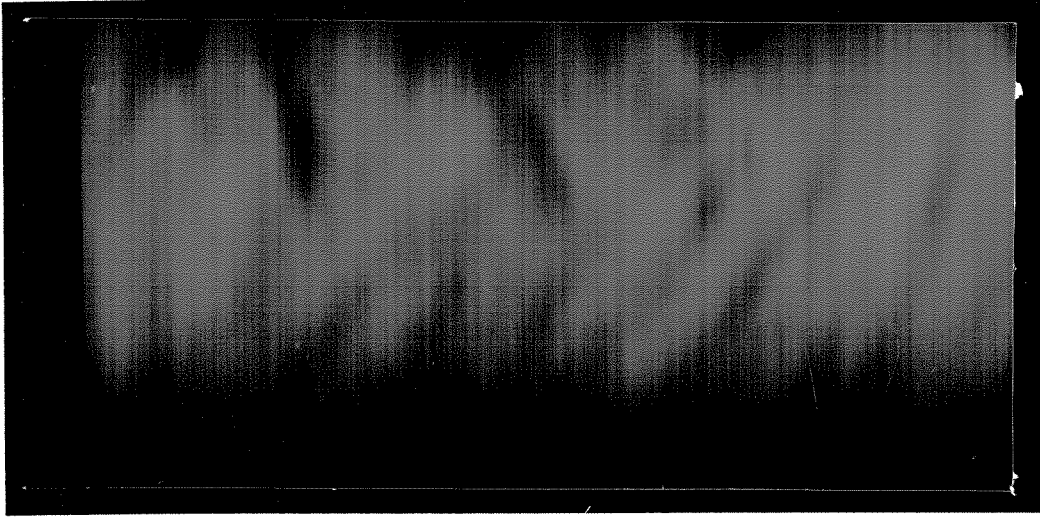


1997-979



TÜRKİYE BİLİMSEL VE
TEKNİK ARAŞTIRMA KURUMU

THE SCIENTIFIC AND TECHNICAL
RESEARCH COUNCIL OF TURKEY



Temel Bilimler Araştırma Grubu

Basic Sciences Research Grant Committee

***MANY ELECTRON CORRELATIONS IN THE
PHOTOIONIZATION CROSS SECTION OF
3D METAL ATOMS INCLUDING SINGLE AND
DOUBLE ELECTRON RESONANCES***

PROJE NO : TBAG- 1188

PROF.DR.ZİKRİ ALTUN

***HAZİRAN 1995
İSTANBUL***

İÇİNDEKİLER

1.	Önsöz	6
2.	Öz (Türkçe ve İngilizce)	7
3.	Proje Ana Metni	10
	A. Çok kuplajlı denklem yönteminin esas quantum sayıları aynı rezonas geçi lerinede uygulanabilir hale getirilmesi	11
	B. Açık kabuklu Sc atomunun taban ve uyarılmış hallerinin enerjilerinin MCHF yöntemi ile hesabı	12
	C. Sc atomunun taban ve son hal korolasyon hesapları	16
4.	Sonuç	18
5.	Referanslar	20
6.	Şekil Alt Yazıları	23

1. Önsöz :

Bu projenin desteklendiği 1 eylül 1993 tarihinden bitiş tarihi olan 31 Ocak 1995 tarihine kadar geçen sürede proje kapsamında önce, atomik fotoiyonlaşma problemlerinin çözümünde başarı ile uygulanan çok cisim kuramı çerçevesinde geliştirilmiş, çok kuplajlı denklemler yöntemini, esas kuantum sayıları aynı olan rezonans geçişlerini tek halli kanalmış gibi işleme sokabilecek hale getirdik. Bunu yapmadaki gayemiz taban halinde bulunan aynı kuantum sayılı dolu bir kabuktan kısmi işgal edilmiş açık bir kabuğa olabilecek kuvvetli rezonans geçişlerinin diğer tüm bağlı ve sürekli rezonans veya rezonans olmayan geçişlerle sonsuz mertebeden etkileşmesine imkan tanımak ve böylece büyük hassasiyetlerle tesir kesitleri üzerindeki etkilerini tesbit etmektir. Neticelerden de görüleceği gibi bunda da oldukça başarılı olduk. Çok kuplajlı denklemlerin geliştirilmiş şeklinin C ve Fortran dilleri ve AIX UNIX işletim sisteminin özelliklerinin entegrasyonu şeklinde programlanması hayli vaktimizi aldı. Mevcut bilgisayar kapasitemizden optimum fayda temin edebilmek için programlarımızın kodlanmasında vektör operasyon kurallarına azami derecede sadık kaldık.

Yine bu dönemde proje kapsamında yapılan bir diğer önemli husus da TÜBİTAK tarafından projede kullandığımız IBM RISC-6000/Model 520 bilgisayarın hard disk kapasitesinin 670 Mb'tan 1Gb ve RAM bellek kapasitesininde 16 Mb'tan 32 Mb'ta çıkarılmasıdır. Bu destek sacndium gibi oldukça karmaşık bir yapıya sahip bir atomun fotoiyonlaşma tesir kesidinin hesabını mümkün kılmıştır.

Proje sonuçlarımızın iki makale olarak yayınlanması için çalışmalarımız yoğun bir şekilde devam etmektedir. Birinci

kısımda scandium atomunun $3p \rightarrow 3d$ rezonans geiř genlięinin farklı kanallar arasındaki paylařımı ile ilgili bilgiler, bu rezonansların tesir kesitlerindeki yerleri ve dięer profil zellikleri hakkında elde ettięimiz bilgiler ięeren bir makale hazırlanmıř ve 24 Mayıs 1995 tarihinde "Europhysics letters" dergisine yayınlanmak zere sunulmuřtur. Bu makale "Photoionization of Atomic Scandium in the $3p \rightarrow 3d$ Resonance Region" bařlıęını tařımaktadır.

Ařaęıda detayları hakkında bilgi sunduęum ikinci makalemizin hazırlıęı devam etmektedir. Bu makalede scandium atomunun $3p$, $3d$ ve $4s$ alt kabuklarından kaynaklanan tm kısmi ve toplam fotoiyonlařma tesir kesitleri hakkında elde ettięimiz bilgiler sunulmaktadır. Yine bu makalede, tesir kesit hesaplarında da kullandıęımız tm eřik ve uyarma enerjilerinin elde ediliř yntemleri ve deęerleri ile ilgili bilgiler sunulmaktadır. Makalenin yazımı biter bitmez Phys. Rev. A' ya yayınlanmak zere gnderilecektir.

2. ÖZ:

TÜBİTAK tarafından desteklenen TBAG-1188 no'lu proje kapsamında öncelikle çok cisim tedirgi kuramı çerçevesinde çok kuplajlı denklemler yöntemi, taban seviyesinde tam ve kısmi işgal edilmiş esas kuantum sayıları aynı olan kabuklar arasındaki rezonans geçişlerini temsil eden bağlı halleri bağımsız birer kanalmış gibi işleme sokabilecek hale getirip gerekli bilgisayar programları yazıldı. Programların hazırlanmasının ardından çok cisim kuramı çerçevesinde ve LS kuplaj sistemine uygun olarak scandium atomunun taban ve fotoiyonlaşma kanallarını temsil eden açısal ve radyal dalga fonksiyonları hesap edildi. Bu dalga fonksiyonları kullanılarak önce taban korolasyonları hesap edilip en düşük mertebeli geçiş genliklerinde gerekli düzeltmeler yapıldı. Son hal korolasyonları ise tek tek grafik hesabı yerine fotoiyonlaşma kanalları arasında oluşturulan çok kuplajlı K-matrix türü denklemlerin çözümünden elde edildi. Scandium atomunun 3p, 3d ve 4s alt kabuklarından kaynaklanan rezonansların profil parametreleri de yine çok kuplajlı denklemlerin çözümünden elde edildi.

Scandium atomunun 3p, 3d, ve 4s alt kabuklarından fotoiyonlaşan elektronlar atomu nihai simetrileri 2P , 2D ve 2F olan toplam 32 kısmi kanaldan uygun biri ile terk eder. Bu kanalların her biri için korolasyonların etkisi ile düzeltilmiş tesir kesitleri hesap edildi. Problemin karmaşık ve meydan okuyan karakteri olmasına karşın, raporumuzda uygun grafikler ile sunduğumuz neticelerimizin, mevcut deneysel sonuçlar ile umut verici uyum içinde olduğunu tesbit ettik. Şu ana kadar yaptığımız literatür taramalarından bu çalışmanın Scandium atomunun 3p $\rightarrow$ 3d rezonans bölgesindeki ilk kuramsal çalışma olduğu görülmektedir.

Abstract

We have first modified the existing coupled equations programs, within the frame work of many-body perturbation theory, to accommodate the resonance transitions between sub shells of the same principal quantum number occupied fully or partially in the ground state of the atom and treat them as independent bound channels, as part of our project - 1188. We then calculated the angular and radial wave functions for the photoionization channels in LS coupling using the numerical techniques developed within the many-body perturbation theory. After correcting the lowest order dipole transition matrix elements with respect to the ground-state correlations we have formed a set of K-matrix like coupled equations among the final state channels to account for the final state correlations rather than including them diagram by diagram. There are altogether 32 partial fotoionization channels available for the 3p, 3d and 4s electrons in scandium with 2P , 2D , and 2F final simetries. All partial cross sections with the resonance effects are then optained from the solutions of the coupled equations as a function of the photon energy. The results presented in various figures and in tables are foud to display encourging similarities with experimental measurements in both qualitatively and quantitativly for such a challinging and quite complex problem. As far as we know up to the time of writing of this report this is the only theoretical studies of the 3p $\rightarrow$ 3d resonace region of scandium atom.

3. PROJE ANA METNİ

Bu projenin ana hedefi temel ve teknik öneme sahip ve oldukça kompleks bir problem olan 3d - metal atomlarının tesir kesitlerinin yüksek mertebeden duyarlıklı hesapların yapılabilmesine olanak verecek yöntemler geliştirmek ve bir 3d - metal atomu olan scandium için uygulamaktır. Bu gaye doğrultusunda yapıлып bitirilen çalışmalar, aşağıda iki ana başlık altında anlatılmaktadır.

A: Çokkuplejli Denklemler yönteminin Geliştirilmesi ve Bilisayar Programlarının yazımı

Bugüne kadar pozitif enerjili fotoiyonlaşma son hal kanalları arasında kurulan ve taban korolasyonlarının etkisini de içeren çok kuplejli denklemlerin çözümünden açık ve kapalı kabuklu atomların kısmi tesir kesitler için pek çok başarılı sonuç elde edilmiştir¹⁻⁴. Biz bu çalışmamızda öncelikle çok kuplejli denklemler yöntemini geliştirerek, bu yöntemin fotoiyonlaşma olayının sebep olduğu taban seviyesindeki tam dolu bir alt kabuktan kısmen dolu bir alt kabuğa olan kuvvetli rezonans geçiş genliklerinin yüksek duyarlıklarla hesaplanmasını sağladık. Bundan amacımız bu tür kuvvetli rezonans geçişlerinin diğer tüm bağlı ve sürekli geçiş genlikleri ile sonsuz mertebeden etkileşmelerini sağlamak ve böylece profillerini güvenilir bir şekilde tesbit etmektir. Rezonansların profillerinin simetrileri, yükseklik ve genişlikleri hakkında elde edilen güvenli bilgiler büyük teknolojik ve temel öneme sahiptirler^{5,6}.

B. Açık Kabuklu Scandium Atomunun Fotoiyonlaşma Toplam ve Kısmi Tesir Kesitleri

Son zamanlarda 3d - metal atomlarının elektronik yapılarına yönelik yoğun deneysel^{7,8} ve kuramsal⁹⁻¹¹ çalışmalar devam etmektedir. Biz bu çalışmamızda bir 3d - metal atomu olan scandiumun şimdiye kadar detaylı teorik bir incelenmesi yapılmamış olan 3p $\rightarrow$ 3d rezonans bölgesine ağırlık verdik. Scandium atomunun taban seviyesinde 3p tam dolu ve 3d ise tek elektron tarafından işgal edilmiş kısmen dolu bir kabuktur. Dolayısı dipol etkileşmesi sonucunda bir 3p elektronunun 3d kabuğundaki boş orbitallerden birine geçişi mümkün olmaktadır. Bu geçiş scandium için enerjileri bir birinden farklı 9 bağlı uyarılmış kanalla olmaktadır. Bu konfigürasyonların tamamı 4s ve 3d elektronlarının fotoiyonlaşma kanalları bazılarında 3p fotoiyonlama kanalları ile yozlaşmış durumdadırlar. Dolayısı ile farklı fotoiyonlaşma kanallarına bozunabilen 3p $\rightarrow$ 3d geçişlerinin titreşim şiddetlerinin nasıl dağıldığının bilinmesi elektronik yapının anlaşılması bakımından büyük önem arz etmektedir.

4. SONUÇLAR

Şekil 1 de kısmi tesir kesit genliklerinin sembolik temsilcileri olan Brueckner-Goldstone grafikleri¹⁻⁴ görülmektedir. Grafik 1(a) tedirgisiz (unperturbed) dipol etkileşmesini temsil etmektedir. Literatürde bu grafikten elde edilen tesir kesidi en düşük mertebeli HF tesir kesidi olarak adlandırılmaktadır^{3,4}. Eğer atomun elektromanyetik alanla etkileşmeden önce ve sonraki hal fonksiyonları tam olarak elde edilebilseydi o zaman grafik 1(a) kullanılarak elde edilen sonuçlar yeterli olacaktı. Ancak iki veya daha fazla elektronu olan atomların, ister serbest ister

etki altında olsunlar, mevcut bilgilerimiz ile hal fonksiyonlarını analitik olarak bulmak mümkün değildir. Dolayısı ile çok elektronlu atomlar ile ilgili problemlerin çözümünde tedirgi yöntemlerine başvurmak problemin doğasından kaynaklanan bir gerçektir. Biz hesaplamalarımız için çok cisim tedirgi yöntemini seçtik. Grafik 1 bu yöntem çerçevesinde elde edilebilecek endüşük mertebeli geçiş genlikleri ve bunların düzeltilmesinde kullanılan 1. ve 2. mertebeli korolasyon genliklerini göstermektedir.

Scandium atomunun $3p^6 3d 4s^2 (^2D)$ ile verilen taban halinde işgal edilmiş spin orbitaller için oluşturulan aşağıdaki Hartree-Fock denklemlerini taban toplam enerjisinin elektron spin orbitallerinin radyal kısımlarında meydana gelebilecek küçük değişmelere göre kararlı olması koşuluna uygun varyasyon hesaplarından elde ettik. Scandiumun $\varphi_{1s}(\vec{r})$, $\varphi_{2s}(\vec{r})$, $\varphi_{2p}(\vec{r})$, $\varphi_{3s}(\vec{r})$, $\varphi_{3p}(\vec{r})$, $\varphi_{3d}(\vec{r})$ ve $\varphi_{4s}(\vec{r})$ orbitalleri için elde edilen Hartree-Fock denklemleri :

$$(D_r + 2J_{1s}^0 - K_{1s}^0 + 2J_{2s}^0 - K_{2s}^0 + 6J_{2p}^0 - K_{2p}^1 + 2J_{3s}^0 - K_{3s}^0 + 6J_{3p}^0 - K_{3p}^1 + J_{3d}^0 - \frac{1}{10} K_{3d}^2 + 2J_{4s}^0 - K_{4s}^0) P_{1s}(r) = \epsilon_{1s} P_{1s}(r).$$

$$(D_r + 2J_{1s}^0 - K_{1s}^0 + 2J_{2s}^0 - K_{2s}^0 + 6J_{2p}^0 - K_{2p}^1 + 2J_{3s}^0 - K_{3s}^0 + 6J_{3p}^0 - K_{3p}^1 + J_{3d}^0 - \frac{1}{10} K_{3d}^2 + 2J_{4s}^0 - K_{4s}^0) P_{2s}(r) = \epsilon_{2s} P_{2s}(r)$$

$$(D_r + 2J_{1s}^0 - \frac{1}{3} K_{1s}^1 + 2J_{2s}^0 - \frac{1}{3} K_{2s}^1 + 6J_{2p}^0 + \frac{2}{5} J_{2p}^2 - K_{2p}^0 + 2J_{3s}^0 - \frac{1}{3} K_{3s}^1 + 6J_{3p}^0 - K_{3p}^0 + \frac{2}{5} K_{3p}^2 + J_{3d}^0 - \frac{1}{15} K_{3d}^1 + \frac{1}{35} K_{3d}^3 + 2J_{4s}^0 - \frac{1}{3} K_{4s}^1) P_{2p}(r) = \epsilon_{2p} P_{2p}(r)$$

$$(D_r + 2J_{1s}^0 - K_{1s}^0 + 2J_{2s}^0 - K_{2s}^0 + 6J_{2p}^0 - K_{2p}^1 + 2J_{3s}^0 - K_{3s}^0 + 6J_{3p}^0 - K_{3p}^1 + J_{3d}^0 - \frac{1}{10} K_{3d}^2 + 2J_{4s}^0 - K_{4s}^0) P_{3s}(r) = \epsilon_{3s} P_{3s}(r)$$

$$(D_r + 2J_{1s}^0 - \frac{1}{3} K_{1s}^1 + 2J_{2s}^0 - \frac{1}{3} K_{2s}^1 + 6J_{2p}^0 + \frac{2}{5} J_{2p}^2 - K_{2p}^0 + 2J_{3s}^0 - \frac{1}{3} K_{3s}^1 + 6J_{3p}^0 - K_{3p}^0 + \frac{2}{5} K_{3p}^2 + J_{3d}^0 - \frac{1}{15} K_{3d}^1 + \frac{1}{35} K_{3d}^3 + 2J_{4s}^0 - \frac{1}{3} K_{4s}^1) P_{3p}(r) = \epsilon_{3p} P_{3p}(r)$$

$$(D_r + 2J_{1s}^0 - \frac{1}{5} K_{1s}^2 + 2J_{2s}^0 - \frac{1}{5} K_{2s}^2 + 6J_{2p}^0 - \frac{1}{5} K_{2p}^1 - \frac{9}{35} K_{2p}^3 + 2J_{3s}^0 - \frac{1}{5} K_{3s}^2 + 6J_{3p}^0 - \frac{1}{5} K_{3p}^1 - \frac{9}{35} K_{3p}^3 + J_{3d}^0 - \frac{1}{10} K_{3d}^2 + \frac{1}{35} J_{3d}^4 + 2J_{4s}^0 - \frac{1}{5} K_{4s}^2) P_{3d}(r) = \epsilon_{3d} P_{3d}(r)$$

$$(D_r + 2J_{1s}^0 - K_{1s}^0 + 2J_{2s}^0 - K_{2s}^0 + 6J_{2p}^0 - K_{2p}^1 + 2J_{3s}^0 - K_{3s}^0 + 6J_{3p}^0 - K_{3p}^1 + J_{3d}^0 - \frac{1}{10} K_{3d}^2 + 2J_{4s}^0 - K_{4s}^0) P_{4s}(r) = \epsilon_{4s} P_{4s}(r)$$

Bu denklemlerdeki D_r , J_{nl}^k , K_{nl}^k operatörlerinin açık ifadeleri aşağıdadır.

$$D_r = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{Z}{r} + \frac{\ell(\ell+1)}{2r^2}$$

$$J_{nl}^k \varphi_{1s}(r) = \left(\int_0^\infty \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} P_{nl}(r') P_{nl}(r') dr' \right) P_{1s}(r)$$

$$K_{nl}^k \varphi_{1s}(r) = \left(\int_0^\infty \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} P_{nl}(r') P_{1s}(r') dr' \right) P_{nl}(r)$$

Yukarıdaki denklemlerin özuyumlu çözümleri taban orbitallerinin Hartree-Fock bağlanma enerjilerini de vermektedir.

