

539.17:541.141.7

A 469 0

MFN 22 85



TÜRKİYE BİLİMSEL VE
TEKNİK ARAŞTIRMA KURUMU

THE SCIENTIFIC AND TECHNICAL
RESEARCH COUNCIL OF TURKEY

1997-1058

OPEN-SHELL RELAXATION, POLARIZATION, AND
RELATIVISTIC EFFECTS IN THE ATOMIC
PHOTOABSORPTION PROCESSES

PROJE No: TBAG_988

Temel Bilimler Araştırma Grubu

Basic Sciences Research Grant Committee



TÜRKİYE BİLİMSEL VE
TEKNİK ARAŞTIRMA KURUMU

THE SCIENTIFIC AND TECHNICAL
RESEARCH COUNCIL OF TURKEY

539.17 : 541.141.7
A 469 0

1997-1058

OPEN-SHELL RELAXATION, POLARIZATION, AND
RELATIVISTIC EFFECTS IN THE ATOMIC
PHOTOABSORPTION PROCESSES

PROJE No: TBAG_988

Marmara Ün. Fen Ed. F.

PROF. DR. ZİKİRİ ALTUN

S. 25

R. 39

Ekim 1992
İSTANBUL

Temel Bilimler Arastirma Grubu
Basic Sciences Research Grant Committee

16296

Bağcı, Mart 1993

OPEN-SHELL, RELAXATION, POLARIZATION,
AND RELATIVISTIC EFFECTS IN
THE ATOMIC PHOTOABSORPTION PROCESSES

PROJE No : TBAG-988

PROF. DR. ZIKRI ALTUN

EKİM 1991
İSTANBUL

İÇİNDEKİLER

1.	Önsöz	6
2.	Öz (Türkçe ve İngilizce)	7
3.	Proje Ana Metni	10
	A. Mevcut Atomik Programların AIX Ortamına Uyarlanması ve Yeni Program Yazımı	11
	B. Açık Kabuklu Kükürt Atomunun Fotoiyonlaşma Toplam ve Kısmi Tesir Kesitleri	12
	C. Kripton Atomu ve Brom Negatif İyonunun 3d Fotoiyonlaşması Üzerindeki Durulma Etkileri	16
4.	Sonuç	18
5.	Referanslar	20
6.	Şekil Alt Yazıları	23

1. Önsöz :

Bu projenin desteklendiği 1 ekim 1991 tarihinden bitiş tarihi 30 ekim 1992 tarihine kadar geçen sürede, projede konu edilen bir çok problem çözümüne kavuşmuştur. Bu projenin başarıyla sonuçlanması yeni bir takım ilgi çekici ve önemli araştırma faaliyetlerinin de başlamasına neden olmuştur. Aşağıda proje kapsamında yapılan işlerin kısa bir özeti verilmiştir.

Projede kullandığımız IBM RISC-6000/Model 520 bilgisayarın disk kapasitesinin 315 Mb'tan 670 Mb'ta ve RAM bellek kapasitesininde 8 Mb'tan 16 Mb'ta çıkarılması için gerekli ilave Hard disk ve RAM bellek TÜBİTAK tarafından satın alınmış ve sisteme ilave edilmişlerdir.

Atomların elektromanyetik alanlarla etkileşmesi ile ilgili araştırmalarda kullanılan mevcut programlar RISC ortamında çalışabilir hale getirilmiş ve ilave programların yazılımı tamamlanmıştır. Bu programlar sayesinde basit ve kompleks atomların taban ve uyarılmış hallerini temsil eden dalga fonksiyonları, çok cisim tedirgi grafikleri, tek ve çift fotoiyonlaşma ve uyarılmalı fotoiyonlaşma tesir kesitleri hesap edilebilir hale gelmiştir. Tek ve çift elektron rezonansları ve fotoelektron açısal dağılım parametreleri de programların hesap kabiliyetleri arasındadır.

Çok cisim tedirgi kuramı kullanılarak açık kabuklu Kükürt atomunun kısmi ve toplam fotoiyonlaşma tesir kesitleri hesap edilmiş ve sonuçlar J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. adlı dergide yayınlanmıştır. Bak : J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 25 2279-2294 (1992)

"Relativistic Random Phase" yöntemi kullanılarak atomik Kripton ve Brom negatif iyonunun 3d kabuğuna ait fotoiyonlaşma parametreleri hesap edilmiş ve sonuçlar J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. adlı dergide yayınlanmıştır. Bak : J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 25 3757-3764 (1992)

2. ÖZ:

TÜBİTAK tarafından desteklenen TBAG-988 no'lu proje kapsamında öncelikle atomik olayların araştırılmasında kullanılan ve değişik işletim sistemleri altında çalışan programların IBM RISC/6000 model 520 bilgisayar işletim sistemi olan AIX ortamında çalışabilmeleri için gerekli değişiklikleri yapılmıştır. Mevcut programların çoğu CDC Cyber 180/855, IBM 3090 ve CONVEX C1 bilgisayar ortamlarında çalışacak şekilde hazırlanmışlardı.

Bu programlar sayesinde basit ve kompleks atomların taban ve uyarılmış bağlı hallerini LS ve LSJ kuplaj sistemlerinde temsil edebilen toplam dalga fonksiyonları, atomdan fotoiyonlaşan pozitif enerjili elektron orbitallerinin hesabı, tek ve çok elektron ve uyarılmalı fotoiyonlaşma tesir kesitleri, "inter" ve "intra" kabuk korolasyonları, resonans profilleri, ve fotoelektron açısal dağılım parametreleri yüksek duyarlılıklarla hesap edilebilmektedir. Bu programları çok cisim tedirgi ve "relativistic random phase" yöntemleri içerisinde kullanarak açık kabuklu kükürt atomunun kısmi ve toplam fotoiyonlaşma tesir kesitleri ile kripton ve bromi negatif iyonunun 3d kabuğuna ait fotoiyonlaşma parametreleri hesap edildi. Her iki halde de hesaplar hem hız hemde uzunluk ayar formalizminde hesaplanarak numerik hatalar minimuma indirildi.

Kükürt atomunun 3s ve 3p alt kabuklarından kaynaklanan 3p $\rightarrow$ nd(ns) ve 3s $\rightarrow$ np bağlı geçişlerine karşı gelen rezonanslar çok kuplajlı denklemler tekniği bünyesinde oluşturulan K-matrix özdeğerleri kullanılarak hesap edildiler. Elektron konfigürasyonları aynı fakat çekirdek yükleri farklı olan Kr atomu ve Br⁻ iyonunun 3d toplam fotoiyonlaşma tesir kesitlerinin hemen hemen tüm enerji aralığında birbirlerine oldukça benzer profilleri olduğu bulundu. Elde edilen sonuçlar daha önce elde edilmiş deneysel verilerle karşılaştırılıp gerekli yorumlar yapıldı.

Abstract

We have first modified the existing programs used for calculations of atomic processes and atomic structure to run on our computer, the IBM RISC/6000, model 520 work station with the AIX operating system (the IBM version of UNIX) as proposed in the project TBAG-988 supported by TÜBİTAK. Most of the existing programs were developed to run under different operating systems like CDC Cyber 180/855, IBM 3030 and 3090, Convex C1. Most important ones among these programs are the multiconfiguration Hartree-Fock (MCHF) program, the Desclaux's and the Oxford multiconfiguration Dirac-Fock (MCDF) programs, Many Body Perturbation Theory (MBPT) coupled-equations program, the ground, and final state correlation programs for the MBPT calculations, the relativistic Random Phase Program (RRPA), and its modification to include the relaxation effects (RRPA-R).

It is now possible to calculate the ground and excited states of complex atoms, photoelectron continuum orbitals, photoionization, photoionization with excitation, and double photoionization cross sections, intershell and intrashell correlations, single and double electron resonance profiles in both LS and LSJ coupling schemes. Using the programs mentioned above within the MBPT formalism we have calculated the partial and total photoionization cross sections for atomic sulfur and within the RRPA and RRPA-R formalisms the partial cross section for the 3d subshells of krypton (Kr) and bromine negative ion (Br^-).

To minimize the numerical error the calculations are performed in length and velocity gauges in all cases. The resonances corresponding to the $3p \rightarrow nd(ns)$ and $3s \rightarrow np$ bound transitions in the photoionization cross sections of 3s and 3p subshells of atomic sulfur were calculated using the eigenvalues of the K-matrix formed applying the coupled-equations in MBPT. The electronic configurations of Kr and Br^- are the same but their nuclear charges are different. One of our aims has been to investigate and compare the photoionization parameters for such a case. The results show that except for the very near threshold

region the photoionization cross sections and other parameters display very close behavior in both magnitude and shape wise. The results obtained in all cases were compared with available experimental values. We have published two papers in J. Phys. B: Atomic and Mol. Phys. one for sulfur and one for KR and Br⁻. These papers are enclosed.

3. PROJE ANA METNİ

Bu projenin ana hedefi kompleks atomların fotoiyonlaşma parametreleri için yüksek mertebeden duyarlıklı hesapların yapılabilmesine olanak veren yeni yöntemler geliştirerek güncel öneme sahip problemlerin çözümüne yardımcı olmaktır. Bu gaye doğrultusunda yapıлып bitirilen çalışmalar, aşağıda iki ana başlık altında anlatılmaktadır.

A: Mevcut Atomik Programların AIX Ortamına Uyarlanması ve Yeni program yazımı

Atomik yapı ve olaylarla ilgili araştırmalarda kullanılan mevcut programlar CDC Cyber 180/855, IBM 3030 ve 3090, Convex C1 gibi farklı işletim sistemine sahip bilgi sayar ortamlarında geliştirilmişlerdi. Proje kapsamında ilk yapılan iş bu programları AIX unix işletim sistemi altında çalışan IBM RISC/6000, model 520 bilgisayarımızda çalışabilir hale getirmek oldu. Çok konfigürasyonlu Hartree-Fock programı,¹ Desclaux² ve Oxford³ tarafından geliştirilen çok konfigürasyonlu Dirac-Fock programları, Çok cisim ilk ve son hal korolasyon programları⁴⁻⁶, çok kuplajlı denklemler ve K-matrix programı⁷, relativistik RPA programı⁸⁻⁹, ve relativistik RRPA-R programı.¹⁰⁻¹²

Atomların hem taban durumlarında hemde uyarılmış hallerindeki toplam dalga fonksiyonlarını LS ve LSJ kuplaj sistemlerinde hesap edebileceğimiz bir dizi yeni program yazıldı. Bu programlardan en önemlisi fotoiyonlaşan elektron orbitallerinin radyal kısmını fotoelektron kinetik enerjisine bağlı olarak hesap eden programdır. Bir diğer önemli program ise fotoiyonlaşma tesir kesitlerinde aynı alt kabuğun uyarılması sonucu ortaya çıkan ve birbirleriyle kuvvetli etkileşen rezonans profillerini hesap etmek için geliştirdiğimiz etkileşimli rezonans programdır.

3. PROJE ANA METNİ

Bu projenin ana hedefi kompleks atomların fotoiyonlaşma parametreleri için yüksek mertebeden duyarlıklı hesapların yapılabilmesine olanak veren yeni yöntemler geliştirerek güncel öneme sahip problemlerin çözümüne yardımcı olmaktır. Bu gaye doğrultusunda yapıлып bitirilen çalışmalar, aşağıda iki ana başlık altında anlatılmaktadır.

A: Mevcut Atomik Programların AIX Ortamına Uyarlanması ve Yeni program yazımı

Atomik yapı ve olaylarla ilgili araştırmalarda kullanılan mevcut programlar CDC Cyber 180/855, IBM 3030 ve 3090, Convex C1 gibi farklı işletim sistemine sahip bilgi sayar ortamlarında geliştirilmişlerdi. Proje kapsamında ilk yapılan iş bu programları AIX unix işletim sistemi altında çalışan IBM RISC/6000, model 520 bilgisayarımızda çalışabilir hale getirmek oldu. Çok konfigürasyonlu Hartree-Fock programı,¹ Desclaux² ve Oxford³ tarafından geliştirilen çok konfigürasyonlu Dirac-Fock programları, Çok cisim ilk ve son hal korolasyon programları⁴⁻⁶, çok kuplajlı denklemler ve K-matrix programı⁷, relativistik RPA programı⁸⁻⁹, ve relativistik RRPA-R programı.¹⁰⁻¹²

Atomların hem taban durumlarında hemde uyarılmış hallerindeki toplam dalga fonksiyonlarını LS ve LSJ kuplaj sistemlerinde hesap edebileceğimiz bir dizi yeni program yazıldı. Bu programlardan en önemlisi fotoiyonlaşan elektron orbitallerinin radyal kısmını fotoelektron kinetik enerjisine bağlı olarak hesap eden programdır. Bir diğer önemli program ise fotoiyonlaşma tesir kesitlerinde aynı alt kabuğun uyarılması sonucu ortaya çıkan ve birbirleriyle kuvvetli etkileşen rezonans profillerini hesap etmek için geliştirdiğimiz etkileşimli rezonans programdır.

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

Kükürt atomunun fotoiyonlaşma tesir kesiti geçmişte bir çok kuramsal¹³⁻¹⁹ ve deneysel²⁰⁻²⁴ araştırmanın konusu olmuştur. Yapılan kuramsal ve deneysel çalışmaların elde ettiği sonuçların farklı olmaları yanında deneysel çalışmaların da kendi aralarında farklı olmaları bizim sülfür atomunu araştırma konusu yapmamızın en önemli nedenlerini oluşturdular. Neticeler arasındaki çelişkiler ile ilgili bilgiler detaylı bir şekilde Tayal¹⁹ tarafından verildiğinden burada tekrarlanmayacaklardır. Bu projede kükürt atomunu araştırmamızın ana gayesi deneysel ve kuramsal sonuçlar arasındaki uyumsuzluğun sebebini anlamak ve daha duyarlıklı deneylerin yapılabilmesine ışık tutmaktır. Bu konuda yapılan çalışmalar bitirilip hakkında bir makale hazırlanarak J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. adlı dergide yayınlanmıştır. Bu makalenin üç kopyası ilişiktir.

Bu projede kükürt atomunun 3s ve 3p alt kabuklarından uyarılmalar göz önüne alınarak ilk iyonlaşma eşik enerjisi olan 10.36 eV ile 60 eV arasında sonuçlar elde edilmiştir. Bildiğimiz kadarıyla kükürt için 60 eV'a kadar çıkan ilk kuramsal çalışma bizimkidir. Hesaplarımız çok cisim tedarigi^{4,25,26}, etkin potansiyel²⁷, ve çok kuplajlı denklemler⁷ yöntemleri kullanılarak yapıldı. Bu hesapların bittiği tarihe kadar kükürt atomunun 3s alt kabuğu için yapılmış bizimkinden başka bir diğer kuramsal çalışmadan haberdar değiliz.

Kükürt atomunun 3s ve 3p alt kabuklarından fotoiyonlaşan elektronların hesaplarda göz önüne alınan son hal LS kanalları şunlardır :

$3s3p^4(^4P)kp^3S$, $3s3p^4(^4P)kp^3P$, $3s3p^4(^4P)kp^3D$, $3s3p^4(^2P)kp^3S$, $3s3p^4(^2P)kp^3P$, $3s3p^4(^2P)kp^3D$, $3s^23p^3(^4S)kd^3D$, $3s^23p^3(^2D)kd^3D$, $3s^23p^3(^2D)kd^3P$, $3s^23p^3(^2D)kd^3S$, $3s^23p^3(^2P)kd^3D$, $3s^23p^3(^2P)kd^3P$, $3s^23p^3(^4S)ks^3S$, $3s^23p^3(^2D)ks^3D$, and $3s^23p^3(^2P)ks^3P$.

