

**Silikon Atomunun X-ışını Bölgesinde Foto Soğurma
Tesir Kesitinin Hesaplanması**

Program Kodu: 1002

Proje No: 116F378

Proje Yürütücüsü:
Doç. Dr. Muhammet Fatih HASOĞLU

ÖNSÖZ

21.yüzyılda kurulan NASA'ya ait Chandra X-Ray Observatory ve Avrupa Uzay Ajansına ait X-ray Multi-Mirror Mission (XMM-Newton) uydu teleskoplarının sunmuş olduđu yüksek çözünürlüğe sahip yüksek-çözünürlüklü spektroskopi gözlemleri kullanarak astrofizik modellemeler yoluyla gözlemlenen ışın kaynaklarında veya ışının ilerlediđi yıldızlar arası bölgede belli atomların varlığının tespiti bilimsel çalışmalarda önemli bir yer tutmaktadır. Yakın zamanda yapılan astrofizik çalışmalarda silikon kristal yapıda toz parçacıkları halinde var olduđu bulunmuştur. Bu sebeple silikonun tek atom yapısında bulunabilmesi sorusunu akıllara getirmektedir.

Silikon atomunun varlığının tespit edilmesi için yapılacak olan astrofizik modellemelerde kullanılmak üzere soğurmaya sebep olan iç kabuklara ait foto soğurma tesir kesitinin hassasiyetle belirlenmesi büyük önem taşımaktadır. Bu tür gözlemlerin modellenmesinde sıklıkla başvuru kapsamlı çalışma Serbest-Parçacık yaklaşımı çerçevesinde yapılmış olup, yalnızca doğrudan foto iyonlaşmaya karşılık gelen, rezonans içermeyen basamak fonksiyonu şeklinde tesir kesitlerini sunmaktadır. Bu tesir kesitleri geçmişte elde edilen düşük-çözünürlüğe sahip gözlemlerin modellemeleri için yeterli olmuştur ancak Chandra ve XMM-Newton'dan elde edilen yüksek çözünürlüklerin modellenmesi için yetersiz kalmaktadır. Silikon atomunun X-ışını soğurma bölgesi ~1.85 keV olup astrofizik modellemelerde kullanılacak nitelikte tesir kesiti için deneysel bir ölçüm veya herhangi bir teorik çalışma literatürde mevcut değildir.

Bu projede silikon atomunun X-ışın bölgesinde foto soğurma tesir kesitini son-teknoloji R-matrix metodu ile teorik olarak hesaplanmıştır. Astrofizik modellemede kullanılan tesir kesitinde yer alan $1s \rightarrow 2p, 3p$ rezonanslarının yanı sıra daha yüksek enerjili Rydberg rezonanslarına ait soğurma tesir kesitleri de ilgili geçişlerin doğru büyük önem taşıyan izleyici Auger Genişleme etkileri hesaplamalara dâhil edilerek ilgili rezonanslar da özenle belirlenmişlerdir. Bu proje kapsamında elde edilen sonuçlar yakın zamanda uluslararası konferanslarda sunulmuş ve yakın zamanda uluslararası indeksli bir makalede basılmak üzere çalışmalar devam etmektedir. Tüm sonuçlar kurumumuz internet sayfasında paylaşılmış ve astrofizik camiasınca yaygın olarak kullanılan XSTAR, CLOUDY ve ION gibi önemli X-ışını spektroskopi modelleme programlarına entegre edilmesi beklenmektedir.

Projenin uygulanması ve gerçekleştirilmesi TÜBİTAK tarafından desteklenmiştir.

Doç. Dr. Muhammet Fatih HASOĞLU
Proje Yürütücüsü

İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ.....	i
İÇİNDEKİLER.....	ii
TABLolar LİSTESİ.....	iii
ŞEKİLLER LİSTESİ.....	iv
ÖZET.....	v
ABSTRACT.....	vi
1. GİRİŞ.....	1
1.1 Giriş.....	1
1.2 Problemin Tanımı.....	2
2. TEORİK YÖNTEMLER.....	3
2.1 HF ve MCHF Metodu.....	4
2.2 R-Matrix Metodu.....	5
2.3 Wigner Time-Delay-Matrix Yöntemi.....	6
2.4 AUTOSTRUCTURE Program Paketi.....	7
3. BULGULAR VE SONUÇLAR.....	8
3.1 Tek Elektron Orbitaleri.....	8
3.1.1 Si ⁺ Orbitaleri.....	8
3.1.2 Si ²⁺ Orbitaleri.....	9
3.2 Si ⁺ Auger Bozunma Oranları.....	10
3.3 Silikon Atomunun Tesir Kesitleri.....	12
4. PROJE ÇIKTILARI VE ÖNERİLER.....	16
KAYNAKÇA.....	17
EKLER.....	21
Ek A: Tesir kesiti hesabında yer alan Si ⁺ hedef halleri ve enerjileri.....	21
Ek B: Auger bozunma oranları hesabında yer alan Si ²⁺ hedef halleri ve enerjileri.....	24

TABLolar LİSTESİ

Tablo 1. Tesir kesitleri hesaplarında kullanılan Si^+ hedef hallerine ait $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3\bar{d}, 4\bar{s}$ ve $4\bar{p}$ orbitallerinin HF ve MCHF yoluyla elde edilmesinde izlenen adımlar.	8
Tablo 2. Auger bozunma oranlarının hesaplandığı R-matrix probleminde Si^{2+} hedef hallerine ait $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3\bar{d}, 4\bar{s}$ ve $4\bar{p}$ orbitallerinin HF ve MCHF metotlarıyla elde edilmesinde izlenen adımlar.	9
Tablo 3. Auger bozunma oranlarının hesabında kullanılan R-matrix problemine dahil edilen Si^{2+} hedef ve Si^+ son hallerinde yer alan terimlerin çok konfigürasyonlu temsilde kullanılan konfigürasyon sayıları.	10
Tablo 4. Hesaplanan $\text{Si}^+ (1s2s^2 2p^6 3s^2 3p^2) [^4P, ^2D, ^2P, ^2S]$ ait Auger bozunma oranları Rydberg biriminde verilmiştir.	12
Tablo 5. Tesir kesiti hesabında kullanılan R-matrix problemine dahil edilen Si^+ hedef ve Si son hallerinde yer alan terimlerin çok konfigürasyonlu temsilde kullanılan konfigürasyon sayıları.	13
Tablo 6. Si^+ hedef hallerinin hesaplanan enerji değerleri ve mevcut NIST enerji değerleri Rydberg biriminde verilmiştir. Ayrıca foton enerjileri eV biriminde verilmektedir.	21
Tablo 7. Si^+ hedef halleri için hesaplanan enerji değerleri ve mevcut NIST enerji değerleri Rydberg biriminde verilmiştir.	24

ŞEKİLLER LİSTESİ

Şekil 1. Sol: GX 5-1 kaynağına ait Chandra MEG spektrumu Gözlem No 5888; Sağ: GX 17+2 kaynağına ait Chandra MEG spektrumu Gözlem No 6630, Verner ve Yakovlev (1995)'in Si atomuna ait tesir kesitleri ile modellemeleri.	2
Şekil 2. Tesir kesitleri hesaplarında kullanılan Si ⁺ hedef hallerine ait $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3\bar{d}, 4\bar{s}$ ve $4\bar{p}$ orbitalleri.	8
Şekil 3. Auger bozunma hesaplarında kullanılan Si ²⁺ hedef hallerine ait $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3\bar{d}, 4\bar{s}$ ve $4\bar{p}$ orbitalleri.	9
Şekil 4. Hesaplanan Q -Time-Delay-matrisinin izi ve rezonanslara karşılık gelen Lorentz- dağılımı şeklinde uyarlamalar(fitting).	11
Şekil 5. Uzunluk ve hız ayarlarında hesaplanan tesir kesitleri.	14
Şekil 6. İzleyici Auger genişleme etkili ve etkisiz tesir kesitleri.	15
Şekil 7. Hesaplanan foto soğurma tesir kesiti, tek-parçacık (IP) tesir kesiti (Verner ve Yakovlev, 1995) ve kristal formunda toz parçacıklı silikonun tesir kesiti (Corrales vd., 2016).	15

ÖZET

Astrofizik uygulamalarda, yüksek-çözünürlüklü X-ışını spektroskopinin asıl amacı uzaydan gelen ışınlarda yer alan soğurma çizgilerinin tespiti ve tespit edilen çizgilerin özelliklerinin modellenmeler kullanılarak belirlemektir. X-ışını bölgesindeki gözlemlenen soğurma çizgilerinin kaynağının büyük bir çoğunluğu atomların iç kabuklarındaki foton elektron etkileşmesidir. Spektroskopi gözlemlerinin modellenmeleri ve yorumlanabilmeleri soğurmaya sebep olan atomlara ait foto soğurma tesir kesitlerinin ulaşılabilir olmasına bağlıdır. Bu tür gözlemlerin modellenmesinde sıklıkla başvurulan kapsamlı çalışma Serbest-Parçacık yaklaşımı çerçevesinde yapılmıştır. Bu tesir kesitleri geçmişte elde edilen düşük-çözünürlüğe sahip gözlemlerin modellenmesi amacı için yeterli olmuştur.

Serbest-Parçacık yaklaşımı ile hesaplanmış tesir kesitlerini kullanan X-ışını soğurma modelleri, Chandra X-Ray Observatory ve Avrupa Uzay Ajansına ait X-ray Multi-Mirror Mission (XMM-Newton) uydu teleskoplarının sunmuş olduğu yüksek çözünürlüğe sahip yüksek-çözünürlüklü spektroskopi gözlemleri için yeterli değildir. Bunun sebebi bu tesir kesitleri yüksek çözünürlüklü spektroskopi için ayrıca büyük önemli olan $1s \rightarrow np$ geçişlerine ait soğurma etkilerini içermemeleridir. X-ışını bölgesinde atomların tesir kesitleri deneysel olarak istenilen seviyede yüksek çözünürlüklü ölçümleri çok zordur. X-ışını bölgesinde silikon atomunun istenilen nitelikte tesir kesiti için deneysel bir ölçüm veya herhangi bir teorik çalışma literatürde mevcut değildir.

Bu projede silikon atomunun X-ışın bölgesinde foto soğurma tesir kesitini son-teknoloji R-matrix metodu kullanılarak teorik olarak hesaplanmıştır. R-matrix metodu daha önce oksijen, neon, karbon ve magnezyum atomların için tesir kesitlerinin hesaplanmasında kullanılmış ve bu sonuçlar astrofizik modellemelerde kullanılmıştır. Ayrıca bu çalışmalardan elde edilen tesir kesitleri astrofizik modellemelerde kullanılan XSTAR, CLOUDY ve ION gibi önemli X-ışını spektroskopi modelleme programlarına entegre edilmişlerdir. Astrofizik modellemede Rydberg rezonanslarına ait soğurma tesir kesitlerinin hassasiyetle bilinmesi ayrıca önemlidir. Bu rezonansların genişliklerinin doğru şekilde tayin edilmesi için büyük öneme arz eden İzleyici Auger Genişleme etkileri hesaba dâhil edilmişlerdir.

Yakın zamanda silikon atomunun K-kabuğu soğurma bölgesine karşılık gelen astrofizik modelleme çalışmaları silikon atomunun kristal yapıda toz parçacıkları halinde var olduğu bulunmuştur. Silikonun atom halinde var olup olmadığı konusundaki yapılacak astrofizik modellemelerde bu projeden elde edilen sonuçların kullanılması ile mümkündür.

Anahtar Kelimeler: X-ışını, Foto Soğurma, Tesir Kesiti, Silikon, R-Matrix Metot, Auger Bozunma

ABSTRACT

In astrophysics applications, the main goal of high-resolution X-ray spectroscopy is to identify absorption lines in the rays coming from the space and determine their properties. Primary source of the absorption lines in the X-ray region is the photon electron interactions in the inner-shells. Modelling and interpretation of spectroscopic observations depends on the availability of the photoabsorption cross section for the relevant atom causing the absorption. For modelling of such observation, often-used comprehensive work was carried out within an Independent-Particle approximation. These cross sections were good enough for the purpose of modelling low-resolution observations in the past.

