



MARMARA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ



Mo^{10+} - Mo^{14+} İYONLARININ
ELEKTRON ÇARPMALI İYONLAŞMA
TESİR KESİT VE ORANLARI

SEVGİ ÇIPLAK

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Fizik Anabilim Dalı
Yüksek Lisans Programı

DANIŞMAN

Prof. Dr. Zikri ALTUN

İSTANBUL, 2015



MARMARA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ



**$\text{Mo}^{10+} - \text{Mo}^{14+}$ İYONLARININ
ELEKTRON ÇARPMALI İYONLAŞMA
TESİR KESİT VE ORANLARI**

SEVGİ ÇIPLAK
(520311016)

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Fizik Anabilim Dalı
Yüksek Lisans Programı

DANIŞMAN

Prof. Dr. Zikri ALTUN

İSTANBUL, 2015

TEŞEKKÜR

Yüksek Lisans Öğretimi ve Yüksek Lisans Tez'inin hazırlanması süreçlerimde fikri, ilmi ve nezaketi ile hiçbir desteğini esirgemeyen danışman hocam sayın Prof. Dr. Zikri ALTUN' a teşekkür eder, saygılarımı sunarım.

Yüksek Lisans Öğretimi ve Yüksek Lisans Tez'inin hazırlanması süreçlerimde farklı alanlarda ve özellikle kendi uzmanlık alanında hoşgörü ile bilgisini paylaşmayı esirgemeyen sayın Yrd. Doç.Dr. Erdi A. BLEDA' ya çok teşekkür ederim.

Tüm süreç boyunca maddi, manevi ve ilmi desteği ile yanımda olan herkese özellikle sevgili eşim Hünkâr ÇIPLAK' a çok teşekkür ederim.

Ekim, 2015

Sevgi ÇIPLAK

İÇİNDEKİLER

SAYFA

TEŞEKKÜR.....	I
İÇİNDEKİLER.....	II
ÖZET.....	IV
ABSTRACT.....	V
SEMBOLLER LİSTESİ.....	VI
KISALTMALAR.....	VII
ŞEKİLLER.....	VIII
TABLolar.....	X
BÖLÜM I.....	1
I.1. GİRİŞ.....	1
I. 1. 1. Elektron İyon (Atom) Çarpışması.....	3
I. 1. 2. Elektron Çarpmalı Doğrudan İyonlaşma.....	4
I. 1. 3. İkili Karşılaşma Yaklaşımı (Binary-Encounter Approximation).....	5
I. 1. 4. Çarpıtılmış Dalga Yöntemi.....	6
I. 1. 5. Hidrojenik Ölçeklendirilmiş Coulomb Born Yaklaşımı.....	7
I.2 AMAÇ.....	8
BÖLÜM II.....	10
II.1.TESİR KESİTLERİN MATEMATİK TEORİSİ.....	10
II. 1. 1. Hidrojenik Ölçeklendirilmiş Coulomb Born Yaklaşımı.....	10
II. 1. 2. Diferansiyel Tesir Kesiti (Rutherford Saçılması).....	11
II.2. ÇOK ELEKTRONLU SİSTEMLERİN KUANTUM MEKANİĞİ.....	18
II. 2. 1. Çok Elektronlu Sistemler ve Merkezi Alan Yaklaşımı.....	18

II. 2. 2. Konfigürasyon Ortalamalı Enerji İfadeleri.....	21
II.3. ÇOK ELEKTRONLU SİSTEMLERDE KONFIGÜRASYON	
ORTALAMALI İYONLAŞMA ENERJİSİ.....	28
II.4. KONFIGÜRASYON ORTALAMALI OTO-İYONLAŞMA.....	29
II.5. KONFIGÜRASYON ORTALAMALI ELEKTRON İYON BİRLEŞME	
TESİR KESİTİ.....	31
II.6 KONFIGÜRASYON ORTALAMALI UYARILMA TESİR KESİTİ.....	32
BÖLÜM III SONUÇLAR VE DEĞERLENDİRMELER.....	34
III.1. ENERJİ VE KONFIGÜRASYON ORTALAMALI TESİR KESİT	
HESAPLARI.....	34
III.2. HİDROJENİK ÖLÇEKLENDİRİLMİŞ, ÇARPITILMIŞ DALGA VE	
İKİLİ KARŞILAŞMA YAKLAŞIMLARINDA TESİR KESİT VE ORAN	
KATSAYILARI.....	43
III. 2. 1. Mo ¹¹⁺ İyonu İçin Hidrojenik Ölçeklendirilmiş, Çarpıtılmış Dalga ve İkili	
Karşılaşma Yaklaşımlarında Elde Edilen Sonuçlar.....	43
III. 2. 2. Mo ¹²⁺ İyonu İçin Hidrojenik Ölçeklendirilmiş, Çarpıtılmış Dalga ve İkili	
Karşılaşma Yaklaşımlarında Elde Edilen Sonuçlar.....	47
III. 2. 3. Mo ¹³⁺ İyonu İçin Hidrojenik Ölçeklendirilmiş, Çarpıtılmış Dalga ve İkili	
Karşılaşma Yaklaşımlarında Elde Edilen Sonuçlar.....	50
III. 2. 4. Mo ¹⁴⁺ İyonu İçin Hidrojenik Ölçeklendirilmiş, Çarpıtılmış Dalga ve İkili	
Karşılaşma Yaklaşımlarında Elde Edilen Sonuçlar.....	53
KAYNAKLAR.....	57
EKLER.....	59
ÖZGEÇMİŞ.....	83

ÖZET

Mo^{10+} - Mo^{14+} İYONLARININ ELEKTRON ÇARPMALI İYONLAŞMA TESİR KESİT ve ORANLARI

Tezimizde, elektronların Mo^{11+} , Mo^{12+} , Mo^{13+} ve Mo^{14+} şeklinde sembolize edilen molibden iyonlarına çarpmaları sonucu meydana gelen iyonlaşma süreçlerini karakterize eden tesir kesit ve oran katsayıları hesaplanmıştır. Bu hesaplamalar önce Amerika Birleşik Devletleri'nin New Mexico eyaletinde bulunan Los Alamos Milli Laboratuvarı'nda geliştirilmiş GIPPER (General Ionization Processes in the Presence of Electrons and Radiation) programı kullanılarak yapılmıştır. GIPPER programı çerçevesinde ikili karşılaşma (binary encounter), çarpıtılmış dalga (distorted wave) ve hidrojenik ölçeklendirilmiş (scaled hydrogenic) adlarıyla literatüre yansıyan yöntemler kullanılarak sonuçlar üretilmiştir. Bu sonuçlar daha sonra konfigürasyon ortalama ve LSJ kuplaj sistemi çerçevesinde oluşturulan seviye ayrışımı çarpıtılmış dalga yöntemleri kullanılarak elde edilen sonuçlarla karşılaştırılmıştır. Bu hesaplamalarda doğrudan iyonlaşma süreçlerinin yanında oto-iyonlaşma süreçleri de göz önüne alınmıştır. Oto-iyonlaşmaya katkı yapan uyarılmış hallerin ışımalı durulma süreçlerine de katkı yapma ihtimalleri olduğundan bu süreçlere ait dallanma oranları hesaplanarak sonuçlara yansıtılmıştır. Oto-iyonlaşma ihtimali olan uyarılmış haller ve bu hallere ait dallanma oranları ve enerji eşik değerleri tablolar halinde de listelenmiştir. Her iyon basamağı için oluşturulan tesir kesiti ve oran katsayıları ardışık bir şekilde grafiklerle temsil edilerek bütünlük sağlanmıştır. GIPPER programı çerçevesinde yapılan LSJ seviye ayrışımı hesaplamalar için toplam tesir kesiti ve oran katsayıları yanında kısmi iyonlaşma kanallarına ait sonuçları da örneklendirilmiştir. Konfigürasyon ortalama yaklaşımlarda kullanılan saçılma genlikleri, iyonların son elektron konfigürasyonlarına ait LSJ seviyeleri üzerinden toplam ve ilk elektron konfigürasyonlarına ait LSJ seviyeleri üzerinden ortalama alınarak oluşturulmuştur. Radyal orbitaller yarı-rölativistik bir çerçevede oluşturulan Hartree-Fock denklemlerinden elde edilmiştir.

Ekim,2015

Sevgi ÇIPLAK

ABSTRACT

ELECTRON IMPACT IONIZATION CROSS SECTIONS AND RATE COEFFICIENTS OF Mo^{10+} - Mo^{14+} IONS

In our thesis, we calculated the cross sections and rate coefficients which characterizes the ionization processes of electrons colliding with Molybdenum ions symbolized with Mo^{11+} , Mo^{12+} , Mo^{13+} and Mo^{14+} . The calculations are first carried out using the GIPPER (General Ionization Processes in the Presence of Electrons and Radiations) program which is developed in Los Alamos National Laboratory located in New Mexico State of United States. GIPPER has the option to calculate electron impact ionization cross sections and rate coefficients in three different methods. These methods are known by the names binary encounter, distorted wave, and scaled hydrogenic in the literature. The calculations are also performed using the configuration-average and level-resolved distorted-wave approximations. Level-resolved calculations are performed in *LSJ* coupling. In these calculations not only direct ionizations but also the contributions from auto ionization channels are taken into account. Since the excited states contributing to the auto-ionization process may also contribute to the radiative recombination process, the branching ratios are calculated and reflected in the results. The excited states which have a finite probability of auto-ionization and the associated branching ratios and energy thresholds are tabulated. The calculated cross sections and rate coefficients for each ion step are successively presented in graphics for the purpose completeness. We also provide results for selected *LSJ* level resolved ionization partial channels that GIPPER program produces along with the total cross sections and rate coefficients. Scattering amplitude used in configuration averaged method is obtained by averaging over all *LSJ* states of an initial configuration and summed over all *LSJ* states of a final configuration. Radial orbitals used are taken from the solutions of the semi-relativistic Hartree-Fock equations.

October, 2015

Sevgi ÇIPLAK

SEMBOLLER LİSTESİ

k	: Dalga sayısı
l	: Açısal momentum
r_{nl}	: nl alt kabuğundaki elektron sayısı
E	: Elektronun enerjisi
I_{nl}	: nl alt kabuğun iyonlaşma enerjisi
$Z_{eff}(nl)$	: nl kabuğundaki bir elektron için oluşturulan etkin yükü
α	: İnce yapı sabiti
T	: Kinetik enerji
$\hat{H}$	: Hamiltonyen işlemcisi
Ψ	: Dalga fonksiyonu
E_{ort}	: Ortalama enerji
A_a	: Oto-iyonlaşma oran katsayısı
W	: İstatistik ağırlık
$\bar{\sigma}_{birleş}$	: Konfigürasyon ortalamalı tesir kesiti
$\delta_{\lambda\mu}$	: Kronocker Delta fonksiyonu
ρ_e	: İyondan koparılan elektron için hal yoğunluğu

KISALTMALAR

GIPPER	: Elektron ve Radyasyon'un varlığında genel İyonizasyon süreçleri (General Ionization Processes in the Presence of Electrons and Radiation)
BED	: İkili Çarpışmalı Dipol (Binary Encounter Dipole)
BEB	: İkili Çarpışmalı Bethe (Binary Encounter Bethe)
PWBA	: Düzlem Dalga Born Yaklaşımı (Plane Wave Born Approximation)
DW	: Çarpıtılmış Dalga (Distorted Wave)
SCH	: Hidrojenik ölçeklendirilmiş-Coulomb Born (Born Hydrogenic Scaled-Coulomb)

ŞEKİLLER

SAYFA

Şekil II. 1. Ağırlık merkezi koordinat sistemi ile laboratuvar koordinat sisteminin karşılaştırılması.....	15
Şekil II. 2. Etkin μ kütleli parçacığın $V(r)$ potansiyelinden saçılması.....	16
Şekil III. 1. 1. Mo^{10+} iyonunun toplam ve kısmi elektron çarpmalı tesir kesitleri.....	37
Şekil III. 1. 2. Mo^{11+} iyonunun toplam ve kısmi elektron çarpmalı tesir kesitleri.....	38
Şekil III. 1. 3. Mo^{12+} iyonunun toplam ve kısmi elektron çarpmalı tesir kesitleri.....	39
Şekil III. 1. 4. Mo^{13+} iyonunun toplam ve kısmi elektron çarpmalı tesir kesitleri.....	41
Şekil III. 1. 5. Mo^{14+} iyonunun toplam ve kısmi elektron çarpmalı tesir kesitleri.....	42
Şekil III. 2. 1. 1. Mo^{11+} iyonunun $4p^1 \ ^2P_{0,5} \rightarrow 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1 \ (^2S)4p^1 \ (^2P)^3P_{0,0}$ iyonlaşma kanalına ait hidrojenik ölçeklendirilmiş, çarpıtılmış dalga ve ikili karşılaşma yaklaşımlarında elde edilen kısmi tesir kesitleri.....	45
Şekil III. 2. 1. 2. Mo^{11+} iyonunun $4p^1 \ ^2P_{0,5} \rightarrow 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1 \ (^2S)4p^1 \ (^2P)^3P_{0,0}$ iyonlaşma kanalına ait hidrojenik ölçeklendirilmiş, çarpıtılmış dalga ve ikili karşılaşma yaklaşımlarında elde edilen kısmi oran katsayıları.....	45
Şekil III. 2. 1. 3. Mo^{11+} iyonunun 3s, 3p, 3d, 4s ve 4p alt kabuklarından kaynaklanan tüm LSJ kısmi iyonlaşma kanalları için elde edilen tesir kesitlerinin toplamı.....	46
Şekil III. 2. 1. 4. Mo^{11+} iyonunun 3s, 3p, 3d, 4s ve 4p alt kabuklarından kaynaklanan tüm LSJ kısmi iyonlaşma kanalları için elde edilen oran katsayılarının toplamı.....	46
Şekil III. 2. 2. 1. Mo^{12+} iyonunun $Mo^{12+} 4s^2 \ ^1S_{0,0} \rightarrow 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1 (^2S)^2S_{0,5}$ iyonlaşma kanalına ait hidrojenik ölçeklendirilmiş, çarpıtılmış dalga ve ikili karşılaşma yaklaşımlarında elde edilen kısmi tesir kesitleri.....	48
Şekil III. 2. 2. 2. Mo^{12+} iyonunun $Mo^{12+} 4s^2 \ ^1S_{0,0} \rightarrow 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1 (^2S)^2S_{0,5}$ iyonlaşma kanalına ait hidrojenik ölçeklendirilmiş, çarpıtılmış dalga ve ikili karşılaşma yaklaşımlarında elde edilen kısmi oran katsayıları.....	48

Şekil III. 2. 2. 3. Mo ¹²⁺ iyonunun 3s, 3p, 3d ve 4s alt kabuklarından kaynaklanan tüm LSJ kısmi iyonlaşma kanalları için elde edilen tesir kesitlerinin toplamı.....	49
Şekil III. 2. 2. 4. Mo ¹²⁺ iyonunun 3s, 3p, 3d ve 4s alt kabuklarından kaynaklanan tüm LSJ kısmi iyonlaşma kanalları için elde edilen oran katsayılarının toplamı.....	49
Şekil III. 2. 3. 1. Mo ¹³⁺ iyonunun 4s ¹ 2S _{0,5} → 3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰ 1S _{0,0} iyonlaşma kanalına ait hidrojenik ölçeklendirilmiş, çarpıtılmış dalga ve ikili karşılaşma yaklaşımlarında elde edilen kısmi tesir kesitleri.....	51
Şekil III. 2. 3. 2. Mo ¹³⁺ iyonunun 4s ¹ 2S _{0,5} → 3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰ 1S _{0,0} iyonlaşma kanalına ait hidrojenik ölçeklendirilmiş, çarpıtılmış dalga ve ikili karşılaşma yaklaşımlarında elde edilen kısmi oran katsayıları.....	51
Şekil III. 2. 3. 3. Mo ¹³⁺ iyonunun 3s, 3p ve 3d alt kabuklarından kaynaklanan tüm LSJ kısmi iyonlaşma kanalları için elde edilen tesir kesitlerinin toplamı.....	52
Şekil III. 2. 3. 4. Mo ¹³⁺ iyonunun 3s, 3p ve 3d kabuklarından kaynaklanan tüm LSJ kısmi iyonlaşma kanalları için elde edilen oran katsayılarının toplamı.....	52
Şekil III. 2. 4. 1. Mo ¹⁴⁺ iyonunun 3d ¹⁰ 1S _{0,0} → 3s ² 3p ⁶ (1S)3d ⁹ (2D) ² D _{2,5} iyonlaşma kanalına ait hidrojenik ölçeklendirilmiş, çarpıtılmış dalga ve ikili karşılaşma yaklaşımlarında elde edilen kısmi tesir kesitleri.....	54
Şekil III. 2. 4. 2. Mo ¹⁴⁺ iyonunun 3d ¹⁰ 1S _{0,0} → 3s ² 3p ⁶ (1S)3d ⁹ (2D) ² D _{2,5} iyonlaşma kanalına ait hidrojenik ölçeklendirilmiş, çarpıtılmış dalga ve ikili karşılaşma yaklaşımlarında elde edilen kısmi oran katsayıları.....	54
Şekil III. 2. 4. 3. Mo ¹⁴⁺ iyonunun 3s, 3p ve 3d alt kabuklarından kaynaklanan tüm LSJ kısmi iyonlaşma kanalları için elde edilen tesir kesitlerinin toplamı.....	55
Şekil III. 2. 4. 4. Mo ¹⁴⁺ iyonunun 3s, 3p ve 3d alt kabuklarından kaynaklanan tüm LSJ kısmi iyonlaşma kanalları için elde edilen oran katsayılarının toplamı.....	55

TABLolar

SAYFA

Tablo III. 2. 1. 1. $\text{Mo}^{11+} 4p^1 {}^2P_{0,5} \rightarrow 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1 ({}^2S)4p^1 ({}^2P)^3P_{0,0}$ kısmi iyonlaşma kanalına ait tesir kesit değerleri.....	44
Tablo III. 2. 2. 1. $\text{Mo}^{12+} 4s^2 {}^1S_{0,0} \rightarrow 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1 ({}^2S)^2S_{0,5}$ kısmi iyonlaşma kanalına ait tesir kesit değerleri.....	47
Tablo III. 2. 3. 1. $\text{Mo}^{13+} 4s^1 {}^2S_{0,5} \rightarrow 3s^2 3p^6 3d^{10} {}^1S_{0,0}$ kısmi iyonlaşma kanalına ait tesir kesit değerleri.....	50
Tablo III. 2. 4. 1. $\text{Mo}^{14+} 3d^{10} {}^1S_{0,0} \rightarrow 3s^2 3p^6 ({}^1S)3d^9 ({}^2D)^2D_{2,5}$ kısmi iyonlaşma kanalına ait tesir kesit değerleri.....	53
Tablo A. 1. Plazmada meydana gelebilecek atomik süreçler.....	60
Tablo B .1. Mo^{10+} iyonunun 3s kabuğuna ait dallanma oran tablosu.....	62
Tablo B. 2. Mo^{10+} iyonunun 3p kabuğuna ait dallanma oran tablosu.....	63
Tablo B. 3. Mo^{10+} iyonunun 3d kabuğuna ait dallanma oran tablosu.....	64
Tablo B. 4. Mo^{10+} iyonunun taban konfigürasyonuna ait enerji seviyeleri.....	64
Tablo B. 5. Mo^{10+} iyonunun 3s, 3p, 3d, 4s ve 4p alt kabuklarından birer elektron iyonlaşması sonucu geride kalan iyonik hallere ait LSJ seviyeleri	65
Tablo C. 1. Mo^{11+} iyonunun 3s kabuğuna ait dallanma oran tablosu	68
Tablo C. 2. Mo^{11+} iyonunun 3p kabuğuna ait dallanma oran tablosu.....	69
Tablo C. 3. Mo^{11+} iyonunun 3d kabuğuna ait dallanma oran tablosu	70
Tablo C. 4. Mo^{11+} iyonunun taban konfigürasyonuna ait enerji seviyeleri.....	70
Tablo C. 5. Mo^{11+} iyonunun 3s, 3p, 3d, 4s ve 4p alt kabuklarından birer elektron iyonlaşması sonucu geride kalan İyonik hallere ait LSJ seviyeleri.....	71
Tablo D. 1. Mo^{12+} iyonunun 3s kabuğuna ait dallanma oran tablosu.....	72
Tablo D. 2. Mo^{12+} iyonunun 3p kabuğuna ait dallanma oran tablosu	73
Tablo D. 3. Mo^{12+} iyonunun 3d kabuğuna ait dallanma oran tablosu	74
Tablo D. 4. Mo^{12+} iyonunun taban konfigürasyonuna ait enerji seviyeleri.....	74
Tablo D. 5. Mo^{12+} iyonunun 3s, 3p, 3d ve 4s alt kabuklarından birer elektron iyonlaşması sonucu geride kalan iyonik hallere ait LSJ seviyeleri.....	75

Tablo E. 1. Mo^{13+} iyonunun 3s kabuğuna ait dallanma oran tablosu.....	76
Tablo E. 2. Mo^{13+} iyonunun 3p kabuğuna ait dallanma oran tablosu.....	77
Tablo E. 3. Mo^{13+} iyonunun 3d kabuğuna ait dallanma oran tablosu.....	78
Tablo E. 4. Mo^{13+} iyonunun taban konfigürasyonuna ait enerji seviyeleri.....	79
Tablo E. 5. Mo^{13+} iyonunun 3s, 3p, 3d ve 4s alt kabuklarından birer elektron iyonlaşması sonucu geride kalan iyonik hallere ait LSJ seviyeleri	79
Tablo E. 6. Mo^{14+} iyonunun 3s kabuğuna ait dallanma oran tablosu	80
Tablo E. 7. Mo^{14+} iyonunun 3p kabuğuna ait dallanma oran tablosu	81
Tablo E. 8. Mo^{14+} iyonunun taban konfigürasyonuna ait enerji seviyeleri	81
Tablo E. 9. Mo^{14+} iyonunun 3s, 3p ve 3d alt kabuklarından birer elektron iyonlaşması sonucu geride kalan iyonik hallere ait LSJ seviyeleri	82

BÖLÜM I

GİRİŞ ve AMAÇ

I.1. GİRİŞ

Plazma, maddenin dördüncü fazı olarak tanımlanmaktadır. Uzaydaki maddenin %99'unun plazma fazında olduğu hatırlanırsa plazma üzerine yapılacak bilimsel çalışmaların önemi hemen kavranabilir. Plazma'ya pozitif ve negatif yüklerden (iyon ve elektronlar) oluşan yarı nötr bir ortam gibi bakabiliriz. İvmeli hareket yapan yüklü parçacıkların çevrelerine ışıma yaptıklarını klasik elektromanyetik teoriden biliyoruz. Plazma kaynaklı ışıma spektrumunun modellenmesi astrofizik ve laboratuvar plazmalarının diyagnostik çalışmaları için önde gelen bilimsel faaliyetler arasındadır. Astrofizikte doğrudan sondajlanarak ulaşılmayan, temel yapısı hidrojen, helyum ve diğer iyonlaşmış gazlardan oluşan yıldızlar hakkında bilgi sahibi olmanın tek yolu bu ortamlardan çevrelerine yayılan ışımanın analizinden elde edilmektedir. Laboratuvar plazmalarında, plazma özelliklerinin ortaya çıkarılması için sondaj kullanımı çoğu zaman plazmaya zarar vererek gerçek maksada ulaşmayı ciddi manada etkilemektedir. Dolayısıyla plazmanın saf haline dönük özelliklerinin belirlenmesinde teorik hesaplamalara ciddi ihtiyaç vardır. Özellikle plazmadan çevresine yayılan ışımanın plazmadaki hangi süreçler sonucunda oluştuğunu anlamak plazmanın yapısı ve özelliklerini ortaya çıkarmada büyük önem taşımaktadır. İyi bir ışıma modelinin mutlaka atomik veri bankasına, sıcaklıkla atomik süreçler arasındaki ilişkiyi ortaya koyan verilere ve plazma içerisindeki değişik türden parçacıkların yoğunluk dağılımına büyük ihtiyaç duyacağı aşikârdır.

Plazmayı oluşturan parçacıklara ait yoğunluklarının belirlenmesi ve plazmadan çevresine ne tür ışımların yayıldığıının anlaşılması için öncelikle plazma parçacıkları arasında meydana gelebilecek etkileşmelerin araştırılması gereklidir. Biz bu tezimizde plazma parçacık dengesini etkileyen süreçlerden biri olan elektron-iyon çarpışma problemini ele aldık. Elektron-iyon çarpışma süreçleri plazma ortamında meydana gelen en yaygın süreçler arasındadır. Bu süreçleri karakterize eden tesir kesitleri ve oran katsayılarının bilinmesi plazma yapı ve dinamiği üzerine yapılan bilimsel çalışmalarda kullanılan temel girdiler arasındadır. Elektron-iyon çarpışma süreçleri ve bu süreçleri

karakterize eden büyüklükler üzerine yapılan çalışmaların tarihi, kuantum mekaniğinin doğum yılları olan 1920'lere kadar uzanmakla beraber bu alanda en ilgi çekici gelişme 1930 yılında Hans Bethe tarafından gerçekleştirilmiştir [1, 2]. Bethe, gelen elektronla hedef elektron arasındaki çarpışma sürecinin dipol etkileşmesi temelinde oluştuğunu kabul etmiştir. Bu kabulü rölativistik olmayan bir çerçevede, kuantum temelli düzlem dalga Born yaklaşımıyla birleştirerek, özellikle yüksek enerjili elektronların hedef atomlardan saçılma sürecini tamamına yakın bir şekilde tanımlayan tesir kesiti formülünü oluşturmuştur. Biz tezimizde elektron iyon çarpışma problemini önce yarı rölativistik kuantum çerçevede ele aldık. Bu hesaplamalar için Amerika Birleşik Devletlerinin New Mexico eyaletinde bulunan Los Alamos Milli Laboratuvarında geliştirilmiş GIPPER (General Ionization Processes in the Presence of Electrons and Radiation) programını kullandık [3]. Bu program çerçevesinde, molibden elementinin Mo^{+11} , Mo^{+12} , Mo^{+13} , ve Mo^{+14} şeklinde temsil edilen dört farklı iyon basamağı için, ikili karşılaşma (Binary Encounter)[4-6], çarpıtılmış dalga (distorted wave)[7] ve hidrojenik ölçeklendirilmiş (scaled hydrogenic)[8] olarak adlandırılan üç farklı yöntemle tesir kesit ve oran katsayıları için hesaplar yapıldı. Bu hesaplar, ayrıca, LSJ kuplaj sistemi çerçevesinde oluşturulan seviye ayrışımı ve konfigürasyon ortalamalı yaklaşımlarla da tekrarlandı. Bu yöntemlerin temelini Rutherford tesir kesiti teorisinin oluşturduğunu söyleyebiliriz. Rutherford tesir kesiti hedef atom veya iyonun geri tepme hareketini ihmal etmekte ve gelen parçacığın da rölativistik olmadığını kabul etmektedir. Mott, Rutherford gibi, hedef atom veya iyonun geri tepme hareketini ihmal etmiş ancak gelen parçacığın rölativistik olduğunu kabul ederek Rutherford diferansiyel tesir kesitini yeniden türetmiştir. Diğer bir deyişle Mott, elektron spin serbestlik derecesini dikkate alarak, Rutherford formülünü elektronlar arasında olabilecek değiş-tokuş etkileşmelerini de yansıtacak şekilde yeniden türetmiştir. Mott tesir kesiti oluşturulurken hedef elektronları, serbest elektronlarmış gibi kabul edilmişlerdir. Oysa bu elektronlar hedef atom çekirdeği etrafında belirli yörüngeler üzerinde dolanan bağlı elektronlardır. Bu bağlı elektronların hız vektörleri gelen elektronun hız vektörü doğrultusuna göre farklı yönlerde olabilirler. Dolayısıyla işi daha gerçekçi çerçeveye oturtabilmek için, bağlı elektronların hız vektörlerinin yönelimlerini tanımlayan bir hız dağılım fonksiyonlarına ihtiyaç vardır. Eğer Mott tesir kesiti bu hız dağılım fonksiyonu ile çarpılıp hızların farklı yönelimleri üzerinden entegre edilirse literatürde ikili

karlaşmalı Bethe model olarak bilinen arpışmalar için tesir kesiti formülü üretilmiş olur. Bilgisayar teknolojisindeki gelişmelere paralel olarak tam anlamıyla kuantum mekanik çerçevede geliştirilmiş ve önemli rölativistik etkileri doğrudan bünyesinde taşıyan, R-matrix ve close-coupling gibi pek çok sofistike teorilerin ortaya çıktığı da görölmektedir. [20,21]

Tezimizde aynı iyonlar için konfigürasyon ortalama arpıtılmış dalga yöntemiyle[7] de hesaplar yaptık. Kuantum temelli arpıtılmış dalga yönteminin yüksek yüke sahip iyonlar için güvenilir sonuç verdikleri bilinen bir husustur. Farklı yöntemlerle elde ettiğimiz sonuçları karşılaştırarak hesaplarımızın güvenilirliği için iyi bir temel oluşturduğumuz kanaatindeyim. Yüksek sıcaklıktaki plazmalardan çevreye yüksek enerjili fotonlar (Ultraviyole(UV), X-ışını ve γ -ışınları) yayılmaktadır. Bu ışımanın analiziden plazma yapısı ve dinamiği hakkında doğrudan bilgi sahibi olunmaktadır. Dolayısıyla bu ışımaların plazma diagnostiği için tasarlanan optik birimlere ulaştırılması büyük önem taşımaktadır. Bu görevi plazmaya doğrudan bakan ve ilk aynalar olarak isimlendirilen metalik yüzeyler yapmaktadır. Dolayısıyla bu yüzeylerin yüksek yansıma kapasitesi ve düşük püskürtme verimli olmaları gereklidir. Burada düşük püskürtmeden kastımız malzemenin yüksek enerjili paracık bombardımanı altında yüzeyinden atomlarını kolayca serbest bırakmama özeliğidir. Molibden bu özelliklere sahip bir elementtir. Dolayısıyla plazma diyagnostik sistemlerdeki ilk aynaların metalik yüzeylerini oluşturma potansiyeli taşımaktadır. Plazmadan yüksek enerjileriyle çevreye yayılan paracıkların ilk ayna yüzeylerine arparak bu yüzeylerden, az miktarda da olsa, atom kopmasına ve kopan bu atomların safsızlık olarak plazmaya karışmalarına neden olur. İlk ayna yüzeylerinin molibden elementile kaplı olmaları halinde bu elementin farklı iyon basamakları için yapılacak hesaplamaların plazma araştırmaları açısından önemi açıktır. Bu nedenle bu tezimizde 4 farklı molibden iyonları için hesaplamalar yapılmıştır.