Scandium atomunun 3p, 3d ve 4s elektronlarının LS kuplaj sisteminde dipol uyarılmaları

$$\begin{aligned}
& 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5 kd \ 3d \ 4s^2 [^2P, ^2D, ^2F], \\
& 1s^2 \ 2s^2 \ 2p^6 \ 3s^2 \ 3p^5 ks \ 3d \ 4s^2 [^2P, ^2D, ^2F], \\
& 1s^2 \ 2s^2 \ 2p^6 \ 3s^2 \ 3p^6 \ kp \ 4s^2 [^2P, ^2D, ^2F], \\
& 1s^2 \ 2s^2 \ 2p^6 \ 3s^2 \ 3p^6 \ kf \ 4s^2 [^2P, ^2D, ^2F], \\
& 1s^2 \ 2s^2 \ 2p^6 \ 3s^2 \ 3p^6 \ 3d \ 4s \ kp [^2P, ^2D, ^2F]
\end{aligned}$$

uyarılmış konfigürasyonları oluştururur. Bu konfigürasyonla pozitif enerjili olduklarında fotoiyonlaşma son hallerini temsil ederler. Bu konfigürasyonlardaki uyarılmış elektronların spin orbitallerini donmuş çekirdek yaklaşımı çerçevesinde oluşturduğumuz ve açık ifadeleri aşağıda verilen etkin - potansiyel Hartree-Fock denklemlerinin çözümlerinden elde ettik.

$$\begin{aligned}
& (D_r + 2J_{1s}^0 - \frac{1}{5} K_{1s}^2 + 2J_{2s}^0 - \frac{1}{5} K_{2s}^2 + 6J_{2p}^0 - \frac{2}{5} K_{2p}^1 - \frac{9}{35} K_{2p}^3 + 2J_{3s}^0 \\
& - \frac{1}{5} K_{3s}^2 + 5J_{3p}^0 - \frac{1}{5} J_{3p}^2 + \frac{14}{15} K_{3p}^1 - \frac{9}{35} K_{3p}^3 + J_{3d}^0 - \frac{1}{10} K_{3d}^0 - \frac{1}{35} K_{3d}^2 \\
& - \frac{1}{35} K_{3d}^4 + 2J_{4s}^0 - \frac{1}{5} K_{4s}^2) P_{kd}^{(3p)}(r) = \epsilon_{kd} P_{kd}^{(3p)}(r)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& (D_r + 2J_{1s}^0 - K_{1s}^0 + 2J_{2s}^0 - K_{2s}^0 + 6J_{2p}^0 - K_{2p}^1 + 2J_{3s}^0 - K_{3s}^1 \\
& + 5J_{3p}^0 - \frac{1}{3} K_{3p}^1 + J_{3d}^0 - \frac{1}{10} K_{3d}^2 + 2J_{4s}^0 - K_{4s}^1) P_{ks}^{(3p)}(r) = \epsilon_{ks} P_{ks}^{(3p)}(r)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& (D_r + 2J_{1s}^0 - \frac{1}{7} K_{1s}^3 + 2J_{2s}^0 - \frac{1}{7} K_{2s}^3 + 6J_{2p}^0 - \frac{9}{35} K_{2p}^2 - \frac{4}{21} K_{2p}^4 \\
& + 2J_{3s}^0 - \frac{1}{7} K_{3s}^3 + 6J_{3p}^0 - \frac{9}{35} K_{3p}^2 - \frac{4}{21} K_{3p}^4 + 2J_{4s}^0 - \frac{1}{7} K_{4s}^3) P_{kf}^{(3d)}(r) \\
& = \epsilon_{kf} P_{kf}^{(3d)}(r)
\end{aligned}$$

$$(D_r + 2J_{1s}^0 - \frac{1}{3} K_{1s}^1 + 2J_{2s}^0 - \frac{1}{3} K_{2s}^1 + 6J_{2p}^0 - K_{2p}^0 - \frac{2}{5} K_{2p}^2 + 2J_{3s}^0 - \frac{1}{3} K_{3s}^1 + 6J_{3p}^0 - K_{3p}^0 - \frac{2}{5} K_{3p}^2 + 2J_{4s}^0 - \frac{1}{3} K_{4s}^1) P_{kp}^{(3d)}(r) = \epsilon_{kp} P_{kp}^{(3d)}(r)$$

$$(D_r + 2J_{1s}^0 - \frac{1}{3} K_{1s}^1 + 2J_{2s}^0 - \frac{1}{3} K_{2s}^1 + 6J_{2p}^0 - K_{2p}^0 - \frac{2}{5} K_{2p}^2 + 2J_{3s}^0 - \frac{1}{3} K_{3s}^1 + 6J_{3p}^0 - K_{3p}^0 - \frac{2}{5} K_{3p}^2 + J_{3d}^0 - \frac{1}{15} K_{3d}^1 - \frac{3}{70} K_{3d}^3 + J_{4s}^0 + \frac{1}{3} K_{4s}^1) P_{kp}^{(4s)}(r) = \epsilon_{kp} P_{kp}^{(4s)}(r)$$

Yukarıdaki denklemleri çözerken, yörünge açısal momentumları aynı olan uyarılmış orbitallerle taban orbitallerinin birbirlerine dik olması

$$R_{EHF} = R_{THF} + (1-P)\Omega(1-P)$$

ile tanımlanan uygun Ω Silver Stone-Huzinaga¹³⁻¹⁶ operatörü ile sağlanmaktadır. Bu ifadedeki R_{EHF} ve R_{THF} operatörleri sırası ile aynı açısal momentumlu taban ve uyarılmış Hartree-Fock operatörleridir.

Tüm hesaplarımız scandium atomunun 3p, 3d ve 4s elektronlarının dipol uyarılmalarını temsil eden her bir yörünge açısal momentumu için yukarıda zikr edilen HF-denklemlerinin çözümlerinden elde ettiğimiz 10 tane bağlı 50 tane sürekli orbital kullanılarak yapıldı. Sürekli orbitaller atomdan kopan ve kinetik enerjileri atom birim sisteminde ($k^2/2$) ile verilen fotoelektron spin orbitalleridir. Scandium atomunun 3p, 3d ve 4s kabuklarından kaynaklanan tekelektron kısmi fotoiyonlaşma kanalları ve bu kanallara ait eşik enerjileri Tablo I, II ve III de görülmektedir. Eşik enerjileri hem taban hemde iyonik haller için ayrı ayrı

yapılan uygun çok konfigürasyonlu ve öz uyumlu hesaplardan elde edildi. Atomun toplam taban enerjisi ve iyonik halleri için çok konfigürasyon etkileşmesi yöntemini kullandık. Bu yöntemin özünü LS simetrisi taban konfigürasyonu aynı ve enerjileri taban enerjisine yakın olduğunu düşündüğümüz sonlu sayıda bağlı uyarılmış konfigürasyonların taban konfigürasyonuna eklenmesi sonucu oluşan çok konfigürasyonlu hale göre toplam atomik hamiltoniye'nin beklenen değerinin minimum olmasının istenmesi teşkil eder. Burada minimizasyon hem konfigürasyonlardaki radyal orbitallerde olabilecek küçük değişimlere göre hemde karışım katsayılarına göre alınmaktadır. Scandium atomunun çok konfigürasyonlu taban halini oluşturan konfigürasyonlar $3p^6 3d 4s^2(^2D)$, $3p^6 3d 4p^2(^2D)$, $3p^6 3d 4d^2(^2D)$, $3p^6 3d 4f^2(^2D)$, $3p^6 3d 5s^2(^2D)$, $3p^6 3d^3(^2D)$, $3p^6 3d^2 4s(^2D)$, $3p^6 3d^2 4d(^2D)$, den ibarettir. Çok konfigürasyon halinin en düşük enerjisi atomun taban toplam enerjisi olmaktadır ve minimizasyon sonucu elde edilen bu değer Sc için $E_T = -759.76499145$ Au olarak bulunmuştur.

Scandium atomunu konu etmemizin en önemli nedenlerinden biri diğer tüm geçiş metal atomlarında olduğu gibi taban seviyesinde esas kuantum sayıları aynı olan biri dolu diğeri kısmen işgal edilmiş kabuklarının bulunmasıdır. Bu tür yapıda olan atomların tesir kesitlerinde dolu kabuktan kısmen dolu kabuğa olabilecek geçişlerin son derece güçlü rezonans profilleri olmaktadır. Scandium atomunda da bu tür rezonanslar $3p \rightarrow 3d$ geçişleri sonucu oluşmaktadır. $3p$ elektronunun dipol etkileşmesi sonucunda $3d$ altkabuğuna geçmesi sonucu ortaya LS simetrileri 2F , 2P , 2D olan dokuz farklı uyarılmış konfigürasyon çıkmaktadır. Bu

konfigürasyonlar sırasıyla şunlardır: $3p^5 3d^2(^1G)4s^2(^2F)$,
 $3p^5 3d^2(^1D)4s^2(^2F)$, $3p^5 3d^2(^3F)4s^2(^2F)$, $3p^5 3d^2(^3F)4s^2(^2D)$,
 $3p^5 3d^2(^1D)4s^2(^2D)$, $3p^5 3d^2(^3P)4s^2(^2D)$ $3p^5 3d^2(^1D)4s^2(^2P)$,
 $3p^5 3d^2(^3P)4s^2(^2P)$, $3p^5 3d^2(^1S)4s^2(^2P)$. Taban seviyesinden bu
rezonans hallere geçiş enerjilerini hesap etmek için yine çok
konfigürasyonlu özuyumlu hesap tekniklerinden yararlandık. Bunun
için önce her bir rezonans konfigürasyonu için uygun sayıda
uyarılmış konfigürasyondan çok konfigürasyonlu hal oluşturduk. Bu
çok konfigürasyonlu hale göre toplam atomik hamiltoniyeinin
beklenen değerinin minimum olmasını istedik.

Aynı LS simetrisine sahip olan $3p^5 3d^2(^1G)4s^2(^2F)$,
 $3p^5 3d^2(^1D)4s^2(^2F)$, ve $3p^5 3d^2(^3F)4s^2(^2F)$, uyarılmış
konfigürasyonları için oluşturduğumuz çok konfigürasyonlu hal
 $3p^5 3d^2 4s^2(^2F)$, $3p^5 3d^4(^2F)$, $3p^5 3d^3 4s(^2F)$, $3p^5 3d^2 4p^2(^2F)$,
 $3p^5 3d^2 4d^2(^2F)$, $3p^5 3d^2 5s^2(^2F)$, $3p^5 3d^3 4d(^2F)$ konfigürasyonlarının
bir lineer karışımıdır. Bu halin toplam enerjisinin
minimizasyonundan $3p^5 3d^2(^1G)4s^2(^2F)$, $3p^5 3d^2(^1D)4s^2(^2F)$ ve
 $3p^5 3d^2(^3F)4s^2(^2F)$ rezonans halleri için elde ettiğimiz toplam
enerjiler sırasıyla - 758.677719715 a.u., -758.627301818 a.u.ve -
758.348938148 a.u. dir. Benzer şekilde $3p^5 3d^2(^3F)4s^2(^2D)$,
 $3p^5 3d^2(^3P)4s^2(^2D)$ ve $3p^5 3d^2(^3P)4s^2(^2D)$ rezonans
konfigürasyonlarının toplam enerjilerini bulmak için
oluşturduğumuz çok konfigürasyonlu hal $3p^5 3d^2 4s^2(^2D)$,
 $3p^5 3d^2 4p^2(^2D)$, $3p^5 3d^2 4d^2(^2D)$, $3p^5 3d^2 4f^2(^2D)$, $3p^5 4s^2 4p_1^2(^2D)$,
 $3p^5 4s^2 4d_1^2(^2D)$, $3p^5 4s^2 4f_1^2(^2D)$, $3p^5 3d^4(^2D)$, $3p^5 3d_1^3 4s_1(^2D)$,
 $3p^5 3d_1^3 4d_2(^2D)$ konfigürasyonlarının bir lineer karışımıdır.
Yapılan öz uyumlu hesaplardan $3p^5 3d^2(^3F)4s^2(^2D)$, $3p^5 3d^2(^3P)4s^2(^2D)$

ve $3p^5 3d^2(^3P)4s^2(^2D)$ rezonans halleri için elde edilen toplam enerjiler sırasıyla -758.231513847 a.u. -758.683271252 a.u ve -758.521475612 a.u dır.

Nihai **LS** simetrileri 2P olan $3p^5 3d^2(^1D)4s^2(^2P)$, $3p^5 3d^2(^3P)4s^2(^2P)$ ve $3p^5 3d^2(^1S)4s^2(^2P)$ rezonans hallerinin toplam enerjilerini hesap etmek için oluşturduğumuz çok konfigürasyonlu hal $3p^5 3d^2(^1D)4s^2(^2P)$, $3p^5 3d^2(^3P)4s^2(^2P)$ ve $3p^5 3d^2(^1S)4s^2(^2P)$, $3p^5 3d^4(^2P)$, $3p^5 3d^3 4s(^2P)$, $3p^5 3d^2 4p^2(^2P)$, $3p^5 3d^2 4d^2(^2P)$, $3p^5 3d^2 5s^2(^2P)$, $3p^5 3d^3 4d(^2P)$ konfigürasyonlarının bir lineer karışımından ibarettir. Bu çok konfigürasyonlu halin toplam enerjisinin minimizasyonundan $3p^5 3d^2(^1D)4s^2(^2P)$, $3p^5 3d^2(^3P)4s^2(^2P)$ ve $3p^5 3d^2(^1S)4s^2(^2P)$ rezonans halleri için elde toplam enerjiler sırasıyla -758.653295837 a.u, -758.252455274 ve -758.483848673 a.u olarak bulundular. Tablo V $3p \rightarrow 3d$ geçişi sonucu oluşan rezonans konfigürasyonları ve bu rezonansların çok konfigürasyonlu ve özuyumlu hesaplardan elde ettiğimiz enerji pozisyonlarını göstermektedir.

Fotoiyonizasyon eşik enerjileri iyonik haller için elde edilen toplam enerjilerden taban toplam enerjisini çıkarılarak hesap edildi. Literatürde bu tür hesaplar ASCF adı ile bilinirler. Scandium atomunun $3p$, $3d$ ve $4s$ elektronlarının atomdan kopması sonucu oluşan iyonik haller $3p^6 3d 4s(^1D)$, $3p^6 3d 4s(^3D)$, $3p^6 4s^2(^1S)$, $3p^5 3d 4s^2(^1P)$, $3p^5 3d 4s^2(^1D)$, $3p^5 3d 4s^2(^1F)$, $3p^5 3d 4s^2(^3P)$, $3p^5 3d 4s^2(^3D)$, $3p^5 3d 4s^2(^3F)$ den ibarettir. Bu hallerin her biri için uygun çok konfigürasyonlu haller oluşturarak toplam enerjilerini bulduk. Örneğinin $3p^6 4s^2(^1S)$, $3p^6 4p^2(^1S)$, $3p^6 4d^2(^1S)$, $3p^6 4f^2(^1S)$, $3p^6 5s^2(^1S)$, $3p^6 3d^2(^1S)$, $3p^6 5p^2(^1S)$, $3p^6 5d^2(^1S)$, $3p^6 5f^2(^1S)$ uyarılmış ve uyarılmamış iyonik

hallerin bir lineer karışımını kullanarak $3p^6 4s^2(^1S)$ iyonik halinin toplam enerjisini -759.497120277 a.u. olarak bulduk. Benzer şekilde $3p^6 3d 4s(^1D)$, $3p^6 3d 4s(^3D)$ iyonik halleri için oluşturduğumuz çok konfigürasyonlu hallerden sırasıyla -759.520590334 a.u. ve -759.540465433 a.u. toplam enerjilerini elde ettik. Diğer taraftan bir 3p elektronunun atomdan kopması $3p^5 3d(^1P)$, $3p^5 3d(^1D)$, $3p^5 3d(^1F)$, $3p^5 3d(^3P)$, $3p^5 3d(^3D)$, $3p^5 3d(^3F)$ ile verilen 6 farklı iyonik halin oluşmasına neden olur. Bu iyonik hallerin toplam enerjilerini bulmak için çok konfigürasyonlu haller oluştururken kullandığımız ilave uyarılmalı iyonik haller $3p^5 3d 4p^2$, $3p^5 3d 4d^2$, $3p^5 3d 4f^2$, $3p^5 3d_1^2 4s$, $3p^5 3d_1^2 4d$, $3p^5 3d_2^3$ d r. Yapılan öz uyumlu hesaplardan 3p iyonik halleri için elde edilen toplam enerjiler şunlardır:

$$E_T(...3p^5 3d 4s^2(^1P)) = -757.935838261 \text{ a.u.}$$

$$E_T(...3p^5 3d 4s^2(^1D)) = -758.288057824 \text{ a.u.}$$

$$E_T(...3p^5 3d 4s^2(^1F)) = -758.281195194 \text{ a.u.}$$

$$E_T(...3p^5 3d 4s^2(^3F)) = -758.376927354 \text{ a.u.}$$

$$E_T(...3p^5 3d 4s^2(^3D)) = -758.28816216 \text{ a.u.}$$

$$E_T(...3p^5 3d 4s^2(^3P)) = -758.427336283 \text{ a.u.}$$

Fotoiyonlaşma kanallarındaki bağlı tek elektron orbitallerinin bağlanma enerjileri uygun etkin potansiyel Hartree-Fock denklemlerinin çözümlerinden elde edildiler. Bu enerjiler Tablo IV de listelenmişlerdir.

Şekil 3, 4, 5, 6 ve 7 de Tablo 1 de görülen ve nihai LS simetrileri 2P olan kısmi tesir kesitlerinin toplamı değişik enerji aralıklarında ve farklı boyutlarda çizilmişlerdir. Grafik 3 teki eşik enerjisinin hemen üstündeki rezonanslar daha detaylı

olarak grafik 4 ve 5 de yeniden çizilmişlerdir. Problemin karmaşık olmasına karşın düz çizgiler ile temsil ettiğimiz dipol uzunluk ayar sonuçları ile kesikli çizgilerin temsil ettiği dipol hız ayar sonuçlarının bir birine yakınlığı hesapların kalitesi hakkında fikir vermektedir. Bu rezonaslardan 6.65 eV'a yakınsayanlar 4s → np rezonansları 7.3 eV'a yakınsayanlar ise 3d → np rezonanslarıdır. Şekil 3 de 30 eV ile 50 eV arasında görülen rezonanslar ise 3p → nd ve 3p → ns rezonanslarıdır. Şekil 6 daki 30 eV ve 34 eV civarındaki kuvvetli rezonanslar 3p → 3d rezonanslarıdır. Bu rezonanslara dikkat edilir ise 3p → 3d geçiş gücünün pekçok konfigürasyona hemen hemen eşit dağıldığı açıkça görülür. Detayları şekiller 7, 8 ve 9 da görülen rezonansların 3p uyarılmasından kaynaklanan diğer nd ve ns rezonanslarıdır. Şekiller kullanılarak bu rezonanslar karşılaştırıldıklarında 3p → ns rezonanslarının 3p → nd rezonanslarına daha dar ve dolayısı ile uzun ömürlü oldukları kolayca görülebilir.

Şekiller 10, 11, 12, 13, 14 ve 15 Tablo 2 de görülen ve nihai LS simetrileri 2D olan kısmi tesir kesitlerinin toplamı ve bu toplamın farklı enerji aralıklarında ve farklı boyutlardaki detayları çizilmişlerdir. Şekil 11'e bakılır ise şekil 4 de 3d → np rezonanslarının bulunduğu bölgenin beklenildiği gibi her hangi bir rezonans etkisi içermediği görülür. Şekil 13 deki 29 eV ve 33 eV ve şekil 14 de 38 eV civarındaki kuvvetli rezonanslar $3p^6 3d 4s^2(^2D) \rightarrow 3p^5 3d^2(^3F) 4s^2(^2D), 3p^5 3d^2(^1D) 4s^2(^2D), 3p^5 3d^2(^3P) 4s^2(^2D)$ bağlı geçişlerini temsil etmektedirler.