X-ray absorption models that incorporate cross sections computed in the Independent-Particle approximation are not adequate for the high-resolution spectroscopic observations observed via Chandra X-ray Observatory and European Space Agency's X-Ray Multi-Mirror Mission (XMM-Newton) space-based satellite telescopes. That is because the Independent-Particle approximation is not including absorption effects corresponding $1s \rightarrow np$ transition which are of great importance for high-resolution spectroscopy. Experimental measurement of X-ray cross sections at desired high resolution is quite difficult. No experimental measurement nor any theoretical study at desired quality exist in the literature for the cross section of silicon atom in the X-ray region.

In this project, the photo absorption cross section of silicon atom in the X-ray region have been theoretically calculated by using state-of-art R-matrix method. R-matrix method has been used to calculate cross sections previously for oxygen, neon, carbon and magnesium and the results the calculated cross sections were integrated into important X-ray spectroscopy modelling codes; XSTAR, CLOUDY, and ION. In the cross sections used in astrophysics modelling, the knowledge of high energy Rydberg resonances with high precision is important. Important Spectator Auger Broadening effects necessary to determine the widths of such resonances have been taken into account.

A recent astrophysical modelling work corresponding to the K-shell photoabsorption region found silicon atom in crystal-form dust particles. In order to investigate whether silicon atoms exist or not in the atomic form can be possible by using the calculated results.

Keywords: X-Ray, Photoabsorption, Cross Section, Silicon, R-Matrix Method, Auger Decay

1. GİRİŞ

Bu bölümde X-ışını spektroskopisi uygulamalarında atomların tesir kesitlerinin bilinmesinin önemi, özellikle silikon atomunun tesir kesitinin bilinmesine neden ihtiyaç duyulduğu ve bu konuda literatürde yer alan çalışmalar sunulacaktır.

1.1 Giriş

Astrofizikte spektroskopi gözlemlerin modellenmeleri ve yorumlanabilmeleri soğurma etkisine sebep olan atomlara ait tesir kesitlerinin ulaşılabilir olmasına bağlıdır. Gözlemlenen spektrumlar ile mevcut foto soğurma tesir kesitleri kullanılarak yapılan bu modellemeler sonucunda yıldızlar arası bölgede (Interstellar Medium - ISM) belirli atom veya moleküllerin varlığının tayin edilmesi ve doğrudan X-ışının kaynağı rolünde olan yıldızların içerikleri ve yıldızlarda meydana gelen reaksiyonlar hakkında dolaylı olarak önemli bilgilere ulaşmak mümkündür. Gözlemlenen spektrum $I(E)$ ile kaynağından yayımlanan spektrum $I_0(E)$ arasındaki ilişki doğrudan foto soğurma tesir kesiti $\sigma(E)$ ile aşağıdaki ifade ile belirlenir;

$$I(E) = I_0(E)e^{-N\sigma(E)}$$

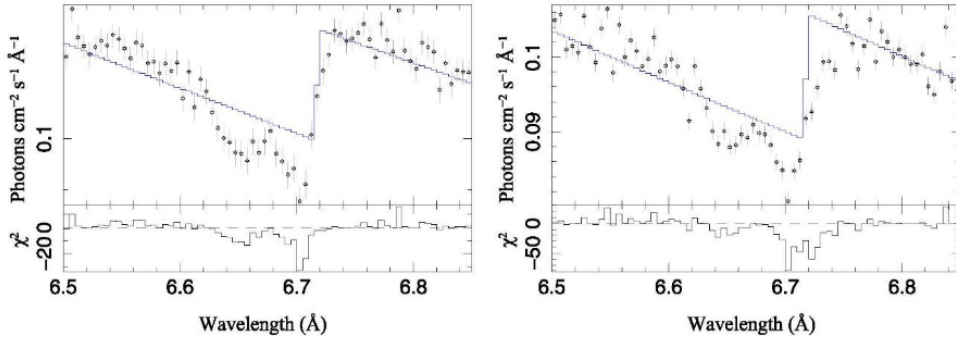
burada N kaynak ile gözlem arasında yer alan soğurmaya sebep olan atomların yoğunluğudur.

Günümüzde astrofizik uygulamalarda sıklıkla kullanılan tesir kesitleri Reilman ve Manson (1979) tarafınca Serbest-Parçacık (Independent-Particle) yaklaşımıyla hesaplanan önemli rezonans etkilerini içerilmeyen sadece doğrudan foto iyonlaşma etkisinin içerildiği basamak fonksiyonu şeklindeki düşük çözünürlüklü eğrilerden ibarettir. Bu tesir kesitleri atomların tüm kabuklarına ait geçişleri içermekle birlikte atom numarası 2 ile 30 arasında olan nötr ve tüm pozitif yüklü iyonlarını için mevcuttur. Diğer veri seti Verner ve Yakovlev (1995) tarafınca derlenen Henke vd. (1993)'de yer alan deneysel sonuçların Reilman ve Manson (1979) sonuçlarına uyarlanması (fitting) sonucunda elde edilen yine basamak fonksiyonu şeklindeki orta düzeyde çözünürlüğe sahip tesir kesitlerinden ibarettir. Bu tesir kesitleri geçmişte elde edilen düşük-çözünürlüğe sahip gözlemlerin modellenmesi için yeterli olmuştur. Ancak yakın zamanlarda kurulan NASA'ya ait Chandra X-Ray Observatory ve Avrupa Uzay Ajansına (ESA) ait X-ray Multi-Mirror Mission (XMM-Newton) uydu teleskopları aracılığıyla yapılan yüksek çözünürlüklü spektroskopi gözlemlerin analizlerinde ve modellemelerinde yetersiz kalmaktadır. Bunun sebebi bu tesir kesitlerinde yalnızca doğrudan foto iyonlaşma tesir kesitini içermesi ve X-ışını bölgesinde yüksek çözünürlüklü spektroskopi için ayrıca büyük önem arz eden $1s \rightarrow np$ geçişlerine ait soğurma etkilerini içermemeleridir.

X-ışını bölgesinde atomların tesir kesitlerinin deneysel olarak yüksek çözünürlüklü ölçümleri çok zor olması sebebiyle, deneysel ölçümler ancak $1s \rightarrow 2p, 3p$ geçişleriyle sınırlı olup çok az sayıda atom veya iyonlar için mevcuttur. Örneğin; Boron gibi C^+ iyonu atomu: Schlachter vd. (2004), berilyum gibi C^{2+} iyonu: Scully vd. (2005), nitrojen atomu: Sant'Anna vd. (2011), oksijen atomu ve iyonları: McLaughlin (2013). Bu deneyler ALS Lawrence Berkeley Ulusal Laboratuvarında son teknoloji foton kaynakları ve detektörler kullanılarak yapılmıştır. Boron-gibi C^+ iyonu deneyinde 287-291.5eV aralığı 65meV ve 120meV çözünürlükleriyle ölçülmüştür. Be-gibi C^{2+} iyonu deneyinde 292-323eV bölgesi üç farklı aralık olarak 68meV, 133meV ve 200meV çözünürlükleriyle ölçülmüştür. Nitrojen atomu için yapılan deneyde 390-420eV bölgesi 60meV çözünürlükle ölçülmüştür. O iyonları için yapılan deneyde 525-550eV foton enerji bölgesi 124meV çözünürlükle ölçülmüştür. X-ışınları bölgesinde yapılan deneysel çalışmalarda hem yüksek enerjili fotonların elde edilmesi hem de istenilen çözünürlüğe ulaşmak gibi zorluklar. Si atomunun K-kabuğu bölgesinin 1844eV ($\sim 6.7\text{\AA}$) yapılan deneylerin çok fazla üzerinde olması, Si atomunun deneysel olarak istenilen çözünürlükte ölçümünün göreceli olarak çok zordur.

1.2 Problemin Tanımı

Yakın zamanda Norbert vd. (2016) tarafınca silikon atomunun K-kabuğu soğurma bölgesine karşılık gelen 6,5-6,9 \AA dalga boyu aralığındaki dört değişik kaynaktan yapılan gözlemlerin rezonanssız tesir kesitlerinin (Verner ve Yakovlev, 1995) kullanılarak yapılan modellemelerin yalnızca iki kaynağa ait olanları Şekil 1.'de gösterilmektedir. Görüldüğü gibi 6,7 \AA civarında önemli soğurma çizgilerinin tam olarak açıklanamadığı ve bu soğurma çizgilerinin tam olarak modellenebilmeleri için Si atomunun yüksek hassasiyete sahip rezonanslı tesir kesitlerine ihtiyaç olduğu aşikârdır.



Şekil 1.Sol: GX 5-1 kaynağına ait Chandra MEG spektrumu Gözlem No 5888; Sağ: GX 17+2 kaynağına ait Chandra MEG spektrumu Gözlem No 6630, Verner ve Yakovlev (1995)'in Si atomuna ait tesir kesitleri ile modellemeleri.

Norbert vd. (2016) tarafınca yapılan çalışmada silikonun kristal yapıda toz parçacıkları halinde var olduğu bulunmuştur. Silikonun atom halinde var olup olmadığı konusundaki yapılacak astrofizik modellemelerde bu projeden elde edilen sonuçların kullanılması ile mümkün olacaktır.

Silikon atomunun X-ışını bölgesinde tesir kesiti için deneysel bir ölçüm yapılmamış olup ihtiyaç duyulan nitelikte herhangi bir teorik çalışma mevcut değildir. Astrofizik modellemelerde $1s \rightarrow 2p, 3p$ geçişlerinin yanı sıra daha yüksek enerjili Rydberg geçişlerine ait soğurma tesir kesitlerinin hassasiyetle bilinmesi büyük önem arz etmektedir. Bu rezonans genliklerinin doğru şekilde tespiti İzleyici Auger Genişmesi etkisinin probleme dahil edilmesiyle mümkündür.

R-matrix metodu geçtiğimiz yıllarda nötr oksijen ve pozitif iyonları (Gorczyca, 2000 ; Gorczyca ve McLaughlin, 2000 ; Juett vd., 2004 ; Garcia vd., 2005 ; Gorczyca vd., 2013), nötr neon ve pozitif iyonları (Juett vd., 2006), nötr nitrogen ve pozitif iyonları (Garcia vd., 2009), nötr karbon atomu ve pozitif iyonları (Hasoğlu vd., 2010) ve nötr magnezyum ve pozitif iyonları (Hasoğlu vd., 2014) için X-ışını bölgesinde tesir kesitlerinin yüksek hassasiyetle hesaplanmasında kullanılmıştır. Yine R-matrix metodunu kullanarak Witthoef vd. (2009) tarafınca yapılan çalışmada Ne, Mg, Si, S, Ar, and Ca elektron sayısı 11 den düşük olan iyon halleri için tesir kesitleri hesaplanmıştır. Bu çalışmada 11 elektrondan az iyonlara odaklanarak $n=2$ konfigürasyon etkileşmesi kompleksi (CI complex) içerisinde sonuçlara ulaşabilmişlerdir. Oysaki nötr Si için elektron sayısı 10'dan fazla olması sebebiyle en kaba yaklaşımda $n=3$ ve yüksek hassasiyet için $n=4$ konfigürasyon etkileşim kompleksinde çalışmak gerekir, haliyle göreceli olarak problemin boyutu da bir hayli artmaktadır. Tüm bu çalışmalardan elde edilen tesir kesitleri astrofizik camiasınca yaygın olarak kullanılan XSTAR (Kallman ve Bautista, 2001), CLOUDY (Ferland vd., 1998) ve ION (Netzer, 1996) gibi önemli spektroskopi modelleme programlarına entegre edilerek, astrofizik camiasına gözlemlerinde bu atom ve iyonlarla ilgili foto soğurma çizgilerinin modellemelerini güvenilir bir şekilde yapma olanağı sunmuştur.

Proje kapsamında hesaplanan silikon atomunun foto soğurma tesir kesitleri astrofizik modellemelerde silikonun atom halinde uzayda var olup olmadığı konusunda araştırmalara olanak sağlayacaktır. Bu tesir kesitlerinin geçmiş yıllarda R-matrix metoduyla hesaplanmış tesir kesitleri gibi XSTAR, CLOUDY ve ION gibi önemli spektroskopi modelleme programlarıyla bütünleştirilmesi umulmaktadır.