Bu kanallar arasındaki korolasyon etkileşimleri ikinci ve daha yukarı mertebeden uygun çok cisim Brueckner²⁵ ve Goldstone²⁶ tedarigi grafikleri yardımıyla hesap edildi. Fotoelektron orbitallerinin hesabında etkin potansiyel yöntemini²⁸

kullanarak aynı alt kabuktan kaynaklanan kanallar arasındaki kuvvetli korolasyon etkileşmelerini otomatik olarak sonsuz mertebeden hesaplara dahil etmiş olduk. Brueckner²⁵ ve Goldstone²⁶ tedirgi grafiklerinin bazı örnekleri şekil 1, 2 ve 3 de görülmektedir. Örneğin şekil 1(c) bir son hal korolasyon grafiği olup bağlı ara haller için paydası sıfır olunca tesir kesit genliğine rezonans katkısı yapar.

Hesaplamalarda sabit tuttuğumuz Kükürt atomunun taban orbitallerini Froese Fischer'ın çok konfigürasyonlu MCHF77¹ programından elde ettik. Kükürt atomunun taban seviyesinin LS simetrisi 3P ve bu seviyeden bir 3p elektronu fotoiyonlaşınca geride kalan 3p elektronlarının LS kuplajları 4S , 2D , ve 2P den ibarettir. Dipol seçim kuralı uygulandığında 3p elektronunun LS LS simetrisi 3S , 3P , ve 3D olan 9 fotoiyonlaşma kanalından her hangi biriyle atomu terk edebileceği aşıkardır. Benzer şekilde kükürtün taban seviyesinden fotoiyonlaşan bir 3s elektronu, geride kalan 4P ve 2P "core" kuplajlarıyla birleşerek 3S , 3P , ve 3D LS simetrilerinde 6 fotoiyonlaşma kanalı verebilir.

Yörünge açısal momentumları aynı fotoelektronlar hangi kanalda olursa olsunlar etkin potansiyel yöntemi sayesinde aynı radyal dalga fonksiyonuyla temsil edildiler. Her bir foto elektron için 40 farklı foton enerjisinde sürekli orbital hesap edildi. Bu orbitallerin dalga sayıları $k=0.05$ a.u. ile $k=14$ a.u. aralığında alındı. Yörünge açısal momentumları $l=0$ ve 1 olan uyarılmış bağlı orbitaller için hesap edilen etkin tekelektron enerjileri (E_n) ve kuantum sayıları Tablo 1 de verilmişlerdir. Hesaplamalarda kullanılan deneysel fotoiyonlaşma eşik enerjileri Tablo 2 de listelenmişlerdir. Bu enerjiler Siegbahn ve Karlson²⁹ tablolarından alındı.

Kükürt atomunun $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$ 3P taban seviyesinden 3s ve 3p elektronları, dipol geçiş kuralına uyan 15 farklı LS kanalıyla iyonlaşabilirler. Bu kanalların kısmi fotoiyonlaşma tesir kesitlerinin toplamı şekil 3'de EFL ve EFV eğrileriyle gösterilmektedir. EFL eğrisi uzunluk ayarındaki hesaplamaları EFV eğriside hız ayarındaki hesaplamaları temsil etmektedir. Bu eğrilerin temsil ettiği sonuçlar yalnız şekil 1(a)'deki en düşük mertebe grafiğinin hesabı sonucu elde edilmişlerdir. Dolayısıyla

bu sonuçlar yalnız etkin potansiyelin²⁷ otomatik olarak içerdiği korolasyonlar türünden son hal korolasyonları içermektedirler. Bunun akabinde şekil 2'de gösterilen 1.mertebeden taban hal korolasyon grafikleri hesap edilip şekil 1(a) grafiğine eklendi. Birinci mertebeden taban korolasyonlarına göre düzeltilmiş sonuçlar, şekil 3'de GSL ve GSV eğrileriyle temsil edilmektedirler. GSL ve GSV eğrileri EFL ve EFV eğrileriyle karşılaştırılınca birinci mertebeden taban hal korolasyonlarının EFL ve EFV uzunluk ve hız ayar sonuçları arasındaki uyumsuzluğu önemli ölçüde giderdiği görülebilir. GSL ve GSV sonuçları arasındaki kalan uyumsuzluğun önemli bir kısmının sebebi, farklı açısal momentumlu fotoelektron içeren fotoiyonlaşma kanalları arasındaki birinci ve daha yukarı mertebeden son hal etkileşmeleridir.

Şekil 3'de çizilmiş R-MAT eğrisi Tayal¹⁹ tarafından kükürt atomu için $3s^2 3p^3 \ ^2P$ iyonuna karşı gelen eşik enerjisiyle R-matrix metodunda hesap edilmiş toplam tesir kesitidir. Bizim GSL ve GSV eğrilrimizle R-MAT eğrisi arasındaki uyumsuzluk, farklı alt kabuklardan kaynaklanan son hal korolasyonlarının hesaplara dahil edilmeleriyle önemli ölçüde azaldı.

Farklı fotoiyonlaşma kanalları arasındaki son hal korolasyonlarını sonsuz mertebeden hesaplara dahil etmek için çok kuplajlı denklemler metodunu⁷ kullandık. Çok kuplajlı denklemler oluşturulurken göz önüne alınan en önemli son hal korolasyonları şekil 1(c), 1(d), 1(e) ve 1(f) ile temsil edilmektedirler. Çok kuplajlı denklemlerin çözümünden elde edilen kısmi tesir kesitlerinin toplamı şekil 4'de görülmektedir. Aynı şekilde karşılaştırmak maksadıyla R-MAT¹⁹ sonucuda çizilmiştir. Bizim sonuçlarımızla R-MAT sonucu arasındaki uyumsuzluğun önemli ölçüde ortadan kalktığına dikkat ediniz. Tayal'ın¹⁹ R-matrix hesabına 3s alt kabuğundan kaynaklanan rezonans geçişleri dahil edilmemiştir. Şekil 4'e bakıldığında bizim sonuçlarımızla R-matrix sonuçları arasında 20 eV civarında oldukça önemli uyumsuzluğun olduğu görülebilir. Bu uyumsuzluğun sebebi 3s rezonanslarının R-matrix hesaplarına dahil edilmemeleridir. Bizim kısmi sonuçlarımızın tamamı $3s \rightarrow np(kp)$ geçişlerinden kaynaklanan korolasyonları içermektedir.

Kükürt atomunun $3s^2 3p^3 \ ^4S$, $3s^2 3p^3 \ ^2D$, ve $3s^2 3p^3 \ ^2P$ eşikleri

arasındaki kısmi tesir kesitlerinin $3p \rightarrow nd$ ve ns bağılı uyarılmalarına karşı gelen fotoiyonlaşma rezonanslarından ne derece etkilendiği şekil 4'den açıkça görülmektedir. Sırasıyla eşik enerjileri 20.23 eV ve 23.448 eV olan $3s3p^4 \ ^4p$ ve $3s3p^4 \ ^2p$ eşikleri altında ve arasındaki rezonanslar $3s \rightarrow np$ bağılı uyarılmalarından kaynaklanmaktadır. Şekil 4'deki Rezonans bölgeleri genişletilmiş olarak farklı grafiklerde tekrar gösterilmiştir.

Şekil 5'de görülen fotoiyonlaşma rezonansları 4S ve 2D eşikleri arasında 2D eşigine limit olarak yakalaşan üç farklı Rydberg rezonans dizilerinden ibarettir. Eşik enerjisi 12.203 eV olan 2D eşigi altındaki toplam tesir kesiti, $3p^3(^4S)kd \ ^3D$ ve $3p^3(^4S)ks \ ^3S$ kısmi tesir kesitlerinin toplanması sonucu elde edilmiştir. Şekil 5'deki rezonansların kaynağı $3p^4 \ ^3P \rightarrow 3p^3(^2D)nd \ ^3S$, $3p^3(^2D)nd \ ^3D$, ve $3p^3(^2D)ns \ ^3D$ bağılı uyarılmalarıdır. $3p^3(^4S)ks \ ^3S$ ve $3p^3(^4S)kd \ ^3D$ kısmi tesirlerinin 2D eşigi altında kalan kısımlarının toplam tesir kesitlerindeki paylarının açıkça görülebilmeleri için bu kısmi tesir kesitleri şekil 6 ve 7'de ayrı ayrı gösterilmişlerdir. Şekil 6'daki $3p^3(^2D)nd \ ^3S$ rezonanslarının zayıf olmaları bu rezonans konfigürasyonları ile $3p^3(^4S)ks \ ^3S$ fotoiyonlaşma kanalı arasındaki "coulomb" etkileşmelerinin zayıf olduğunu göstermektedir. Şekil 7'deki kuvvetli rezonanslar $3p^3(^2D)nd \ ^3D$ bağılı seviyeleri ile $3p^3(^4S)kd \ ^3D$ fotoiyonlaşma kanalı arasındaki kuvvetli coulomb etkileşmesi sonucu oluşmaktadır. Toplam tesir kesitinin 2D ve 2P eşikleri arasında kalan kısmı genişletilmiş olarak şekil 8'de görülmektedir. Hesaplamalarda 2P eşik enerjisi için Siegbahn and Karlsson²⁹ tarafından verilen 13.403 eV kullanıldı. Şekil 8'de görülen eğri şekiller 9, 10, 11, ve 12'de grafikleri verilen kısmi tesir kesitleri toplanarak elde edildi. Şekil 9 $3p^4 \ ^3P \rightarrow 3p^3(^4S)kd \ ^3D$, ve $3p^3(^4S)ks \ ^3S$ kısmi tesir kesitlerinin toplamını göstermektedir. Bu grafiklerdeki rezonanslar $3p^4 \ ^3P \rightarrow 3p^3(^2P)nd \ ^3D$ bağılı uyarılmalarından kaynaklanmaktadır. Diğer taraftan $3p^3(^4S)ks$ fotoiyonlaşma tesir kesitinin hem hız ayar hemde uzunluk ayar formalizminde elde edilen sonucularının 2D ve 2P eşikleri arasında sabit ve yaklaşık 1Mb değerinde olduğu bulundu. Şekil 10'da gösterilen $3p^4 \ ^3P \rightarrow 3p^3(^2D)kd \ ^3D$ kısmi tesir kesitindeki rezonansların sebebi $3p^4 \ ^3P \rightarrow 3p^3(^2P)nd \ ^3D$ bağılı

uyarılmalarıdır. Şekil 11 $3p^4\ ^3P \rightarrow 3p^3(^2D)ks\ ^3D$ kısmi tesir kesitini göstermektedir. Bu şekildeki rezonanslarda şekil 10'daki rezonanslar gibi $3p^4\ ^3P \rightarrow 3p^3(^2P)nd\ ^3D$ bağlı uyarılmalardan kaynaklanmaktadır. Şekil 10 ve 11 karşılaştırılınca bu şekillerdeki rezonansların Fano²⁵ q parametresinin farklı işaretli olduğu görülebilir. Şekil 12'de $3p^4\ ^3P \rightarrow 3p^3(^2D)kd\ ^3P$ fotiyonlaşma kısmi tesir kesitleri hem uzunluk hemde hız ayar formalizminde verilmişlerdir. Bu şekillerdeki rezonansların kaynağı $3p^4\ ^3P \rightarrow 3p^3(^2P)nd, ns\ ^3P$ bağlı uyarılmalardır.

Toplam 2D tesir kesitinin 2D ve 2P eşikleri arasındaki değerleri şekil 13'de verilmiştir. Bu bölgede olup 2P limitine yaklaşan rezonansların enerji konumları çok kuplajlı denklemlerin çözümünden elde edilip Tablo 4 de listelenmişlerdir.

Karşılaştırma maksadıyla aynı tabloda Tayal'ın¹⁹ R-matrix hesaplarında kullanmak için hesapladığı değerler ve Gibson²⁴ ve arkadaşlarının rezonans konumları için buldukları deneysel değerler verilmiştir.

Şekil 14 $3s^23p^4\ ^3P \rightarrow 3s3p^4(^4P)np\ ^3S, ^3P, \text{ ve } ^3D$ bağlı rezonans uyarılmalarının hakim olduğu toplam tesir kesitini göstermektedir. Bu şekilde Tayal'ın R-matrix sonuçları da verilmiştir. Şekil 15 toplam tesir kesitinin $3s3p^4\ ^4P$ ve $3s3p^4\ ^2P$ eşikleri arasında kalan kısmını göstermektedir. Bu bölgedeki rezonansların kaynağı da $3s^23p^4\ ^3P \rightarrow 3s3p^4(^4P)np\ ^3S, ^3P, \text{ ve } ^3D$ bağlı uyarılmalarıdır. Bu bölge için Tayal Tarafından verilen sonuç da aynı şekilde gösterilmektedir.

C. Kripton Atomu ve Brom Negatif İyonunun 3d Fotoiyonlaşması Üzerindeki Durulma Etkileri

Kr ve Br^- 'ın 3d kısmi tesir kesitlerini hem RRPA^{11,12,30-32} hemde RRPA-R^{33,34} tekniklerini kullanarak elde ettik. Bu hesaplamalarda fotoiyonlaşma kanalları oluşturulurken jj - kuplaj sisteminde 3d, 4s ve 4p alt kabuklarından dipol geçiş kuralı kullanıldı. Yapılan ön çalışmalar hem Kr hem de Br^- 'ın 3d alt kabuklarının altındaki kabuklardan kaynaklanan korelasyon etkilerinin 3d kısmi tesir kesitlerine dikkate değer etkileri olmadığını gördüğünden RRPA ve RRPA-R fotoiyonlaşma kanalları oluşturulurken ihmal edildiler.

3d _{3/2}	→	f _{5/2} , p _{3/2} , p _{1/2} ,
3d _{5/2}	→	f _{7/2} , f _{5/2} , p _{3/2} ,
4s _{1/2}	→	p _{3/2} , p _{1/2} ,
4p _{1/2}	→	d _{3/2} , s _{1/2} ,
4p _{3/2}	→	d _{5/2} , d _{3/2} , s _{1/2} .

elde RRPA hesaplamalarında fotoiyonlaşma kanallarının eşik enerjileri relativistik Dirac - Fock^{2,3} hesaplamalarından elde edildi. RRPA-R hesaplamalarında ise eşik enerjileri taban seviyesi ve iyon halleri için yapılan öz uyumlu hesaplamalardan elde edilen toplam enerjiler farkından elde edildi. Tablo IV'de hesaplamalarımızda kullanılan eşik enerjiler listelenmiştir.

Fotoiyonlaşan elektronları temsil eden tek elektron orbitalleri RRPA metodunda donmuş "core" ve RRPA-R metodunda ise durulmuş iyonik "core" yaklaşımlarından elde edildiler. RRPA-R hesaplamalarında gereken yerde taban ve son hal seviyelerindeki tek elektron orbitalleri arasındaki "overlap" uygun şekilde hesaplamalara dahil edildi.

Şekil 15'de Kr ve Br⁻ atom ve negatif iyon için elde edilen 3d kısmi tesir kesitleri verilmektedir. Aynı grafikde Lukirski³⁵ tarafından ölçülen deneysel sonuçlar da verilmiştir. RRPA metodunda elde edilen hız ve uzunluk tesir kesitleri arasında gözlenebilir bir fark olmadığından şekil 1'de yalnız hız sonucu verilmiştir. Kr ve Br⁻ sonuçları karşılaştırılınca eşik enerji civarı hariç diğer enerjilerde şekil ve büyüklük bakımından birbirlerine oldukça yakın oldukları gözlenebilir.

