

113

**İKİ VE ÜÇ ELEKTRONLU ATOMLARIN
REZONANS DURUMLARININ
SPEKTROSKOPİK ÖZELLİKLERİNİN
İNCELENMESİ**

DOKTORA TEZİ

SELMA ŞİMŞEK

**İnönü Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi
Fizik Bölümü Araştırma Görevlisi**

MALATYA-1984

Bu çalışmanın konusunu veren, çalışmalarım süresince daima bana yol gösteren ve karşılaştığım problemlerin çözümünde her türlü yardımlarını gördüğüm Hocam; Sayın Doç.Dr. Şakir ERKOÇ'a sonsuz şükranlarımı sunarım.

Bize çalışma imkan ve ortamı sağlayan ve misafirperverliklerini esirgemeyen O.D.T.Ü. Fizik Bölümü'ne ve bilgisayar programlarının çalıştırılmasında yardımcı olan O.D.T.Ü. Bilgi İşlem Merkezi mensuplarına teşekkür etmeyi bir borç bilirim.

İ Ç İ N D E K İ L E R

ÖZET

BÖLÜM I.	GİRİŞ
BÖLÜM II.	LİTYUM ATOMUNUN $2S$ REZONANS DURUMLARININ ÇİZGİ-GE- NİŞLİKLERİ
BÖLÜM III.	LİTYUM ATOMUNUN $2S$ REZONANS DURUMLARININ GEÇİŞ İHTİMALLERİ
BÖLÜM IV.	REZONANS DURUMLARININ ÇİZGİ-ŞEKİLLERİ
	EKLER
	KAYNAKLAR

Ö Z E T

Üç-elektronlu atomların ve iyonlarının enerji spektrumları kısaca açıklandıktan sonra, bunların yarı bağılı (rezonans) hâlleri ve hesap teknikleri hakkında genel bir bilgi verilmiş ve daha önce geliştirilen Türev Metodu'nun çizgi-genişliği ifadesi yardımı ile Li atomunun ikinci iyonlaşma eşiğinin altında yer alan dokuz tane 2^2S simetrisine sahip rezonans hâllerinin çizgi-genişlikleri hesaplanmıştır.

Ayrıca Li atomunun bu hâllerinin dalga fonksiyonları kullanılarak, kendiliğinden iyonlaşma ihtimâlleri de hesaplanmıştır.

Zaman Kararlılığı Teorisi ve Fano'nun Konum etkileşmesi teorisi yardımı ile rezonans hâllelerinin çizgi-şeklini veren yeni bir ifade çıkartılıp, uygulama olarak, He atomunun $(2s^2)^1S$ ve $(2p^2)^1S$ rezonans hâllelerinin çizgi-şekli elde edilmiştir.

Hesap sonuçlarının, mevcut deney ve teori sonuçları ile uyum içinde oldukları görülmüştür.

BÖLÜM I

GİRİŞ

Kuantum mekaniğinin başlangıcında (1905'lerde) atom, molekül ve iyonların spektrumlarında, sadece kararlı hâllerin mevcut olduğu sanılıyordu. Bu hâller, kesikli çizgiler şeklinde olan ve birinci iyonlaşma eşiğinin altındaki bölgede gözlenen bağlı hâllerdir. Sonradan sürekli bölgede ve iyonlaşma eşikleri arasında da birtakım bağlı olmayan hâller gözlemlendi.

Kararlı hâllerin rölativistik olmayan çözümü, kuantum mekaniğinin iki ana yaklaşıma:metodu olan değişim (variation) veya etkileşim (perturbation) metodları ve genellikle zamandan bağımsız Schrödinger Denklemi kullanılarak yapılır. Çok-elektronlu sistemler için karışık hesaplamalar gerektiren orbital yaklaşımları; meselâ Hartree ve Hartree-Fock Teorileri [2,3] ve bunlardan daha anlamlı ve hassas olan Sinanoğlu'nun Çok-Elektron-Teorisi (ÇET) [4], bağlı hâllerin enerji seviyelerinin ve dalga fonksiyonlarının hesaplanmasında kullanılan belli başlı teorilerindendir.