2. TEORİK YÖNTEMLER

Bu bölümde projede yapılan hesaplamalarda kullanılan metotlardan ve yöntemlerden ve ayrıca projenin hangi kısmında kullanıldıklarından bahsedilecektir. Bu yöntemlerin detaylarına atıf yapılacak kaynaklardan ulaşılabilir.

2.1 HF ve MCHF Metodu

Atomlardaki elektronların bir dış etki sonucunda buldukları kuantum seviyesinden başka bir seviyeye geçiş olasılıklarını hesaplamak için öncelikle atomun taban ve uyarılmış hallerine ait toplam dalga fonksiyonlarını ve bu hallerin enerji seviyelerini bulmak gerekmektedir. Hartree-Fock (HF) ve Çok Konfigürasyonlu Hartree-Fock (MCHF) yaklaşımları ile atomların kuantum hallerine ait dalga fonksiyonlarının tespit edilmesi için geliştirilmiş yaklaşım metodlarıdır. Projemizde HF ve MCHF metodları hesaplamalarda yer alan atom yörüngelerine ait tek elektron orbitallerini belirlemede kullanılacaktır.

Bir atomun enerji operatörü H (Hamiltonian), herhangi bir kuantum haline ait dalga fonksiyonu ψ_n ve bu halin enerji değeri E_n olmak üzere aşağıda belirtilen özdeğer denklemini sağlarlar

$$H\psi_n = E_n\psi_n .$$

Bu öz-değer öz-fonksiyon denkleminin çözümü analitik olarak ancak tek elektronlu atomlar için mümkün olup daha fazla elektronlu atomlarda yaklaşım metodları gerektirmektedir. Bu ifadeyi çözümsüz yapan öncelikle H enerji operatörü içinde yer alan elektronlar-elektron etkileşmesidir. Çözümü bu terimin yaklaşık olarak ifade edilip daha sonra pertürbasyon etkisi olarak probleme dâhil edilmesidir. Ancak pertürbasyon yönteminin geçerli olabilmesi için elektron-elektron etkileşmesinin gerçek değerine oldukça yakın olması gerekmektedir. Elektron-elektron etkileşmesinin en iyi bir şekilde temsili literatürde sıklıkla rastlanan Merkezi-Alan yaklaşımıyla (Central Field Approximation) mümkündür (Hartree 1928a, 1928b). Bu yaklaşımın temelinde atom içinde yer alan her bir elektron atomun çekirdeğinin ve diğer elektronların oluşturmuş oldukları küresel simetriye sahip bir potansiyel alanında hareket ettiği varsayımı yatmaktadır. Bu yaklaşım sonrasında atomun tek elektronlu orbitallerini içeren, Hartree denklemleri olarak bilinen kuplajlı denklemlere ulaşılır. Bu kuplajlı denklemlerde bir orbitalin bilinmesi diğer bir orbitalin bilinmesine bağlıdır. Hartree, bu denklemlerin çözümünün iterasyon yoluyla öz uyumlu alan (self-consistent field) metoduyla mümkün olacağını göstermiştir. Uygulanan iterasyon çözümünde elektron orbitallerinde meydana gelen küçük değişiklikler altında enerji değerinin kararlı olması şarttır. Hartree çözümlerinde atomu temsil eden dalga fonksiyonunu tek elektron dalga fonksiyonlarının çarpımı olarak ifade etmiştir. Fock (1930) bu türden dalga fonksiyonlarının Pauli'nin dışarlama prensibine uymadığı ve dalga fonksiyonlarının Pauli'nin prensibine uygun bir şekilde asimetrik olarak bir matris determinantı şeklinde ifade edilmesi gerektiğini ileri sürerek Hartree'nin denklemlerine benzer kuplajlı denklemler elde etmiştir. Ancak ek olarak değiş-tokuş adı verilen elektronların ayırt edilemez özelliklerinden ortaya çıkan bir terim yer almaktadır. Günümüzde bu şekilde ifade edilen dalga fonksiyonlarının orbitallerde meydana gelen küçük değişimler sonrasında dalga fonksiyonunun kararlı olması şartı sonucunda elde edilen denklemlere Hartree-

Fock denklemleri adı verilir. Çözümleri iterasyon metoduyla enerjinin kararlı olması prensibine dayalı olarak yapılır.

Bir atomun kuantum halinin çok konfigürasyonlu olarak hal fonksiyonu;

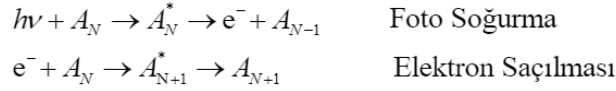
$$\Psi = \sum_{i=1}^K c_i \psi_i$$

burada ψ_i tek konfigürasyonlu aynı simetriye sahip etkileşen tek konfigürasyonlu kuantum halleri ve c_i karışım sabitleridir. Bu şekilde radyal fonksiyonlarda meydana gelen küçük değişikliklere karşı hal fonksiyonunun kararlılık şartı Hartree-Fock denklemlerine benzer kuplajlı diferansiyel denklemler elde edilir. Bu denklemlerin eş zamanlı olarak karışım katsayıları ile eş zamanlı olarak çözümü MCHF metodu olarak bilinir.

Bu projede, HF ve MCHF metotlarının bilgisayar ortamında uygulaması Froese Fischer vd. (2007) tarafınca oluşturulmuş ve herkesin kullanımına açık program paketi ile gerçekleştirilmiştir.

2.2 R-Matrix Metodu

R-matrix metodu ilk olarak Nükleer Fizik problemlerinde rezonans reaksiyon problemlerini çalışmak üzere Wigner ve Eisenbud (1947) tarafından geliştirilmiştir. Bu metodun Atom ve Moleküllerde de kullanılabileceği fikri 1960'larda fark edilmiştir. Günümüzde R-matrix metodu atom ve moleküllerde foton etkileşimleri ve elektron saçılması gibi birçok problemlere başarıyla uygulanabilmektedir;



bu reaksiyonlarda alt indeks atom veya iyondaki elektron sayısını belirtmek için kullanılmıştır. A_N^* ve A_{N+1}^* ara-rezonans hallerini temsil etmektedir.

R-matrix metodunda temel fikir hedef atom veya molekülün bağlı elektronlar ile e^- serbest/saçılan elektronun bulunduğu uzayı küresel koordinatlarda sınır $r = a$ olmak üzere iki ayrı bölgeye bölmektir. $r = a$ sınırı R-matrix yarıçapı olarak adlandırılır ve hedef hallerde yer alan elektron orbitallerini kapsayacak şekilde seçilir. $r < a$ iç bölgede serbest elektron ve hedef hallerde yer alan elektronlar arası değiş-tokuş (exchange) etkileri önemli olup, toplam dalga fonksiyonları asimetric olacak şekilde ifade edilir. $r > a$ dış bölgede değiş-tokuş etkisi önemsiz olup toplam dalga fonksiyonu hedef hal dalga fonksiyonu ile dalga saçılan elektrona ait sürekli dalga fonksiyonunun çarpımı olarak alınır. Bu metotta atomdan ayrılan veya saçılan serbest

elektron hedef hallerin oluşturmuş olduğu uzun-menzilli çok kutuplu potansiyelde hareket eder ve asimptotik sınır şartlarını sağlarlar. R-matrix toplam dalga fonksiyonlarının logaritmik türevlerinin tersi olarak tanımlanır. Tanımlanan R-matrix 'in iç ve dış bölgedeki toplam dalga fonksiyonları için $r=a$ sınırında sürekli olması şartı uygulanır. Asimptotik ve bu R-matrix süreklilik şartları kullanılarak her iki bölgedeki dalga fonksiyonları belirlenir. İlk ve son hal dalga fonksiyonlarının belirlenmesi sonrasında foton enerjisine bağlı olarak foto soğurma tesir kesit aşağıdaki ifadeyle elde edilebilir;

$$\sigma = \frac{4}{3} \pi^2 \alpha \omega \left| \langle \psi_i | r | \psi_f \rangle \right|^2$$

bu denklemden α ince yapı sabitini, ω foton enerjisini ve ψ_i ve ψ_f çok konfigürasyonlu ilk ve son kuantum hallerini temsil etmektedir. R-matrix metodunun atom ve moleküllerde uygulamaları üzerine yapılmış çalışmaları kapsamlı olarak Burke (2011)'den ulaşılabilir.

Bu projede, R-matrix metodunun bilgisayar ortamında uygulaması Belfast R-matrix Program paketi kullanılarak yapılmıştır. Bu program paketi ilk olarak Berrington vd. (1995) tarafınca oluşturulmuş ve günümüzde Prof. Dr. Nigel Badnell'in liderliğini yaptığı UK APAP Network grubu tarafınca uluslararası katkılar ile devamlı olarak geliştirilmekte olup umumi kullanıma açıktır.

2.3 Wigner Time-Delay-Matrix Yöntemi

Auger bozunma oranlarının hesabında sıklıkla kullanılan Wigner Time-Delay-Matrix yöntemi (Smith 1960) kullanılabilir. Bu metodun uygulanabilmesi için öncelikle hesaplanması istenen iyonunun son hal durumu olduğu elektron saçılması problemine R-matrix metoduyla çözümlenmesi gerekir.

R-matrix metodunun uygulanması sonucunda son haller ile hedef halleri arasında elde edilen **K**-reaksiyon matrisi kullanılarak saçılma matrisi **S** aşağıdaki bağıntı ile tayin edilir;

$$\mathbf{S} = \left(\frac{1 + i\mathbf{K}}{1 - i\mathbf{K}} \right).$$

Saçılma matrisi cinsinde Time-Delay-Matrisi olarak bilinen **Q** matrisi

$$\mathbf{Q} = -i \frac{d}{dE} (\mathbf{S}^+ \mathbf{S})$$

ifadesiyle elde edilir. Burada \mathbf{S}^+ , **S** saçılma matrisinin kompleks eşleniğidir.

Reel \mathbf{Q} matrisinin izi problemde dâhil edilen her bir rezonansın genişliği Γ_i ve enerji pozisyonu E_i olmak üzere Lorentz dağılımı şekline

$$\text{Tr}\{\mathbf{Q}(E)\} = \sum_{i=1}^N \frac{\Gamma_i}{(E - E_i)^2 + \left(\frac{\Gamma_i}{2}\right)^2}$$

sahiptir. Elde edilen enerjinin fonksiyonu olan $\text{Tr}\{\mathbf{Q}(E)\}$ dağılımından matematiksel olarak Γ_i Auger bozunma oranları elde edilir.

2.4 AUTOSTRUCTURE Program Paketi

İlk olarak atoma ait dalga fonksiyonlarının ve enerji seviyelerinin belirlenmesi amacıyla geliştirilmiş SUPERSTRUCTURE (Eissner vd.,1974) programının bir uzantısı olan ve UK APAP Network tarafınca geliştirilmiş AUTOSTURUCTRE (Badnell, 2011) olarak bilinen program paketi, atomların ve iyonik hallerinin dalga fonksiyonları, enerji seviyeleri, ışımali bozunma oranları, Auger bozunma oranları ve foto iyonlaşma tesir kesitlerini LS- ve IC-kuplajlarında hesaplanmasına olanak sağlar.

AUTOSTRUCTURE programında tek ve çok konfigürasyonlu sistemlerde orbitallerin varyasyon prensibine göre optimizasyonları mümkündür. Bu programda orbitallerin elde edilmesinde kullanılacak potansiyeller Thomas-Fermi veya Hartree-Slater potansiyelleri olup; değiş-tokuş etkilerinin dolaylı olarak içerildiği lokal olmayan potansiyellerden ibarettir.

Auger bozunma oranlarını ayrıca AUTOSTRUCTURE programında Distorted-Wave-Yaklaşımıyla çerçevesinde hesaplanabilirler. Bu yaklaşımda R-matrix metodunda dâhil edilen sürekli haller ile bağlı haller arasındaki etkileşmelerin dâhil edilememesi sebebiyle AUTOSTRUCTURE programı ile elde edilen Auger oranlarının karşılaştırma amaçlıdır. Auger genişleme etkisinde R-matrix sonucundan elde edilen değerler kullanılmıştır.

