lambda} \cdot \langle \varphi_b | \vec{p} | \varphi_a \rangle = im\omega_{ba} \vec{e}_{\vec{k}\lambda} \cdot \langle \varphi_b | \vec{r} | \varphi_a \rangle \quad (\text{II.21})$$

olduğu görülür. Geçiş esnasında enerji korunumu sağlandığından $\omega_{ba} = \omega_{\vec{k}}$ olduğu da aşık olmalıdır. Böylece pertürbasyon olarak baktığımız atom ile ışımaya alanı arasındaki etkileşme terimlerine ait matris elemanları da aşağıdaki nihai şekillerini almış olurlar.

$$\langle \varphi_b; n_{\vec{k}\lambda} + 1 | \hat{H}_1^{(+)} | \varphi_a; n_{\vec{k}\lambda} \rangle_{E_1} = i \sqrt{\frac{2\pi e^2 \hbar (n_{\vec{k}\lambda} + 1)}{V}} \omega_{\vec{k}}^{1/2} \vec{e}_{\vec{k}\lambda} \cdot \langle \varphi_b | \vec{r} | \varphi_a \rangle \quad (\text{II.22})$$

$$\langle \varphi_b; n_{\vec{k}\lambda} - 1 | \hat{H}_1^{(-)} | \varphi_a; n_{\vec{k}\lambda} \rangle_{E_1} = i \sqrt{\frac{2\pi e^2 \hbar n_{\vec{k}\lambda}}{V}} \omega_{\vec{k}}^{1/2} \vec{e}_{\vec{k}\lambda} \cdot \langle \varphi_b | \vec{r} | \varphi_a \rangle \quad (\text{II.23})$$

Diğer taraftan relativistik etkiler göz ardı edilerek çok elektronlu bir atomu,

$$\bar{H}_{atom} = \sum_i \left(\frac{P_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_i} \right) + \sum_{i \langle j=1}^N \frac{e^2}{r_{ij}} \quad (\text{II.24})$$

şeklinde bir Hamiltoniyen ile temsil edebiliriz. Bu Hamiltoniyene ait özdeğer denklemini çözerek atoma ait hal fonksiyonu bulunabilir.

II.2 ATOMİK HAL FONKSİYONLARI

Biz burada atoma ait hal fonksiyonunun radyal orbitallerini hesaplamak için Hartree-Fock yaklaşımını kullanacağız. Bunun için önce atomik hal fonksiyonlarının atomun terim simetrisine uygun Slater determinantlarının antisimetrik lineer karışımı şeklinde olduğunu kabul edeceğiz. q_1, q_2, \dots, q_N elektronların uzay ve spin koordinatlarını göstermek üzere küresel simetriye sahip taban hali için atomik hal fonksiyonu

$$\Psi(q_1, q_2, \dots, q_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} u_\alpha(q_1) & u_\beta(q_1) & \dots & u_\nu(q_1) \\ u_\alpha(q_2) & u_\beta(q_2) & \dots & u_\nu(q_2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ u_\alpha(q_N) & u_\beta(q_N) & \dots & u_\nu(q_N) \end{vmatrix} \quad (\text{II.25})$$

şeklinde tek bir Slater determinantı [30,34,35,36] olarak ifade edilebilir. Elektron spin orbitallerinin (n, l, m_l, m_s) şeklinde ifade edilen kuantum sayıları bu determinantta $\alpha, \beta, \dots, \nu$ sembolleri ile gösterilmiştir. Aynı zamanda elektron spin orbitallerinin

$$\langle u_\mu | u_\lambda \rangle = \int u_\mu^*(q) u_\lambda(q) dq = \delta_{\lambda\mu} \quad (\text{II.26})$$

şeklinde ifade edilen diklik ve normalizasyon bağıntısını sağladıklarını da belirtmeliyiz. (II.25) hal fonksiyonuna göre (II.24) denklemindeki atomik Hamiltoniyenin beklenen değeri, ayrı ayrı bu Hamiltoniyedeki tek ve çift elektron operatörlerinin beklenen değerleri için bulunan sonuçların toplamından elde edilecektir. Bu hesaplamalar için önce elektronun kinetik enerjisini ve çekirdekle etkileşmesini temsil eden tek elektron operatörünü ve elektron-elektron Coulomb etkileşmesini temsil eden iki elektron operatörlerini tanımlayalım. Tek elektron operatörü

$$H_1 = \sum_i \hat{f}_i = \sum_i \left(\frac{P_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_i} \right) \quad (\text{II.27})$$

şeklinde ve iki elektron operatörü de

$$g_{ij} = \frac{e^2}{r_{ij}} \quad (\text{II.28})$$

şeklinde tanımlanacaktır. Bu operatörlerin atom birim sistemindeki karşılıkları da sırasıyla

$$f_i = -\frac{\nabla_i^2}{2} - \frac{Z}{r_i} \quad (\text{II.29})$$

ve

$$g_{ij} = \frac{1}{r_{ij}} \quad (\text{II.30})$$

ifadeleriyle verilebilirler. İki elektron operatörünün matris elemanının genel ifadesi Ek.A.'da türetilmiştir.

Şimdi bu operatörlerin (II.25) hal fonksiyonlarına göre beklenen değerlerini hesaplayalım. Eğer $\lambda = \alpha, \beta, \dots, \nu$ kuantum sayılarını ve $\psi_H = u_\alpha(q_1)u_\beta(q_2)\dots u_\nu(q_N)$ ile de elektron spin orbitallerinin çarpımı temsil edilirse (II.29) ile temsil edilen tek elektron operatörünün beklenen değeri için

$$\begin{aligned}
\langle \Psi | \hat{H}_1 | \Psi \rangle &= \sum_{i=1}^N \sum_P (-1)^P \langle \psi_H | f_i | \Psi_H \rangle \\
&= \sum_{i=1}^N \langle \psi_H | \hat{f}_i | \psi_H \rangle = \sum_{\lambda} \langle u_{\lambda}(q_i) | \hat{f}_i | u_{\lambda}(q_i) \rangle
\end{aligned} \tag{II.31}$$

sonucu kolaylıkla bulunabilir.

$$I_{\lambda} = \langle u_{\lambda}(q_i) | \hat{f}_i | u_{\lambda}(q_i) \rangle \tag{II.32}$$

tanımı yapılırsa tek elektron operatörünün beklenen değeri için literatürde de sıkça kullanılan

$$\langle \Psi | \hat{H}_1 | \Psi \rangle = \sum_{\lambda} I_{\lambda} \tag{II.33}$$

ifadesi elde edilir. (II.30) ile tanımlanan iki elektron Coulomb etkileşme operatörünün beklenen değeri için permütasyon operatörü yardımıyla

$$\langle \Psi | g_{ij} | \Psi \rangle = \sum_{i < j} \sum_P (-1)^P \langle \psi_H | g_{ij} | \psi_H \rangle \tag{II.34}$$

ifadesi yazılabilir. Bu ifade sadeleştirilerek aşağıdaki şekline kolaylıkla dönüştürülebilir:

$$\begin{aligned}
\langle \Psi | g_{ij} | \Psi \rangle &= \sum_{\substack{\lambda, \mu \\ \text{tüm çiftler}}} \langle u_{\lambda}(q_i) u_{\mu}(q_j) | \frac{1}{r_{ij}} | u_{\lambda}(q_i) u_{\mu}(q_j) \rangle \\
&\quad - \langle u_{\lambda}(q_i) u_{\mu}(q_j) | \frac{1}{r_{ij}} | u_{\mu}(q_i) u_{\lambda}(q_j) \rangle \\
&= \frac{1}{2} \sum_{\lambda} \sum_{\mu} \langle u_{\lambda}(q_i) u_{\mu}(q_j) | \frac{1}{r_{ij}} | u_{\lambda}(q_i) u_{\mu}(q_j) \rangle \\
&\quad - \langle u_{\lambda}(q_i) u_{\mu}(q_j) | \frac{1}{r_{ij}} | u_{\mu}(q_i) u_{\lambda}(q_j) \rangle
\end{aligned} \tag{II.35}$$

Bu sonuçtaki terimlerin fiziksel anlamlarını daha net ortaya koyabilmek için aşağıdaki tanımları yapalım:

$$J_{\lambda\mu} = \left\langle u_{\lambda}(q_i)u_{\mu}(q_j) \left| \frac{e^2}{r_{ij}} \right| u_{\lambda}(q_i)u_{\mu}(q_j) \right\rangle \quad (\text{II.36})$$

$$K_{\lambda\mu} = \left\langle u_{\lambda}(q_i)u_{\mu}(q_j) \left| \frac{e^2}{r_{ij}} \right| u_{\mu}(q_i)u_{\lambda}(q_j) \right\rangle \quad (\text{II.37})$$

Bu tanımlardan hemen

$$J_{\lambda\mu} = J_{\mu\lambda} \quad (\text{II.38})$$

$$K_{\lambda\mu} = K_{\mu\lambda} \quad (\text{II.39})$$

özelliklerinin varlığı ortaya çıkmaktadır. (II.36) ile tanımlanan ifade elektronların doğrudan etkileşmelerini temsil ettiğinden literatürde $J_{\lambda\mu}$ doğrudan elektron-elektron etkileşme terimi olarak isimlendirilir. Bu terimde her elektronun kendi konumunu muhafaza ettiğine dikkat ediniz. Diğer taraftan (II.37) ile temsil edilen $K_{\lambda\mu}$ ifadesinde ise elektronların konumlarını (veya kuantum sayılarını) yer değiştirmektedir. Dolayısıyla $K_{\lambda\mu}$ elektron-elektron değiş tokuş (exchange) etkileşmesi olarak isimlendirilir. $J_{\lambda\mu}$ ve $K_{\lambda\mu}$ için bulunan sonuçlar birleştirilerek elektron-elektron Coulomb etkileşme operatörünün beklenen değeri için

$$\langle \Psi | g_{ij} | \Psi \rangle = \frac{1}{2} \sum_{\lambda} \sum_{\mu} [J_{\lambda\mu} - K_{\lambda\mu}] \quad (\text{II.40})$$

sonucu yazılabilir. Böylece (II.24) ile verilen ve rölativistik olmayan atomik Hamiltoniyenin beklenen değeri için

$$E(\Psi) = \sum_{\lambda} I_{\lambda} + \frac{1}{2} \sum_{\lambda} \sum_{\mu} [J_{\lambda\mu} - K_{\lambda\mu}] \quad (\text{II.41})$$

sonucu bulunur. Varyasyon bu genel enerji ifadesine uygulayarak denklem (II.25) elektron spin orbitallerinin radyal kısımlarını bulabiliriz. Ancak biz bunun yerine

denklem (II.41)'deki enerji ifadesini sodyum konfigürasyonuna sahip bir iyon için açıkça yazdıktan sonra varyasyon prensibini kullanacağız. Bunun için denklem (II.41)'deki $J_{\lambda\mu}$ ve $K_{\lambda\mu}$ ile temsil edilen iki elektron direk ve değiş tokuş integrallerini sodyum konfigürasyonuna sahip bir iyon için hesaplamamız gereklidir. Aşağıda bu hesaplamanın detayı verilmiştir. Bu hesaplamalarda tek elektron spin orbitalleri

$$u_{\lambda}(q_i) = R_{nl}^{\lambda}(r_i) Y_{lm_i}^{\lambda}(\Omega_i) \chi_i^{\lambda}(m_s) = \frac{1}{r} P_{nl}^{\lambda}(r_i) Y_{lm_i}^{\lambda}(\Omega_i) \chi_i^{\lambda}(m_s) \quad (\text{II.42})$$

ile temsil edilmiştir. Elektron-elektron etkileşmesi küresel harmonikler cinsinde

$$\frac{1}{r_{ij}} = \sum_{k,q} \frac{4\pi}{2\lambda+1} \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} Y_{kq}^*(\Omega_i) Y_{kq}(\Omega_j) \quad (\text{II.43})$$

şeklinde yazılabilir [30]. Bu tanımlarla elektron-elektron Coulomb etkileşme integrallerinin

$$\begin{aligned} & \left\langle u_{\lambda}(q_i) u_{\mu}(q_j) \left| \frac{1}{r_{ij}} \right| u_{\nu}(q_i) u_{\eta}(q_j) \right\rangle \\ &= \left\langle \frac{1}{r} P_{nl}^{\lambda}(r_i) Y_{lm_i}^{\lambda}(\Omega_i) \frac{1}{r} P_{nl}^{\mu}(r_j) Y_{lm_j}^{\mu}(\Omega_j) \left| \frac{1}{r_{ij}} \left| \frac{1}{r} P_{nl}^{\nu}(r_i) Y_{lm_i}^{\nu}(\Omega_i) \frac{1}{r} P_{nl}^{\eta}(r_j) Y_{lm_j}^{\eta}(\Omega_j) \right. \right. \right\rangle \quad (\text{II.44}) \\ & \times \delta(m_s^{\lambda}, m_s^{\mu}) \delta(m_s^{\nu}, m_s^{\eta}) \end{aligned}$$

şeklinde yazılabileceği kolaylıkla gösterilebilir. Bu integralin açıl kısmı

$$\left\langle Y_{lm_i}^{\lambda}(\Omega_i) \left| Y_{kq}^*(\Omega_i) \right| Y_{lm_i}^{\nu}(\Omega_i) \right\rangle \left\langle Y_{lm_j}^{\mu}(\Omega_j) \left| Y_{kq}(\Omega_j) \right| Y_{lm_j}^{\eta}(\Omega_j) \right\rangle \quad (\text{II.45})$$

şeklinde radyal kısımdan bağımsız olarak hesaplanabilir. Bir küresel harmoniğin küresel harmonikler cinsinden beklenen değeri

$$\langle l'm' | Y_{LM} | lm \rangle = (-1)^{m'} \sqrt{\frac{(2l'+1)(2L+1)(2l+1)}{4\pi}} \begin{pmatrix} l' & L & l \\ -m' & M & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & L & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{II.46})$$

şeklinde yazılabilir [30-32]. Bu ifade literatürde Gaunt formülü olarak bilinir [32]. Bu ifadedeki $3-j$ sembollerinin sıfırdan farklı olmaları için gerekli koşullar

$$-m' + M + m = 0 \quad , \quad l' + L + l \quad , \quad \Delta(l'Ll) \quad (II.47)$$

şeklinde ifade edilebilir [32]. Küresel harmoniklerin küresel harmonikler cinsinden beklenen değerleri $c^k(lm, l'm')$ katsayıları ile

$$c^k(lm, l'm') = \sqrt{\frac{4\pi}{2k+1}} \langle lm | Y_{km-m'} | l'm' \rangle = (-1)^{m-m'} c^k(lm, l'm') \quad (II.48)$$

şeklinde ilişkilendirilebilir [30]. (II.47)'de verilen koşulları (II.45) integralleri

$$-m_i^\lambda - q + m_i^\nu = 0 \quad , \quad -m_i^\mu + q + m_i^\eta = 0 \quad , \quad m_i^\lambda + m_i^\nu = m_i^\mu + m_i^\eta \quad (II.49)$$

şeklinde ifade edilebilirler. Buradan, (II.47), (II.48), ve (II.49) kuralları (II.45)'de kullanılır ve elde edilen sonuçlar (II.44)'de yerlerine yazılırsa elektron-elektron Coulomb etkileşme integrali için

$$\begin{aligned} & \left\langle u_\lambda(q_i) u_\mu(q_j) \left| \frac{1}{r_{ij}} \right| u_\nu(q_i) u_\eta(q_j) \right\rangle \\ &= \delta(m_s^\lambda, m_s^\nu) \delta(m_s^\mu, m_s^\eta) \delta(m_l^\lambda + m_l^\nu, m_l^\mu + m_l^\eta) \sum_{k=0}^{\infty} c^k(l^\lambda m_l^\lambda, l^\nu m_l^\nu) \\ & \times c^k(l^\mu m_l^\mu, l^\eta m_l^\eta) R^k(\lambda \nu \mu \eta) \end{aligned} \quad (II.50)$$

sonucu bulunur. Bu sonucu

$$\lambda = \nu, \quad \mu = \eta \quad (II.51)$$

özel durumu için daha basit şekilde yazabiliriz. Bu özel durum için (II.50)'deki Kronecker-Delta'ların hepsi 1'e eşit olacağından bu denklem basitleşerek aşağıdaki şekli alır:

$$J_{\lambda\mu} = \left\langle u_{\lambda}(q_i) u_{\mu}(q_j) \left| \frac{1}{r_{ij}} \right| u_{\lambda}(q_i) u_{\mu}(q_j) \right\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} c^k(l^{\lambda} m_l^{\lambda}, l^{\lambda} m_l^{\lambda}) c^k(l^{\mu} m_l^{\mu}, l^{\mu} m_l^{\mu}) \times R^k(\lambda\mu\lambda\mu) \quad (\text{II.52})$$

Bu ifade bu hali ile tamamıyla radyal integrallerin fonksiyonudur. c^k katsayılarının çarpımlarından a^k katsayıları

$$a^k(l^{\lambda} m_l^{\lambda}, l^{\mu} m_l^{\mu}) \equiv c^k(l^{\lambda} m_l^{\lambda}, l^{\lambda} m_l^{\lambda}) c^k(l^{\mu} m_l^{\mu}, l^{\mu} m_l^{\mu}) = \frac{4\pi}{2k+1} \langle l^{\lambda} m_l^{\lambda} | Y_{k0} | l^{\lambda} m_l^{\lambda} \rangle \langle l^{\mu} m_l^{\mu} | Y_{k0} | l^{\mu} m_l^{\mu} \rangle \quad (\text{II.53})$$

şeklinde tanımlanırsa

$$J_{\lambda\mu} = \sum_{k=0}^{\infty} a^k F^k(\lambda\mu) = J_{\mu\lambda} \quad (\text{II.54})$$

sonucu bulunur. Burada F^k integrali

$$F^k(n^{\lambda} l^{\lambda}, n^{\mu} l^{\mu}) = R^k(\nu\mu\nu\mu) = \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \frac{r_i^{\lambda}}{r_i^{\lambda+1}} [P_{nl}^{\lambda}(r_i)]^2 [P_{nl}^{\mu}(r_j)]^2 dr_i dr_j \quad (\text{II.55})$$

şeklinde tamamıyla spin-orbit hallerin radyal kısımlarına bağlı bir integraldir. Benzer şekilde

$$\lambda = \eta, \mu = \nu \quad (\text{II.56})$$

özel durumu için (II.50) ile verilen elektron-elektron etkileşme integrali aşağıdaki şekilde daha sade bir şekilde yazılabilir.