Şekil 16'da kısmi tesir kesitleri için dallanma oranları verilmiştir. Bu şekilden görülebileceği gibi elektronik konfigürasyonları aynı fakat çekidek yükleri farklı atomik sistemlerin kısmi tesir kesitleri arasındaki dallanma oranları eşik enerji civarı hariç diğer bölgelerde hemen hemen aynı değerdendirler.

Şekil 17'de Kr ve Br⁻ 'ın 3d alt kabuklarının fotoelektron "asymmetry" parametreleri görülmektedir. Bu parametre incelendiğinde 3d fotoelektronun d ve f dalgaları arasındaki girişim hakkında önemli bilgiler elde edilebilir. Çünkü bu parametre aynı alt kabuktan kaynaklanan kısmi tesir kesit kanalları arasındaki faz farkına bağlıdır.

Şekil 18'de ise spin polarizasyon parametreleri^{37,38} verilmektedir. Bu parametreler dipol matris elemanları ve faz farkları cinsinden ifade edilebildiklerinden atomik fotoiyonlaşma olayı hakkında ilave bilgiler verebilirler. Örneğin δ parametresi toplam fotoelektron akısının spin polarizasyonunun foton enerjisine bağlı değişimi hakkında tesir kesitlerinden doğrudan elde edemiyeceğimiz bilgiler vermektedir.

4. SOUNÇ

Çok cisim tedirgi kuramı ve donmuş ve durulmalı core relativistik random phase yaklaşım metodları atom ve negatif şyonların fotoşyonlaşma tesir kesit ve diğer fotoiyonlaşma parametreleri hesaplamalarında oldukça tatmin edici yanıtlar verebilmektedir. Hesaplamalarımız bu tekniklerin daha da geliştirilerek kompleks atomik sistemler'in tesir kesit hesaplamalarında da kullanabileceklerini göstermektedir. Atomların elektromanyetik alanla etkileşmesi probleminin iyi analşılmasının pratik ve temel yararları bilinen bir gerçektir. Laboratuvarlarda zehirli olan üretim güçlüğü gibi çeşitli nedenlerden dolayı incelenmesi mümkün olamıyan atomik problemlerin güvenilir çözümlerinin önemi tartışılmazdır.

Kükürt kompleks atomik sistemlere bir örnektir. Bu atom için elde ettiğimiz sonuçlar daha karmaşık yapıya sahip atomik problemlerin çözümü için cesaret vermektedir. Hedefimiz deneyle yaraşabilir ve hatta daha hassas sonuçların elde edilebileceği hesaba dayalı teknikler geliştirmektir. Bundan sonraki hedefimiz teknolojik öneme sahip ve d alt kabukları açık olan 3d-metal atomlarının incelenmesi olacaktır.

$3s^2 3p^3 \ ^2P$ eşik enerjisi altındaki rezonans hesaplamalarımızın daha duyarlıklı deneylerin yapılmasını motive edeceğine inanmaktayız.

Teşekkürler

Yukarıdaki çalışmaların yapılabıldığı 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-988

proje kapsamında artırılmasına yaptıđı katkıdan dolayı TÜBİTAK'a minnetarız.

5. Referanslar

1. Froese Fischer C 1978 *Comput. Phys. Commun.* **14** 1
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
4. Kelly H P 1968 *Adv. Theor. Phys.* **2**, 75
5. Kelly H P 1969 *Adv. Chem. Phys.* **14** 129
6. Kelly H P 1976 In: *Photoionization and Other Probes of Many-
Electron Interactions*, edited by Wuilleumier F J
(Plenum, New York) 83
7. Brown E R, Carter S L and Kelly H P 1980 *Phys. Rev. A* **21**
1237
8. Huang K-N 1980 *Phys. Rev. A* **22** 223-39
9. Huang K-N, Johnson W R, and Cheng K T 1981 *At. Data Nucl.
Data Tables* **26** 33-45
10. Johnson W R and Cheng K T 1979 *Phys. Rev. A* **20** 978-88
11. Johnson W R and Lin C D 1979 *Phys. Rev. A* **20** 964-77
12. Johnson W R and Lin C D, Cheng K T, and Lee C M 1980 *Phys.
Scr.* **21** 409-22
13. Conneely M J, Smith K and Lipsky L 1970 *J. Phys. B: At. Mol.
Phys.* **3** 493
14. Chapman R D and Henry R J W 1971 *Astrophys. J.* **168** 169
15. Dill D, Starace A F and Manson S T 1975 *Phys. Rev. A* **11** 1596
16. McGuire E J 1979 *Phys. Rev. A* **19** 1978
17. Manson S T, Msezane A, Starace A F and Shahabi S 1979 *Phys.
Rev. A* **20** 1005
18. Berrington K A and Taylor K T 1982 *Comput. Phys. Commun.* **26**
397

19. Tayal S S 1988 *Phys. Rev. A* **38** 729
20. Mendoza C and Zeippen C J 1988 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **21**
1G 259
21. Tondello G 1972 *Astrophys. J.* **172** 771
22. Alder J F, Bombelka R M and Kirkbright G F 1978 *J. Phys. B:
At. Mol. Phys.* **11** 253
23. Kaufman V 1979 *Phys. Scr.* **26** 1979
24. Gibson S T, Greene J P, Ruscić B and Berkowitz J 1986 *J.
Phys. B: At. Mol. Phys.* **19** 2825
25. Brueckner K A 1955 *Phys. Rev.* **97**, 1353
26. Goldstone J 1957 *Proc. R. Soc. London A* 230
27. Kelly H P 1972 *Phys. Rev. A* **6** 1048
28. Qian Z D, Carter S L and Kelly H P 1986 *Phys. Rev. A* **33** 1751
29. 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
30. Amusia M Ya and Cherepkov N A 1971 *Soviet Phys. - JETP* **33**
90-6 (1970 *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **60** 160-74)
31. Amusia M Ya and Cherepkov N A 1975 *Case. Stud. At. Phys.* **5**
47-179
32. Wendin G 1976 In: *Photoionization and Other Probes of
Many-Electron Interactions*, edited by Wuilleumier F J
(Plenum, New York) 61-82
33. Kutzner M, Radojević V, Kelly H P, and Altun Z 1990
Physica Scripta **40** 823-6
34. Radojević V, Kelly H P, and Johnson W R 1987 *Phys. Rev. A*
35 2117-21

35. Radojević V, Kutzner M, and Kelly H P 1989 Phys. Rev. A 40 727-34
36. Huang K-N 1980 Phys. Rev. A 22 223-39
37. Huang K-N, Johnson W R, and Cheng K T 1981 At. Data Nucl. Data Tables 26 33-45
38. Moore C E 1971 *Atomic Energy Levels* NSRDS-NBS 35, Vol 1 (Washington, DC: US Govt Printing Office) pp 76-80
39. Smirnov B M 1982 *Negative Ions* (McGraw-Hill, New York)

Tablo 1. Etkin tek elektron orbital enerjileri (E_n) ve bağılı uyarılmış seviyelerin kuantum sayıları (n^*)

nl	n^*	E_n	nl	n^*	E_n	nl	n^*	E_n
3d	2.9618	0.0570	4s	1.9491	0.1316	4p	2.4408	0.0840
4d	3.9610	0.0319	5s	2.9791	0.0563	5p	3.4676	0.0416
5d	4.9598	0.0203	6s	3.9880	0.0314	6p	4.4773	0.0250
6d	5.9589	0.0141	7s	4.9919	0.0021	7p	5.4820	0.0166
7d	6.9583	0.0103	8s	5.9940	0.0014	8p	6.4845	0.0119
8d	7.8577	0.0079	9s	6.9951	0.0102	9p	7.4860	0.0089
9d	8.9571	0.0062	10s	7.9957	0.0078	10p	8.4869	0.0069

Tablo 2. Deneysel eşik enerjileri I (Siegbahn and Karlson 1982)

Seviye	I (a.u)
$3s^2 3p^3(^4S)$	0.38072
$3s^2 3p^3(^2P)$	0.44845
$3s^2 3p^3(^2D)$	0.49255

Tablo 3. $S^+(^2D)$ eşiğine yaklaşan otoiyonlaşma rezonanslarının konum enerjileri.

Konfigürasyon	Şimdiki çalışma	Tayal (1988)	Mendoza and Zeippen (1988)
$3p^3(^2D)3d^3S$	10.385	10.661	10.627
$3p^3(^2D)5s^3D$	10.635	10.823	10.631
$3p^3(^2D)4d^3D$	11.249	11.248	11.195
$3p^3(^2D)4d^3S$	11.267	11.334	11.317
$3p^3(^2D)6s^3D$	11.173	11.409	11.337
$3p^3(^2D)5d^3D$	11.613	11.603	11.569
$3p^3(^2D)5d^3S$	11.630	11.649	11.641
$3p^3(^2D)7s^3D$	11.650	11.687	11.652
$3p^3(^2D)6d^3D$	11.806	11.795	
$3p^3(^2D)6d^3S$	11.815	11.819	11.815
$3p^3(^2D)8s^3D$	11.821	11.826	
$3p^3(^2D)7d^3D$	11.925	11.899	
$3p^3(^2D)7d^3S$	11.926	11.921	
$3p^3(^2D)8d^3S$	11.991	11.973	

Table 4. $S^+(^2P)$ eşiğine yaklaşan otoiyonlaşma rezonanslarının konum enerjileri.

Konfigürasyon	Şimdiki Çalışma	Tayal (1988)	Mendoza and Zeippen (1988)
$3p^3(^2P)4d^3P$	12.435	12.492	12.492
$3p^3(^2P)4d^3D$	12.440	12.493	12.487
$3p^3(^2P)6s^3P$	12.525	12.613	12.537
$3p^3(^2P)5d^3P$	12.820	12.823	12.797
$3p^3(^2P)5d^3D$	12.811	12.825	12.824
$3p^3(^2P)7s^3P$	12.847	12.891	12.853
$3p^3(^2P)6d^3P$	12.999	13.004	12.990
$3p^3(^2P)6d^3D$	13.990	13.005	13.005
$3p^3(^2P)8s^3P$	13.021	13.044	13.023
$3p^3(^2P)7d^3P$	13.112	13.112	
$3p^3(^2P)7d^3D$	13.115	13.113	13.114
$3p^3(^2P)9s^3P$	13.125	13.138	
$3p^3(^2P)8d^3P$	13.180	13.182	
$3p^3(^2P)8d^3D$	13.182	13.183	
$3p^3(^2P)10s^3P$	13.220	13.199	

Tablo 5. Kr ve Br⁻ 3d fotoiyonlaşmasının DHF, ΔE_{SCF} ve deneysel eşik enerjileri.

Atomic sistem	Alt-kabuk	DHF ^a		ΔE_{SCF} ^b		Expt.
		(a.u.)	(eV)	(a.u.)	(eV)	(eV)
Kr	4p _{3/2}	0.51435	13.9962	0.47816	13.0385	14.000 ^c
	4p _{1/2}	0.54151	14.7354	0.50306	13.6890	14.666 ^c
	4s	1.18774	32.3201	1.13992	31.0188	27.515 ^c
	3d _{5/2}	3.72680	101.4115	3.38562	92.1274	93.83 ^c
	3d _{3/2}	3.77765	102.7952	3.43320	93.4222	95.84 ^c
Br ⁻	4p _{3/2}	0.13103	3.5647	0.087254	2.3743	3.364 ^d
	4p _{1/2}	0.15148	4.1219	0.10429	2.8379	3.825 ^e
	4s	0.71269	19.3933	0.649229	17.666	
	3d _{5/2}	2.79853	76.1513	2.425777	66.009	
	3d _{3/2}	2.84134	77.3164	2.46542	67.088	

^a DHF hesaplamalarında elde edilmiş tek-elektron mutlak özdeğerleri.

^b Taban ve uyarılmış bağlı haller için yapılam öz uyumlu relativistik hesaplamalardan elde edilen toplam enerjiler arasındaki farklar. Difference between the self-consistently

^c Siegbahn and Karlson (1982) tablosundan alındı

^d Br⁻'un 1. eşik enerjisi için Smirnov³⁹ tarafından verilen deneysel

^e Moore³⁸ tablosundan alınan deneysel değerler.

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. Coulomb etkileşmesine göre birinci mertebeden taban korelasyonlarına katkıda bulunan Brueckner-Goldstone grafikleri. Bu grafiklerde etkin tek elektron potansiyeli ile olan etkileşmeler çarpı işareti ile temsil edilmişlerdir.

Şekil 3. Kükürt atomunun $S(^3P)$ taban seviyesinde $3s$ ve $3p$ elektronlarının fotoiyonlaşmasının toplam tesir kesiti. EFL etiketli eğri uzunluk EFV etiketli eğri ise hız sonuçlarını temsil etmektedir. Bu sonuçlar etkin potansiyel dışında hiç bir korelasyon etkisi taşımamaktadır. Bu sonuçlara 1.mertebeden taban korelasyonları dahil edildiğinde GSL ve GSV eğrileri elde edilmişlerdir. Noktalı çizgili eğri Tayal'ın¹⁹ R-Matrix sonucunu göstermektedir..

Şekil 4. $S(^3P)$ taban seviyesinin 1. iyonlaşma eşiği (4S) ile 60 eV arasında son hal ve rezonans korelasyonlarını da içeren toplam tesir kesiti. Sürekli çizgili eğri uzunluk, kesikli çizgi hız ve noktalı cigi ise Tayal'ın sonuçların temsil etmektedir. Sürekli çizgili eğri uzunluk ve kesikli çizgi hız sonuçlarını temsil etmektedirler.

Şekil 5. 4S and 2D eşikleri arasındaki toplam tesir kesiti. Sürekli çizgili eğri uzunluk ve kesikli çizgi hız sonuçlarını temsil etmektedirler.

Şekil 6. 4S and 2D eşikleri arasındaki 3S kısmi tesir kesit. Sürekli çizgili eğri uzunluk ve kesikli çizgi hız sonuçlarını temsil etmektedirler.

Şekil 7. 4S and 2D eşikleri arasındaki 3D kısmi tesir kesit. Sürekli çizgili eğri uzunluk ve kesikli çizgi hız sonuçlarını temsil etmektedirler.

Şekil 8 $3s^23p^3\ ^2D$ ve $3s^23p^3\ ^2P$ eşikleri arasındaki toplam tesir kesit. Sürekli çizgili eğri uzunluk ve kesikli çizgi hız sonuçlarını temsil etmektedirler.

Şekil 9 $3s^23p^3\ ^2D$ ve $3s^33p^3\ ^2P$ eşikleri arasındaki $3p^4(^3P) \rightarrow 3p^3(^4S)kd\ ^3D$ ve $3p^3(^4S)kd\ ^3D$ kısmi tesir kesitlerinin toplamı. Sürekli çizgili eğri uzunluk ve kesikli çizgi hız sonuçlarını temsil etmektedirler.

Şekil 10 $3s^23p^3\ ^2D$ ve $3s^33p^3\ ^2P$ eşikleri arasındaki $3p^4(^3P) \rightarrow 3p^3(^2D)kd\ ^3D$ kısmi tesir kesit. Sürekli çizgili eğri uzunluk ve kesikli çizgi hız sonuçlarını temsil etmektedirler.

Şekil 11 $3s^23p^3\ ^2D$ ve $3s^33p^3\ ^2P$ eşikleri arasındaki $3p^4(^3P) \rightarrow 3p^3(^2D)ks\ ^3D$ kısmi tesir kesit. Sürekli çizgili eğri uzunluk ve kesikli çizgi hız sonuçlarını temsil etmektedirler.