3. BULGULAR VE SONUÇLAR

Bu kısımda projede elde edilen sonuçlar projede izlenen adım sırasında göre sunulacaktır. Ayrıca projenin çıktıları ve bunların yayımlanması konularına değinilecektir.

3.1 Tek Elektron Orbitaleri

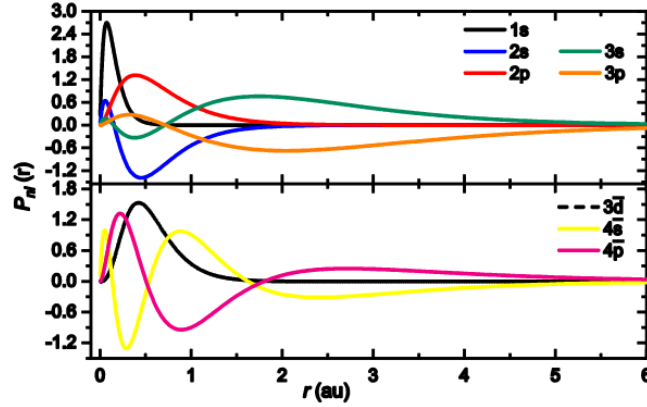
Silikon atomunun tesir kesiti ve $1s2s^22p^23s^23p^2$ Si^+ hedef hallerine ait Auger bozunma oranları için uygulanan R-matrix metodunda kullanılan tek-elektron orbitalerinin HF ve MCHF yöntemleriyle nasıl elde edildikleri ve bu orbitaler bir grafikte sunulacaktır.

3.1.1 Si^+ Orbitaleri

Silikon atomunun tesir kesitleri hesaplarında uygulanan $h\nu + 1s^22s^22p^23s^23p(^2P) \rightarrow Si^+$ problemine uygulanan R-matrix metodunda kullanılan Si^+ hedef hallerine ait $1s, 2s, 2p, 3s$ ve $3p$ orbitaleri fiziksel ve $3\bar{d}, 4\bar{s}$ ve $4\bar{p}$ korelasyon orbitaleri olarak probleme dahil edilmişlerdir. Bu orbitalerin HF ve MCHF metotlarıyla belirlenmesinde izlenen adımlar Tablo 1.'de gösterilmektedir. Elde edilen orbitaler Şekil 2.'de gösterilmektedir

Tablo 1. Tesir kesitleri hesaplarında kullanılan Si^+ hedef hallerine ait $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3\bar{d}, 4\bar{s}$ ve $4\bar{p}$ orbitalerinin HF ve MCHF yoluyla elde edilmesinde izlenen adımlar.

$1s, 2s, 2p, 3s$ ve $3p$	$1s^22s^22p^23s^23p(^2P)$ tek konfigürasyon taban enerji seviyesi göz önüne alınarak HF ile belirlenmiştir
$3\bar{d}, 4\bar{s}$ ve $4\bar{p}$	Açık K-kabuklu $1s2s^22p^23s^23p(^4P)$ konfigürasyonundan korelasyon orbitalerine olan tek ve çift tüm uyarımlar sonrasında elde edilen çok konfigürasyonlu 4P halinin MCHF enerjisinin optimizasyonu ile elde edilmiştir



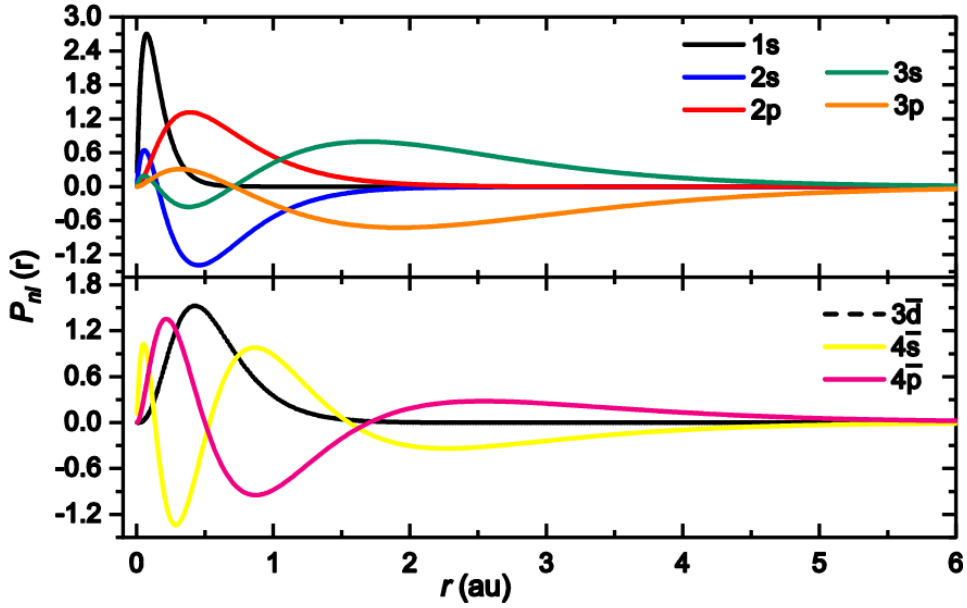
Şekil 2. Tesir kesitleri hesaplarında kullanılan Si^+ hedef hallerine ait $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3\bar{d}, 4\bar{s}$ ve $4\bar{p}$ orbitaleri.

3.1.2 Si²⁺ Orbitaleri

K-açık kabuklu $1s2s^22p^23s^23p^2$ Si⁺ hallerinin Auger bozunma oranlarının hesaplandığı R-matrix probleminde Si²⁺ hedef hallerine ait $1s, 2s, 2p, 3s$ ve $3p$ orbitaleri fiziksel ve $3\bar{d}, 4\bar{s}$ ve $4\bar{p}$ korelasyon orbitaleri olarak probleme dahil edilmişlerdir. Bu orbitaler $e^- + \text{Si}^{2+} \rightarrow \text{Si}^+$ elektron saçılması probleminde yer alan Si²⁺ hedef halleri için Tablo 2'de gösterilen adımlarla HF ve MCHF metotları kullanılarak belirlenmişlerdir. Şekil 3 bu orbitaleri göstermektedir.

Tablo 2. Auger bozunma oranlarının hesaplandığı R-matrix probleminde Si²⁺ hedef hallerine ait $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3\bar{d}, 4\bar{s}$ ve $4\bar{p}$ orbitalerinin HF ve MCHF metotlarıyla elde edilmesinde izlenen adımlar.

$1s, 2s$ ve $2p$	$1s^22s^22p^23s^2(^1S)$ tek konfigürasyon taban enerji seviyesinin HF enerjisi göz önüne alınarak belirlenmiştir
$3s$ and $3p$	Açık K-kabuklu $1s2s^22p^23s^23p(^3P)$ tek konfigürasyon enerji seviyesi için $1s, 2s$ ve $2p$ orbitalerini değiştirmeden HF enerjisi göz önüne alarak belirlenmişlerdir.
$3\bar{d}, 4\bar{s}$ ve $4\bar{p}$	Açık K-kabuklu $1s2s^22p^23s^23p(^3P)$ konfigürasyonundan korelasyon orbitalerine olan tek ve çift tüm uyarımlar sonrasında elde edilen çok konfigürasyonlu 3P halinin MCHF enerjisi üzerinde optimize edilmişlerdir.



Şekil 3. Auger bozunma hesaplarında kullanılan Si²⁺ hedef hallerine ait $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3\bar{d}, 4\bar{s}$ ve $4\bar{p}$ orbitaleri.

3.2 Si⁺ Auger Bozunma Oranları

Si⁺ (1s2s²2p⁶3s²3p²) hallerinin Auger bozunma oranlarının R-matrix metodu ile hesaplanmasında Wigner Time-Delay-Matrix (Smith 1960) yöntemi (bakınız Bölüm 2.3) bu kısımda anlattığı şekilde uygulanmıştır. Burada izlenecek yolla daha önce yakın zamanda C- ve Mg-serisine ait foto soğurma hesaplamalarında kullanılmıştır (Hasoglu vd., 2010; 2014).

K-kabuğu açık Si⁺ halinin Auger bozunma oranlarının R-matrix probleminde e⁻ + Si²⁺ ele alınmıştır. Tek konfigürasyonlu gösterimle Si²⁺ elektron saçılma problemi;

$$e^- + \text{Si}^{2+} (1s2l^m 3l^n) \rightarrow \text{Si}^+ (1s2s^2 2p^6 3s^2 3p^2), (m+n=10),$$

ifadesiyle gösterilebilir. Elde edilen Auger bozunma oranlarının dikkatli bir şekilde hesaplanması için hedef hallerine ait tek elektron hallerinin doğru olarak belirlenmesi ve bozunmaya sebep olabilecek tüm bozunma kanallarının probleme dahil edilmesi önemlidir. Hedef hali durumunda bulunan Si²⁺ hallerine ait tek elektron orbitalleri HF ve MCHF metotlarıyla hesaplanmışlardır (bakınız Bölüm 3.1.2). Çok konfigürasyonlu temsilde R-matrix metodunda Si²⁺ halleri 367 elektron ve Si⁺ halleri 234 elektron konfigürasyonu içermekte olup bunlardan ortaya çıkan toplamdaki terim sayıları 31985 ve 4302. R-matrix problemine dahil edilen hedef Si²⁺ ve son Si⁺ hallerinde yer alan hallerin çok konfigürasyonlu temsillerindeki konfigürasyon sayıları Tablo 3'de gösterilmektedir. Hesaplamalara dâhil edilen 82-hedef halleri ve enerjileri Ek B bölümü altında yer alan Tablo 7'de verilmiştir.

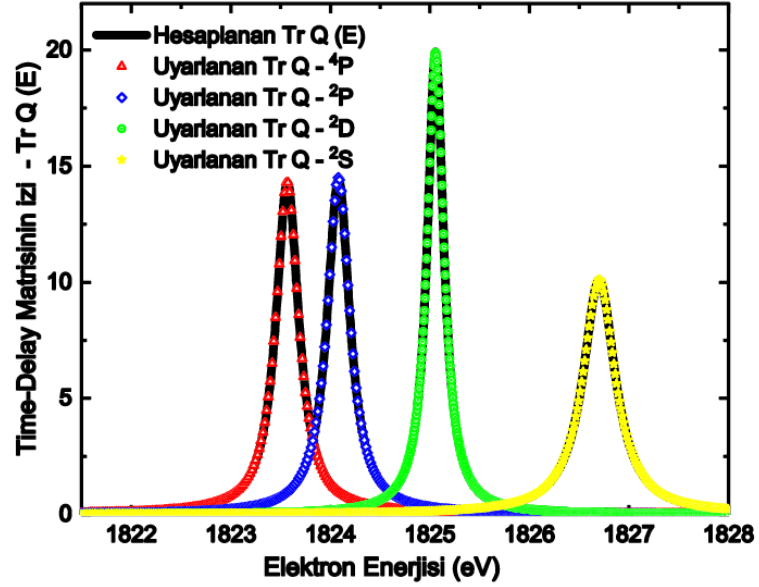
Tablo 3. Auger bozunma oranlarının hesabında kullanılan R-matrix problemine dahil edilen Si²⁺ hedef ve Si⁺ son hallerinde yer alan terimlerin çok konfigürasyonlu temsilde kullanılan konfigürasyon sayıları.