Şekiller 16, 17, 18, 19, 20 ve 21 Tablo 3 de görülen ve nihai LS simetrileri 2F olan kısmi tesir kesitlerinin toplamını ve bu toplamın detaylarını göstermektedir. Şekil 17'e bakılır ise şekil

4 de görülen $3d \rightarrow np$ rezonanslarının 2P kanalındaki profil özelliklerine benzer özellikler ile ortaya çıktıkları görülür. bulunduğu bölgenin beklenildiği gibi her hangi bir rezonans etkisi içermediği görülür. Şekil 17 de 6.2 eV ile 6.6 eV arasında görülen uzunluk ve genişlik bakımından zayıf pikler $3p^6 3d 4s(^1D)np(^2F)$ bağlı konfigürasyonlarının coulomb etkileşmesi sonucu $4s$ elektronunun sürekli halini temsil eden $3p^6 3d 4s(^3D)kp(^2F)$ haline hızlı bir şekilde bozunmalarından kaynaklanmaktadır. Bu rezonanslar daha ayrıntılı olarak şekil 18 de yeniden çizilmişlerdir. Bu şekillerdeki kuvvetli rezonanslar $3p^6 4s^2(^1S)nf(^2F)$ bağlı hallerinin $3p^6 3d 4s(^3D(^1D))kp(^2F)$ sürekli hallerine dejenerasyonundan kaynaklanmaktadır. Yaptığımız hesaplar hem $4s \rightarrow np$ hem de $3d \rightarrow nf$ rezonanslarının q parametrelerinin^{18,23} pozitif olduklarını göstermektedir ve bu durum şekillerdeki rezonans profilleri tarafından da teyit edilmektedir. Fano q parametrelerinin pozitif olması rezonansların önce minimumdan geçip daha sonra maksimum oluşlarını gösteren asimetric yapıları olmaktadır. Scandium atomunun 2F toplam kısmi tesir kesitinde $3p$ alt kabuğundan $3d$ alt kabuğuna olan rezonans geçişlerini temsil eden pikler şekil 17 de sırasıyla 29.5 eV, 30.9 eV ve 38.5 eV enerjilerinde görülmektedirler. Dikkat edilir ise 30.9 eV enerjili $3p^5 3d^2(^2D)4s^2(^2F)$ rezonansı window profiline sahiptir. Diğer taraftan 38.5 eV daki $3p^5 3d^2(^3F)4s^2(^2F)$ rezonansı da diğer $3p \rightarrow nd$ (ns) rezonansları ile yoğun bir etkileşme içindedir. Şekil 20 2F kanalındaki $3p \rightarrow 3d$ rezonanslarının en düşük enerjili iki ögesini ayrıntılı olarak göstermektedir. 2F kanallarının kısmi tesir kesitlerinin toplamının $3p$ elektronunun eşik enerjileri civarındaki durumu şekil 21 de ayrıntılı olarak

cizilmiştir. Bu şekildeki rezonanslar $3p \rightarrow nd$ (ns) uyarılmalarına aittirler. Burada dikkat çeken husus nd ve ns rezonansların'ın q parametrelerinin farklı işaretlerde olmalarıdır. q parametresi $3p \rightarrow nd$ rezonansları için pozitif $3p \rightarrow ns$ rezonanslar için ise negatiftirler.

4. SONUC

Scandium atomunun fotoiyonlaşma problemi oldukça kompleks bir problemdir. Bu problem üzerinde çok az miktarda teorik çalışmanın varlığında bunu işaret etmektedir. Çok cisim tedirgi ve etkin potansiyel yaklaşımları çerçevesinde hem dipol uzunluk hemde dipol hız ayar hesaplarının kalitatif ve kantitatif bakımından birbiri ile ve deneysel sonuçlar ile uyumlu sonuçlar vermesi scandium probleminden daha zor olan diğer 3d - metal atomlarının fotoiyonlaşma problemlerinin yüksek duyarlılıklarla çözülebilmelerine zemin hazırlamıştır. Özellikle scandium atomunu $3p \rightarrow 3d$ geçişlerinden kaynaklanan ve çok sayıda uyarılmış LS simetrisine dağılmış ve çok sayıda kısmi fotoiyonlaşma kanalında ortaya çıkan rezonanslar için elde ettiğimiz sonuçların ilgi çekeceğinden ve yeni kuramsal ve deneysel çalışmaların başlamasına neden olacağı umudunu taşımaktayız. Hedefimiz scandium probleminden aldığımız cesaret ve TBİTAK' n teşvik edici desteği sayesinde deneyle yaraşabilir ve hatta daha hassas sonuçların elde edilebileceği hesaba dayalı teknikler geliştirmektir.

Teşekürler

Yukarıdaki çalışmaların yapıldığı IBM RISC 6000/520 bilgisayarın alınmasına yaptıkları katkıdan dolayı Türk Petrol Vakfı ve Marmara Üniversitesi Rektörlüğüne teşekkürlerimizi arz ederiz. Bilgisayarımızın disk ve ana bellek kapasitesini TBAG-1188 proje kapsamında artırılmasına yaptığı katkıdan dolayı TÜBİTAK'a minnetarız.

Tablo I : Son hal LS simetrisi 2P olan kanalları için eşik enerjileri. Bu enerjiler hem taban hali için hemde uygun iyonik haller için yapılan çok konfigürasyonlu ve öz uyumlu MCHF hesaplarından elde edilmiştir.

T A B L O I	
Fotoiyonlaşma kanalları	Eşik Enerjisi
$3p^6 3d 4s^2(^2D) \rightarrow 3p^6 3d 4s(^1D)kp(^2P)$	-.2443245
$\rightarrow 3p^6 3d 4s(^3D)kp(^2P)$	-.2244494
$\rightarrow 3p^6 4s^2(^1S)kp(^2P)$	-.2678545
$\rightarrow 3p^5 3d(^1F)4s^2kd(^2P)$	-1.4837796
$\rightarrow 3p^5 3d(^1D)4s^2kd(^2P)$	-1.4768570
$\rightarrow 3p^5 3d(^1P)4s^2kd(^2P)$	-1.8290766
$\rightarrow 3p^5 3d(^3F)4s^2kd(^2P)$	-1.3879874
$\rightarrow 3p^5 3d(^3D)4s^2kd(^2P)$	-1.4767526
$\rightarrow 3p^5 3d(^3P)4s^2kd(^2P)$	-1.3375785
$\rightarrow 3p^5 3d(^1P)4s^2ks(^2P)$	-1.8290766
$\rightarrow 3p^5 3d(^3P)4s^2ks(^2P)$	-1.3375786
$\rightarrow 3p^5 3d^2(^1S)4s^2(^2P)$	-1.6277874
$\rightarrow 3p^5 3d^2(^3P)4s^2(^2P)$	-1.8553145
$\rightarrow 3p^5 3d^2(^1D)4s^2(^2P)$	-1.4532593

Tablo II : Son hal LS simetrisi 2D olan kanalları için eşik enerjileri. Bu enerjiler hem taban hali için hemde uygun iyonik haller için yapılan çok konfigürasyonlu ve öz uyumlu MCHF hesaplarından elde edilmiştir.

T A B L O II	
Fotoiyonlaşma kanalları	Eşik Enerjisi
$3p^6 3d 4s^2(^2D) \rightarrow 3p^6 3d 4s(^1D)kp(^2D)$	-0.2443245
$\rightarrow 3p^6 3d 4s(^3D)kp(^2D)$	-0.2244494
$\rightarrow 3p^5 3d(^1F)4s^2kd(^2D)$	-1.4837796
$\rightarrow 3p^5 3d(^1D)4s^2kd(^2D)$	-1.4768570
$\rightarrow 3p^5 3d(^1P)4s^2kd(^2D)$	-1.8290766
$\rightarrow 3p^5 3d(^3F)4s^2kd(^2D)$	-1.3879875
$\rightarrow 3p^5 3d(^3D)4s^2kd(^2D)$	-1.4767526
$\rightarrow 3p^5 3d(^3P)4s^2kd(^2D)$	-1.3375785
$\rightarrow 3p^5 3d(^1P)4s^2ks(^2D)$	-1.4768570
$\rightarrow 3p^5 3d(^3P)4s^2ks(^2D)$	-1.4767527
$\rightarrow 3p^5 3d^2(^1D)4s^2(^2D)$	-1.5871519
$\rightarrow 3p^5 3d^2(^3P)4s^2(^2D)$	-1.4253562
$\rightarrow 3p^5 3d^2(^3F)4s^2(^2D)$	-1.8771136

Tablo III : Son hal LS simetrisi 2F olan kanalları için eşik enerjileri. Bu enerjiler hem taban hali için hemde uygun iyonik haller için yapılan çok konfigürasyonlu ve öz uyumlu MCHF hesaplarından elde edilmiştir.

T A B L O III		
Fotoiyonlaşma kanalları		Eşik Enerjisi
$3p^6 3d 4s^2(^2D)$	$\rightarrow 3p^6 3d 4s(^1D)kp(^2F)$	-.2443245
	$\rightarrow 3p^6 3d 4s(^3D)kp(^2F)$	-.2244494
	$\rightarrow 3p^6 4s^2(^1S)kf(^2F)$	-.2678545
	$\rightarrow 3p^5 3d(^1F)4s^2kd(^2F)$	-1.4837796
	$\rightarrow 3p^5 3d(^1D)4s^2kd(^2F)$	-1.4768570
	$\rightarrow 3p^5 3d(^1P)4s^2kd(^2F)$	-1.8290766
	$\rightarrow 3p^5 3d(^3F)4s^2kd(^2F)$	-1.3879874
	$\rightarrow 3p^5 3d(^3D)4s^2kd(^2F)$	-1.4767526
	$\rightarrow 3p^5 3d(^3P)4s^2kd(^2F)$	-1.3375785
	$\rightarrow 3p^5 3d(^1F)4s^2ks(^2F)$	-1.8290766
	$\rightarrow 3p^5 3d(^3F)4s^2ks(^2F)$	-1.3375786
	$\rightarrow 3p^5 3d^2(^1D)4s^2(^2F)$	-1.4813257
	$\rightarrow 3p^5 3d^2(^3F)4s^2(^2F)$	-1.7596897
	$\rightarrow 3p^5 3d^2(^1G)4s^2(^2F)$	-1.4313740

Tablo IV :Tedirgi hesaplarımızda kullandığımız uyarılmış bağlı orbitallerin HF-bağlanma enerjileri. Bu tabloda n esas kuantum sayısı her açısal momentum için $4 \leq n \leq 14$ arasında değişen tam sayıdır.

T A B L O IV

E_{ns}	E_{np}	E_{nd}	E_{nf}
-.1013024	-.0895650	-.0561139	-.0315082
-.0441735	-.0466283	-.0312457	-.0201972
-.0259372	-.0276423	-.0199471	-.0140235
-.0171369	-.0181746	-.0138433	-.0102967
-.0121793	-.0128360	-.0101700	-.0078781
-.0091046	-.0095414	-.0077876	-.0062208
-.0070649	-.0073685	-.0061546	-.0050362
-.0056421	-.0058611	-.0049866	-.0041603
-.0046101	-.0047729	-.0041223	-.0034946
-.0038377	-.0039620	-.0034650	-.0029768

5. Referanslar

2. Desclaux J P 1975 Comput. Phys. Commun. 9 31-45
3. Grant I P, McKenzie B J, Norrington P H, Meyers D F, and Pyper N C 1980 Comput. Phys. Commun. 21 207-31
1. Kelly H P 1976 In: *Photoionization and Other Probes of Many-Electron Interactions*, edited by Wuilleumier F J (Plenum, New York) 83
2. Brown E R, Carter S L and Kelly H P 1980 Phys. Rev. A 21 1237
3. Qian Z D, Carter S L and Kelly H P 1986 Phys. Rev. A 33 1751
4. James J. Boyle, Zikri Altun, Hugh P. Kelly Phys. Rev. A 47 p 4811-4830 (1993)
5. Zikri Altun J. Phys.B 25 p 2279 (1992)
6. A.F. Starace, Theory of Atomic Photoionization in Corpuscles and Radiation in Matter. I. (1982).
7. Siegbahn H and Karlsson L 1982 In: *Corpuscles and Radiation in Matter I*, Vol. 31 of Encyclopedia of Physics, edited by Mehlhorn W (Springer-Verlag, Berlin), p. 215
8. Sonntag B and Zimmerman P J. Phys.B 911 Rep. Prog. 1992
9. Wetzel H E thesis Universtat Hamburg 1987
10. Robicheaux F and Green C H Phys. Rev. A 48 4429 1993
11. Robicheaux F and Green C H Phys. Rev. A 48 4441 1993
12. Robicheaux F and Amstrong D J Phys. Rev. A 48 4450 1993
13. K.A Brueckner, Phys. Rev. 97, 1353 (1955)
14. Goldstone J 1957 Proc. R. Soc. London A 230
15. Kelly H P 1968 Adv. Theor. Phys. 2, 75
16. Kelly H P 1969 Adv. Chem. Phys. 14 129
17. Manson S T, Msezane A, Starace A F and Shahabi S 1979 Phys.

18. Froese Fischer C *Comput. Phys. Commun.* **14** 1 1978
19. Froese Fischer C *Comput. Phys. Commun.* **14** 145 1991
20. Froese-Fischer, C. (1973). "The Hartree-Fock Method for Atoms." (Wiley, New York).
21. Lindgren I. and Morrison J. "Atomic Many Body Theory". (Springer-Verlag, New York (1982)).
22. Kelly H P 1972 *Phys. Rev. A* **6** 1048
23. Amusia M Ya and Cherepkov N A 1971 *Soviet Phys. - JETP* **33** 90-6 (1970 *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **60** 160-74)
24. Amusia M Ya and Cherepkov N A 1975 *Case. Stud. At. Phys.* **5** 47-179
25. Wendin G 1976 In: *Photoionization and Other Probes of Many-Electron Interactions*, edited by Wuilleumier F J (Plenum, New York) 61-82
26. Kutzner M, Radojević V, Kelly H P, and Altun Z 1990 *Physica Scripta* **40** 823-6

6. Şekil alt yazıları

Şekil 1. Fotoiyonlaşma dipol matris elemanına katkısı olan Brueckner-Goldstone tedirgi grafikleri. Sonunda nokta bulunan kesikli çizgiler dipol etkileşmelerini, ve diğer kesikli çizgiler de coulomb etkileşmelerini temsil etmektedir. Bu grafiklerde p , q ve r taban orbitallerini ve k , k' ve k'' uyarılmış orbitalleri temsil etmektedir.

Şekil 2. Çok kuplajlı denklemlerin sembolik grafik ifadesi.

Şekil 3. Scandium atomunun $3p$, $3d$ ve $4s$ elektronlarının sonhal LS simetrisi 2D kısmi tesir kesitlerinin toplamı. — uzunluk — — — hız ayar sonuçlarını temsil etmektedir.

Şekil 4. Toplam 2D kısmi tesir kesitlerindeki $4s \rightarrow np$ ve $3d \rightarrow nf$ rezonansları — uzunluk — — — hız ayar sonuçlarını temsil etmektedir.

Şekil 5. Toplam 2D kısmi tesir kesitlerindeki $4s \rightarrow np$ rezonanslarının detaylı profilleri. — uzunluk — — — hız ayar sonuçlarını temsil etmektedir.

Şekil 6. Toplam 2D kısmi tesir kesitlerindeki $3p \rightarrow 3d$ rezonanslarının detaylı profilleri. — uzunluk — — — hız ayar sonuçlarını temsil etmektedir.

Şekil 7 Toplam 2D kısmi tesir kesitlerindeki $3p \rightarrow 3d$, $3p \rightarrow nd(ns)$. Dar olanlar ns geniş olanlar ise nd rezonanslarını temsil etmektedir. — uzunluk — — — hız ayar sonuçlarını temsil etmektedir.

Şekil 9 Toplam 2D kısmi tesir kesitlerindeki $3p \rightarrow nd(ns)$. Dar ve kısa olanlar ns geniş ve uzun olanlar ise nd rezonanslarını temsil etmektedir. — uzunluk — — — hız ayar sonuçlarını temsil etmektedir.

Şekil 10. Scandium atomunun 3p, 3d ve 4s elektronlarının sonhal LS simetrisi 2D kısmi tesir kesitlerinin toplam. — uzunluk — — — hız ayar sonuçlarını temsil etmektedir.

Şekil 11. Toplam 2D kısmi tesir kesitlerindeki 4s $\rightarrow$ np ve 3d $\rightarrow$ nf rezonansları — uzunluk — — — hız ayar sonuçlarını temsil etmektedir.

Şekil 12. Toplam 2D kısmi tesir kesitlerindeki 4s $\rightarrow$ np rezonanslarının detaylı profilleri. — uzunluk — — — hız ayar sonuçlarını temsil etmektedir.

Şekil 13. Toplam 2D kısmi tesir kesitlerindeki 3p $\rightarrow$ 3d rezonanslarının detaylı profilleri. — uzunluk — — — hız ayar sonuçlarını temsil etmektedir.

Şekil 14 Toplam 2D kısmi tesir kesitlerindeki 3p $\rightarrow$ 3d, 3p $\rightarrow$ nd(ns). Dar olanlar ns geniş olanlar ise nd rezonanslarını temsil etmektedir. — uzunluk — — — hız ayar sonuçlarını temsil etmektedir.

Şekil 15 Toplam 2D kısmi tesir kesitlerindeki 3p $\rightarrow$ nd(ns). Dar ve kısa olanlar ns geni ve uzun olanlar ise nd rezonanslarını temsil etmektedir. — uzunluk — — — hız ayar sonuçlarını temsil etmektedir.

Şekil 10. Scandium atomunun 3p, 3d ve 4s elektronlarının sonhal LS simetrisi 2P kısmi tesir kesitlerinin toplam. — uzunluk — — — hız ayar sonuçlarını temsil etmektedir.

Şekil 11. Toplam 2P kısmi tesir kesitlerindeki 4s $\rightarrow$ np ve 3d $\rightarrow$ nf rezonansları — uzunluk — — — hız ayar sonuçlarını temsil etmektedir.

Şekil 12. Toplam 2P kısmi tesir kesitlerindeki 4s $\rightarrow$ np

rezonanslarının detaylı profilleri. — uzunluk — — — hız ayar sonuçlarını temsil etmektedir.

Şekil 13. Toplam 2P kısmi tesir kesitlerindeki $3p \rightarrow 3d$ rezonanslarının detaylı profilleri. — uzunluk — — — hız ayar sonuçlarını temsil etmektedir.

Şekil 14 Toplam 2P kısmi tesir kesitlerindeki $3p \rightarrow 3d$, $3p \rightarrow nd(ns)$. Dar olanlar ns geniş olanlar ise nd rezonanslarını temsil etmektedir. — uzunluk — — — hız ayar sonuçlarını temsil etmektedir.

Şekil 15 Toplam 2P kısmi tesir kesitlerindeki $3p \rightarrow nd(ns)$. Dar ve kısa olanlar ns geniş ve uzun olanlar ise nd rezonanslarını temsil etmektedir. — uzunluk — — — hız ayar sonuçlarını temsil etmektedir.

Şekil 16. Scandium atomunun $3p$, $3d$ ve $4s$ elektronlarının sonhal LS simetrisi 2P kısmi tesir kesitlerinin toplam. — uzunluk — — — hız ayar sonuçlarını temsil etmektedir.

Şekil 17. Toplam 2P kısmi tesir kesitlerindeki $4s \rightarrow np$ ve $3d \rightarrow nf$ rezonansları — uzunluk — — — hız ayar sonuçlarını temsil etmektedir.

Şekil 18. Toplam 2P kısmi tesir kesitlerindeki $4s \rightarrow np$ rezonanslarının detaylı profilleri. — uzunluk — — — hız ayar sonuçlarını temsil etmektedir.

Şekil 19. Toplam 2P kısmi tesir kesitlerindeki $3p \rightarrow 3d$ rezonanslarının detaylı profilleri. — uzunluk — — — hız ayar sonuçlarını temsil etmektedir.