Şekil 12 $3s^23p^3\ ^2D$ ve $3s^33p^3\ ^2P$ eşikleri arasındaki $3p^4(^3P) \rightarrow 3p^3(^2D)kd\ ^3P$ kısmi tesir kesit. Sürekli çizgili eğri uzunluk ve kesikli çizgi hız sonuçlarını temsil etmektedirler.

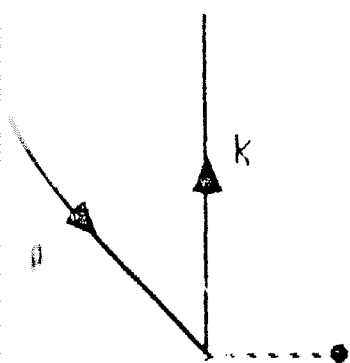
Şekil 13 $3s^23p^3\ ^2D$ ve $3s^33p^3\ ^2P$ eşikleri arasındaki toplam 2D tesir kesiti. Sürekli çizgili eğri uzunluk ve kesikli çizgi hız sonuçlarını temsil etmektedirler.

Şekil 14 $3s3p^4\ ^4P$ eşiği altındaki toplam tesir kesit. Rezonanslar $3s^23p^4\ ^3P \rightarrow 3s3p^4(^4P)np\ ^3S, ^3P, \text{ ve } ^3D$ bağlı uyarılmalarından kaynaklanmaktadır. Noktalı çizgi aynı bölge için Tayal'ın verdiği sonuçları göstermektedir.

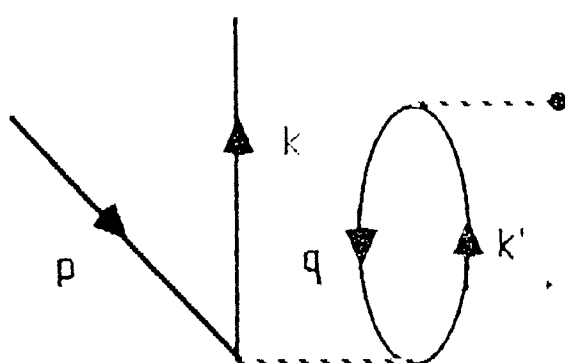
Şekil 15 $3s3p^4\ ^4P$ ve $3s3p^4\ ^2P$ eşikleri arasındaki toplam tesir kesiti. Rezonanslar $3s^23p^4\ ^3P \rightarrow 3s3p^4(^2P)np\ ^3S, ^3P, \text{ ve } ^3D$ bağlı uyarılmalarından kaynaklanmaktadır. Tayal'ın verdiği sonuçları göstermektedir.

Şekil 16. Kr ve Br^- atom ve negatif iyonun 3d kısmi fotoiyonlaşma tesir kesitleri. Düz çizgi (—) RRPA-R uzunluk, kesikli çizgi (---) hız sonuçlarını temsil etmektedirler. Noktalı çizgi (----) RRPA hız sonucunu temsil etmektedir. Lukirskii tarafından verilen deneysel sonuçlar dolu dairelerle gösterilmektedir.

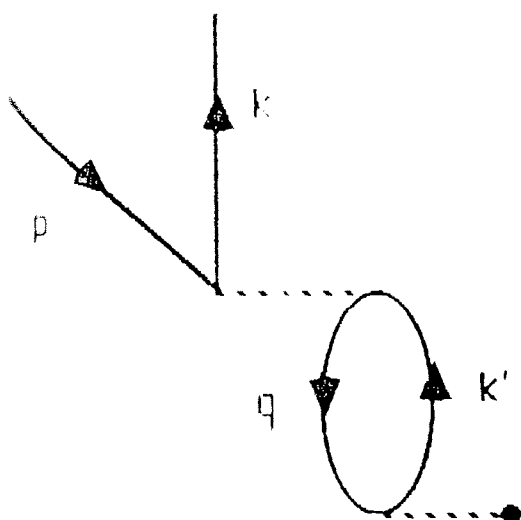
Şekil 17. $3d_{5/2}$ ve $3d_{3/2}$ alt kabuklarından kaynaklanan kısmi tesir kesitlerinin dallanma oranları. Düz çizgi (—) RRPA-R ve noktalı çizgi (----) RRPA sonuçlarını temsil etmektedirler. **Şekil 18.** Fotoelektron açısal dağılım β parametresi. Düz çizgi (—) RRPA-R ve noktalı çizgi (----) RRPA sonuçlarını temsil etmektedirler. **Figure 19.** "Spin polarization" parametreleri ξ , η , ζ , ve δ (Huang 1980, Huang et al 1981) for Kr and Br^- 3d shells. Üzerinde $3/2$ bulunan eğri $3d_{3/2}$ alt kabuğuna ve üzerinde $5/2$ bulunan eğri ise $3d_{5/2}$ altkabuğuna aittirler. Düz çizgi (—) RRPA-R ve noktalı çizgi (----) RRPA sonuçlarını temsil etmektedirler.