$$\begin{aligned}
K_{\lambda\mu} &= \left\langle u_{\lambda}(q_i)u_{\mu}(q_j) \left| \frac{1}{r_{ij}} \right| u_{\mu}(q_i)u_{\lambda}(q_j) \right\rangle \\
&= \delta(m_s^{\lambda}, m_s^{\mu}) \sum_{k=0}^{\infty} c^k(l^{\lambda}m_l^{\lambda}, l^{\mu}m_l^{\mu}) c^k(l^{\lambda}m_l^{\lambda}, l^{\mu}m_l^{\mu}) R^k(\lambda\mu\mu\lambda)
\end{aligned} \tag{II.57}$$

Bu integralin sıfırdan farklı olabilmesi için birbiri ile integre edilen radyal orbitallerin spinlerinin kuantum sayılarının birbirine eşit olması gereklidir. Benzer şekilde c^k katsayılarının çarpımı

$$b^k(l^{\lambda}m_l^{\lambda}, l^{\mu}m_l^{\mu}) = [c^k(l^{\lambda}m_l^{\lambda}, l^{\mu}m_l^{\mu})]^2 \tag{II.58}$$

şeklinde tanımlanabilir ve böylece

$$K_{\lambda\mu} = \delta(m_s^{\lambda}, m_s^{\mu}) \sum_{k=0}^{\infty} b^k G^k = K_{\mu\lambda} \tag{II.59}$$

sonucu bulunur. Burada, G^k sembolü

$$G^k(n^{\lambda}l^{\lambda}, n^{\mu}l^{\mu}) = R^k(\nu\mu\mu\nu) = \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \frac{r_{<}^{\lambda}}{r_{>}^{\lambda+1}} P_{nl}^{\lambda}(r_i) P_{nl}^{\mu}(r_j) P_{nl}^{\mu}(r_i) P_{nl}^{\lambda}(r_j) dr_i dr_j \tag{II.60}$$

şeklinde bir radyal integraldir. Dikkat edilirse F^k integralinde aynı spin orbitallerine ait radyal orbitaller birbirleri ile integre edilirken, G^k integralinde farklı spin orbitallerine ait radyal orbitaller birbiri ile integre edilmiştir. Bu integrallerin her ikisi de pozitif değerli olup literatürde Slater integralleri [30-36] olarak isimlendirilir. F^k integralleri doğrudan elektron-elektron etkileşmesinin radyal kısmını, G^k integralleri de değiş-tokuşlu elektron-elektron etkileşmesinin radyal kısmını temsil ederler. Bundan dolayı bu integraller sık sık, sırasıyla, direct (doğrudan) ve exchange (değiş-tokuş) etkileşme integralleri olarak isimlendirilir [30-36]

Diğer taraftan (II.33)'deki tek elektron integrallerinin toplamı iyondaki dolu kabuklar üzerinden bir toplama dönüştürebiliriz. Eğer dolu kabuklara ait radyal orbitalleri $P_{n_a l_a}(r)$ ile gösterirsek bu toplamdaki her hangi bir terime ait tek elektron integrali

$$I_\lambda = \int_0^\infty P_{n_\lambda l_\lambda}(r) \left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l_\lambda(l_\lambda+1)}{2r^2} - \frac{Z}{r} \right) P_{n_\lambda l_\lambda}(r) dr \quad (\text{II.61})$$

şeklinde yazılabilir. Dolu kabuklardaki elektron sayıları q_a ile temsil edilirse (II.33)'deki tek elektron integralleri

$$\langle \Psi | \hat{H}_1 | \Psi \rangle = \sum_a q_a I_a \quad (\text{II.62})$$

şeklini alır. Böylece bir atomun veya iyonun toplam enerjisi tamamiyle radyal integraller cinsinden

$$E_{\text{top}} = \sum_{\substack{\lambda, \mu \\ \text{tüm elektron} \\ \text{çiftler}}} q_a I_a + \frac{1}{2} \sum_{\lambda} \sum_{\mu} \sum_k (a^k F^k - b^k G^k) \quad (\text{II.63})$$

Bu toplam enerji ifadesi sodyum konfigürasyonuna sahip bir atom veya iyon için yazılırsa

$$\begin{aligned} E_{\text{top}} = & 2I(1s,1s) + 2I(2s,2s) + 6I(2p,2p) + I(3s,3s) + F_0(1s,1s) + 4F_0(1s,2s) \\ & - 2G_0(1s,2s) + 12F_0(1s,2p) - 2G_1(1s,2p) + 2F_0(1s,3s) - G_0(1s,3s) \\ & + F_0(2s,2s) + 12F_0(2s,2p) - 2G_1(2s,2p) + 2F_0(2s,3s) - 1G_0(2s,3s) \\ & + 15F_0(2p,2p) - 1.2F_2(2p,2p) + 6F_0(2p,3s) - G_1(2p,3s) \end{aligned} \quad (\text{II.64})$$

sonucu bulunur. Bu ifadedeki I , F ve G integrallerini çarpan a^k ve b^k katsayıları literatürdeki tablolardan alındı [36].

Varyasyon prensibi kullanılarak elektron spin orbitallerinin radyal kısımlarını elde edebileceğimiz denklemler oluşturulabilir. Eğer varyasyon prensibini [37] örnek olarak yukarıdaki toplam enerji ifadesine uygularsak sodyum konfigürasyonuna sahip atom veya iyonun elektron spin orbitallerinin radyal kısımları için Hartree-Fock adı verilen çözümleri birbirine bağlı radyal denklemler elde edilir. Bu denklemlerden elde edilen radyal orbitaller açılmal kısımları ile birleştirilerek, elektron spin orbitalleri oluşturulur. Yukarıdaki toplam enerji ifadesi radyal orbitalleri

bilinmeyen elektron spin orbitallerinden kurulmuş Slater determinantı kullanılarak oluşturulduğu için, toplam dalga fonksiyonunun antisimetrik olma özelliği de hesaplara otomatik olarak yansıtılmış olmaktadır.

Burada varyasyon prensibini radyal orbitallerdeki ufak değişmelere karşılık toplam enerjinin kararlı olmasını şart koşarak uygulayacağız. Varyasyon prensibini uygularken, elektron spin orbitallerinin normalizasyon ve diklik özellikleri muhafaza edilmelidir. Bu koşul uygun Lagrange çarpanları vasıtasıyla yerine getirilebilir.

Toplam enerji ifadesine varyasyon prensibini uygulamadan önce, bu ifadedeki ortonormalite, tek-elektron ve iki elektron radyal integrallerinin varyasyonları için kolaylıkla elde edilebilecek genel kuralları verelim.

$$N_{\lambda\mu} = \int_0^{\infty} P_{\lambda}(r) P_{\mu}(r) dr = \delta(\lambda, \mu) \quad (\text{II.65})$$

şeklinde verilen ortonormalite integralinin varyasyonu alınırsa

$$\delta N_{\lambda\mu} = (1 + \delta_{\lambda\mu}) \int_0^{\infty} \delta P_{\lambda}(r) P_{\mu}(r) dr \quad (\text{II.66})$$

bulunur. Şimdi, (II.61) ile tanımlanan tek elektron integralinin varyasyonu için

$$\begin{aligned} \delta I_{\lambda} = & \int_0^{\infty} \delta P_{\lambda}(r) \left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l_{\lambda}(l_{\lambda}+1)}{2r^2} - \frac{Z}{r} \right] P_{\lambda}(r) dr \\ & + \int_0^{\infty} P_{\lambda}(r) \left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l_{\lambda}(l_{\lambda}+1)}{2r^2} - \frac{Z}{r} \right] \delta P_{\lambda}(r) dr \end{aligned} \quad (\text{II.67})$$

yazılabilir.

$$\int_0^{\infty} P_{\lambda}(r) \frac{d^2}{dr^2} \delta P_{\lambda}(r) dr = \int_0^{\infty} \delta P_{\lambda}(r) \frac{d^2}{dr^2} P_{\lambda}(r) dr \quad (\text{II.68})$$

eşitliği kullanılarak

$$\delta I_\lambda = 2 \int_0^\infty \delta P_\lambda(r) \left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l_\lambda(l_\lambda+1)}{2r^2} - \frac{Z}{r} \right] P_\lambda(r) dr \quad (\text{II.69})$$

sonucu kolaylıkla elde edilebilir. (II.55) ve (II.60) ile tanımlanan iki-elektron integralleri

$$Y_k(\lambda\mu, r) = r \int_0^\infty \frac{r'^k}{r'^{k+1}} P_\lambda(r') P_\mu(r') dr' = \frac{1}{r^k} \int_0^r r'^k P_\lambda(r') P_\mu(r') dr' + r^{k+1} \int_r^\infty \frac{1}{r'^{k+1}} P_\lambda(r') P_\mu(r') dr' \quad (\text{II.70})$$

tanımı yapılırsa

$$F^k(\lambda, \mu) = \int_0^\infty P_\lambda^2(r) \frac{1}{r} Y_k(\mu\mu, r) dr = \int_0^\infty P_\mu^2(r) \frac{1}{r} Y_k(\lambda\lambda, r) dr \quad (\text{II.71})$$

$$G^k(\lambda, \mu) = \int_0^\infty P_\lambda^2(r) P_\mu^2(r) \frac{1}{r} Y_k(\lambda\mu, r) dr \quad (\text{II.72})$$

şeklini alırlar. Varyasyon prensibini bu hallere uygularsak

$$\delta F^k(\lambda, \lambda) = 4 \int_0^\infty \delta P_\lambda(r) P_\lambda(r) \frac{1}{r} Y_k(\lambda\lambda, r) dr \quad (\text{II.73})$$

$$\delta F^k(\lambda, \mu) = 2(1 + \delta_{\lambda\mu}) \int_0^\infty \delta P_\lambda(r) P_\lambda(r) \frac{1}{r} Y_k(\mu\mu, r) dr \quad (\text{II.74})$$

$$\delta G^k(\lambda, \mu) = 2(1 + \delta_{\lambda\mu}) \int_0^\infty \delta P_\lambda(r) P_\mu(r) \frac{1}{r} Y_k(\lambda\mu, r) dr \quad (\text{II.75})$$

sonuçları bulunur. $F^k(\lambda, \lambda) = G^k(\lambda, \lambda)$ olduğunu hatırlayınız. Bu sonuçları (II.64) toplam enerjisine uygularsak 1s, 2s, 2p ve 3s kabuklarındaki elektronların radyal orbitalleri aşağıdaki Hartree-Fock denklemleri elde edilebilir. Varyasyon prensibini

uygularken elektron spin orbitallerin diklik ve normalizasyon bağıntılarını uygun Lagrange çarpanları kullanılarak hesaplara dahil edebiliriz. λ_{1s1s} Lagrange çarpanı ile 1s elektrın spin orbitalininin normalizasyon konusu, λ_{1s2s} Lagrange çarpanı ile de 1s ve 2s elektron spin orbitallerinin diklik koşulu hesaplara dahil edilebilir. Benzer şekilde diğerk elektron spin orbitallerinin normalizasyon ve diklik koşulları için de $\lambda_{1s2p}, \lambda_{1s3s}, \lambda_{2s2s}, \lambda_{2s2p}, \lambda_{2p2p}, \lambda_{3s3s}$ için de Lagrange çarpanlarını kullanabiliriz.

$$\delta_{P_{1s}} (E_{tot} - 2\lambda_{1s1s} N_{1s1s} - 4\lambda_{1s2s} N_{1s2s} - 2\lambda_{1s3s} N_{1s3s}) = 0 \quad (\text{II.76})$$

$$\delta_{P_{2s}} (E_{tot} - 4\lambda_{2s1s} N_{2s1s} - 2\lambda_{2s2s} N_{2s2s} - 2\lambda_{2s3s} N_{2s3s}) = 0 \quad (\text{II.77})$$

$$\delta_{P_{2p}} (E_{tot} - 6\lambda_{2p2p} N_{2p2p}) = 0 \quad (\text{II.78})$$

$$\delta_{P_{3s}} (E_{tot} - 2\lambda_{3s1s} N_{3s1s} - 2\lambda_{3s2s} N_{3s2s} - \lambda_{3s3s} N_{3s3s}) = 0 \quad (\text{II.79})$$

Yukarıdaki (II.76), (II.77), (II.78) ve (II.79) denklemleri ile tanımlanan varyasyon hesaplarından 1s, 2s, 2p ve 3s elektron spin orbitallerinin radyal kısımları için Hartree-Fock denklemlerini bulabiliriz. Şimdi sırasıyla yukarıdaki varyasyonları hesaplayalım:

$$\delta_{P_{1s}} E_{tot} - 2\lambda_{1s1s} \delta_{P_{1s}} N_{1s1s} - 4\lambda_{1s2s} \delta_{P_{1s}} N_{1s2s} - 2\lambda_{1s3s} \delta_{P_{1s}} N_{1s3s} = 0 \quad (\text{II.80})$$

$$\delta_{P_{1s}} E_{tot} = 2\lambda_{1s1s} \delta_{P_{1s}} N_{1s1s} + 4\lambda_{1s2s} \delta_{P_{1s}} N_{1s2s} + 2\lambda_{1s3s} \delta_{P_{1s}} N_{1s3s} \quad (\text{II.81})$$

$$\begin{aligned} \delta_{P_{1s}} E_{tot} = & 2\delta_{P_{1s}} I(1s, 1s) + \delta_{P_{1s}} F^0(1s, 1s) + 4\delta_{P_{1s}} F^0(1s, 2s) \\ & - 2\delta_{P_{1s}} G^0(1s, 2s) + 12\delta_{P_{1s}} F^0(1s, 2p) - 2\delta_{P_{1s}} G^1(1s, 2p) \\ & + 2\delta_{P_{1s}} F^0(1s, 3s) - \delta_{P_{1s}} G^0(1s, 3s) \end{aligned} \quad (\text{II.82})$$

Bu ifadedeki terimlerin varyasyonları aşağıda hesaplanmıştır.

$$\delta_{P_{1s}} I(1s, 1s) = 2 \int_0^{\infty} \delta P_{1s}(r) \hat{D}_{1s} P_{1s}(r) dr \quad (\text{II.83})$$

$$\delta_{P_{1s}} F^0(1s, 1s) = 4 \int_0^{\infty} \delta P_{1s}(r) P_{1s}(r) \frac{1}{r} Y_0(1s1s, r) dr \quad (\text{II.84})$$

$$\delta_{P_{1s}} F^0(1s, 2s) = 2 \int_0^{\infty} \delta P_{1s}(r) P_{1s}(r) \frac{1}{r} Y_0(2s2s, r) dr \quad (\text{II.85})$$

$$\delta_{P_{1s}} G^0(1s, 2s) = 2 \int_0^{\infty} \delta P_{1s}(r) P_{2s}(r) \frac{1}{r} Y_0(1s2s, r) dr \quad (\text{II.86})$$

$$\delta_{P_{1s}} F^0(1s, 2p) = 2 \int_0^{\infty} \delta P_{1s}(r) P_{1s}(r) \frac{1}{r} Y_0(2p2p, r) dr \quad (\text{II.87})$$

$$\delta_{P_{1s}} G^1(1s, 2p) = 2 \int_0^{\infty} \delta P_{1s}(r) P_{2p}(r) \frac{1}{r} Y_1(1s2p, r) dr \quad (\text{II.88})$$

$$\delta_{P_{1s}} F^0(1s, 3s) = 2 \int_0^{\infty} \delta P_{1s}(r) P_{1s}(r) \frac{1}{r} Y_0(3s3s, r) dr \quad (\text{II.89})$$

$$\delta_{P_{1s}} G^0(1s, 3s) = 2 \int_0^{\infty} \delta P_{1s}(r) P_{3s}(r) \frac{1}{r} Y_0(1s3s, r) dr \quad (\text{II.90})$$

$$\delta N_{1s1s} = 2 \int_0^{\infty} \delta P_{1s}(r) P_{1s}(r) dr \quad (\text{II.91})$$

$$\delta N_{1s2s} = \int_0^{\infty} \delta P_{1s}(r) P_{2s}(r) dr \quad (\text{II.92})$$

$$\delta N_{1s3s} = \int_0^{\infty} \delta P_{1s}(r) P_{3s}(r) dr \quad (\text{II.93})$$

$$\begin{aligned}
\delta_{P_{1s}} E_{tot} = & 4 \int_0^{\infty} \delta P_{1s}(r) \left[\hat{D}_{1s} P_{1s}(r) + P_{1s}(r) \frac{1}{r} Y_0(1s1s, r) + 2P_{1s}(r) \frac{1}{r} Y_0(2s2s, r) \right. \\
& - P_{2s}(r) \frac{1}{r} Y_0(1s2s, r) + 6P_{1s}(r) \frac{1}{r} Y_0(2p2p, r) - P_{2p}(r) \frac{1}{r} Y_1(1s2p, r) \\
& \left. + P_{1s}(r) \frac{1}{r} Y_0(3s3s, r) - \frac{1}{4} P_{3s}(r) \frac{1}{r} Y_0(1s3s, r) \right] dr \quad (II.94)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
2\lambda_{1s1s} \delta_{P_{1s}} N_{1s1s} + 4\lambda_{1s2s} \delta_{P_{1s}} N_{1s2s} + 2\lambda_{1s3s} \delta_{P_{1s}} N_{1s3s} = & 2\lambda_{1s1s} \int_0^{\infty} \delta P_{1s}(r) P_{1s}(r) dr \\
+ 4\lambda_{1s2s} \int_0^{\infty} \delta P_{1s}(r) P_{2s}(r) dr + 2\lambda_{1s3s} \int_0^{\infty} \delta P_{1s}(r) P_{3s}(r) dr & \quad (II.95)
\end{aligned}$$

Yukarıdaki (II.94)ve (II.95) denklemleri birleştirilirse

$$\begin{aligned}
4 \int_0^{\infty} \delta P_{1s}(r) \left[\hat{D}_{1s} P_{1s}(r) + P_{1s}(r) \frac{1}{r} Y_0(1s1s, r) + 2P_{1s}(r) \frac{1}{r} Y_0(2s2s, r) \right. \\
- P_{2s}(r) \frac{1}{r} Y_0(1s2s, r) + 6P_{1s}(r) \frac{1}{r} Y_0(2p2p, r) - P_{2p}(r) \frac{1}{r} Y_1(1s2p, r) \\
+ P_{1s}(r) \frac{1}{r} Y_0(3s3s, r) - \frac{1}{4} P_{3s}(r) \frac{1}{r} Y_0(1s3s, r) \left. \right] dr = \\
4 \int_0^{\infty} \delta P_{1s}(r) \left[\frac{1}{2} \lambda_{1s1s} P_{1s}(r) + \lambda_{1s2s} P_{2s}(r) + \frac{1}{2} \lambda_{1s3s} P_{3s}(r) \right] dr \quad (II.96)
\end{aligned}$$