Atom Hali	Terim (^{2S+1} L Parite)	Konfigürasyon Sayısı
Si ²⁺	¹ S ^e	917
	¹ S ^o	533
	³ S ^e	1453
	³ S ^o	1003
	⁵ S ^e	783
	⁵ S ^o	578
	¹ P ^e	1937
	¹ P ^o	1497
	³ P ^e	3574
	³ P ^o	2516
	⁵ P ^e	2017
	⁵ P ^o	1275
	¹ D ^e	2332

Tablo 3.'ün devamı

	$^1D^o$	1500
	$^3D^e$	3951
	$^3D^o$	2613
	$^5D^e$	2150
	$^5D^o$	1366
	Toplam	31985
Si ⁺	$^4P^e$	1085
	$^2P^e$	565
	$^2D^e$	1236
	$^2S^e$	1416
	Toplam	4302

R-matrix metodunun uygulanması sonucunda elde edilen K-reaksiyon matrisi kullanılarak Bölüm 2.3'de anlatılan adımlar sonrasında Q-Time-Delay-matrisi elde edilmiştir. Q-Time-Delay-matrisinin izi ve $Si^+(1s2s^22p^63s^23p^2)[^4P, ^2D, ^2P, ^2S]$ hallerine ait Auger bozunma oranlarının tespiti için yapılan Lorentz-dağılımı şeklinde uyarlamalar(fitting) Şekil 4'de gösterilmektedir.



Şekil 4. Hesaplanan Q-Time-Delay-matrisinin izi ve rezonanslara karşılık gelen Lorentz-dağılımı şeklinde uyarlamalar(fitting).

Ayrıca $Si^+(1s2s^22p^63s^23p^2)[^4P, ^2D, ^2P, ^2S]$ hallerinin Auger bozunma oranları AUTOSTRUCTURE program paketi ile hesaplanmıştır. Hesaplamalarda aynı R-matrix metodunun uygulanmasında kullanılan hedef ve rezonans durumları için aynı konfigürasyon

etkileşmesi probleme dahil edilmiştir. Şekil 4'de gösterilen Time-Delay-matrisinden ve AUTOSTRUCTURE programından elde edilen Auger bozunma oranları Tablo 4'de gösterilmektedir.

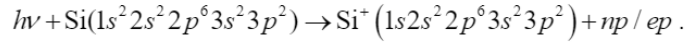
Tablo 4. Hesaplanan $\text{Si}^+(1s^2s^22p^63s^23p^2)[^4P, ^2D, ^2P, ^2S]$ ait Auger bozunma oranları Rydberg biriminde verilmiştir.

Konfigürasyon – LS Terimi	R-matrix	AUTOSTRUCTURE
$1s^2s^22p^63s^23p^2[^4P^e]$	0.2818	0.3038
$1s^2s^22p^63s^23p^2[^2P^e]$	0.2781	0.3025
$1s^2s^22p^63s^23p^2[^2D^e]$	0.1983	0.3034
$1s^2s^22p^63s^23p^2[^2S^e]$	0.4021	0.3032

R-matrix ve AUTOSTRUCTURE programından elde edilen Auger bozunma oranları aynı mertebede olup farklılık AUTOSTRUCTURE programında Distorted-Wave-Yaklaşımında sürekli haller ile bağlı haller arasındaki etkileşmelerin içerilememesinden kaynaklanmaktadır.

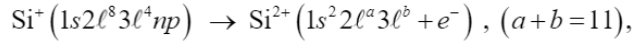
3.3 Silikon Atomunun Tesir Kesitleri

Tek konfigürasyonlu temsil ile silikon atomunun K-kabuğu foto soğurma reaksiyonu aşağıdaki şekildedir;



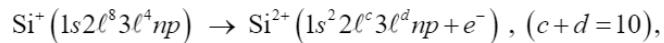
Burada K-kabuğunda oluşacak boşluk sonrasında ara-uyarılmış ve rezonans halleri farklı iki yollarla Auger bozulma reaksiyonuna maruz kalır.

Bunlardan birincisi katılımcı Auger bozunması;



olup bu bozunma yolunda valans elektronu np bozunma reaksiyonunda yer alır. Bu tür bozunma sonucunda tesir kesitindeki np rezonansları üzerindeki genişleme etkisi $1/n^3$ olarak gider ve düşük n değerlerinin genişliğinin doğru olarak elde edilmesi için probleme dâhil edilmesi önemlidir. Katılımcı Auger bozunma etkileri R-matrix probleminde ilgili bozunma kanallarının probleme dâhil edilmesi ile doğrudan dâhil edilebilir (Burke 2011; Berrington vd. 1995).

İkinci bozunma yolu izleyici Auger bozunması;



olup bu bozunmada np valans elektronu izleyici durumunda olup, bozunmada yer almaz. Bu bozunma yoluna bağlı olarak np rezonansları üzerindeki genişleme etkisi sabit olup tüm n değerleri üzerinde önemli genişlemeye sebep olur. Bu genişleme etkisine izleyici Auger genişleme etkisi adı verilip, bu etki dolaylı olarak izleyici Auger genişleme etkisi yöntemiyle hesaplamalara dâhil edilebilir (Gorczyca ve Robicheaux, 1999). İzleyici Auger genişleme etkisinin uygulanabilmesi için $Si^+(1s2s^22p^63s^23p^2)$ halleri için Auger bozunma oranlarının hesaplanması gerekir. Bölüm 2.3 Wigner Time-Delay-Matrix yöntemi ve Bölüm 2.4 AUTOSTRUCTURE programı yoluyla gerekli Auger bozunma oranları elde edilmişlerdir (bakınız Bölüm 3.2). Tesir kesiti hesaplarında izleyici Auger bozunma etkisinin dâhil edilebilmesi için Wigner Time-Delay-Matrix yöntemiyle elde edilen Auger bozunma oranları kullanılmıştır.

R-matrix metodun uygulanmasında kullanılan Si^+ hedef orbitallerinin HF ve MCHF yoluyla elde edilmesi Bölüm 3.1.1'de açıklanmıştır. R-matrix metodunun uygulanmasında daha da önemli bir faktör N - ve $N+1$ elektron sistemlerin doğru bir şekilde çok konfigürasyon temsili ve mümkün tüm hedef hallerin probleme dahil edilmesidir. Korelasyon etkilerini içermek için R-matrix metodunda Si^{2+} halleri 224 ve Si^+ halleri 180 konfigürasyon ile temsil edilmişlerdir. Bu 224 ve 180 konfigürasyonundan ortaya çıkan toplamdaki terim sayıları 15308 ve 5737'dir. R-matrix problemine dahil edilen hedef Si^+ ve son Si hallerinde yer alan hallerin çok konfigürasyonlu temsillerindeki konfigürasyon sayıları Tablo 5'de gösterilmektedir.

Tablo 5. Tesir kesiti hesabında kullanılan R-matrix problemine dahil edilen Si^+ hedef ve Si son hallerinde yer alan terimlerin çok konfigürasyonlu temsilde kullanılan konfigürasyon sayıları.

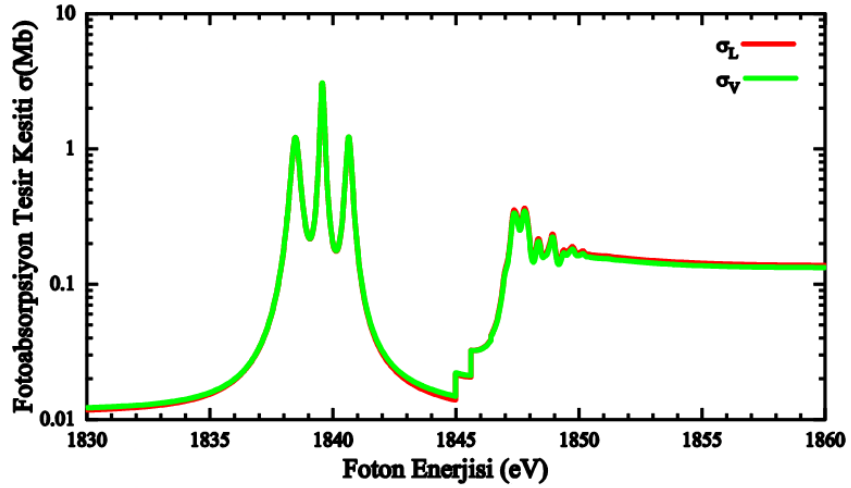
Atom Hali	Terim ($^{2S+1}L_{Parite}$)	Konfigürasyon Sayısı
Si^+	$^2P^o$	1492
	$^4P^e$	1621
	$^2D^e$	2063
	$^2P^e$	1794
	$^2S^e$	787
	$^2S^o$	566
	$^2D^o$	1545
	$^4S^e$	613
	$^4S^o$	543
	$^4P^o$	1231
	$^4D^e$	1716
	$^4D^o$	1337
	Toplam	15308

Tablo 5.'in devamı

Si	$^3P^e$	1640
	$^3P^o$	675
	$^3S^o$	1607
	$^3D^o$	1815
	Toplam	5737

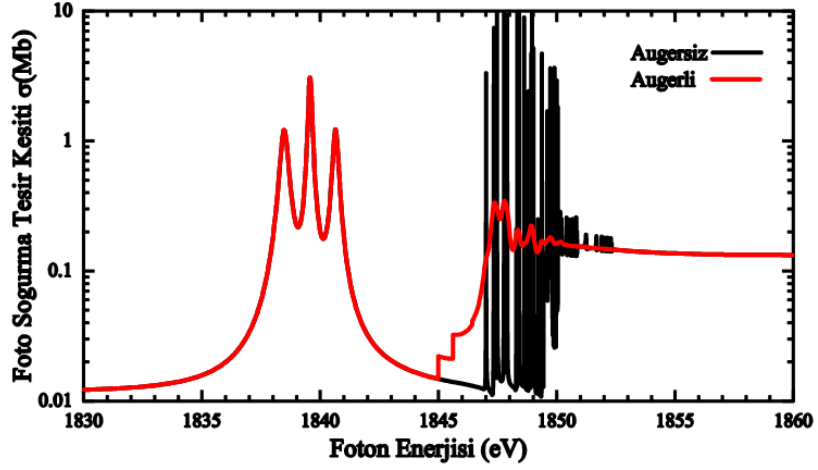
Probleme dâhil edilen Si^+ hedef halleri ve Si taban halinin enerjileri Ek A'da yer alan Tablo 6.'de gösterilmektedir. Tablo 6'dan da görüldüğü gibi Si atomunun taban halinden $Si^+ 3p^{-1}$ iyonlaşma enerjisi 8.618197eV (8.151752eV NiST değeri) olarak elde edilmiştir. Bu sonuç, hedef Si^+ ve son Si hallerinde çok elektron korelasyon etkilerinin tutarlı bir şekilde içerildiklerini göstermektedir.

Probleme dâhil edilen Si^+ ve Si çok konfigürasyonlu hallerin bütünlüğünü ölçmek için tesir kesitleri uzunluk ve hız ayarlarında hesaplanmıştır. Şekil 5 her iki ayarda hesaplanmış tesir kesitlerini göstermektedir. Bu tesir kesitleri arasında iyi derecede tutarlılık elde edilmiş olması (en fazla % 4.21 ve tüm spektrum üzerinden ortalama %3.17 farklılık) çok konfigürasyonlu dalga fonksiyonlarımızın iyi derecede bütünlüğe sahip olduklarına işaret etmektedir. Bundan sonraki şekillerde göstereceğimiz tüm tesir kesitleri uzunluk ayarında hesaplanmıştır.



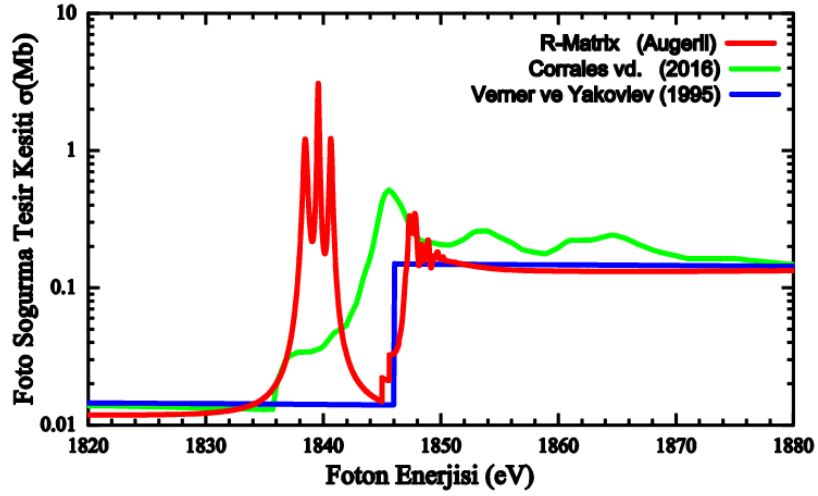
Şekil 5. Uzunluk ve hız ayarlarında hesaplanan tesir kesitleri.