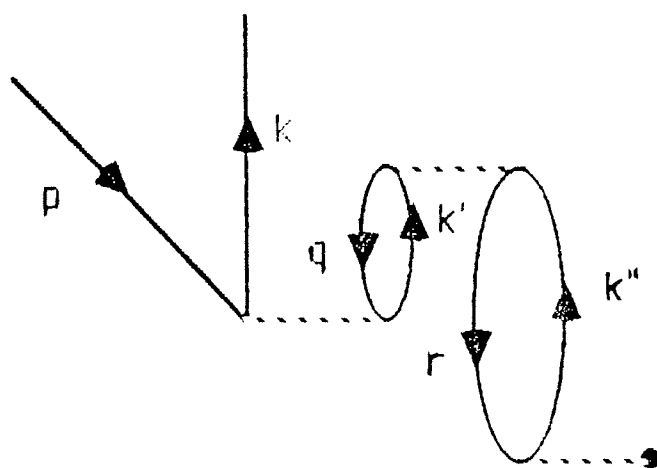
a



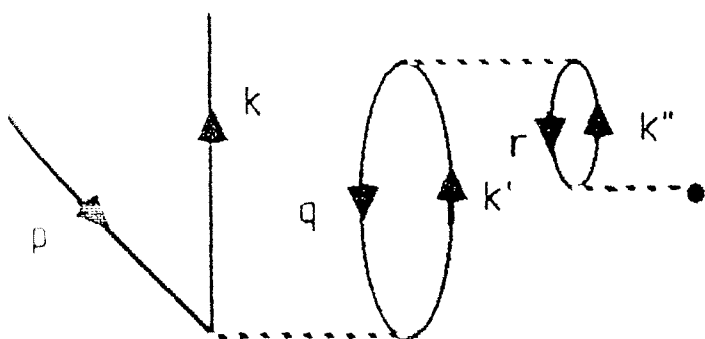
b



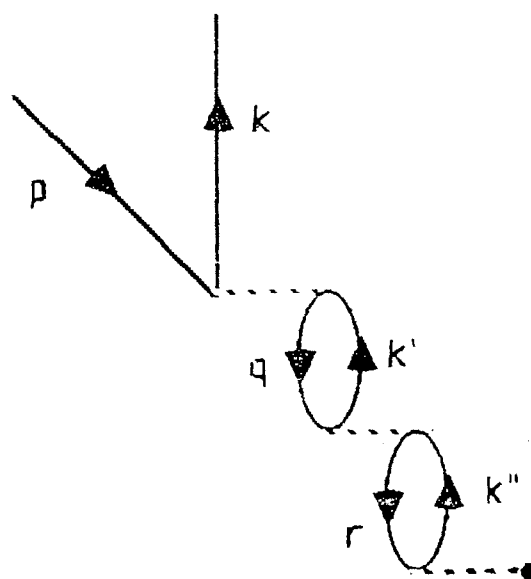
c



d

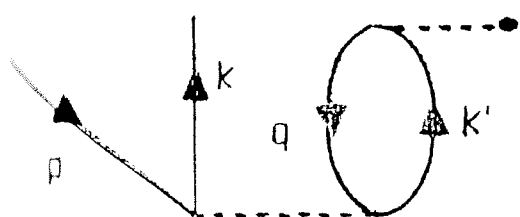


e

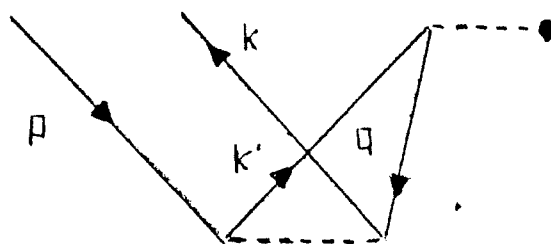


f

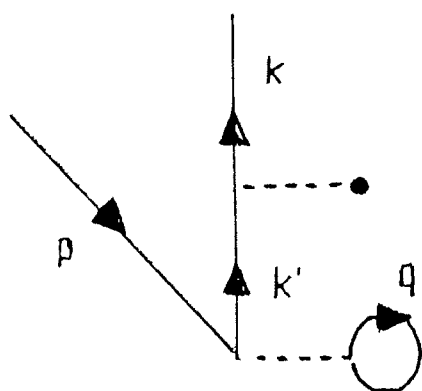
Fig. 1



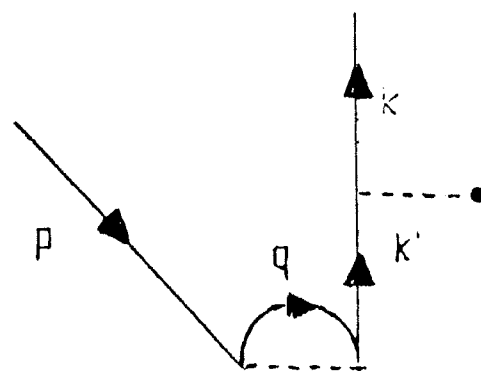
a



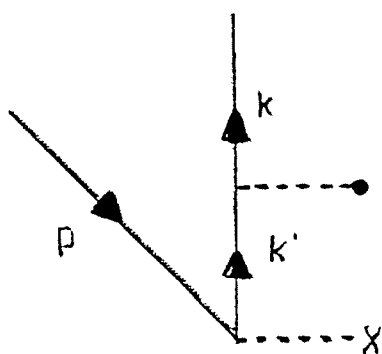
b



c



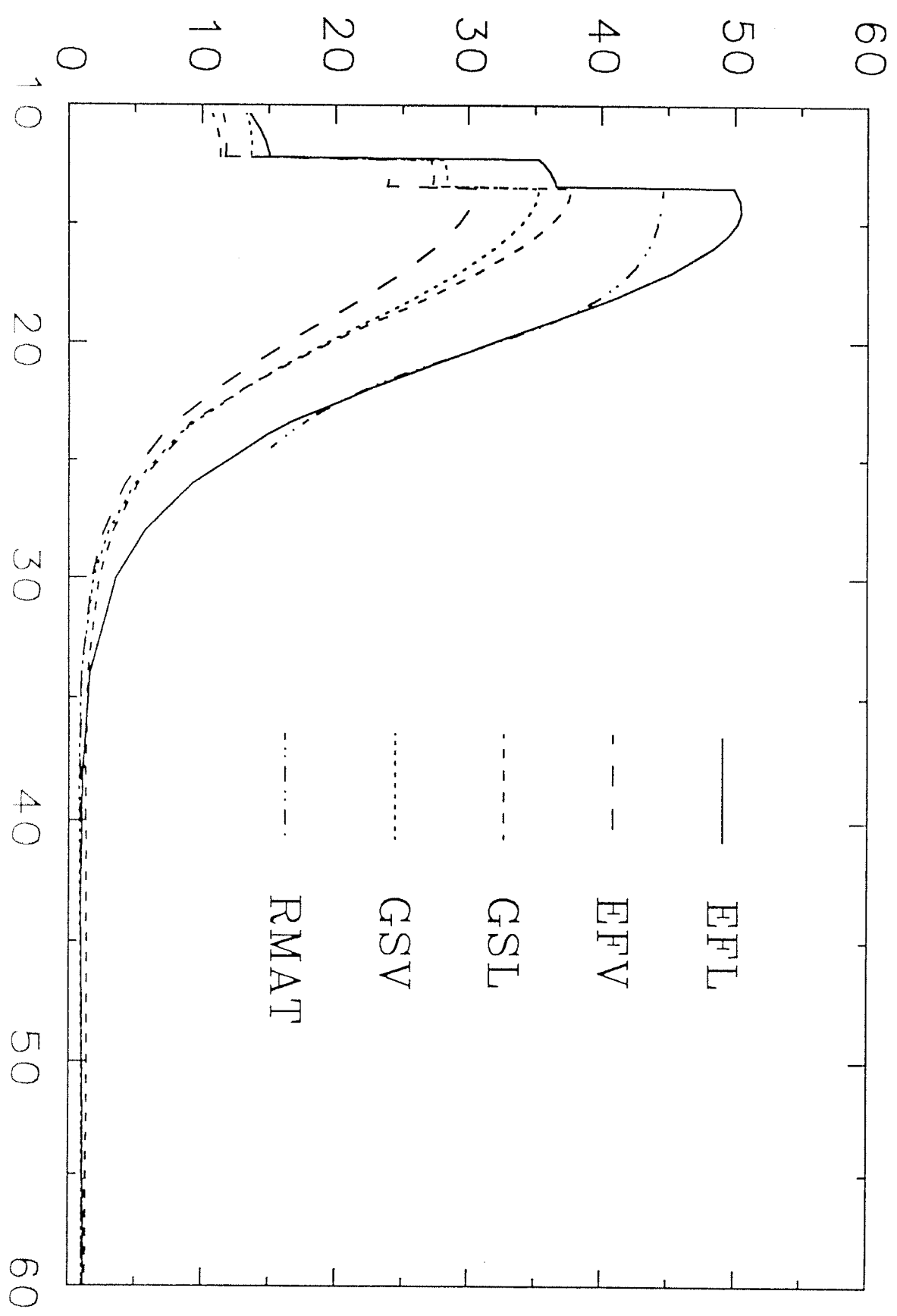
d



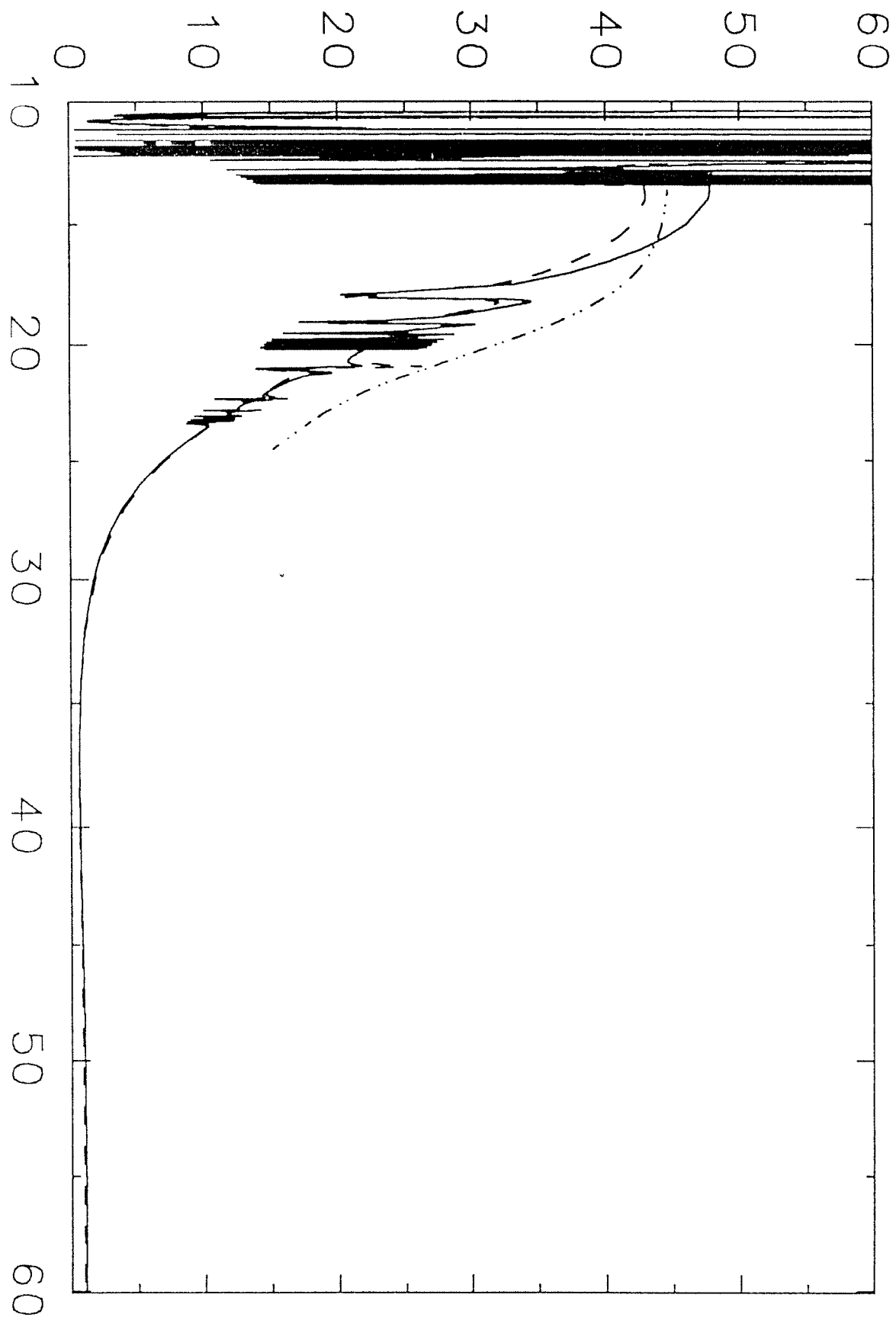
e

Fig.2

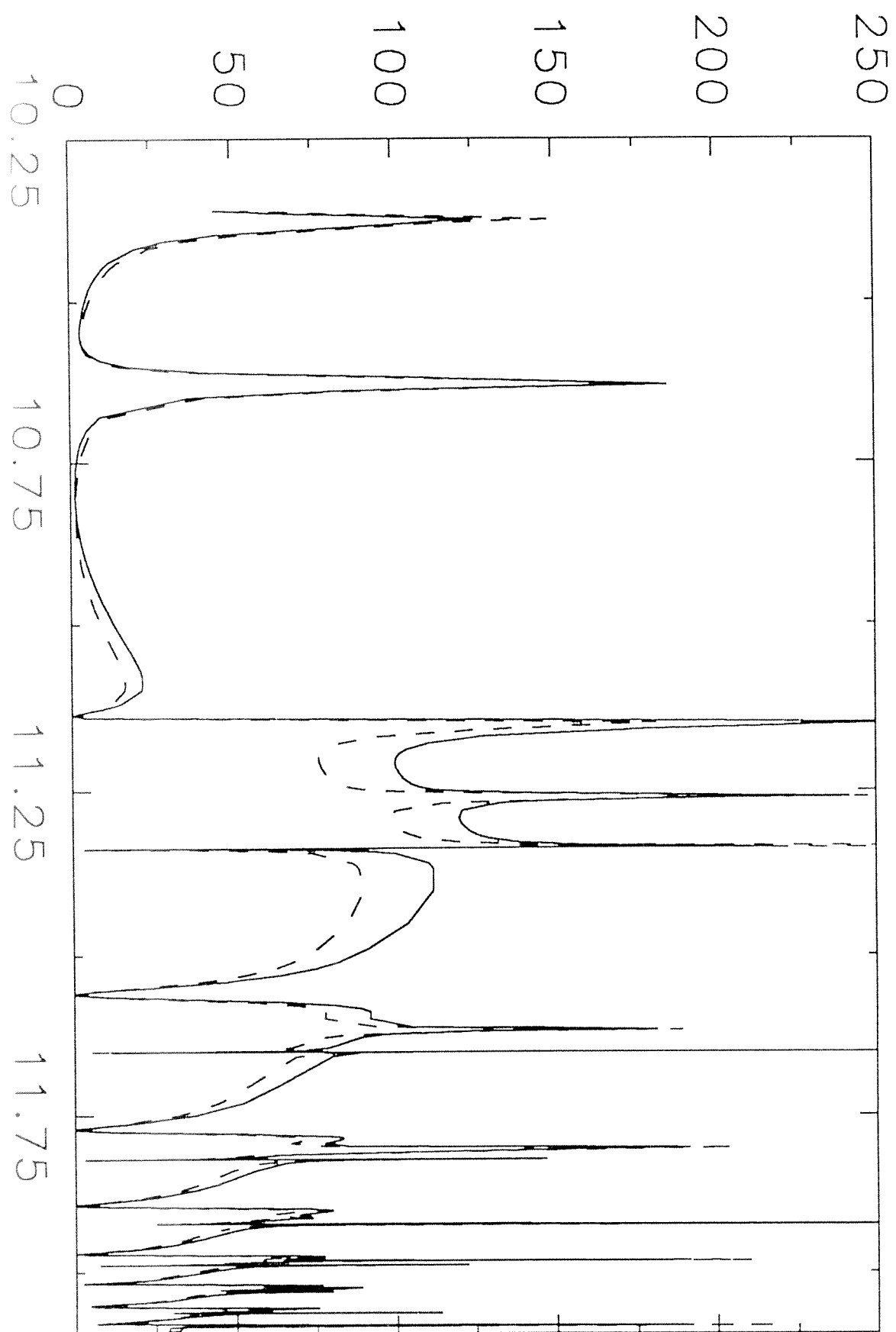
Cross section (Mb)



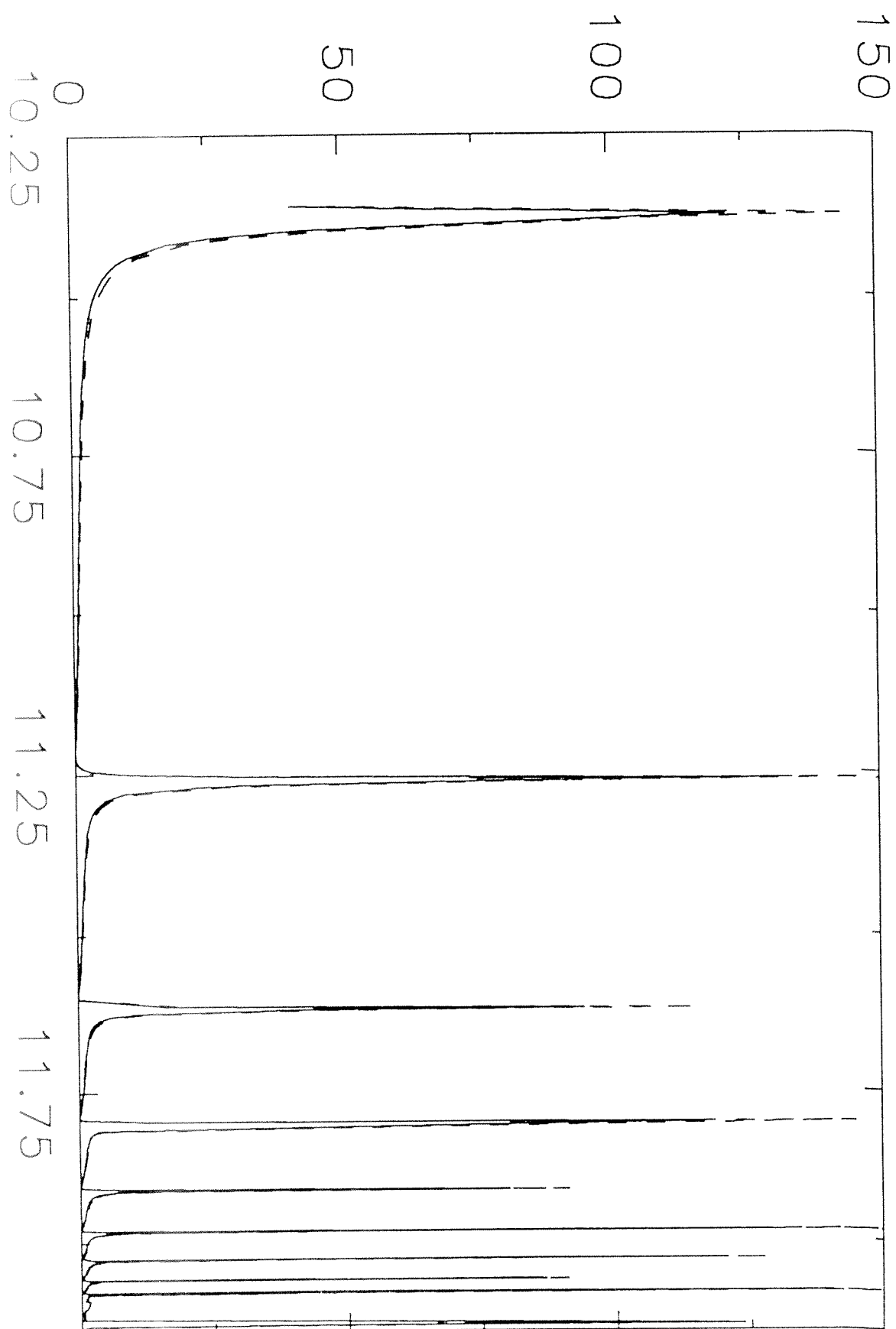
Cross section (Mb)



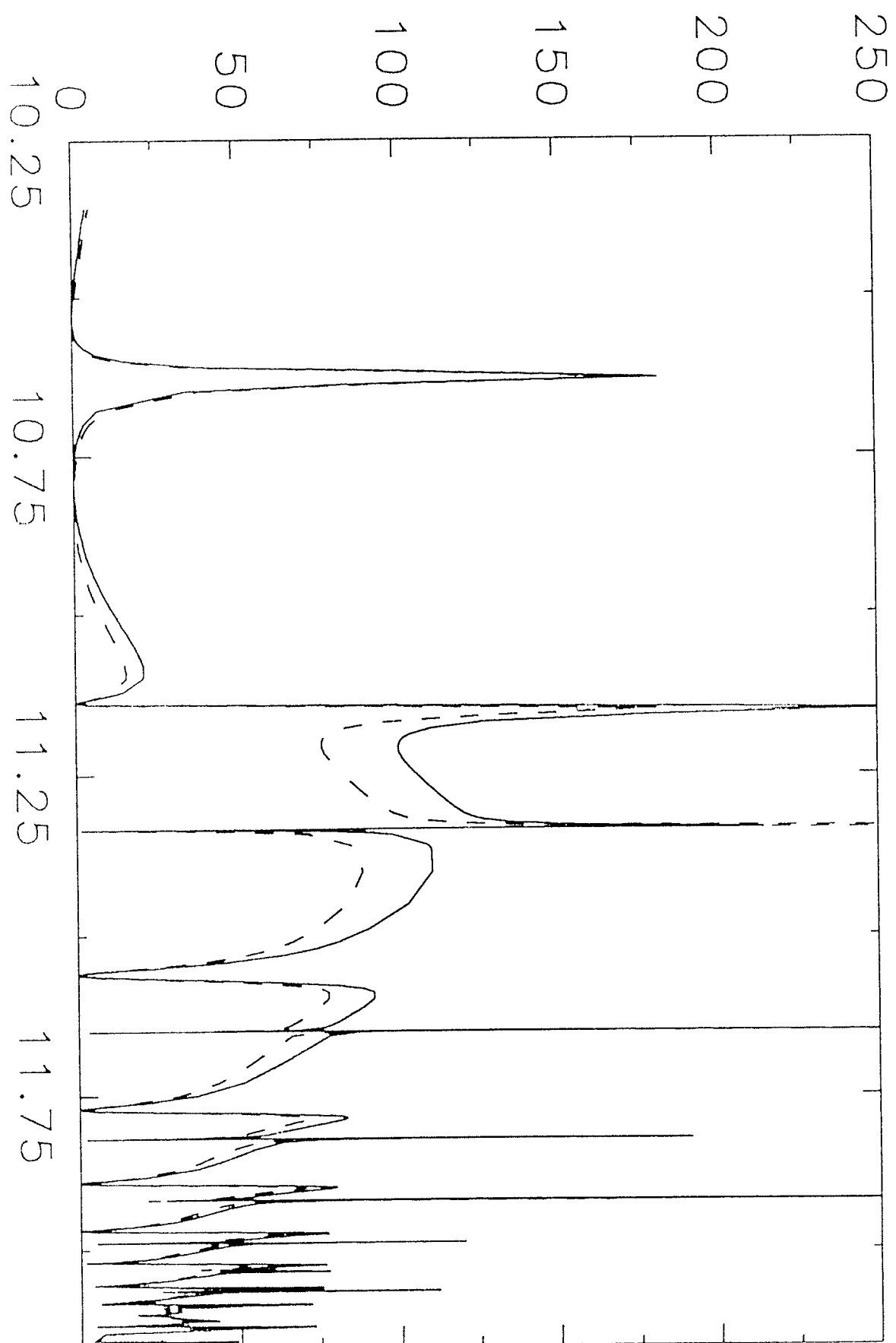
Cross section (Mb)



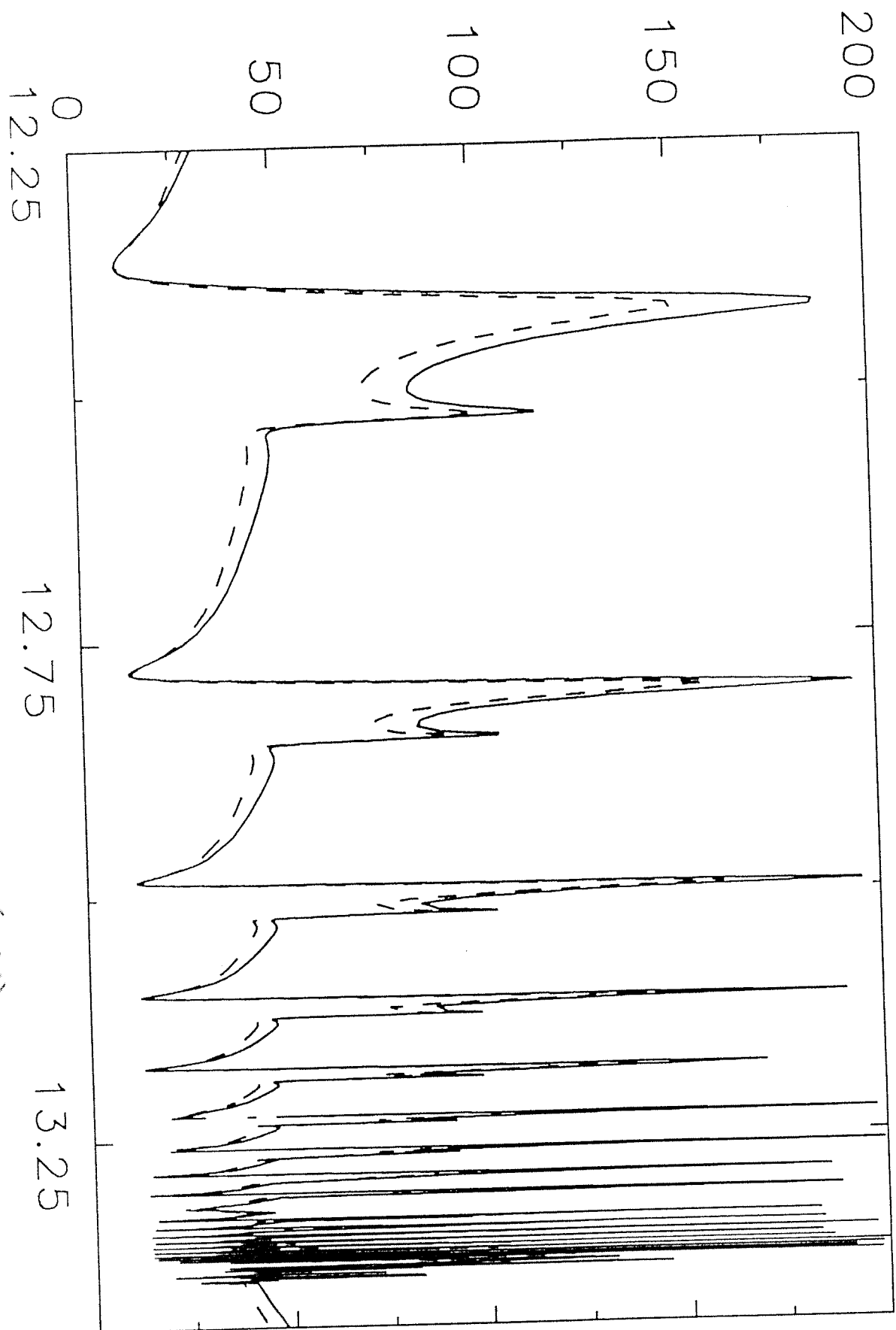
Cross section (Mb)