I. 1. 1. Elektron İyon (Atom) arpışması

Elektronun iyon(atom) arpışması ya elastik ya da elastik olmayan bir tarzda sonlanır. Elastik arpışmalarda hedef iyonun(atomun) içyapısında herhangi bir değışme olmaz. Elastik olmayan arpışmalarda hedef iyonun(atomun), arpışma süreci

esnasında, içyapısında değişiklikler olur. Bu değişiklikler hedef iyonun(atomun) uyarılması, bir veya daha fazla elektron kaybederek iyonlaşması şeklinde ortaya çıkar. Çarpışma süreci hedef iyonu(atomu) valans ve valans altı kabuklarından elektron kopararak iyonlaştırabilir. Hedef iyonun(atomun) yapısındaki değişiklik, yalnız valans veya valans altı kabuklarının her hangi birinde bir veya daha fazla elektron azalması şeklinde meydana gelmişse, iyonlaşma süreci doğrudan iyonlaşma süreci olarak adlandırılır. İyonlaşma süreci dolaylı şekilde de oluşabilir. Bu sürecin oluşması için gerekli minimum koşul elektron çarpması sonucu iyonunda en az iki elektronun, enerjisi tek elektron iyonlaşma eşik enerjisinden daha büyük olan bağlı bir kuantum haline uyarılmasıdır. Hedefin çarpışmadan önceki kuantum haliyle kıyaslandığında en az iki uyarılmış elektrona sahip bu bağlı hal daha kararlı hallerden birine bozularak elektron kaybedebilir. Bu süreç literatürde oto-iyonlaşma süreci olarak adlandırılır.

Biz bu tezimizde önce doğrudan tek elektron iyonlaşma süreçlerini karakterize eden tesir kesiti ve oran katsayıları için hesaplamalar yaptık. Tezimizin önemli bir bölümünde oto-iyonlaşma süreçleri sonucu meydana gelen iyonlaşma olaylarını incelemek olmuştur. Oto-iyonlaşma süreçlerinin tesir kesiti ve oran katsayılarına etkileri hesaplanmış ve sonuçlar grafiklerle gösterilmiştir.

I. 1. 2. Elektron Çarpmalı Doğrudan İyonlaşma

q yüküne sahip hedef iyonun taban halini A^{q+} ile temsil edersek elektron çarpmalı doğrudan tek elektron iyonlaşma sürecini

$$e(k_i l_i) + A^{q+} \rightarrow A^{q+1} + e(k_s l_s) + e(k_f l_f) \quad \text{I.1}$$

şeklinde sembolize edebiliriz. Burada $e(k_i l_i)$ gelen elektronu, $e(k_s l_s)$ saçılan elektronu ve $e(k_f l_f)$ de hedef iyonun valans veya valans altı kabuklarından doğrudan iyonlaştırılan elektronu temsil etmektedir. k ve l sembolleri sırasıyla elektronların dalga sayılarını ve açısal momentumlarını temsil etmektedir. Atom birim siteminde dalga sayılarının momentum vektörlerinin büyüklüğüne eşit olduğunu ve çarpışma sürecinin hem enerjinin hem de momentumun korunduğu bir süreç olduğunu hatırlatalım. Gelen elektronun süreç esnasındaki momentum kaybının $\vec{q} = \vec{k}_i - \vec{k}_f$ ile verilebileceğinde aşîkâr olmalıdır. Doğrudan iyonlaşma süreci, gelen elektron tarafından hedefe aktarılan

enerji ve momentumun hedeften belirli enerji ve momentum değerlerine sahip bir elektronun kopmasıyla sonuçlanan bir süreçtir. İlerleyen bölümlerde böyle bir süreci karakterize eden tesir kesitinin konfigürasyon ortalama bir yaklaşımla nasıl hesap edilebileceğini göstereceğiz.

I. 1. 3. İkili Karşılaşma Yaklaşımı (Binary-Encounter Approximation)

İkili karşılaşımlı çarpışma yaklaşımı ilk olarak 1959 yılında Gryzinski [9] tarafından formüle edilmiştir. Bu yaklaşımdaki temel fikir, iyonların(atomların) elektron çarpmalı iyonlaşma ve uyarılma süreçlerinin yaklaşık olarak, serbest iki elektron arasında meydana gelebilecek çarpışma süreci temelinde tanımlanabileceği düşüncesidir. Burada gelen elektronun çarptığı elektronun iyonun bağlı Rydberg elektronlarından bir olduğu anlaşılmalıdır. Vriens ve arkadaşları hedef elektronların çarpışmadan önce izotropik hız-yönelim dağılımına sahip olduklarını kabul ederek ikili çarpışmalı yaklaşım için daha sofistike tesir kesiti formülü elde etmişlerdir [10]. Bu kabul esas itibarıyla ikili karşılaşımlı çarpışma tesir kesiti için Mott [11] tarafından türetilen klasik formülü kısmen düzeltmektedir. Mott formülünün türetilmesinde hedef elektronları da gelen elektron gibi noktasal kabul edilmektedir. Mott tesir kesiti, Rutherford [12] tesir kesiti formülünün iki elektron arasındaki çarpışma sürecine, elektronlar arasında olabilecek değiş tokuş etkilerini de göz önüne alarak genişletilmiş halidir. Mott formülü daha ziyade katı çarpışma(hard collision) olarak tanımlayacağımız düşük çarpışma parametrelili çarpışmaları için geçerli bir formüldür. Bonsen ve Vriens Rutherford formülünden başlayarak saçılan ve hedeften iyonlaştırılan elektron enerjilerine ve saçılma açısına bağlı çift diferansiyelli tesir kesiti formülünü üretmişlerdir [13].

Bethe [1] büyük çarpışma parametrelili çarpışmalarda, çarpışma sürecini kontrol eden asıl etkinin gelen elektron ile hedef elektronları arasındaki dipol etkileşimler olduğu düşüncesinden hareketle ikili çarpışmalı dipol (BED) modeli olarak isimlendirilen bir model oluşturmuştur. BED modelinde en önemli girdi iyonlaşma için diferansiyel dipol titreşim gücüdür. Diferansiyel titreşim gücü foto iyonlaşma tesir kesitlerinden türetilir. Kim ve arkadaşları [14] diferansiyel titreşim gücünün oluşturulmasında atomik yapıdan kaynaklanan zorlukların olacağına dikkat çekerek ikili

karşılaşmalı çarpışma süreçleri için, ikili çarpışmalı Bethe (BEB) adını verdikleri, daha basit bir model geliştirmişlerdir.

I. 1. 4. Çarpıtılmış Dalga Yöntemi

Bu yöntemi anlayabilmek için önce düzlem dalga Born (plane wave Born) [12,15-18] yaklaşımına kısaca göz atalım. Düzlem dalga Born yaklaşımında hem gelen elektron hem de saçılan elektron düzlem dalga ile temsil edilir. Diğer bir deyişle, bu yaklaşımda yeteri derecede uzak mesafelerde olan, gelen ve saçılan elektronların serbest paracık gibi davrandıkları kabul edilmektedir. Bu kabul, gelen ve saçılan elektronların hal fonksiyonlarının uzay kısımlarının düzlem dalga şeklinde alınmasının arkasında yatan temel fikirdir.

Düzlem dalga Born yaklaşımında (PWBA) tesir kesiti gelen elektronun hedef elektronlarıyla Coulomb etkileşmesi için hesaplanan genelleştirilmiş titreşim gücü kullanılarak hesaplanabilir [19] PWBA yönteminin en önemli avantajı kolayca hesaplanabilir olmasıdır. Ancak sonuçlarının güvenilirliği gelen elektronun kinetik enerjisi ve dolayısıyla açısal momentumunun büyüklüğüne kritik olarak bağlıdır. Düşük enerjili çarpışma problemlerinin bu yöntemle modellenmesi çok gerçekçi değildir. PWBA yaklaşımının daha gelişmiş hali literatürde çarpıtılmış dalga (distorted wave (DW)) adıyla bilinir.

DW yaklaşımında Coulomb etkileşmesinin uzun mesafeli (long range) davranışı dikkate alınarak gelen ve saçılan elektronlar için düzlem dalga yerine Z protonlu ve N elektronlu hedefin Z-N pozitif çekirdek yükü ile oluşturacağı Coulomb hal fonksiyonları kullanılmaktadır. Çarpıtılmış dalga yaklaşımında gelen elektron ile hedef elektronlar arasındaki Coulomb etkileşmesi gelen elektronun başlangıçtaki düzlem dalgasını etkileyerek değişikliğe uğratar. Kuantum mekanik çerçevede kısmi dalga açılımı kullanılarak diferansiyel tesir kesiti hesabı yapılmaktadır. Çarpıtılmış dalga yaklaşımının PWBA yaklaşımından en önemli farkı gelen ve saçılan elektronların hal fonksiyonlarının saf düzlem dalga yerine küresel yayılma özelliği olan bir terimin eklenmesiyle değişikliğe uğratılmış düzlem dalga ile temsil edilmesidir. Düzlem dalgada oluşturulan bu değişikliğin kaynağının gelen elektronla hedef elektronları arasındaki elektrostatik etkileşmeler olduğu unutulmamalıdır. Çarpıtılmış dalga yöntemi

elektronların yüksek pozitif yüke sahip iyonlarla çarpışmaları sonucunda meydana gelebilecek uyarılma ve iyonlaşma süreçlerini karakterize eden tesir kesiti ve oran katsayılarının hesapları için oldukça güvenilir sonuçlar vermektedir. Ancak düşük yüklü veya nötr sistemler için DW yerine R-Matrix veya Close-Coupling [20-23] yaklaşımlarının kullanılması daha uygundur.

I. 1. 5. Hidrojenik Ölçeklendirilmiş Coulomb Born Yaklaşımı

Hidrojenik ölçeklendirilmiş-Coulomb Born (SCH) yaklaşımındaki temel fikir şudur: Çok elektronlu bir sistemin Hamiltoniyen'i $\rho = Zr$ şeklinde bir değişken dönüşümüne tabi tutulursa basitleşerek hidrojenik bir terim ile Z^{-1} ile çarpılmış elektronlar arası Coulomb etkileşimleri temsil eden diğer bir terimin toplamı şekline gelir [24].

Hesaplamalarda Z^{-1} ile çarpılmış elektronlar arası Coulomb etkileşme terimine pertürbasyon olarak bakılmaktadır. Artan Z değerlerine karşılık pertürbasyonun terimindeki azalmanın uygulama açısından önemi büyüktür. Bu fikrin elektron-iyon çarpışma süreçlerinin modellenmesine taşınması Sampson ve arkadaşları [25] tarafından yapılmıştır. Sampson ve arkadaşları hidrojenik hedefler için yaptıkları hesaplamaların sonuçlarını uygun perdeleme parametreleriyle karmaşık yapıları gerçek sistemlere uyarlamışlardır. Bu yöntemin başarısı N hedef sistemdeki elektron sayısı, Z de hedef sistemin proton sayısı olmak üzere Z/N değerine kritik olarak bağlıdır. Z/N değerinin 2 veya daha büyük olması halinde SCH yönteminin iyi sonuçlar verdiği bilinmektedir.

I. 2. AMAÇ

Maddenin dördüncü fazı olarak görülen plazma kâinata en çok rastlanan madde şeklindedir. Plazma elektron ve pozitif iyonlardan ibaret bir yapıya sahiptir. Plazma içerisindeki yüklü parçacıklar hem birbirleriyle hem de harici ve dâhili elektrik ve manyetik alanlarla etkileşirler. Plazma içerisindeki pozitif ve negatif yüklü parçacıklar arasından meydana gelen etkileşmelerin anlaşılması plazma yapının ve dinamiğinin ortaya çıkarılmasında kritik öneme sahiptir. Plazma içerisinde meydana gelen en yaygın süreçlerden biri, değişik türden plazma parçacıkları arasında meydana gelen çarpışma sürecidir. Elektron çarpmalı iyonlaşma ve birleşme süreçleri plazma parçacık dengesini etkileyen önemli süreçler arasındadır. Atom ve iyonların elektron çarpmalı iyonlaşma süreçleri temel ve pratik öneme sahip araştırma konusu olarak devam etmektedir. Pratik açıdan bakıldığında yüksek sıcaklıklı plazmalarda bulunan yüksek yüklü iyonların iyonlaşma oranlarının tahmini plazma dinamiğinin ve yapısının belirlenmesi için geliştirilen matematiksel modeller için temel girdi parametreleri arasındadır. Plazmada meydana gelen atomik süreçler, plazmayı oluşturan değişik türden parçacıkların sayılarının zamanla değişmesine neden olmaktadır. Dolayısıyla plazma yapısının anlaşılmasında parçacıklarının zamanla nasıl değiştiklerinin bilinmesi gereklidir. Plazma parçacıklarının zamanla değişimlerinin matematik modelleri parçacık dengesini etkileyen atomik süreçlerin birim zamanda oluşumlarını yansıtan oran katsayılarına ihtiyaç duymaktadır. Plazmada meydana gelebilecek atomik süreçler Ek A-Tablo A.1. de listelenmiştir. Bu süreçleri karakterize eden tesir kesiti ve oran katsayıları hesaplanması için yoğun bilimsel çabaların devam ettiği kısa bir literatür araştırmasından da görülebilir. Plazma içerisinde meydana gelen süreçlerin zamanla değişim oranları plazma sıcaklığına bağlıdır. Dolayısıyla atomik süreçlere ait oran katsayılarının sıcaklığın fonksiyonu olarak belirlenmesi önemlidir. Bu durum plazma ister laboratuvar kaynaklı ister uzay kaynaklı olsun geçerlidir. Molibden ve Rutenyum elementlerinin Samanyolu galaksimizin oluşumunun değişik evrelerinde kimyasal yapıya katkı yaptıklarına dair ciddi sonuçlar literatüre yansımıştır. Galaksiyi oluşturan yıldızların plazma fazında olmaları dolayısıyla, bu elementler ve farklı iyon basamaklarıyla gerçekleşebilecek atomik süreçleri karakterize eden tesir kesiti ve oran katsayılarının belirlenmesine yönelik çabaları artırmıştır. Tezdeki amacımız sınırlı sayıda da olsa, Molibden elementinin farklı iyon basamaklarına ait tesir kesiti ve oran

katsayılarını yarı r lativistik kuantum y ntemlerle hesaplayarak bu alandaki ihtiya n giderilmesine katkı yapmaktır. Bu  er evede Molibden elementin Mo^{11+} Mo^{12+} , Mo^{13+} ve Mo^{14+} iyonlarına ait elektron  arpmalı iyonla ma tesir kesitlerini be  farklı y ntemle hesapladık. Bu y ntemler sırasıyla ikili kar ıla ma (binary encounter) ,  arpıtılmış dalga (distorted wave), hidrojenik  l eklendirilmiş (scaled hydrogenic), konfig rasyon ortalamalı ve seviye ayrışımı  arpıtılmış dalga adlarıyla bilinirler. B ylece farklı y ntemlerde elde edilen sonu ları kar ıla tırarak hesapların g venirliliklerini sa lamaya  alı tık.

BÖLÜM II

TEORİ

II. 1. TESİR KESİTLERİN MATEMATİK TEORİSİ

II. 1. 1. Hidrojenik Ölçeklendirilmiş Coulomb Born Yaklaşımı

Hidrojenik ölçeklendirilmiş Coulomb Born yaklaşımı çerçevesinde tesir kesiti hesabı için

$$u = \frac{E}{I_{nl}} \quad \text{II.1}$$

olmak üzere

$$Q_{nl}^{HR}(u) = \left(\frac{Z}{n}\right)^4 \frac{Q_f^H(nl, u)}{r_{nl} \pi a_0^2} \quad \text{II.2}$$

şeklinde tanımlanan indirgenmiş hidrojenik tesir kesiti kullanılmaktadır [26]. Burada r_{nl} parametresi nl alt kabuğundaki elektron sayısını, E gelen elektronun enerjisini, I_{nl} ise nl alt kabuğun iyonlaşma enerjisini temsil etmektedir. II.2 sonucu kullanılarak proton sayısı Z olan bir iyon için tesir kesiti hesabı yapılabilir. Bunun temel dayanağı herhangi bir iyonlaşma kanalı için elde edilen hidrojenik tesir kesitinin $Z^4 Q$ şeklinde ölçeklendirilmiş halinin, izoelektronik seriler için Z 'nin çok yavaş değişen bir fonksiyonu olmasıdır. Bu gerçekten hareketle Sampson ve arkadaşları [27] Z protonlu bir iyonun elektron çarpmalı iyonlaşma tesir kesitinin

$$Q_j(nl, u) = \pi a_0^2 \left(\frac{n}{Z_{eff}(nl)}\right)^4 r_{nl} Q_{nl}^{HR}(u) \quad \text{II.3}$$

ifadesinden yaklaşık olarak hesap edilebileceğini göstermişlerdir. $Z_{eff}(nl)$, perdeleme etkisi göz önüne alınarak nl kabuğundaki bir elektron için oluşturulan etkin yükü temsil etmektedir. Hidrojenik bir iyonun iyonlaşma enerjisinin

$$E^I(Ryd) = \left(\frac{Z}{n}\right)^2 \quad \text{II.4}$$

şeklinde verilebileceği hatırlanırsa II.3 ifadesi

$$Q_j(nl, u) = \frac{\pi a_0^2}{[E^I(Ryd)]^2} r_{nl} Q_{nl}^{HR}(u) \quad \text{II.5}$$

şeklinde yazılabilir. $Q_{nl}^{HR}(u)$ için az sayıda u değeri göz önüne alınarak edilen sonuçlar

$$Q_{nl}^{HR}(u) = \frac{1}{u} \left[\frac{A''(nl)}{n} \ln(u) + D''(nl) \left(1 - \frac{1}{u}\right)^2 + \left(\frac{c''(nl)}{u} + \frac{d''(nl)}{u^2}\right) \left(1 - \frac{1}{u}\right) \right] \quad \text{II.6}$$

şeklinde bir ifadeyle u 'nun fonksiyonu haline getirilebilir. $A''(nl)$ ve $D''(nl)$ katsayıları Bethe katsayıları olarak bilinir [28]. $c''(nl)$, $d''(nl)$ ve diğer tüm katsayılar En Küçük Kareler Uyumlaştırma Yöntemi (Least Squares Fitting Method) kullanılarak elde edilebilir.

II. 1. 2. Diferansiyel Tesir Kesiti (Rutherford Saçılması)

Genelliği korumak için $Z_1 e$ yüküne sahip bir parçacığın $Z_2 e$ yüküne sahip başka bir parçacıktan Coulomb saçılma sürecini ele alacağız. Gelen parçacık doğrultusunu koordinat sisteminin z eksenini olarak alırsak Coulomb saçılma süreci silindirik simetriye sahip bir problem haline gelir ve saçılma sürecini tanımlayan hal fonksiyonu ve saçılma genliği z -ekseni etrafındaki dönmeyi temsil eden ϕ açısından bağımsız hale gelir. Gelen parçacıkla hedef parçacık arasındaki mesafeyi r ile gösterirsek Coulomb etkileşmesini de $V(r)$ ile temsil edersek saçılma dinamiğini

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(r) \right] \psi = E\psi \quad \text{II.7}$$

şeklinde bir Schrödinger dalga denklemiyle temsil edebiliriz. Coulomb etkileşmesinin cgs birim sistemindeki ifadesi için

$$V(|\vec{r}|) = V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \quad \text{II.8}$$

yazılabilir. Problemi ağırlık merkezi koordinat sisteminde ele alıp ağırlık merkezinin kartezyen koordinatları

$$\xi = r - z, \eta = r + z \text{ ve } \phi = \tan^{-1}\left(\frac{y}{x}\right) \quad \text{II.9}$$

şeklinde tanımlanan parabolik koordinat sistem ile değiştirilirse

$$\nabla^2 = \frac{4}{\xi+\eta} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial}{\partial \eta} \right) \right] + \frac{1}{\eta\xi} \left(\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \quad \text{II.10}$$

$$V(r) = \frac{2Z_1Z_2e^2}{\xi+\eta} \quad \text{II.11}$$

bulunur. II.9 denklemindeki eşitliklerin

$$x = \sqrt{\xi\eta}\cos\phi, \quad y = \sqrt{\xi\eta}\sin\phi \text{ ve } z = \frac{1}{2}(\xi - \eta) \quad \text{II.12}$$

şeklinde de yazılabileceğini hatırlatalım. Böylece II.7 denklemini parabolik koordinat sisteminde

$$\frac{4}{\xi+\eta} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial \psi}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial \psi}{\partial \eta} \right) \right] + \frac{1}{\eta\xi} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right) + \left(\frac{2\mu E}{\hbar^2} - \frac{2\mu Z_1Z_2e^2}{\hbar^2(\xi+\eta)} \right) \psi = 0 \quad \text{II.13}$$

yazılabilir. Bu denklemini

$$k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2} \quad \text{ve} \quad \gamma = \frac{\mu Z_1Z_2e^2}{k\hbar^2} \quad \text{II.14}$$

tanımlarıyla II.13 denklemini

$$\frac{4}{\xi+\eta} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial \psi}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial \psi}{\partial \eta} \right) \right] + \frac{1}{\eta\xi} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right) + \left(k^2 - \frac{2\gamma k}{\xi+\eta} \right) \psi = 0 \quad \text{II.15}$$

şeklini alır. II.15 denkleminin çözümünü

$$\psi(\vec{r}) = e^{ik\frac{(\eta-\xi)}{2}} g(\xi) \quad \text{II.16}$$

şeklinde arasak $g(\xi)$ fonksiyonu için

$$\xi \frac{d^2 g(\xi)}{d\xi^2} + (1 - ik\xi) \frac{dg(\xi)}{d\xi} - \gamma k g(\xi) = 0 \quad \text{II.17}$$

denklemini elde edebiliriz. Bu denklemin çözümü

$$g(\xi) = 1 + \frac{(-i\gamma)}{1} \frac{z}{1!} + \frac{-i\gamma(-i\gamma+1)}{1(1+1)} \frac{z^2}{2!} + \dots = {}_1F_1(-i\gamma; 1; ik\xi) \quad \text{II.18}$$

şeklinde bir confluent hypergeometric fonksiyondur [29] $z = (\eta - \xi)/2$ eşitliği ile II.16 denklemini

$$\psi(\vec{r}) = e^{ikz} g(\xi) \quad \text{II.19}$$

şeklinde z-doğrultusunda ilerleyen bir düzlem dalga ile saçılma sürecinin düzlem dalga üzerindeki etkisini yansıtan $g(\xi)$ fonksiyonun çarpımı şekline getirir. Bu denklemin asimptotik davranışı için

$$\psi(\vec{r}) \cong e^{ikz} F(-i\gamma; 1; ik\xi) \quad \text{II.20}$$

yazılabilir. Asimptotik davranış için daha somut bir ifadeyi

$${}_1F_1(a; c; z) \cong \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(c-a)} |z|^{-a} e^{ia\frac{\pi}{2}} + \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)} |z|^{a-c} e^z e^{i(a-c)\frac{\pi}{2}} \quad \text{II.21}$$

eşitliğini [29] kullanarak yazabiliriz. II.22 denklemi II.18 ve II.20 denklemleri göz önüne alınarak yazılırsa yeteri derecede büyük r değerleri için

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) &\cong e^{ikz} F(-i\gamma; 1; ik\xi) \\ &\rightarrow \frac{e^{\frac{\pi\gamma}{2}}}{\Gamma(1+i\gamma)} \left\{ e^{i(kz+\gamma \log k(r-z))} + \frac{\Gamma(1+i\gamma)}{i\Gamma(-i\gamma)} \frac{e^{-i\gamma \log \sin^2 \frac{\theta}{2}}}{2k \sin^2 \frac{\theta}{2}} \frac{e^{i(kr-\gamma \log 2kr)}}{r} \right\} \\ &\equiv \frac{e^{\frac{\pi\gamma}{2}}}{\Gamma(1+i\gamma)} \left[e^{i(kz+\gamma \log k(r-z))} + f(k, \theta) \frac{e^{i(kr-\gamma \log 2kr)}}{r} \right] \quad \text{II.22} \end{aligned}$$

bu denklem saçılan dalga fonksiyonunun asimptotik davranışını temsil etmektedir. Diğer bir değişle hal fonksiyonunun saçılma merkezinden yeteri derecede uzak mesafelerde alacağı şekli temsil etmektedir. Bu sonuç Coulomb potansiyelinden saçılan bir düzlem dalganın asimptotik hali için

$$\psi(\vec{r}) \cong N(e^{ikz} + f(k, \theta) \frac{e^{ikr}}{r}) \quad \text{II.23}$$

şeklinde basit bir ifade oluşturulamayacağını da açıkça göstermektedir. Bunun nedeni Coulomb potansiyelinin uzak mesafelerde de etkisini göstererek saçılıp uzaklaşan parçacığın gerçek serbest bir parçacık gibi davranmasına engel olmasıdır. II.22 denkleminde bakıldığında Coulomb etkisinin uzak mesafelerde gelen ve saçılan hal fonksiyonlarının faz açılarını etkilediği görülmektedir. Bu faz açılarının II.22 denkleminde r 'nin logaritmik fonksiyonu olduğu görülmektedir. r değişimi logaritmik olarak faz açısına yansıtacağı için faz açısının değişimi çok yavaş olacaktır. Dolayısıyla diferansiyel tesir kesitini

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(k, \theta)|^2 \quad \text{II.24}$$

formülünü kullanarak oluşturabiliriz. Burada $f(k, \theta)$ saçılma genliği için

$$\Gamma(-i\gamma) = \frac{\Gamma(1-i\gamma)}{-i\gamma} \quad \text{II.25}$$

eşitliğini kullanarak

$$\begin{aligned} f(k, \theta) &= -\gamma \frac{\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(1-i\gamma)} \frac{e^{-i\gamma \log \sin^2 \frac{\theta}{2}}}{2k \sin^2 \frac{\theta}{2}} \\ &= -\frac{\gamma}{2k \sin^2 \frac{\theta}{2}} e^{i(\eta_0 - \gamma \log \sin^2 \frac{\theta}{2})} \end{aligned} \quad \text{II.26}$$

ifadesinin yazabiliriz. Bu ifade yazılırken

$$e^{2i\eta_0} = \frac{\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(1-i\gamma)} \quad \text{II.27}$$

eşitliği kullanıldı. Burada

$$\eta_0 = \arg \Gamma(1 + i\gamma) \quad \text{II.28}$$

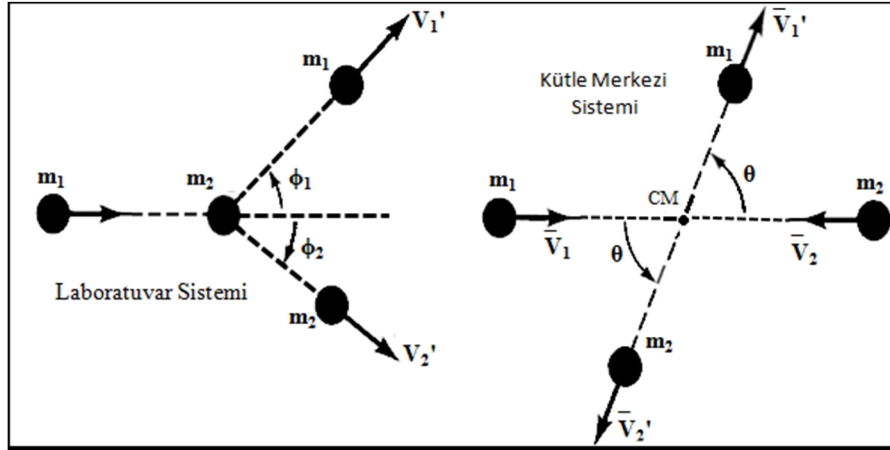
olduğunu hatırlatalım.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\gamma^2}{4k^2 \sin^4 \frac{\theta}{2}}$$

II.29

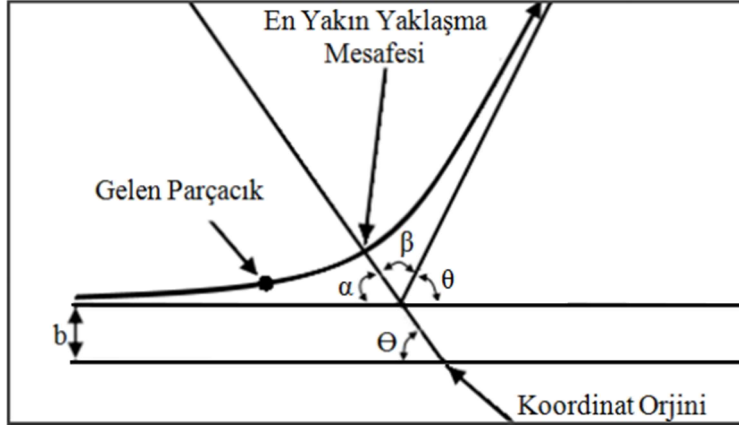
II.7 denklemi m_1 kütlesi Z_1e yüküne sahip bir parçacık ile m_2 kütlesi ve Z_2e yüküne sahip başka bir parçacık arasındaki çarpışma problemini ağırlık merkezi koordinat sisteminde tanımlayan bir denklemdir. $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ ve r 'ninde ağırlık merkezi koordinat sisteminde iki parçacık arasındaki mesafe olduğunu hatırlatalım.

Şekil II.1 iki parçacık arasındaki saçılma sürecinin laboratuvar ve ağırlık merkezi koordinat sistemlerinden görünüşünü resmetmektedir.



Şekil II. 1. Ağırlık merkezi koordinat sistemi ile laboratuvar koordinat sisteminin karşılaştırılması.

Şekil II. 2. iki parçacık saçılma probleminin, μ etkin kütleli tek bir parçacığın, ağırlık merkezi koordinat sisteminde, r parçacıklar arasındaki mesafe olmak üzere, $V(r)$ potansiyelinden saçılma problemine dönüşümünü resmetmektedir. II.7 denklemi şekil II. 2. 'deki saçılma sürecinin matematik modelidir.