Kuantum mekaniğinin kuruluşundan az sonra, 1925 yılında Auger tarafından, sürekli bölgenin içinde yer alan birtakım kararsız hâller gözlemlendi. Bu hâller, önce bağlı hâller gibi davranıyor fakat bir müddet sonra ışın yayınlamadan (rediationless) kendiliğinden bozunuyorlardı, yani bunlar, hem bağlı hâllerin özelliklerini ve hem de bağımsız hâllerin özelliklerini bir arada taşıyorlardı. Onun için bu hâller

lere yaribağlı (YB)^{*} hâller adı verilmiştir. Ayrıca bunlara rezonans ve kendiliğinden iyonlaşma (Kİ)^{*} hâlleri de denir.

YB hâller, enerji spektrumunda sürekli bölgenin içine gömülmüş, kesikli bölgelerdekine nazaran daha geniş çizgiler şeklinde gözlenir.

Herhangi bir atom, molekül ve iyonun ait enerji seviyeleri, sistemin elektronlarının uyarılma şekillerine bağlıdır. Genellikle bir sistem tekli (singly) uyarıldığı zaman bağı, ikili (doubly) veya çoklu (multiply) (iki veya daha fazla elektronunun birden uyarılması) uyarıldığı zaman da genellikle YB hâller meydana gelir⁵.

Bir sistemin tekli, ikili ve genel olarak çoklu uyarılmış hâllerinin ne demek olduğunu açıklamak için üç-elektronlu bir atomik sistemin enerji seviyeleri. şekil 1 de gösterilmiştir. Bu şekilde, her bir seviye, bir tek atomik şekillenime (elektronik konuma) karşılık gelir, fakat bu hâlleri tanımlamak için birkaç şekillenimin (birden fazla) bir karışımına ihtiyaç duyulduğu zaman (n_1, n_2, α) sembolik notasyonu kullanılmıştır⁶. Meselâ helyum atomunda en düşük ikili uyarılmış $1s^e$ hâli ($2s^2$) + ($2p^2$) den meydana gelir ve bu yüzden de (2,2a) olarak sınıflandırılır. İkinci düşük ikili uyarılmış $1s^e$ hâli ise çoğunlukla ($2s^2$) - ($2p^2$) olarak verilir ve (2,2b) sembolik notasyonu ile sınıflandırılır.

Buradan da görüldüğü gibi n_1 içteki elektronun kuvantum sayısını, n_2 dıştaki elektronun kuvantum sayısını, $\alpha = a, b, c, \dots$ 'ıncı seviyelerin elemanını, e ise hâlin paritesinin çift olduğunu göstermektedir. Nötr Li atomu, pozitif B^+ iyonu ve negatif He^- iyonu için temel hâl konumu ($1s^2 2s$) $2s^e$ olarak gösterilir (Şekil 1). Temel hâlin üstündeki atomik sistemin tekli uyarılmış sonsuz sayıda kararlı hâlleri vardır bu seviyeler, iki-elektronlu sistemin taban hâli + sonsuzda serbest

^{*} Tezin bundan sonraki kısımlarında bu kısaltmalar kullanılacaktır.

olarak duran bir elektrona karşılık gelen üç-elektronlu sistemin birinci iyonlaşma eşiğine doğru birbirlerine yaklaşırlar. Bunların üzerinde iki-elektronlu sistemin (meselâ Li^+) bir defa uyarılmış hâlleri bulunur. Benzer şekilde He atomunun taban hâli olan $(1s^2)^1S$ seviyesinin (19,35 eV) üzerinde olan He^- iyonunun en düşük uyarılmış $(1s2s^2)^2S^e$ hâli de sürekli bölgenin içine gömülmüş kesikli YB hâllerin bir örneğidir.