Bu son ifade de aşağıdaki şekilde sadeleşir.

$$\begin{aligned}
\hat{D}_{1s} P_{1s}(r) + P_{1s}(r) \frac{1}{r} Y_0(1s1s, r) + 2P_{1s}(r) \frac{1}{r} Y_0(2s2s, r) - P_{2s}(r) \frac{1}{r} Y_0(1s2s, r) \\
+ 6P_{1s}(r) \frac{1}{r} Y_0(2p2p, r) - P_{2p}(r) \frac{1}{r} Y_1(1s2p, r) + P_{1s}(r) \frac{1}{r} Y_0(3s3s, r) \\
- \frac{1}{4} P_{3s}(r) \frac{1}{r} Y_0(1s3s, r) = \lambda_{1s1s} P_{1s}(r) + \lambda_{1s2s} P_{2s}(r) + \frac{1}{2} \lambda_{1s3s} P_{3s}(r) \quad (II.97)
\end{aligned}$$

Bu sonucu literatürde yaygın olarak kullanılan bir notasyonla gösterebiliriz. Bunun için aşağıdaki tanımları yapmak yeterlidir.

$$J_{1s}^0 P_{1s} = \frac{1}{r} Y_0(1s1s, r) P_{1s} , J_{2s}^0 P_{1s} = \frac{1}{r} Y_0(2s2s, r) P_{1s} \quad (\text{II.98})$$

$$J_{2p}^0 P_{1s} = \frac{1}{r} Y_0(2p2p, r) P_{1s} , K_{2s}^0 P_{1s} = \frac{1}{r} Y_0(1s2s, r) P_{2s} \quad (\text{II.99})$$

$$K_{2p}^1 P_{1s} = \frac{1}{r} Y_1(1s2p, r) P_{2p} , K_{3s}^0 P_{1s} = \frac{1}{r} Y_0(1s3s, r) P_{3s} \quad (\text{II.100})$$

tanımlarıyla ve

$$K_{1s}^0 P_{1s} = J_{1s}^0 P_{1s} \quad (\text{II.101})$$

eşitliği hatırlanırsa (II.97) denklemi aşağıdaki daha sade görünümlü şekli alır.

$$\left[\hat{D}_{1s} + 2J_{1s}^0 - K_{1s}^0 + 2J_{2s}^0 - K_{2s}^0 + 6J_{2p}^0 - K_{2p}^1 + J_{3s}^0 - \frac{1}{2} K_{3s}^0 \right] P_{1s}(r) = \lambda_{1s1s} P_{1s}(r) + \lambda_{1s2s} P_{2s}(r) + \frac{1}{2} \lambda_{1s3s} P_{3s}(r) \quad (\text{II.102})$$

Benzer şekilde diğer varyasyon denklemlerinden de 2s, 2p, 3s elektron spin orbitallerinin radyal kısımları için aşağıdaki denklemler bulunabilir. Bu denklemler için de

$$K_{2s}^0 P_{2s} = J_{2s}^0 P_{2s} , K_{2p}^0 P_{2p} = J_{2p}^0 P_{2p} , K_{3s}^0 P_{3s} = J_{3s}^0 P_{3s} \quad (\text{II.103})$$

özdeşlikleri kullanılmıştır:

$$\left[\hat{D}_{2s} + 2J_{1s}^0 - K_{1s}^0 + 2J_{2s}^0 - K_{2s}^0 + 6J_{2p}^0 - K_{2p}^1 + J_{3s}^0 - \frac{1}{2} K_{3s}^0 \right] P_{2s}(r) = \lambda_{2s1s} P_{1s}(r) + \lambda_{2s2s} P_{2s}(r) + \frac{1}{2} \lambda_{2s3s} P_{3s}(r) \quad (\text{II.104})$$

$$\left[\hat{D}_{2p} + 2J_{1s}^0 - \frac{1}{3}K_{1s}^1 + 2J_{2s}^0 - \frac{1}{3}K_{2s}^0 + 6J_{2p}^0 - \frac{2}{5}J_{2p}^2 - K_{2p}^0 + J_{3s}^0 - \frac{1}{2}K_{3s}^0 \right] P_{2p}(r) = \lambda_{2p2p} P_{2p}(r) \quad (\text{II.105})$$

$$\left[\hat{D}_{3s} + 2J_{1s}^0 - K_{1s}^0 + 2J_{2s}^0 - K_{2s}^0 + 6J_{2p}^0 - K_{2p}^1 \right] P_{3s}(r) = \lambda_{3s1s} P_{1s}(r) + \lambda_{3s2s} P_{2s}(r) + \lambda_{3s3s} P_{3s}(r) \quad (\text{II.106})$$

$$\hat{D}_{1s} = \hat{D}_{2s} = \hat{D}_{3s} = \hat{D} \text{ olsun.}$$

$$\hat{h}_{1s2s}^{HF} = \hat{D} + 2J_{1s}^0 - K_{1s}^0 + 2J_{2s}^0 - K_{2s}^0 + 6J_{2p}^0 - K_{2p}^1 + J_{3s}^0 - \frac{1}{2}K_{3s}^0 = \hat{D} + \hat{R}_0 + \frac{1}{2}K_{3s}^0 \quad (\text{II.107})$$

1s ve 2s radyal orbitalleri için Hartree-Fock operatörleri aynı olduğundan P_{1s} , ve P_{2s} radyal orbitalleri otomatik olarak birbirlerine dik olurlar. Çünkü aynı Hermitsel operatörün farklı özdeğerli özfonksiyonları birbirlerine diktirler. Dolayısıyla $\lambda_{1s2s} = \lambda_{2s1s} = 0$ alınabilir.

$$\hat{h}_{3s}^{HF} = \hat{D} + 2J_{1s}^0 - K_{1s}^0 + 2J_{2s}^0 - K_{2s}^0 + 6J_{2p}^0 - K_{2p}^1 + J_{3s}^0 - K_{3s}^0 = \hat{D} + \hat{R}_0 \quad (\text{II.108})$$

$$\langle P_{3s} | \hat{D} + \hat{R}_0 + \frac{1}{2}K_{3s}^0 | P_{1s} \rangle - \lambda_{1s3s} = 0 \quad (\text{II.109})$$

$$\langle P_{3s} | \hat{D} + \hat{R}_0 + \frac{1}{2}K_{3s}^0 | P_{2s} \rangle - \lambda_{2s3s} = 0 \quad (\text{II.110})$$

$$\langle P_{1s} | \hat{D} + \hat{R}_0 | P_{3s} \rangle - \lambda_{1s3s} = 0 \quad (\text{II.111})$$

$$\langle P_{2s} | \hat{D} + \hat{R}_0 | P_{3s} \rangle - \lambda_{2s3s} = 0 \quad (\text{II.112})$$

(II.109)'dan (II.111)'i ve (II.11)'dan (II.112)'yi çıkarırsak

$$\lambda_{1s3s} = -\langle P_{3s} | \frac{1}{2} K_{3s}^0 | P_{1s} \rangle \quad (\text{II.113})$$

$$\lambda_{2s3s} = -\langle P_{3s} | \frac{1}{2} K_{3s}^0 | P_{2s} \rangle \quad (\text{II.114})$$

elde ederiz.

$$\left[\hat{D} + \hat{R}_0 + \frac{1}{2} K_{3s}^0 - \lambda_{1s1s} \right] |P_{1s}\rangle - |P_{3s}\rangle \langle P_{3s} | \frac{1}{2} K_{3s}^0 | P_{1s} \rangle = 0 \quad (\text{II.115})$$

$$\left[\hat{D} + \hat{R}_0 + \frac{1}{2} K_{3s}^0 - \lambda_{2s2s} \right] |P_{2s}\rangle - |P_{3s}\rangle \langle P_{3s} | \frac{1}{2} K_{3s}^0 | P_{2s} \rangle = 0 \quad (\text{II.116})$$

$$\left[\hat{D}_{2p} + 2J_{1s}^0 - \frac{1}{3} K_{1s}^1 + 2J_{2s}^0 - \frac{1}{3} K_{2s}^0 \right. \\ \left. + 6J_{2p}^0 - \frac{2}{5} J_{2p}^2 - K_{2p}^0 + J_{3s}^0 - \frac{1}{2} K_{3s}^0 - \lambda_{2p2p} \right] P_{2p}(r) = 0 \quad (\text{II.117})$$

$$\left[\hat{D} + \hat{R}_0 - \lambda_{3s3s} \right] |P_{3s}\rangle - 2|P_{1s}\rangle \langle P_{1s} | \frac{1}{2} K_{3s}^0 | P_{3s} \rangle - 2|P_{2s}\rangle \langle P_{2s} | \frac{1}{2} K_{3s}^0 | P_{3s} \rangle = 0 \quad (\text{II.118})$$

Denklemleri özuyumlu bir yöntemle çözümlenerek elektron spin orbitalleri için radyal Hartree-Fock orbitalleri bulunmuş olur. Biz bu denklemlerin çözümü için ayrıca program yazma yerine Froese-Fischer, C. [36] tarafından yazılmış Hartree-Fock programını kullandık.

Elektron-iyon çarpışma probleminde gelen serbest elektronun ve iyondan koparak serbest hale gelen elektronların radyal orbitalleri için benzer şekilde Hartree-Fock denklemleri yazılabilir. Bu tür sürekli enerjili Hartree-Fock denklemleri de Pindzola, et al. tarafından geliştirilmiş Hartree-Fock programlarını kullanarak çözdük.

II.3 KONFIGÜRASYON ORTALAMALI İYONLAŞMA TESİR KESİTİ

Biz bu tezimizde

$$(n_1 l_1)^{q_1+1} (n_2 l_2)^{q_2-1} k_i l_i \rightarrow (n_1 l_1)^{q_1} (n_2 l_2)^{q_2} k_f l_f \quad (\text{II.119})$$

şeklinde genel olarak temsil edilen süreçler için, ortalama konfigürasyon uyarımlı tesir kesitlerini ve

$$(n_1 l_1)^{q_1+1} k_i l_i \rightarrow (n_1 l_1)^{q_1} k_e l_e k_f l_f \quad (\text{II.120})$$

şeklinde konfigürasyon ortalama iyonlaşma tesir kesitlerini göz önüne aldık. Ortalama konfigürasyon uyarımlı tesir kesitleri elektron birleşme süreçlerini karakterize eden konfigürasyon ortalama tesir kesitleri ile orantılıdır [4,38]. Örneğin,

$$(n_1 l_1)^{q_1+1} (n_2 l_2)^{q_2-1} (n_3 l_3)^{q_3-1} k_i l_i \rightarrow (n_1 l_1)^{q_1} (n_2 l_2)^{q_2} (n_3 l_3)^{q_3} \quad (\text{II.121})$$

electron birleşme sürecinde $(n_3 l_3)$ yerine $k_f l_f$ ve $q_3 = 1$ alınır

$$(n_1 l_1)^{q_1+1} (n_2 l_2)^{q_2-1} k_i l_i \rightarrow (n_1 l_1)^{q_1} (n_2 l_2)^{q_2} k_f l_f \quad (\text{II.122})$$

şeklinde ifade ettiğimiz ortalama konfigürasyon uyarımlı tesir kesitine ait süreç elde edilmiş olur.

$$(n_1 l_1)^{q_1+1} (n_2 l_2)^{q_2-1} (n_3 l_3)^{q_3-1} k_i l_i \rightarrow (n_1 l_1)^{q_1} (n_2 l_2)^{q_2} (n_3 l_3)^{q_3} \quad (\text{II.123})$$

elektron birleşme sürecine ait tesir kesiti bu sürecin tersi olan ve

$$(n_1 l_1)^{q_1} (n_2 l_2)^{q_2} (n_3 l_3)^{q_3} \rightarrow (n_1 l_1)^{q_1+1} (n_2 l_2)^{q_2-1} (n_3 l_3)^{q_3-1} k_f l_f \quad (\text{II.124})$$

şeklinde ifade edilen oto-iyonlaşma oranı ile ilişkilendirilebilir. Bu ilişki

$$\bar{\sigma}_{birleş} = \frac{2\pi^2}{\bar{k}_i^2} \sum_{l_i} \frac{G_I}{2G_F} \bar{A}_a \quad (\text{II.125})$$

şeklinde yazılır [4]. Burada G_I ve G_F ilk ve son hale ait istatistik ağırlıklardır. Bu ağırlıklar

$$G_I = \begin{pmatrix} 4l_1 + 2 \\ q_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4l_2 + 2 \\ q_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4l_3 + 2 \\ q_3 \end{pmatrix} \quad (\text{II.126})$$

ve

$$G_F = \begin{pmatrix} 4l_1 + 2 \\ q_1 + 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4l_2 + 2 \\ q_2 - 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4l_3 + 2 \\ q_3 - 1 \end{pmatrix} \quad (\text{II.127})$$

ifadeleri ile tanımlanabilirler. Oto-iyonlaşma oranı ise

$$\bar{A}_a = q_2 q_3 \frac{(4l_1 + 2 - q_1)}{\bar{k}_f} M(14; 23) \quad (\text{II.128})$$

şeklinde yazılabilir. Burada $M(14; 23)$

$$\begin{aligned} M(14; 23) &= \sum_{\lambda} \begin{pmatrix} l_1 & \lambda & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \begin{pmatrix} l_3 & \lambda & l_4 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \frac{[R^{\lambda}(14, 23)]^2}{(2\lambda + 1)} \\ &+ \sum_{\lambda'} \begin{pmatrix} l_1 & \lambda' & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \begin{pmatrix} l_3 & \lambda' & l_4 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \frac{[R^{\lambda'}(41, 23)]^2}{(2\lambda' + 1)} \\ &+ \sum_{\lambda, \lambda'} (-1)^{\lambda + \lambda'} \begin{pmatrix} l_1 & \lambda & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_3 & \lambda & l_4 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & \lambda' & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_3 & \lambda' & l_4 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left\{ \begin{matrix} l_1 & \lambda & l_2 \\ l_4 & \lambda' & l_3 \end{matrix} \right\} \end{aligned} \quad (\text{II.129})$$

ile ifade edilir. Bu ifadelerin detayları [4,38] da bulunabilir. (II.125) birleşme tesir kesiti kullanılarak

$$(n_1 l_1)^{q_1+1} (n_2 l_2)^{q_2-1} k_i l_i \rightarrow (n_1 l_1)^{q_1} (n_2 l_2)^{q_2} k_f l_f \quad (\text{II.130})$$

sürecine karşı gelen ortalama konfigürasyon uyarımalı tesir kesiti

$$\bar{\sigma}_{uyarılmalı} = \rho_f \Delta \varepsilon \sum_{l_f} \bar{\sigma}_{birleş} \quad (\text{II.131})$$

ifadesinden elde edilebilir [4]. Burada, $\rho_f = 2 / \pi \bar{k}_f$ şeklinde tanımlanan son hal yoğunluğudur. Son hal yoğunluk ifadesinin sürekli hallerin radyal kısımları için seçilen normalizasyonu bağlı olduğunu da söylemeliyiz. Biz burada momentum normalizasyonunu kullandık. Böylece, ortalama konfigürasyon uyarımalı tesir kesiti için

$$\bar{\sigma}_{uyarılmalı} = \frac{8\pi}{\bar{k}_i^3 \bar{k}_f} (q_1 + 1) (4l_2 + 3 - q_2) \sum_{l_i, l_f} (2l_i + 1) (2l_f + 1) M(2f; li) \quad (\text{II.132})$$

formülü elde edilmiş olur. Diğer taraftan, konfigürasyon ortalamalı tesir kesiti için aşağıdaki genel süreci göz önüne alalım. Bu süreç

$$(n_1 l_1)^{q_1+1} (n_2 l_2)^{q_2-1} k_i l_i \rightarrow (n_1 l_1)^{q_1} (n_2 l_2)^{q_2} k_f l_f \quad (\text{II.133})$$

sürecinde $(n_2 l_2) = (k_e l_e)$ ve $q_2 = 1$ alınarak elde edilebilir. Dolayısıyla bu sürece ait tesir kesit ifadesi konfigürasyon ortalamalı tesir kesitinin diferansiyel şeklini elde etmekte kullanılabilir.

$$\frac{d\bar{\sigma}_{iyon}}{d\varepsilon} = \rho_e \sum_{l_e} \bar{\sigma}_{uyarılmalı} \quad (\text{II.134})$$

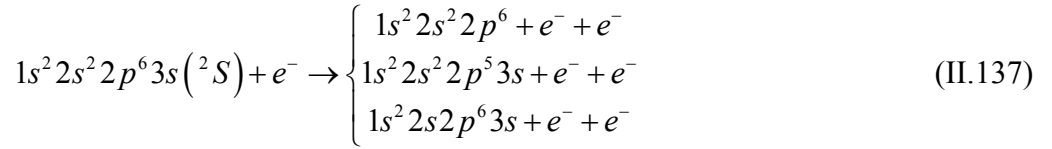
Burada, $\varepsilon = k_e^2 / 2$ şeklinde tanımlı iyondan kopan elektronun kinetik enerjisidir. Ortalama konfigürasyon uyarımalı tesir kesiti için (II.132) denklemi ile verilen ifadesi burada kullanılırsa

$$\frac{d\bar{\sigma}_{iyon}}{d\varepsilon} = \frac{32}{\bar{k}_i^3 \bar{k}_e \bar{k}_f} (q_1 + 1) \sum_{l_i, l_e, l_f} (2l_i + 1)(2l_e + 1)(2l_f + 1) M(ef; li) \quad (\text{II.135})$$

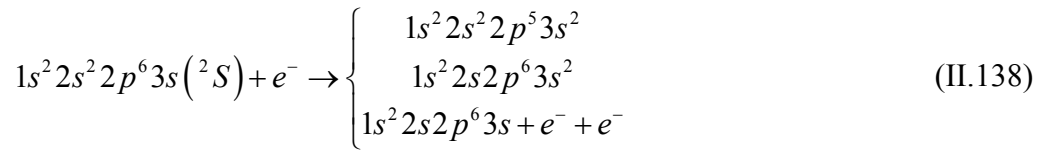
sonucu bulunur. Bu sonuç integrale edilerek toplam konfigürasyon ortalamalı iyonlaşma tesir kesiti bulunur:

$$\bar{\sigma}_{iyon} = \int_0^{E_{\max}/2} \frac{d\bar{\sigma}_{iyon}}{d\varepsilon} d\varepsilon \quad (\text{II.136})$$

Buradaki integralin üst sınırı $E_{\max} = (k_e^2 + k_f^2)/2$ şeklinde tanımlı son halde bulunan iyonlaşmış elektronlara ait kinetik enerjilerin toplamıdır. Biz bu tezimizde (II.132) ve (II.136) ile verilen tesir kesitlerini sodyum konfigürasyonuna sahip iyonlar için yazılabilecek aşağıdaki süreçler için hesapladık ve sonuçları gelen elektronun enerjisine göre grafiklerle gösterdik. Hesaplamalarda doğrudan iyonlaşma süreçleri için aşağıdaki reaksiyonlar göz önüne alınmıştır:



Uyarımalı süreçler için aşağıdaki reaksiyonlar göz önüne alınmıştır:



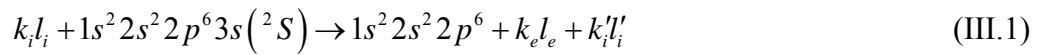
Bu süreçlerde n kuantum sayısı 3 – 6 arasında l kuantum sayısı 0 – 4 arasında değerler almaktadır.