Cross section (Mb)

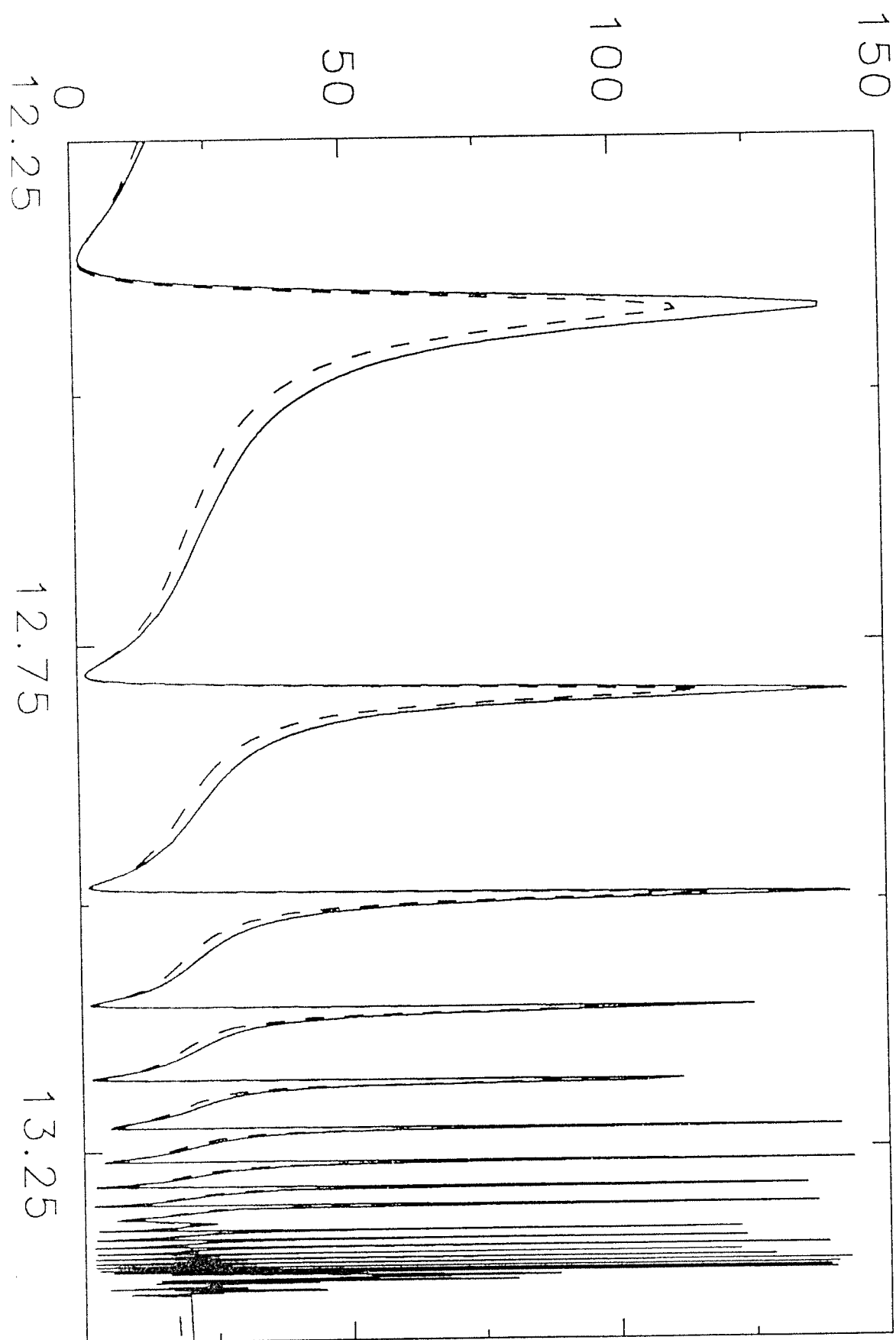


Cross section (Mb)

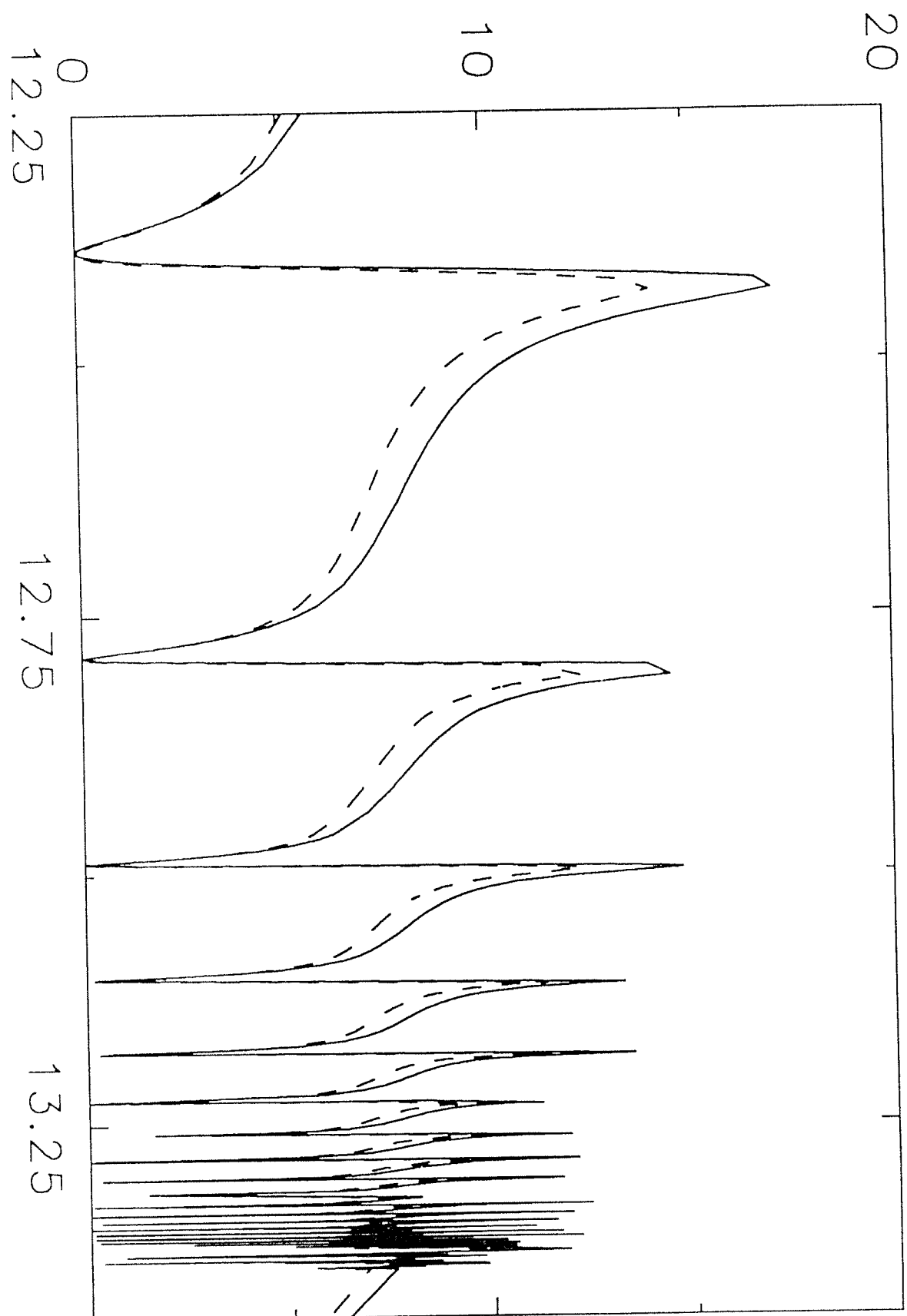


Photon Energy (eV)

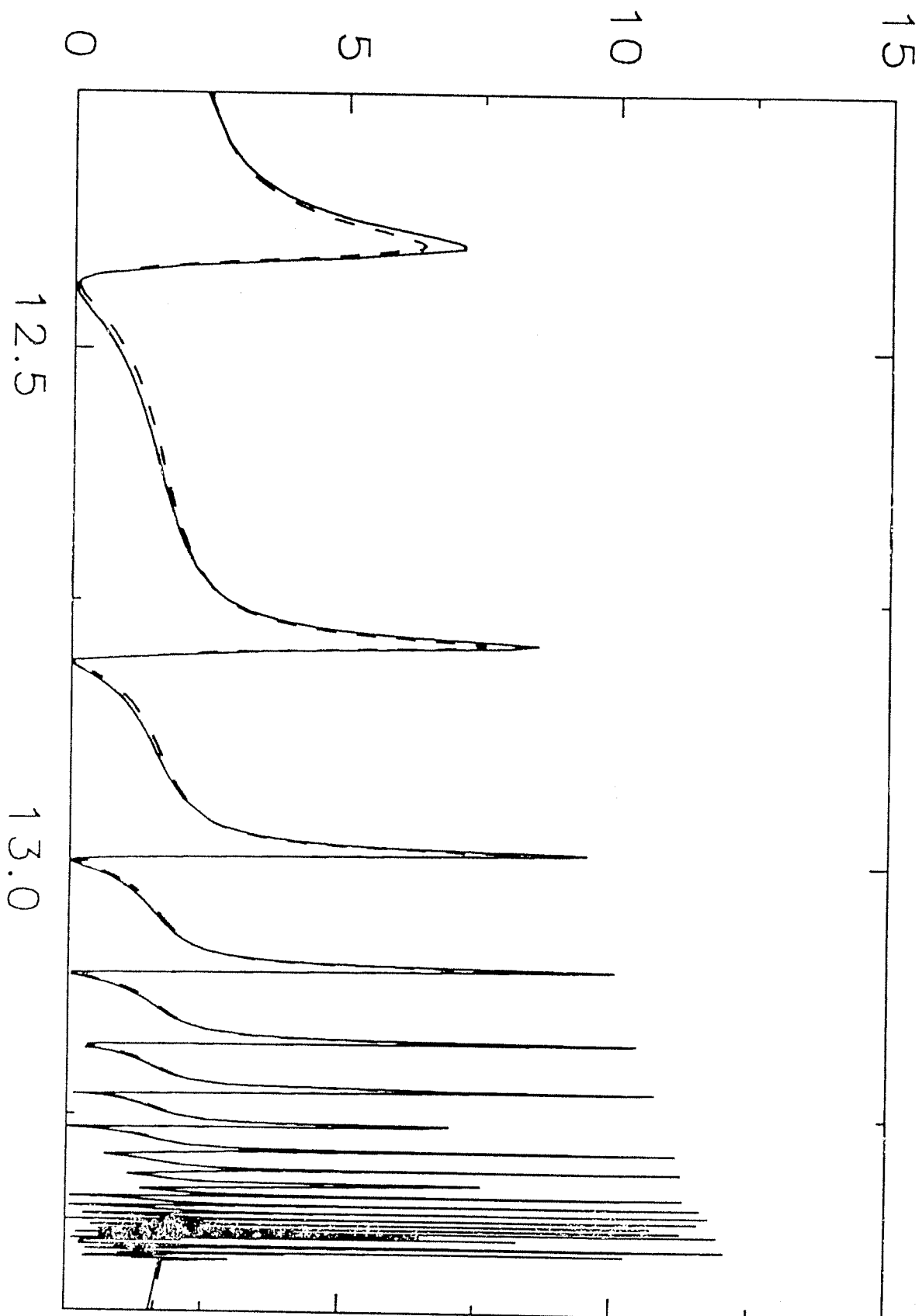
Cross section (Mb)