Şekil 1'in üst kısımlarında iki defa iyonlaşmış üç-elektronlu sistemin taban hâli ile sonsuzda serbest olarak duran diğer iki elektrona karşılık gelen $(1s\epsilon\ell\epsilon'\ell')$ ile temsil edilen ikinci iyonlaşma eşiği görülmektedir.

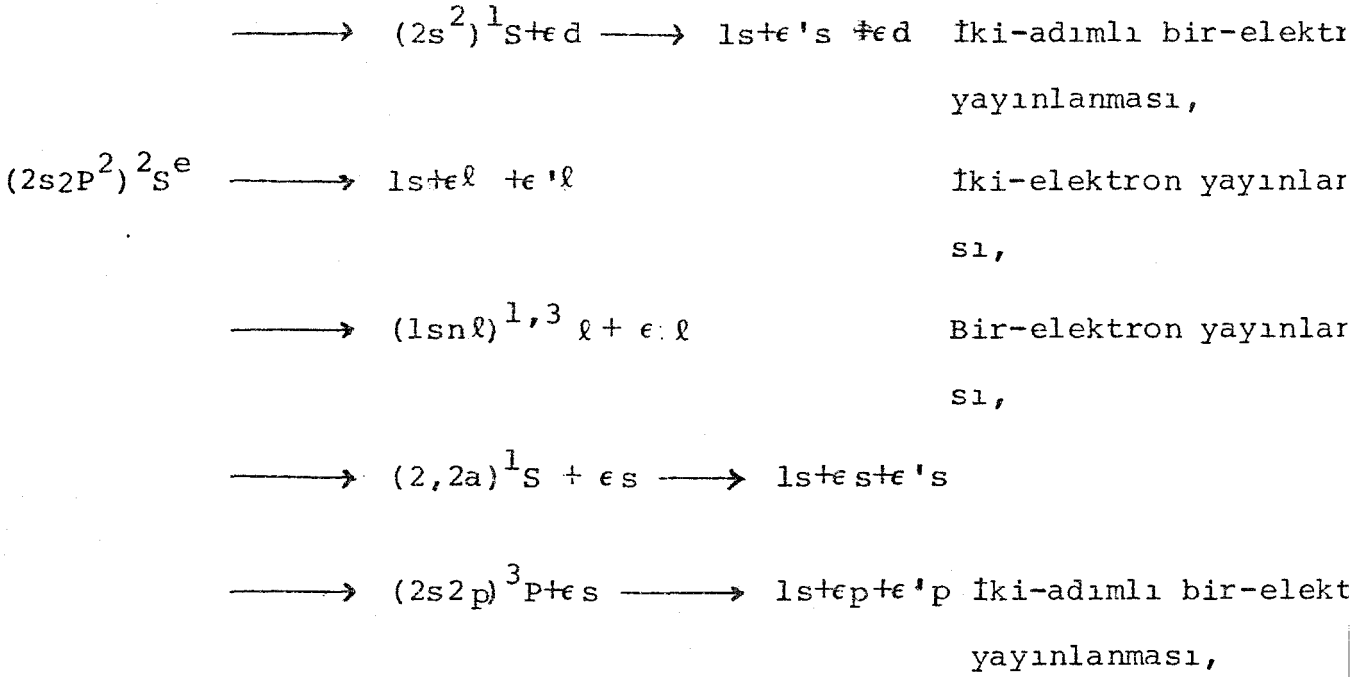
Üç-elektronlu atomların ikinci iyonlaşma eşiklerinin üzerinde üçlü uyarılmış hâller bulunur. Bunlar da enerji seviyeleri bakımından iki-elektronlu iyonlarının ikili ve bir-elektronlu iyonlarının uyarılmış bölgeleri içinde yer alırlar. Aynı durumlar üç-elektronlu iyonlarda da bulunur. Li atomunun ve He^- iyonunun üçlü uyarılmış hâlleri aşağıda ifade edildiği gibi bir veya iki elektronun kendiliğinden iyanlaşması ile ikili veya tekli uyarılmış hâllere geçebilirler⁷¹.