Şekil 20. Toplam 2P kısmi tesir kesitlerindeki $3p \rightarrow 3d$, $3p \rightarrow nd(ns)$. Dar olanlar ns geniş olanlar ise nd rezonanslarını temsil etmektedir. — uzunluk — — — hız ayar sonuçlarını temsil

etmektedir.

Şekil 21. Toplam 2P kısmi tesir kesitlerindeki $3p \rightarrow nd(ns)$. Dar ve kısa olanlar ns geniş ve uzun olanlar ise nd rezonanslarını temsil etmektedir. — uzunluk — — — hız ayar sonuçlarını temsil etmektedir.

Şekil 22. Scandium atomunun $3p$, $3d$ ve $4s$ elektronlarının sonhal LS simetrisi 2P , 2D , 2F kısmi tesir kesitlerinin toplamı. — uzunluk — — — hız ayar sonuçlarını temsil etmektedir.

Şekil 23. Toplam tesir kesitindeki $4s \rightarrow np$ ve $3d \rightarrow nf$ rezonansları — uzunluk — — — hız ayar sonuçlarını temsil etmektedir.

Şekil 24. Toplam tesir kesitindeki $4s \rightarrow np$ rezonanslarının detaylı profilleri. — uzunluk — — — hız ayar sonuçlarını temsil etmektedir.

Şekil 25. Toplam tesir kesitindeki $3p \rightarrow 3d$ rezonanslarının detaylı profilleri. — uzunluk — — — hız ayar sonuçlarını temsil etmektedir.

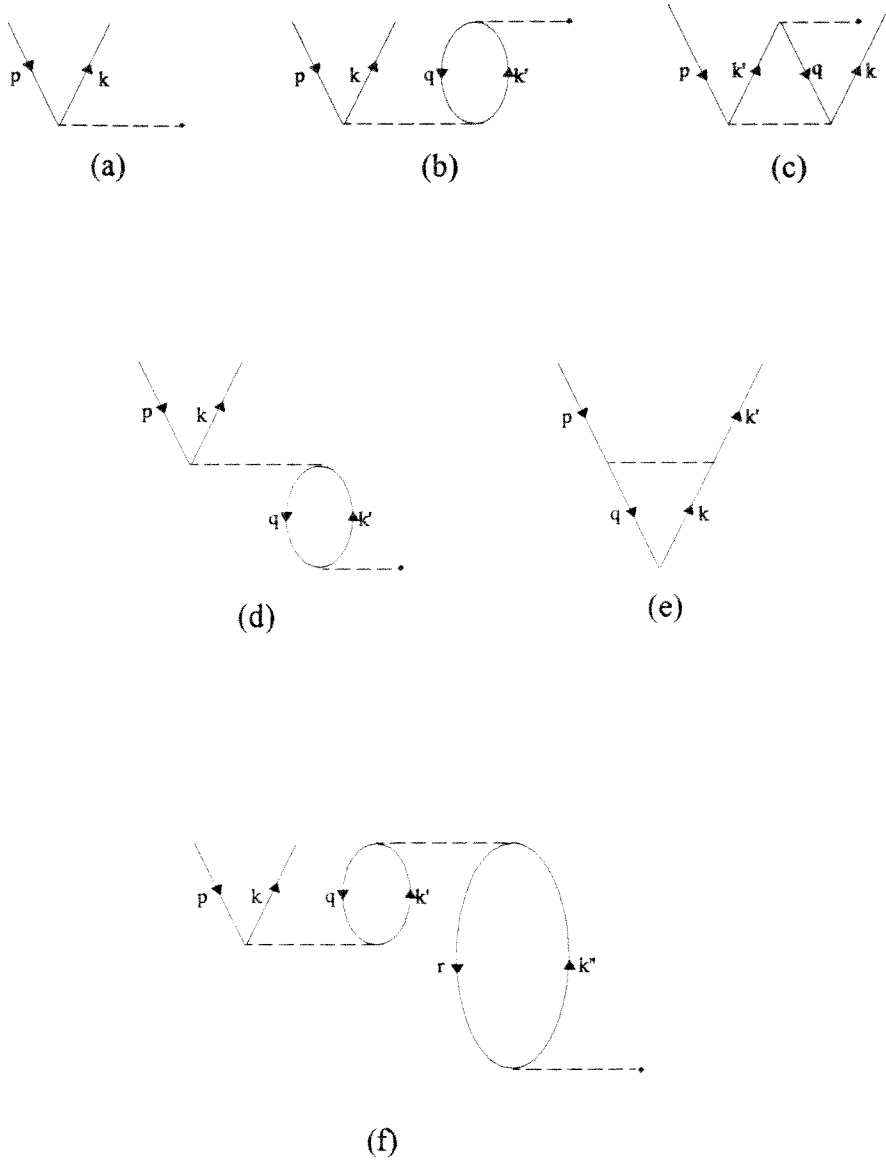
Şekil 26. Toplam tesir kesitlindeki $3p \rightarrow 3d$, $3p \rightarrow nd(ns)$. Dar olanlar ns geniş olanlar ise nd rezonanslarını temsil etmektedir. — uzunluk — — — hız ayar sonuçlarını temsil etmektedir.

Şekil 27. Toplam kesitindeki $3p \rightarrow nd(ns)$. Dar ve kısa olanlar ns geniş ve uzun olanlar ise nd rezonanslarını temsil etmektedir. — uzunluk — — — hız ayar sonuçlarını temsil etmektedir.

$$\begin{array}{c} \nearrow p \\ \searrow k \\ \hline \end{array} = \begin{array}{c} \nearrow p \\ \searrow k \\ \hline \bullet \end{array} + \begin{array}{c} \nearrow p \\ \searrow k \\ \hline \text{---} p \text{---} \text{---} k' \end{array} + \begin{array}{c} \nearrow p \\ \searrow k \\ \hline \text{---} p \text{---} \text{---} k' \end{array} + \begin{array}{c} \nearrow p \\ \searrow k \\ \hline \text{---} p \text{---} \text{---} k' \end{array}$$

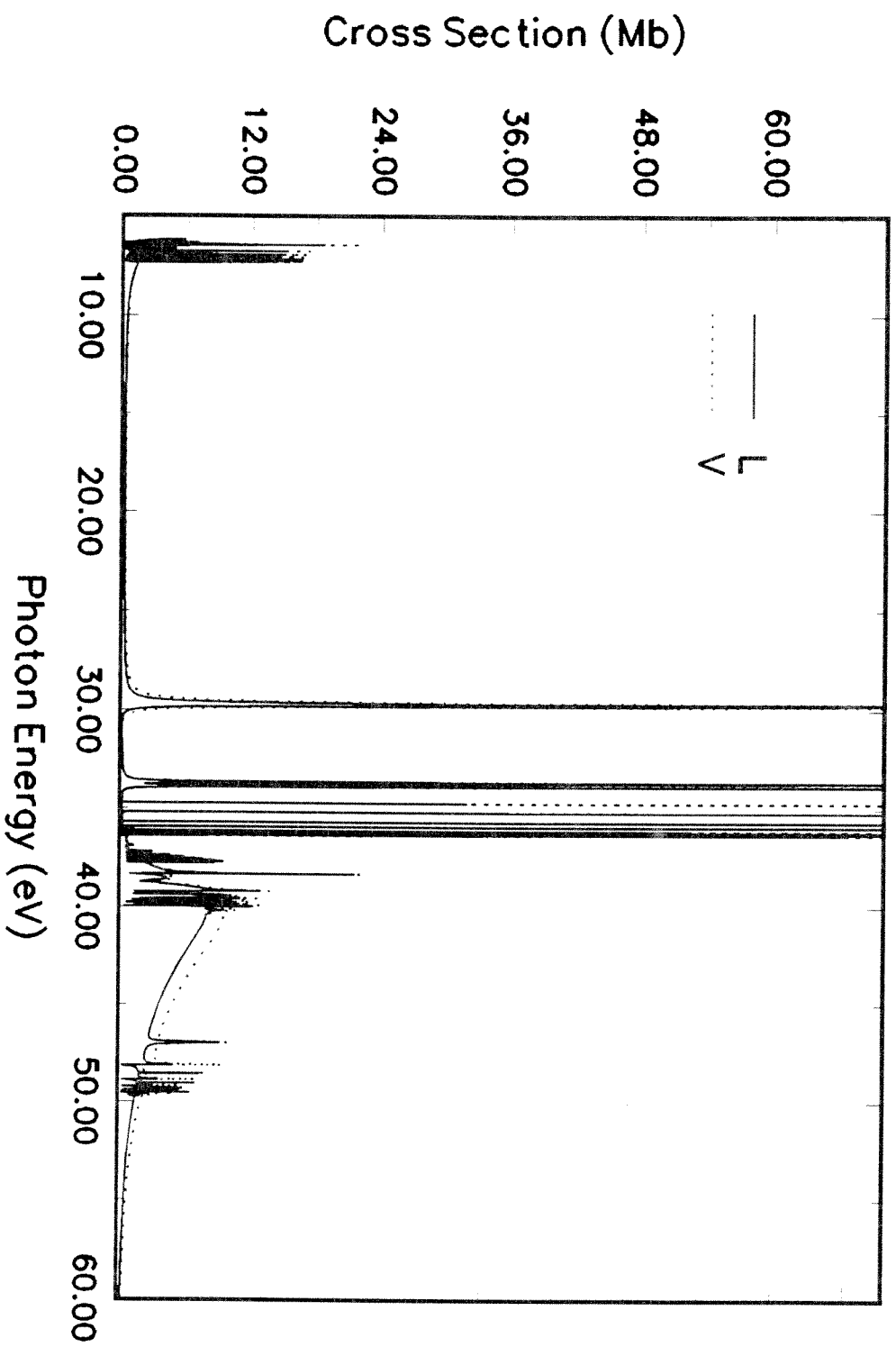
$$\begin{array}{c} \nearrow q \\ \searrow k \\ \hline \end{array} = \begin{array}{c} \nearrow q \\ \searrow k \\ \hline \bullet \end{array} + \begin{array}{c} \nearrow q \\ \searrow k \\ \hline \text{---} p \text{---} \text{---} k' \end{array} + \begin{array}{c} \nearrow q \\ \searrow k \\ \hline \text{---} q \text{---} \text{---} k' \end{array} + \begin{array}{c} \nearrow q \\ \searrow k \\ \hline \text{---} r \text{---} \text{---} k' \end{array}$$

$$\begin{array}{c} \nearrow r \\ \searrow k \\ \hline \end{array} = \begin{array}{c} \nearrow r \\ \searrow k \\ \hline \bullet \end{array} + \begin{array}{c} \nearrow r \\ \searrow k \\ \hline \text{---} p \text{---} \text{---} k' \end{array} + \begin{array}{c} \nearrow r \\ \searrow k \\ \hline \text{---} q \text{---} \text{---} k' \end{array} + \begin{array}{c} \nearrow r \\ \searrow k \\ \hline \text{---} r \text{---} \text{---} k' \end{array}$$

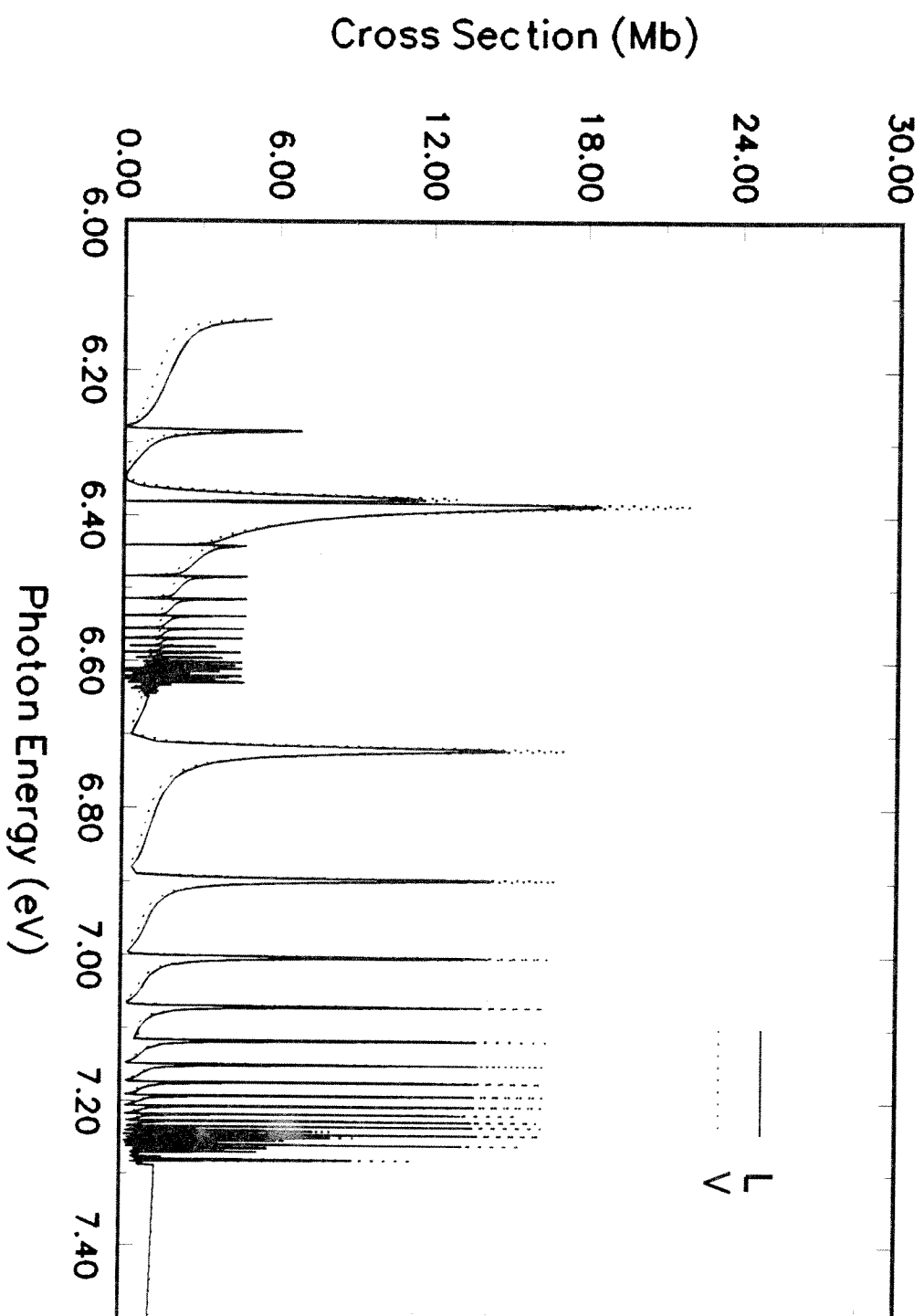


ŞEKİL 1

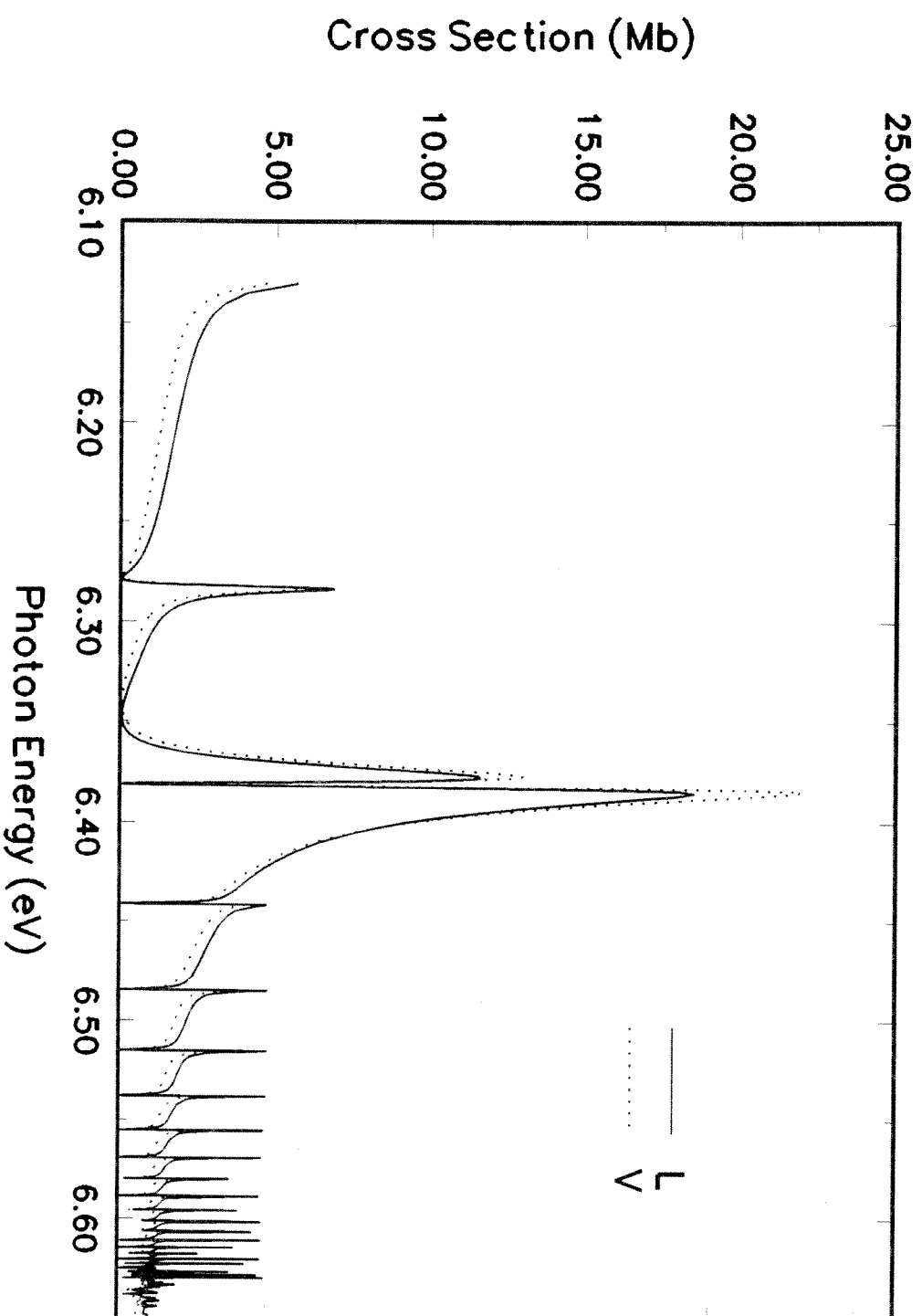
$3p63d4s2(2D) \rightarrow \text{Total } 2P \text{ Cross Section}$