BÖLÜM III

SONUÇLAR ve DEĞERLENDİRMELER

III.1 SODYUM KONFIGÜRASYONUNA SAHİP KALAY VE TUNGSTEN İYONLARININ KONFIGÜRASYON ORTALAMALI ÇARPITILMIŞ DALGA YAKLAŞIMINDA ELEKTRON-ÇARPMA İYONLAŞMA TESİR KESİTLERİNİN HESABI

Mg^{1+} taban seviyesinde $1s^2 2s^2 2p^6 3s(^2S)$ konfigürasyonuna sahiptir. Bu iyonun elektron çarpması sonucu $3s$ kabuğundaki elektronun iyonundan kopması ile sonuçlanan iyonlaşma süreci aşağıdaki şekilde yazılabilir:

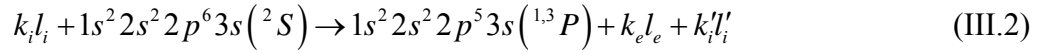


Bu süreçte iyonun elektronu çarpmak üzere gelen elektronu $k_i l_i$, $3s$ kabuğundan kopan elektron da $k_e l_e$ ile temsil edilmiştir. Gelen elektron süreç esnasında enerji ve momentum kaybedeceği için, bu farkı yansıtmak için bu elektron sürecin son halinde $k_i' l_i'$ şeklinde bir notasyonla gösterilmiştir. Burada k elektronun atom birim sistemindeki lineer momentumu, ve l de yörünge açısal momentumudur. Bu ve tezimize konu diğer süreçlere ait iyonlaşma enerjileri yarı-rölativistik, çarpıtılmış dalga yaklaşımı çerçevesinde Cowan programı [11] kullanılarak hesaplanmış ve elde edilen sonuçlar Tablo III.1.'de listelenmiştir. Mg^{1+} iyonunun $3s$ elektronunun iyonlaşması sürecinde gelen elektron için kullanılan kinetik enerji değerleri Tablo

III.2’de listelenmiştir. Bu enerji değerlerinin ilk üçü için iyondan kopan ve serbest hale gelen $k_e l_e$ elektronunun kinetik enerji değerleri Tablo III.3’de listelenmiştir. Bu tabloda 3. sütununda gelen ve kopan elektronun kinetik enerjilerinin fonksiyonu olarak kısmi tesir kesitleri de verilmiştir. Hesaplamalarımızda gelen ve iyondan kopan elektronun açısal momentumu için $l = 0 - 20$ arasında değerler kullanılmıştır.

$3s$ elektronunun doğrudan iyonlaşmasını karakterize eden tesir kesiti Grafik III.1’de nokta-nokta çizgilerle görülmektedir.

Mg^{1+} iyonunun $2p$ kabuğundan elektron kopması ile sonuçlanan doğrudan iyonlaşma süreci aşağıdaki şekilde sembolik olarak gösterilebilir:



Böyle bir sürecin çok sayıda iyonlaşma kanalı oluşturacağı aşikâr olmalıdır. Örneğin, gelen elektron p -elektronu olarak kabul edilirse, sürecin ilk haline ait terim simetrisi $^{1,3}P$ olur. İyonlaşma Coulomb etkileşmesi sonucunda olduğundan süreç esnasında terim simetrisi korunmak zorundadır. Dolayısıyla, sürecin son halindeki l_e ve l_i' açısal momentum kuantum sayıları bu korunum kanununu sağlayacak şekilde seçilmelidirler. Sürecin son halinde $1s^2 2s^2 2p^5 3s$ şeklinde temsil edilen iyonik kısmın terim simetrisi $^{1,3}P$ ’dir. Dolayısıyla, l_e ve l_i' açısal momentum kuantum sayıları öyle seçilmelidir ki, bunlardan oluşacak terim simetrisi $^{1,3}P$ ile birleştirildiğinde sonuç gene $^{1,3}P$ olsun. Bu açıklamalardan l_e ve l_i' açısal momentum kuantum sayıları için

$$l_e l_i' = ss, sp, sd, pp, pd, dd, df, ff, fg, \dots \quad (III.3)$$

değerlerinin verilebileceği anlaşılmalıdır. Buradaki harflerin spektroskopik anlamlara sahip olduklarını hatırlatalım. Örneğin, s ile yörünge açısal momentumu 0, p ile yörünge açısal momentumu 1 temsil edilmiştir. $2p$ elektronunun doğrudan Mg^{1+} iyonundan kopmasını karakterize eden tesir kesiti Grafik III.1’de $---$ ile temsil edilmiştir. Hesaplamalarda gelen elektron için kullanılan enerjiler Tablo III.2’de ve bu enerjilerin ilk üçü için iyondan kopan elektronun enerjilerinin fonksiyonu olarak elde edilen tesir kesitleri Tablo III.4’de listelenmiştir.

Mg^{1+} iyonunun 2s alt kabuğundan doğrudan elektron kopmasını karakterize eden tesir kesiti Grafik III.1'de -.-.- ile çizilmiş eğri ile verilmiştir. Bu hesaplamalarda gelen elektron için kullanılan enerjiler Tablo III.2'de ve bu enerjilerin ilk üçü için iyondan kopan elektronun enerjilerinin fonksiyonu olarak elde edilen tesir kesitleri Tablo III.5'de listelenmiştir. Grafik III.1'den eşik enerjisi civarında baskın tesir kesitin 3s kabuğuna ait olduğu kolaylıkla görülebilir. Gelen elektronun enerjisindeki artmaya paralel olarak 3s iyonlaşma ihtimalinin azalmakta ve 200eV'dan sonra 2p kabuğundan meydana gelebilecek iyonlaşma ihtimali artarak daha baskın olmaktadır. Bu tür bilgiler plazmadaki elektron dağılımlarının anlaşılması için son derece önemli bilgilerdir.

Grafik III.1'de uyarımalı iyonlaşma süreçlerinin katkıları da görülmektedir. Bu katkılar aşağıda sembolik olarak gösterilen süreçlere ait hesaplamalardan elde edilmiştir.

$$k_i l_i + 1s^2 2s^2 2p^6 3s (^2S) \rightarrow 1s^2 2s 2p^6 3snl + k_i' l_i' \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 + k_e l_e + k_i'' l_i'' \quad (III.4)$$

$$k_i l_i + 1s^2 2s^2 2p^6 3s (^2S) \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^5 3snl + k_i' l_i' \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 + k_e l_e + k_i'' l_i'' \quad (III.5)$$

Bu uyarımalı iyonlaşma süreçlerinde n kuantum sayısı için 0–8 aralığında değerler alınmış, l kuantum sayısı için de 0–4 aralığında değerler alınmıştır. Uyarılmış haller Coulomb operatörü ile uyumlu geçiş kurallarına uyacak şekilde sayıları binlerle ifade edilebilecek terim simetrisi oluştururlar. Bunlar ilk ve son halleri birbirine bağlayan ve sayıları binlerle ifade edilebilecek iyonlaşma kanallarının oluşmasına neden olurlar. Dolayısıyla, bu tür hesaplamalar oldukça özveri isteyen çalışmalar olarak değerlendirilmelidir. Yukarıdaki iyonlaşma kanallarının bazıları oto-iyonlaşma ile bozularak iyondan elektron kopmasına neden olma yerine ışımaya yaparak enerjilerini kaybedip ile hallerine dönebilirler. Bu tür ışımalı durulmalar iyonlaşma ihtimalini büyük oranda azaltıcı yönde etkilemektedir. Hesaplamalarda ışımalı durulmaları dikkate alan ve genel ifadesi

$$B_j^a = \frac{\sum_m A_{jm}^a}{\sum_m A_{jm}^a + \sum_k A_{jk}^r} \quad (III.6)$$

olan dallanma oranları hesaplanmış ve kullanılmıştır. Burada j halinde bulunan uyarılmış iyonun m haline oto-iyonlaşma oranları A_{jm}^a ile ve j halinden k haline ışımali geçiş oranları da A_{jk}^r ile gösterilmiştir. Toplamlar verilen bir uyarılmış halin oto-iyonlaşma veya ışımali geçişle geçiş yapabileceği bütün haller üzerinden alınmaktadır. 2s ve 2p kabuklarından elektron uyarılması ile oluşan uyarılmış hallerin bozulmaları sonucunda meydana gelen dolaylı iyonlaşma tesir kesiti doğrudan tesir kesitlerine eklenerek elde edilen toplam tesir kesiti Grafik III.1'de düz siyah çizgi ile çizilmiştir. Uyarılmali kanalların toplam tesir kesitlerine katkıları özellikle eşik enerjisi civarında oldukça dikkate değer büyüklüktedir ve bu şekilden de açıkça görülmektedir. Enerji artışına paralel olarak uyarılmali kanalların etkisi kaybolmakta ve yüksek enerjilerde dikkate alınmayacak değerlere inmektedirler.

Yukarıda Mg^{1+} iyonunu için yapılan enerji, doğrudan ve uyarılmali tesir kesiti hesapları aynı yöntem kullanılarak sodyum konfigürasyonuna sahip Ar^{7+} , Kr^{25+} , Sn^{39+} , Xe^{43+} ve W^{63+} iyonları için de yapıldı. Bu iyonların iyonlaşma enerjileri topluca Tablo 1.'de listelenmiştir. Ar^{7+} 'nin iyonlaşma hesaplarında gelen elektronun kinetik enerjileri için kullanılan değerler Tablo III.6'da ve bu enerjilerin ilk üçü için elde edilen kısmi tesir kesit hesapları iyonu terk eden elektronun enerjisinin fonksiyonu olarak Tablo III.7, Tablo III.8, ve Tablo III.9'da listelenmişlerdir. Bu iyonun 2s, 2p ve 3s kabuklarının iyonlaşmalarını karakterize eden tesir kesitleri Grafik III.2.'de görülmektedir. Bu grafikte 2s, 2p ve 3s kabuklarından meydana gelen doğrudan iyonlaşma tesir kesitlerinin toplamı ve uyarılmali kanallardan kaynaklanan katkıları içeren toplam tesir kesiti de verilmiştir.

Kr^{25+} 'in iyonlaşma hesaplarında gelen elektronun kinetik enerjileri için kullanılan değerler Tablo III.10'da ve bu enerjilerin ilk üçü için elde edilen kısmi tesir kesit hesapları iyonu terk eden elektronun enerjisinin fonksiyonu olarak Tablo III.11, Tablo III.12, ve Tablo III.13'de listelenmişlerdir. Bu iyonun 2s, 2p ve 3s kabuklarının iyonlaşmalarını karakterize eden tesir kesitleri Grafik III.3'de görülmektedir. Bu grafikte 2s, 2p ve 3s kabuklarından meydana gelen doğrudan iyonlaşma tesir kesitlerinin toplamı ve uyarılmali kanallardan kaynaklanan katkıları içeren toplam tesir kesiti de verilmiştir.

Sn^{39+} 'un iyonlaşma hesaplarında gelen elektronun kinetik enerjileri için kullanılan değerler Tablo III.14'de ve bu enerjilerin ilk üçü için elde edilen kısmi

tesir kesit hesapları iyonu terk eden elektronun enerjisinin fonksiyonu olarak Tablo III.15, Tablo III.16, ve Tablo III.17'de listelenmişlerdir. Bu iyonun 2s, 2p ve 3s kabuklarının iyonlaşmalarını karakterize eden tesir kesitleri Grafik III.4'de görülmektedir. Bu grafikte 2s, 2p ve 3s kabuklarından meydana gelen doğrudan iyonlaşma tesir kesitlerinin toplamı ve uyarılmalı kanallardan kaynaklanan katkıları içeren toplam tesir kesiti de verilmiştir.

Xe^{43+} 'ün iyonlaşma hesaplarında gelen elektronun kinetik enerjileri için kullanılan değerler Tablo III.18'de ve bu enerjilerin ilk üçü için elde edilen kısmi tesir kesit hesapları iyonu terk eden elektronun enerjisinin fonksiyonu olarak Tablo III.19, Tablo III.20, ve Tablo III.21'de listelenmişlerdir. Bu iyonun 2s, 2p ve 3s kabuklarının iyonlaşmalarını karakterize eden tesir kesitleri Grafik III.5'de görülmektedir. Bu grafikte 2s, 2p ve 3s kabuklarından meydana gelen doğrudan iyonlaşma tesir kesitlerinin toplamı ve uyarılmalı kanallardan kaynaklanan katkıları içeren toplam tesir kesiti de verilmiştir.

W^{63+} 'ün iyonlaşma hesaplarında gelen elektronun kinetik enerjileri için kullanılan değerler Tablo III.22'de ve bu enerjilerin ilk üçü için elde edilen kısmi tesir kesit hesapları iyonu terk eden elektronun enerjisinin fonksiyonu olarak Tablo III.23, Tablo III.24, ve Tablo III.25'de listelenmişlerdir. Bu iyonun 2s, 2p ve 3s kabuklarının iyonlaşmalarını karakterize eden tesir kesitleri Grafik III.6'da görülmektedir. Bu grafikte 2s, 2p ve 3s kabuklarından meydana gelen doğrudan iyonlaşma tesir kesitlerinin toplamı ve uyarılmalı kanallardan kaynaklanan katkıları içeren toplam tesir kesiti de verilmiştir.

KAYNAKLAR

- [1] Donald E. Osterbrock, '*Astrophysics of Gases of Nebula and Active Galactic Nuclei*', University Science Books Mill Valley California, **1989**.
- [2] Janev R.K., Ed., '*Atomic and Molecular Processes in Fusion Edge Plasmas*', Plenum, New York **1995**.
- [3] *The Opacity Project Team, The Opacity Project Vol.1, Institute of Physics Publications, Bristol, UK., 1995*.
- [4] M. S. Pindzola, Donald C. Griffin and Christopher Bottcher, '*Atomic Processes in Electron-Ion and Ion-Ion Collisions*', Plenum Publishing Corporation, **1986**.
- [5] Griem H. R., '*Principle of Plasma Spectroscopy*' Cam. Uni. Press, **1997**.
- [6] M. Goto and T. Fujimoto, '*Collisional-Radiative Model for Neutral Helium in Plasma: Excitation Cross Section and Singlet-Triplet Wave Function Mixing*', National Institute for Fusion Science, **1997**.
- [7] S. M. Younger, '*Giant resonance effects in the electron-impact ionization of heavy atoms and ions*', Phys. Rev. A, Volume 35, Number 7, **1987**.
- [8] Wallace H. Tucker, '*Radiation Processes In Astrophysics*', The MIT Press, Cambridge, Massachusetts, and London, **1975**.
- [9] ITER Physics Basis, Nucl. Fusion 39, 2137, **1999**; Plasma Phys. Contolled Fusion 44, B323, **2002**.
- [10] R. D. Cowan and J. B Mann, '*Contribution of autoionization to total ionization rates*', The Astrophysical Journal, 232, 940-947, **1979**.
- [11] N.R. Badnell, '*On the effects of the two-body non-fine-structure operators of the Breit-Pauli Hamiltonian*', J.Phys. B., At. Mol. Opt. Phys. 30, 1-11 **1997**.
- [12] U. I. Safronova, T. Kato and M. Ohira, '*Dielectronic Recombination Rate Coefficients to The Excited States Of CIII from CIV*', National Institute for Fusion Science, **1996**.
- [13] Summers H.P., and Hooper M.P., '*On Radiative power from Impurities in Plasmas*', Plasma Physics, Vol.25, 1311, **1983**.