İzleyici Auger genişleme etkisinin hesaplanan tesir kesiti üzerinde ne derecede etkili olduğunu görmek için İzleyici Auger genişleme etkisini göz ardı ederek tesir kesiti hesabı yapıldı. İzleyici Auger genişleme etkilerinin içerildiği ve içerilmediği tesir kesitleri Şekil 6'da gösterilmektedir. Görüldüğü gibi bu K-kabuğu eşik değeri üzerinde yer alan dar rezonansları genişleterek bu bölgede tesir kesiti üzerinde beklenildiği gibi büyük bir etki oluşturmaktadır.



Şekil 6. İzleyici Auger genişleme etkili ve etkisiz tesir kesitleri.

Son olarak hesaplanan tesir kesitinin tek-parçacık (IP) modelinin ve kristal formunda toz parçacıklı silikonun tesir kesiti ile karşılaştırması Şekil 7’de gösterilmektedir. Hesaplanan tesir kesitinin zemininin tek-parçacık modeliyle uyumlu olması tesir kesitinin hesabında K-kabuğundan daha düşük enerjili L- ve M- kabuklarındaki iyonlaşma etkilerinin doğru bir şekilde probleme dâhil edildiğini işaret etmektedir. Ayrıca silikonun tesir kesitinin silikonun toz yapıdaki tesir kesitine benzer davranış gösterdiği görülmektedir. Bu iki hal arasındaki farklılığın ana sebebi kristal yapıdaki atomun elektronların fazladan kristal potansiyeline maruz kalması ve bu potansiyelin simetrik yapısı sunu tesir kesitinde dalgalanmalar olarak ortaya çıkıyor.



Şekil 7. Hesaplanan foto soğurma tesir kesiti, tek-parçacık (IP) tesir kesiti (Verner ve Yakovlev,1995) ve kristal formunda toz parçacıklı silikonun tesir kesiti (Corrales vd., 2016).

4. PROJE ÇIKTILARI VE ÖNERİLER

Projeden elde edilen sonuçların bir bölümü "Workshop on Astrophysics Opacities" isimli uluslararası bilimsel konferansta sözlü olarak sunulmuş ve bildiri kitabında baskıdadır (Hasoglu ve Gorczyca, 2017, 2018a). Projeden elde edilen sonuçlar yine kısmi olarak uluslararası bilimsel konferansta poster sunumu olarak sunulmuştur (Gorczyca ve Hasoglu, 2018). Proje çalışmasından elde edilen tesir kesitleri Hasoglu (2018) internet sayfasında yayımlanarak, astrofizik camiasının X-ışını bölgesinde yapacakları modelleme çalışmalarında kullanma imkânı sunulmaktadır.

İleriki dönemlerde elde edilen sonuçların sıklıkla kullanılan XSTAR, CLOUDY ve ION gibi önemli X-ışını spektroskopi modelleme programlarına dâhil edilmesi beklenmektedir. Hesaplanan hedef enerjileri, Auger bozunma oranları ve en önemlisi tesir kesitleri SCI-indeksinde yer alan uluslararası bilimsel bir dergide yayımlanmak üzere çalışmalar devam etmektedir (Hasoglu ve Gorczyca, 2018b).

KAYNAKÇA

- Badnell, N. R. 2011. "A Breit–Pauli distorted wave implementation for autostructure.", *Computer Physics Communications*, 182(7), 1528.
- Berrington, K. A., Eissner, W. B. ve Norrington, P. H. 1995. "RMATRIX1: Belfast atomic R-matrix codes.", *Computer Physics Communications*, 92(2-3), 290.
- Burke, P. G. 2011. *R-Matrix Theory of Atomic Collisions Application to Atomic, Molecular and Optical Processes*. Berlin - Heidelberg: Springer.
- Corrales, L. R., García, J., Wilms, J. ve Baganoff, F., 2016. "The dust-scattering component of X-ray extinction: effects on continuum fitting and high-resolution absorption edge structure", *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 458, 1345-1351.
- Eissner, W., Jones, M. ve Nussbaumer, H. 1974. "Techniques for the calculation of atomic structures and radiative data including relativistic corrections.", *Computer Physics Communications*, 8(4), 270.
- Ferland, G. J., Korista, K. T., Verner, D. A., Ferguson, J. W., Kingdon, J. B. ve Verner, E. M. 1998. "CLOUDY 90: Numerical Simulation of Plasmas and Their Spectra." *Publications of the Astronomical Society of the Pacific*, 110, (749), 761.
- Fock, V. 1930. "Näherungsmethode zur Lösung des quantenmechanischen Mehrkörperproblems", *Zeitschrift für Physik*, 61, 126–148.
- Froese Fischer, C., Tachiev, G., Gaigalas, G. ve Godefroid, M. R. 2007. "An MCHF atomic-structure package for large-scale calculations.", *Computer Physics Communications*, 176(8), 559.
- García, J., Mendoza, C., Bautista, M. A., Gorczyca, T. W., Kallman, T. R. ve Palmeri, P. 2005. "K-Shell Photoabsorption of Oxygen Ions.", *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 158(1), 68.
- García, J., Kallman, T. R., Witthoef, M., Behar, E., Mendoza, C., Palmeri, P., Quinet, P., Bautista, M. A. ve Klapisch, M. 2009. "Nitrogen K-Shell Photoabsorption.", *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 185(2), 477.
- Gorczyca, T. W. ve Robicheaux, F. 1999. "Auger decay of the photoexcited $2p^{-1}nl$ Rydberg series in argon.", *Physical Review A*, 60(2), 1216.
- Gorczyca, T. W. 2000. "Auger decay of the photoexcited $\{1s\}^{-1}\mathrm{np}$ Rydberg series in neon.", *Physical Review A*, 61(2), 024702.

- Gorczyca, T. W. ve McLaughlin, B. M. 2000. "Inner-shell photoexcited resonances in atomic oxygen.", *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 33(24), L859.
- Gorczyca, T. W., Bautista, M. A., Hasoglu, M. F., García, J., Gatuzz, E., Kaastra, J. S., Kallman, T. R., Manson, S. T., Mendoza, C., Raassen, A. J. J., Vries, C. P. d. ve Zatsarinny, O. 2013. "A Comprehensive X-Ray Absorption Model for Atomic Oxygen.", *The Astrophysical Journal*, 779(1), 78.
- Gorczyca, T. W. ve Hasoglu, M. F., 2018a." X-ray absorption by interstellar atomic gases near the K-edges of C, O, Ne, Mg, and Si, and the L-edge of Fe", 2018 NASA Laboratory Astrophysics Workshop, Abstract#2, April 8-11, Athens, GA, U.S.A. (Poster Sunum).
- Hartree, D. R. 1928a. "The Wave Mechanics of an Atom with a Non-Coulomb Central Field. Part I. Theory and Methods", *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 24, 89-110.
- Hartree, D. R. 1928b. "The Wave Mechanics of an Atom with a Non-Coulomb Central Field. Part II. Some Results and Discussion", *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 24, 111-132.
- Hasođlu, M. F., Sh. A., Abdel-Naby., Gorczyca, T. W., Drake, J. J. ve McLaughlin, B. M. 2010. "K-shell Photoabsorption Studies of the Carbon Isonuclear Sequence.", *The Astrophysical Journal*, 724(2), 1296.
- Hasođlu, M. F., Sh. A., Abdel-Naby, Gatuzz, E., García, J., Kallman, T. R., Mendoza, C. ve Gorczyca, T. W. 2014. "K-shell Photoabsorption of Magnesium Ions.", *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 214(1), 8.
- Hasoglu, M. F. ve Gorczyca, T. W., 2017. "X-ray absorption by interstellar atomic gases near the K-edges of C, O, Ne, Mg, and Si, and the L-edge of Fe", *Workshop on Astrophysics Opacities Abstract# 52*, August 1-4, Kalamazoo, MI, USA. (Sözlü Sunum).
- M. F. Hasoglu ve T. W. Gorczyca, 2018a."X-ray absorption by interstellar atomic gases near the K-edges of C, O, Ne, Mg, and Si, and the L-edge of Fe", *ASP Conference Series Proceedings of Workshop on Astrophysical Opacities* (Baskıda).
- Hasoglu, M. F. ve Gorczyca, T. W., 2018b. "X-ray Absorption of Atomic Si at the K-edge", *The Astrophysical Journal Supplement Series* (Hazırlık Aşamasında).
- Hasoglu, M. F., "Photoabsorption Cross Section for Silicon Atom in the X-Ray Region", <http://beric.hku.edu.tr/?course=x-ray-photoabsorption> Son erişim tarihi: 14 Nisan 2018.

- Henke, B. L., Gullikson, E. M. ve Davis, J. C. 1993. "X-Ray Interactions: Photoabsorption, Scattering, Transmission, and Reflection at $E = 50\text{-}30,000$ eV, $Z = 1\text{-}92$.", *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 54(2), 181.
- Juett, A. M., Schulz, N. S. ve Chakrabarty, D. 2004. "High-Resolution X-Ray Spectroscopy of the Interstellar Medium: Structure at the Oxygen Absorption Edge.", *The Astrophysical Journal*, 612(1), 308.
- Juett, A. M., Schulz, N. S., Chakrabarty, D. ve Gorczyca, T. W. 2006. "High-Resolution X-Ray Spectroscopy of the Interstellar Medium. II. Neon and Iron Absorption Edges.", *The Astrophysical Journal*, 648(2), 1066.
- Kallman, T. ve Bautista, M. 2001. "Photoionization and High-Density Gas.", *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 133(1), 221.
- McLaughlin, B. M., Ballance, C. P., Bowen, K. P., Gardenghi, D. J. ve Stolte, W. C. 2013. "High Precision K-shell Photoabsorption Cross Sections for Atomic Oxygen: Experiment and Theory.", *The Astrophysical Journal Letters*, 771(1), L8.
- Netzer, H. 1996. "X-Ray Lines in Active Galactic Nuclei and Photoionized Gases.", *The Astrophysical Journal*, 473(2), 781.
- Norbert, S. S., Lia, C. ve Claude, R. C. 2016. "Si K Edge Structure and Variability in Galactic X-Ray Binaries.", *The Astrophysical Journal*, 827(1), 49.
- Reilman, R. F. ve Manson, S. T. 1979. "Photoabsorption cross sections for positive atomic ions with Z equal to or less than 30.", *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 40, 815.
- Sant'Anna, M. M., Schlachter, A. S., Öhrwall, G., Stolte, W. C., Lindle, D. W. ve McLaughlin, B. M. 2011. "K-Shell X-Ray Spectroscopy of Atomic Nitrogen.", *Physical Review Letters*, 107(3), 033001.
- Schlachter, A. S., Sant'Anna, M. M., Covington, A. M., Aguilar, A., Gharaibeh, M. F., Emmons, E. D., Scully, S. W. J., Phaneuf, R. A., Hinojosa, G., Álvarez, I., Cisneros, C., Müller, A. ve McLaughlin, B. M. 2004. "Lifetime of a K-shell vacancy in atomic carbon created by $1s \rightarrow 2p$ photoexcitation of C^+ .", *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 37(5), L103.

- Scully, S. W. J., Aguilar, A., Emmons, E. D., Phaneuf, R. A., Halka, M., Leitner, D., Levin, J. C., Lubell, M. S., Püttner, R., Schlachter, A. S., Covington, A. M., Schippers, S., Müller, A. ve McLaughlin, B. M. 2005. "K-shell photoionization of Be-like carbon ions: experiment and theory for C 2+.", *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 38(12), 1967.
- Smith, F. T. 1960. "Lifetime Matrix in Collision Theory.", *Physical Review*, 118(1), 349.
- Verner, D. A. ve Yakovlev, D. G. 1995. "Analytic FITS for partial photoionization cross sections.", *Astronomy and Astrophysics Suppl.*, 109, 125.
- Wigner, E. P. ve Eisenbud, L. 1947. "Higher Angular Momenta and Long Range Interaction in Resonance Reactions.", *Physical Review*, 72(1), 29.
- Witthoef, M. C., Bautista, M. A., Mendoza, C., Kallman, T. R., Palmeri, P. ve Quinet, P. 2009. "K-Shell Photoionization and Photoabsorption of Ne, Mg, Si, S, Ar, and Ca.", *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 182(1), 127.