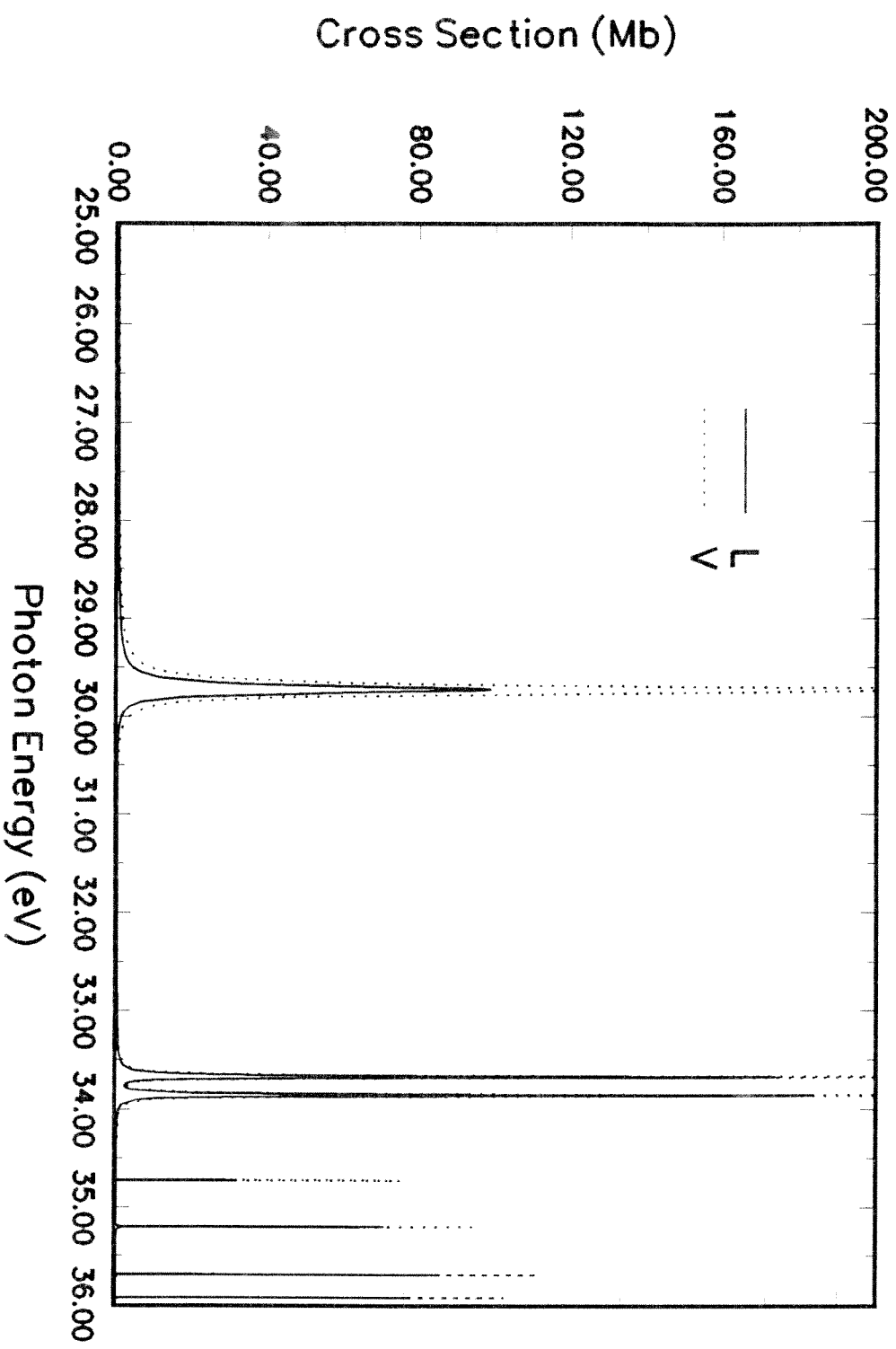
$3p63d4s^2(2D) \rightarrow \text{Total } 2P \text{ Cross Section}$



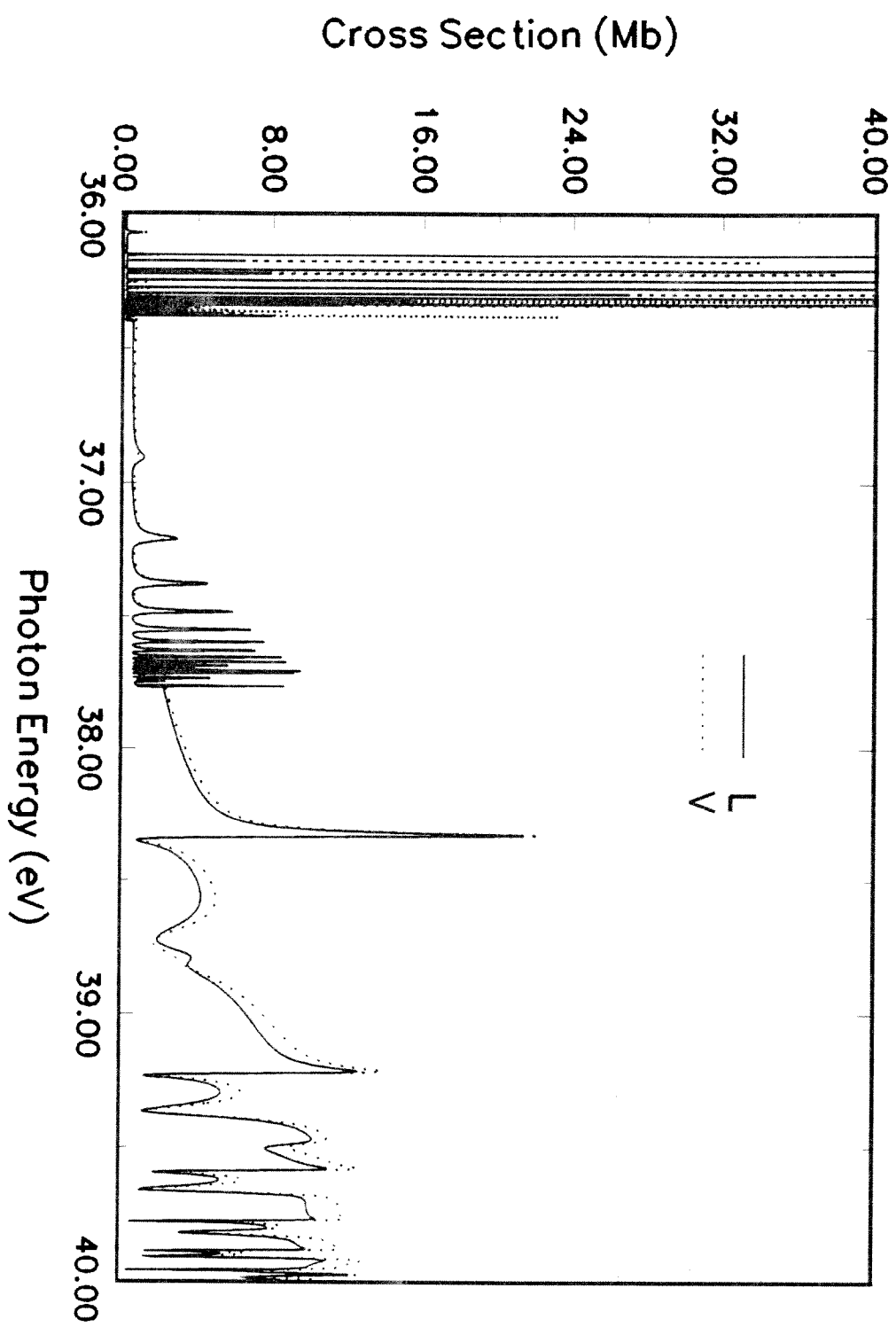
$3p^63d4s^2(2D) \rightarrow$ Total 2P Cross Section



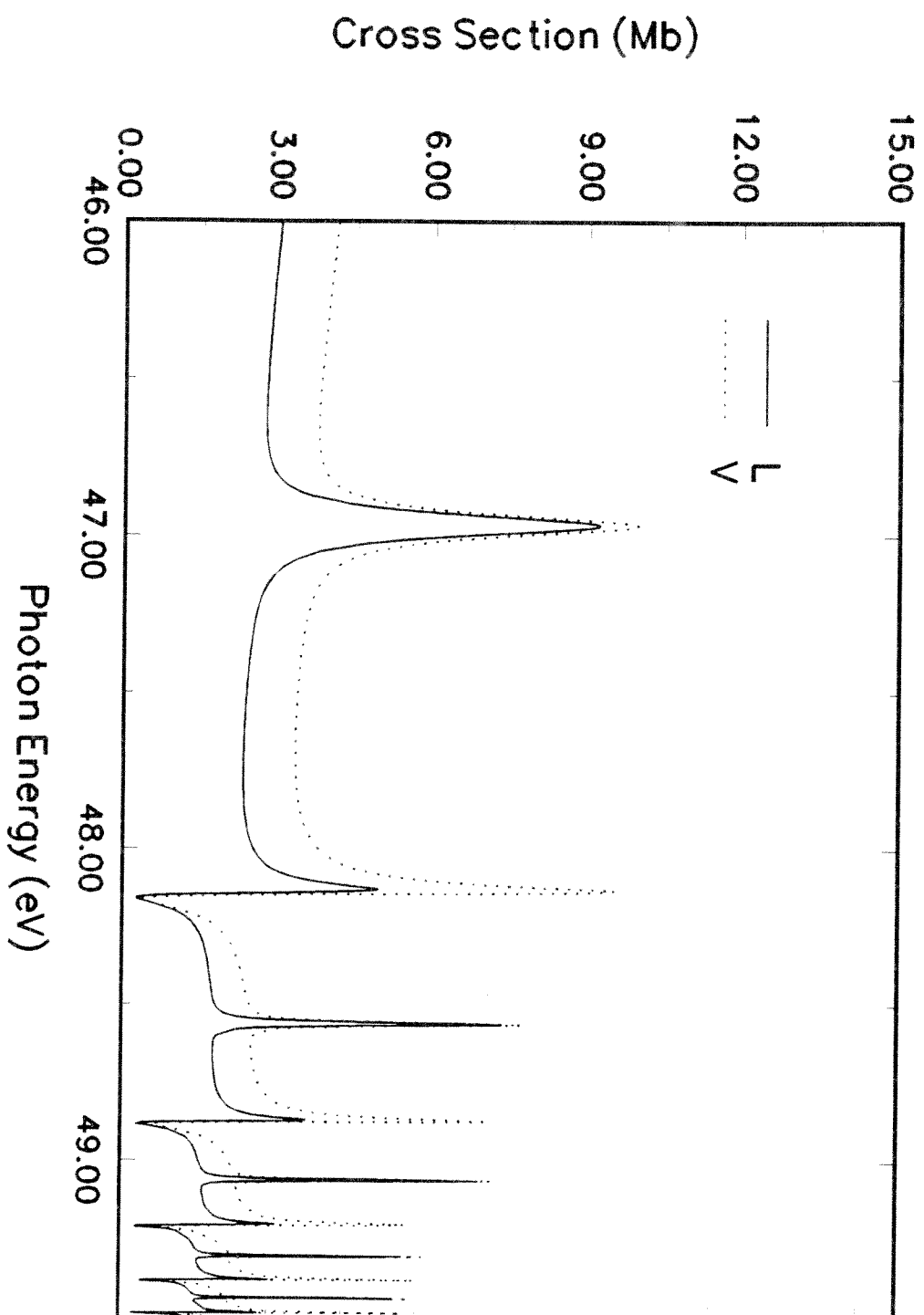
$3p63d4s^2(2D) \rightarrow \text{Total } 2P \text{ Cross Section}$



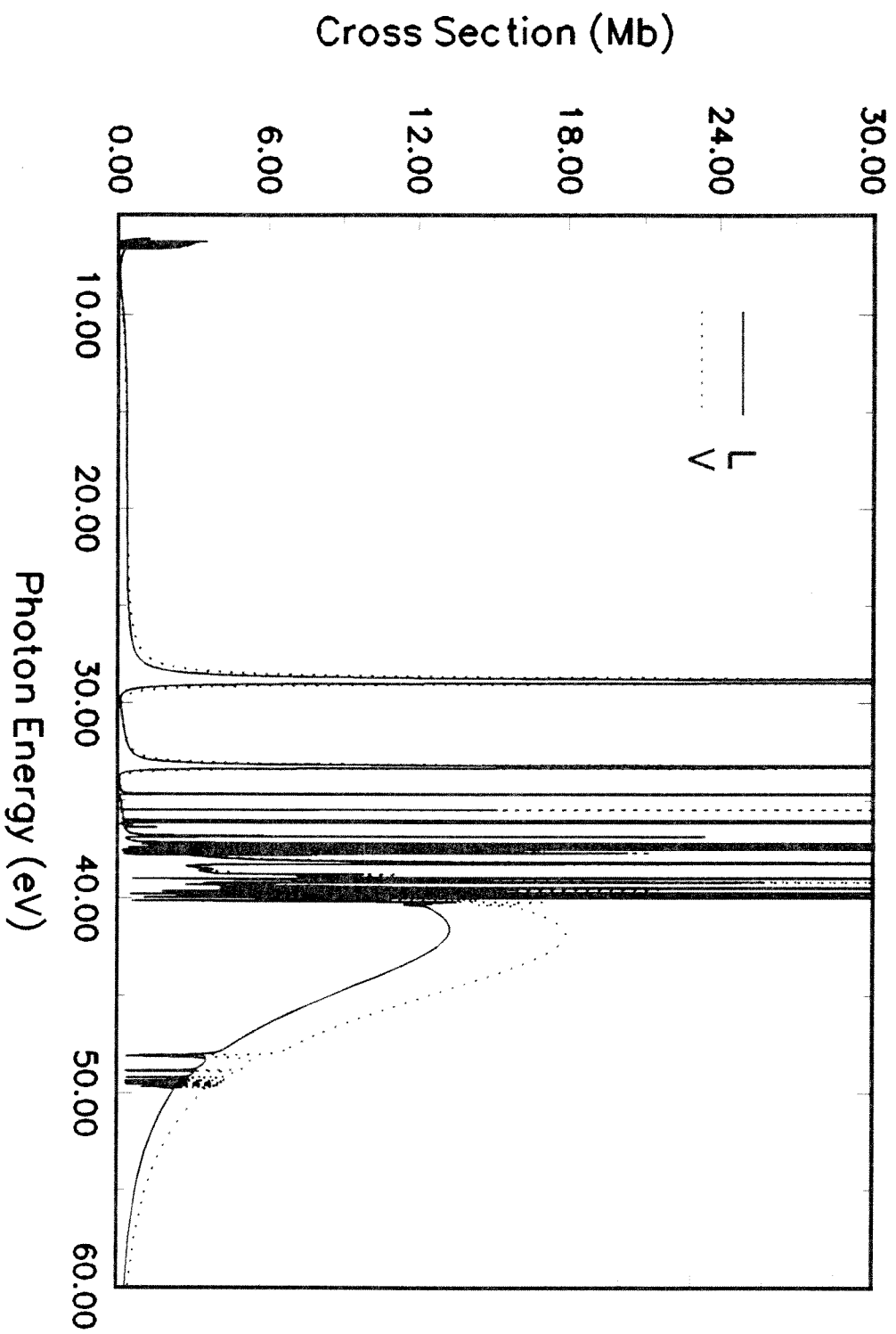
$3p63d4s2(2D) \rightarrow$ Total 2P Cross Section



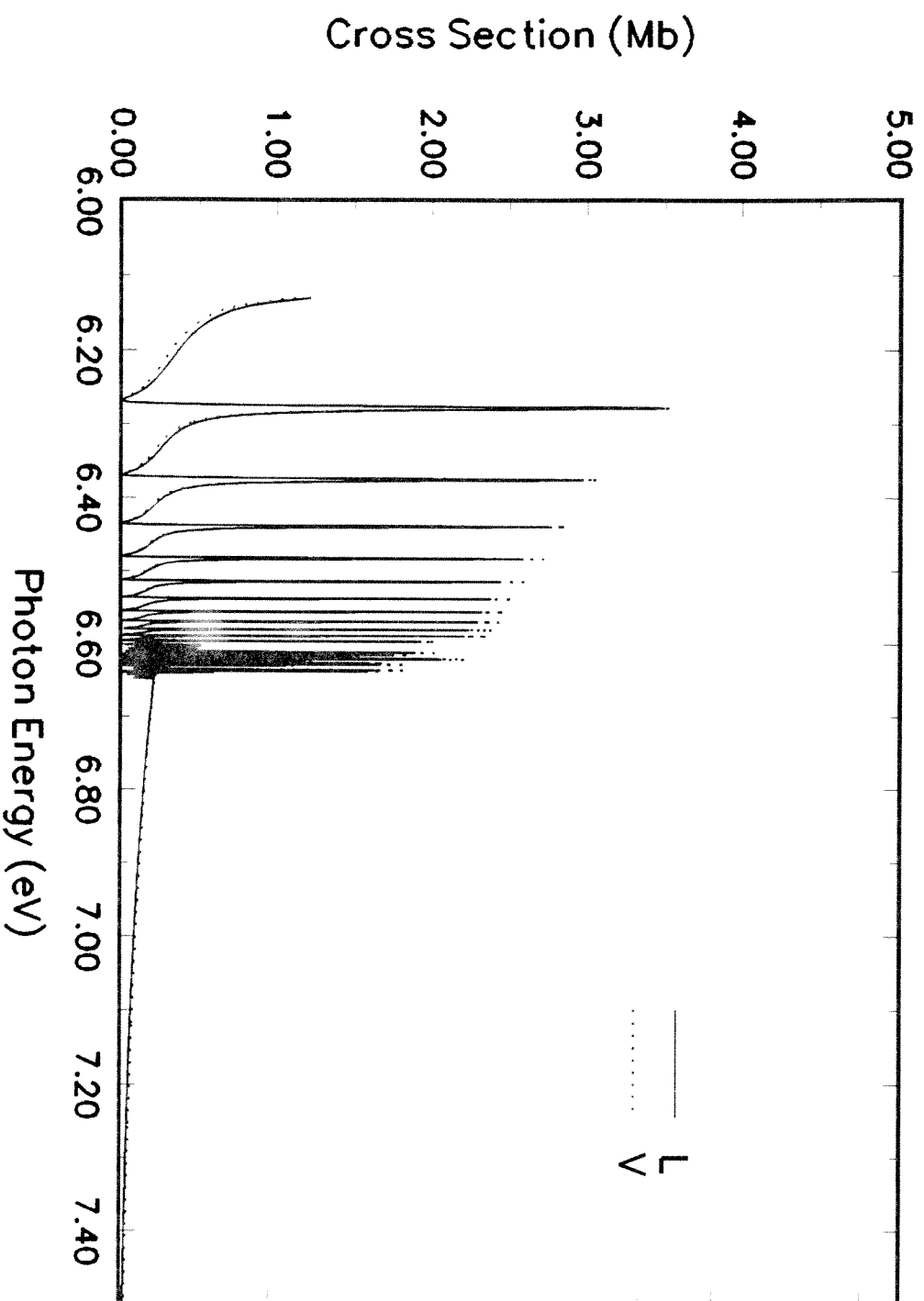
$3p63d4s^2(2D) \rightarrow \rightarrow$ Total 2P Cross Section