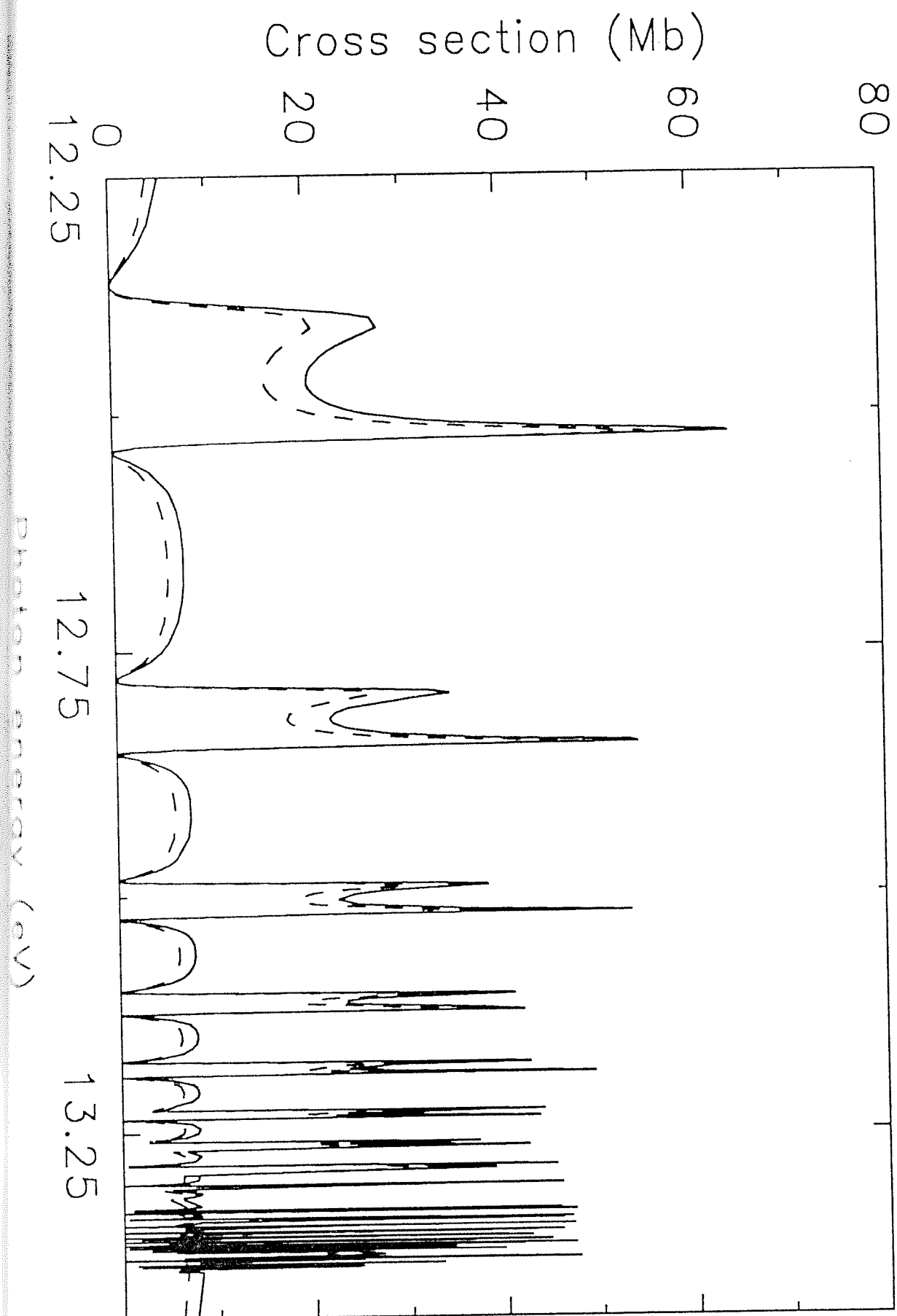


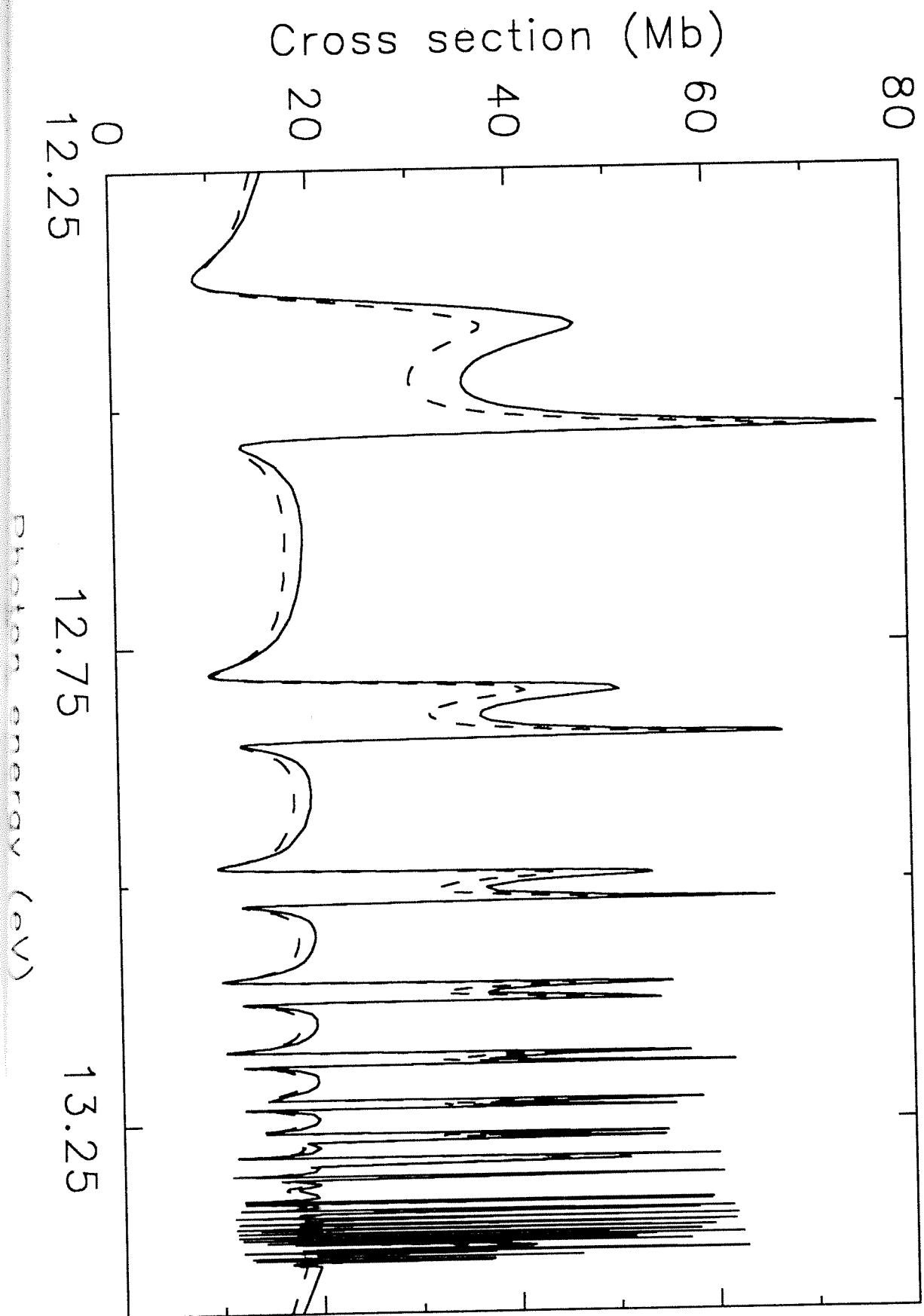
Cross section (Mb)



Cross section (Mb)







Cross section (Mb)