Şekil II. 2. Etkin μ kütleli parçacığın $V(r)$ potansiyelinden saçılması

II.29 sonucunu laboratuvar koordinat sistemine transfer ederek diferansiyel tesir kesitini şekil II.1.'de saçılma süreci için oluşturabiliriz. Eğer saçılma sürecinin gelen elektronla hedef elektron arasında olduğu kabul edilirse $m_1 = m_2$ olacağından $\phi_1 = \frac{\theta}{2}$ olduğu gösterilebilir. Diğer taraftan koordinat değişiminin tesir kesiti alanını değiştirmeyeceğinden

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_L = \frac{d\Omega_{CM}}{d\Omega_L} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{CM} = \frac{\sin\theta d\theta}{\sin\phi_1 d\phi_1} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{CM} \quad \text{II.30}$$

yazılabilir. $\phi_1 = \frac{\theta}{2}$ olduğu göz önüne alınırsa

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_L = 4\cos\phi_1 \left(\frac{d\sigma(\theta=2\phi_1)}{d\Omega}\right)_{CM} \quad \text{II.31}$$

bulunur. Bu sonuç, v elektronlar arasındaki göreceli hız'ın büyüklüğü ve m de elektronun sükûnet kütlesi olmak üzere

$$k = \frac{mv}{\hbar} \quad \text{ve} \quad \gamma = \frac{\mu e^2}{k\hbar^2} = \frac{\alpha}{k} \quad \text{II.32}$$

tanımlarıyla II.29 denkleminde taşınırsa

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_L = \left(\frac{\alpha}{mv^2}\right)^2 \frac{\cos\phi_1}{\sin^4\phi_1} \quad \text{II.33}$$

bulunur. II.32 denklemindeki α sabitinin Bohr yarıçapının tersi olduğuna dikkat edelim. İnce yapı sabitidir. Bu sonuç $T = \frac{1}{2}mv^2$ tanımıyla

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_L = \left(\frac{2\alpha}{T}\right)^2 \frac{\cos\phi_1}{\sin^4\phi_1} \quad \text{II.34}$$

şeklinde de yazılabilir. Diğer taraftan, bir parçacık T kinetik enerjisiyle hareketsiz ancak kendisiyle eşit başka bir parçacığa çarparsa, laboratuvar koordinat sisteminde, çarpışmadan sonraki enerjisinin

$$W = T \sin^2\phi_1 \quad \text{II.35}$$

şeklinde yazılacağı bilinen bir husustur. Çarpışma esnasında başlangıçta hareketsiz bulunan parçacığın kazanacağı enerjinin de

$$T - W = T \cos^2\phi_1 \quad \text{II.36}$$

şeklinde yazılacağı kolaylıkla gösterilebilir. II.35 denkleminde

$$dW = 2T \sin\phi_1 \cos\phi_1 d\phi_1 \quad \text{II.37}$$

yazılabilir.

$$\cos\phi_1 d\Omega_L = 2\pi \cos\phi_1 \sin\phi_1 d\phi_1 \quad \text{II.38}$$

katı açısı II.37 denklemiyle

$$d\Omega_L = \frac{\pi}{T} dW \quad \text{II.39}$$

şekline getirilebilir. II.39 sonucu II.34 denkleminde taşınırsa saçılan elektron

$$\left(\frac{d\sigma}{dW}\right)_L = \frac{\pi}{T} \left(\frac{2\alpha}{T}\right)^2 \frac{T^2}{W^2} = \frac{4\pi\alpha^2}{T} \frac{1}{W^2} \quad \text{II.40}$$

sonucu bulunur. Bu sonuç atom birim sisteminde

$$\frac{d\sigma(W,T)}{dW} = \frac{4\pi\alpha^2}{T} \frac{1}{W^2} \quad \text{II.41}$$

şeklinde de yazılabilir. Ancak bu sonuç $W = 0$ için halinde ıraksayan bir sonuçtur. Eğer hedef atomdaki elektronun bağlanma enerjisini göz önüne alınır ve hedef elektrona aktarılan enerji için

$$E = W + B \quad \text{II.42}$$

yazılarak II.40 ifadesinde W yerine kullanılırsa bu tekillik ortadan kaldırılmış olur. Eğer hedef atomda elektronun koparıldığı kabuktaki elektron sayısı N ile gösterilirse diferansiyel tesir kesiti için

$$\frac{d\sigma(W,T)}{dW} = \frac{d\sigma}{dE} = \frac{4\pi\alpha^2 N}{T} \frac{1}{E^2} \quad \text{II.43}$$

nihai ifadeyi yazabiliriz. Bu sonuç diferansiyel tesir kesitini, gelen ve hedef atomdan koparılacak iyonlaştırılan elektronların enerjilerine parametrik olarak bağlı hale getirmektedir. Bu bağıllık tezimizde Los Alamos ionization code (GIPPER)'ı kullanarak yapmış olduğumuz hesaplamalar için II.43 sonucu kritik önem taşımaktadır. Sonlu sayıda enerji için kuantum temelli tesir kesitleri II.43 ifadesindeki parametrik bağımlılık geliştirilerek tesir kesiti için analitik ifadelerin oluşturulmasında farklı yöntemlerin ortaya çıkmasına neden olmuştur. Tezimizde bu tür analitik ifadeler ikili çarpışmalı iyonlaşma, hidrojenik ölçeklendirilmiş iyonlaşma ve çarpıtılmış dalga yöntemleri başlıkları altında verilmiştir.

II. 2. ÇOK ELEKTRONLU SİSTEMLERİN KUANTUM MEKANİĞİ

II. 2. 1. Çok Elektronlu Sistemler ve Merkezi Alan Yaklaşımı

N elektronlu bir atomun hal fonksiyonu için bulunduğu kuantum halinin spin ve açısal momentumundan kaynaklanan terim veya seviye simetrisine bağlı olarak bir veya daha fazla sayıda Slater determinantının antisimetrik lineer karışımı şeklinde ifade edilebilir [30,31]. Slater determinantlarının elemanları atomik elektronlara ait spin orbitalleridir. N elektronlu kapalı kabuklu bir atomun elektronlarına ait spin orbitalleri $u_\alpha(q_1), u_\beta(q_1) \dots, u_\nu(q_N)$ şeklinde temsil edilirse, bu atomun taban seviyesine ait kuantum hal fonksiyonun

$$\psi(q_1, q_2, \dots, q_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} u_\alpha(q_1) & u_\beta(q_1) \dots & u_\nu(q_1) \\ u_\alpha(q_2) & u_\beta(q_2) \dots & u_\nu(q_2) \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ u_\alpha(q_N) & u_\beta(q_N) \dots & u_\nu(q_N) \end{vmatrix} \quad \text{II.44}$$

şeklinde yazılabilir. Burada $q_1, q_2, \dots, q_N$ elektronların uzay ve spin koordinatlarını ve $\alpha, \beta, \dots, \nu$ indeksleri elektron spin orbitallerinin (n, l, m_l, m_s) şeklinde ifade edilen kuantum sayılarını temsil etmek üzere kullanılmışlardır. Elektron spin orbitallerinin

$$\langle u_\mu | u_\lambda \rangle = \int u_\mu^*(q) u_\lambda(q) dq = \delta_{\lambda\mu} \quad \text{II.45}$$

şeklinde ifade edilen diklik ve normalizasyon bağıntısını sağladıklarını da belirtmeliyiz. N elektronlu bir atomun rölativistik olmayan Hamiltoniyen'i

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\nabla_i^2}{2} - \frac{Z}{r_i} \right) + \sum_{i < j=1}^N \frac{1}{r_{ij}} = \sum_{i=1}^N \hat{f}_i + \sum_{i > j=1}^N \hat{g}_{ij} \quad \text{II. 46}$$

şeklinde yazılabilir. Bu Hamiltonyen'in ilk toplamı tek elektron, ikinci toplamı da iki elektron işlemcisidir. Atomun taban seviyesine ait enerjiyi bulmak için $\hat{H}$ işlemcisinin II.44 ile verilen Slater determinatına göre beklenen değerini alalım. II.44 denklemiyle verilen Slater determinantında köşegen elemanı olarak gözüken elektron spin orbitallerinin çarpımını $\psi_H = u_\alpha(q_1) u_\beta(q_2) \dots u_\nu(q_N)$ şeklinde temsil edersek II.46 Hamiltoniyen'inde, atomun elektronlarının kinetik enerjilerini ve çekirdekle olan Coulomb etkileşmelerini temsil eden tek elektron işlemcisinin beklenen değeri için aşağıdaki sonucu kolayca bulabiliriz.

$$\left\langle \psi \left| \sum_{i=1}^N \hat{f}_i \right| \psi \right\rangle = \sum_{i=1}^N \langle \psi_H | \hat{f}_i | \psi_H \rangle = \sum_{\lambda} \langle u_\lambda(q_i) | \hat{f}_i | u_\lambda(q_i) \rangle \quad \text{II. 47}$$

II.46 Hamiltoniyen'indeki iki elektron işlemcisi atomun elektronları arasındaki Coulomb etkileşmelerini temsil eden bir işlemcidir. Bu iki elektron işlemcisinin II.44 Slater determinantına göre beklenen değerinin

$$\begin{aligned} \langle \Psi | g_{ij} | \Psi \rangle = & \frac{1}{2} \sum_{\lambda} \sum_{\mu} \left\langle u_{\lambda}(q_i) u_{\mu}(q_j) \left| \frac{1}{r_{ij}} \right| u_{\lambda}(q_i) u_{\mu}(q_j) \right\rangle \\ & - \left\langle u_{\lambda}(q_i) u_{\mu}(q_j) \left| \frac{1}{r_{ij}} \right| u_{\mu}(q_i) u_{\lambda}(q_j) \right\rangle \end{aligned} \quad \text{II.48}$$

şeklinde yazılabileceği gösterilebilir [30, 31].

$$I_{\lambda} = \langle u_{\lambda}(q_i) | \hat{f}_i | u_{\lambda}(q_i) \rangle \quad \text{II.49}$$

$$J_{\lambda\mu} = \langle u_{\lambda}(q_i) u_{\mu}(q_j) | g_{ij} | u_{\lambda}(q_i) u_{\mu}(q_j) \rangle \quad \text{II.50}$$

$$K_{\lambda\mu} = \langle u_{\lambda}(q_i) u_{\mu}(q_j) | g_{ij} | u_{\mu}(q_i) u_{\lambda}(q_j) \rangle \quad \text{II.51}$$

tanımlarıyla F Hamiltoniyeinin beklenen değeri için

$$E = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \sum_{\lambda} I_{\lambda} + \frac{1}{2} \sum_{\lambda} \sum_{\mu} [J_{\lambda\mu} - K_{\lambda\mu}] \quad \text{II.52}$$

$J_{\lambda\mu}$ integralinde g_{ij} için verilen beklenen değerin sağ ve sol tarafında aynı kuantum sayılı spin orbitallerinin uzay ve spin koordinatları aynı iken, $K_{\lambda\mu}$ integralinde g_{ij} için verilen beklenen değerin sağ ve sol tarafında aynı kuantum sayılı spin orbitallerinin koordinatlarının farklı olduğu görülmektedir. Diğer bir deyişle $K_{\lambda\mu}$ integralinde beklenen değerin sağ ve sol tarafındaki spin orbitalleri koordinatlarını değiştirmiştir. Bu nedenlerden dolayı $J_{\lambda\mu}$ integraline doğrudan Coulomb etkileşmesi ve $K_{\lambda\mu}$ integralinde deşik tokuş Coulomb etkileşmesi adı verilmektedir. Tek elektronlu atom ve iyonlar hariç, rölativistik olmayan kuantum mekaniği çerçevesinde bile, elektron spin orbitali için analitik çözümler üretmek mümkün değildir. Merkezi alan yaklaşımında elektron spin orbitallerinin radyal, açısal ve spin bağımlı kısımları birbirinden ayrılmaktadır [32,33].

Bu yaklaşım çerçevesinde spin orbitallerinin genel yapısı için

$$u_{\lambda}(q_i) = R_{nl}^{\lambda}(r_i) Y_{lm_l}^{\lambda}(\theta_i \phi_i) \chi_i^{\lambda}(m_s) \quad \text{II.53}$$

ifadesi yazılabilir. II.53 ifadesinde tek bilinmeyen $R_{nl}^\lambda(r_i)$ şeklinde temsil edilen radyal orbitallerdir. Radyal orbitaller o şekilde hesaplanmalıdır ki bu radyal orbitallerine göre II.52 ile verilen enerjinin beklenen değeri hesaplandığında oluşabilecek en düşük değer oluşsun. II.52 denklemindeki enerji ifadesinin, radyal orbitallerde oluşabilecek küçük değişimler altında kararlı olması istenerek uygulanacak varyasyon hesabından elde edilecek denklemler istenilen radyal orbitalleri vermektedir. Bu denklemler Hartree-Fock denklemleri olarak bilinir [30,31]. Hartree-Fock denklemleri elde edilirken radyal orbitallerin normalizasyon ve diklik koşulları uygun Lagrange çarpanları vasıtasıyla hesaplara yansıtılmaktadır.

II. 1. 2. Konfigürasyon Ortalamalı Enerji İfadeleri

N elektronlu ve Z protunlu bir atomun konfigürasyon ortalamalı enerji değerlerini elde etmek için yaygın şekilde iki farklı yöntem kullanılmaktadır. Birinci yöntem N elektronlu ve Z protunlu atomun elektron konfigürasyonuna ait terimler için bulunacak enerjiler üzerinden atomun toplam enerjisi için ortalama değer oluşturmak şeklinde özetlenebilir. İkinci yöntemde toplam enerjinin konfigürasyon ortalamalı değerini elde etmek için tamamen bireysel elektronların spin orbitalleri ve bu spin orbitallerine ait kuantum sayıları kullanılmaktadır. Biz tezimizde konfigürasyon ortalamalı enerjilerin hesabı için 2. metodu detaylandırdık. Formülasyonda basitlik sağlamak için $u_\lambda(q_i) = R_{nl}^\lambda(r_i)Y_{lm_l}^\lambda(\theta_i \phi_i)\chi_i^\lambda(m_s)$ şeklindeki elektron spin orbitalleri aşağıda $|i\rangle = |n_i l_i m_{l_i} m_{s_i}\rangle$ notasyonu ile temsil edilmiştir. II.52 denklemindeki doğrudan veya değiş tokuşlu Coulomb etkileşmelerine ait beklenen değerler etkileşen elektronların aynı veya farklı kabuklarda olup olmadıkları dikkate alınarak iki farklı gruba ayrılarak toplam enerjiye dâhil edilmişlerdir. Bu tanımlarla II.52 denkleminde verilen toplam enerji için aşağıdaki genel ifadeyi yazabiliriz[19].

$$E_{ort} = \sum_{i=1}^N \langle i|f|i \rangle_{ort} + \sum_{\substack{i < j \\ \text{eşdeğer} \\ \text{olmayan} \\ \text{elektron} \\ \text{çiftleri}}} \{ \langle ij|g|ij \rangle_{ort} - \langle ij|g|ji \rangle_{ort} \} + \sum_{\substack{i,j \\ \text{eşdeğer} \\ \text{elektron} \\ \text{çiftleri}}} \{ \langle ij|g|ij \rangle_{ort} - \langle ij|g|ji \rangle_{ort} \}$$

II.54

şeklinde yazabiliriz. Bu ifadedeki ilk terim atomdaki elektronların kinetik enerjileri ve çekirdekdeki protonlarla etkileşmesini temsil eden tek elektron işlemcisinin elektron-

spin orbitallerine göre beklenen değerini temsil etmektedir. 2. terim ise elektronlar arsındaki Coulomb etkileşmelerini atomun farklı kabuklarındaki elektron-spin orbitallerine göre beklenen değerlerini temsil etmektedir. 3. terim ise elektronlar arasındaki Coulomb etkileşmelerini atomun eşdeğer elektronlarının spin orbitallerine göre beklenen değerlerini temsil etmektedir. II.54 ifadesinin konfigrasyon ortalama değerini oluşturmak için kuplaşsız temsil kullanılabilir.

$$\langle i|f|i\rangle_{ort} = \sum_{m_{s_i} m_{l_i}} \frac{\langle n_i l_i m_{l_i} m_{s_i} | f | n_i l_i m_{l_i} m_{s_i} \rangle}{(2l_i + 1)(2s_i + 1)} = I(n_i l_i) \quad \text{II. 55}$$

Bu ifade kuplaşsız tek elektron-spin orbitallerine göre tek elektron işlemcisinin ortalama değerini oluşturur. Benzer şekilde

$$\langle ij|g|ij\rangle_{ort} = \sum_{m_{l_i} m_{l_j}} \sum_{m_{s_i} m_{s_j}} \frac{\langle n_i l_i m_{l_i} m_{s_i} n_j l_j m_{l_j} m_{s_j} | g | n_i l_i m_{l_i} m_{s_i} n_j l_j m_{l_j} m_{s_j} \rangle_{ort}}{(2l_i + 1)(2l_j + 1)(2s_i + 1)(2s_j + 1)}, n_i l_i \neq n_j l_j \quad \text{II.56}$$

$$\begin{aligned} \langle ij|g|ij\rangle_{ortij} &= \sum_{m_{l_i} m_{l_j}} \sum_{m_{s_i} m_{s_j}} \langle n_i l_i m_{l_i} m_{s_i} n_j l_j m_{l_j} m_{s_j} | g | n_i l_i m_{l_i} m_{s_i} n_j l_j m_{l_j} m_{s_j} \rangle \\ &= \sum_{m_{l_i} m_{s_i}} \langle ij|g|ij\rangle_{orti} \end{aligned} \quad \text{II. 57}$$

tanımını yapalım. II.57 denklemindeki beklenen değer hesabı için Coulomb etkileşme işlemcisini

$$g_{12} = \frac{1}{r_{12}} = \sum_k \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} \frac{4\pi}{2k + 1} \sum_q Y_q^k(\theta_1, \phi_1) Y_q^{k*}(\theta_2, \phi_2) \quad \text{II. 58}$$

şeklinde küresel harmonikler cinsinden ifade edelim. İşlemleri basitleştirmek için önce

$$C_q^k = \sqrt{\frac{4\pi}{2k + 1}} Y_q^k(\theta, \phi) \quad \text{II. 59}$$

şeklinde tanımlanan tensör işlemcisinin beklenen değerini yazalım [19,31,32].

$$\begin{aligned}
C_q^k(lm, l'm') &= \langle lm | C_q^k | l'm' \rangle = \sqrt{\frac{4\pi}{2k+1}} \int Y_m^l(\Omega) Y_q^k(\Omega) Y_m^{l'}(\Omega) \\
&= (-1)^m [(2l+1)(2l'+1)]^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} l & k & l' \\ -m & q & m' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & k & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{II. 60}
\end{aligned}$$

II.58, II.59 ve II.60 eşitliklerinden yararlanılırsa

$$\begin{aligned}
\langle ij | g | ij \rangle_{orti} &= \sum_{k=0}^{\infty} F^k(i, j) C^k(l_i m_{l_i}, l_i m_{l_i}) \sum_{m_{l_j} m_{s_j}} C^k(l_j m_{l_j}, l_j m_{l_j}) \\
&= \sum_{k=0}^{\infty} F^k(i, j) C^k(i, i) \sum_{m_{l_j} m_{s_j}} (-1)^{-m_{l_j}} (2l_j + 1) \begin{pmatrix} l_j & k & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_j & k & l_j \\ -m_{l_j} & 0 & m_{l_j} \end{pmatrix} \quad \text{II. 61}
\end{aligned}$$

ifadesini yazabiliriz. Bu ifadede m_{s_j} üzerinden toplam yalnız 2 çarpanını getireceğinden bu ifade

$$\begin{aligned}
\langle ij | g | ij \rangle_{orti} &= \sum_{k=0}^{\infty} F^k(i, j) C^k(i, i) 2(2l_j + 1) (-1)^{-l_j} \\
&\quad X \begin{pmatrix} l_j & k & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \sum_{m_{l_j}} (-1)^{l_j - m_{l_j}} \begin{pmatrix} l_j & l_j & k \\ m_{l_j} & -m_{l_j} & 0 \end{pmatrix} \quad \text{II. 62}
\end{aligned}$$

şeklinde yazılabilir. $3j$ -sembollerine ait

$$\sum_m (-1)^{j-m} \begin{pmatrix} j & j & J \\ m & -m & 0 \end{pmatrix} = \sqrt{2j+1} \delta_{j0}$$

özelliklerinden yararlanarak

$$\langle ij | g | ij \rangle_{orti} = \sum_{k=0}^{\infty} F^k(i, j) C^k(i, i) 2(2l_i + 1) (-1)^{-l_j} \begin{pmatrix} l_j & k & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \delta_{k0} \sqrt{2l_i + 1}$$

$$= F^0(i, j) C^0(i, i) 2(2l_i + 1)^{3/2} (-1)^{-l_j} \begin{pmatrix} l_j & k & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{II.63}$$

yazılabilir. Yine $3j$ sembolünün bir başka özelliği

$$\begin{pmatrix} j & 0 & j \\ -m & 0 & m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j & j & 0 \\ m & -m & 0 \end{pmatrix} = (-1)^{j-m} \frac{1}{\sqrt{2j+1}}$$

kullanılırsa $\langle ij|g|ij \rangle$ ortalama değeri için

$$\langle ij|g|ij \rangle_{orti} = F^0(i, j) C^0(i, i) 2(2l_j + 1)^{3/2} (2l_j + 1)^{-1/2} = F^0(i, j) 2(2l_j + 1) \quad \text{II.64}$$

sonucu elde edilir. Bu sonuç II.57 ifadesinde yerine konursa

$$\begin{aligned} \langle ij|g|ij \rangle_{ortij} &= \sum_{m_i, m_j} \langle ij|g|ij \rangle_{orti} = \sum_{m_i, m_{s_i}} F^0(i, j) 2(2l_j + 1) \\ &= 2(2l_i + 1) F^0(i, j) 2(2l_j + 1) \end{aligned} \quad \text{II.65}$$

sonucu bulunur. Bu sonuç II.56 ifadesinden, $s_i = 1/2$ ve $s_j = 1/2$ alınarak yerine konursa

$$\langle ij|g|ij \rangle_{ort} = F^0(i, j), \quad n_i l_i \neq n_j l_j \quad \text{II.66}$$

sonucu bulunur.

Şimdi elektron-elektron Coulomb etkileşmesinin değiş-tokuş(exchange) kısmının ortalama değerini bulalım. Bunun için önce

$$\langle ij|g|ij \rangle_{ort} = \sum_{m_i, m_{s_i}}^N \sum_{m_j, m_{s_j}} \frac{\langle n_i l_i m_i m_{s_i} n_j l_j m_j m_{s_j} | g | n_j l_j m_j m_{s_j} n_i l_i m_i m_{s_i} \rangle_{ort}}{(2l_i + 1)(2s_i + 1)(2l_j + 1)(2s_j + 1)}, \quad \text{II.67}$$

$n_i l_i \neq n_j l_j$ için ifadesini yazalım ve

$$\langle ij|g|ij \rangle_{ortij} = \sum_{m_i, m_{l_j}} \sum_{m_{s_i}, m_{s_j}} \langle n_i l_i m_i m_{s_i} n_j l_j m_j m_{s_j} | g | n_j l_j m_j m_{s_j} n_i l_i m_i m_{s_i} \rangle$$

$$= \sum_{m_{l_i} m_{s_i}} \langle ij|g|ji \rangle_{orti} \quad \text{II. 68}$$

tanımını yapalım.

II.58, II.59 ve II.60 eşitlikleri göz önüne alınır ve değiş tokuş etkileşmelerinin spin kuantum sayıları aynı olan elektronla arasında olacağı hatırlanırsa

$$\langle ij|g|ji \rangle_{orti} = \sum_{k=0}^{\infty} G^k(i, j) \sum_{m_{l_j} m_{s_j}} \delta_{m_{s_i}, m_{s_j}} C^k(l_i m_{l_i}, l_j m_{l_j}) C^k(l_i m_{l_i}, l_j m_{l_j})$$

eşitliği kolayca yazılabilir. Bu ifade

$$\langle ij|g|ji \rangle_{orti} = \sum_{k=0}^{\infty} G^k(i, j) \sum_{m_{l_j} m_{s_j}} \delta_{m_{s_i}, m_{s_j}} [C^k(i, j)]^2$$

şeklinde daha basit bir halde getirilebilir. Bu son ifadede II.60 denklemi kullanılırsa

$$= \sum_{k=0}^{\infty} G^k(i, j) \sum_{m_{l_j} m_{s_j}} \delta_{m_{s_i}, m_{s_j}} (2l_i + 1)(2l_j + 1) \begin{pmatrix} l_i & k & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2.$$

$$\begin{pmatrix} l_i & k & l_j \\ -m_{l_i} & m_{l_i} - m_{l_j} & m_{l_j} \end{pmatrix}^2$$

Bu sonuç

$$\sum_{m_{l_j}} (2l_i + 1) \begin{pmatrix} l_i & k & l_j \\ -m_{l_i} & m_{l_i} - m_{l_j} & m_{l_j} \end{pmatrix}^2 = 1$$

özellliği kullanılarak basitleştirilebilir [31,32].

$$\langle ij|g|ji \rangle_{orti} = \sum_{k=0}^{\infty} G^k(i, j) \sum_{m_{s_j}} \delta_{m_{s_i}, m_{s_j}} (2l_j + 1) \begin{pmatrix} l_i & k & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2$$

$$= \sum_{k=0}^{\infty} G^k(i, j) (2l_j + 1) \begin{pmatrix} l_i & k & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2$$

Bu sonucu II.68 ifadesinde yerine koyarsak

$$\begin{aligned} \langle ij|g|ij \rangle_{ortij} &= \sum_{m_{l_i} m_{s_i}} \langle ij|g|ji \rangle_{orti} = \sum_{m_{l_i} m_{s_i}} \sum_{k=0}^{\infty} G^k(i, j) (2l_j + 1) \begin{pmatrix} l_i & k & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2_{orti} \\ \langle ij|g|ij \rangle_{ortij} &= \sum_{k=0}^{\infty} G^k(i, j) (2l_i + 1)(2l_j + 1) 2 \begin{pmatrix} l_i & k & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \end{aligned} \quad \text{II. 69}$$

$$\langle ij|g|ji \rangle_{ort} = \frac{\langle ij|g|ji \rangle_{ortij}}{(2l_i + 1)(2s_i + 1)(2l_j + 1)(2s_j + 1)} = \frac{\langle ij|g|ji \rangle_{ortij}}{(2l_i + 1)2(2l_j + 1)2} \quad \text{II. 70}$$

sonucu elde edilir. Bu ifade II.70 denkleminde yerine konulursa değiş-tokuş etkileşmesinin ortalama değeri için

$$\langle ij|g|ji \rangle_{ort} = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{\infty} \begin{pmatrix} l_i & k & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 G^k(i, j)$$

nihai sonucu bulunur. Böylece farklı atomik kabuklara ait elektronlardan oluşan elektron çiftleri arasındaki ortalama Coulomb etkileşmesi için

$$\langle ij|g|ji \rangle_{ort} = F^0(i, j) - \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{\infty} \begin{pmatrix} l_i & k & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 G^k(i, j) \quad \text{II. 71}$$

sonucunu buluruz. Şimdi aynı kabukta bulunan eşdeğer elektron çiftleri arasındaki ortalama Coulomb etkileşmesini bulalım. II.71 sonucundan hareketle aynı kabuktaki elektronlar arasındaki Coulomb etkileşmesinin konfigürasyon ortalamalı değeri de aşağıdaki şekilde bulunabilir.

$$\langle ij|g|ij \rangle_{ort} = F^0(i, i) - \frac{2l_i + 1}{4l_i + 1} \sum_{k>0} \begin{pmatrix} l_i & k & l_i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 F^k(i, i), n_i l_i = n_j l_j \quad \text{II. 72}$$

II.71 ve II.72 sonuçları kullanılarak N elektronlu bir atomun ortalama enerjisi için aşağıdaki sonucu yazabiliriz.

$$E_{ort} = \sum_{i=1}^N I(n_i l_i) + \sum_{\substack{(i,j) \\ \text{farklı} \\ \text{kabuklar} \\ \text{üzerinden}}} \left\{ F^0(n_i l_i, n_j l_j) - \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{\infty} \begin{pmatrix} l_i & k & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 G^k(n_i l_i, n_j l_j) \right\} \\ + \sum_{\substack{(i,j) \\ \text{aynı} \\ \text{kabuklar} \\ \text{üzerinden}}} \left\{ F^0(n_i l_i, n_i l_i) - \frac{2l_i + 1}{4l_i + 1} \sum_{k>0} \begin{pmatrix} l_i & k & l_i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 F^k(n_i l_i, n_i l_i) \right\}$$

II.73

Bu ifadenin ilk terimini daha açık bir şekilde yazalım.

$$I(n_i l_i) = \left\langle n_i l_i m_{l_i} m_{s_i} \left| -\frac{1}{2} \nabla^2 - \frac{Z}{r_i} \right| n_i l_i m_{l_i} m_{s_i} \right\rangle$$

II.74

Eğer elektron-spin orbitallerinin açısal ve radyal kısımları

$$|n_i l_i m_{l_i} m_{s_i}\rangle = R_{n_i l_i}(r_{ij}) Y_{l_i}^{m_{l_i}}(\theta_i \phi_i) \chi_{s_i}(m_{s_i})$$

$$= \frac{P_{n_i l_i}(r_i)}{r_i} |n_i l_i m_{l_i} m_{s_i}\rangle$$

şeklinde birer çarpan olarak yazılabilirse $I(n_i l_i)$ için

$$I(n_i l_i) = \int_0^{\infty} P_{n_i l_i}(r) \left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{Z}{r} \right) P_{n_i l_i}(r) dr$$

II. 75

integralini oluşturabiliriz. Diğer terimler benzer şekilde yazılabilir.