- [14] S. D. Loch, J. A. Ludlow, and M. S. Pindzola ‘*Electron-impact ionization of Pb^{q+} ions for $q=1-10$* ’, *Phys. Rev. A* 72, 0327713, **2005**.
- [15] N. R. Badnell, M. G. O’Mullane, H. P. Summers, Z. Altun, M. A. Bautista, J. Colgan, T. W. Gorczyca, D. M. Mitnik, M. S. Pindzola, and O. Zatsarinny, ‘*Dielectronic recombination data for dynamic finite-density plasmas*’, *Astronomy Astrophysics*, Vol.406, 1151-1165, **2003**.
- [16] D.R. Bates, (ed), ‘*Atomic and Molecular Spectra*’, Academic Press, **1964**.
- [17] D. C. Griffin and M. S. Pindzola, ‘*Distorted wave calculations of electron-impact ionization in the Ni isoelectronic sequence*’, *J. Phys. B* 21, 3253, **1988**.
- [18] N. R. Badnell, ‘*Dielectronic recombination of Fe^{13+} : benchmarking the M-shell*’, arXiv:astro-ph/0607412, v1, 18 Jul **2006**.
- [19] Robert P. Cowan, ‘*The Theory Of Atomic Structure and Spectra*’ University Of California Pres, Berkeley, **1981**.
- [20] S. D. Loch, C. J. Fontes, J. Colgan, M. S. Pindzola, C. P. Balance, D. C. Griffin, M. G. O’Mullane, and H. P. Summers, ‘*A collisional-radiative study of lithium plasmas*’, *July 9*, **2003**.
- [21] N.R. Badnell and M.S. Pindzola, ‘*Resonance contributions to the electron-impact ionization of few-electron highly charged ions*’, *Phys. Rev.*, Volume 47, Number 4, **1993**.
- [22] N.R. Badnell and M.S. Pindzola, ‘*Resonance contributions to the electron-impact ionization of few-electron highly charged ions*’, *Phys. Rev. A*, Volume 47, Number 4, **1993**.
- [23] P. Mandelbaum, M. Cohen, J.L. Schwob, and A. Bar-Shalom, ‘*Excitation-autoionization cross-sections and rate coefficients for Ge-like ions*’, *Eur. Phys. J. D.* 33, 213-220, **2005**.
- [24] M.S. Pindzola, D. M. Mitnik, J. A. Shaw, D.C. Griffin, N.R. Badnell, H.P. Summers and D.R.Schultz, ‘*Electron-impact Ionization of Atomic Ions in the Na Isoelectronic Sequence*’, *Physica Scripta*, Vol. 57, 514-518, **1998**.
- [25] D.C. Griffin, M.S. Pindzola, and C. Bottcher, ‘*Distorted-wave calculations of*

- dielectronic recombination cross sections in the Li isoelectronic sequence*,
Phys. Rev. A., **1985**.
- [26] M.S. Pindzola, S.D. Loch, ‘*Electron-impact ionization excitation cross sections for Fe^{16+} in the configuration-average distorted-wave approximation*’, Phys. Rev. A 73, 012718, **2006**.
- [27] Stephen, M. Younger, ‘*Giant resonance effects in the electron-impact ionization of heavy atoms and ions*’, Phys. Rev. A, Volume 35, Number 7, **1987**.
- [28] G.J. Hatton, N.F. Lane, and J.C. Weisheit, ‘*Inelastic electron-ion scattering in dense plasma*’, J. Phys. B.: At. Mol. Phys. 14 **1981**.
- [29] S. M. Younger ‘*Electron-impact-ionization cross sections and rates for highly ionized berylliumlike ions*’, Phys. Rev. A 24, 1278, **1981**.
- [30] Mitchel Weissbluth, ‘*Photon-Atom Interactions*’, Academic Press, Inc., **1989**.
- [31] Eugen Merzbacher, ‘*Quantum Mechanics*’, John Willey and Sons, New York, **1998**.
- [32] I.I. Sobelman, ‘*An Introduction To The Theory of Atomic Spectra*’, Pergamon Press, **1972**.
- [33] J. D. Jackson, ‘*Classical Electrodynamics*’, John Wiley&Sons, New York, **1978**.
- [34] E. U. Condon, G. H. Shortley, ‘*Atomic Spectra*’, Cambridge At The University Press, **1964**.
- [35] E. U. Condon, Halis Odabaşı, ‘*Atomic Structure*’, Cambridge University
- [36] C. Fischer Froese, ‘*The MCHF Atomic Structure Package*’, Elsevier Sc. Pub., 10, **1991**.
- [37] I. Lindgren, J. Morrison, ‘*Atomic Many Body Theory*’, Springer-Verlag, **1986**.
- [38] I. Yavuz, Master Tezi , ‘ $(n_1 l_1)^{q_1} (n_2 l_2)^{q_2}$ ve $(n_1 l_1)^{q_1} (n_2 l_2)^{q_2} (n_3 l_3)^{q_3}$ şeklinde uyarılmış elektron konfigürasyonlarına sahip atomların oto-iyonlaşma oranlarının açısız integrallerinin açısız momentum grafikleri yardımıyla hesaplanması ve radyal denklemlerin elde edilmesi’, Marmara Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, **2006**.

EKLER

EK A : Coulomb Matris Elemanın 3-j Sembolleri ile Elde Edilmesi

EK. A

Coulomb Matris Elemanının Elde Edilmesi

İki elektron arasındaki Coulomb etkileşim terimi:

$$\frac{1}{r_{12}} = \sum_{\lambda, q} \frac{4\pi}{2\lambda + 1} \frac{r_{<}^{\lambda}}{r_{>}^{\lambda+1}} (-1)^q Y_{\lambda}^q(\theta_1, \phi_1) Y_{\lambda}^{-q}(\theta_2, \phi_2)$$

şeklinde ifade edilir. Bu ifadeyi daha sade hale getirmek için

$$C_q^{\lambda} \equiv \sqrt{\frac{4\pi}{2\lambda + 1}} Y_{\lambda}^q(\theta, \phi)$$

küresel tensör operatörü temsil edersek:

$$\frac{1}{r_{12}} = \sum_{\lambda, q} (-1)^q \frac{r_{<}^{\lambda}}{r_{>}^{\lambda+1}} C_q^{\lambda}(1) C_{-q}^{\lambda}(2)$$

elde edilir. Coulomb matris elemanını elde etmek için

$$|a\rangle \equiv |n_a l_a m_{l_a} m_{s_a}\rangle$$

$$\langle a, b | \frac{1}{r_{12}} | c, d \rangle \equiv \langle n_a l_a m_{l_a} m_{s_a}, n_b l_b m_{l_b} m_{s_b} | \frac{1}{r_{12}} | n_c l_c m_{l_c} m_{s_c}, n_d l_d m_{l_d} m_{s_d} \rangle$$

$$= \sum_{\lambda, q} (-1)^q \langle n_a l_a, n_b l_b | \frac{r_{<}^{\lambda}}{r_{>}^{\lambda+1}} | n_c l_c, n_d l_d \rangle \delta_{m_{s_a}, m_{s_c}} \delta_{m_{s_b}, m_{s_d}}$$

$$\times \langle l_a m_{l_a} | C_q^{\lambda}(1) | l_c m_{l_c} \rangle \langle l_b m_{l_b} | C_{-q}^{\lambda}(2) | l_d m_{l_d} \rangle$$

Wigner-Eckart teoremine göre:

$$\langle l_a m_{l_a} | C_q^\lambda(1) | l_c m_{l_c} \rangle = (-1)^{l_a - m_{l_a}} \begin{pmatrix} l_a & \lambda & l_c \\ -m_{l_a} & q & m_{l_c} \end{pmatrix} \langle l_a \| C^\lambda(1) \| l_c \rangle$$

$$\langle l_b m_{l_b} | C_{-q}^\lambda(2) | l_d m_{l_d} \rangle = (-1)^{l_b - m_{l_b}} \begin{pmatrix} l_b & \lambda & l_d \\ -m_{l_b} & -q & m_{l_d} \end{pmatrix} \langle l_b \| C^\lambda(2) \| l_d \rangle$$

elde ederiz. Burada:

$$\langle l \| C^\lambda(1) \| l' \rangle = (-1)^l \sqrt{(2l+1)(2l'+1)} \begin{pmatrix} l & \lambda & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

şeklinde indirgenemez temsildir. Bu ifadeleri yerine yazarsak:

$$\langle a, b | \frac{1}{r_{12}} | c, d \rangle = \sum_{\lambda, q} (-1)^{q+l_a+l_b-m_{l_a}-m_{l_b}} \delta_{m_{s_a}, m_{s_c}} \delta_{m_{s_b}, m_{s_d}} \langle n_a l_a, n_b l_b | \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} | n_c l_c, n_d l_d \rangle$$

$$\times \begin{pmatrix} l_a & \lambda & l_c \\ -m_{l_a} & q & m_{l_c} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_b & \lambda & l_d \\ -m_{l_b} & -q & m_{l_d} \end{pmatrix} \langle l_a \| C^\lambda(1) \| l_c \rangle \langle l_b \| C^\lambda(2) \| l_d \rangle$$

olur. İndirgenemez temsillerin açık ifadelerini de yazarsak:

$$\langle a, b | \frac{1}{r_{12}} | c, d \rangle = \sum_{\lambda, q} (-1)^{q+l_a+l_b-m_{l_a}-m_{l_b}} \delta_{m_{s_a}, m_{s_c}} \delta_{m_{s_b}, m_{s_d}}$$

$$\times \langle n_a l_a, n_b l_b | \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} | n_c l_c, n_d l_d \rangle \begin{pmatrix} l_a & \lambda & l_c \\ -m_{l_a} & q & m_{l_c} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_b & \lambda & l_d \\ -m_{l_b} & -q & m_{l_d} \end{pmatrix}$$

$$\times (-1)^{l_a+l_b} \sqrt{(2l_a+1)(2l_b+1)(2l_c+1)(2l_d+1)} \begin{pmatrix} l_a & \lambda & l_c \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_b & \lambda & l_d \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

elde ederiz. Gerekli düzenlemeler yapılırsa,

$$\langle a, b | \frac{1}{r_{12}} | c, d \rangle = \delta_{m_{s_a}, m_{s_c}} \delta_{m_{s_b}, m_{s_d}} \sqrt{(2l_a+1)(2l_b+1)(2l_c+1)(2l_d+1)}$$

$$\times \sum_{\lambda} R^{\lambda}(ab, cd) \begin{pmatrix} l_a & \lambda & l_c \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_b & \lambda & l_d \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\times \sum_q (-1)^{q-m_{l_a}-m_{l_b}} \begin{pmatrix} l_a & \lambda & l_c \\ -m_{l_a} & q & m_{l_c} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_b & \lambda & l_d \\ -m_{l_b} & -q & m_{l_d} \end{pmatrix}$$

sonucuna ulaşırız. Burada

$$R^{\lambda}(ab, cd) = \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} P_{n_a l_a}(r_1) P_{n_b l_b}(r_2) \frac{r_{<}^{\lambda}}{r_{>}^{\lambda+1}} P_{n_c l_c}(r_1) P_{n_d l_d}(r_2) dr_1 dr_2$$

Slater integralidir.

TABLO III.1

İYON	GEÇİŞ	İYONLAŞMA ENERJİSİ (eV)
Ar⁷⁺	$1s^2 2s^2 2p^6 3s \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6$	1.4370E+02
	$1s^2 2s^2 2p^6 3s \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^5 3s$	3.9564E+02
	$1s^2 2s^2 2p^6 3s \rightarrow 1s^2 2s 2p^6 3s$	4.7311E+02
Mg¹⁺	$1s^2 2s^2 2p^6 3s \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6$	1.5198E+01
	$1s^2 2s^2 2p^6 3s \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^5 3s$	6.7459E+01
	$1s^2 2s^2 2p^6 3s \rightarrow 1s^2 2s 2p^6 3s$	1.0871E+02
Kr²⁵⁺	$1s^2 2s^2 2p^6 3s \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6$	1.2060E+03
	$1s^2 2s^2 2p^6 3s \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^5 3s$	2.8758E+03
	$1s^2 2s^2 2p^6 3s \rightarrow 1s^2 2s 2p^6 3s$	3.0991E+03
Sn³⁹⁺	$1s^2 2s^2 2p^6 3s \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6$	2.7641E+03
	$1s^2 2s^2 2p^6 3s \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^5 3s$	6.3918E+03
	$1s^2 2s^2 2p^6 3s \rightarrow 1s^2 2s 2p^6 3s$	6.8339E+03
W⁶³⁺	$1s^2 2s^2 2p^6 3s \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6$	7.1331E+03
	$1s^2 2s^2 2p^6 3s \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^5 3s$	1.5879E+04
	$1s^2 2s^2 2p^6 3s \rightarrow 1s^2 2s 2p^6 3s$	1.7315E+04
Xe⁴³⁺	$1s^2 2s^2 2p^6 3s \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6$	3.3353E+03
	$1s^2 2s^2 2p^6 3s \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^5 3s$	7.6612E+03
	$1s^2 2s^2 2p^6 3s \rightarrow 1s^2 2s 2p^6 3s$	8.1987E+03

TABLO III.2

İYON	GEÇİŞ	GELEN ELEKTRONUN ENERJİSİ (eV)
Mg⁺¹	$1s^2 2s^2 2p^6 3s \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^5 3s$	6.8808E+01
		7.0157E+01
		7.2181E+01
		7.4205E+01
		7.7578E+01
		8.0951E+01
		8.7697E+01
		1.0119E+02
		1.1805E+02
		1.3492E+02
		1.5178E+02
		1.6865E+02
		1.8551E+02
		2.0238E+02
	$1s^2 2s^2 2p^6 3s \rightarrow 1s^2 2s 2p^6 3s$	1.1088E+02
		1.1306E+02
		1.1632E+02
		1.1958E+02
		1.2502E+02
		1.3045E+02
		1.4132E+02
		1.6307E+02
		1.9024E+02
		2.1742E+02
		2.4460E+02
		2.7178E+02
	2.9895E+02	
	3.2613E+02	
	$1s^2 2s^2 2p^6 3s \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6$	1.5502E+01
		1.5806E+01
		1.6262E+01
		1.6717E+01
		1.7477E+01
		1.8237E+01
		1.9757E+01
		2.2797E+01
2.6596E+01		
3.0395E+01		
3.4195E+01		
3.7994E+01		
4.1794E+01		
4.5593E+01		

TABLO III.3

Mg¹⁺		
$k_i l_i + 1s^2 2s^2 2p^6 3s(^2S) \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6(^1S) + k_e l_e + k_i' l_i'$		
GELEN ELEKTRONUN ENERJİSİ (eV)	İYONLAŞAN ELEKTRONUN ENERJİSİ (eV)	DİFERANSİYEL TESİR KESİTİ (Mb/eV)
1.5502E +01	1.5198E-02	2.8500E+01
	3.0395E-02	2.8497E+01
	4.5593E-02	2.8495E+01
	6.0791E-02	2.8493E+01
	7.5988E-02	2.8491E+01
	9.1186E-02	2.8490E+01
	1.0638E-01	2.8489E+01
	1.2158E-01	2.8488E+01
	1.3678E-01	2.8486E+01
	1.5198E-01	2.8485E+01
1.5806E +01	3.0395E-02	2.7386E+01
	6.0791E-02	2.7370E+01
	9.1186E-02	2.7367E+01
	1.2158E-01	2.7357E+01
	1.5198E-01	2.7345E+01
	1.8237E-01	2.7343E+01
	2.1277E-01	2.7340E+01
	2.4316E-01	2.7333E+01
	2.7356E-01	2.7332E+01
	3.0395E-01	2.7333E+01
1.6262E +01	5.3192E-02	2.5864E+01
	1.0638E-01	2.5830E+01
	1.5958E-01	2.5805E+01
	2.1277E-01	2.5779E+01
	2.6596E-01	2.5759E+01
	3.1915E-01	2.5743E+01
	3.7234E-01	2.5730E+01
	4.2554E-01	2.5719E+01
	4.7873E-01	2.5717E+01
	5.3192E-01	2.5710E+01

TABLO III.4

Mg^{1+} $k_i l_i + 1s^2 2s^2 2p^6 3s(2S) \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^5 3s(1,3P) + k_e l_e + k'_i l'_i$		
GELEN ELEKTRONUN ENERJİSİ (eV)	İYONLAŞAN ELEKTRONUN ENERJİSİ (eV)	DİFERANSİYEL TESİR KESİTİ (Mb/eV)
6.8808E +01	6.7459E-02	8.4101E-01
	1.3492E-01	8.4097E-01
	2.0238E-01	8.4098E-01
	2.6984E-01	8.4096E-01
	3.3729E-01	8.4103E-01
	4.0475E-01	8.4099E-01
	4.7221E-01	8.4101E-01
	5.3967E-01	8.4103E-01
	6.0713E-01	8.4100E-01
7.0157E +01	6.7459E-01	8.4104E-01
	1.3492E-01	8.3024E-01
	2.6984E-01	8.3040E-01
	4.0475E-01	8.3055E-01
	5.3967E-01	8.3035E-01
	6.7459E-01	8.3035E-01
	8.0951E-01	8.3050E-01
	9.4442E-01	8.3044E-01
	1.0793E+00	8.3041E-01
7.2181E +01	1.2143E+00	8.3058E-01
	1.3492E+00	8.3069E-01
	2.3611E-01	8.1471E-01
	4.7221E-01	8.1480E-01
	7.0832E-01	8.1475E-01
	9.4442E-01	8.1474E-01
	1.1805E+00	8.1489E-01
	1.4166E+00	8.1480E-01
	1.6527E+00	8.1485E-01
1.8888E+00	8.1496E-01	
2.1250E+00	8.1493E-01	
2.3611E+00	8.1490E-01	

TABLO III.5

Mg¹⁺		
$k_i l_i + 1s^2 2s^2 2p^6 3s(^2 S) \rightarrow 1s^2 2s 2p^6 3s(^1,3 S) + k_e l_e + k_i l_i'$		
GELEN ELEKTRONUN ENERJİSİ (eV)	İYONLAŞAN ELEKTRONUN ENERJİSİ (eV)	DİFERANSİYEL TESİR KESİTİ (Mb/eV)
1.1088E +02	1.0871E-01	5.4409E-02
	2.1742E-01	5.4426E-02
	3.2613E-01	5.4428E-02
	4.3484E-01	5.4431E-02
	5.4355E-01	5.4438E-02
	6.5226E-01	5.4429E-02
	7.6097E-01	5.4434E-02
	8.6968E-01	5.4435E-02
	9.7839E-01	5.4437E-02
	1.0871E+00	5.4443E-02
1.1306E +02	2.1742E-01	5.3998E-02
	4.3484E-01	5.4018E-02
	6.5226E-01	5.4039E-02
	8.6968E-01	5.4052E-02
	1.0871E+00	5.4052E-02
	1.3045E+00	5.4060E-02
	1.5219E+00	5.4074E-02
	1.7394E+00	5.4075E-02
	1.9568E+00	5.4073E-02
	2.1742E+00	5.4072E-02
1.1632E +02	3.8049E-01	5.3308E-02
	7.6097E-01	5.3357E-02
	1.1415E+00	5.3407E-02
	1.5219E+00	5.3434E-02
	1.9024E+00	5.3457E-02
	2.2829E+00	5.3475E-02
	2.6634E+00	5.3506E-02
	3.0439E+00	5.3525E-02
	3.4244E+00	5.3514E-02
	3.8049E+00	5.3538E-02