EKLER

Ek A: Tesir kesiti hesabında yer alan Si^+ hedef halleri ve enerjileri.

Bu kısımda tesir kesiti hesaplarında Si^+ hedef halleri ve enerjileri Tablo 6'de gösterilmektedir. Tabloda ayrıca güvenilir NIST enerji seviyeleri arasında mevcut olanlarıda listelenmiştir.

Tablo 6. Si^+ hedef hallerinin hesaplanan enerji değerleri ve mevcut NIST enerji değerleri Rydberg biriminde verilmiştir. Ayrıca foton enerjileri eV biriminde verilmektedir.

R-Matrix Hedef Hali	Konfigürasyon	Terim	Enerji (Ryd)		Foton Enerjisi (eV)	
			R-Matrix	NIST	R-Matrix	NIST
1. Si	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$	$^3P^e$	-0.633421	-0.599138	0.000000	0.000000
2. $\text{Si}^+ 3p^{-1}$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p$	$^2P^o$	0.000000	0.000000	8.618197	8.151752
3.	$1s^2 2s^2 2p^6 3s 3p^2$	$^4P^e$	0.327446	0.390120	13.073362	13.459646
4. $\text{Si}^{2+} 3s^{-1}$	$1s^2 2s^2 2p^6 3s 3p^2$	$^2D^e$	0.587576	0.587576	16.612638	16.146193
5.	$1s^2 2s^2 2p^6 3s 3p^2$	$^2S^e$	0.721819	0.696881	18.439122	17.633375
6.	$1s^2 2s^2 2p^6 3s 3p^2$	$^2P^e$	0.838092	0.763144	20.021109	18.534936
7.	$1s^2 2s^3 2p^6 3p^3$	$^4S^o$	1.449660	1.119419	28.341981	23.382343
8.	$1s^2 2s^3 2p^6 3p^3$	$^2D^o$	1.584565	1.231197	30.177471	24.903172
9.	$1s^2 2s^3 2p^6 3p^3$	$^2P^o$	1.708374	1.312131	31.861992	26.004344
10. $\text{Si}^+ 2s^{-1}$	$1s^2 2s^2 2p^5 3s^2 3p^2$	$^4P^o$	7.750210		114.066004	
11.	$1s^2 2s^2 2p^5 3s^2 3p^2$	$^4D^o$	7.786601		114.561133	
12.	$1s^2 2s^2 2p^5 3s^2 3p^2$	$^2P^o$	7.795725		114.685272	
13.	$1s^2 2s^2 2p^5 3s^2 3p^2$	$^2D^o$	7.812542		114.914081	
14.	$1s^2 2s^2 2p^5 3s^2 3p^2$	$^4S^o$	7.833051		115.193122	
15.	$1s^2 2s^2 2p^5 3s^2 3p^2$	$^2S^o$	7.833387		115.197694	
16.	$1s^2 2s^2 2p^5 3s^2 3p^2$	$^2D^o$	7.911484		116.260266	
17.	$1s^2 2s^2 2p^5 3s^2 3p^2$	$^2P^o$	7.976300		117.142139	
18.	$1s^2 2s^2 2p^5 3s^2 3p^2$	$^2P^o$	8.005542		117.540000	
19.	$1s^2 2s^2 2p^5 3s 3p^3$	$^4P^e$	8.205660		120.262766	
20.	$1s^2 2s^2 2p^5 3s 3p^3$	$^4D^e$	8.420655		123.187945	
21.	$1s^2 2s^2 2p^5 3s 3p^3$	$^2P^e$	8.441310		123.468972	
22.	$1s^2 2s^2 2p^5 3s 3p^3$	$^4P^e$	8.506008		124.349240	
23.	$1s^2 2s^2 2p^5 3s 3p^3$	$^4S^e$	8.512926		124.443365	

Tablo 6.'nin devamı

24.		$1s^2 2s^2 2p^5 3s 3p^3$	$^4D^e$	8.530343		124.680338	
25.		$1s^2 2s^2 2p^5 3s 3p^3$	$^2D^e$	8.561110		125.098947	
26.		$1s^2 2s^2 2p^5 3s 3p^3$	$^4P^e$	8.562704		125.120635	
27.		$1s^2 2s^2 2p^5 3s 3p^3$	$^2P^e$	8.586262		125.441160	
28.		$1s^2 2s^2 2p^5 3s 3p^3$	$^2D^e$	8.603684		125.678200	
29.		$1s^2 2s^2 2p^5 3s 3p^3$	$^2S^e$	8.678961		126.702404	
30.		$1s^2 2s^2 2p^5 3s 3p^3$	$^2P^e$	8.787176		128.174756	
31.		$1s^2 2s^2 2p^5 3s 3p^3$	$^2D^e$	8.822191		128.651163	
32.		$1s^2 2s^2 2p^5 3s 3p^3$	$^4P^e$	8.826515		128.709995	
33.		$1s^2 2s^2 2p^5 3s 3p^3$	$^2D^e$	8.895148		129.643801	
34.		$1s^2 2s^2 2p^5 3s 3p^3$	$^2P^e$	8.914617		129.908693	
35.		$1s^2 2s^2 2p^5 3s 3p^3$	$^2S^e$	8.923882		130.034750	
36.		$1s^2 2s^2 2p^5 3s 3p^3$	$^2P^e$	8.953644		130.439686	
37.	Si+ $2s^{-1}$	$1s^2 2s 2p^6 3s^2 3p^2$	$^4P^e$	11.326536		162.724780	
38.		$1s^2 2s 2p^6 3s^2 3p^2$	$^2P^e$	11.335264		162.843532	
39.		$1s^2 2s 2p^6 3s^2 3p^2$	$^2D^e$	11.379582		163.446513	
40.		$1s^2 2s 2p^6 3s^2 3p^2$	$^2S^e$	11.547492		165.731063	
41.		$1s^2 2s 2p^6 3s^1 3p^3$	$^4S^o$	12.015260		172.095421	
42.		$1s^2 2s 2p^6 3s^1 3p^3$	$^4D^o$	12.198575		174.589568	
43.		$1s^2 2s 2p^6 3s^1 3p^3$	$^4P^o$	12.287456		175.798866	
44.		$1s^2 2s 2p^6 3s^1 3p^3$	$^2D^o$	12.308974		176.091635	
45.		$1s^2 2s 2p^6 3s^1 3p^3$	$^2P^o$	12.398411		177.308497	
46.		$1s^2 2s 2p^6 3s^1 3p^3$	$^2D^o$	12.594263		179.973220	
47.		$1s^2 2s 2p^6 3s^1 3p^3$	$^4S^o$	12.629053		180.446566	
48.		$1s^2 2s 2p^6 3s^1 3p^3$	$^2S^o$	12.639385		180.587141	
49.		$1s^2 2s 2p^6 3s^1 3p^3$	$^2P^o$	12.683577		181.188409	
50.		$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^3$	$^4P^o$	17.172763		242.267376	
51.		$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^3$	$^2P^o$	17.260084		243.455448	
52.		$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^3$	$^2D^o$	17.297912		243.970128	
53.		$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^3$	$^2P^o$	17.316924		244.228801	
54.		$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^3$	$^4D^o$	17.331420		244.426031	
55.		$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^3$	$^4P^o$	17.367919		244.922629	
56.		$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^3$	$^4D^o$	17.380143		245.088946	
57.		$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^3$	$^2S^o$	17.387945		245.195099	
58.		$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^3$	$^4P^o$	17.417346		245.595123	

Tablo 6.'nin devamı

59.		$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^3$	$^2D^o$	17.484761		246.512358	
60.		$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^3$	$^2P^o$	17.496819		246.676417	
61.		$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^3$	$^4S^o$	17.505331		246.792229	
62.		$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^3$	$^2P^o$	17.525256		247.063325	
63.		$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^3$	$^4D^o$	17.643232		248.668483	
64.		$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^3$	$^2D^o$	17.800674		250.810607	
65.		$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^3$	$^2S^o$	17.830809		251.220618	
66.		$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^3$	$^2D^o$	17.843829		251.397765	
67.		$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^3$	$^2P^o$	17.877580		251.856975	
68.		$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^3$	$^2P^o$	17.971039		253.128559	
69.		$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^3$	$^4S^o$	18.267442		257.161359	
70.		$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^3$	$^2D^o$	18.393615		258.878044	
71.		$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^3$	$^2P^o$	18.490829		260.200718	
72.		$1s^2 2s 2p^5 3s^2 3p^3$	$^4P^e$	20.270967		284.420920	
73.		$1s^2 2s 2p^5 3s^2 3p^3$	$^2P^e$	20.331770		285.248193	
74.		$1s^2 2s 2p^5 3s^2 3p^3$	$^4D^e$	20.349765		285.493029	
75.		$1s^2 2s 2p^5 3s^2 3p^3$	$^2P^e$	20.408609		286.293649	
76.		$1s^2 2s 2p^5 3s^2 3p^3$	$^4P^e$	20.428394		286.562840	
77.		$1s^2 2s 2p^5 3s^2 3p^3$	$^4S^e$	20.443257		286.765063	
78.		$1s^2 2s 2p^5 3s^2 3p^3$	$^4D^e$	20.445673		286.797934	
79.		$1s^2 2s 2p^5 3s^2 3p^3$	$^2D^e$	20.473399		287.175169	
80.		$1s^2 2s 2p^5 3s^2 3p^3$	$^4P^e$	20.480877		287.276913	
81.		$1s^2 2s 2p^5 3s^2 3p^3$	$^2P^e$	20.503155		287.580023	
82.		$1s^2 2s 2p^5 3s^2 3p^3$	$^2D^e$	20.515516		287.748204	
83.		$1s^2 2s 2p^5 3s^2 3p^3$	$^2S^e$	20.598332		288.874982	
84.		$1s^2 2s 2p^5 3s^2 3p^3$	$^4P^e$	21.602722		302.540512	
85.		$1s^2 2s 2p^5 3s^2 3p^3$	$^2D^e$	21.746068		304.490849	
86.		$1s^2 2s 2p^5 3s^2 3p^3$	$^2P^e$	21.762633		304.716229	
87.		$1s^2 2s 2p^5 3s^2 3p^3$	$^2D^e$	21.819446		305.489215	
88.		$1s^2 2s 2p^5 3s^2 3p^3$	$^2P^e$	21.844756		305.833578	
89.		$1s^2 2s 2p^5 3s^2 3p^3$	$^2S^e$	21.849451		305.897457	
90.	Si ⁺ 1s ⁻¹	$1s 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$	$^4P^e$	135.296371		1849.433561	
91.		$1s 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$	$^2P^e$	135.341559		1850.048380	
92.		$1s 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$	$^2D^e$	135.401826		1850.868361	
93.		$1s 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$	$^2S^e$	135.509451		1852.332685	

Ek B: Auger bozunma oranları hesabında yer alan Si^{2+} hedef halleri ve enerjileri.

Bu kısımda Auger bozunma oranları hesabında Si^+ hedef halleri ve enerjileri Tablo 7.'de sunulmaktadır. Tabloda ayrıca güvenilir NIST enerji seviyeleri arasında mevcut olanları da bu tabloda listelenmiştir.

Tablo 7. Si^+ hedef halleri için hesaplanan enerji değerleri ve mevcut NIST enerji değerleri Rydberg biriminde verilmiştir.