II. 3. ÇOK ELEKTRONLU SİSTEMLERDE KONFIGÜRASYON ORTALAMALI İYONLAŞMA ENERJİSİ

Atomun ortalama iyonlaşma enerjisini bulmak için hem atomun kendisi için hem de iyonlaşmış hali için II.73 denklemini kullanılarak toplam ortalama enerji bulunur. Bu iki enerji arasındaki fark oluşturulur. Bu fark atomun konfigürasyon ortalama iyonlaşma enerjisi olarak bilinir. Atomun iyonik halinin ortalama enerjisi için II-73 ifadesinde N yerine $N - 1$ almak yeterlidir. Böylece ortalama iyonlaşma enerjisi için aşağıda detaylandırıldığı gibi analitik bir ifade elde edilebilir.

$$E_{ort}^{iyon} = \sum_{i=1}^{N-1} I(n_i l_i) + \sum_{\substack{(i,j) \\ \text{farklı} \\ \text{kabuklar} \\ \text{üzerinden}}} \left\{ F^0((n_i l_i, n_j l_j)) - \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{\infty} \begin{pmatrix} l_i & k & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 G^k((n_i l_i, n_j l_j)) \right\} \\ + \sum_{\substack{(i,j) \\ \text{aynı} \\ \text{kabuklar} \\ \text{üzerinden}}} \left\{ F^0((n_i l_i, n_i l_i)) - \frac{2l_i + 1}{4l_i + 1} \sum_{k>0} \begin{pmatrix} l_i & k & l_i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 F^k((n_i l_i, n_i l_i)) \right\}$$

II.76

$\Delta E_{ort} = E_{ort}^{iyon} - E_{ort}^{atom}$ farkı iyonlaşma enerjisini verir. Eğer atomdan bir elektronun kopması, geride kalan elektronların, kuantum sayılarında değişikliğe neden olmadığı ve radyal orbitallerde meydana getireceği değişikliklerinde ihmal edilir boyutlarda kaldığı kabul edilirse atomun ortalama iyonlaşma enerjisi için

$$\Delta E_{ort} = I(n_N l_N) - \sum_{j=1}^{N-1} \left\{ F^0((n_N l_N, n_j l_j)) - \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{\infty} \begin{pmatrix} l_N & k & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 G^k((n_N l_N, n_j l_j)) \right\} - \\ \sum_{j=1}^{N-1} \left\{ F^0((n_j l_j, n_j l_j)) - \frac{2l_N + 1}{4l_N + 1} \sum_{k>0} \begin{pmatrix} l_j & k & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 F^k((n_j l_j, n_j l_j)) \right\}$$

II.77

sonucu yazılabilir. Bu sonuç donmuş kor yaklaşımında (frozen core) tek elektron için konfigürasyon ortalamalı iyonlaşma enerjisidir. Bu enerjinin tek elektron bağlanma enerjisinin negatifi olduğu II.77 denkleminde açıkça görülmektedir.

II. 4. KONFIGÜRASYON ORTALAMALI OTO-İYONLAŞMA

Konfigürasyon ortalamalı oto-iyonlaşma oran katsayısını

$$(n_1 l_1)^{q_1} (n_2 l_2)^{q_2} (n_3 l_3)^{q_3} \rightarrow (n_1 l_1)^{q_1+1} (n_2 l_2)^{q_2-1} (n_3 l_3)^{q_3-1} + k_f l_f \quad \text{II.78}$$

şeklinde bir süreç için yazalım. II.78 sürecinin sağ ve sol tarafındaki konfigürasyonların istatistik ağırlık değerleri

$$W_{sağ} = \binom{4l_1 + 2}{q_1} \binom{4l_2 + 2}{q_2} \binom{4l_3 + 2}{q_3} \quad \text{II.79}$$

ve

$$W_{sol} = (q_1 + 1) \binom{4l_1 + 2}{q_1 + 1} q_2 \binom{4l_2 + 2}{q_2} q_3 \binom{4l_3 + 2}{q_3} \binom{4l_f + 2}{1} \quad \text{II.80}$$

şeklinde yazılabilir. II.78 ve II.79 istatistik ağırlık değerleri kullanılarak II.78 sürecine ait ortalama oto-iyonlaşma oran katsayısı kuplajsız temsilde

$$A_a = \frac{4}{k_f} \frac{W_{sol}}{W_{sağ}} |\langle n_1 l_1 k_f l_f | g | n_2 l_2 n_3 l_3 \rangle|_{ort}^2 \quad \text{II.81}$$

şeklinde yazılabilir. Ortalama oto-iyonlaşma oranı $LSJM_f$ şeklinde bir kuplaj sistemi kullanılarak da hesaplanabilir. Bu durumda önce sürecin ilk ve son kuantum hallerine ait enerji öz fonksiyonları $LSJM_f$ kuplajında $|\Psi_i\rangle = |\gamma_i S_i L_i J_i M_{J_i}\rangle$ ve $|\Psi_f\rangle = |\gamma_f S_f L_f J_f M_{J_f}\rangle$ şeklinde oluşturulur. Arkasından

$$A_a(i \rightarrow f) = \frac{4}{k_f} |\langle \Psi_f | g | \Psi_i \rangle|^2 = \frac{4}{k_f} \left| \left\langle \gamma_f S_f L_f J_f M_{J_f} \left| \sum_{i < j=1}^{N+1} g_{ij} \left| \gamma_i S_i L_i J_i M_{J_i} \right. \right. \right. \right|^2 \quad \text{II.82}$$

oto-iyonlaşma oranı $LSJM_J$ kuplajında oluşturulan bütün ilk ve son kuantum halleri arasında hesaplanır. Elde edilen sonuçlar toplanıp ilk kuantum hallerine ait $2J + 1$ değerlerinin toplamına bölünürse konfigürasyon ortalamalı oto-iyonlaşma oranı elde edilmiş olur. Konfigürasyon ortalamalı oto-iyonlaşma oranı için $LSJM_J$ da aşağıdaki ifade yazılabilir [7].

$$A_a = \frac{4}{k_f} \frac{\sum_{\gamma_f J_f M_f} \sum_{\gamma_i J_i M_i} \left| \langle \gamma_f S_f L_f J_f M_{J_f} | \sum_{i>j=1}^{N+1} g_{ij} | \gamma_i S_i L_i J_i M_{J_i} \rangle \right|^2}{\sum_{\gamma_i J_i} (2J_i + 1)} \quad \text{II.83}$$

Ancak biz burada kuplajsız temsilde oluşturulan ve II.81 denklemiyle verilen formülü kullanarak ortalama oto-iyonlaşma oran katsayısını oluşturacağız.

$$R^\kappa(n_1 k_f, n_2 n_3) = \int_0^\infty \int_0^\infty P_{n_1 l_1}(r) P_{k_f l_f}(r') \frac{r_{<}^\kappa}{r_{>^{\kappa+1}}} P_{n_2 l_2}(r) P_{n_3 l_3}(r') dr dr' \quad \text{II.84}$$

ve

$$\begin{aligned} M(n_1 k_f; n_2 n_3) &= \sum_K \begin{pmatrix} l_1 & \kappa & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \begin{pmatrix} l_3 & \kappa & l_f \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \frac{[R^\kappa](n_1 k_f; n_2 n_3)^2}{(2\lambda + 1)} \\ &+ \sum_{\lambda'} \begin{pmatrix} l_1 & \kappa' & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \begin{pmatrix} l_2 & \kappa' & l_f \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \frac{(R^\kappa(n_1 k_f, n_2 n_3))^2}{(2\lambda' + 1)} \\ &- \sum_{K, K'} (-1)^{\lambda + \lambda'} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & \kappa \\ l_f & l_3 & \kappa' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & \kappa & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_3 & \kappa' & l_f \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & \kappa' & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_2 & \kappa' & l_f \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad \text{II.85}$$

$$\begin{aligned} M(n_1 k_f; n_2 n_3) &= \sum_K \begin{pmatrix} l_1 & \kappa & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \begin{pmatrix} l_3 & \kappa & l_f \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \frac{(R^\kappa(n_1 k_f; n_2 n_3))^2}{(2K + 1)} \\ &+ \sum_{K'} \begin{pmatrix} l_1 & \kappa' & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \begin{pmatrix} l_2 & \kappa' & l_f \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \frac{(R^{\kappa'}(n_1 k_f, n_2 n_3))^2}{(2K' + 1)} \end{aligned}$$

$$-\sum_{\kappa, \kappa'} (-1)^{\lambda+\lambda'} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & \kappa \\ l_f & l_3 & \kappa' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & \kappa & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_3 & \kappa' & lf \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & \kappa' & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_2 & \kappa' & l_f \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^*$$

$$R^\kappa(n_1 k_f; n_2 n_3) R^{\kappa'}(n_1 k_f, n_2 n_3) \quad \text{II.86}$$

olmak üzere

$$\bar{A}_a = q_2 q_3 \frac{(4l_1+2-q_1)(4l_f+2)}{k_f} M(n_1 k_f; n_2 n_3) \quad \text{II.87}$$

yazılabilir [7]. 3j sembollerindeki κ ve κ' büyüklüklerinin $\Delta(l' L l)$ şeklinde temsil edilen üçgen kuralını sağladıklarını hatırlatalım.

II. 5. KONFIGÜRASYON ORTALAMALI ELEKTRON İYON BİRLEŞME TESİR KESİTİ

Konfigürasyon ortalamalı elektron-iyon birleşme tesir kesitini

$$(n_1 l_1)^{q_1+1} (n_2 l_2)^{q_2-1} (n_3 l_3)^{q_3-1} + k_i l_i \rightarrow (n_1 l_1)^{q_1} (n_2 l_2)^{q_2} (n_3 l_3)^{q_3} \quad \text{II.88}$$

süreci için ele alacağız. Burada $k_i l_i$ ile gelen elektron, $(n_1 l_1)^{q_1+1} (n_2 l_2)^{q_2-1} (n_3 l_3)^{q_3-1}$ ile de bu elektronun çarparak birleştiği iyonun ilk hali temsil edilmektedir. Bu süreçte gelen elektron $n_3 l_3$ kabuğuna yakalanırken $n_1 l_1$ kabuğundaki bir elektronu $n_2 l_2$ kabuğuna uyarmaktadır. II.88 sürecine II.78 oto-iyonlaşma sürecinin tersi bir süreç olarak bakılabileceği açıktır. Dolayısıyla detay balans prensibinden hareketle II.88 elektron-iyon birleşme sürecini karakterize eden konfigürasyon ortalamalı tesir kesiti

$$\bar{\sigma}_{birleş} = \frac{2\pi^2}{k_i^2 \Delta \varepsilon} \sum_{l_i} \frac{W_I}{2W_F} \bar{A}_a \quad \text{II.89}$$

şeklinde bulunabilir[19,7] . Burada W_F ve W_I sırasıyla II.88 sürecinin sağ ve sol tarafındaki kuantum hallerinin istatistik ağırlıklarıdır. Bu istatistik ağırlıklar aşağıda verilmiştir.

$$W_I = \begin{pmatrix} 4l_1 + 2 \\ q_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4l_2 + 2 \\ q_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4l_3 + 2 \\ q_3 \end{pmatrix} \quad \text{II.90}$$

ve

$$W_F = \binom{4l_1 + 2}{q_1 + 1} \binom{4l_2 + 2}{q_2 - 1} \binom{4l_3 + 2}{q_3 - 1} \quad \text{II.91}$$

Hesaplamalarda $\Delta\varepsilon$ enerji farkı o şekilde seçilmelidir ki, değeri iyonda oluşabilecek rezonansların en geniş olanının genişliğinden daha büyük olsun. II.90 ve II.91 ifadeleri II.89 denklemine taşınmışsa elektron-iyon birleşme sürecine ait tesir kesi için

$$\bar{\sigma}_{recomb} = \frac{2\pi^2}{k_i^3 \Delta\varepsilon} (q_1 + 1)(4l_3 + 3 - q_3)(4l_2 + 3 - q_2) \sum_{l_i} (2l_i + 1) M(n_2 n_3; n_1 l_i) \quad \text{II.92}$$

sonucu bulunur [7].

II.6 KONFIGÜRASYON ORTALAMALI UYARILMA TESİR KESİTİ

Elektron çarpmalı uyarılma tesir kesitini

$$(n_1 l_1)^{q_1+1} (n_2 l_2)^{q_2-1} k_i l_i \rightarrow (n_1 l_1)^{q_1} (n_2 l_2)^{q_2} k_f l_f \quad \text{II.93}$$

şeklinde bir süreci göz önüne alarak oluşturalım. Burada iyona çarpmak üzere gelen elektron $k_i l_i$ temsil edilmiştir. Bu elektron, süreç esnasından, enerjisinin bir kısmını $(n_1 l_1)^{q_1+1} (n_2 l_2)^{q_2-1}$ konfigürasyona sahip iyona aktararak $n_1 l_1$ kabuğundaki bir elektronun $n_2 l_2$ kabuğuna uyarılmasına neden olmuştur. Enerjisi azalarak saçılıp iyondan uzaklaşan elektron II.93 denkleminde $k_f l_f$ ile temsil edilmiştir. II.88 denkleminde $q_3 = 1$ alınırsa II.88 denklemi $k_i l_i$ ile temsil edilen gelen elektronun iyonla birleşerek $(n_1 l_1)^{q_1} (n_2 l_2)^{q_2} n_3 l_3$ şeklinde bir konfigürasyonun oluşacağı görülür. Eğer $n_3 l_3$ elektronu $k_f l_f$ elektronuyla yer değiştirirse II.93 denklemi elde edilmiş olur. II.92 ile verilen konfigürasyon ortalamalı tesir kesiti ifadesinde $q_3 = 1$ alınır ve $n_3 l_3 \rightarrow k_f l_f$ yer değiştirmesi yapılarak son elektron çarpmalı uyarılma tesir kesiti için

$$\bar{\sigma}_{uyarılmalı} = \frac{8\pi}{k_i^3 k_f} (q_1 + 1)(4l_2 + 3 - q_2) \sum_{l_i l_f} (2l_i + 1) (2l_f + 1) M(n_2 f; n_1 i) \quad \text{II.94}$$

sonucu bulunabilir. [7].

Konfigürasyon ortalamalı doğrudan iyonlaşma tesir kesitini

$$k_i l_i + (n_1 l_1)^{q_1+1} \rightarrow (n_1 l_1)^{q_1} + k_e l_e + k_f l_f \quad \text{II.95}$$

şeklinde bir süreç için ele alacağız. Burada $k_i l_i$ ile gelen elektron, $k_e l_e$ ile çarpma sonucu iyonun bağlı orbitallerinden birinde koparılarak iyonlaştırılan elektron ve $k_f l_f$ ile de gelen elektronun iyonla etkileşip saçıldıktan sonraki hali temsil edilmektedir. II.93 denkleminde $q_2 = 1$ ve $n_2 l_2$ yerinede $k_e l_e$ alınırsa konfigürasyon ortalama tesir kesiti formülünün II.94 sonucundan elde edilmesinin yolu açılmış olur. ρ_e iyondan koparılan elektron için hal yoğunluğu olmak üzere, enerji ayrışımı diferansiyel tesir kesiti için

$$\frac{d\bar{\sigma}_{ion}}{d\varepsilon} = \rho_e \sum_{l_e} \bar{\sigma}_{exc} \quad \text{II.96}$$

yazılabilir. Burada ρ_e durum yoğunluğunun serbest elektron radyal orbitallerinin normalizasyonuna bağlı olarak $2/(\pi k_e)$ şeklinde alınacağına ve $(4l_2 + 3 - q_2) = 2(2l_2 + 1)$ şeklinde yazılacağı görülürse II.96 ifadesi

$$\frac{d\bar{\sigma}_{ion}}{d\varepsilon} = \frac{32}{k_i^3 k_e k_f} (q_1 + 1) \sum_{l_i, l_f, l_e} (2l_i + 1)(2l_e + 1)(2l_f + 1) M(l_e l_f; n_1 l_i) \quad \text{II.97}$$

şeklini alır. Bu sonucun atomdan koparılarak iyonlaştırılan elektronun alabileceği enerji değerleri üzerinden

$$\bar{\sigma}_{ion} = \int_0^{E_{max}/2} \frac{d\bar{\sigma}_{ion}}{d\varepsilon} d\varepsilon \quad \text{II.98}$$

şeklinde alınacak entegralinden toplam konfigürasyon ortalama iyonlaşma tesir kesiti bulunur. Buradaki entegralin üst sınırı II.95 sürecinin son kuantum halinde bulunan serbest elektronların kinetik enerjilerinin toplamının yarısıdır. Diğer bir değişle $E_{max} = (k_e^2 + k_f^2)/2$ şeklinde tanımlanmıştır.

BÖLÜM III

SONUÇLAR VE DEĞERLENDİRMELER

III. 1. ENERJİ VE KONFIGÜRASYON ORTALAMALI TESİR KESİT HESAPLARI

Mo^{10+} iyonun taban haline ait elektron konfigürasyonu $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^2$ şeklindedir. Bu konfigürasyonun muhtemel LSJ enerji seviyeleri Ek B-Tablo B.4.'te gösterilmektedir. Kuantum seviyelerinin sırası artan göreceli enerji değerlerine göre verilmiştir. Bu tablonun ilk sütununda verilen enerji değerleri, en düşük enerjiye sahip seviye $[Ar]3d^{10} 4s^2 4p^2 ({}^3P) {}^3P_{0,0}$ kuantum halinin enerjisi referans alınarak oluşturulmuş göreceli enerji değerleridir. Elektron çarpması sonucu Mo^{10+} iyonu 3s, 3p, 3d, 4s ve 4p alt kabuklarından elektron kaybederek iyonlaşabilir. 3s, 3p, 3d, 4s ve 4p alt kabuklarından bir elektron kaybederek iyonlaşmış Mo^{10+} konfigürasyonları Ek B-Tablo B. 5.'te listelenmiştir. Ek B-Tablo B.5.'in ilk sütunu Mo^{10+} iyonun 3s, 3p, 3d, 4s ve 4p alt kabuklarından doğrudan elektron iyonlaştırmak için gerekli eşik enerjilerini listelemektedir. Ek B-Tablo B.5.'in 2. sütunu ise Mo^{10+} iyonunun 3s, 3p, 3d, 4s ve 4p alt kabuklarından elektron kopması sonucu geride kalan yükü bir artmış iyonun LSJ kuplajında oluşabilecek kuantum seviyelerini listelemektedir.

Elektron çarpmalı tesir kesiti sürecinin nasıl oluştuğunu bir örnekle açıklayalım. Gelen elektronu $k_i l_i$ ile bu elektronunun çarpması sonucu iyondan kopan elektronu $k_e l_e$ ile gösterelim. Burada $k_i l_i$ elektronunun çarpma süreci esnasında iyonca enerji aktararak saçılma ortamından $k_f l_f$ şeklinde uzaklaştığını kabul edelim. Bundan sonraki tartışmalar için gelen elektron kastımız $k_i l_i$, saçılan elektron kastımız $k_f l_f$ ve iyonlaşan elektrondan kastımızda $k_e l_e$ olacaktır.

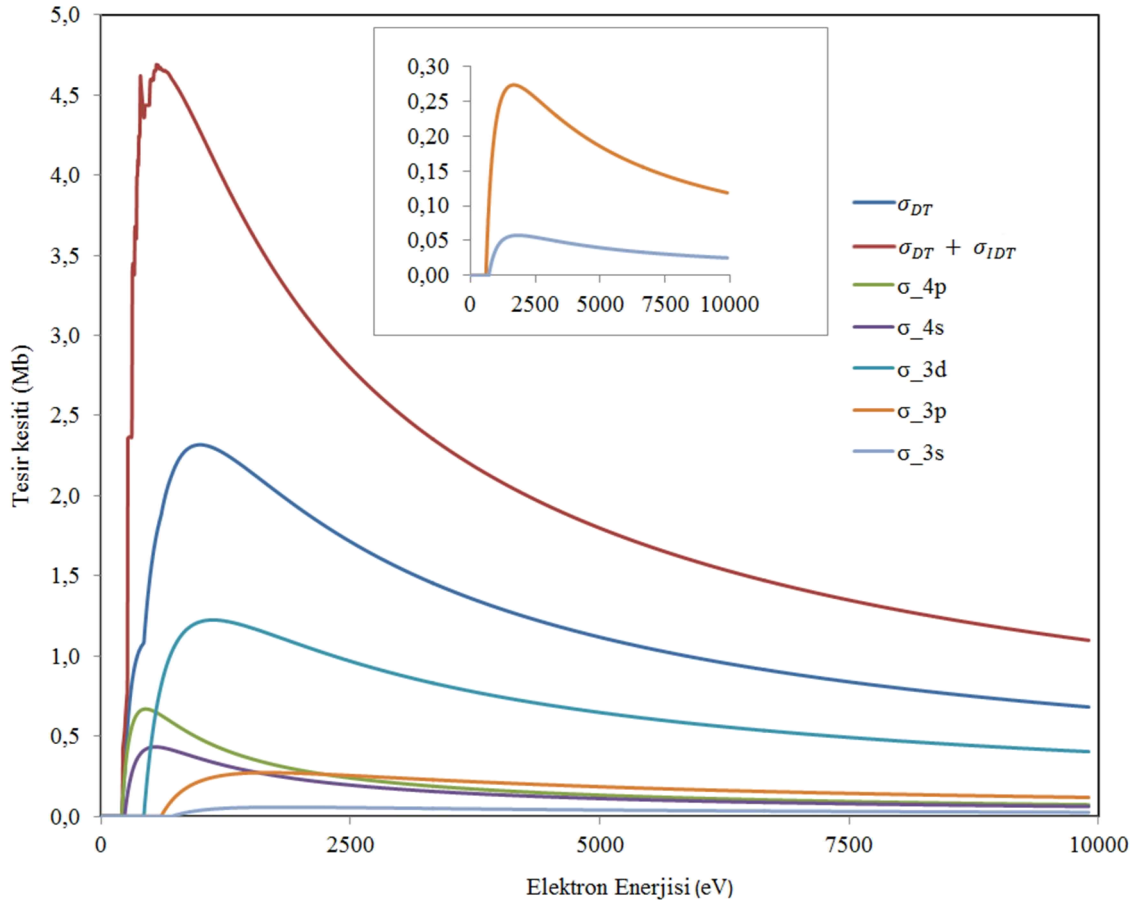
Eğer gelen elektronun Ek B-Tablo B.4.'nün ilk satırında verilen $[Ar]3d^{10} 4s^2 4p^2 ({}^3P) {}^3P_{0,0}$ konfigürasyona sahip Mo^{10+} iyonuyla çarpıştığını kabul edersek süreç sembolik olarak

$k_i l_i + [ArI]3d^{10}4s^24p^2(^3P_{0,0}) \rightarrow [ArI]3d^{10}4s^24p^1(^2P_{0,5}) + k_e l_e + k_f l_f$ şeklinde yazılır. Benzer ifadeler Ek B-Tablo B.4. verilen diğer bütün taban konfigürasyonlar için yazılabilir. Mo^{10+} iyonun 3s, 3p, 3d, 4s ve 4p alt kabuklarından seviye ayrışımı iyonlaşma kanallarının gelen elektronun açısal momentumuna bağlı olarak artacağı açıktır. Biz tezimizde gelen ve saçılan elektronun açısal momentum kuantum sayısının $l_i = l_f = 0 - 14$ aralığında değiştiğini ve iyonlaşan elektronun açısal kuantum sayısının da $l_e = 0 - 10$ aralığında değiştiğini kabul ettik. Bu değerlerle Ek B- Tablo B.4. ve Tablo B.5. birlikte değerlendirildiğinde, Mo^{10+} iyonun 3s, 3p, 3d, 4s ve 4p alt kabuklarından oluşturulabilecek seviye ayrışımı iyonlaşma kanal sayısının çok büyük sayılara ulaşacağı açık olmalıdır. Bu nedenle Mo^{10+} iyonu için yalnız bölüm II de teorik detayları verilen yapılandırma ortalama yaklaşım kullanılarak hesaplar yapıldı. Bu hesaplamalarda gelen elektronun enerjisinin, iyonlaşma eşik enerjilerinin üzerinde 14 farklı değerde olduğu kabul edildi. Her gelen elektron enerjisi için iyondan koparılan elektronun 10 farklı enerji değeriyle ana iyonundan uzaklaştığı kabul edildi.

Şekil III. 1. 1.'de $\sigma_{3s}, \sigma_{3p}, \sigma_{3d}, \sigma_{4s}, ve \sigma_{4p}$ etiketli eğriler sırasıyla Mo^{10+} iyonun 3s, 3p, 3d, 4s ve 4p alt kabuklarından kaynaklanan elektron çarpmalı kısmi doğrudan iyonlaşma tesir kesitlerini temsil etmektedir. Burada doğrudan sıfatı ile, gelen elektronun enerjisinin bir kısmını çarptığı iyonun alt kabuklarına ait bağlı bir elektrona aktararak, iyonda başka herhangi bir değişikliğe neden olmadan, enerji aktardığı elektronun kopup iyonlaşma süreci anlatılmak istenmektedir. Şekil III. 1. 1.'de σ_{DT} ile etiketlenmiş grafik 3s, 3p, 3d, 4s ve 4p alt kabuklarına ait doğrudan kısmi iyonlaşma tesir kesitlerinin toplamını temsil etmektedir. $\sigma_{DT} + \sigma_{IDT}$ ile etiketlenmiş grafik σ_{DT} sonucuna oto-iyonlaşma kanallarından gelen katkıların eklenmesiyle elde edilmiştir. Gelen elektron enerjisini bir kısmını çarptığı iyonla aktararak, çarptığı iyonun uyarılmasına neden olabilir. Mo^{10+} iyonun için yaptığımız enerji hesaplamaları sonucu n ve l kuantum sayıları için $n = 4 - 7$ ve $l = 0 - 3$ değerlerini alarak $[NeI]3s^13p^63d^{10}4s^24p^2nl$, $[MgI]3p^53d^{10}4s^24p^2nl$ ve $[NeI]3s^23p^63d^94s^24p^2nl$ şeklinde oluşan uyarılmış hallerin oto-iyonlaşma ihtimalleri olduğunu belirledik. Bu hallerin ışımalı süreçlerle elektron kaybetmeden, çarpışmadan önceki hallerine de dönebilecekleri açıktır. Ek B-Tablo B.1., Tablo B. 2. ve Tablo B.3. hesaplara dahil edilen oto-iyonlaşma ihtimali olan uyarılmış haller ile bu hallere ait dallanma oranlarını

temsil etmektedir. Dallanma oranları $B_j^a = \frac{A_{j \rightarrow f}^a}{\sum_h A_{j \rightarrow h}^r + \sum_v A_{j \rightarrow v}^a}$ ifadesi kullanılarak hesaplanmıştır. Burada $A_{j \rightarrow h}^r$ ile verilen bir j konfigürasyonundan verilen bir h konfigürasyonuna ışımalı durulma oranı, $A_{j \rightarrow f}^a$ ile de verilen bir j konfigürasyonundan verilen bir f oto-iyonlaşma oranı temsil edilmektedir. Dallanma oranları için yapılan hesapların sonuçları Ek B-Tablo B.1., Tablo B. 2. ve Tablo B.3.' de listelenmiştir.

Ek B-Tablo B.1., Tablo B. 2. ve Tablo B.3.'den de görüleceği gibi dallanma etkisinin hesaplara dahil edilmesi Şekil III.1.1.'de gösterilen $\sigma_{DT} + \sigma_{IDT}$ sonucunu kayda değer oranda etkilemeyecektir. Oto-iyonlaşma katkısına üzerindeki den de görüleceği gibi dallanma oranının σ_{3s} kısmi tesir kesitine etkisi çok düşük olacaktır. Şekil III.1.1.'de gösterilen $\sigma_{DT} + \sigma_{IDT}$ toplam tesir kesitine dallanma etkisinin dahil edilmediğini belirtelim. $\sigma_{DT} + \sigma_{IDT}$ eğrisinde eşik enerjiler civarında görülen rezonans türü davranışların, oto-iyonlaşma kanallarına ait iyonlaşma eşik enerjilerinin farklı fakat birbirine yakın değerlerde olmasından kaynaklanmaktadır. $\sigma_{DT} + \sigma_{IDT}$ eğrisi ile σ_{DT} karşılaştırıldığında oto-iyonlaşma kanallarından gelen katkının nerdeyse doğrudan iyonlaşma kanallarından gelen katkıyla aynı etkiyi gösterdiği açıkça görülmektedir. Şekil III. 1. 1.' de 3s ve 3p kabuklarına ait kısmi tesir kesitlerinin eşik enerjisi civarındaki davranışları, aynı şekil içine yerleştirilmiş küçük boyutlu bir pencere içerisinde gösterilmiştir.

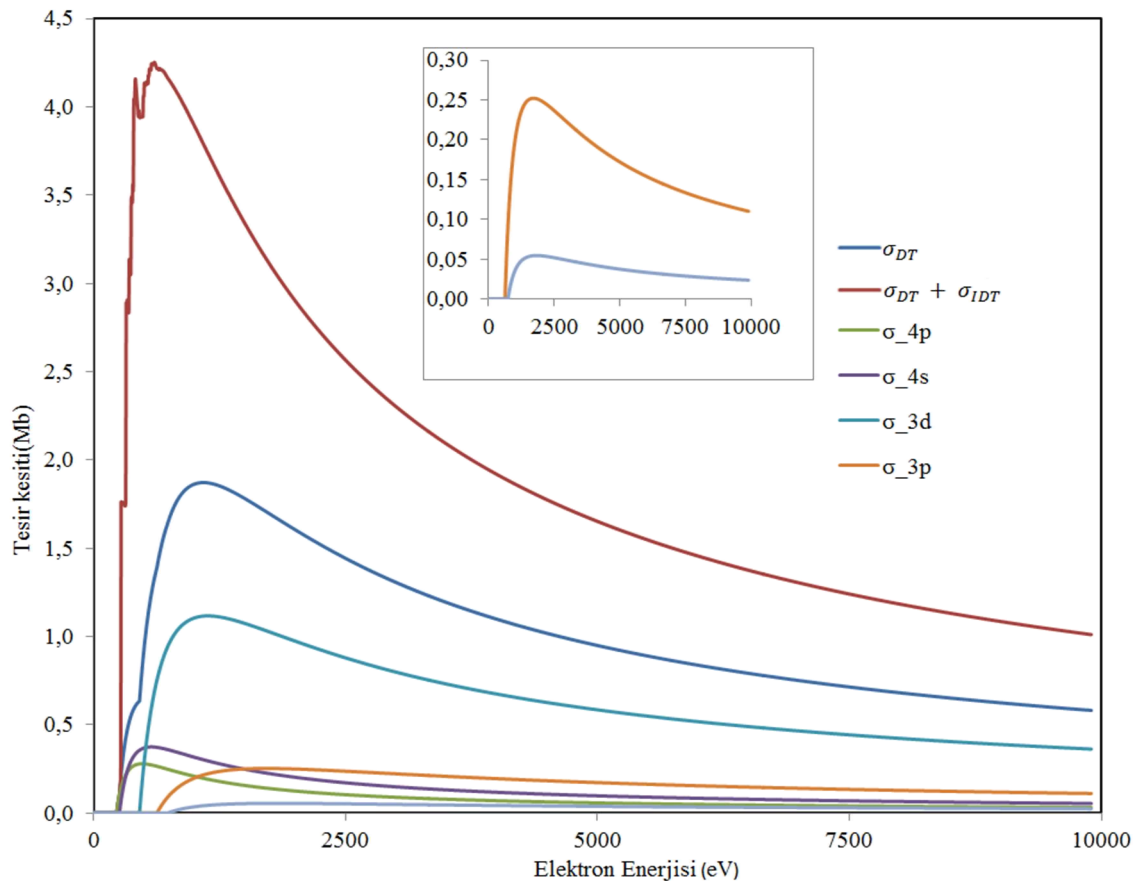


Şekil III. 1. 1. Mo^{10+} iyonunun toplam ve kısmi elektron çarpmalı tesir kesitleri.