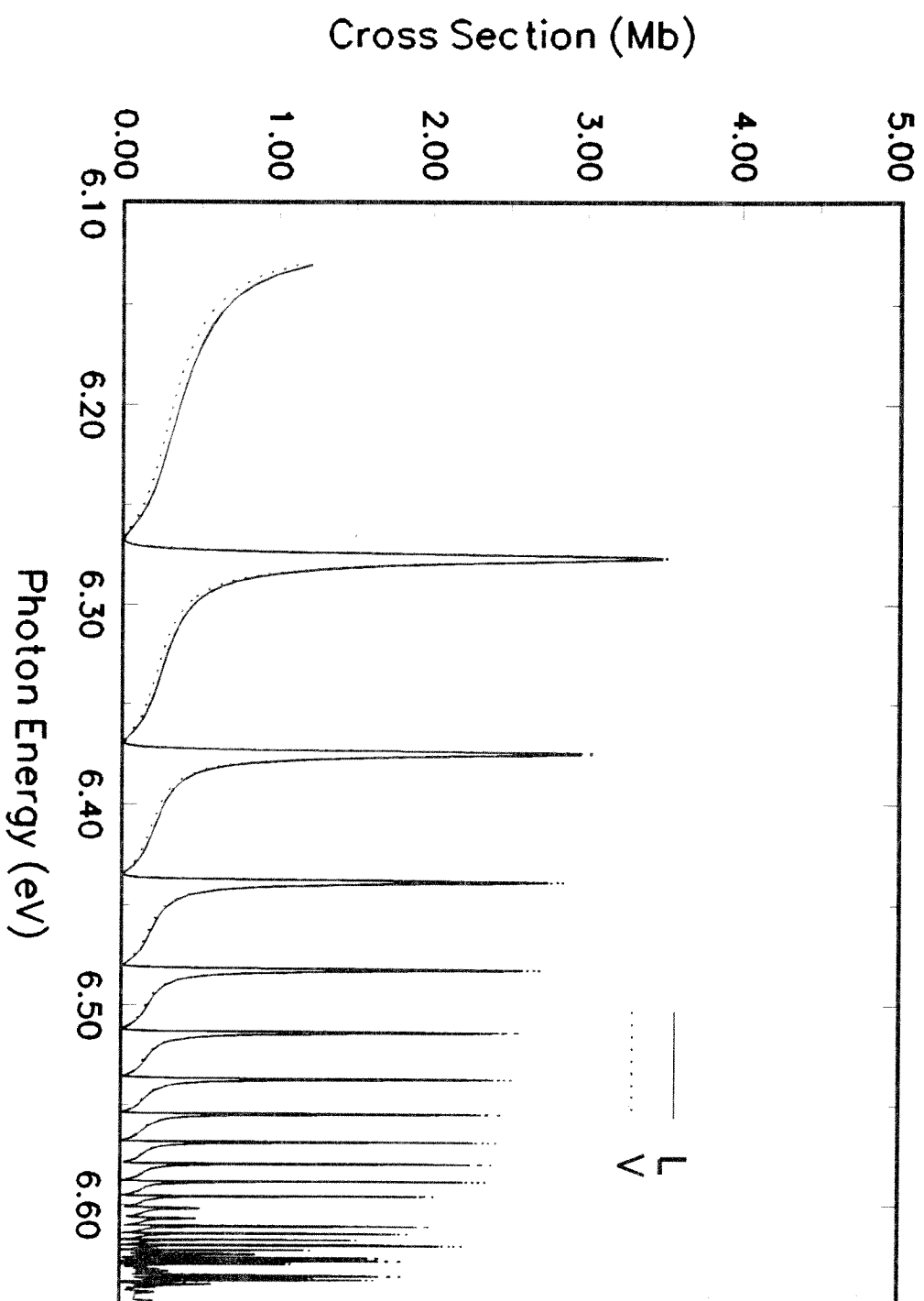
3p63d4s2--> Total 2D Cross Section



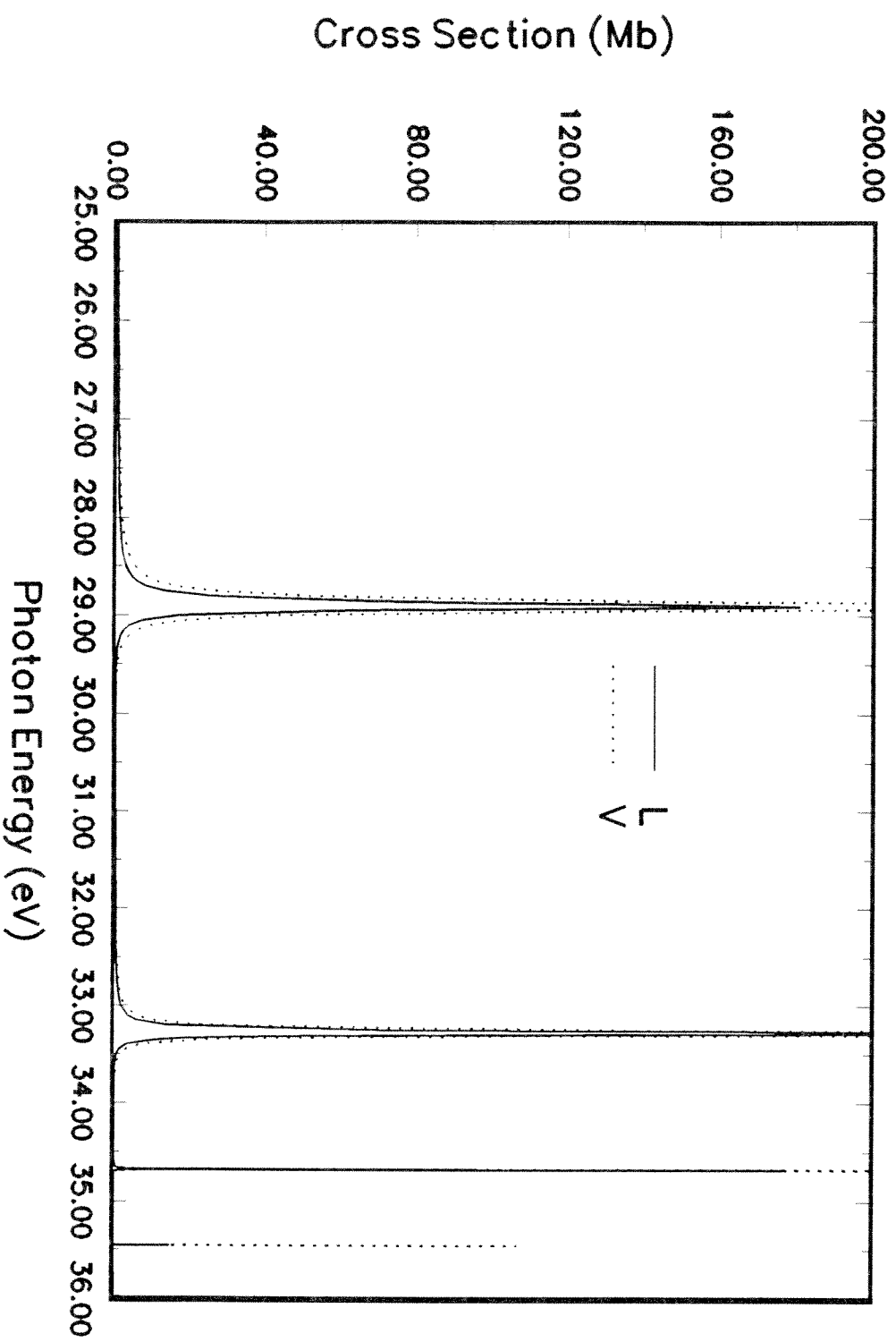
$3p63d4s2 \rightarrow$ Total 2D Cross Section



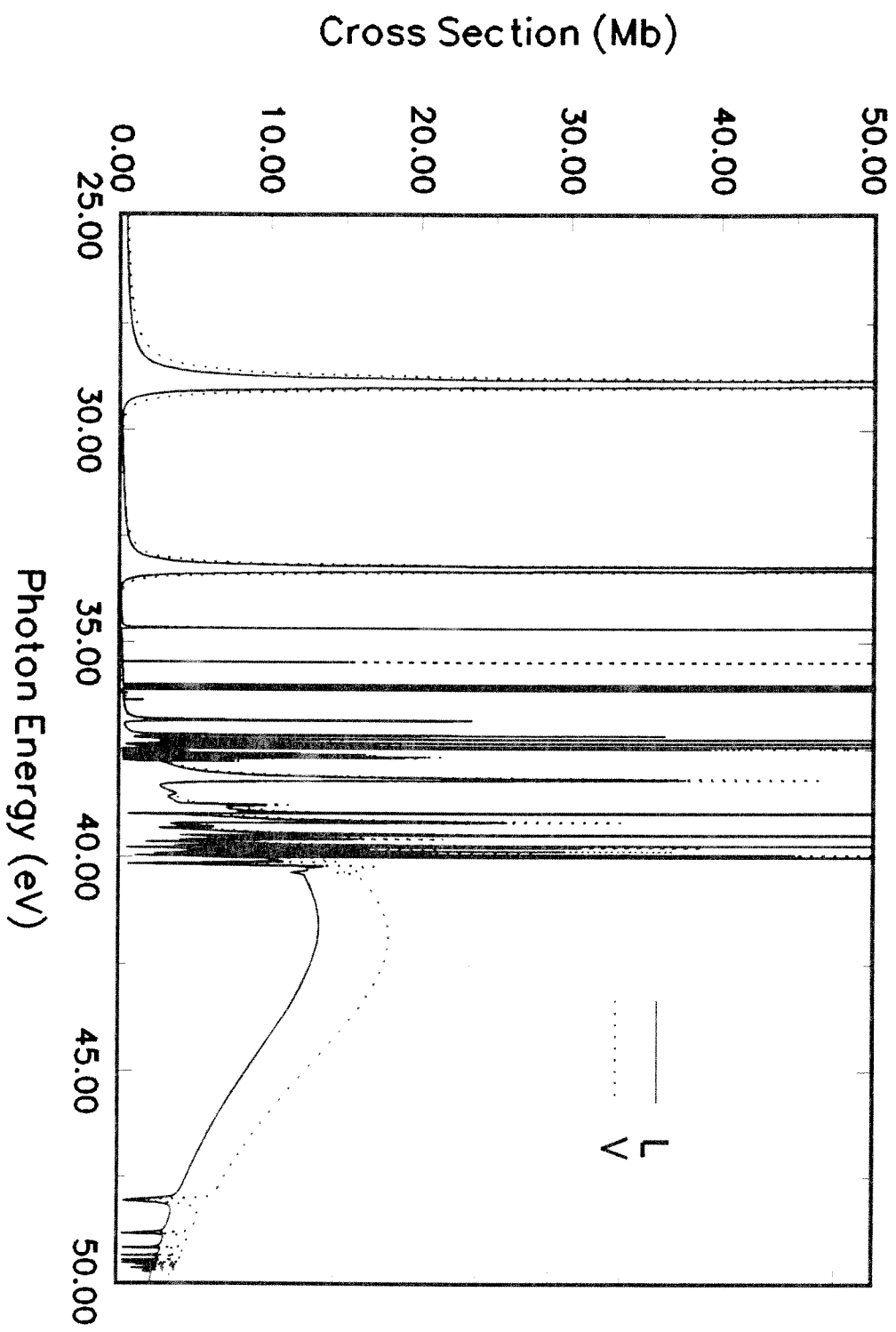
$3p63d4s^2 \rightarrow \gamma$ Total 2D Cross Section



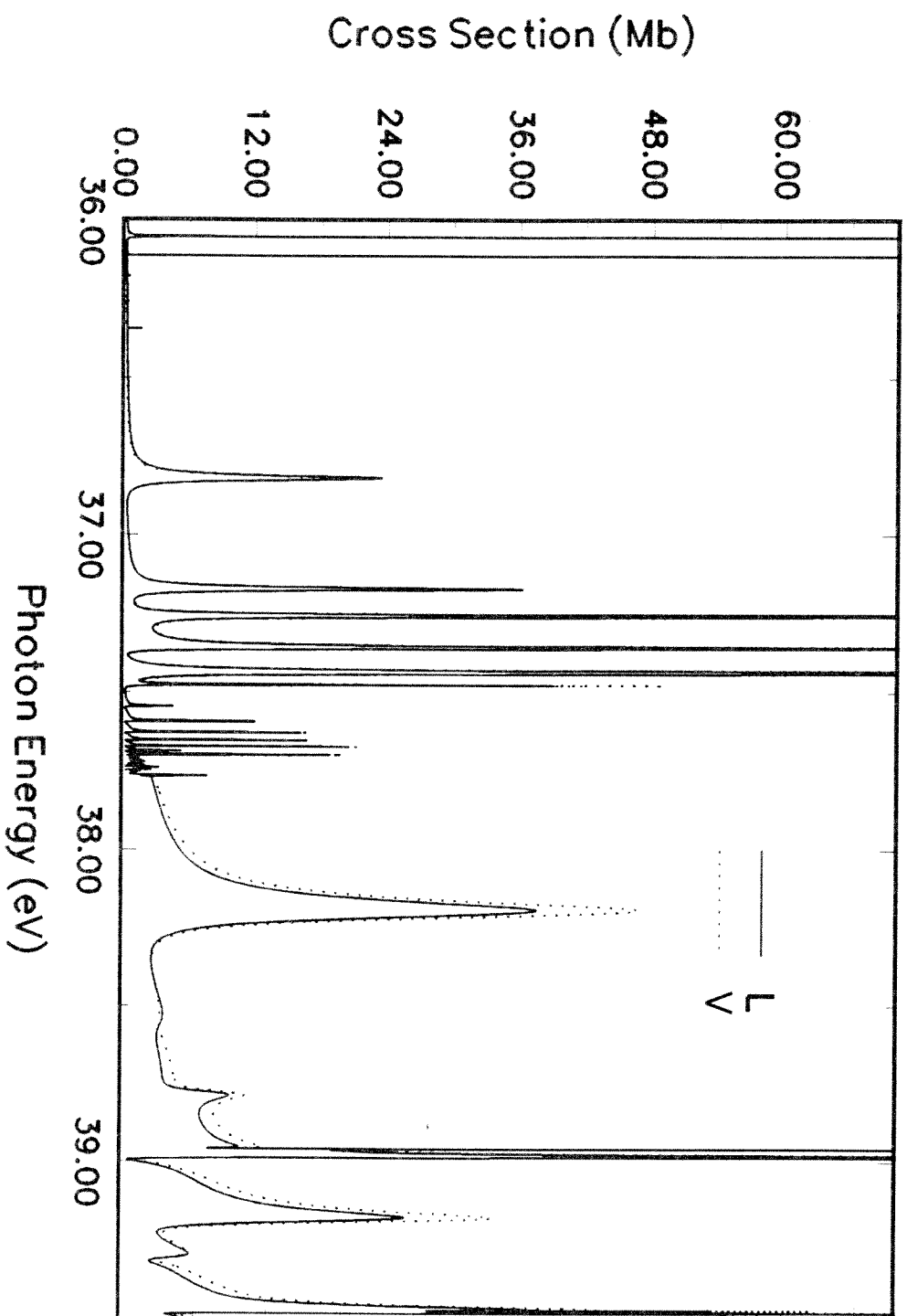
$3p^63d4s^2 \rightarrow \gamma$ Total 2D Cross Section



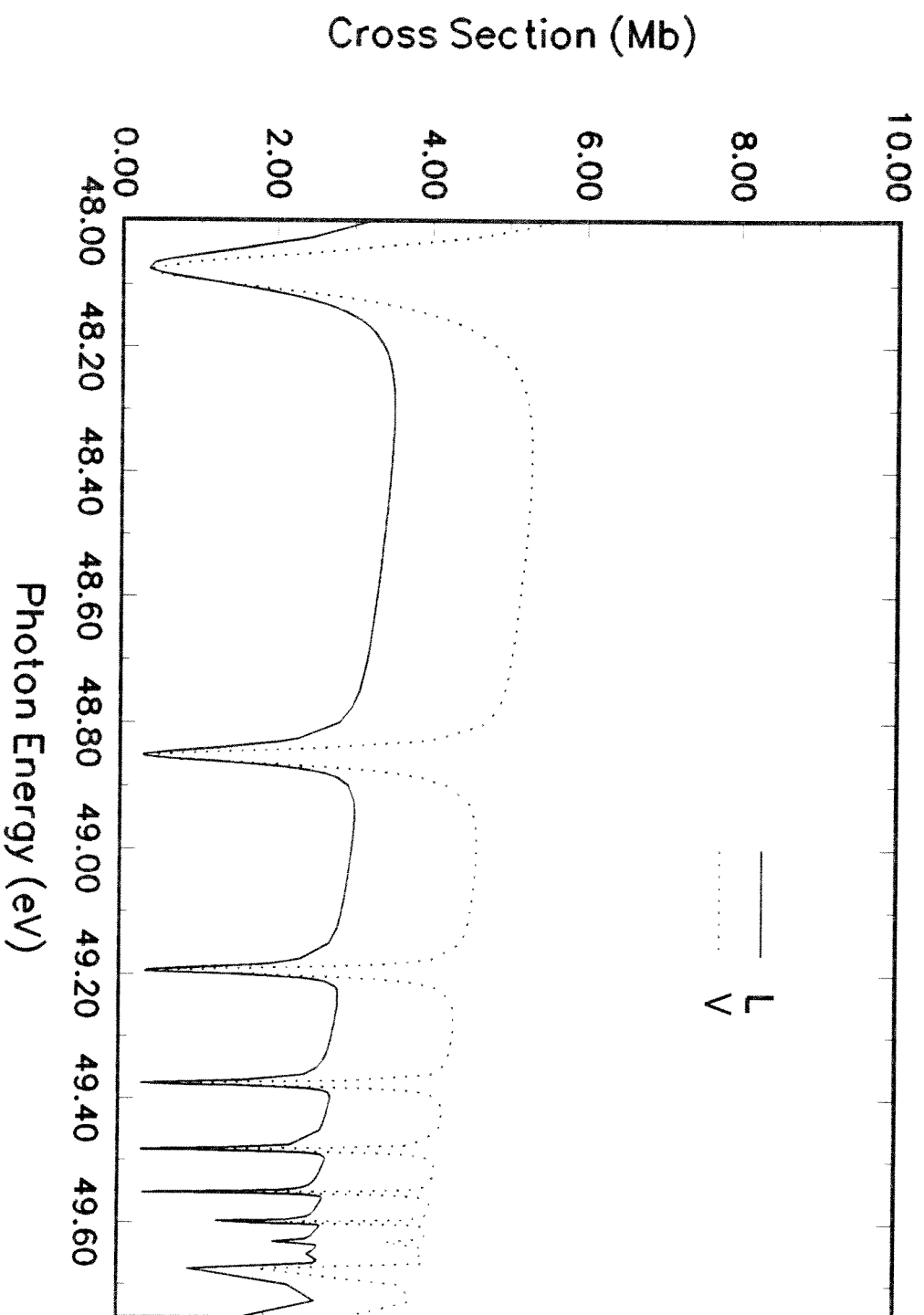
$3p63d4s^2 \rightarrow \gamma$ Total 2D Cross Section



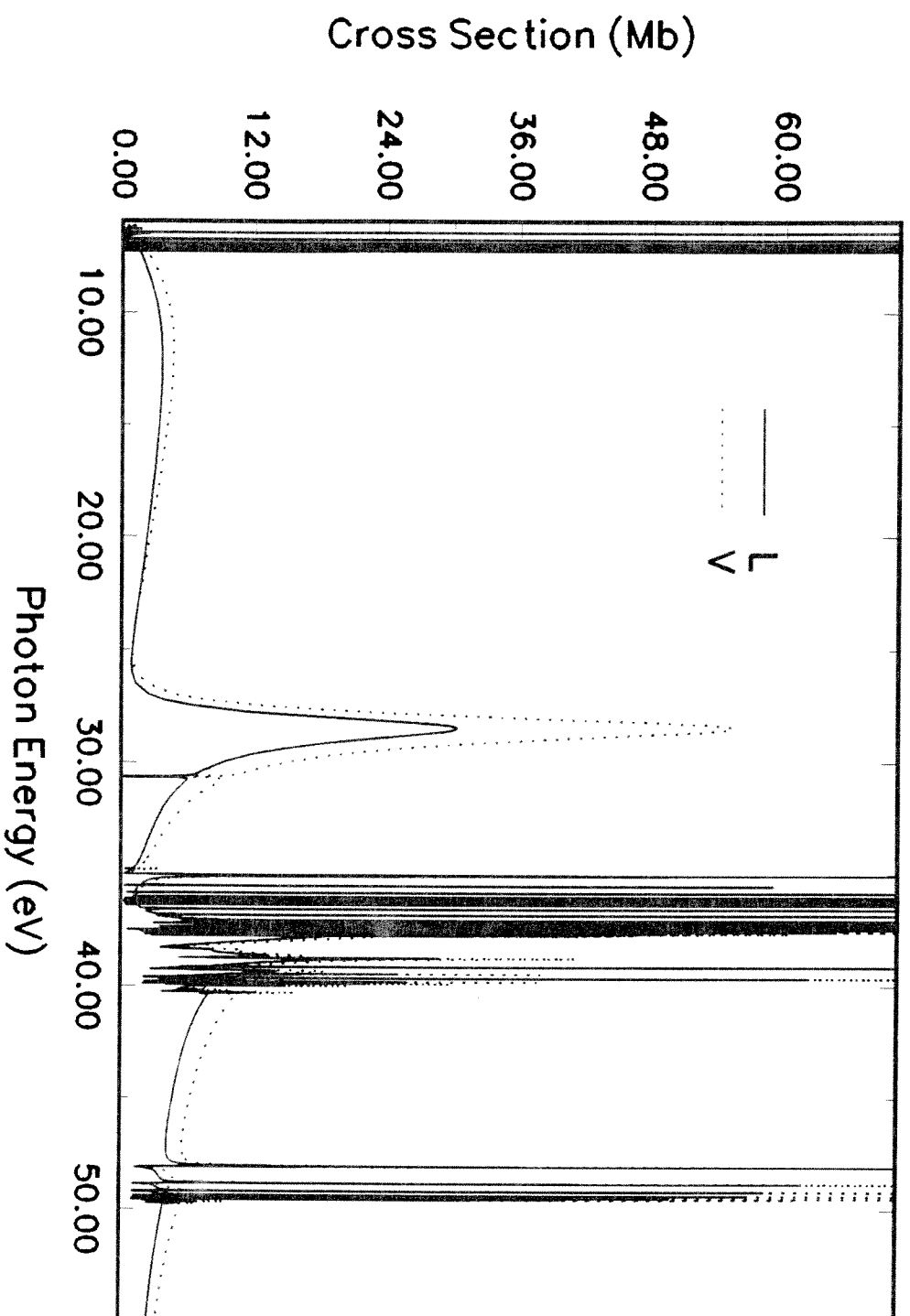
$3p^63d4s^2 \rightarrow \gamma$ Total 2D Cross Section