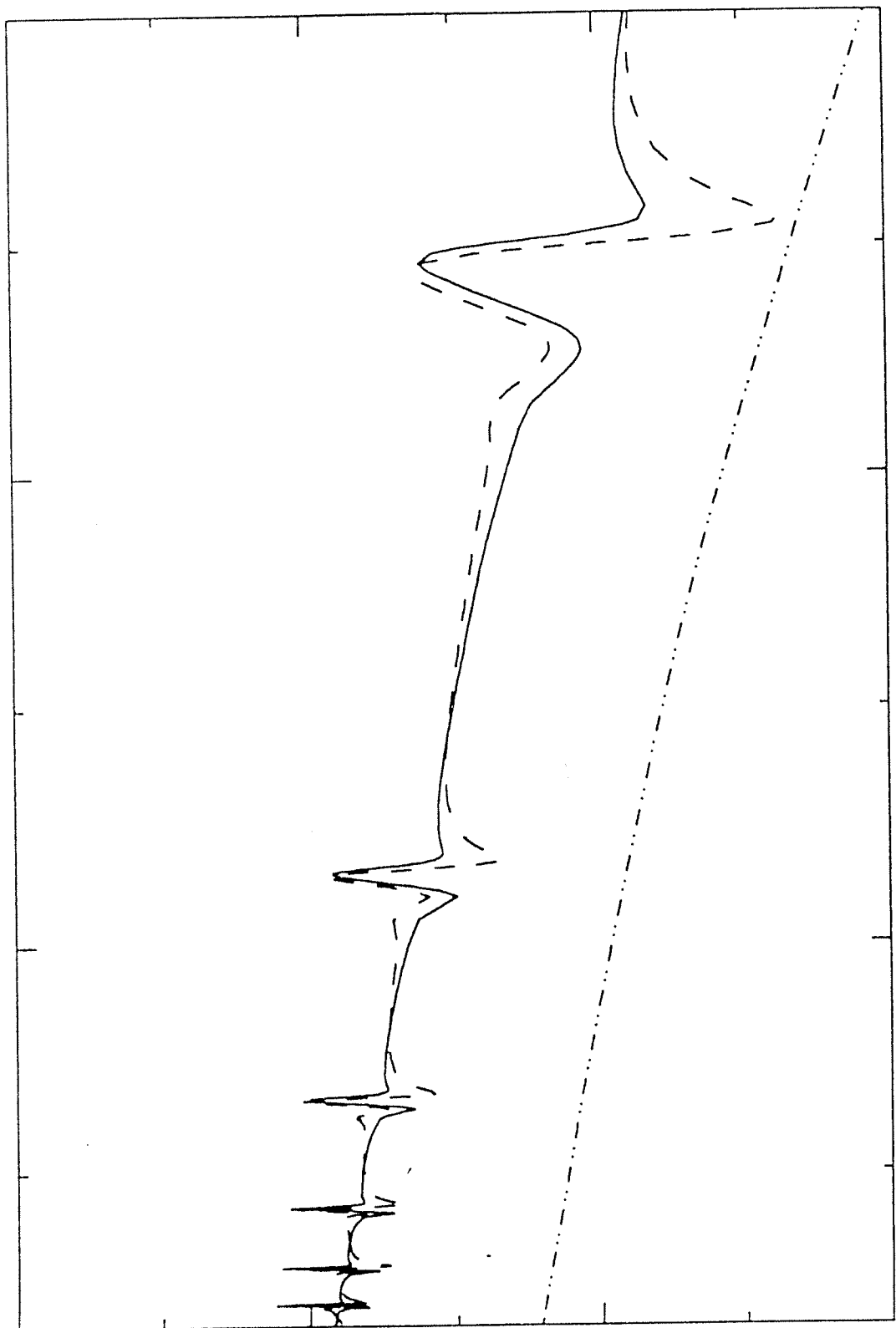
30
20
10
0

20.5

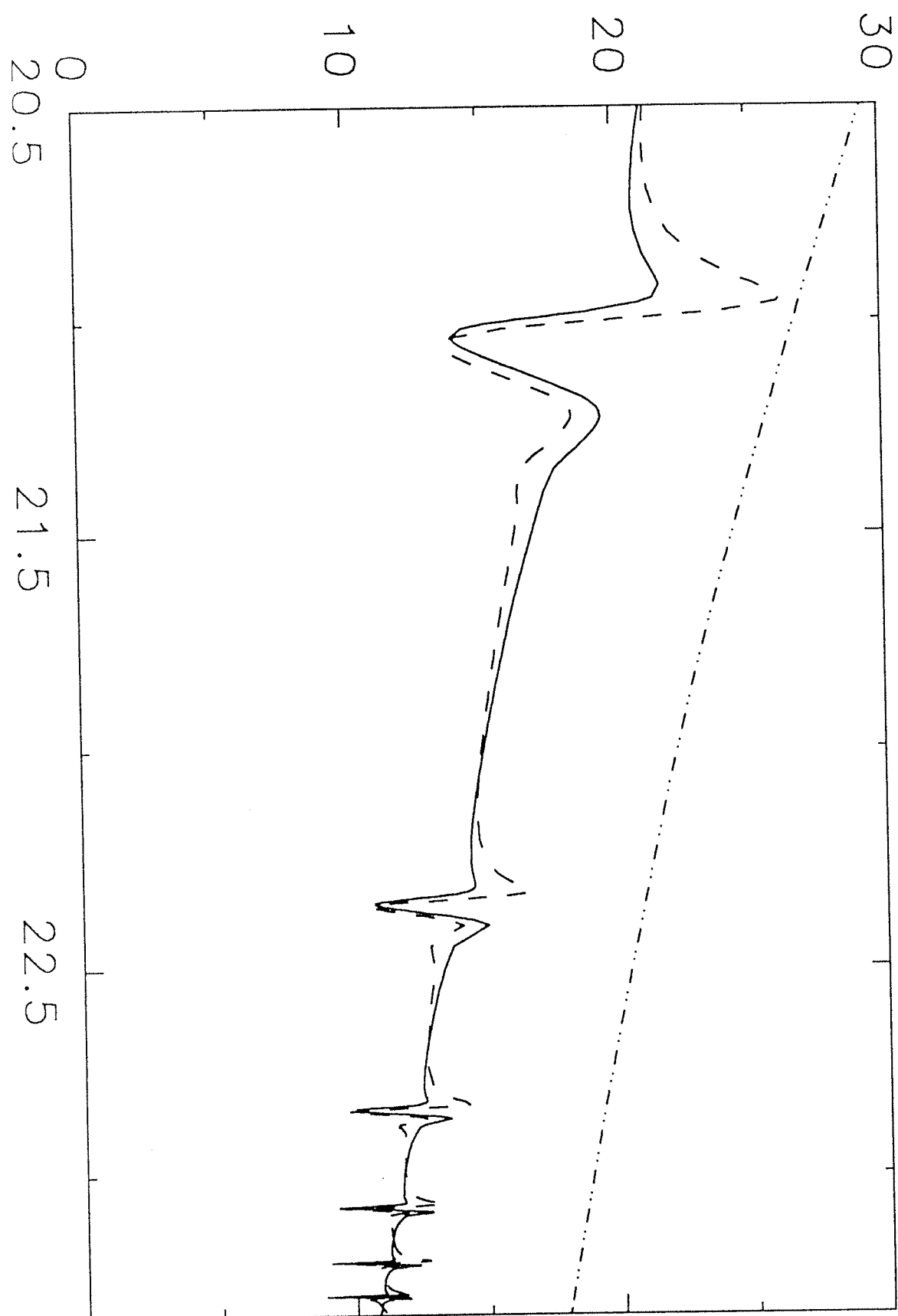
21.5

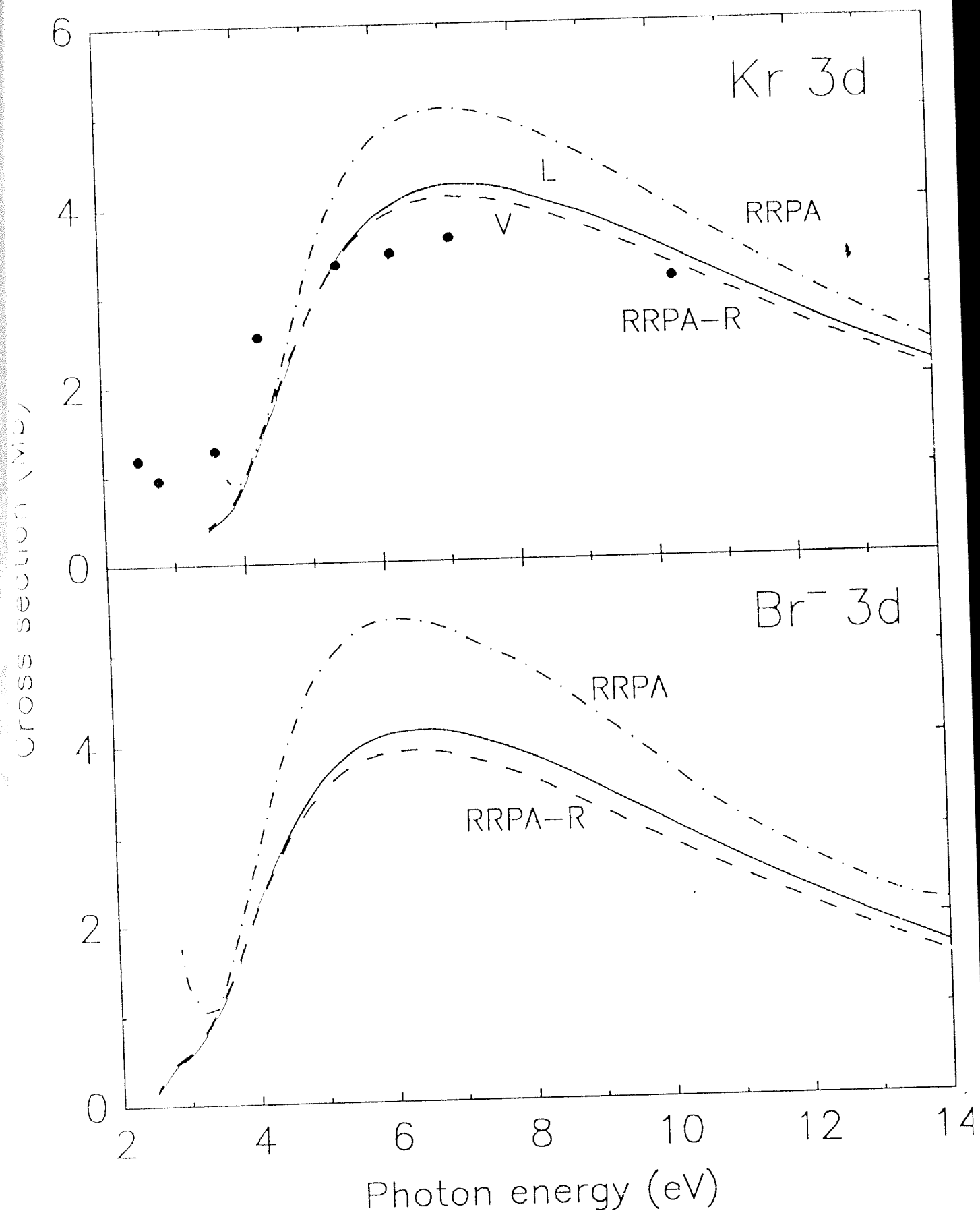
22.5

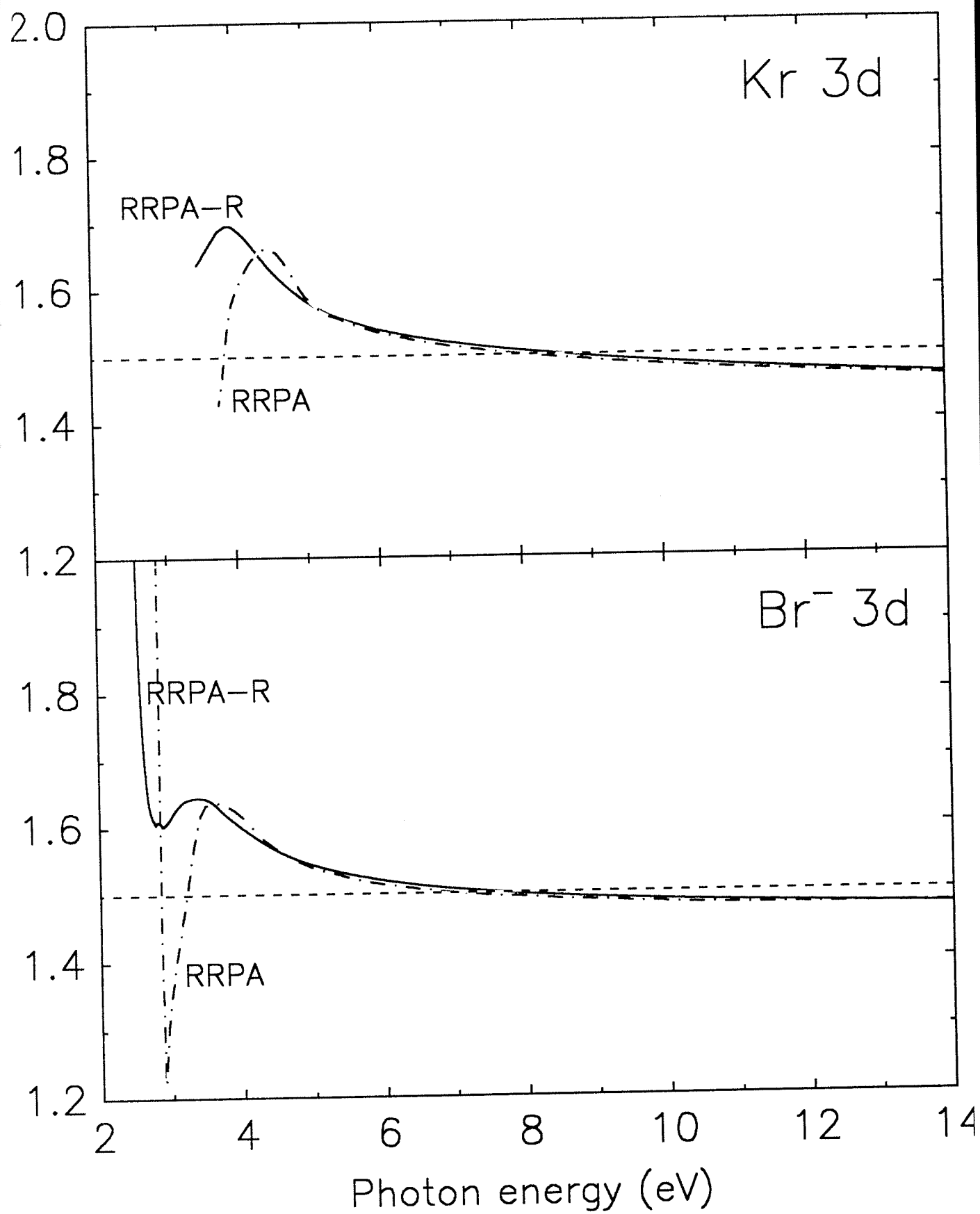
Photon energy (eV)

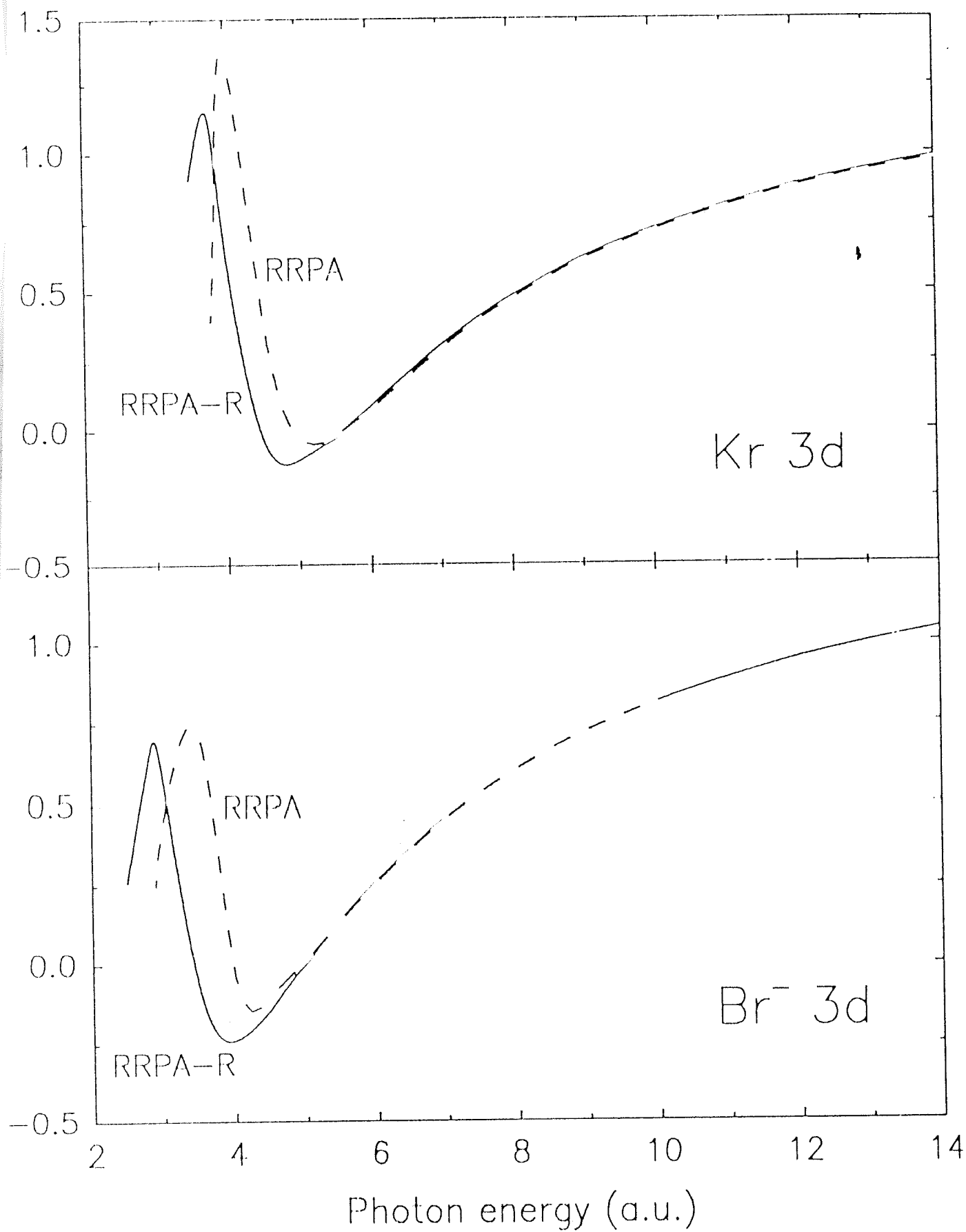


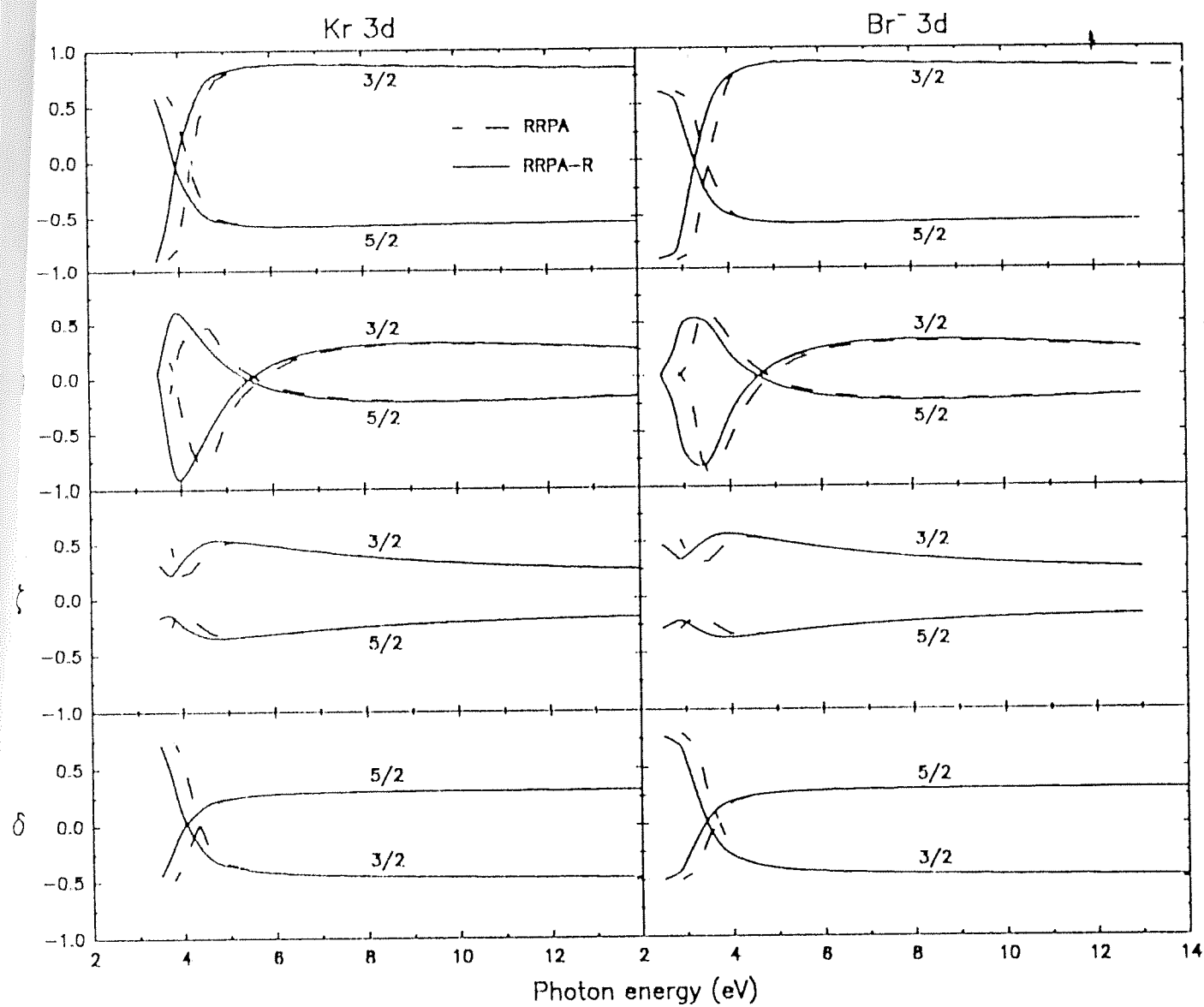
Cross section (Mb)











BİBLİYOGRAFİK BİLGİ FORMU	
1. Proje No: TBAG-988	2. Rapor Tarihi: 24 Kasım 1992
3. Projenin Başlangıç ve Bitiş Tarihleri: 1 Ekim 1991-1 Ekim 1992	
4. Projenin Adı: Open-Shell Relaxation, Polarization, and Relativistic Effects in The Atomic Photoabsorption Processes	
5. Proje Yürütücüsü ve Yardımcı araştırmacılar: Prof. Dr. Zikri Altun	
6. Projenin Yürütüldüğü Kuruluş ve Adresi: MARMARA ÜNİVERSİTESİ Fen-Edebiyat Fakültesi, 81040 Ziverbey/İSTANBUL	
7. Destekleyen Kuruluşların Adı ve Adresi: TÜBİTAK, Atatürk Bulvarı No: 2, Kavaklıdere / ANKARA; TÜRKPETROL VAKFI, Emirhan Cad. No:145 A Blok Atakule Dikilitaş / İSTANBUL	
8. Öz (Abstract): TÜBİTAK tarafından desteklenen TBAG-988 nolu proje kapsamında geliştirilen programlar sayesinde, basit ve kompleks atomların taban ve uyarılmış bağlı hallerini LS ve LSJ kuplaj sistemlerinde temsil edebilen toplam dalga fonksiyonları, atomdan fotoiyonlaşan pozitif enerjili elektron orbitallerinin hesabı, tek ve çok elektron ve uyarılmalı fotoiyonlaşma tesir kesitleri, "inter" ve "intra" kabuk korolasyonları, rezonans profilleri, ve fotoelektron açısal dağılım parametreleri, yüksek duyarlıklarla hesap edilebilmektedir. Bu programlar, çok cisim tedirgi ve "relativistic random phase" yöntemleri bünyesinde kullanılarak açık kabuklu kükürt atomunun kısmi ve toplam fotoiyonlaşma tesir kesitleri ile krypton atomu ve bromine negatif iyonunun 3d kabuğuna ait fotoiyonlaşma parametreleri hesap edildi. Kükürt atomunun 3s ve 3p alt kabuklarından kaynaklanan 3p → nd(ns) ve 3s → np bağlı geçişlerinden kaynaklanan rezonanslar çok kuplajlı denklemler tekniği bünyesinde oluşturulan K-matrix özdeğerleri kullanılarak hesap edildiler. S, Kr ve Br ⁻ için bulunan sonuçlar daha önce elde edilmiş deneysel verilerle karşılaştırıldı. Anahtar Kelimeler: Fotoiyonlaşma, Tesir Kesiti, Kükürt, Krypton, Bromine, Rezonans	
9. Proje ile ilgili Yayın/Tebliğlerle ilgili Bilgiler: Proje kapsamında "Photoionization cross section and resonance structure of atomic sulfur" ve "Relaxation effects on the 3d photoionization of atomic krypton and bromine negative ion" adlı makaleler yayınlandı. Bak: J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 25 2279-2294 (1992) and J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 25 3757-3764 (1992)	
10. Bilim Dalı : Atom va Molekül Fiziği Doçentlik B. Dalı Kodu: 404.03.01	ISIC Kodu:
11. Dağıtım(*): ☐ Sınırlı ☒ Sınırsız	
12. Raporun Gizlilik Durumu: ☐ Gizli ☒ Gizli Değil	