TABLO III.6

İYON	GEÇİŞ	GELEN ELEKTRONUN ENERJİSİ (eV)
Ar⁺⁷	$1s^2 2s^2 2p^6 3s \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^5 3s$	4.0355E+02
		4.1147E+02
		4.2333E+02
		4.3520E+02
		4.5499E+02
		4.7477E+02
		5.1433E+02
		5.9346E+02
		6.9237E+02
		7.9128E+02
		8.9019E+02
		9.8910E+02
		1.0880E+03
		1.1869E+03
	$1s^2 2s^2 2p^6 3s \rightarrow 1s^2 2s 2p^6 3s$	4.8258E+02
		4.9204E+02
		5.0623E+02
		5.2043E+02
		5.4408E+02
		5.6774E+02
		6.1505E+02
		7.0967E+02
		8.2795E+02
		9.4623E+02
		1.0645E+03
		1.1828E+03
		1.3011E+03
		1.4193E+03
	$1s^2 2s^2 2p^6 3s \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6$	1.4657E+02
		1.4945E+02
		1.5376E+02
		1.5807E+02
		1.6526E+02
		1.7244E+02
		1.8681E+02
		2.1555E+02
2.5148E+02		
2.8740E+02		
3.2333E+02		
3.5925E+02		
3.9518E+02		
4.3110E+02		

TABLO III.7

Ar^{7+} $k_i l_i + 1s^2 2s^2 2p^6 3s(^2S) \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6(^1S) + k_e l_e + k_i l_i'$		
GELEN ELEKTRONUN ENERJİSİ (eV)	İYONLAŞAN ELEKTRONUN ENERJİSİ (eV)	DİFERANSİYEL TESİR KESİTİ (Mb/eV)
1.4657E +02	1.4370E-01	3.0456E-02
	2.8740E-01	3.0448E-02
	4.3110E-01	3.0439E-02
	5.7480E-01	3.0432E-02
	7.1850E-01	3.0429E-02
	8.6220E-01	3.0430E-02
	1.0059E+00	3.0433E-02
	1.1496E+00	3.0438E-02
	1.2933E+00	3.0441E-02
	1.4370E+00	3.0443E-02
1.4945E +02	2.8740E-01	2.9374E-02
	5.7480E-01	2.9366E-02
	8.6220E-01	2.9353E-02
	1.1496E+00	2.9339E-02
	1.4370E+00	2.9333E-02
	1.7244E+00	2.9332E-02
	2.0118E+00	2.9330E-02
	2.2992E+00	2.9326E-02
	2.5866E+00	2.9321E-02
	2.8740E+00	2.9318E-02
1.5376E +02	5.0295E-01	2.7879E-02
	1.0059E+00	2.7861E-02
	1.5089E+00	2.7844E-02
	2.0118E+00	2.7811E-02
	2.5148E+00	2.7793E-02
	3.0177E+00	2.7778E-02
	3.5207E+00	2.7765E-02
	4.0236E+00	2.7761E-02
	4.5266E+00	2.7753E-02
	5.0295E+00	2.7745E-02

TABLO III.8

Ar^{7+} $k_i l_i + 1s^2 2s^2 2p^6 3s(^2S) \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^5 3s(^1,3P) + k_e l_e + k_i' l_i'$		
GELEN ELEKTRONUN ENERJİSİ (eV)	İYONLAŞAN ELEKTRONUN ENERJİSİ (eV)	DİFERANSİYEL TESİR KESİTİ (Mb/eV)
4.0355E+02	3.9564E-01	1.0956E-02
	7.9128E-01	1.0954E-02
	1.1869E+00	1.0950E-02
	1.5826E+00	1.0949E-02
	1.9782E+00	1.0951E-02
	2.3738E+00	1.0951E-02
	2.7695E+00	1.0949E-02
	3.1651E+00	1.0948E-02
	3.5608E+00	1.0949E-02
4.1147E+02	3.9564E+00	1.0949E-02
	7.9128E-01	1.0606E-02
	1.5826E+00	1.0601E-02
	2.3738E+00	1.0599E-02
	3.1651E+00	1.0596E-02
	3.9564E+00	1.0593E-02
	4.7477E+00	1.0592E-02
	5.5390E+00	1.0590E-02
	6.3302E+00	1.0589E-02
4.2333E+02	7.1215E+00	1.0588E-02
	7.9128E+00	1.0589E-02
	1.3847E+00	1.0126E-02
	2.7695E+00	1.0116E-02
	4.1542E+00	1.0107E-02
	5.5390E+00	1.0099E-02
	6.9237E+00	1.0092E-02
	8.3084E+00	1.0086E-02
	9.6932E+00	1.0082E-02
4.2333E+02	1.1078E+01	1.0079E-02
	1.2463E+01	1.0077E-02
	1.3847E+01	1.0076E-02

TABLO III.9

Ar^{7+} $k_i l_i + 1s^2 2s^2 2p^6 3s(^2 S) \rightarrow 1s^2 2s 2p^6 3s(^1,3 S) + k_e l_e + k_i' l_i'$		
GELEN ELEKTRONUN ENERJİSİ (eV)	İYONLAŞAN ELEKTRONUN ENERJİSİ (eV)	DİFERANSİYEL TESİR KESİTİ (Mb/eV)
1.4657E +02	1.4370E-01	3.0456E-02
	2.8740E-01	3.0448E-02
	4.3110E-01	3.0439E-02
	5.7480E-01	3.0432E-02
	7.1850E-01	3.0429E-02
	8.6220E-01	3.0430E-02
	1.0059E+00	3.0433E-02
	1.1496E+00	3.0438E-02
	1.2933E+00	3.0441E-02
	1.4370E+00	3.0443E-02
1.4945E +02	2.8740E-01	2.9374E-02
	5.7480E-01	2.9366E-02
	8.6220E-01	2.9353E-02
	1.1496E+00	2.9339E-02
	1.4370E+00	2.9333E-02
	1.7244E+00	2.9332E-02
	2.0118E+00	2.9330E-02
	2.2992E+00	2.9326E-02
	2.5866E+00	2.9321E-02
	2.8740E+00	2.9318E-02
1.5376E +02	5.0295E-01	2.7879E-02
	1.0059E+00	2.7861E-02
	1.5089E+00	2.7844E-02
	2.0118E+00	2.7811E-02
	2.5148E+00	2.7793E-02
	3.0177E+00	2.7778E-02
	3.5207E+00	2.7765E-02
	4.0236E+00	2.7761E-02
	4.5266E+00	2.7753E-02
	5.0295E+00	2.7745E-02

TABLO III.10

İYON	GEÇİŞ	GELEN ELEKTRONUN ENERJİSİ (eV)
Kr⁺²⁵	$1s^2 2s^2 2p^6 3s \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^5 3s$	2.9333E+03
		2.9908E+03
		3.0771E+03
		3.1633E+03
		3.3071E+03
		3.4509E+03
		3.7385E+03
		4.3136E+03
		5.0326E+03
		5.7515E+03
		6.4704E+03
		7.1894E+03
		7.9083E+03
		8.6273E+03
	$1s^2 2s^2 2p^6 3s \rightarrow 1s^2 2s 2p^6 3s$	3.1611E+03
		3.2230E+03
		3.3160E+03
		3.4090E+03
		3.5639E+03
		3.7189E+03
		4.0288E+03
		4.6486E+03
		5.4234E+03
		6.1982E+03
		6.9729E+03
		7.7477E+03
	8.5225E+03	
	9.2972E+03	
	$1s^2 2s^2 2p^6 3s \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6$	1.2302E+03
		1.2543E+03
		1.2905E+03
		1.3266E+03
		1.3869E+03
		1.4472E+03
		1.5678E+03
		1.8090E+03
2.1106E+03		
2.4121E+03		
2.7136E+03		
3.0151E+03		
3.3166E+03		
3.6181E+03		

TABLO III.11

Kr^{25+}		
$k_i l_i + 1s^2 2s^2 2p^6 3s(^2S) \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6(^1S) + k_e l_e + k_i l_i'$		
GELEN ELEKTRONUN ENERJİSİ (eV)	İYONLAŞAN ELEKTRONUN ENERJİSİ (eV)	DİFERANSİYEL TESİR KESİTİ (Mb/eV)
1.2302E +03	1.2060E+00	5.6155E-05
	2.4121E+00	5.6148E-05
	3.6181E+00	5.6142E-05
	4.8241E+00	5.6137E-05
	6.0301E+00	5.6132E-05
	7.2362E+00	5.6128E-05
	8.4422E+00	5.6127E-05
	9.6482E+00	5.6126E-05
	1.0854E+01	5.6126E-05
	1.2060E+01	5.6127E-05
1.2543E +03	2.4121E+00	5.4065E-05
	4.8241E+00	5.4044E-05
	7.2362E+00	5.4025E-05
	9.6482E+00	5.4005E-05
	1.2060E+01	5.3986E-05
	1.4472E+01	5.3975E-05
	1.6884E+01	5.3970E-05
	1.9296E+01	5.3964E-05
	2.1709E+01	5.3956E-05
	2.4121E+01	5.3952E-05
1.2905E +03	4.2211E+00	5.1218E-05
	8.4422E+00	5.1147E-05
	1.2663E+01	5.1088E-05
	1.6884E+01	5.1050E-05
	2.1106E+01	5.0996E-05
	2.5327E+01	5.0963E-05
	2.9548E+01	5.0943E-05
	3.3769E+01	5.0917E-05
	3.7990E+01	5.0906E-05
	4.2211E+01	5.0907E-05

TABLO III.12

Kr^{25+}		
$k_i l_i + 1s^2 2s^2 2p^6 3s(2S) \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^5 3s(1,3P) + k_e l_e + k_i' l_i'$		
GELEN ELEKTRONUN ENERJİSİ (eV)	İYONLAŞAN ELEKTRONUN ENERJİSİ (eV)	DİFERANSİYEL TESİR KESİTİ (Mb/eV)
2.9333E +03	2.8758E+00	3.1270E-05
	5.7515E+00	3.1261E-05
	8.6273E+00	3.1265E-05
	1.1503E+01	3.1268E-05
	1.4379E+01	3.1258E-05
	1.7255E+01	3.1252E-05
	2.0130E+01	3.1258E-05
	2.3006E+01	3.1262E-05
	2.5882E+01	3.1255E-05
2.9908E +03	2.8758E+01	3.1250E-05
	5.7515E+00	3.0171E-05
	1.1503E+01	3.0162E-05
	1.7255E+01	3.0148E-05
	2.3006E+01	3.0143E-05
	2.8758E+01	3.0133E-05
	3.4509E+01	3.0127E-05
	4.0261E+01	3.0123E-05
	4.6012E+01	3.0120E-05
3.0771E +03	5.1764E+01	3.0116E-05
	5.7515E+01	3.0118E-05
	1.0065E+01	2.8666E-05
	2.0130E+01	2.8636E-05
	3.0195E+01	2.8601E-05
	4.0261E+01	2.8578E-05
	5.0326E+01	2.8556E-05
	6.0391E+01	2.8544E-05
	7.0456E+01	2.8525E-05
	8.0521E+01	2.8516E-05
9.0586E+01	2.8515E-05	
1.0065E+02	2.8506E-05	

TABLO III.13

Kr^{25+}		
$k_i l_i + 1s^2 2s^2 2p^6 3s(2S) \rightarrow 1s^2 2s 2p^6 3s(1,3S) + k_e l_e + k_i' l_i'$		
GELEN ELEKTRONUN ENERJİSİ (eV)	İYONLAŞAN ELEKTRONUN ENERJİSİ (eV)	DİFERANSİYEL TESİR KESİTİ (Mb/eV)
3.1611E +03	3.0991E+00	6.0545E-06
	6.1982E+00	6.0541E-06
	9.2972E+00	6.0535E-06
	1.2396E+01	6.0529E-06
	1.5495E+01	6.0525E-06
	1.8594E+01	6.0523E-06
	2.1694E+01	6.0520E-06
	2.4793E+01	6.0518E-06
	2.7892E+01	6.0517E-06
	3.0991E+01	6.0516E-06
3.2230E +03	6.1982E+00	5.8571E-06
	1.2396E+01	5.8548E-06
	1.8594E+01	5.8527E-06
	2.4793E+01	5.8510E-06
	3.0991E+01	5.8494E-06
	3.7189E+01	5.8482E-06
	4.3387E+01	5.8472E-06
	4.9585E+01	5.8465E-06
	5.5783E+01	5.8461E-06
	6.1982E+01	5.8460E-06
3.3160E +03	1.0847E+01	5.5859E-06
	2.1694E+01	5.5793E-06
	3.2540E+01	5.5734E-06
	4.3387E+01	5.5685E-06
	5.4234E+01	5.5641E-06
	6.5081E+01	5.5607E-06
	7.5927E+01	5.5578E-06
	8.6774E+01	5.5560E-06
	9.7621E+01	5.5549E-06
	1.0847E+02	5.5543E-06

TABLO III.14

İYON	GEÇİŞ	GELEN ELEKTRONUN ENERJİSİ (eV)
Sn⁺³⁹	$1s^2 2s^2 2p^6 3s \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^5 3s$	6.5197E+03
		6.6475E+03
		6.8393E+03
		7.0310E+03
		7.3506E+03
		7.6702E+03
		8.3094E+03
		9.5877E+03
		1.1186E+04
		1.2784E+04
		1.4382E+04
		1.5980E+04
		1.7578E+04
		1.9175E+04
	$1s^2 2s^2 2p^6 3s \rightarrow 1s^2 2s 2p^6 3s$	6.9706E+03
		7.1072E+03
		7.3123E+03
		7.5173E+03
		7.8590E+03
		8.2007E+03
		8.8840E+03
		1.0251E+04
		1.1959E+04
		1.3668E+04
		1.5376E+04
		1.7085E+04
	1.8793E+04	
	2.0502E+04	
	$1s^2 2s^2 2p^6 3s \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6$	2.8193E+03
		2.8746E+03
		2.9575E+03
		3.0405E+03
		3.1787E+03
		3.3169E+03
		3.5933E+03
		4.1461E+03
4.8371E+03		
5.5281E+03		
6.2191E+03		
6.9101E+03		
7.6012E+03		
8.2922E+03		

TABLO III.15

Sn^{39+}		
$k_i l_i + 1s^2 2s^2 2p^6 3s(2S) \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6(1S) + k_e l_e + k_i l_i'$		
GELEN ELEKTRONUN ENERJİSİ (eV)	İYONLAŞAN ELEKTRONUN ENERJİSİ (eV)	DİFERANSİYEL TESİR KESİTİ (Mb/eV)
2.8193E +03	2.7641E+00	4.6562E-06
	5.5281E+00	4.6557E-06
	8.2922E+00	4.6551E-06
	1.1056E+01	4.6545E-06
	1.3820E+01	4.6542E-06
	1.6584E+01	4.6541E-06
	1.9348E+01	4.6540E-06
	2.2112E+01	4.6538E-06
	2.4877E+01	4.6536E-06
	2.7641E+01	4.6535E-06
2.8746E +03	5.5281E+00	4.4819E-06
	1.1056E+01	4.4801E-06
	1.6584E+01	4.4783E-06
	2.2112E+01	4.4767E-06
	2.7641E+01	4.4756E-06
	3.3169E+01	4.4745E-06
	3.8697E+01	4.4736E-06
	4.4225E+01	4.4732E-06
	4.9753E+01	4.4728E-06
	5.5281E+01	4.4726E-06
2.9575E +03	9.6742E+00	4.2445E-06
	1.9348E+01	4.2390E-06
	2.9023E+01	4.2342E-06
	3.8697E+01	4.2298E-06
	4.8371E+01	4.2264E-06
	5.8045E+01	4.2234E-06
	6.7719E+01	4.2211E-06
	7.7394E+01	4.2195E-06
	8.7068E+01	4.2185E-06
	9.6742E+01	4.2183E-06

TABLO III.16

Sn^{39+}		
$k_i l_i + 1s^2 2s^2 2p^6 3s(2S) \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^5 3s(1,3P) + k_e l_e + k_i' l_i'$		
GELEN ELEKTRONUN ENERJİSİ (eV)	İYONLAŞAN ELEKTRONUN ENERJİSİ (eV)	DİFERANSİYEL TESİR KESİTİ (Mb/eV)
6.5197E +03	6.3918E+00	2.8070E-06
	1.2784E+01	2.8071E-06
	1.9175E+01	2.8058E-06
	2.5567E+01	2.8067E-06
	3.1959E+01	2.8060E-06
	3.8351E+01	2.8057E-06
	4.4743E+01	2.8060E-06
	5.1135E+01	2.8057E-06
	5.7526E+01	2.8056E-06
6.6475E +03	6.3918E+01	2.8057E-06
	1.2784E+01	2.7074E-06
	2.5567E+01	2.7060E-06
	3.8351E+01	2.7052E-06
	5.1135E+01	2.7037E-06
	6.3918E+01	2.7038E-06
	7.6702E+01	2.7029E-06
	8.9486E+01	2.7025E-06
	1.0227E+02	2.7021E-06
6.8393E +03	1.1505E+02	2.7023E-06
	1.2784E+02	2.7016E-06
	2.2371E+01	2.5698E-06
	4.4743E+01	2.5667E-06
	6.7114E+01	2.5645E-06
	8.9486E+01	2.5621E-06
	1.1186E+02	2.5601E-06
	1.3423E+02	2.5587E-06
	1.5660E+02	2.5575E-06
1.7897E+02	2.5565E-06	
2.0134E+02	2.5559E-06	
2.2371E+02	2.5557E-06	

TABLO III.17

Sn^{39+}		
$k_i l_i + 1s^2 2s^2 2p^6 3s(2S) \rightarrow 1s^2 2s 2p^6 3s(1,3S) + k_e l_e + k_i l_i'$		
GELEN ELEKTRONUN ENERJİSİ (eV)	İYONLAŞAN ELEKTRONUN ENERJİSİ (eV)	DİFERANSİYEL TESİR KESİTİ (Mb/eV)
6.9706E +03	6.8339E+00	5.6331E-07
	1.3668E+01	5.6325E-07
	2.0502E+01	5.6321E-07
	2.7336E+01	5.6316E-07
	3.4169E+01	5.6312E-07
	4.1003E+01	5.6309E-07
	4.7837E+01	5.6307E-07
	5.4671E+01	5.6305E-07
	6.1505E+01	5.6304E-07
	6.8339E+01	5.6304E-07
7.1072E +03	1.3668E+01	5.4469E-07
	2.7336E+01	5.4449E-07
	4.1003E+01	5.4428E-07
	5.4671E+01	5.4412E-07
	6.8339E+01	5.4395E-07
	8.2007E+01	5.4387E-07
	9.5674E+01	5.4376E-07
	1.0934E+02	5.4370E-07
	1.2301E+02	5.4366E-07
	1.3668E+02	5.4366E-07
7.3123E +03	2.3919E+01	5.1910E-07
	4.7837E+01	5.1849E-07
	7.1756E+01	5.1797E-07
	9.5674E+01	5.1748E-07
	1.1959E+02	5.1705E-07
	1.4351E+02	5.1673E-07
	1.6743E+02	5.1650E-07
	1.9135E+02	5.1633E-07
	2.1527E+02	5.1620E-07
	2.3919E+02	5.1616E-07