Şekil III. 1. 2. Mo^{11+} iyonun 3s, 3p, 3d, 4s ve 4p alt kabuklarından kaynaklanan konfigürasyon ortalamalı kısmi ve toplam tesir kesitleri gösterilmektedir. $\sigma_{3s}, \sigma_{3p}, \sigma_{3d}, \sigma_{4s}$ ve σ_{4p} etiketli eğriler sırasıyla bu alt kabuklardan kaynaklanan doğrudan iyonlaşma tesir kesitlerini temsil etmektedir. Doğrudan iyonlaşma kısmi tesir kesitlerin toplamı Şekil III. 1. 2.'de σ_{DT} etiketli grafikte temsil edilmektedir. n ve l kuantum sayıları $n = 4 - 7$ ve $l = 0 - 3$ aralığında değişmek üzere $[NeI]3s^13p^63d^{10}4s^24p^1nl$ ve $[MgI]3p^53d^{10}4s^24p^1nl$ uyarılmış konfigürasyonların oto-iyonlaşmalı sürece katkı yapmaktadırlar. Ancak $[NeI]3s^13p^63d^94s^24p^2$ hariç $[NeI]3s^13p^63d^94s^24p^1nl$ şeklinde oluşan diğer bütün uyarılmış oto-iyonlaşma ihtimaline sahiptir. Bu sonuçlara uyarılmış haller için hesapladığımız konfigürasyon ortalamalı toplam enerjileri karşılaştırarak ulaştık. $[NeI]3s^23p^63d^94s^14p^1nl$ uyarılmış konfigürasyonların tamamı oto-iyonlaşma eşik enerjinin altında kaldıkları için elektron çarpmalı iyonlaşma sürecine katkı yapmazlar. 3s, 3p ve 3d alt kabuklarının

uyarılması sonucu oluşan oto-iyonlaşma ihtimalli uyarılmış haller için hesapladığımız dallanma oranları Ek C-Tablo C. 1. Tablo C. 2. ve Tablo C.3.' de listelenmiştir.

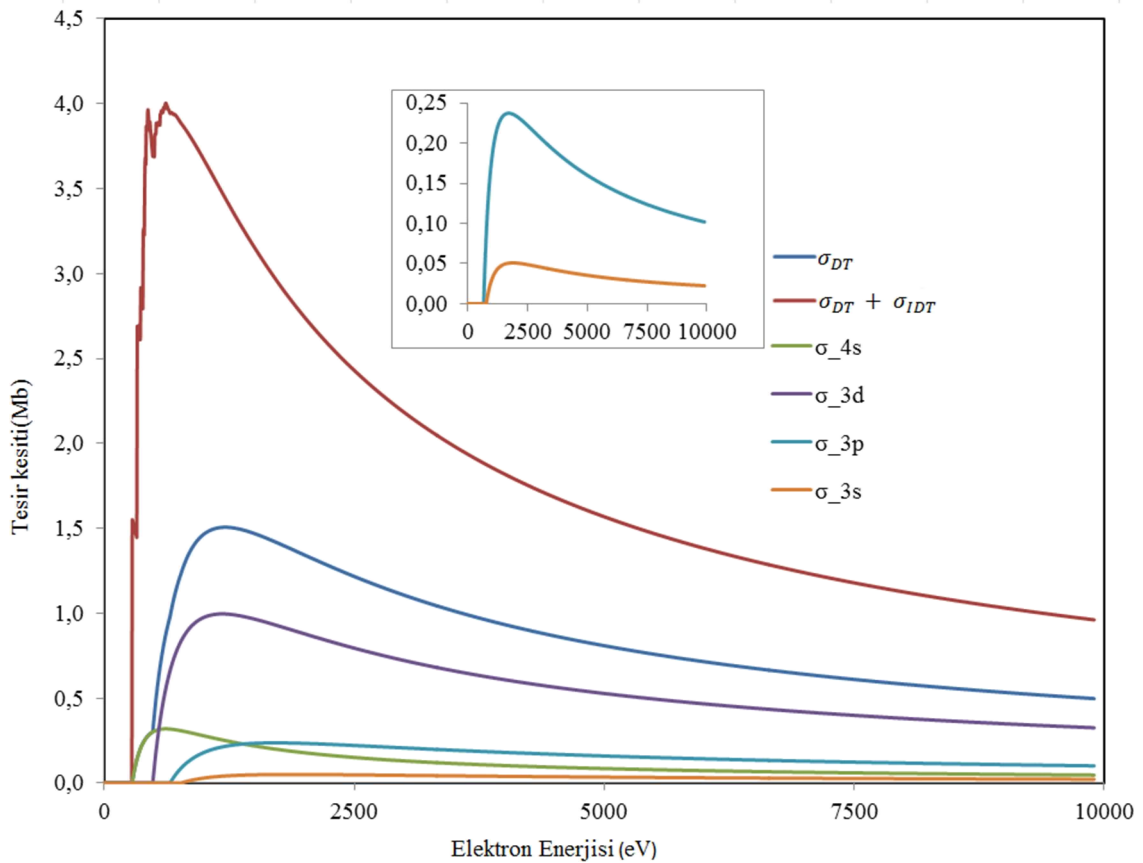
Şekil III. 1. 2. de $\sigma_{DT} + \sigma_{IDT}$ ile etiketlenmiş grafik σ_{DT} sonucuna oto-iyonlaşma kanallarından gelen katkıların eklenmesiyle elde edilmiştir. Ek C-Tablo C. 1., Tablo C. 2. ve Tablo C. 3.' den de görüleceği gibi dallanma etkisinin hesaplara dahil edilmesi Şekil III.1.2.' de gösterilen $\sigma_{DT} + \sigma_{IDT}$ sonucunu kayda değer oranda etkilemeyecektir. Bu nedenle σ_{IDT} hesaplarına dallanma oranları dahil edilmemiştir. Ancak daha hassas hesaplar için dahil edilmesinin daha uygun olacağını da burada belirtelim. Mo^{10+} iyonunda olduğu gibi Mo^{11+} iyonu içinde oto-iyonlaşma kanallarından gelen katkının neredeyse doğrudan iyonlaşma süreçlerinin toplamından gelen katkıya eşdeğer olduğu söylenebilir. Şekil III. 1. 2.' de 3s ve 3p kabuklarına ait kısmi tesir kesitlerinin eşik enerjisi civarındaki davranışları, aynı şekil içine yerleştirilmiş küçük boyutlu bir pencere içerisinde gösterilmiştir.



Şekil III. 1. 2. Mo^{11+} iyonunun toplam ve kısmi elektron çarpmalı tesir kesitleri.

Şekil III. 1. 3.'de gösterilen sonuçlar Mo^{12+} iyonun 3s, 3p, 3d ve 4s alt kabuklarından

kaynaklanan konfigürasyon ortalamalı kısmi ve toplam tesir kesitleri için yapılan hesaplamalardan elde edilmiştir. Bu alt kabuklara ait doğrudan iyonlaşma tesir kesitleri sırasıyla σ_{3s} , σ_{3p} , σ_{3d} ve σ_{4s} şeklinde etiketlenmiştir. Doğrudan iyonlaşma tesir kesitlerini toplamı Şekil III. 1. 3.' de σ_{DT} etiketli grafikte temsil edilmektedir. Mo^{12+} iyonun 3s, 3p ve 3d alt kabuklarından birer elektron uyarılmasıyla elde edilen $[NeI]3s^13p^63d^{10}4s^2nl$, $[MgI]3p^53d^{10}4s^2nl$ ve $[NeI]3s^23p^63d^94s^2nl$ şeklindeki uyarılmış konfigürasyonların tamamı, $3s^23p^63d^94s^24p^1$ konfigürasyonu hariç, n ve l kuantum sayılarının her değeri için oto-iyonlaşma ihtimali olan konfigürasyonlardır. Biz tezimizde $n = 4 - 7$ ve $l = 0 - 3$ için oluşan oto-iyonlaşma süreçlerini hesaplara dâhil ettik. Ek D Tablo D. 1., Tablo D. 2. ve Tablo D. 3. Mo^{12+} iyonun 3s, 3p ve 3d alt kabuklarının uyarılmasıyla elde edilen oto-iyonlaşmalı uyarılmış hallere ait dallanma oranlarını listelemektedir.



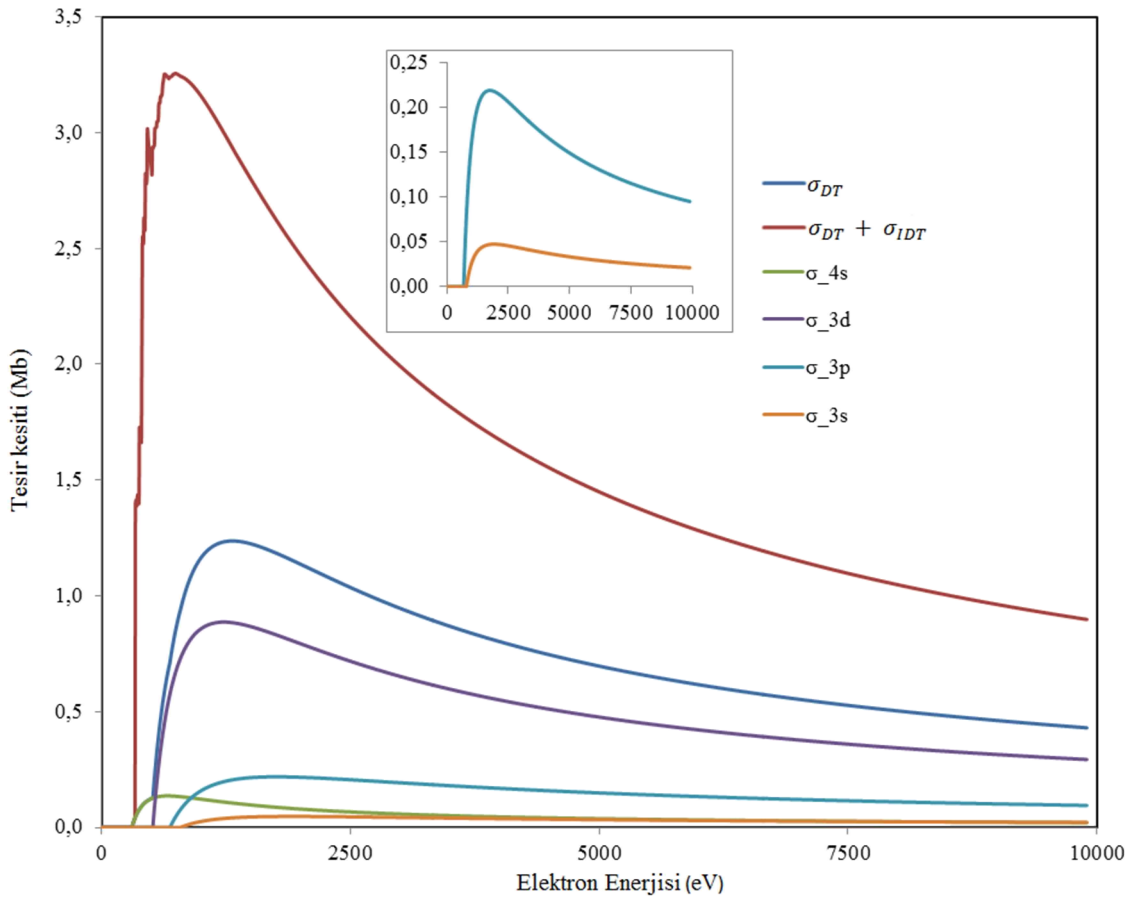
Şekil III. 1. 3. Mo^{12+} iyonunun toplam ve kısmi elektron çarpmalı tesir kesitleri.

Mo^{12+} iyonunun oto-iyonlaşmalı uyarılmış hallerden gelen katkıları yansıtan toplam elektron çarpmalı tek elektron iyonlaşma tesir kesiti Şekil III.1.3.' de $\sigma_{DT} + \sigma_{IDT}$ ile etiketlenmiştir. Bu sonuca dallanma oranlarından gelen etki dâhil edilmemiştir. Ek D- Tablo D. 1., Tablo D. 2. ve Tablo D. 3.'den de görüleceği gibi dallan etkisinin hesaplara dahil edilmesi Şekil III. 1. 3.' de gösterilen $\sigma_{DT} + \sigma_{IDT}$ sonucunu kayda değer oranda etkilemeyeceği söylenebilir. Şekil III. 1. 3.'den de görüleceği gibi oto-iyonlaşma süreçleri Mo^{12+} iyonu için de olmaza olmaz önemdedirler. Hatta σ_{IDT} tesir kesitinin iyonlaşma eşik enerjisi civarından σ_{DT} kesitinden daha büyük olduğu açıkça görülmektedir. Şekil III. 1. 3.' de 3s ve 3p kabuklarına ait kısmi tesir kesitlerinin eşik enerjisi civarındaki davranışları, aynı şekil içine yerleştirilmiş küçük boyutlu bir pencere içerisinde gösterilmiştir.

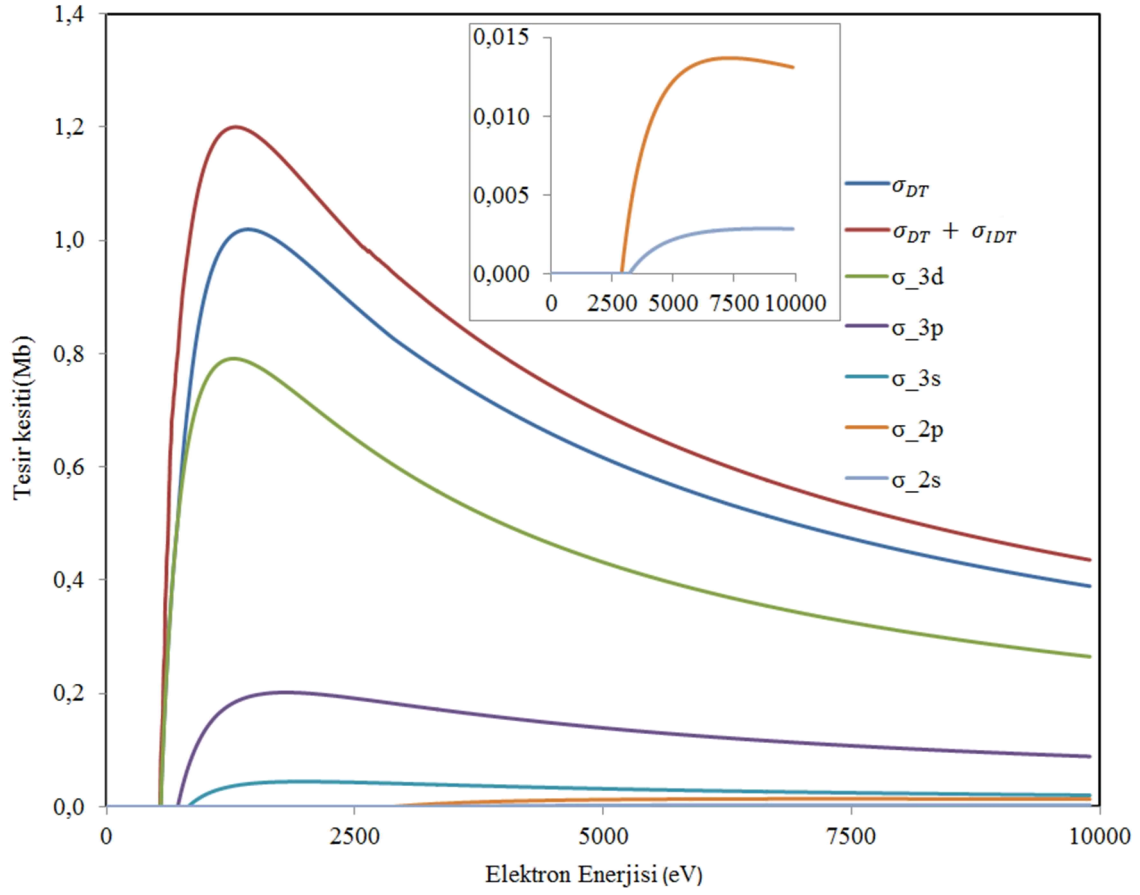
Mo^{13+} ve Mo^{14+} iyonları için yapılan hesaplamaların sonuçları sırasıyla Şekil III. 1. 4.'te ve Şekil III. 1. 5.'te gösterilmektedir. Be şekillerde $\sigma_{3s}, \sigma_{3p}, \sigma_{3d}$ ve σ_{4s} ile etiketlenmiş eğriler sırasıyla bu iyonların 3s, 3p, 3d ve 4s alt kabuklarından kaynaklanan kısmi elektron çarpmalı tesir kesitlerini temsil etmektedirler. Mo^{13+} iyonu temel alınarak oluşturulan $[NeI]3s^13p^63d^{10}4s^1nl$, $[MgI]3p^53d^{10}4s^1nl$ konfigürasyonlarının, n ve l kuantum sayılarının her değeri için oto-iyonlaşma ihtimalili konfigürasyon olduklarını belirledik. Mo^{13+} iyonunun 3d alt kabuğunun uyarılmasıyla oluşturulan $[MgI]3p^63d^94s^1nl$ şeklindeki konfigürasyonlardan $n=4, l=0-2$ kuantum sayılı olanlar hariç diğerlerinin tamamı oto-iyonlaşma ihtimali olan konfigürasyonlar olarak belirlendi ve diğer oto-iyonlaşmalı konfigürasyonlarla birlikte Mo^{13+} tesir kesiti hesaplarına dahil edildi. Diğer taraftan Mo^{14+} iyonu için 3s alt kabuğundan bir elektron uyarılmasıyla oluşturulan $[NeI]3s^13p^63d^{10}nl$ konfigürasyonları, $[NeI]3s^13p^63d^{10}4s$ ve $[NeI]3s^13p^63d^{10}4p$ konfigürasyonları hariç, n ve l kuantum sayılarının diğer her değeri için oto-iyonlaşmalı konfigürasyon olduklarını belirledik. Mo^{14+} iyonu için 3p alt kabuğundan bir elektron uyarılmasıyla oluşturulan $[NeI]3s^23p^53d^{10}nl$ şeklindeki konfigürasyonlardan $n=4, l=0-3$ ve $n=5, l=0$ değerlerine karşı gelenler hariç diğerlerinin tamamının oto-iyonlaşma ihtimali olduklarını belirledik ve iyonlaşmaya etkilerini hesaplara dahil ettik. Mo^{13+} ve Mo^{14+} iyonlarının toplam doğrudan iyonlaşma tesir kesitleri Şekil III.1.4 ve 5.'te σ_{DT} ile etiketlenmişlerdir. Mo^{13+} ve Mo^{14+} iyonlarının oto-iyonlaşmalı uyarılmış halleri için hesapladığımız

dallanma oranları sırasıyla Ek E-Tablo E. 1., Tablo E. 2., Tablo E. 3. ve Tablo E. 6., Tablo E. 7. tablolarında listelenmiştir.

Şekil III. 1. 4.'te ve Şekil III. 1. 5.'te $\sigma_{DT} + \sigma_{IDT}$ şeklinde etiketlenmiş eğriler sırasıyla Mo^{13+} ve Mo^{14+} iyonlarının toplam elektron çarpmalı tek elektron iyonlaşma tesir kesitlerini temsil etmektedirler. Şekil III. 1. 4.'ten de görüleceği gibi oto-iyonlaşmanın katkısı Mo^{13+} içinde doğrudan iyonlaşma ile hemen hemen aynı boyuttadır. Ancak Mo^{14+} için durum kısmen farklıdır. Bunun nedeni, yukarıda da izah edildiği gibi, düşük kuantum sayılı uyarılmış hallerin oto-iyonlaşma eşik enerjisinin altında kalmalarıdır. Mo^{13+} ve Mo^{14+} iyonlarının σ_{IDT} hesaplarına dallanma oranlarının etkisinin yansıtılmamış olduğunu da hatırlatalım. Dallanma oranlarının σ_{IDT} etkisini azda olsa küçülteceği açıktır.



Şekil III. 1. 4. Mo^{13+} iyonunun toplam ve kısmi elektron çarpmalı tesir kesitleri.



Şekil III. 1. 5. Mo^{14+} iyonunun toplam ve kısmi elektron çarpmalı tesir kesitleri.

III. 2. HİDROJENİK ÖLÇEKLENDİRİLMİŞ, ÇARPITILMIŞ DALGA VE İKİLİ KARŞILAŞMA YAKLAŞIMLARINDA TESİR KESİT VE ORAN KATSAYILARI

Bu bölümde Mo^{11+} , Mo^{12+} , Mo^{13+} ve Mo^{14+} iyonlar için hidrojenik ölçeklendirilmiş, çarpıtılmış dalga ve ikili karşılaşma yaklaşımlarında GIPPER programını [3] kullanarak elektron çarpmalı iyonlaşma tesir kesiti ve oran katsayı hesaplamalar yaptık. GIPPER program yapısal hesaplamalar için COWAN tarafından detaylandırıldığı şekliyle [19] çok konfigürasyonlu yarı rölativistik Hartree-Fock yaklaşım kullanmaktadır. GIPPER sürekli orbitalleri Schrödinger denkleminin çözümlerinden elde etmektedir. Hidrojenik ölçeklendirilmiş yaklaşımda hidrojenik iyonlar için, değiş-tokuş Coulomb Born (Coulomb-Born exchange) [3,8,28] yaklaşımında, hesaplanan iyonlaşma tesir kesitleri II.6 ile verilen bir analitik ifadeyle uyumlu hale getirilmişlerdir. Bu ifadenin gelen elektronun enerjisiyle hedeften koparılan elektronun n ve l kuantum sayılarına bağlı olduğunu hatırlatalım. GIPPER program çarpıtılmış dalga yönteminde gelen parçacıkla hedef parçacığı arasındaki gerçek potansiyeli kullanmaktadır.

Mo^{11+} , Mo^{12+} , Mo^{13+} ve Mo^{14+} iyonlarına ait tesir kesiti ve oran katsayıları için, hidrojenik ölçeklendirilmiş, çarpıtılmış dalga ve ikili karşılaşma yaklaşımlarında yapılan hesaplamaların sonuçları tablo ve şekillerle temsil edilmişlerdir.

III. 2. 1. Mo^{11+} İyonu İçin Hidrojenik Ölçeklendirilmiş, Çarpıtılmış Dalga ve İkili Karşılaşma Yaklaşımlarında Elde Edilen Sonuçlar

Mo^{11+} iyonun $4p^1 \ ^2P_{0,5} \rightarrow 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1 \ (^2S)4p^1 \ (^2P)^3P_{0,0}$ kısmi iyonlaşma kanalı için elde edilen ve Tablo III. 2. 1. 1. etiketli tabloda listelenen tesir kesiti sonuçları Şekil III. 2. 1. 1.'de grafiklerle gösterilmiştir.

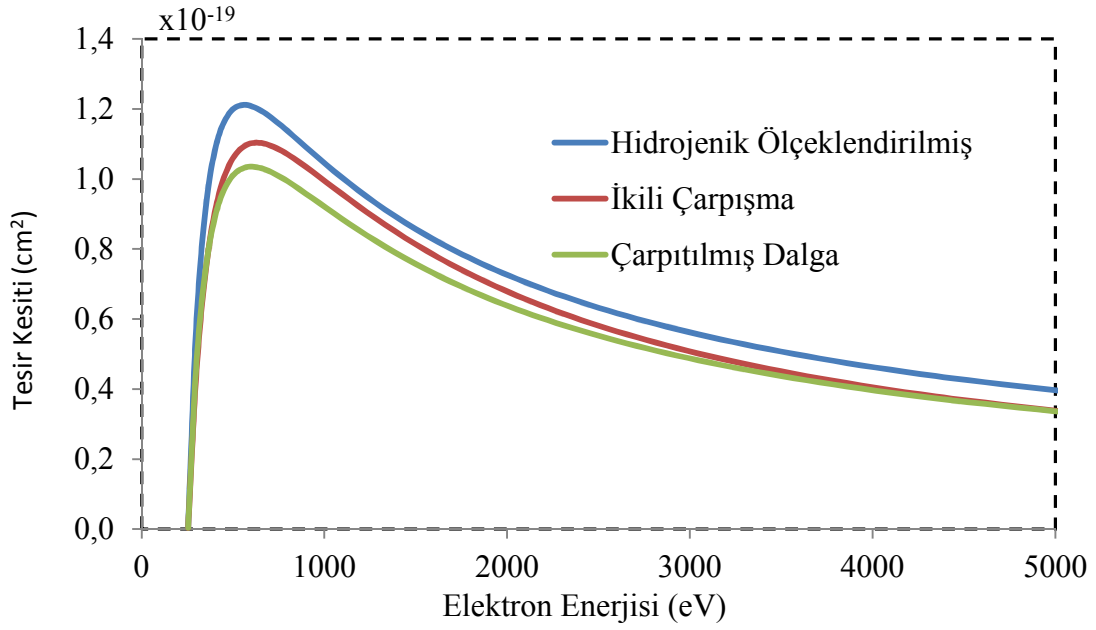
Şekil III.2.1.2 de Mo^{11+} iyonunun $4p^1 \ ^2P_{0,5} \rightarrow 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1 \ (^2S)4p^1 \ (^2P)^3P_{0,0}$ kısmi iyonlaşma kanalına ait hidrojenik ölçeklendirilmiş, çarpıtılmış dalga ve ikili karşılaşma yaklaşımlarında elde edilen kısmi oran katsayıları resmedilmiştir.

Şekil III. 2. 1. 3.'te ve Şekil III. 2. 1. 4.'te Mo^{11+} iyonunun 3s, 3p, 3d, 4s ve 4p alt kabuklarından kaynaklanan tüm LSJ kısmi iyonlaşma kanalları için elde edilen tesir kesitlerinin ve oran katsayılarının toplamaları resmedilmiştir.

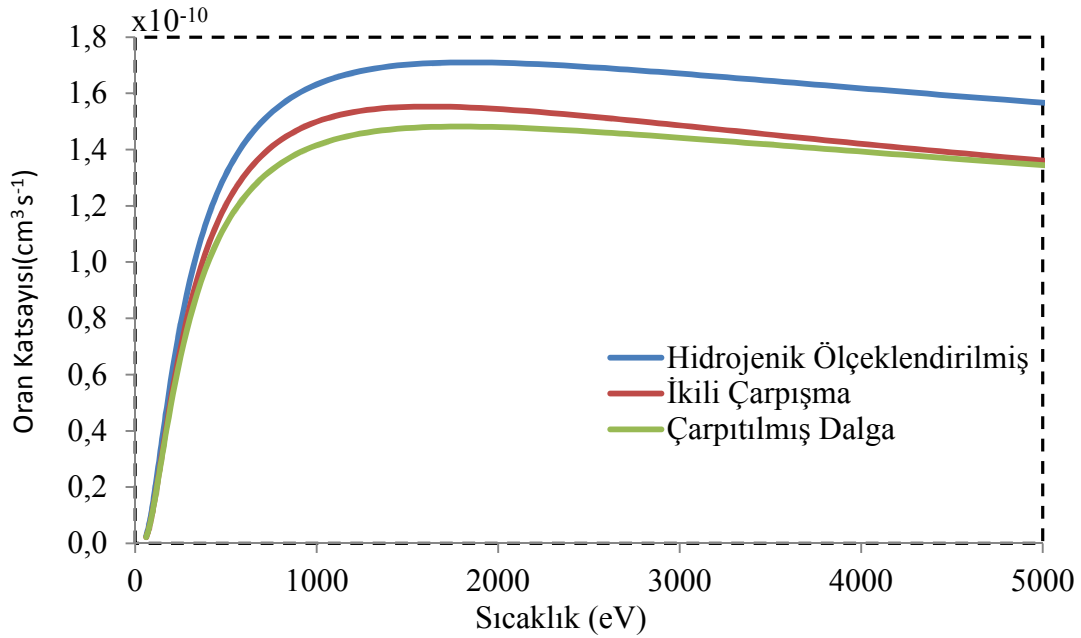
Grafiklerden de görüleceği gibi tesir kesiti profilleri bir birlerine çok yakın seyretmektedir. Çarpıtılmış dalga yöntemi kuantum mekanik çerçevede oluşturulan birinci Born yaklaşımını kullanmaktadır. Çarpıtılmış dalga yaklaşımında ayrıca gelen, saçılan ve iyonlaşan elektronlara ait sürekli orbitallerde saçılmaya neden olan gerçek potansiyelinin etkisini hissederek değişime uğratılmaktadırlar. Bu yönleriyle güvenilirlik açısından Şekil III. 2. 1. 1.'de verilen diğer sonuçlardan daha üst düzeyde olduğunu düşünebiliriz.

Tablo III. 2. 1. 1. $\text{Mo}^{11+} 4p^1 {}^2P_{0,5} \rightarrow 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1 ({}^2S)4p^1 ({}^2P)^3P_{0,0}$ kısmi iyonlaşma kanalına ait tesir kesiti değerleri.