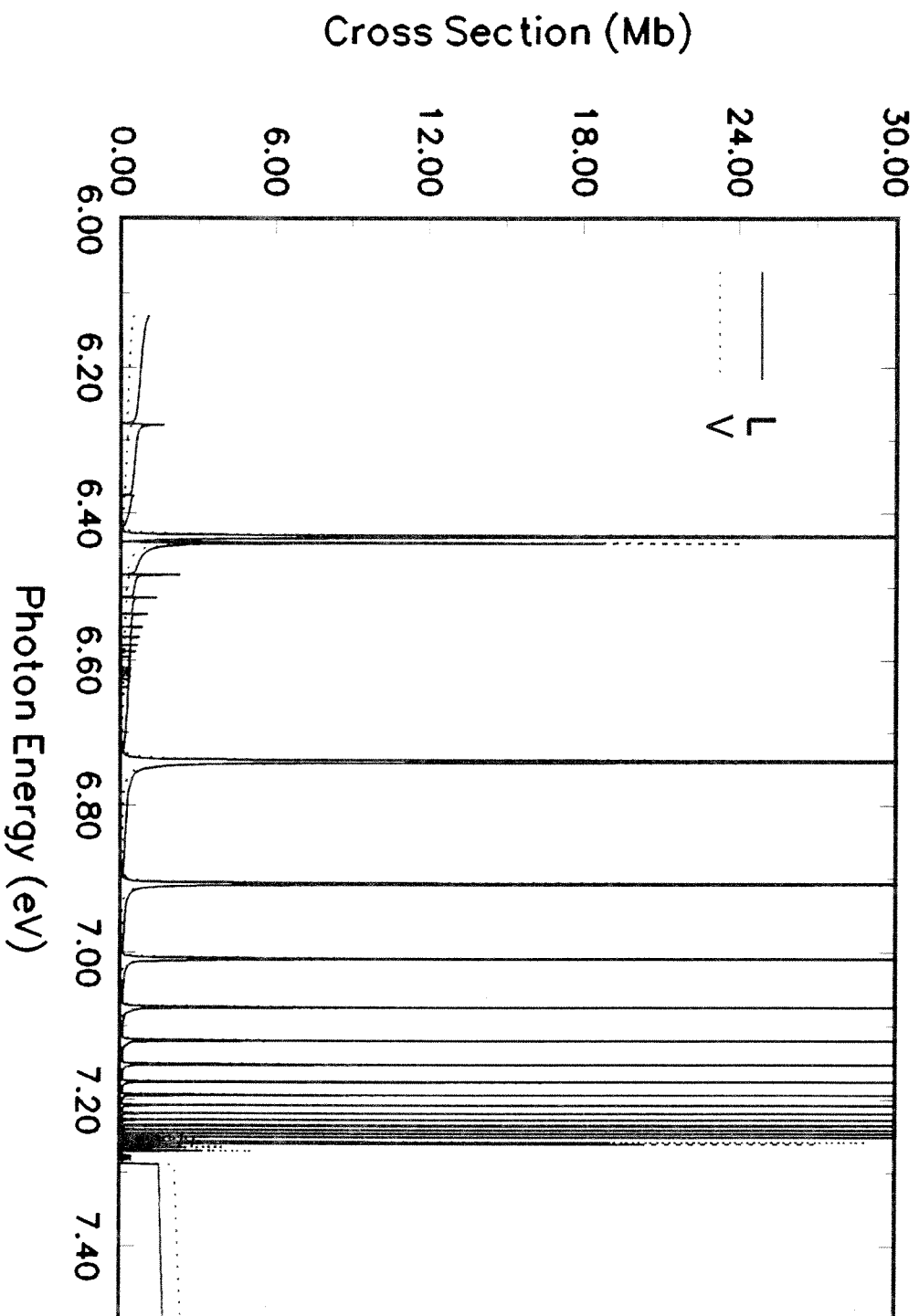
$3p63d4s^2 \rightarrow$ Total 2D Cross Section



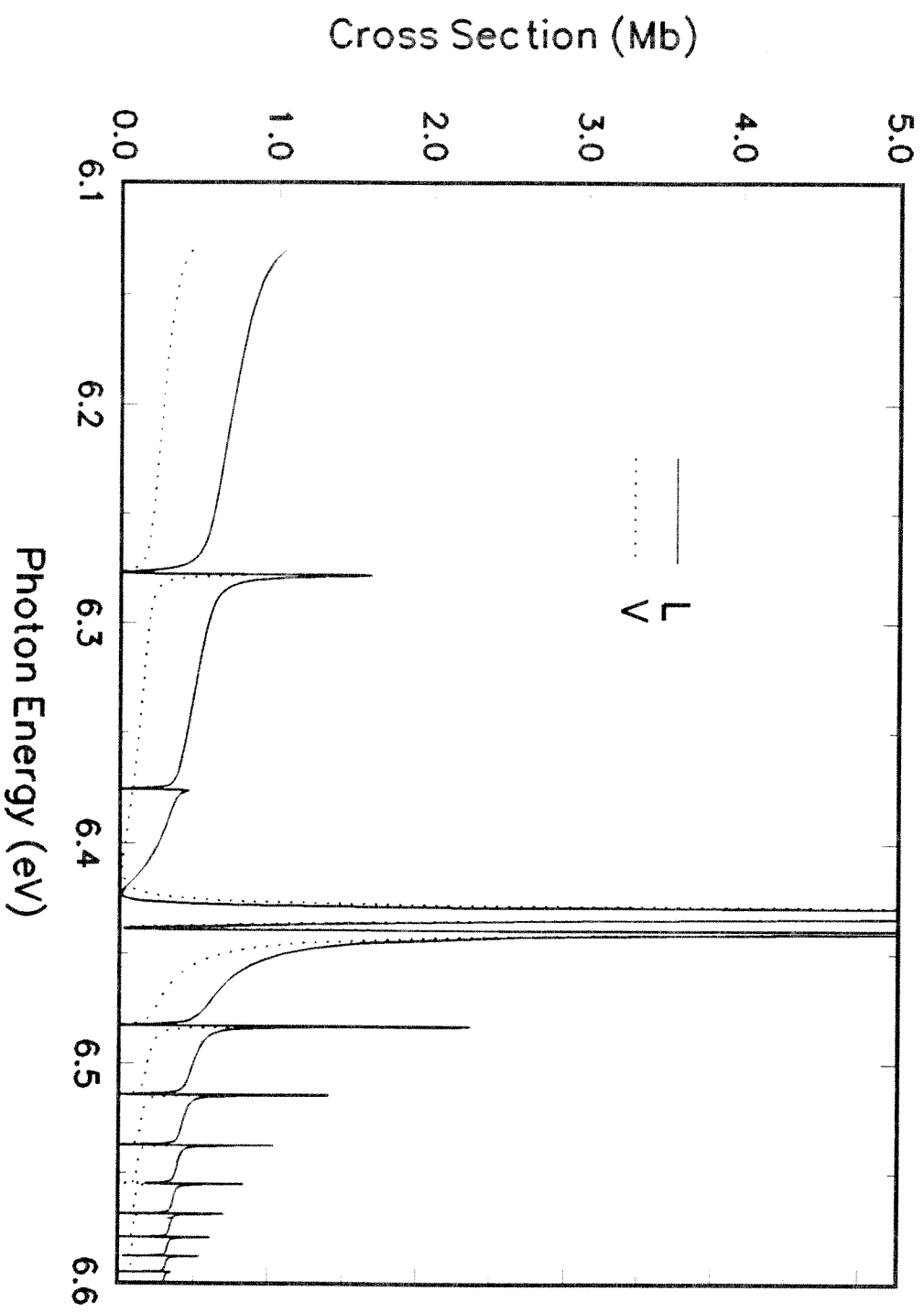
$3p^63d4s^2 \rightarrow \text{Total } (2F) \text{ Cross Section}$



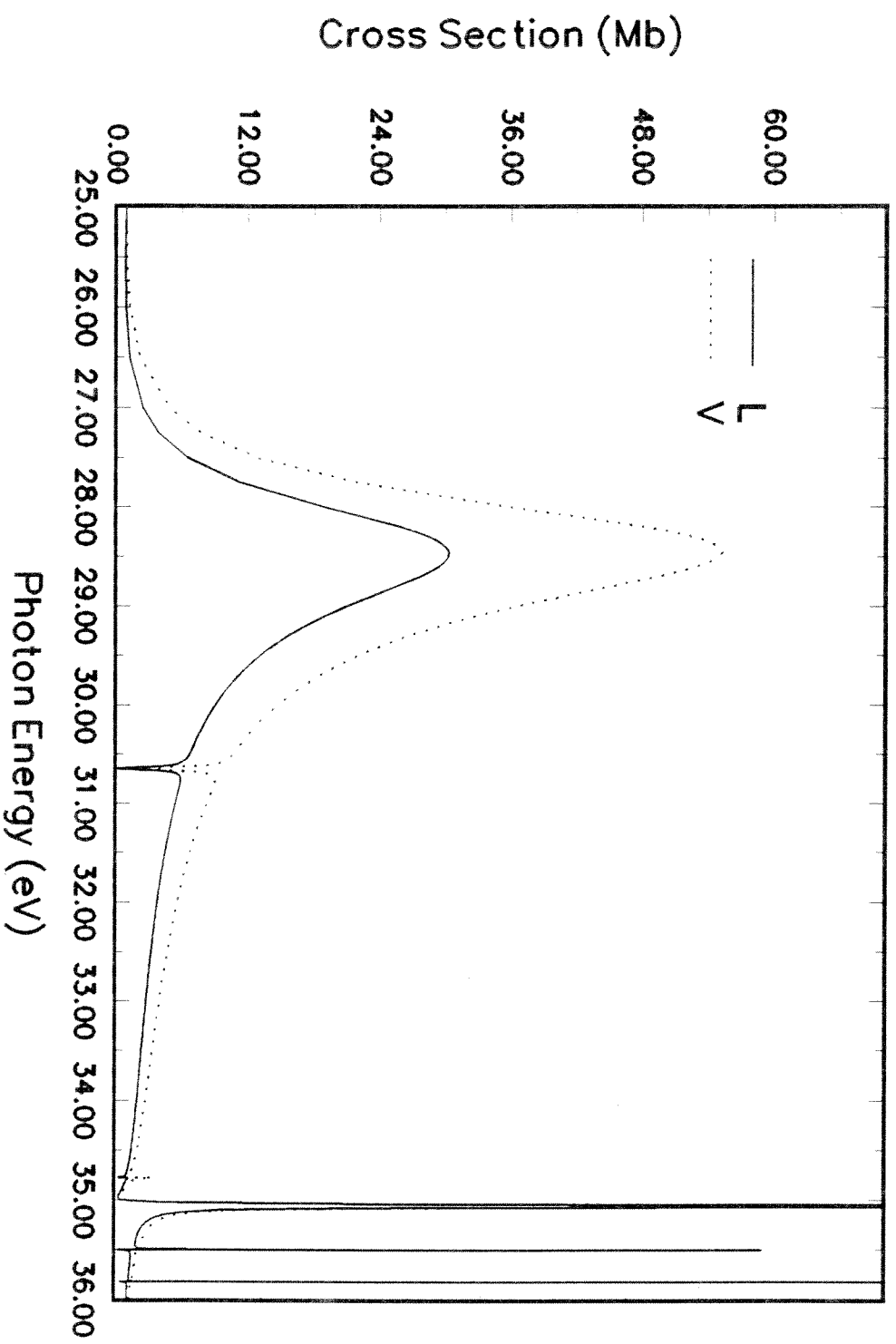
$3p63d4s^2 \rightarrow \text{Total } (2F) \text{ Cross Section}$



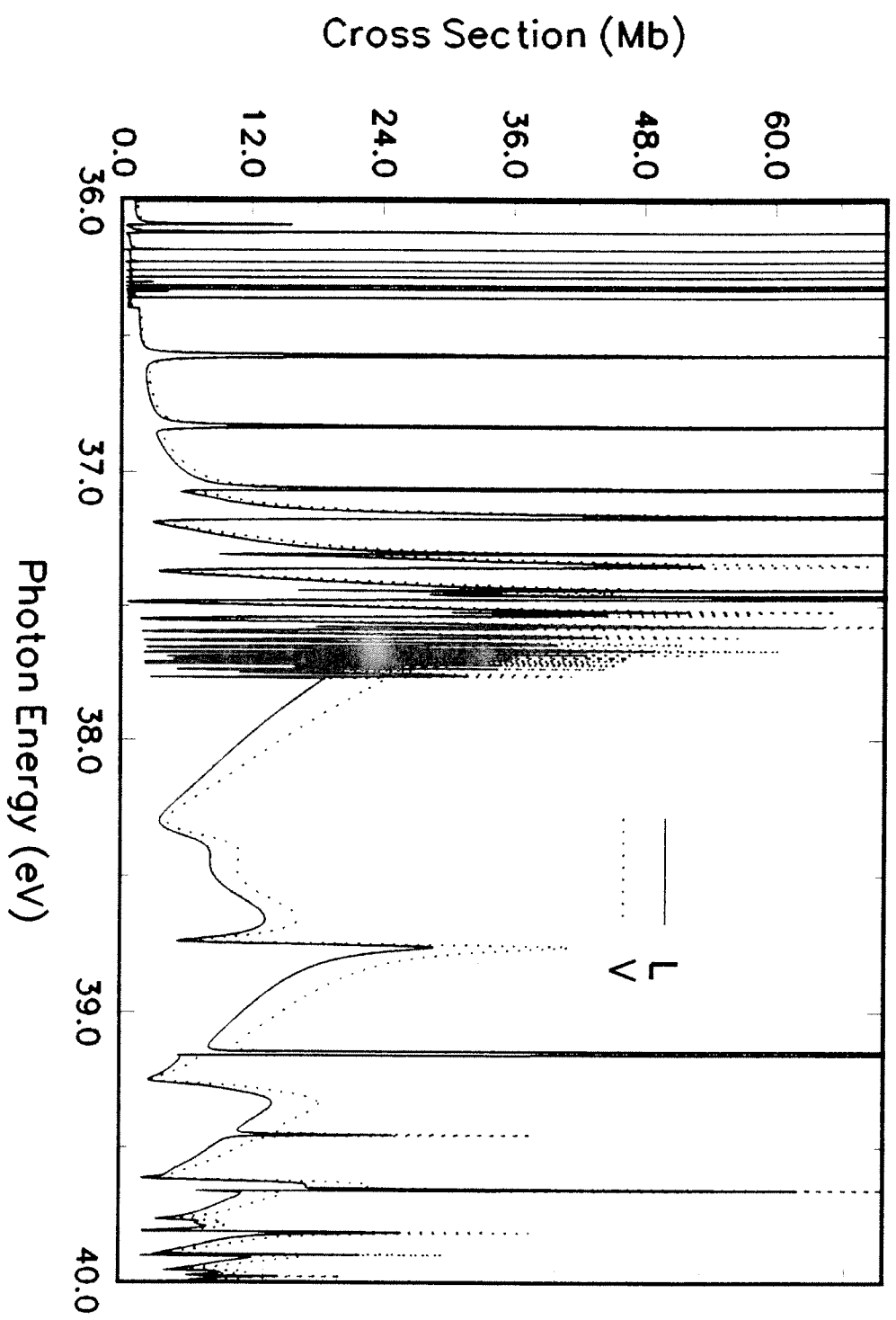
$3p^6 3d 4s^2 \rightarrow$ Total (2F) Cross Section



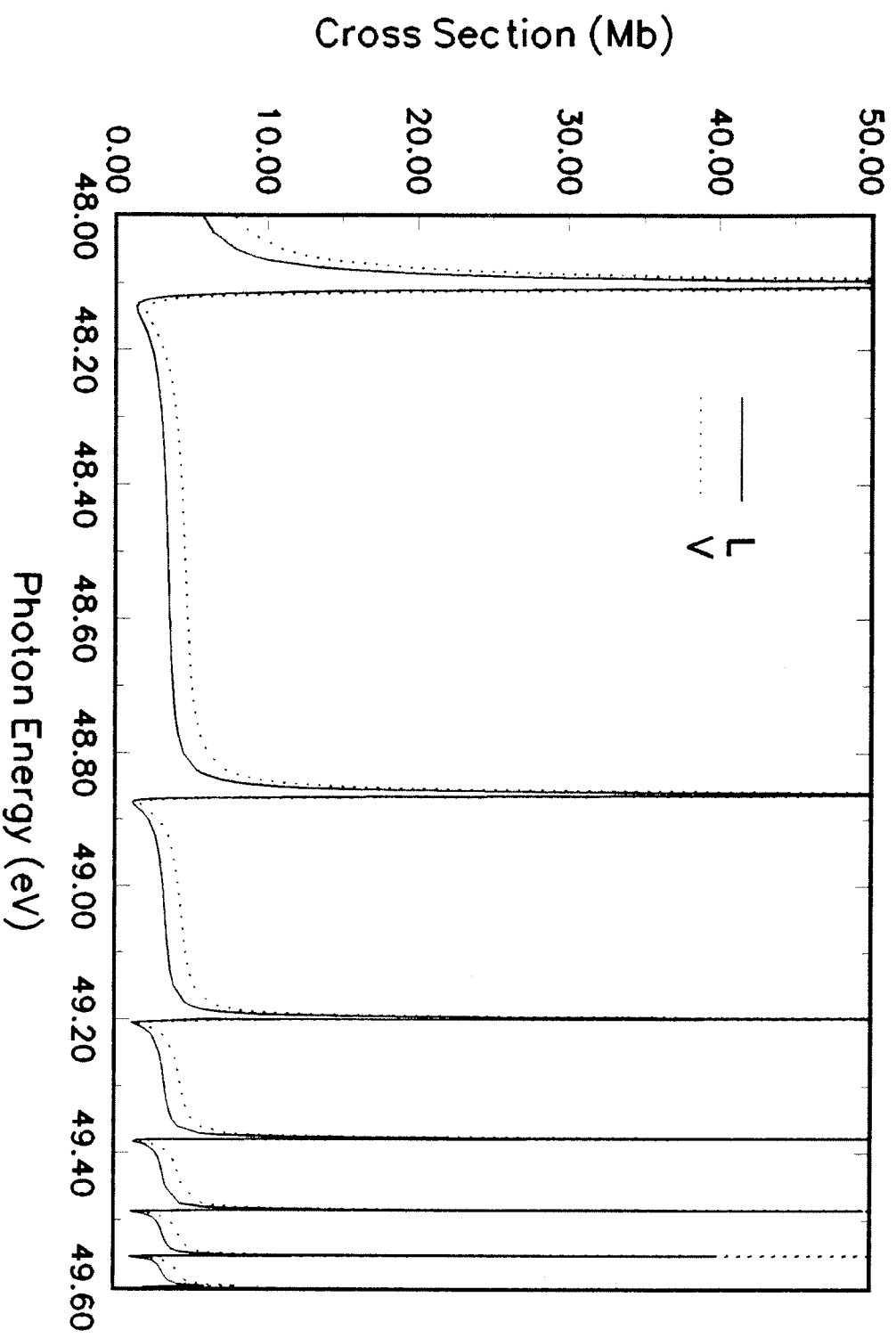
$3p63d4s2 \rightarrow \text{Total } (2F)$ Cross Section