TABLO III.18

İYON	GEÇİŞ	GELEN ELEKTRONUN ENERJİSİ (eV)
Xe⁺⁴³	$1s^2 2s^2 2p^6 3s \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^5 3s$	7.8144E+03
		7.9677E+03
		8.1975E+03
		8.4273E+03
		8.8104E+03
		9.1935E+03
		9.9596E+03
		1.1492E+04
		1.3407E+04
		1.5322E+04
		1.7238E+04
		1.9153E+04
		2.1068E+04
		2.2984E+04
	$1s^2 2s^2 2p^6 3s \rightarrow 1s^2 2s 2p^6 3s$	8.3626E+03
		8.5266E+03
		8.7726E+03
		9.0185E+03
		9.4285E+03
		9.8384E+03
		1.0658E+04
		1.2298E+04
		1.4348E+04
		1.6397E+04
		1.8447E+04
		2.0497E+04
	2.2546E+04	
	2.4596E+04	
	$1s^2 2s^2 2p^6 3s \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6$	3.4020E+03
		3.4687E+03
		3.5688E+03
		3.6688E+03
		3.8356E+03
		4.0023E+03
		4.3359E+03
		5.0029E+03
5.8368E+03		
6.6706E+03		
7.5044E+03		
8.3382E+03		
9.1720E+03		
1.0006E+04		

TABLO III.19

Xe^{43+} $k_i l_i + 1s^2 2s^2 2p^6 3s(^2S) \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6(^1S) + k_e l_e + k_i l_i'$		
GELEN ELEKTRONUN ENERJİSİ (eV)	İYONLAŞAN ELEKTRONUN ENERJİSİ (eV)	DİFERANSİYEL TESİR KESİTİ (Mb/eV)
3.4020E+03	3.3353E+00	2.6421E-06
	6.6706E+00	2.6418E-06
	1.0006E+01	2.6416E-06
	1.3341E+01	2.6414E-06
	1.6676E+01	2.6412E-06
	2.0012E+01	2.6410E-06
	2.3347E+01	2.6408E-06
	2.6682E+01	2.6407E-06
	3.0018E+01	2.6406E-06
	3.3353E+01	2.6406E-06
3.4687E+03	6.6706E+00	2.5433E-06
	1.3341E+01	2.5421E-06
	2.0012E+01	2.5411E-06
	2.6682E+01	2.5402E-06
	3.3353E+01	2.5395E-06
	4.0023E+01	2.5390E-06
	4.6694E+01	2.5385E-06
	5.3365E+01	2.5382E-06
	6.0035E+01	2.5380E-06
	6.6706E+01	2.5379E-06
3.5688E+03	1.1674E+01	2.4085E-06
	2.3347E+01	2.4053E-06
	3.5021E+01	2.4024E-06
	4.6694E+01	2.4000E-06
	5.8368E+01	2.3980E-06
	7.0041E+01	2.3964E-06
	8.1715E+01	2.3951E-06
	9.3388E+01	2.3941E-06
	1.0506E+02	2.3936E-06
	1.1674E+02	2.3934E-06

TABLO III.20

Xe^{43+}		
$k_i l_i + 1s^2 2s^2 2p^6 3s(^2S) \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^5 3s(^{1,3}P) + k_e l_e + k'_i l'_i$		
GELEN ELEKTRONUN ENERJİSİ (eV)	İYONLAŞAN ELEKTRONUN ENERJİSİ (eV)	DİFERANSİYEL TESİR KESİTİ (Mb/eV)
7.8144E+03	7.6612E+00	1.6186E-06
	1.5322E+01	1.6182E-06
	2.2984E+01	1.6181E-06
	3.0645E+01	1.6180E-06
	3.8306E+01	1.6179E-06
	4.5967E+01	1.6177E-06
	5.3629E+01	1.6175E-06
	6.1290E+01	1.6176E-06
	6.8951E+01	1.6178E-06
7.9677E+03	7.6612E+01	1.6179E-06
	1.5322E+01	1.5612E-06
	3.0645E+01	1.5600E-06
	4.5967E+01	1.5589E-06
	6.1290E+01	1.5592E-06
	7.6612E+01	1.5587E-06
	9.1935E+01	1.5582E-06
	1.0726E+02	1.5580E-06
	1.2258E+02	1.5578E-06
	1.3790E+02	1.5577E-06
1.5322E+02	1.5578E-06	
8.1975E+03	2.6814E+01	1.4815E-06
	5.3629E+01	1.4797E-06
	8.0443E+01	1.4778E-06
	1.0726E+02	1.4771E-06
	1.3407E+02	1.4755E-06
	1.6089E+02	1.4748E-06
	1.8770E+02	1.4741E-06
	2.1451E+02	1.4735E-06
	2.4133E+02	1.4733E-06
	2.6814E+02	1.4731E-06

TABLO III.21

Xe^{43+} $k_i l_i + 1s^2 2s^2 2p^6 3s(2S) \rightarrow 1s^2 2s 2p^6 3s(1,3S) + k_e l_e + k_i' l_i'$		
GELEN ELEKTRONUN ENERJİSİ (eV)	İYONLAŞAN ELEKTRONUN ENERJİSİ (eV)	DİFERANSİYEL TESİR KESİTİ (Mb/eV)
8.3626E+03	8.1987E+00	3.2432E-07
	1.6397E+01	3.2428E-07
	2.4596E+01	3.2428E-07
	3.2795E+01	3.2428E-07
	4.0993E+01	3.2425E-07
	4.9192E+01	3.2419E-07
	5.7391E+01	3.2414E-07
	6.5589E+01	3.2416E-07
	7.3788E+01	3.2420E-07
8.5266E+03	8.1987E+01	3.2423E-07
	1.6397E+01	3.1360E-07
	3.2795E+01	3.1346E-07
	4.9192E+01	3.1334E-07
	6.5589E+01	3.1325E-07
	8.1987E+01	3.1313E-07
	9.8384E+01	3.1311E-07
	1.1478E+02	3.1307E-07
	1.3118E+02	3.1297E-07
8.7726E+03	1.4758E+02	3.1297E-07
	1.6397E+02	3.1302E-07
	2.8695E+01	2.9880E-07
	5.7391E+01	2.9850E-07
	8.6086E+01	2.9812E-07
	1.1478E+02	2.9788E-07
	1.4348E+02	2.9765E-07
	1.7217E+02	2.9746E-07
	2.0087E+02	2.9730E-07
2.2956E+02	2.9724E-07	
2.5826E+02	2.9711E-07	
2.8695E+02	2.9717E-07	

TABLO III.22

İYON	GEÇİŞ	GELEN ELEKTRONUN ENERJİSİ (eV)
W⁺⁶³	$1s^2 2s^2 2p^6 3s \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^5 3s$	1.6197E+04
		1.6514E+04
		1.6991E+04
		1.7467E+04
		1.8261E+04
		1.9055E+04
		2.0643E+04
		2.3819E+04
		2.7789E+04
		3.1759E+04
		3.5728E+04
		3.9698E+04
		4.3668E+04
		4.7638E+04
	$1s^2 2s^2 2p^6 3s \rightarrow 1s^2 2s 2p^6 3s$	1.7661E+04
		1.8008E+04
		1.8527E+04
		1.9046E+04
		1.9912E+04
		2.0778E+04
		2.2509E+04
		2.5972E+04
		3.0301E+04
		3.4630E+04
		3.8959E+04
		4.3287E+04
		4.7616E+04
		5.1945E+04
	$1s^2 2s^2 2p^6 3s \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6$	7.2758E+03
		7.4184E+03
		7.6324E+03
		7.8464E+03
		8.2031E+03
		8.5597E+03
		9.2730E+03
		1.0700E+04
1.2483E+04		
1.4266E+04		
1.6049E+04		
1.7833E+04		
1.9616E+04		
2.1399E+04		

TABLO III.23

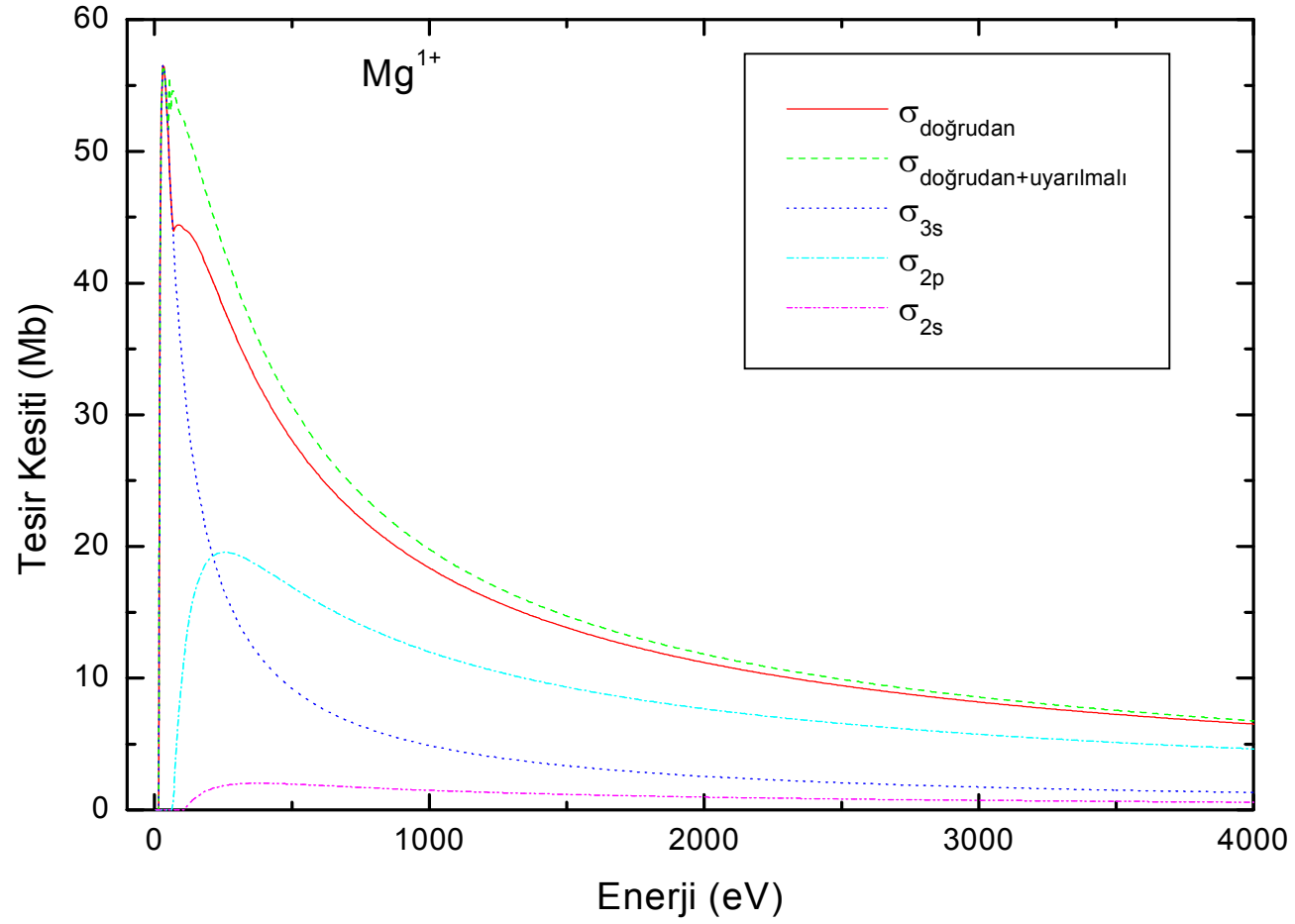
W^{63+}		
$k_i l_i + 1s^2 2s^2 2p^6 3s(2S) \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6(1S) + k_e l_e + k_i l_i'$		
GELEN ELEKTRONUN ENERJİSİ (eV)	İYONLAŞAN ELEKTRONUN ENERJİSİ (eV)	DİFERANSİYEL TESİR KESİTİ (Mb/eV)
7.2758E +03	7.1331E+00	2.6321E-07
	1.4266E+01	2.6318E-07
	2.1399E+01	2.6314E-07
	2.8532E+01	2.6311E-07
	3.5666E+01	2.6308E-07
	4.2799E+01	2.6306E-07
	4.9932E+01	2.6306E-07
	5.7065E+01	2.6306E-07
	6.4198E+01	2.6307E-07
	7.1331E+01	2.6307E-07
7.4184E +03	1.4266E+01	2.5331E-07
	2.8532E+01	2.5322E-07
	4.2799E+01	2.5313E-07
	5.7065E+01	2.5303E-07
	7.1331E+01	2.5294E-07
	8.5597E+01	2.5289E-07
	9.9864E+01	2.5286E-07
	1.1413E+02	2.5283E-07
	1.2840E+02	2.5280E-07
	1.4266E+02	2.5278E-07
7.6324E +03	2.4966E+01	2.3988E-07
	4.9932E+01	2.3953E-07
	7.4898E+01	2.3927E-07
	9.9864E+01	2.3902E-07
	1.2483E+02	2.3884E-07
	1.4980E+02	2.3866E-07
	1.7476E+02	2.3850E-07
	1.9973E+02	2.3846E-07
	2.2469E+02	2.3840E-07
	2.4966E+02	2.3834E-07

TABLO III.24

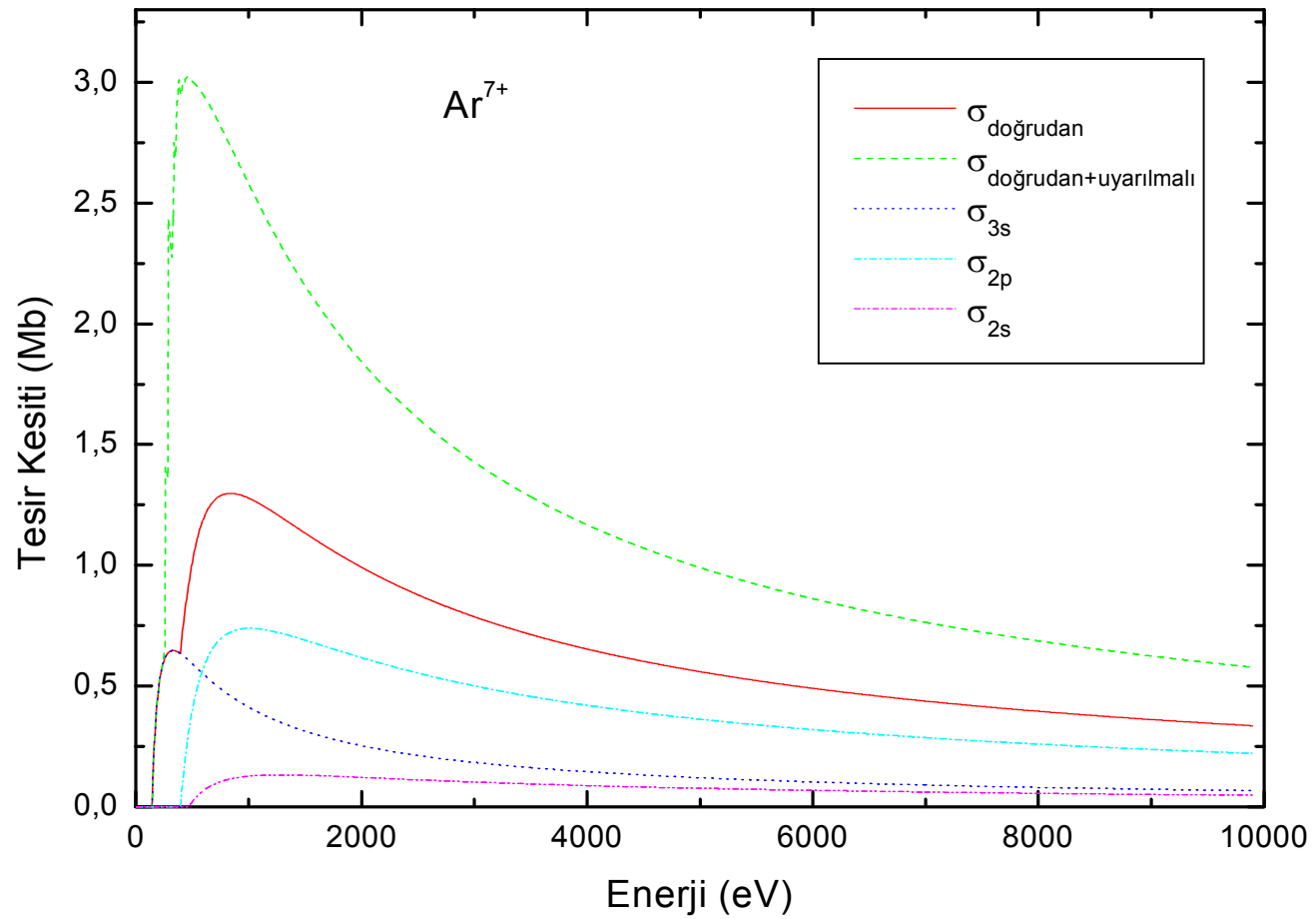
W^{63+}		
$k_i l_i + 1s^2 2s^2 2p^6 3s(2S) \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^5 3s(1,3P) + k_e l_e + k_i' l_i'$		
GELEN ELEKTRONUN ENERJİSİ (eV)	İYONLAŞAN ELEKTRONUN ENERJİSİ (eV)	DİFERANSİYEL TESİR KESİTİ (Mb/eV)
1.6197E +04	1.5879E+01	1.7312E-07
	3.1759E+01	1.7305E-07
	4.7638E+01	1.7298E-07
	6.3517E+01	1.7299E-07
	7.9397E+01	1.7302E-07
	9.5276E+01	1.7300E-07
	1.1116E+02	1.7297E-07
	1.2703E+02	1.7297E-07
	1.4291E+02	1.7298E-07
1.6514E +04	1.5879E+02	1.7298E-07
	3.1759E+01	1.6676E-07
	6.3517E+01	1.6680E-07
	9.5276E+01	1.6667E-07
	1.2703E+02	1.6662E-07
	1.5879E+02	1.6661E-07
	1.9055E+02	1.6656E-07
	2.2231E+02	1.6652E-07
	2.5407E+02	1.6651E-07
1.6991E +04	2.8583E+02	1.6653E-07
	3.1759E+02	1.6646E-07
	5.5578E+01	1.5823E-07
	1.1116E+02	1.5807E-07
	1.6673E+02	1.5785E-07
	2.2231E+02	1.5784E-07
	2.7789E+02	1.5763E-07
	3.3347E+02	1.5755E-07
	3.8904E+02	1.5746E-07
4.4462E+02	1.5745E-07	
5.0020E+02	1.5733E-07	
5.5578E+02	1.5744E-07	