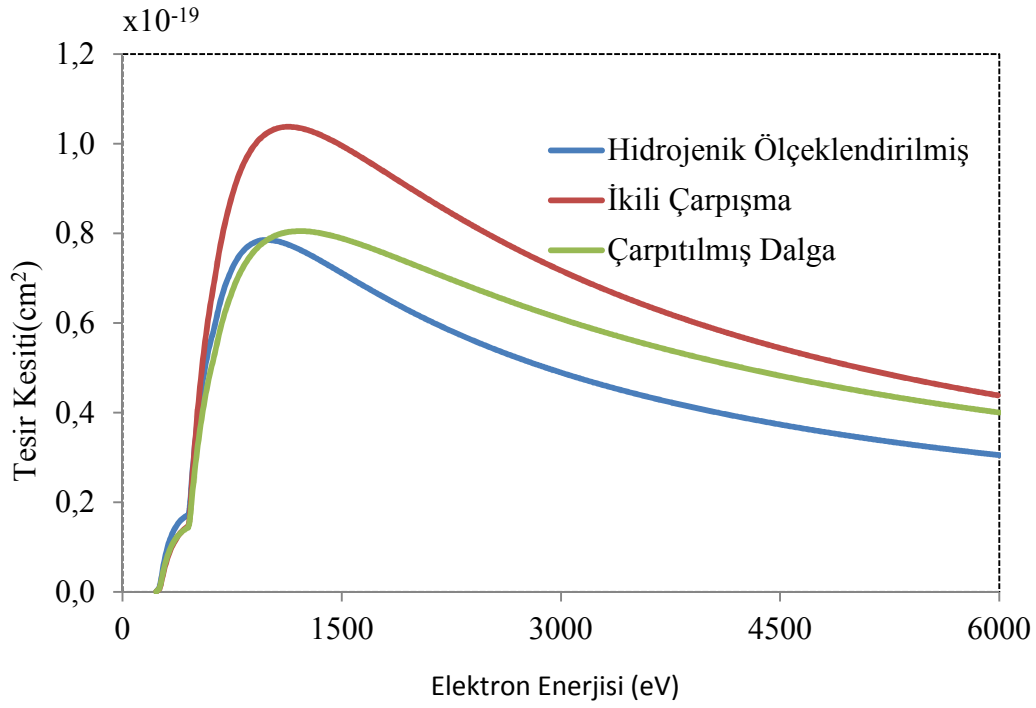
Elektron Enerjisi (eV)	Hidrojenik Ölçeklendirilmiş Tesir Kesiti ($\times 10^{-19}$)	İkili Çarpışma Tesir Kesiti ($\times 10^{-19}$)	Çarpıtılmış Dalga Tesir Kesiti ($\times 10^{-19}$)
2,5460E+02	4,5724E-03	3,2313E-03	3,6434E-03
2,9807E+02	5,7281E-01	4,3399E-01	4,5866E-01
3,4897E+02	9,1067E-01	7,3110E-01	7,3861E-01
4,0854E+02	1,0980E+00	9,2474E-01	9,0530E-01
4,7828E+02	1,1869E+00	1,0390E+00	9,9527E-01
5,5993E+02	1,2115E+00	1,0932E+00	1,0318E+00
6,5551E+02	1,1945E+00	1,1027E+00	1,0307E+00
7,6742E+02	1,1511E+00	1,0800E+00	1,0034E+00
8,9844E+02	1,0915E+00	1,0348E+00	9,5842E-01
1,0518E+03	1,0228E+00	9,7469E-01	9,0215E-01
1,2314E+03	9,4972E-01	9,0571E-01	8,3940E-01
1,4416E+03	8,7545E-01	8,3230E-01	7,7372E-01
1,6877E+03	8,0223E-01	7,5779E-01	7,0771E-01
1,9758E+03	7,3149E-01	6,8459E-01	6,4321E-01
2,3131E+03	6,6419E-01	6,1436E-01	5,8146E-01



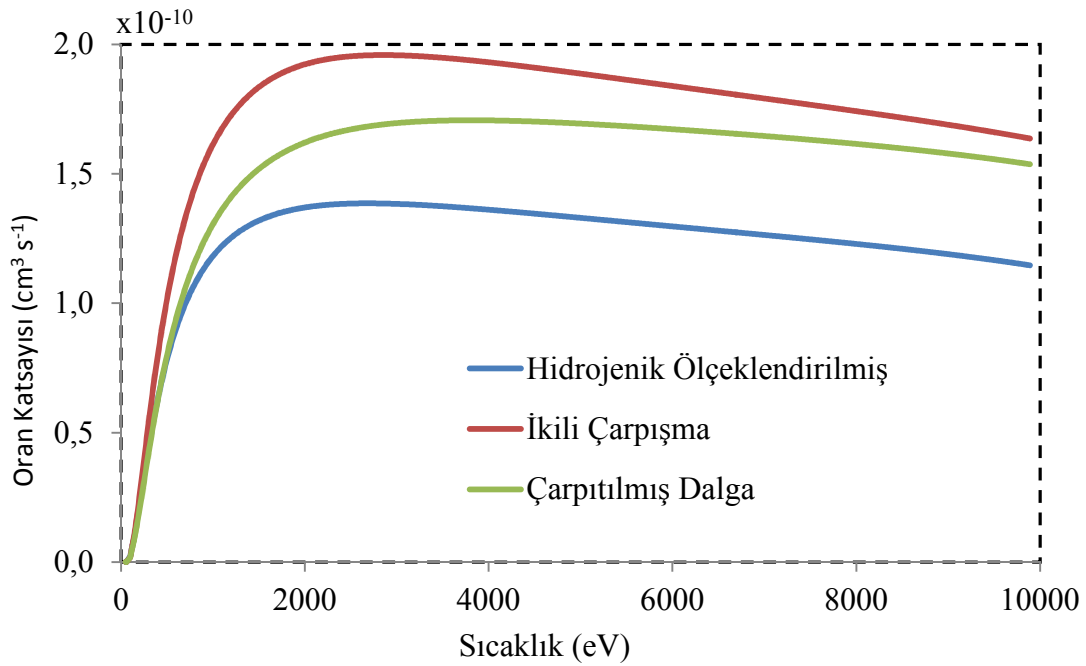
Şekil III. 2. 1. 1. Mo¹¹⁺ iyonunun $4p^1 \ ^2P_{0,5} \rightarrow 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1 ({}^2S)4p^1 ({}^2P)^3P_{0,0}$ iyonlaşma kanalına ait hidrojenik ölçeklendirilmiş, çarpıtılmış dalga ve ikili karşılaşma yaklaşımlarında elde edilen kısmi tesir kesitleri.



Şekil III. 2. 1. 2. Mo¹¹⁺ iyonunun $4p^1 \ ^2P_{0,5} \rightarrow 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1 ({}^2S)4p^1 ({}^2P)^3P_{0,0}$ iyonlaşma kanalına ait hidrojenik ölçeklendirilmiş, çarpıtılmış dalga ve ikili karşılaşma yaklaşımlarında elde edilen kısmi oran katsayıları.



Şekil III. 2. 1. 3. Mo¹¹⁺ iyonunun 3s, 3p, 3d, 4s ve 4p alt kabuklarından kaynaklanan tüm LSJ kısmi iyonlaşma kanalları için elde edilen tesir kesitlerinin konfigürasyon ortalaması.



Şekil III. 2. 1. 4. Mo¹¹⁺ iyonunun 3s, 3p, 3d, 4s ve 4p alt kabuklarından kaynaklanan tüm LSJ kısmi iyonlaşma kanalları için elde edilen oran katsayılarının konfigürasyon ortalaması.

III. 2. 2. Mo¹²⁺ İyonu İçin Hidrojenik Ölçeklendirilmiş, Çarpıtılmış Dalga ve İkili Karşılaşma Yaklaşımlarında Elde Edilen Sonuçlar

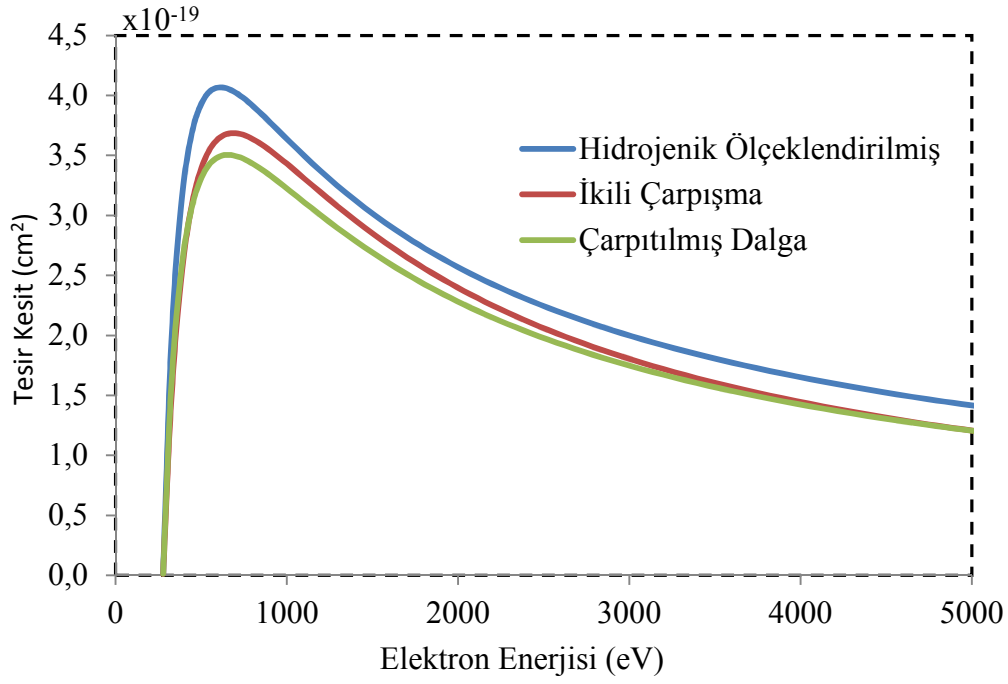
Mo¹²⁺ iyonun 4s² 1S_{0,0} → 3s² 3p⁶ 3d¹⁰ 4s¹(²S)²S_{0,5} kısmi iyonlaşma kanalı için elde edilen ve Tablo III.2.2.1. etiketli tabloda listelenen tesir kesiti sonuçları Şekil III.2.2.1. grafiklerle de gösterilmiştir.

Şekil III.2.2.2.'de Mo¹²⁺ iyonunun Mo¹²⁺ 4s² 1S_{0,0} → 3s² 3p⁶ 3d¹⁰ 4s¹(²S)²S_{0,5} kısmi iyonlaşma kanalına ait hidrojenik ölçeklendirilmiş, çarpıtılmış dalga ve ikili karşılaşma yaklaşımlarında elde edilen kısmi oran katsayıları resmedilmiştir.

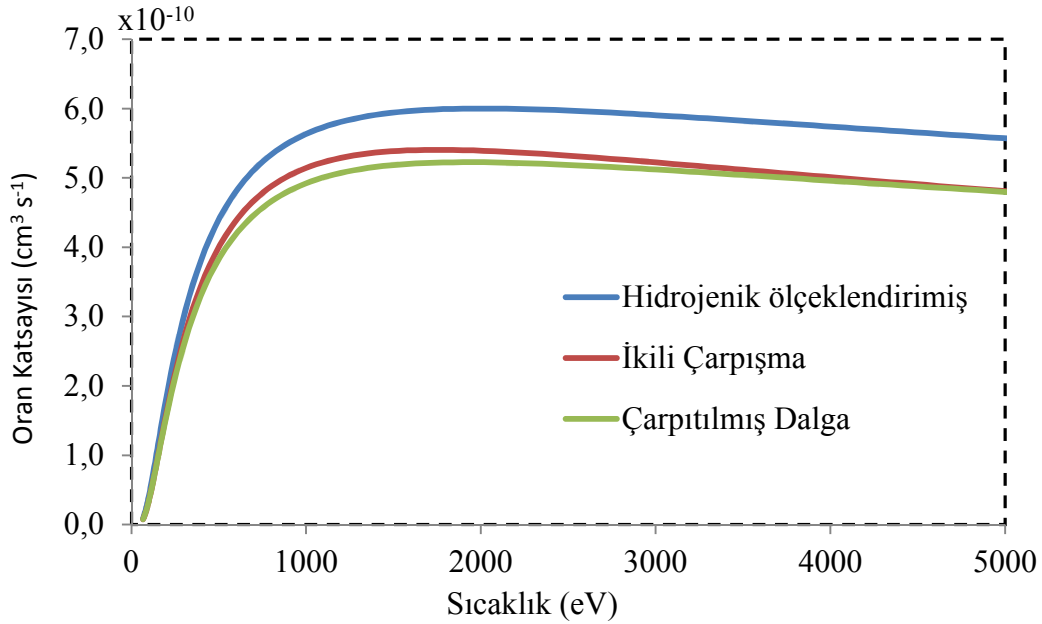
Şekil III.2.3.3.'te ve Şekil III.2.3.4.'te Mo¹²⁺ iyonunun 3s, 3p, 3d ve 4s alt kabuklarından kaynaklanan tüm LSJ kısmi iyonlaşma kanalları için elde edilen tesir kesitlerinin ve oran katsayılarının toplamaları resmedilmiştir.

Tablo 2. 2. 1. Mo¹²⁺ 4s² 1S_{0,0} → 3s² 3p⁶ 3d¹⁰ 4s¹(²S)²S_{0,5} kısmi iyonlaşma kanalına ait tesir kesiti değerleri.

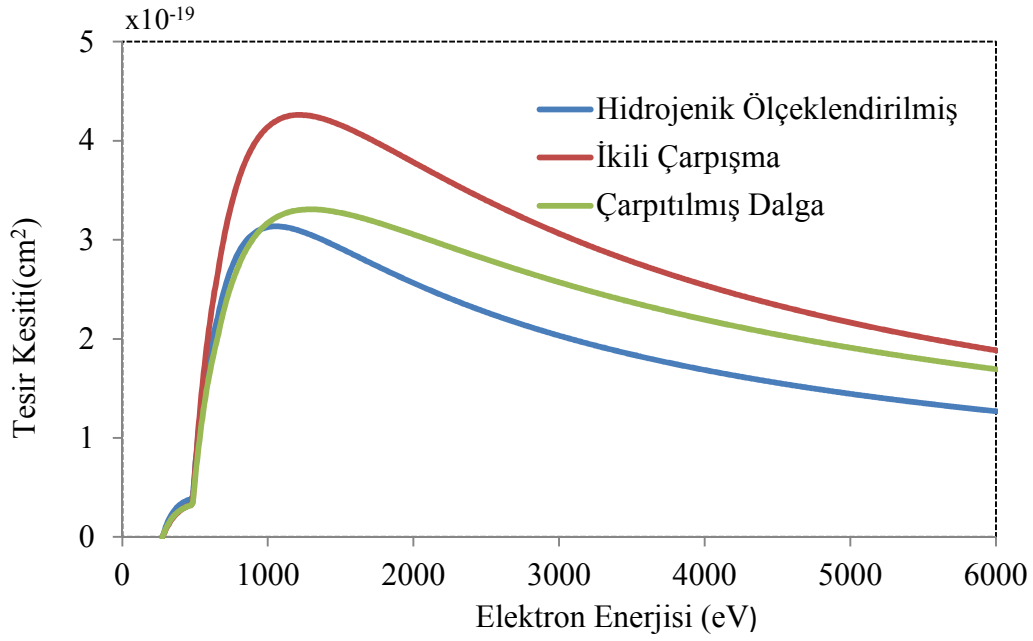
Elektron Enerjisi (eV)	Hidrojenik Ölçeklendirilmiş Tesir Kesiti (x10 ⁻¹⁹)	İkili Çarpışma Tesir Kesiti (x10 ⁻¹⁹)	Çarpıtılmış Dalga Tesir Kesiti (x10 ⁻¹⁹)
2,7801E+02	1,5352E-02	1,0799E-02	1,2388E-02
3,2547E+02	1,9233E+00	1,4504E+00	1,5608E+00
3,8105E+02	3,0577E+00	2,4433E+00	2,5095E+00
4,4609E+02	3,6868E+00	3,0901E+00	3,0703E+00
5,2224E+02	3,9852E+00	3,4714E+00	3,3714E+00
6,1139E+02	4,0677E+00	3,6516E+00	3,4933E+00
7,1577E+02	4,0107E+00	3,6826E+00	3,4897E+00
8,3797E+02	3,8649E+00	3,6057E+00	3,3983E+00
9,8100E+02	3,6650E+00	3,4535E+00	3,2471E+00
1,1485E+03	3,4343E+00	3,2519E+00	3,0571E+00
1,3445E+03	3,1889E+00	3,0205E+00	2,8443E+00
1,5741E+03	2,9395E+00	2,7744E+00	2,6210E+00
1,8428E+03	2,6936E+00	2,5249E+00	2,3959E+00
2,1574E+03	2,4561E+00	2,2798E+00	2,1756E+00
2,5257E+03	2,2301E+00	2,0449E+00	1,9645E+00



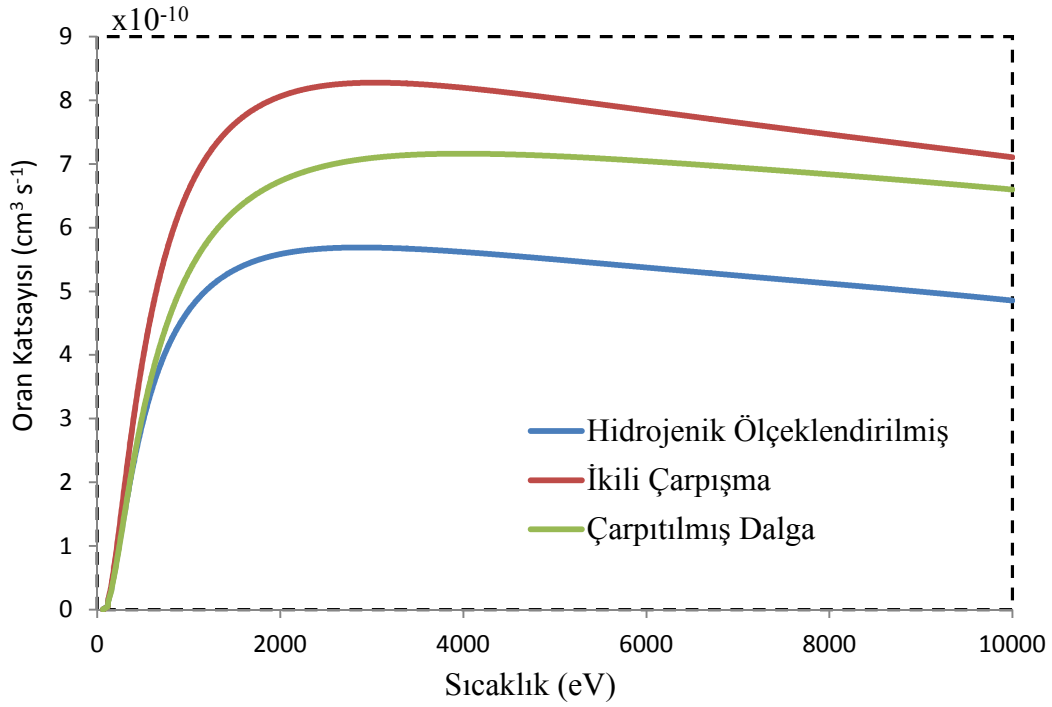
Şekil III. 2. 2. 1. Mo^{12+} iyonun $4s^2 \ ^1S_{0,0} \rightarrow 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1 (^2S)^2S_{0,5}$ iyonlaşma kanalına ait hidrojenik ölçeklendirilmiş, çarpıtılmış dalga ve ikili karşılaşma yaklaşımlarında elde edilen kısmi tesis kesitleri.



Şekil III. 2. 2. 2. Mo^{12+} iyonunun $4s^2 \ ^1S_{0,0} \rightarrow 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1 (^2S)^2S_{0,5}$ iyonlaşma kanalına ait hidrojenik ölçeklendirilmiş, çarpıtılmış dalga ve ikili karşılaşma yaklaşımlarında elde edilen kısmi oran katsayıları.



Şekil III. 2. 2. 3. Mo^{12+} iyonunun 3s, 3p, 3d ve 4s alt kabuklarından kaynaklanan tüm LSJ kısmi iyonlaşma kanalları için elde edilen tesir kesitlerinin konfigürasyon ortalaması.



Şekil III. 2. 2. 4. Mo^{12+} iyonunun 3s, 3p, 3d ve 4s alt kabuklarından kaynaklanan tüm LSJ kısmi iyonlaşma kanalları için elde edilen oran katsayılarının konfigürasyon ortalaması.

III. 2. 3. Mo¹³⁺ İyonu İçin Hidrojenik Ölçeklendirilmiş, Çarpıtılmış Dalga ve İkili Karşılaşma Yaklaşımlarında Elde Edilen Sonuçlar

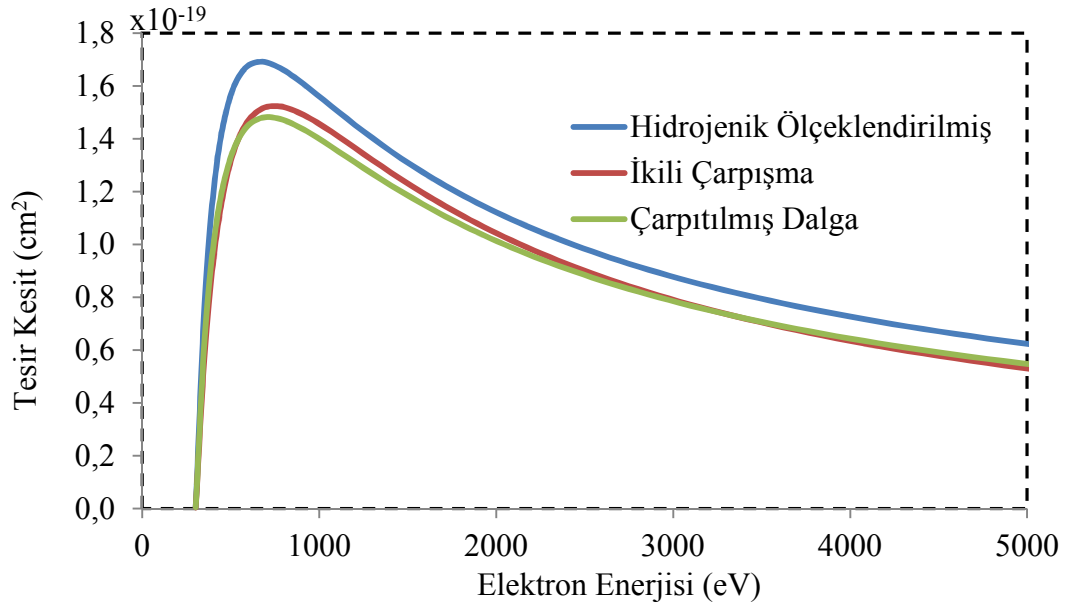
Mo¹³⁺ iyonunun $4s^1 2S_{0,5} \rightarrow 3s^2 3p^6 3d^{10} 1S_{0,0}$ kısmi iyonlaşma kanalı için elde edilen ve Tablo III. 2. 3. 1. etiketli tabloda listelenen tesir kesiti sonuçları Şekil III. 2. 3. 1.'de grafiklerle gösterilmiştir.

Şekil III. 2. 3. 2.'de Mo¹³⁺ iyonunun $4s^1 2S_{0,5} \rightarrow 3s^2 3p^6 3d^{10} 1S_{0,0}$ kısmi iyonlaşma kanalına ait hidrojenik ölçeklendirilmiş, çarpıtılmış dalga ve ikili karşılaşma yaklaşımlarında elde edilen kısmi oran katsayıları resmedilmiştir.

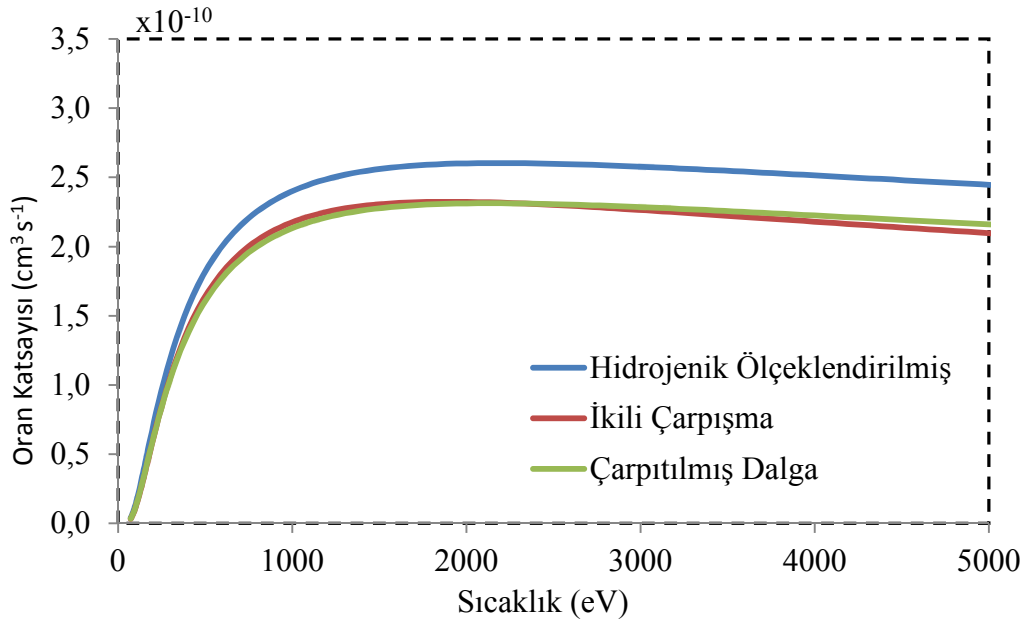
Şekil III. 2. 3. 3.'te ve Şekil III. 2. 3. 4.'te Mo¹³⁺ iyonunun 3s, 3p ve 3d alt kabuklarından kaynaklanan tüm LSJ kısmi iyonlaşma kanalları için elde edilen tesir kesitlerinin ve oran katsayılarının toplamaları resmedilmiştir.

Tablo III. 2. 3. 1. Mo¹³⁺ $4s^1 2S_{0,5} \rightarrow 3s^2 3p^6 3d^{10} 1S_{0,0}$ kısmi iyonlaşma kanalına ait tesir kesiti değerleri.

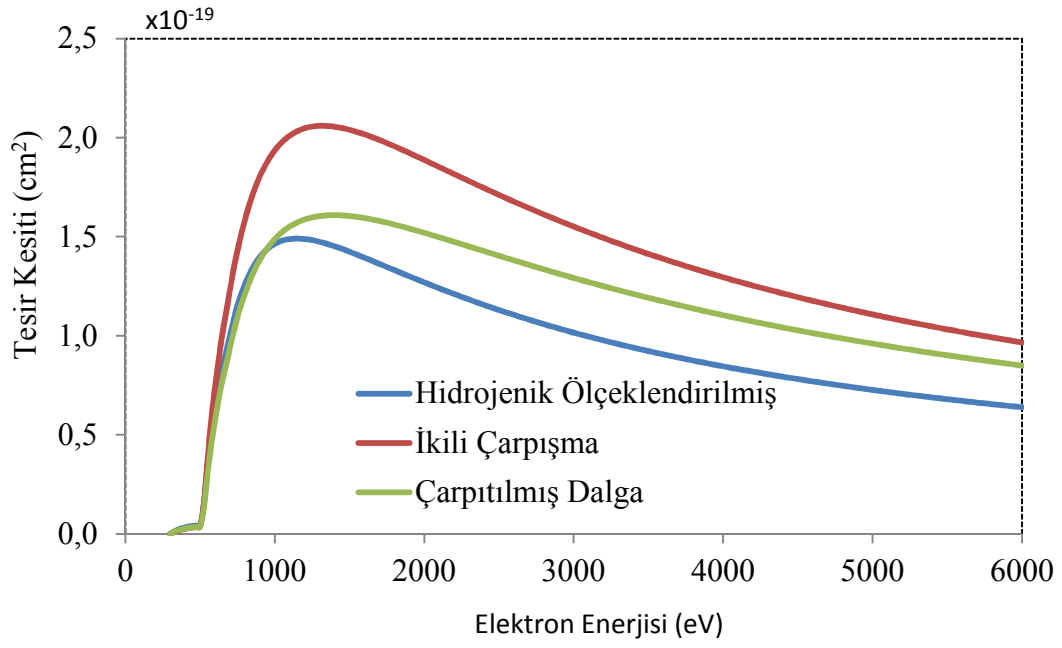
Elektron Enerjisi (eV)	Hidrojenik Ölçeklendirilmiş Tesir Kesiti ($\times 10^{-19}$)	İkili Çarpışma Tesir Kesiti ($\times 10^{-19}$)	Çarpıtılmış Dalga Tesir Kesiti ($\times 10^{-19}$)
3,0267E+02	6,3863E-03	4,4694E-03	5,2713E-03
3,5435E+02	8,0002E-01	6,0024E-01	6,6105E-01
4,1482E+02	1,2718E+00	1,0111E+00	1,0619E+00
4,8567E+02	1,5334E+00	1,2786E+00	1,2993E+00
5,6858E+02	1,6574E+00	1,4361E+00	1,4268E+00
6,6564E+02	1,6917E+00	1,5104E+00	1,4778E+00
7,7927E+02	1,6679E+00	1,5227E+00	1,4752E+00
9,1231E+02	1,6073E+00	1,4904E+00	1,4354E+00
1,0681E+03	1,5241E+00	1,4270E+00	1,3706E+00
1,2504E+03	1,4281E+00	1,3431E+00	1,2899E+00
1,4639E+03	1,3260E+00	1,2469E+00	1,2001E+00
1,7138E+03	1,2223E+00	1,1448E+00	1,1062E+00
2,0063E+03	1,1201E+00	1,0412E+00	1,0120E+00
2,3489E+03	1,0213E+00	9,3962E-01	9,1994E-01
2,7499E+03	9,2732E-01	8,4227E-01	8,3186E-01



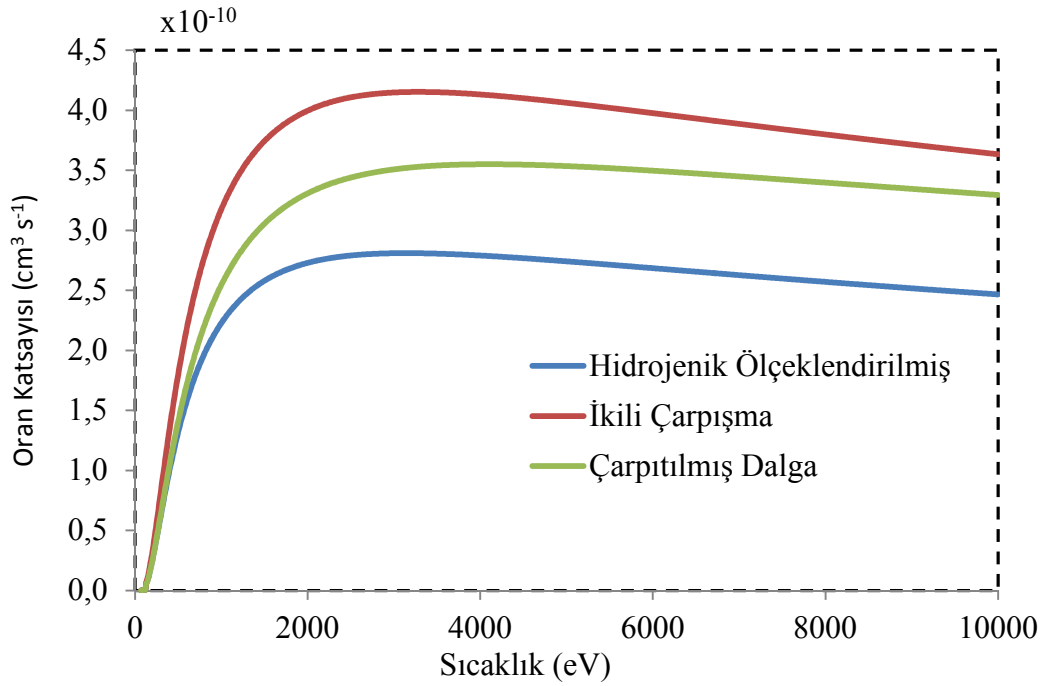
Şekil III. 2. 3. 1. Mo^{13+} iyonunun $4s^1\ ^2S_{0,5} \rightarrow 3s^2\ 3p^6\ 3d^{10}\ ^1S_{0,0}$ iyonlaşma kanalına ait hidrojenik ölçeklendirilmiş, çarpıtılmış dalga ve ikili karşılaşma yaklaşımlarında elde edilen kısmi tesir kesitleri.