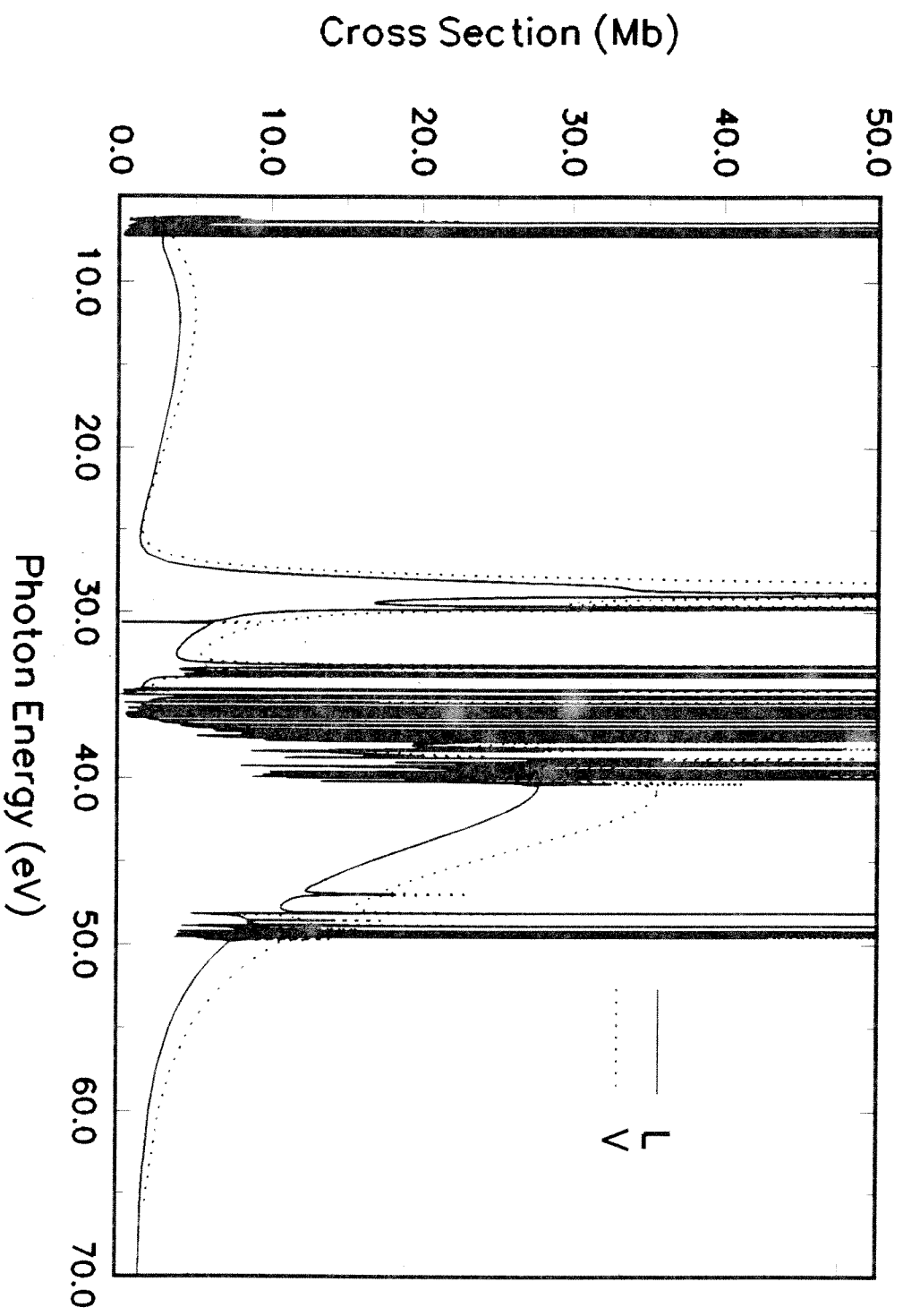
$3p63d4s2 \rightarrow$ Total (2F) Cross Section



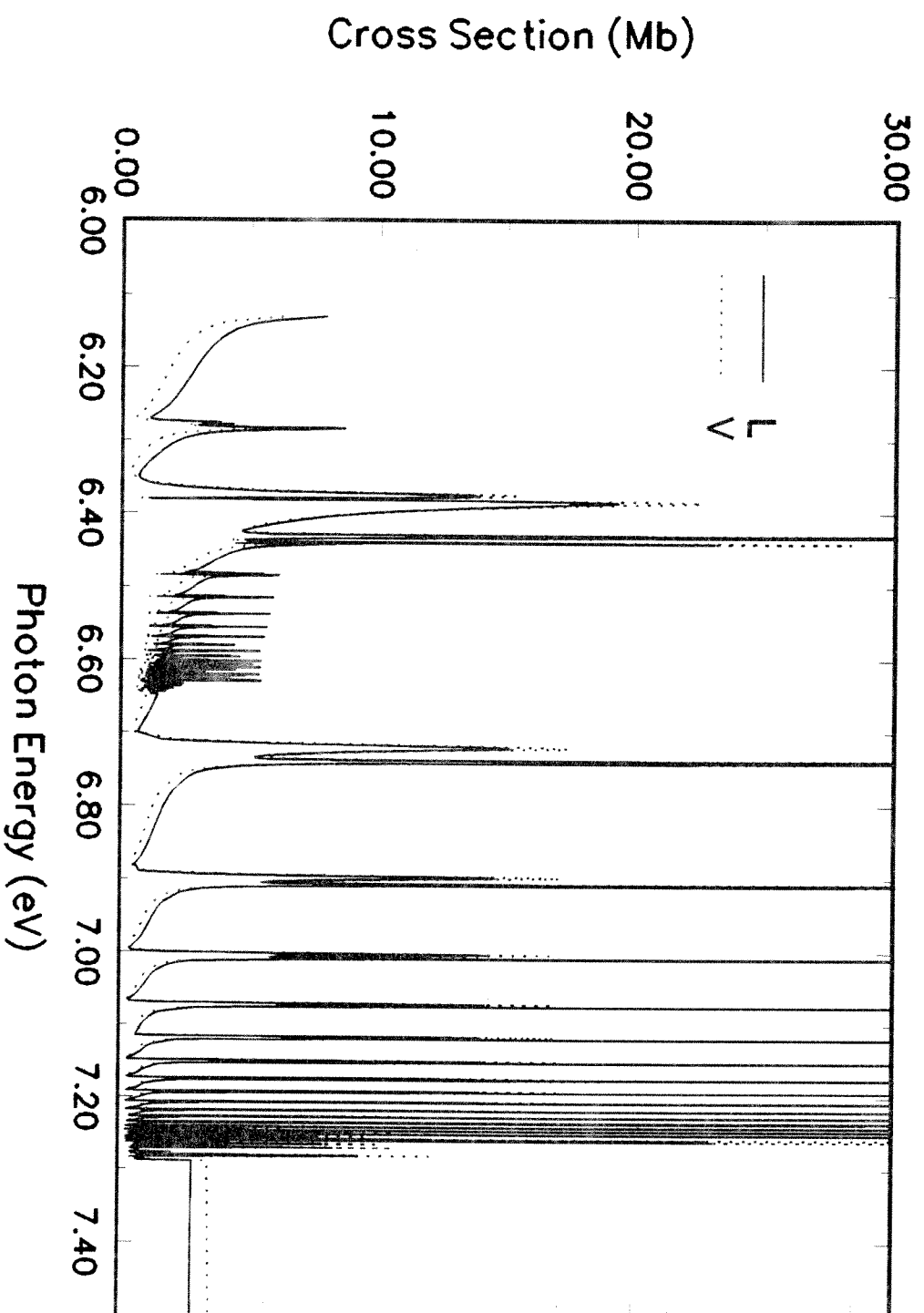
$3p^63d4s^2 \rightarrow$ Total (2F) Cross Section



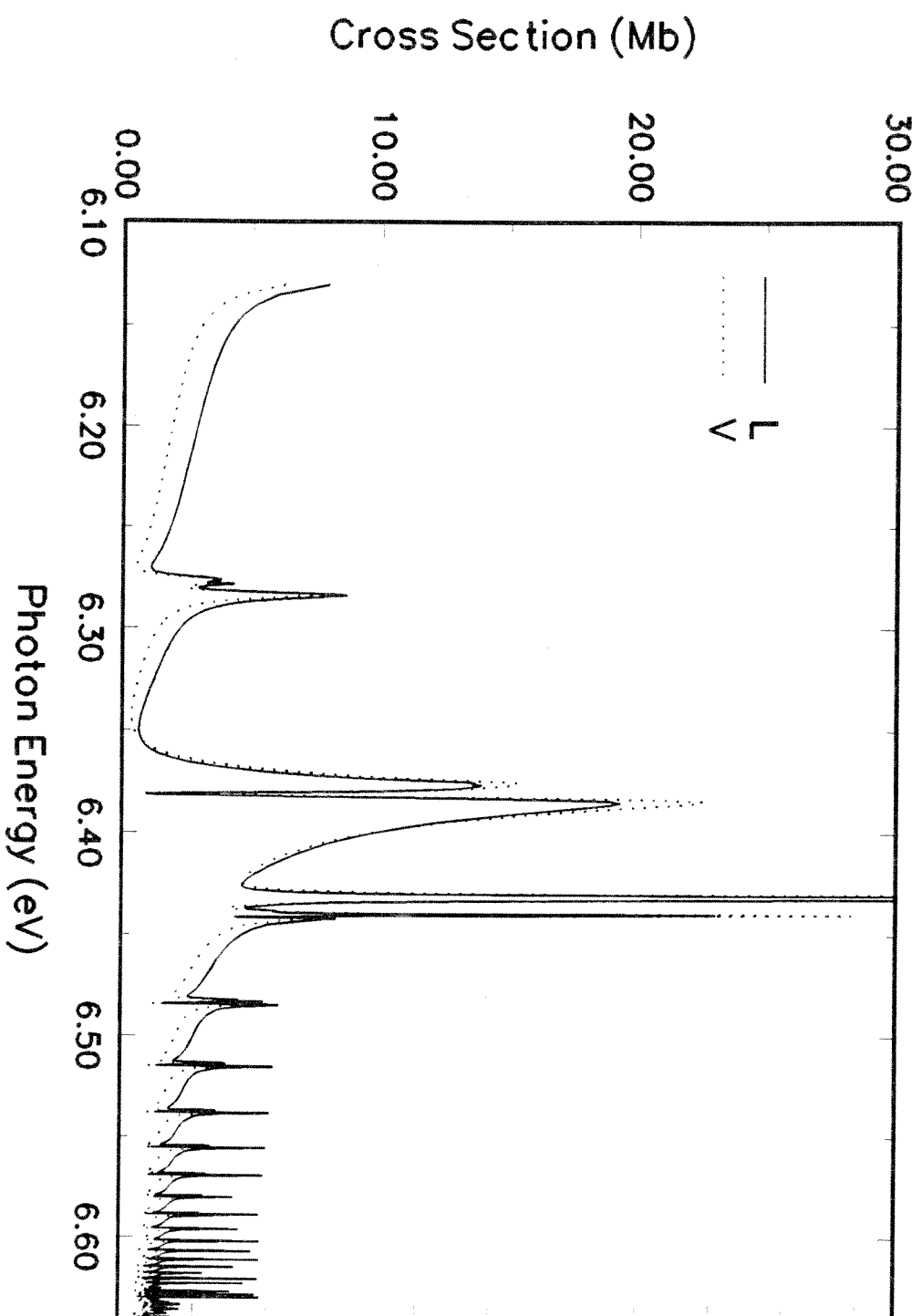
$3p63d4s2 \rightarrow \gamma$ Total (2P + 2D + 2F) Cross Section



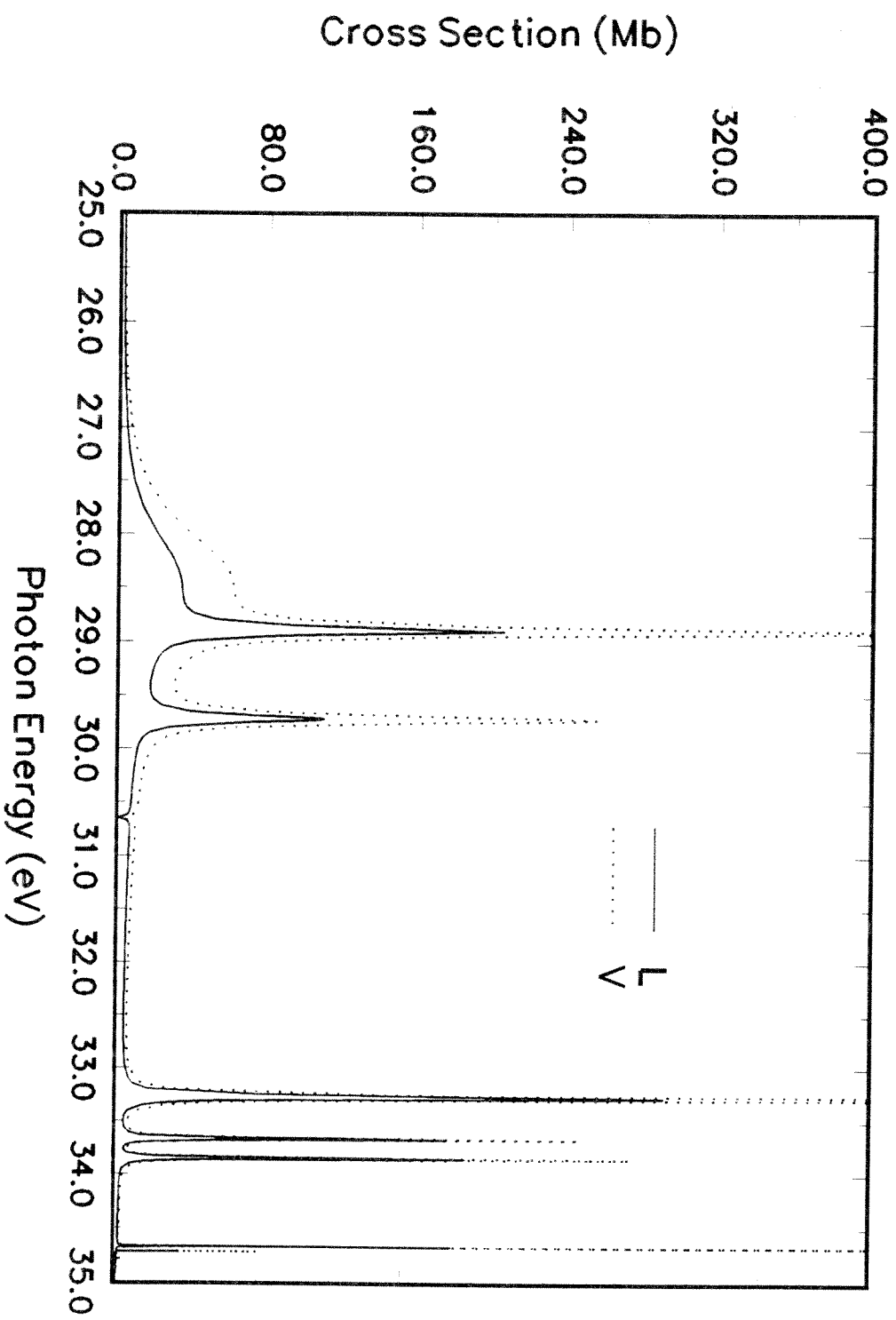
$3p63d4s^2 \rightarrow \text{Total } (2P + 2D + 2F) \text{ Cross Section}$



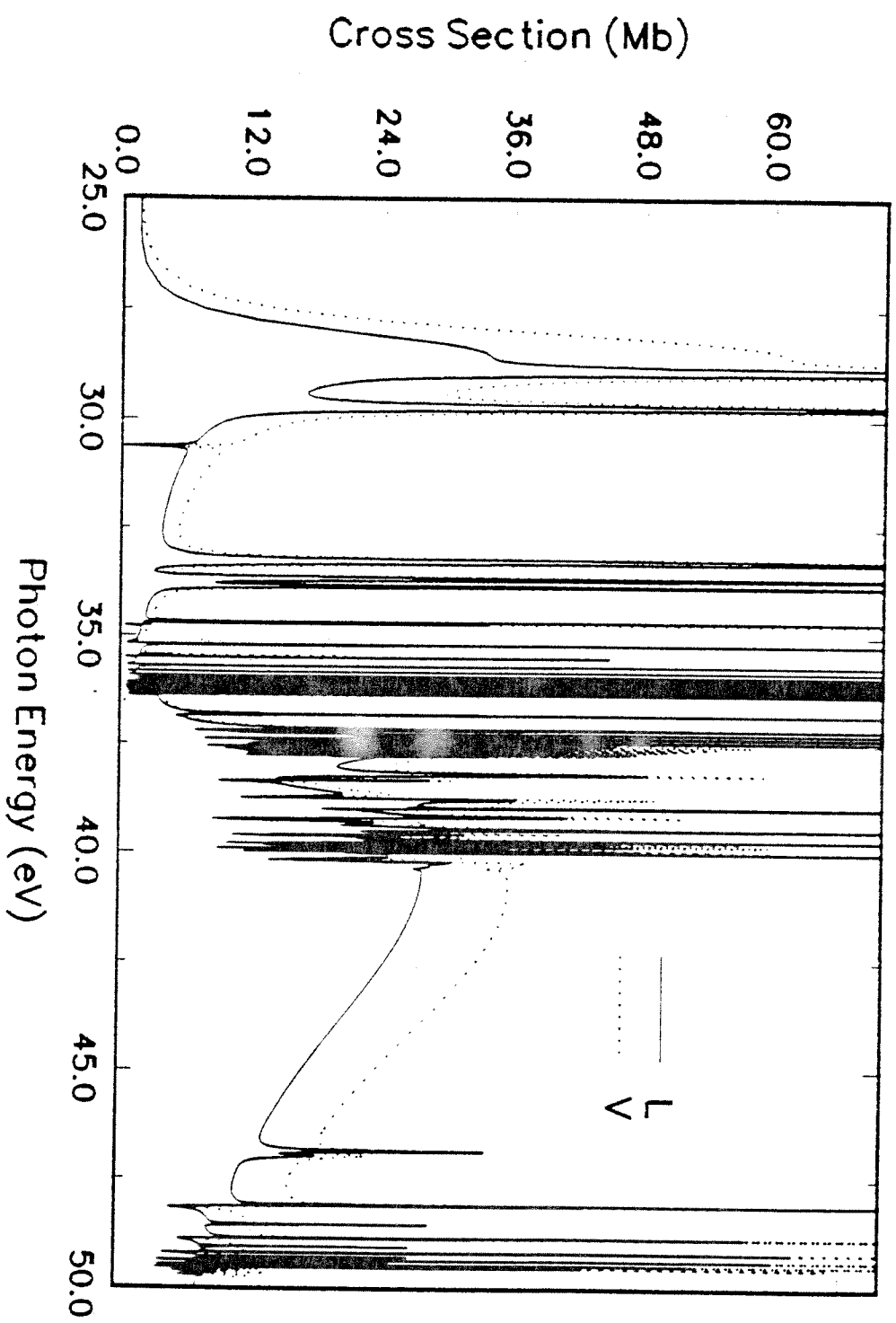
$3p^63d4s^2 \rightarrow \text{Total } (2P + 2D + 2F) \text{ Cross Section}$



$3p^63d4s^2 \rightarrow \text{Total } (2P + 2D + 2F) \text{ Cross Section}$



$3p63d4s^2 \rightarrow \text{Total } (2P + 2D + 2F) \text{ Cross Section}$



$3p63d4s^2 \rightarrow$ Total (2P + 2D + 2F) Cross Section