TABLO III.25

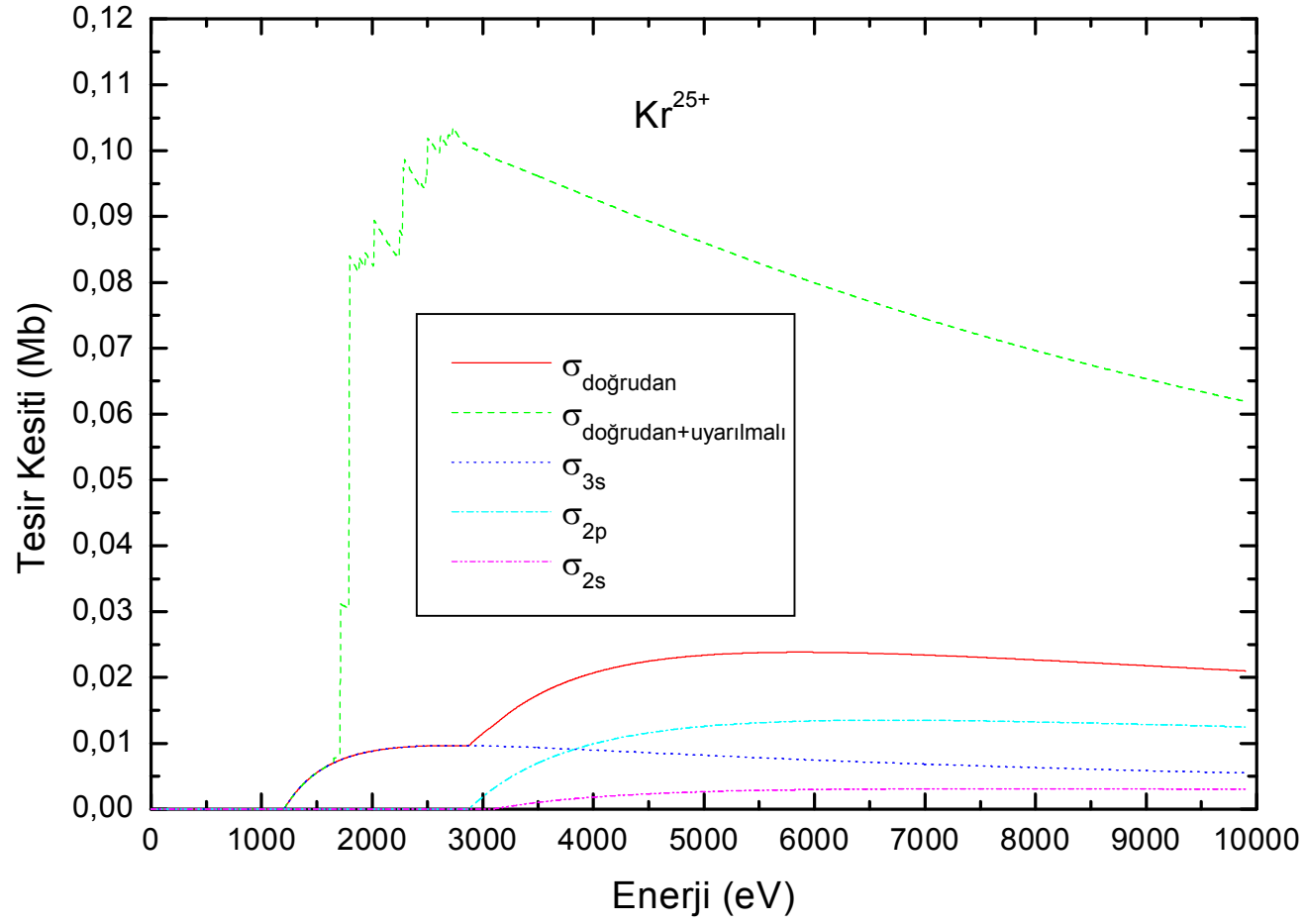
W^{63+}		
$k_i l_i + 1s^2 2s^2 2p^6 3s(2S) \rightarrow 1s^2 2s 2p^6 3s(1,3S) + k_e l_e + k_i' l_i'$		
GELEN ELEKTRONUN ENERJİSİ (eV)	İYONLAŞAN ELEKTRONUN ENERJİSİ (eV)	DİFERANSİYEL TESİR KESİTİ (Mb/eV)
1.7661E +04	1.7315E+01	3.2665E-08
	3.4630E+01	3.2665E-08
	5.1945E+01	3.2659E-08
	6.9260E+01	3.2652E-08
	8.6575E+01	3.2658E-08
	1.0389E+02	3.2662E-08
	1.2120E+02	3.2650E-08
	1.3852E+02	3.2642E-08
	1.5583E+02	3.2651E-08
	1.7315E+02	3.2660E-08
1.8008E +04	3.4630E+01	3.1574E-08
	6.9260E+01	3.1560E-08
	1.0389E+02	3.1557E-08
	1.3852E+02	3.1531E-08
	1.7315E+02	3.1543E-08
	2.0778E+02	3.1520E-08
	2.4241E+02	3.1523E-08
	2.7704E+02	3.1519E-08
	3.1167E+02	3.1511E-08
	3.4630E+02	3.1519E-08
1.8527E +04	6.0602E+01	3.0072E-08
	1.2120E+02	3.0045E-08
	1.8181E+02	3.0010E-08
	2.4241E+02	2.9988E-08
	3.0301E+02	2.9952E-08
	3.6361E+02	2.9941E-08
	4.2422E+02	2.9925E-08
	4.8482E+02	2.9916E-08
	5.4542E+02	2.9903E-08
	6.0602E+02	2.9912E-08



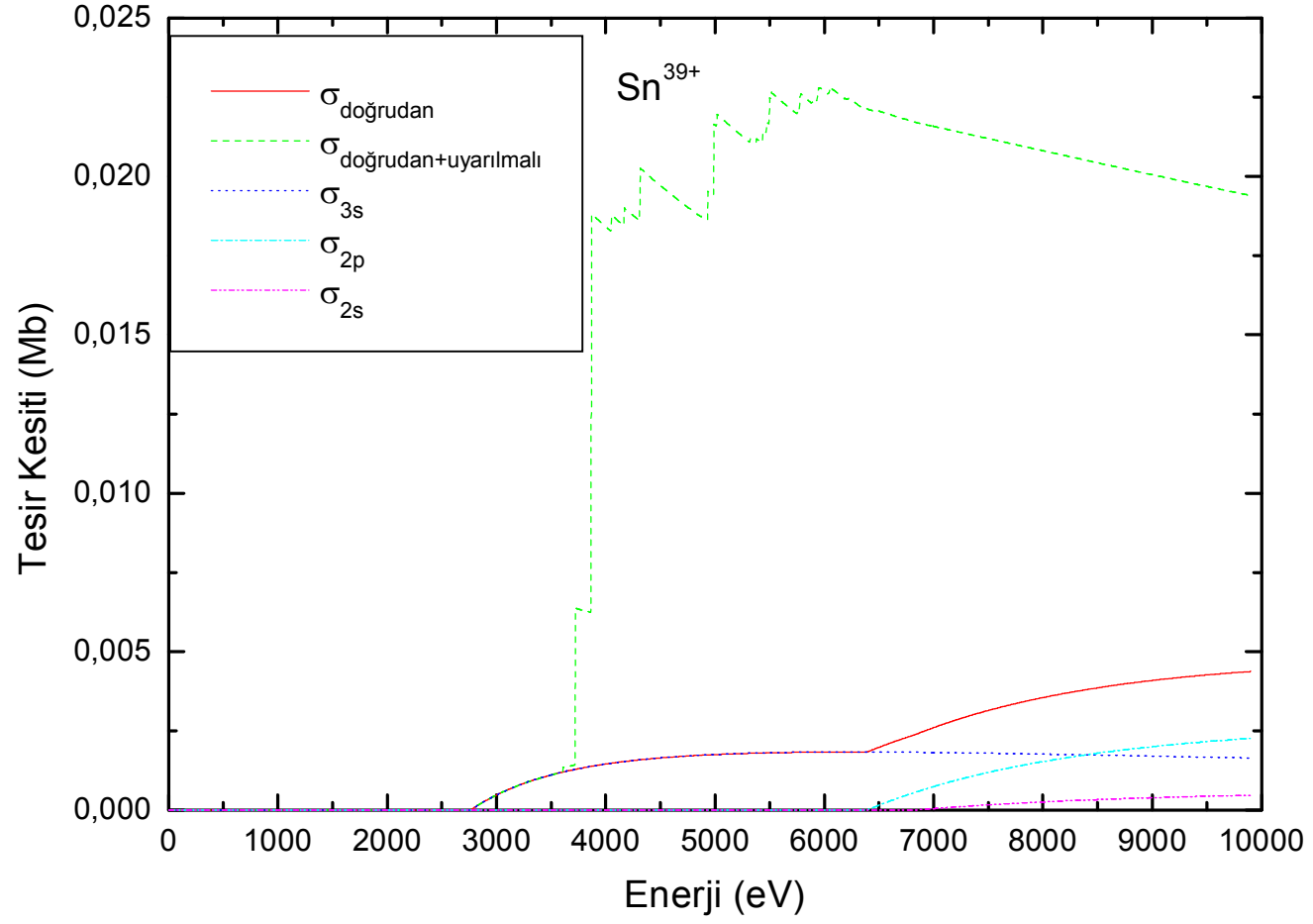
GRAFİK III.1



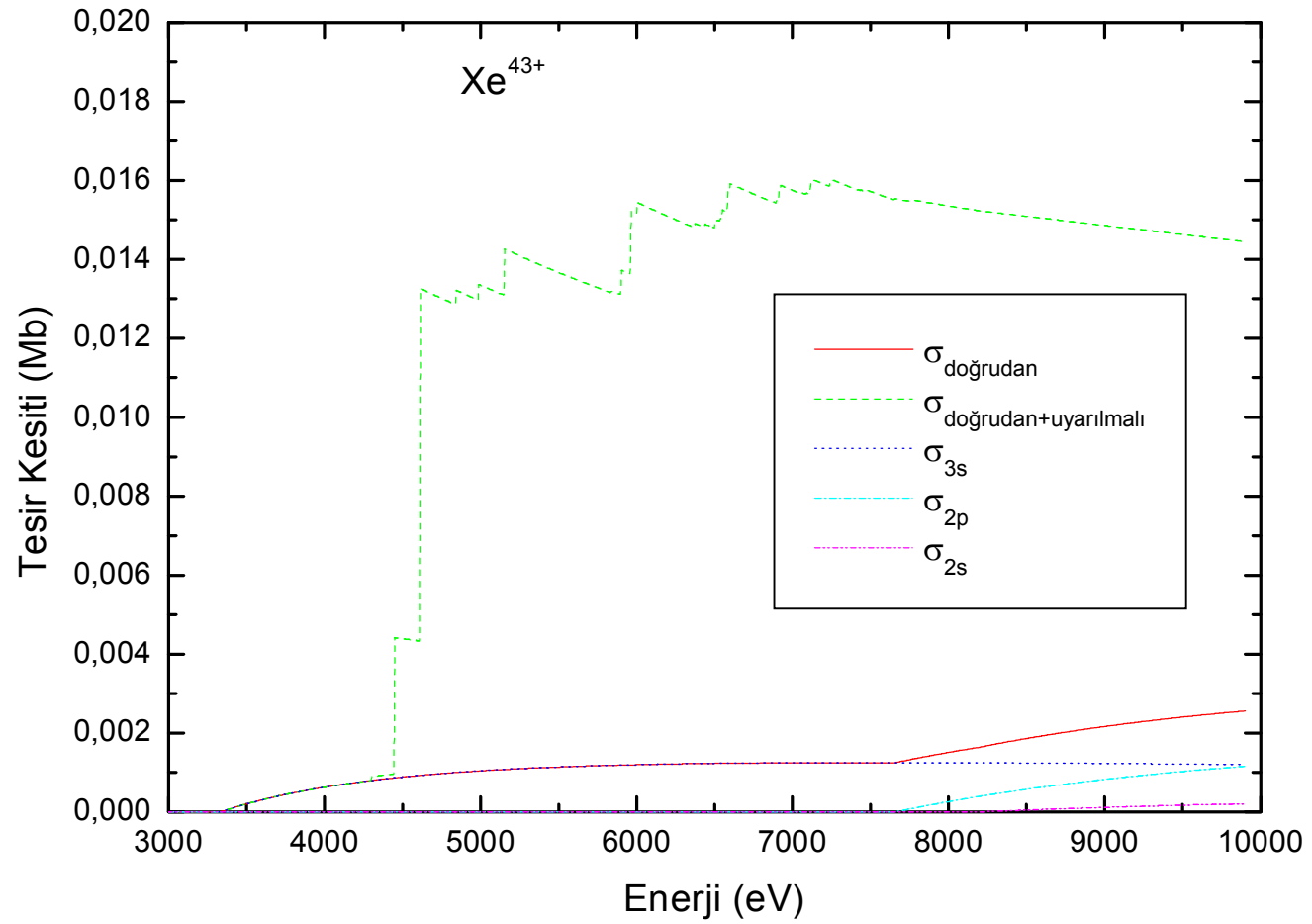
GRAFİK III.2



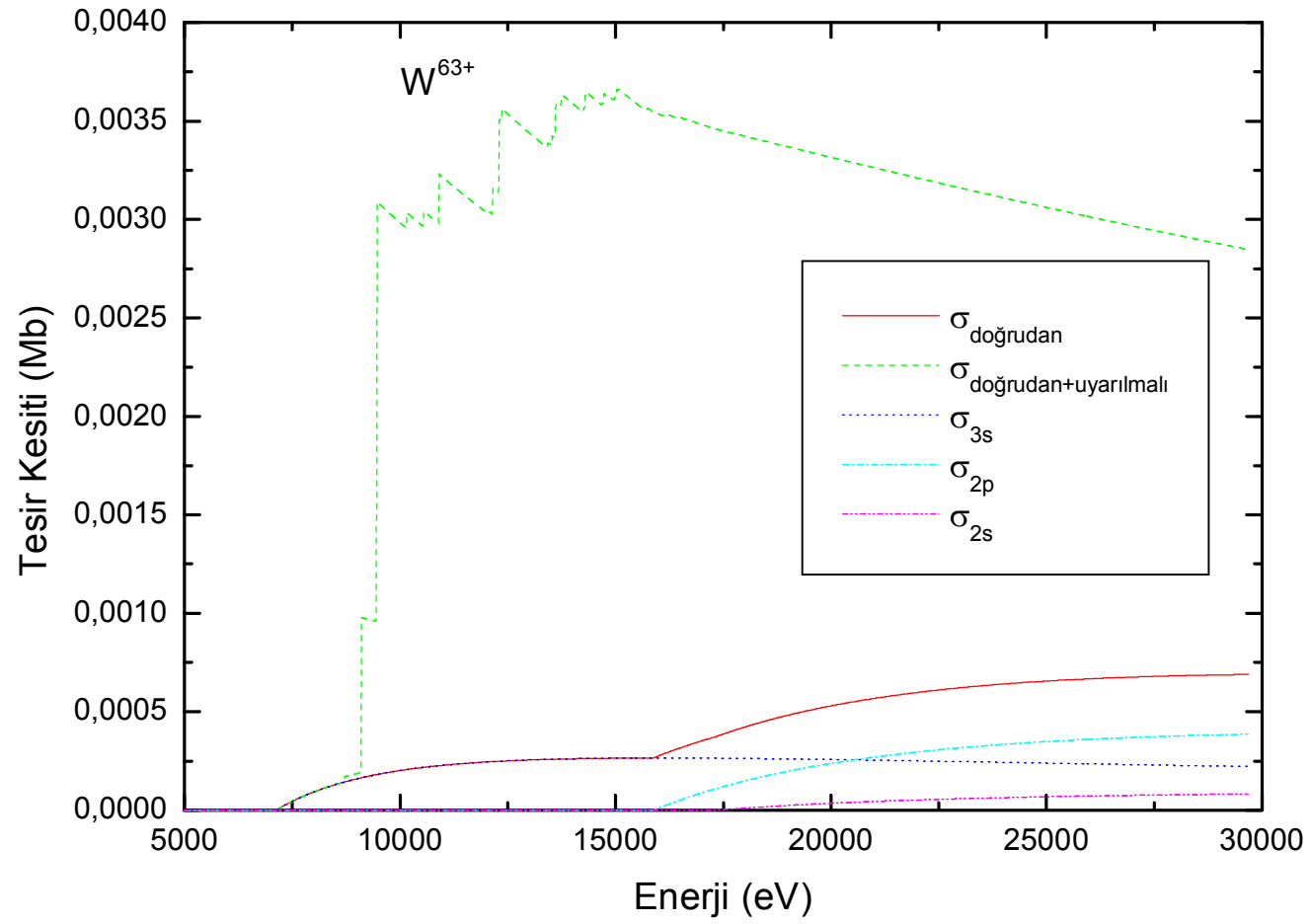
GRAFİK III.3



GRAFİK III.4



GRAFİK III.5



GRAFİK III.6

ÖZGEÇMİŞ

15.05.1983 tarihinde Iğdır'da doğdum. İlk, orta ve lise öğrenimimi İstanbul'da tamamladım. 1999–2003 yıllarında İstanbul Üniversitesi Astronomi ve Uzay Bilimleri Bölümünde, 2001-2004 yılları arasında İstanbul Üniversitesi Fizik Bölümünde okuduktan sonra, 2004 yılında Marmara Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü'nün açmış olduğu Fizik Yüksek Lisans programına girmeye hak kazandım. Bu süre zarfında sayın hocam Prof. Dr. Zikri ALTUN ile şu anda sunma aşamasına geldiğimiz Yüksek Lisans tez çalışmasına başladık.

Haziran, 2007

Ufuk GÖLÇEK