Şekil III. 2. 3. 2. Mo^{13+} iyonunun $4s^1\ ^2S_{0,5} \rightarrow 3s^2\ 3p^6\ 3d^{10}\ ^1S_{0,0}$ iyonlaşma kanalına ait hidrojenik ölçeklendirilmiş, çarpıtılmış dalga ve ikili karşılaşma yaklaşımlarında elde edilen kısmi oran katsayıları.



Şekil III. 2. 3. 3. Mo¹³⁺ iyonunun 3s, 3p ve 3d alt kabuklarından kaynaklanan tüm LSJ kısmi iyonlaşma kanalları için elde edilen tesir kesitlerinin konfigürasyon ortalaması.



Şekil III. 2. 3. 4. Mo¹³⁺ iyonunun 3s, 3p ve 3d kabuklarından kaynaklanan tüm LSJ kısmi iyonlaşma kanalları için elde edilen oran katsayılarının konfigürasyon ortalaması.

III. 2. 4. Mo¹⁴⁺ İyonu İçin Hidrojenik Ölçeklendirilmiş, Çarpıtılmış Dalga ve İkili Karşılaşma Yaklaşımlarında Elde Edilen Sonuçlar

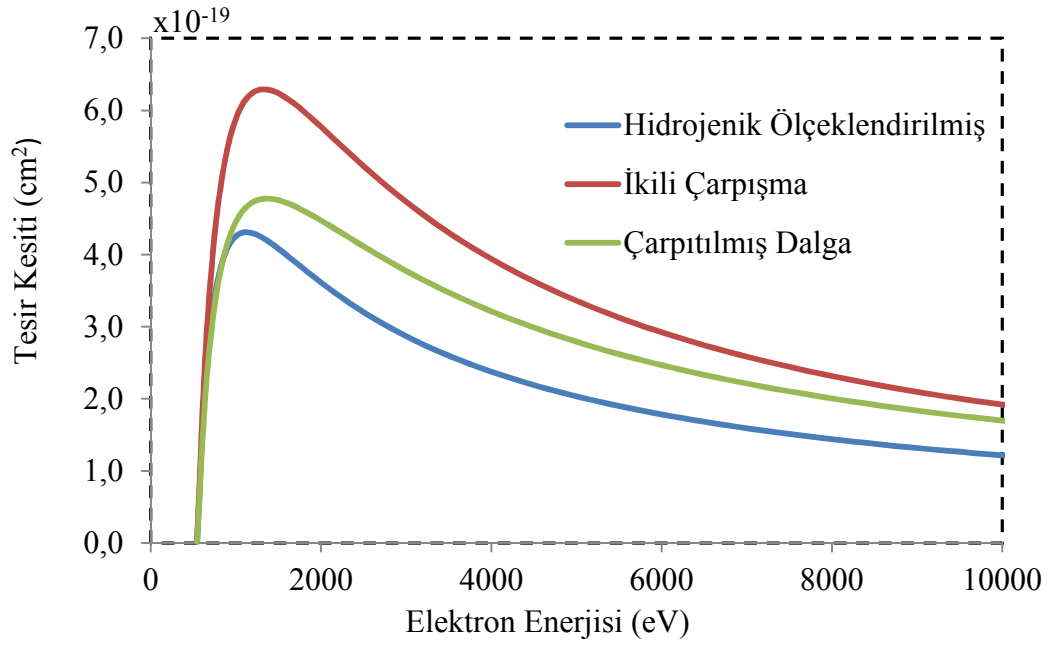
Mo¹⁴⁺ iyonun $3d^{10} {}^1S_{0,0} \rightarrow 3s^2 3p^6 ({}^1S)3d^9 ({}^2D)^2D_{2,5}$ kısmi iyonlaşma kanalı için elde edilen ve Tablo III. 2. 4. 1 etiketli tabloda listelenen tesir kesiti sonuçları Şekil III. 2. 4. 1. grafiklerle de gösterilmiştir.

Şekil III. 2. 4. 2.'de Mo¹⁴⁺ iyonunun ${}^1S_{0,0} \rightarrow 3s^2 3p^6 ({}^1S)3d^9 ({}^2D)^2D_{2,5}$ kısmi iyonlaşma kanalına ait hidrojenik ölçeklendirilmiş, çarpıtılmış dalga ve ikili karşılaşma yaklaşımlarında elde edilen kısmi oran katsayıları resmedilmiştir.

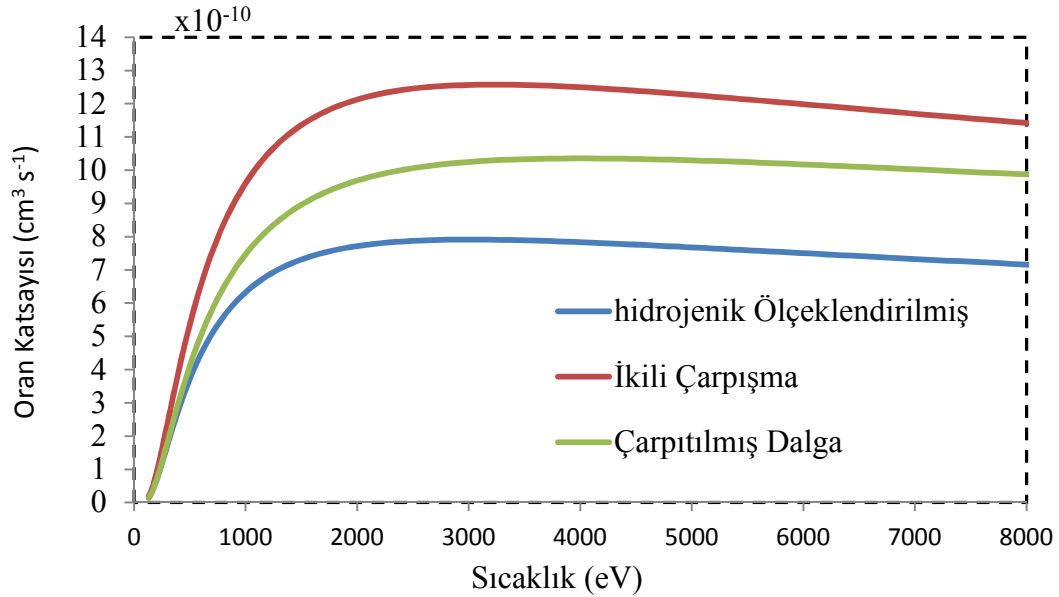
Şekil III. 2. 4. 3.'te ve Şekil III. 2. 4. 4.'te Mo¹⁴⁺ iyonunun 3s, 3p ve 3d alt kabuklarından kaynaklanan tüm LSJ kısmi iyonlaşma kanalları için elde edilen tesir kesitlerinin ve oran katsayılarının toplamaları resmedilmiştir.

Tablo III. 2. 4. 1. Mo¹⁴⁺ $3d^{10} {}^1S_{0,0} \rightarrow 3s^2 3p^6 ({}^1S)3d^9 ({}^2D)^2D_{2,5}$ kısmi iyonlaşma kanalına ait tesir kesiti değerleri.

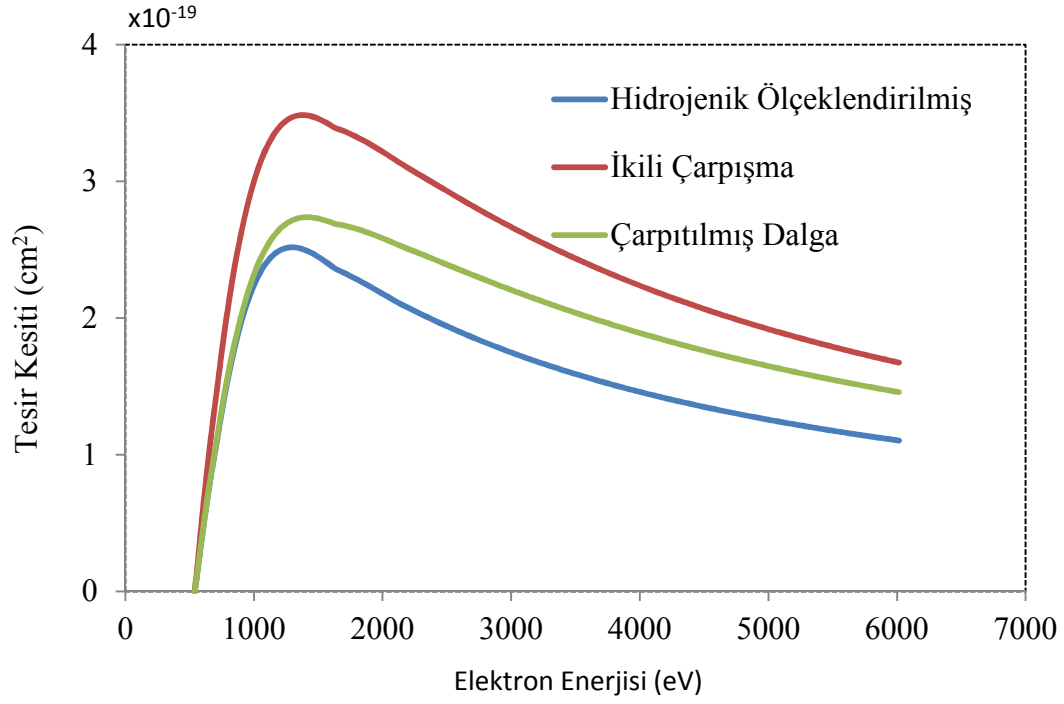
Elektron Enerjisi (eV)	Hidrojenik Ölçeklendirilmiş Tesir Kesiti (x10 ⁻¹⁹)	İkili Çarpışma Tesir Kesiti (x10 ⁻¹⁹)	Çarpıtılmış Dalga Tesir Kesiti (x10 ⁻¹⁹)
5,4330E+02	1,7290E-02	1,8761E-02	1,4998E-02
6,3606E+02	2,1453E+00	2,5074E+00	1,9698E+00
7,4461E+02	3,3712E+00	4,2098E+00	3,2462E+00
8,7178E+02	4,0112E+00	5,3092E+00	4,0415E+00
1,0206E+03	4,2735E+00	5,9491E+00	4,5017E+00
1,1948E+03	4,2955E+00	6,2431E+00	4,7243E+00
1,3988E+03	4,1684E+00	6,2813E+00	4,7742E+00
1,6376E+03	3,9526E+00	6,1349E+00	4,6974E+00
1,9172E+03	3,6881E+00	5,8604E+00	4,5291E+00
2,2445E+03	3,4012E+00	5,5018E+00	4,2968E+00
2,6277E+03	3,1090E+00	5,0936E+00	4,0229E+00
3,0762E+03	2,8226E+00	4,6616E+00	3,7253E+00
3,6014E+03	2,5487E+00	4,2252E+00	3,4182E+00
4,2162E+03	2,2913E+00	3,7985E+00	3,1121E+00
4,9360E+03	2,0524E+00	3,3911E+00	2,8148E+00



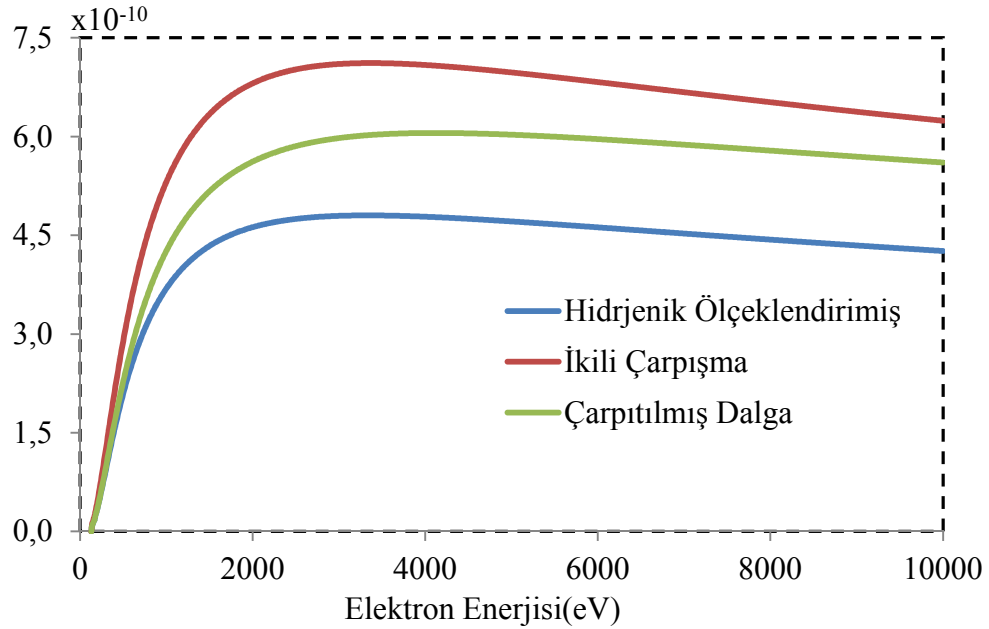
Şekil III. 2. 4. 1. Mo^{14+} iyonunun $3d^{10} \ ^1S_{0,0} \rightarrow 3s^2 3p^6 ({}^1S)3d^9 ({}^2D)^2D_{2,5}$ iyonlaşma kanalına ait hidrojenik ölçeklendirilmiş, çarpıtılmış dalga ve ikili karşılaşma yaklaşımlarında elde edilen kısmi tesir kesitleri.



Şekil III. 2. 4. 2. Mo^{14+} iyonun $3d^{10} \ ^1S_{0,0} \rightarrow 3s^2 3p^6 ({}^1S)3d^9 ({}^2D)^2D_{2,5}$ iyonlaşma kanalına ait hidrojenik ölçeklendirilmiş, çarpıtılmış dalga ve ikili karşılaşma yaklaşımlarında elde edilen kısmi oran katsayıları.



Şekil III. 2. 4. 3. Mo^{14+} iyonunun 3s, 3p ve 3d alt kabuklarından kaynaklanan tüm LSJ kısmi iyonlaşma kanalları için elde edilen tesir kesitlerinin konfigürasyon ortalaması.



Şekil III. 2. 4. 4. Mo^{14+} iyonunun 3s, 3p ve 3d alt kabuklarından kaynaklanan tüm LSJ kısmi iyonlaşma kanalları için elde edilen oran katsayılarının konfigürasyon ortalaması.

GIPPER programı çerçevesinde farklı yöntemlerle elde edilen sonuçların profil ve büyüklük bakımından birbirleriyle oldukça iyi uyum içerisinde oldukları görülmektedir. Bu sonuçlardan hangisinin en güvenilir olduğunun sorulması halinde cevabı kuantum mekanik temelinde oluşturabiliriz. Çarpıtılmış dalga yöntemi kuantum mekanik çerçevede oluşturulan birinci Born yaklaşımına dayanmaktadır. Ayrıca bu yöntem gelen, saçılan ve iyonlaşan elektronlara ait sürekli orbitallere saçılmaya neden olan gerçek potansiyel etkisini yansıtarak bu orbitallerin daha gerçekçi olmalarını sağlamaktadır. Bu yönleriyle güvenilirlik açısından yukarıdaki şekillerde verilen yeşil renkli eğrilerle temsil edile çarpıtılmış dalga sonuçlarının diğer sonuçlara göre daha üst düzeyde olduğunu düşünebiliriz.

KAYNAKLAR

- [1] H. Bethe: Ann. Phys. 5, 325 (1930),
- [2] Bethe, H. A.; Salpeter, E. E. Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms, New York: Academic Press, (1957).
- [3] <http://aphysics2.lanl.gov/tempweb/lanldocs/gipper.pdf>, R.E.H. Clark, J. Abdallah, Jr., J.B. Mann, Ap. J. Vol, 381, pg. 597 (1991)
- [4] Yong-Ki Kim and M. Eugene Rudd, Phys. Rev. A, Volume 50, Page 3954-3967, 1994
- [5] Bethe, H. A.; Salpeter, E. E. Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms, Springer-Verlag, Berlin, (1957)
- [6] N.F. Mott and H. S.W. Massey, The Theory of Atomic Collisions (Clarendon Press, Oxford, 1965), pp.489-490.
- [7] Michael S. Pindzola, Donald C. Griffin, and Christopher Bottcher in Atomic Processes in Electron-Ion Collisions, Edited by F. Brouillard, NATO ASI Series B: Physics, Vol. 145, Page 75
- [8] D H Sampson and L B Golden, J. Phys. B: Atom. Molec. Phys., Vol. 11, No. 3, (1978).
- [9] Gryziński M 1959 Physical Review 115 374.
- [10] Vriens L 1966 Physical Review 141 88, VRIENS, L., and BONSEN, T. F. M., 1968, J. Phys. B (Proc. Phys. Soc.), [2], 1, 1123-30.).
- [11] N.F. Mott, Proc. R. Soc. London Ser. A 126, 259 (1930)
- [12] Landau & E.M. Lifshitz Quantum Mechanics (Volume 3 of A Course of Theoretical Physics) Pergamon Press (1965).
- [13] Bensen T F M and Vriens L 1970 Physica 47 307; 1971 Physica 54 318.
- [14] Physical Review A Volume 50, Number 5 November 1994 Binary-encounter-dipole model for electron-impact ionization Yong-Ki Kim and M. Eugene Rudd.
- [15] L.I. Schiff. Quantum Mechanics. McGraw-Hill Book Company Inc., 1955.
- [16] B.H. Bransden and C.J. Joachain. Quantum Mechanics. Prentice Hall, 2nd edition, (2000).
- [17] E. Merzbacher. Quantum Mechanics. John Wiley and Sons Inc., (1970).

- [18] N.F. Mott and H.S.W. Massey. The Theory of Atomic Collisions. Oxford University Press. 3rd edition, (1965).
- [19] R.D. Cowan. Theory of Atomic Spectra, University of California Press, Berkeley, p563-569,(1981).
- [20] For the application of the close-coupling theory to electron-ion collisions, Adv. At. Mol. Phys. 11,83 (1975).
- [21] For a review of the R-matrix theory, see P.G.Burke in Atomic Physics 5, Eds., R. Marrus, M. Prior, and H. Schugart (Plenum, New York, 1977) p. 293.
- [22] For an extensive review of the theoretical methods for slow collisions, see B. H. Bransden, and M.R.C Mcdowell, Phys. Rep. 30, 207 (1977).
- [23] C.C.J. Roothaan, Rev. Mod. Phys. 23, 69,(1951); 32 179 (1960).
- [24] C. The Hartree-Fock Method for Atoms: A Numerical Approach, F Fischer - 1977, John Wiley and Sons, Inc.,(New York)
- [25] L. B. Golden ve D. H. Sampson, The Astrophysical Journal Supplement Series, 38: 19-28, (1978).
- [26] Electron impact ionisation results by the $Z=\infty$ method, D H Sampson and L B Golden, J. Phys. B: Atom. Molec. Phys., Vol. 11, No. 3, (1978).
- [27] J. Phys. B: Atom. Molec. Phys., Vol. 10, No. 11, (1977), J. Phys. B: Atom. Molec. Phys., Vol. 11, No. 3, (1978).
- [28] Omidvar K 1969 Phys. Rev. 177 Sayfa 211-218.
- [29] Eugen Merzbacher, Quantum Mechanics, John Wiley and Sons, Inc,3. Baskı, Sayfa 311.
- [30] John, C. Slater, Quantum Theory of Atomic Structure, Vol. I and II, McGraw Hill; 1st edition (1960).
- [31] Mitchel Weissbluth, Atoms and Molecules, Academic Press New York San Francisco London (1978)
- [32] Ingvar Lindgren and John Morrison , Atomic Many-Body Theory, 2nd ed., Springer (1986) .
- [33] B. H. Bransden and c_ J. Joachain, Physics of Atoms and Molecules, Prentice Hall, 2. Baskı (2003).

EKLER

Ek A: Plazmada meydana gelebilecek atomik süreçler.

Ek B: Mo^{10+} iyonunun 3s kabuğuna ait dallanma oran tablosu, Mo^{10+} iyonunun 3p kabuğuna ait dallanma oran tablosu, Mo^{10+} iyonunun 3d kabuğuna ait dallanma oran tablosu, Mo^{+10} iyonunun taban konfigürasyonuna ait enerji seviyeleri ve Mo^{+10} iyonunun 3s, 3p, 3d, 4s ve 4p alt kabuklarından birer elektron iyonlaşması sonucu geride kalan iyonik hallere ait LSJ seviyeleri.

Ek C: Mo^{11+} iyonunun 3s kabuğuna ait dallanma oran tablosu, Mo^{11+} iyonunun 3p kabuğuna ait dallanma oran tablosu, Mo^{11+} iyonunun 3d kabuğuna ait dallanma oran tablosu, Mo^{+11} iyonunun taban konfigürasyonuna ait enerji seviyeleri ve Mo^{11+} iyonunun 3s, 3p, 3d, 4s ve 4p alt kabuklarından birer elektron iyonlaşması sonucu geride kalan iyonik hallere ait LSJ seviyeleri.

Ek D: Mo^{12+} iyonunun 3s kabuğuna ait dallanma oran tablosu, Mo^{12+} iyonunun 3p kabuğuna ait dallanma oran tablosu, Mo^{12+} iyonunun 3d kabuğuna ait dallanma oran tablosu, Mo^{12+} iyonunun taban konfigürasyonuna ait enerji seviyeleri ve Mo^{12+} iyonunun 3s, 3p, 3d ve 4s alt kabuklarından birer elektron iyonlaşması sonucu geride kalan iyonik hallere ait LSJ seviyeleri.

Ek E: Mo^{13+} iyonunun 3s kabuğuna ait dallanma oran tablosu, Mo^{13+} iyonunun 3p kabuğuna ait dallanma oran tablosu, Mo^{13+} iyonunun 3d kabuğuna ait dallanma oran tablosu ve Mo^{13+} iyonunun taban konfigürasyonuna ait enerji seviyeleri. Mo^{14+} iyonunun 3s kabuğuna ait dallanma oran tablosu, Mo^{14+} iyonunun 3p kabuğuna ait dallanma oran tablosu, Mo^{14+} iyonunun taban konfigürasyonuna ait enerji seviyeleri ve Mo^{14+} iyonunun 3s, 3p ve 3d alt kabuklarından birer elektron iyonlaşması sonucu geride kalan iyonik hallere ait LSJ seviyeleri.

Ek A.

Plazmada meydana gelebilecek atomik süreçler.

Tablo A. 1. Plazmada meydana gelebilecek atomik süreçler.

Reaksiyon Adı	Örnek Reaksiyon
Kırılma Işıması (Bremsstrahlung)	$X^{+q} + e_i^- \Rightarrow X^{+q} + e_f^- + h\nu$
Elektron Çarpmalı İyonlaşma (Electron Impact (Collisional) İonization)	$X^{+q} + e_i^- \Rightarrow X^{+(q+1)} + e_f^- + e_k^-$
Üç Cisim Rekombinasyon (Three Body Recombination)	$X^{+(q+1)} + 2e_i^- \Rightarrow X^{+q} + e_f^-$
Foto-İyonlaşma (Photo-Ionization)	$X^{+q} + h\nu \Rightarrow X^{+(q+1)} + e_f^-$
Işımalı Rekombinasyon (Radiative Recombination)	$X^{+(q+1)} + e_i^- \Rightarrow X^{+q} + h\nu$
Oto-İyonlaşma (Auto-Ionization)	$X^{+q**} \Rightarrow X^{+(q+1)} + e_f^-$ $1s2nl \Rightarrow 1s^2 + e_f^-$
Dielektronik Rekombinasyon (Di-Electronic Recombination)	$X^{+(q+1)} + e_i^- \Rightarrow X^{+q**} \Rightarrow X^{+q*} + h\nu$
Uyarılmalı-Oto iyonlaşma (Excitation-Autoionization)	$X^{+q} + h\nu \Rightarrow X^{+q**} \Rightarrow X^{+(q+1)} + e_f^-$
Elektron Çarpmalı (Electron Impact)	$X^{+q} + e_i^- \Rightarrow X^{+q**} + e_f^-$ $\Rightarrow X^{+(q+1)} + e_l^- + e_k^-$
Kendiliğinden Foton Emisyon (Spontaneous Photon (Line) Emission)	$X^{+q*} \Rightarrow X^{+q} + h\nu$

Tablo A. 1. devamı

Foton-Uyarma (Photo-Excitation)	$X^{+q} + h\nu \Rightarrow X^{+q*}$
Uyarmalı Foton Emisyon (Induced Photon Emission)	$X^{+q*} + h\nu \Rightarrow X^{+q} + 2h\nu$
Elektron Çarpmalı Uyarılma (Electron İmpact (Collisional) Excitation)	$X^{+q} + e_i^- \Rightarrow X^{+q*} + e_f^-$
Elektron Çarpmalı Durulma (Electron İmpact De-Excitation)	$X^{+q*} + e_i^- \Rightarrow X^{+q} + e_f^-$
Dielektronik Yakalama Aracılığıyla Rezonans Uyarma (Resonant Excitation Via Di- Electronic Capture)	$X^{+q*} + e_i^- \Rightarrow X^{+q**} \Rightarrow X^{+(q+1)*} + e_f^-$

Ek B.

Mo¹⁰⁺ iyonunun 3s kabuğuna ait dallanma oran tablosu, Mo¹⁰⁺ iyonunun 3p kabuğuna ait dallanma oran tablosu, Mo¹⁰⁺ iyonunun 3d kabuğuna ait dallanma oran tablosu, Mo⁺¹⁰ iyonunun taban konfigürasyonuna ait enerji seviyeleri ve Mo⁺¹⁰ iyonunun 3s, 3p, 3d, 4s ve 4p alt kabuklarından birer elektron iyonlaşması sonucu geride kalan iyonik hallere ait LSJ seviyeleri.

Tablo B. 1. Mo¹⁰⁺ iyonun 3s kabuğuna ait dallanma oran tablosu.

Dallanma Oranı (3s kabuğundan iyonlaşma için)	Oluşan Oto-İyonlaşmalı Halleri (3s kabuğunun uyarılması sonucu)
9.9843E-01	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ³
9.9212E-01	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ² 4d ¹
9.8342E-01	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ² 4f ¹
9.9905E-01	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ² 5s ¹
8.9813E-01	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ² 5p ¹
9.8550E-01	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ² 5d ¹
9.6802E-01	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ² 5f ¹
9.9783E-01	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ² 6s ¹
8.7696E-01	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ² 6p ¹
9.7062E-01	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ² 6d ¹
9.2979E-01	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ² 6f ¹
9.9523E-01	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ² 7s ¹
8.6644E-01	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ² 7p ¹
9.4086E-01	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ² 7d ¹
8.3002E-01	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ² 7f ¹

Tablo B. 2. Mo^{10+} iyonun 3p kabuğuna ait dallanma oran tablosu.

Dallanma Oranı (3p kabuğundan iyonlaşma için)	Oluşan Oto-İyonlaşmalı Halleri (3p kabuğunun uyarılması sonucu)
9.9980E-01	$3s^2 3p^5 3d^{10} 4s^2 4p^3$
9.9398E-01	$3s^2 3p^5 3d^{10} 4s^2 4p^2 4d^1$
9.9872E-01	$3s^2 3p^5 3d^{10} 4s^2 4p^2 4f^1$
9.8839E-01	$3s^2 3p^5 3d^{10} 4s^2 4p^2 5s^1$
9.9910E-01	$3s^2 3p^5 3d^{10} 4s^2 4p^2 5p^1$
9.9276E-01	$3s^2 3p^5 3d^{10} 4s^2 4p^2 5d^1$
9.9856E-01	$3s^2 3p^5 3d^{10} 4s^2 4p^2 5f^1$
9.8843E-01	$3s^2 3p^5 3d^{10} 4s^2 4p^2 6s^1$
9.9847E-01	$3s^2 3p^5 3d^{10} 4s^2 4p^2 6p^1$
9.9245E-01	$3s^2 3p^5 3d^{10} 4s^2 4p^2 6d^1$
9.9775E-01	$3s^2 3p^5 3d^{10} 4s^2 4p^2 6f^1$
9.8730E-01	$3s^2 3p^5 3d^{10} 4s^2 4p^2 7s^1$
9.9646E-01	$3s^2 3p^5 3d^{10} 4s^2 4p^2 7p^1$
9.9099E-01	$3s^2 3p^5 3d^{10} 4s^2 4p^2 7d^1$
9.9501E-01	$3s^2 3p^5 3d^{10} 4s^2 4p^2 7f^1$

Tablo B. 3. Mo¹⁰⁺ iyonun 3d kabuğuna ait dallanma oran tablosu.