R-Matrix Hedefi	Konfigürasyon	Terim	R-Matrix	NIST
1.	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$	$^1S^e$	0.000000	0.000000
2.	$1s^2 2s^2 2p^6 3s 3p$	$^3P^o$	0.473045	0.482829
3.	$1s^2 2s^2 2p^6 3s 3p$	$^1P^o$	0.845452	0.755298
4.	$1s^2 2s^2 2p^6 3p^2$	$^3P^e$	1.175619	1.184381
5.	$1s^2 2s^2 2p^6 3p^2$	$^1D^e$	1.275401	1.113701
6.	$1s^2 2s^2 2p^6 3p^2$	$^1S^e$	1.497204	1.3982867
7.	$1s^2 2s^2 2p^5 3s^2 3p$	$^3S^e$	7.892254	
8.	$1s^2 2s^2 2p^5 3s^2 3p$	$^3D^e$	7.956394	
9.	$1s^2 2s^2 2p^5 3s^2 3p$	$^1D^e$	7.984849	
10.	$1s^2 2s^2 2p^5 3s^2 3p$	$^3P^e$	7.992287	
11.	$1s^2 2s^2 2p^5 3s^2 3p$	$^1P^e$	7.993042	
12.	$1s^2 2s^2 2p^5 3s^2 3p$	$^1S^e$	8.224556	
13.	$1s^2 2s^2 2p^5 3s 3p^2$	$^5P^o$	8.344883	
14.	$1s^2 2s^2 2p^5 3s 3p^2$	$^5D^o$	8.387993	
15.	$1s^2 2s^2 2p^5 3s 3p^2$	$^5S^o$	8.440869	
16.	$1s^2 2s^2 2p^5 3s 3p^2$	$^3D^o$	8.451654	
17.	$1s^2 2s^2 2p^5 3s 3p^2$	$^3S^o$	8.477551	
18.	$1s^2 2s^2 2p^5 3s 3p^2$	$^3P^o$	8.477638	
19.	$1s^2 2s^2 2p^5 3s 3p^2$	$^1P^o$	8.697713	
20.	$1s^2 2s^2 2p^5 3s 3p^2$	$^3D^o$	8.716706	
21.	$1s^2 2s^2 2p^5 3s 3p^2$	$^3P^o$	8.754541	
22.	$1s^2 2s^2 2p^5 3s 3p^2$	$^1D^o$	8.770663	
23.	$1s^2 2s^2 2p^5 3s 3p^2$	$^3P^o$	8.845214	
24.	$1s^2 2s^2 2p^5 3s 3p^2$	$^1P^o$	8.896242	
25.	$1s^2 2s^2 2p^5 3s 3p^2$	$^3P^o$	8.947688	
26.	$1s^2 2s^2 2p^5 3s 3p^2$	$^3D^o$	8.970844	
27.	$1s^2 2s^2 2p^5 3s 3p^2$	$^1D^o$	8.982130	

Tablo 7.'nin devamı

28.	$1s^2 2s^2 2p^5 3s 3p^2$	$^1S^o$	9.012406	
29.	$1s^2 2s^2 2p^5 3s 3p^2$	$^3S^o$	9.031770	
30.	$1s^2 2s^2 2p^5 3s 3p^2$	$^1P^o$	9.136193	
31.	$1s^2 2s 2p^6 3s^2 3p$	$^3P^o$	11.483121	
32.	$1s^2 2s 2p^6 3s^2 3p$	$^1P^o$	11.526933	
33.	$1s^2 2s 2p^6 3s^1 3p^2$	$^5P^e$	11.855513	
34.	$1s^2 2s 2p^6 3s^1 3p^2$	$^3P^e$	11.961543	
35.	$1s^2 2s 2p^6 3s^1 3p^2$	$^3D^e$	12.166922	
36.	$1s^2 2s 2p^6 3s^1 3p^2$	$^1D^e$	12.246979	
37.	$1s^2 2s 2p^6 3s^1 3p^2$	$^3S^e$	12.314440	
38.	$1s^2 2s 2p^6 3s^1 3p^2$	$^1S^e$	12.392294	
39.	$1s^2 2s 2p^6 3s^1 3p^2$	$^3P^e$	12.456707	
40.	$1s^2 2s 2p^6 3s^1 3p^2$	$^1P^e$	12.482651	
41.	$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^2$	$^5S^e$	17.339724	
42.	$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^2$	$^5D^e$	17.424196	
43.	$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^2$	$^5P^e$	17.469516	
44.	$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^2$	$^3D^e$	17.493525	
45.	$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^2$	$^3P^e$	17.513469	
46.	$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^2$	$^1D^e$	17.581803	
47.	$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^2$	$^1S^e$	17.584030	
48.	$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^2$	$^3D^e$	17.593726	
49.	$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^2$	$^1P^e$	17.599216	
50.	$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^2$	$^3P^e$	17.659423	
51.	$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^2$	$^3P^e$	17.697326	
52.	$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^2$	$^3S^e$	17.780959	
53.	$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^2$	$^3D^e$	17.903720	
54.	$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^2$	$^3P^e$	17.982687	
55.	$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^2$	$^1P^e$	18.053472	
56.	$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^2$	$^1D^e$	18.055275	
57.	$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^2$	$^1D^e$	18.079854	
58.	$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^2$	$^1S^e$	18.348579	
59.	$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^2$	$^3P^e$	18.406449	
60.	$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^2$	$^1D^e$	18.490132	
61.	$1s^2 2s^2 2p^4 3s^2 3p^2$	$^1S^e$	18.602302	
62.	$1s^2 2s 2p^5 3s^2 3p^2$	$^5P^o$	20.442637	

Tablo 7.'in devamı

63.	$1s^2 2s 2p^5 3s^2 3p^2$	$^5D^o$	20.470221	
64.	$1s^2 2s 2p^5 3s^2 3p^2$	$^3P^o$	20.525336	
65.	$1s^2 2s 2p^5 3s^2 3p^2$	$^5S^o$	20.533515	
66.	$1s^2 2s 2p^5 3s^2 3p^2$	$^3D^o$	20.540001	
67.	$1s^2 2s 2p^5 3s^2 3p^2$	$^1D^o$	20.577268	
68.	$1s^2 2s 2p^5 3s^2 3p^2$	$^3S^o$	20.581399	
69.	$1s^2 2s 2p^5 3s^2 3p^2$	$^1S^o$	20.605724	
70.	$1s^2 2s 2p^5 3s^2 3p^2$	$^3D^o$	20.642055	
71.	$1s^2 2s 2p^5 3s^2 3p^2$	$^1P^o$	20.668575	
72.	$1s^2 2s 2p^5 3s^2 3p^2$	$^3P^o$	20.696277	
73.	$1s^2 2s 2p^5 3s^2 3p^2$	$^3P^o$	20.719646	
74.	$1s^2 2s 2p^5 3s^2 3p^2$	$^3P^o$	21.782236	
75.	$1s^2 2s 2p^5 3s^2 3p^2$	$^3D^o$	21.785905	
76.	$1s^2 2s 2p^5 3s^2 3p^2$	$^3S^o$	21.823653	
77.	$1s^2 2s 2p^5 3s^2 3p^2$	$^1P^o$	21.876784	
78.	$1s^2 2s 2p^5 3s^2 3p^2$	$^1D^o$	21.910856	
79.	$1s^2 2s 2p^5 3s^2 3p^2$	$^1P^o$	21.992533	
80.	$1s^2 2p^6 3s^2 3p^2$	$^3P^e$	24.720438	
81.	$1s^2 2p^6 3s^2 3p^2$	$^1D^e$	24.822804	
82.	$1s^2 2p^6 3s^2 3p^2$	$^1S^e$	24.921970	
83.	$1s 2s^2 2p^6 3s^2 3p$	$^1P^o$	135.546554	

TÜBİTAK
PROJE ÖZET BİLGİ FORMU

Proje Yürütücüsü:	Doç. Dr. MUHAMMET FATİH HASOĞLU
Proje No:	116F378
Proje Başlığı:	Silikon Atomunun X-Işını Bölgesinde Foto Soğurma Tesir Kesitinin Hesaplanması
Proje Türü:	1002 - Hızlı Destek
Proje Süresi:	9
Araştırmacılar:	
Danışmanlar:	
Projenin Yürütüldüğü Kuruluş ve Adresi:	HASAN KALYONCU Ü.
Projenin Başlangıç ve Bitiş Tarihleri:	15/05/2017 - 15/02/2018
Onaylanan Bütçe:	11600.0
Harcanan Bütçe:	11000.0
Öz:	<p>Astrofizik uygulamalarda, yüksek-çözünürlüklü X-ışını spektroskopinin asıl amacı uzaydan gelen ışınlarda yer alan soğurma çizgilerinin tespiti ve tespit edilen çizgilerin özelliklerinin modellenmeler kullanılarak belirlemektir. X-ışını bölgesindeki gözlemlenen soğurma çizgilerinin kaynağının büyük bir çoğunluğu atomların iç kabuklarındaki foton elektron etkileşmesidir. Spektroskopi gözlemlerinin modellenmeleri ve yorumlanabilmeleri soğurmaya sebep olan atomlara ait foto soğurma tesir kesitlerinin ulaşılabilir olmasına bağlıdır. Bu tür gözlemlerin modellenmesinde sıklıkla başvurulmuş kapsamlı çalışma Serbest-Parçacık yaklaşımı çerçevesinde yapılmıştır. Bu tesir kesitleri geçmişte elde edilen düşük-çözünürlüğe sahip gözlemlerin modellenmesi amacı için yeterli olmuştur.</p> <p>Serbest-Parçacık yaklaşımı ile hesaplanmış tesir kesitlerini kullanan X-ışını soğurma modelleri, Chandra X-Ray Observatory ve Avrupa Uzay Ajansına ait X-ray Multi-Mirror Mission (XMM-Newton) uydusu teleskoplarının sunmuş olduğu yüksek çözünürlüğe sahip yüksek-çözünürlüklü spektroskopi gözlemleri için yeterli değildir. Bunun sebebi bu tesir kesitleri yüksek çözünürlüklü spektroskopi için ayrıca büyük önemli olan 1s-np geçişlerine ait soğurma etkilerini içermemeleridir. X-ışını bölgesinde atomların tesir kesitleri deneysel olarak istenilen seviyede yüksek çözünürlüklü ölçümleri çok zordur. X-ışını bölgesinde silikon atomunun istenilen nitelikte tesir kesiti için deneysel bir ölçüm veya herhangi bir teorik çalışma literatürde mevcut değildir.</p> <p>Bu projede silikon atomunun X-ışın bölgesinde foto soğurma tesir kesitini son-teknoloji R-matrix metodu kullanılarak teorik olarak hesaplanmıştır. R-matrix metodu daha önce oksijen, neon, karbon ve magnezyum atomlarının için tesir kesitlerinin hesaplanmasında kullanılmış ve bu sonuçlar astrofizik modellemelerde kullanılmıştır. Ayrıca bu çalışmalardan elde edilen tesir kesitleri astrofizik modellemelerde kullanılan XSTAR, CLOUDY ve ION gibi önemli X-ışını spektroskopi modelleme programlarına entegre edilmişlerdir. Astrofizik modellemede Rydberg rezonanslarına ait soğurma tesir kesitlerinin hassasiyetle bilinmesi ayrıca önemlidir. Bu rezonansların genişliklerinin doğru şekilde tayin edilmesi için büyük öneme arz eden İzleyici Auger Genişleme etkileri hesaba dâhil edilmişlerdir.</p> <p>Yakın zamanda silikon atomunun K-kabuğu soğurma bölgesine karşılık gelen astrofizik modelleme çalışmaları silikon atomunun kristal yapıda toz parçacıkları halinde var olduğu bulunmuştur. Silikonun atom halinde var olup olmadığı konusundaki yapılacak astrofizik modellemelerde bu projeden elde edilen sonuçların kullanılması ile mümkündür.</p>
Anahtar Kelimeler:	X-Işını, Foto Soğurma, Tesir Kesiti, Silikon, R-Matrix Metot, Auger Bozunma
Fikri Ürün Bildirim Formu Sunuldu Mu?:	Hayır
Projeden Yapılan Yayınlar:	1- X-ray absorption by interstellar atomic gases near the K-edges of C, O, Ne, Mg, and Si, and the L-edge of Fe (Bildiri - Uluslararası Bildiri - Poster Sunum), 2- X-ray absorption by interstellar atomic gases near the K-edges of C, O, Ne, Mg, and Si, and the L-edge of Fe (Bildiri - Uluslararası Bildiri - Sözlü Sunum).