Dallanma Oranı (3d kabuğundan iyonlaşma için)	Oluşan Oto-İyonlaşmalı Halleri (3d kabuğunun uyarılması sonucu)
9.9792E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 4p ³
9.9929E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 4p ² 4d ¹
9.8124E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 4p ² 4f ¹
9.8791E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 4p ² 5s ¹
9.7818E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 4p ² 5p ¹
9.9796E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 4p ² 5d ¹
9.7313E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 4p ² 5f ¹
9.7844E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 4p ² 6s ¹
9.6664E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 4p ² 6p ¹
9.9561E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 4p ² 6d ¹
9.6967E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 4p ² 6f ¹
9.5848E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 4p ² 7s ¹
9.3820E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 4p ² 7p ¹
9.8939E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 4p ² 7d ¹
9.6138E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 4p ² 7f ¹

Tablo B. 4. Mo¹⁰⁺ iyonunun taban konfigürasyonuna ait enerji seviyeleri.

Göreceli Enerji Öz Değerleri (eV)	LSJ Enerji Seviyeleri
0.0000e+00	[ArI]3d ¹⁰ 4s ² 4p ² (³ P) ³ P _{0,0}
2.0661e+00	[ArI]3d ¹⁰ 4s ² 4p ² (³ P) ³ P _{1,0}
3.2631e+00	[ArI]3d ¹⁰ 4s ² 4p ² (³ P) ³ P _{2,0}
6.6501e+00	[ArI]3d ¹⁰ 4s ² 4p ² (¹ D) ¹ D _{2,0}
1.0477e+01	[ArI]3d ¹⁰ 4s ² 4p ² (¹ S) ¹ S _{0,0}

Tablo B. 5. Mo¹⁰⁺ iyonunun 3s, 3p, 3d, 4s ve 4p alt kabuklarından birer elektron iyonlaşması sonucu geride kalan iyonik hallere ait LSJ seviyeleri.

Sıra No	İyonlaşma Eşik Enerjileri (eV)	İyonik Konfigürasyon
1	2.0897e+02	[NeI] 3s ² 3p ⁶ d ¹⁰ 4s ² (¹ S) 4p ¹ (² P) ² P _{0.5}
1	2.1237e+02	[NeI] 3s ² 3p ⁶ d ¹⁰ 4s ² (¹ S) 4p ¹ (² P) ² P _{1.5}
3	2.3244e+02	[NeI] 3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ¹ (² S) 4p ² (³ P) ⁴ P _{0.5}
4	2.3404e+02	[NeI] 3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ¹ (² S) 4p ² (³ P) ⁴ P _{1.5}
5	2.3562e+02	[NeI] 3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ¹ (² S) 4p ² (³ P) ⁴ P _{2.5}
6	2.4199e+02	[NeI] 3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ¹ (² S) 4p ² (¹ D) ² D _{1.5}
7	2.4262e+02	[NeI] 3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ¹ (² S) 4p ² (¹ D) ² D _{2.5}
8	2.4537e+02	[NeI] 3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ¹ (² S) 4p ² (¹ S) ² S _{0.5}
9	2.4894e+02	[NeI] 3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ¹ (² S) 4p ² (³ P) ² P _{0.5}
10	2.5022e+02	[NeI] 3s ² 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ¹ (² S) 4p ² (³ P) ² P _{1.5}
11	4.2676e+02	[NeI] 3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² (² D) 4p ² (³ P) ⁴ D _{2.5}
12	4.2856e+02	[NeI] 3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² (² D) 4p ² (³ P) ⁴ D _{3.5}
13	4.2893e+02	[NeI] 3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² (² D) 4p ² (³ P) ⁴ D _{1.5}
14	4.2989e+02	[NeI] 3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² (² D) 4p ² (³ P) ² F _{2.5}
15	4.3050e+02	[NeI] 3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² (² D) 4p ² (³ P) ⁴ F _{4.5}
16	4.3067e+02	[NeI] 3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² (² D) 4p ² (³ P) ⁴ D _{0.5}
17	4.3081e+02	[NeI] 3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² (² D) 4p ² (¹ D) ² P _{1.5}
18	4.3086e+02	[NeI] 3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² (² D) 4p ² (³ P) ⁴ F _{3.5}
19	4.3096e+02	[NeI] 3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² (² D) 4p ² (³ P) ⁴ P _{2.5}
20	4.3126e+02	[NeI] 3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² (² D) 4p ² (³ P) ² D _{1.5}
21	4.3183e+02	[NeI] 3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² (² D) 4p ² (¹ D) ² S _{0.5}
22	4.3273e+02	[NeI] 3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² (² D) 4p ² (³ P) ⁴ F _{1.5}
23	4.3292e+02	[NeI] 3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² (² D) 4p ² (³ P) ⁴ F _{2.5}
24	4.3385e+02	[NeI] 3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² (² D) 4p ² (¹ D) ² G _{3.5}
25	4.3391e+02	[NeI] 3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² (² D) 4p ² (¹ D) ² P _{0.5}
26	4.3392e+02	[NeI] 3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² (² D) 4p ² (¹ D) ² F _{2.5}

Tablo B. 5. Devamı

27	4.3394e+02	[NeI]3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² (² D)4p ² (¹ D) ² G _{4.5}
28	4.3461e+02	[NeI]3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² (² D)4p ² (³ P) ⁴ P _{1.5}
29	4.3495e+02	[NeI]3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² (² D)4p ² (³ P) ² P _{0.5}
30	4.3508e+02	[NeI]3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² (² D)4p ² (¹ D) ² F _{3.5}
31	4.3560e+02	[NeI]3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² (² D)4p ² (³ P) ² P _{1.5}
32	4.3565e+02	[NeI]3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² (² D)p ² (¹ D) ² D _{2.5}
33	4.3728e+02	[NeI]3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² (² D)4p ² (³ P) ⁴ P _{0.5}
34	4.3733e+02	[NeI]3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² (² D)4p ² (¹ D) ² D _{1.5}
35	4.3763e+02	[NeI]3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² (² D)4p ² (³ P) ² F _{3.5}
36	4.3820e+02	[NeI]3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² (² D)4p ² (¹ S) ² D _{2.5}
37	4.3934e+02	[NeI]3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² (² D)4p ² (³ P) ² D _{2.5}
38	4.4221e+02	[NeI]3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² (² D)4p ² (¹ S) ² D _{1.5}
39	5.9494e+02	[NeI]3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² (² P)4p ² (³ P) ⁴ P _{1.5}
40	5.9677e+02	[NeI]3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² (² P)4p ² (³ P) ⁴ P _{2.5}
41	5.9737e+02	[NeI]3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² (² P)4p ² (³ P) ⁴ P _{0.5}
42	5.9807e+02	[NeI]3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² (² P)4p ² (³ P) ² D _{1.5}
43	5.9862e+02	[NeI]3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² (² P)4p ² (³ P) ⁴ D _{3.5}
44	5.9901e+02	[NeI]3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² (² P)4p ² (³ P) ⁴ S _{1.5}
45	5.9915e+02	[NeI]3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² (² P)4p ² (³ P) ² D _{2.5}
46	6.0167e+02	[NeI]3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² (² P)4p ² (³ P) ² S _{0.5}
47	6.0219e+02	[NeI]3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² (² P)4p ² (¹ D) ² F _{3.5}
48	6.0316e+02	[NeI]3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² (² P)4p ² (¹ D) ² D _{2.5}
49	6.0389e+02	[NeI]3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² (² P)4p ² (¹ D) ² P _{0.5}
50	6.0628e+02	[NeI]3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² (² P)4p ² (¹ D) ² D _{1.5}
51	6.0718e+02	[NeI]3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² (² P)4p ² (¹ S) ² P _{1.5}
52	6.1506e+02	[NeI]3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² (² P)4p ² (³ P) ⁴ D _{0.5}
53	6.1530e+02	[NeI]3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² (² P)4p ² (³ P) ² P _{0.5}
54	6.1577e+02	[NeI]3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² (² P)4p ² (³ P) ⁴ D _{1.5}
55	6.1678e+02	[NeI]3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² (² P)4p ² (³ P) ⁴ D _{2.5}

Tablo B. 5. Devamı

56	6.1945e+02	$[\text{NeI}]3s^23p^53d^{10}4s^2(^2P)4p^2(^3P)^2P_{1.5}$
57	6.2067e+02	$[\text{NeI}]3s^23p^53d^{10}4s^2(^2P)4p^2(^1D)^2F_{2.5}$
58	6.2140e+02	$[\text{NeI}]3s^23p^53d^{10}4s^2(^2P)4p^2(^1D)^2P_{1.5}$
59	6.2470e+02	$[\text{NeI}]3s^23p^53d^{10}4s^2(^2P)4p^2(^1S)^2P_{0.5}$
60	7.0821e+02	$[\text{NeI}]3s^13p^63d^{10}4s^2(^2S)4p^2(^3P)^4P_{0.5}$
61	7.1028e+02	$[\text{NeI}]3s^13p^63d^{10}4s^2(^2S)4p^2(^3P)^4P_{1.5}$
62	7.1157e+02	$[\text{NeI}]3s^13p^63d^{10}4s^2(^2S)4p^2(^3P)^4P_{2.5}$
63	7.1166e+02	$[\text{NeI}]3s^13p^63d^{10}4s^2(^2S)4p^2(^3P)^2P_{0.5}$
64	7.1280e+02	$[\text{NeI}]3s^13p^63d^{10}4s^2(^2S)4p^2(^3P)^2P_{1.5}$
65	7.1555e+02	$[\text{NeI}]3s^13p^63d^{10}4s^2(^2S)4p^2(^1D)^2D_{2.5}$
66	7.1613e+02	$[\text{NeI}]3s^13p^63d^{10}4s^2(^2S)4p^2(^1D)^2D_{1.5}$
67	7.1973e+02	$[\text{NeI}]3s^13p^63d^{10}4s^2(^2S)4p^2(^1S)^2S_{0.5}$

Ek C.

Mo¹¹⁺ iyonunun 3s kabuğuna ait dallanma oran tablosu, Mo¹¹⁺ iyonunun 3p kabuğuna ait dallanma oran tablosu, Mo¹¹⁺ iyonunun 3d kabuğuna ait dallanma oran tablosu, Mo¹¹⁺ iyonunun taban konfigürasyonuna ait enerji seviyeleri ve Mo¹¹⁺ iyonunun 3s, 3p, 3d, 4s ve 4p alt kabuklarından birer elektron iyonlaşması sonucu geride kalan iyonik hallere ait LSJ seviyeleri.

Tablo C. 1. Mo¹¹⁺ iyonun 3s kabuğuna ait dallanma oran tablosu.

Dallanma Oranı (3s kabuğundan iyonlaşma için)	Oluşan Oto-İyonlaşmalı Halleri (3s kabuğunun uyarılması sonucu)
9.9815E+01	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ²
9.9341E+01	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹ 4d ¹
9.8806E+01	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹ 4f ¹
9.9920E+01	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹ 5s ¹
8.3093E+01	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹ 5p ¹
9.8865E+01	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹ 5d ¹
9.7216E+01	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹ 5f ¹
9.9833E+01	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹ 6s ¹
7.9450E+01	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹ 6p ¹
9.7720E+01	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹ 6d ¹
9.3654E+01	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹ 6f ¹
9.9627E+01	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹ 7s ¹
8.0115E+01	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹ 7p ¹
9.5190E+01	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹ 7d ¹
8.2547E+01	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹ 7f ¹

Tablo C. 2. Mo¹¹⁺ iyonun 3p kabuğuna ait dallanma oran tablosu.

Dallanma Oranı (3p kabuğundan iyonlaşma için)	Oluşan Oto-İyonlaşmalı Halleri (3p kabuğunun uyarılması sonucu)
9.9976E+01	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ²
9.8845E+01	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹ 4d ¹
9.9903E+01	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹ 4f ¹
9.7935E+01	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹ 5s ¹
9.9927E+01	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹ 5p ¹
9.8617E+01	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹ 5d ¹
9.9892E+01	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹ 5f ¹
9.7995E+01	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹ 6s ¹
9.9870E+01	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹ 6p ¹
9.8601E+01	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹ 6d ¹
9.9831E+01	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹ 6f ¹
9.7970E+01	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹ 7s ¹
9.9710E+01	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹ 7p ¹
9.8415E+01	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹ 7d ¹
9.9618E+01	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹ 7f ¹

Tablo C. 3. Mo¹¹⁺ iyonun 3d kabuğuna ait dallanma oran tablosu.

Dallanma Oranı (3d kabuğundan iyonlaşma için)	Oluşan Oto-İyonlaşmalı Halleri (3d kabuğunun uyarılması sonucu)
0.0000E+00	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 4p ²
9.9943E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 4p ¹ 4d ¹
9.6173E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 4p ¹ 4f ¹
9.8896E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 4p ¹ 5s ¹
9.7109E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 4p ¹ 5p ¹
9.9830E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 4p ¹ 5d ¹
9.4444E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 4p ¹ 5f ¹
9.8012E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 4p ¹ 6s ¹
9.6061E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 4p ¹ 6p ¹
9.9625E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 4p ¹ 6d ¹
9.3919E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 4p ¹ 6f ¹
9.6218E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 4p ¹ 7s ¹
9.3796E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 4p ¹ 7p ¹
9.9114E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 4p ¹ 7d ¹
9.3162E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 4p ¹ 7f ¹

Tablo C. 4. Mo¹¹⁺ iyonunun taban konfigürasyonuna ait enerji seviyeleri.

Göreceli Enerji Öz Değerleri (eV)	LSJ Enerji Seviyeleri
0.0000e+00	[[ArI] 3d ¹⁰ 4s ² (4p ¹ P) ² P _{0.5}
3.3994e+00	[ArI] 3d ¹⁰ 4s ² (4p ¹ ² P) ² P _{1.5}

Tablo C. 5. Mo¹¹⁺ iyonunun 3s, 3p, 3d, 4s ve 4p alt kabuklarından birer elektron iyonlaşması sonucu geride kalan iyonik hallere ait LSJ seviyeleri.

İyonlaşma Eşik Enerjileri (eV)	İyonik Konfigürasyon
2.3072e+02	[ArI](3d ¹⁰ (¹ S) 4s ² (¹ S) ¹ S _{0,0}
2.5436e+02	[ArI]3d ¹⁰ 4s ¹ (² S)4p ¹ (² P) ³ P _{0,0}
2.5529e+02	[ArI]3d ¹⁰ 4s ¹ (² S)4p ¹ (² P) ³ P _{1,0}
2.5791e+02	[ArI]3d ¹⁰ 4s ¹ (² S)4p ¹ (² P) ³ P _{2,0}
2.6669e+02	[ArI]3d ¹⁰ 4s ¹ (² S)4p ¹ (² P) ¹ P _{1,0}
4.5393e+02	[ArI]3d ⁹ 4s ² (² D)4p ¹ (² P) ³ P _{2,0}
4.5453e+02	[ArI]3d ⁹ 4s ² (² D)4p ¹ (² P) ³ F _{3,0}
4.5733e+02	[ArI]3d ⁹ 4s ² (² D)4p ¹ (² P) ³ F _{2,0}
4.5746e+02	[ArI]3d ⁹ 4s ² (² D)4p ¹ (² P) ³ P _{1,0}
4.5767e+02	[ArI]3d ⁹ 4s ² (² D)4p ¹ (² P) ³ F _{4,0}
4.5876e+02	[ArI]3d ⁹ 4s ² (² D)4p ¹ (² P) ¹ D _{2,0}
4.5920e+02	[ArI]3d ⁹ 4s ² (² D)4p ¹ (² P) ³ D _{3,0}
4.5940e+02	[ArI]3d ⁹ 4s ² (² D)4p ¹ (² P) ¹ P _{1,0}
4.5994e+02	[ArI]3d ⁹ 4s ² (² D)4p ¹ (² P) ³ P _{0,0}
4.6144e+02	[ArI]3d ⁹ 4s ² (² D)4p ¹ (² P) ¹ F _{3,0}
4.6180e+02	[ArI]3d ⁹ 4s ² (² D)4p ¹ (² P) ³ D _{1,0}
4.6234e+02	[ArI]3d ⁹ 4s ² (² D)4p ¹ (² P) ³ D _{2,0}

Ek D.

Mo¹²⁺ iyonunun 3s kabuğuna ait dallanma oran tablosu, Mo¹²⁺ iyonunun 3p kabuğuna ait dallanma oran tablosu, Mo¹²⁺ iyonunun 3d kabuğuna ait dallanma oran tablosu, Mo¹²⁺ iyonunun taban konfigürasyonuna ait enerji seviyeleri ve Mo¹²⁺ iyonunun 3s, 3p, 3d ve 4s alt kabuklarından birer elektron iyonlaşması sonucu geride kalan iyonik hallere ait LSJ seviyeleri.

Tablo D. 1. Mo¹²⁺ iyonun 3s kabuğuna ait dallanma oran tablosu.

Dallanma Oranı (3s kabuğundan iyonlaşma için)	Oluşan Oto-İyonlaşmalı Halleri (3s kabuğunun uyarılması sonucu)
9.9323E-01	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹
1.0000E+00	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4d ¹
1.0000E+00	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 4f ¹
1.0000E+00	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 5s ¹
9.9193E-01	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 5p ¹
1.0000E+00	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 5d ¹
1.0000E+00	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 5f ¹
1.0000E+00	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 6s ¹
9.9165E-01	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 6p ¹
1.0000E+00	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 6d ¹
1.0000E+00	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 6f ¹
1.0000E+00	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 7s ¹
9.9146E-01	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 7p ¹
1.0000E+00	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 7d ¹
1.0000E+00	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ² 7f ¹

Tablo D. 2. Mo¹²⁺ iyonun 3p kabuğuna ait dallanma oran tablosu.

Dallanma Oranı (3p kabuğundan iyonlaşma için)	Oluşan Oto-İyonlaşmalı Halleri (3p kabuğunun uyarılması sonucu)
1.0000E+00	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² 4p ¹
9.1742E-01	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² 4d ¹
1.0000E+00	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² 4f ¹
9.3383E-01	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² 5s ¹
1.0000E+00	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² 5p ¹
8.6747E-01	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² 5d ¹
1.0000E+00	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² 5f ¹
9.2683E-01	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² 6s ¹
1.0000E+00	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² 6p ¹
8.4030E-01	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² 6d ¹
1.0000E+00	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² 6f ¹
9.2280E-01	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² 7s ¹
1.0000E+00	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² 7p ¹
8.2491E-01	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² 7d ¹
1.0000E+00	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ² 7f ¹

Tablo D. 3. Mo¹²⁺ iyonun 3d kabuğuna ait dallanma oran tablosu.

Dallanma Oranı (3d kabuğundan iyonlaşma için)	Oluşan Oto-İyonlaşmalı Halleri (3d kabuğunun uyarılması sonucu)
0.0000E+00	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 4p ¹
1.0000E+00	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 4d ¹
9.9978E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 4f ¹
1.0000E+00	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 5s ¹
9.9999E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 5p ¹
1.0000E+00	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 5d ¹
9.9985E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 5f ¹
1.0000E+00	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 6s ¹
9.9999E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 6p ¹
1.0000E+00	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 6d ¹
9.9989E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 6f ¹
1.0000E+00	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 7s ¹
9.9999E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 7p ¹
1.0000E+00	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 7d ¹
9.9990E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ² 7f ¹

Tablo D.4 Mo¹²⁺ iyonunun taban konfigürasyonuna ait enerji seviyeleri.

Göreceli Enerji Öz Değerleri (eV)	LSJ Enerji Seviyeleri
0.0000e+00	[ArI]3d ¹⁰ 4s ² (¹ S) ¹ S _{0,0}

Tablo D. 5. Mo^{+12} iyonunun 3s, 3p, 3d ve 4s alt kabuklarından birer elektron iyonlaşması sonucu geride kalan iyonik hallere ait LSJ seviyeleri.

İyonlaşma Eşik Enerjileri (eV)	İyonik Konfigürasyon
2.7773e+02	$[\text{NeI}]3s^23p^63d^{10}(^1\text{S})4s^1(^2\text{S})^2\text{S}_{0.5}$
4.8275e+02	$[\text{NeI}]3s^23p^63d^9(^2\text{D})4s^2(^1\text{S})^2\text{D}_{2.5}$
4.8604e+02	$[\text{NeI}]3s^23p^63d^9(^2\text{D})4s^2(^1\text{S})^2\text{D}_{1.5}$
6.5061e+02	$[\text{NeI}]3s^23p^53d^{10}(^2\text{P})4s^2(^1\text{S})^2\text{P}_{1.5}$
6.6859e+02	$[\text{NeI}]3s^23p^53d^{10}(^2\text{P})4s^2(^1\text{S})^2\text{P}_{0.5}$
7.6364e+02	$[\text{NeI}]3s^13p^63d^{10}(^2\text{S})4s^2(^1\text{S})^2\text{S}_{0.5}$

Ek E.

Mo¹³⁺ iyonunun 3s kabuğuna ait dallanma oran tablosu, Mo¹³⁺ iyonunun 3p kabuğuna ait dallanma oran tablosu, Mo¹³⁺ iyonunun 3d kabuğuna ait dallanma oran tablosu ve Mo¹³⁺ iyonunun taban konfigürasyonuna ait enerji seviyeleri. Mo¹⁴⁺ iyonunun 3s kabuğuna ait dallanma oran tablosu, Mo¹⁴⁺ iyonunun 3p kabuğuna ait dallanma oran tablosu, Mo¹⁴⁺ iyonunun taban konfigürasyonuna ait enerji seviyeleri ve Mo¹⁴⁺ iyonunun 3s, 3p ve 3d alt kabuklarından birer elektron iyonlaşması sonucu geride kalan iyonik hallere ait LSJ seviyeleri.

Tablo E. 1. Mo¹³⁺ iyonun 3s kabuğuna ait dallanma oran tablosu.

Dallanma Oranı (3s kabuğundan iyonlaşma için)	Oluşan Oto-İyonlaşmalı Halleri (3s kabuğunun uyarılması sonucu)
1.0000E+00	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ²
9.8614E-01	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ¹ 4p ¹
1.0000E+00	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ¹ 4d ¹
1.0000E+00	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ¹ 5f ¹
1.0000E+00	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ¹ 5p ¹
9.8396E-01	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ¹ 5d ¹
1.0000E+00	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ¹ 5f ¹
1.0000E+00	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ¹ 6p ¹
1.0000E+00	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ¹ 6d ¹
9.8366E-01	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ¹ 6f ¹
1.0000E+00	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ¹ 7p ¹
1.0000E+00	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ¹ 7d ¹
1.0000E+00	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ¹ 7f ¹
9.8340E-01	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ¹
1.0000E+00	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ¹
1.0000E+00	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ¹

Tablo E. 2. Mo¹³⁺ iyonun 3p kabuğuna ait dallanma oran tablosu.

Dallanma Oranı (3p kabuğundan iyonlaşma için)	Oluşan Oto-İyonlaşmalı Halleri (3p kabuğunun uyarılması sonucu)
1.0000E+00	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ²
1.0000E+00	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ¹ 4p ¹
8.4102E-01	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ¹ 4d ¹
1.0000E+00	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ¹ 4f ¹
8.7761E-01	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ¹ 5p ¹
1.0000E+00	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ¹ 5d ¹
7.5101E-01	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ¹ 5f ¹
1.0000E+00	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ¹ 6p ¹
8.6372E-01	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ¹ 6d ¹
1.0000E+00	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ¹ 6f ¹
7.0330E-01	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ¹ 7p ¹
1.0000E+00	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ¹ 7d ¹
8.5613E-01	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ¹ 7f ¹
1.0000E+00	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ¹
6.7733E-01	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ¹
1.0000E+00	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ¹

Tablo E. 3. Mo¹³⁺ iyonun 3d kabuğuna ait dallanma oran tablosu.

Dallanma Oranı (3d kabuğundan iyonlaşma için)	Oluşan Oto-İyonlaşmalı Halleri (3d kabuğunun uyarılması sonucu)
0.0000E+00	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ²
0.0000E+00	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ¹ 4p ¹
0.0000E+00	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ¹ 4d ¹
9.6159E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ¹ 4f ¹
1.0000E+00	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ¹ 5s ¹
9.8537E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ¹ 5p ¹
1.0000E+00	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ¹ 5d ¹
9.2865E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ¹ 5f ¹
1.0000E+00	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ¹ 6s ¹
9.8541E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ¹ 6p ¹
1.0000E+00	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ¹ 6d ¹
9.1109E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ¹ 6f ¹
1.0000E+00	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ¹ 7s ¹
9.8517E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ¹ 7p ¹
1.0000E+00	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ¹ 7d ¹
9.0141E-01	3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ 4s ¹ 7f ¹

Tablo E. 4. Mo¹³⁺ iyonunun taban konfigürasyonuna ait enerji seviyeleri.

Göreceli Enerji Öz Değerleri (eV)	LSJ Enerji Seviyeleri
0.0000e+00	[ArI]3d ¹⁰ 4s ¹ (² S _{0.5})

Tablo E. 5. Mo¹³⁺ iyonunun 3s, 3p, 3d ve 4s alt kabuklarından birer elektron iyonlaşması sonucu geride kalan iyonik hallere ait LSJ seviyeleri.

İyonlaşma Eşik Enerjileri (eV)	İyonik Konfigürasyon
3.0237e+02	[NeI]3s ² 3p ⁶ (¹ S)3d ¹⁰ (¹ S) ¹ S _{0.0}
5.1213e+02	[[NeI]3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ (² D)4s ¹ (² S) ³ D _{3.0}
5.1268e+02	[NeI]3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ (² D)4s ¹ (² S) ³ D _{2.0}
5.1545e+02	[NeI]3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ (² D)4s ¹ (² S) ³ D _{1.0}
5.1595e+02	[NeI]3s ² 3p ⁶ 3d ⁹ (² D)4s ¹ (² S) ¹ D _{2.0}
6.7953e+02	[NeI]3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ (² P)4s ¹ (² S) ³ P _{2.0}
6.8063e+02	[NeI]3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ (² P)4s ¹ (² S) ¹ P _{1.0}
6.9759e+02	[[NeI]3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ (² P)4s ¹ (² S) ³ P _{0.0}
6.9819e+02	[NeI]3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ (² P)4s ¹ (² S) ³ P _{1.0}
7.9146e+02	[NeI]3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ (² S)4s ¹ (² S) ³ S _{1.0}
7.9540e+02	[NeI]3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ (² S)4s ¹ (² S) ¹ S _{0.0}

Tablo E. 6. Mo¹⁴⁺ iyonun 3s kabuğuna ait dallanma oran tablosu.

Dallanma Oranı (3s kabuğundan iyonlaşma için)	Oluşan Oto-İyonlaşmalı Halleri (3s kabuğunun uyarılması sonucu)
1.0000E+00	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4s ¹
9.8614E-01	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4p ¹
1.0000E+00	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4d ¹
1.0000E+00	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 4f ¹
1.0000E+00	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 5s ¹
9.8396E-01	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 5p ¹
1.0000E+00	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 5d ¹
1.0000E+00	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 5f ¹
1.0000E+00	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 6s ¹
9.8366E-01	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 6p ¹
1.0000E+00	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 6d ¹
1.0000E+00	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 6f ¹
1.0000E+00	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 7s ¹
9.8340E-01	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 7p ¹
1.0000E+00	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 7d ¹
1.0000E+00	3s ¹ 3p ⁶ 3d ¹⁰ 7f ¹

Tablo E. 7. Mo¹⁴⁺ iyonun 3p kabuğuna ait dallanma oran tablosu.

Dallanma Oranı (3p kabuğundan iyonlaşma için)	Oluşan Oto-İyonlaşmalı Halleri (3p kabuğunun uyarılması sonucu)
0.0000E+00	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4s ¹
0.0000E+00	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4p ¹
0.0000E+00	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4d ¹
0.0000E+00	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 4f ¹
0.0000E+00	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 5s ¹
1.0000E+00	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 5p ¹
9.9842E-01	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 5d ¹
1.0000E+00	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 5f ¹
9.9964E-01	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 6s ¹
1.0000E+00	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 6p ¹
9.9829E-01	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 6d ¹
1.0000E+00	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 6f ¹
9.9964E-01	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 7s ¹
1.0000E+00	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 7p ¹
9.9823E-01	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 7d ¹
1.0000E+00	3s ² 3p ⁵ 3d ¹⁰ 7f ¹

Tablo E. 8. Mo¹⁴⁺ iyonunun taban konfigürasyonuna ait enerji seviyeleri.

Göreceli Enerji Öz Değerleri (eV)	LSJ Enerji Seviyeleri
0.0000e+00	[NeI]3s ² 3p ⁶ (3d ¹⁰ 1S) ¹ S _{0,0}

Tablo E. 9. Mo¹⁴⁺ iyonunun 3s, 3p ve 3d alt kabuklarından birer elektron iyonlaşması sonucu geride kalan iyonik hallere ait LSJ seviyeleri.

İyonlaşma Eşik Enerjileri (eV)	İyonik Konfigürasyon
5.4276e+02	[NeI]3s ² 3p ⁶ (¹ S) 3d ⁹ (² D) ² D _{2.5}
5.4610e+02	[NeI]3s ² 3p ⁶ (¹ S) 3d ⁹ (² D) ² D _{1.5}
7.1002e+02	[NeI]3s ² (3p ⁵ (² P) 3d ¹⁰ (¹ S) ² P _{1.5}
7.2815e+02	[NeI]3s ² 3p ⁵ (² P) 3d ¹⁰ (¹ S) ² P _{0.5}
8.2193e+02	[NeI]3s ¹ 3p ⁶ (² S) 3d ¹⁰ (¹ S) ² S _{0.5}

ÖZGEÇMİŞ

13.12.1981 tarihinde Mazgirt Tunceli’de doğdum. İlk, orta ve lise eğitimi – öğretimimi İstanbul’da tamamladım. Lisans eğitimimi 2004 yılı Haziran ayında Sakarya Üniversitesi Fen – Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü’nde tamamladım. 2015 yılı Ocak ayında Marmara Üniversitesi’nde Pedagojik Formasyon Eğitim Programı’nı tamamlayarak Pedagojik Formasyon Eğitim Programı Sertifikası’nı aldım. 2011 yılında başladığım Marmara Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Genel Fizik üzerine başladığım Yüksek Lisans Öğretimi’ min tez metnini tamamlamış bulunmaktayım.

Ekim, 2015

Sevgi ÇIPLAK