$$(2s^2 2p)^2 P^0 \longrightarrow (1sn\ell)^{1,3} \ell + \epsilon (\ell \pm 1) \text{ Bir-elektron yayınlanması.}$$

$$\longrightarrow 1s + \epsilon \ell + \epsilon' (\ell \pm 1) \text{ İki-elektron yayınlanması.}$$

$$(2s2p^2)^2 D^e \longrightarrow 1s + \epsilon \ell + \epsilon' (\ell, \ell \pm 2) \text{ İki-elektron yayınlanması.}$$

$$\longrightarrow (1sn\ell)^{1,3} \ell + \epsilon (\ell, \ell \pm 2) \text{ Bir-elektron yayınlanması.}$$



burada e ve o sırasıyla çift ve tek pariteyi göstermektedir. Buradan da görüldüğü gibi, genel olarak çok-elektronlu bir sistemin N defa uyarılmış bir hâli [(N-1)-elektronlu sürekli bir bölgenin içine gömülen ve kendiliğinden iyonlaşabilen] 1,2,..., N-1 tane serbest elektron yayınlayabilir.

YB hâller, kararlı hâllerin çözülebildiği

$$H\Psi = E \Psi \tag{I.1}$$

Schrödinger denklemi ile çözülemezler. Bu hâllerin çözümünde genellikle iki-elektronlu atomlar için uygulanan birçok metod geliştirilmiştir. [8-16]. Fakat bu metodların çok-elektronlu (ikiden fazla) sistemlere ve üst enerji seviyelerine uygulanmasının çok zor olmasından dolayı yeni metodlara ve teorilere ihtiyaç duyuldu. 1973-1976 yılları arasında Öksüz tarafından "Zaman Kararlılığı Teorisi" adı verilen ve literatürde "Time Stability Theory (TST)" diye bilinen bir teori geliştirildi.

Zaman Kararlılığı Teorisi'nin temel denklemi olan

$$[H^2 - 2 \langle H \rangle H] \Psi = [\langle H^2 \rangle - 2 \langle H \rangle^2] \Psi \quad (I.2)$$

bağıntısından da görüldüğü gibi bu teoride de Hamiltonyen'in karesini hesaplama mecburiyeti vardır. Bunun hesaplanması için de çok-elektronlu sistemlerde çok zor ve karışık integrallerin alınması gerekmektedir.

Bu güçlüğü de ortadan kaldıran bir metod, Öksüz ve arkadaşları tarafından geliştirildi [19,20] ve çeşitli sistemlere başarı ile uygulandı [19-21]. Türev Metodu adı verilen bu metod, diğer metodların ve Zaman Kararlılığı Teorisinin hesap zorluklarının hiçbirini ihtiva etmeyen

$$\left| \frac{\partial}{\partial \alpha} \langle \Phi | H - E | \Phi \rangle \right| = \min \quad (I.3)$$
$$E = \langle H \rangle$$

denkleminde ibarettir. Burada Φ YB hâllerin sadece kesikli bölgesini temsil eden dalga fonksiyonunu, α da $\alpha = \alpha_R$ de $|\Phi\rangle$ 'ye $E = \langle \Phi | H | \Phi \rangle$ 'yi sağlayan değişim parametresidir, aynı zamanda $\partial \langle H \rangle / \partial \alpha$ ifadesini minimum yapan Lagrange parametresidir.

YB hâllerin çözümü için bu kadar çok metod geliştirilmesinin sebebi; bu hâllerin öneminin gün geçtikçe artmasından ve çok sayıda araştırmacının dikkatini çekmesindedir. Bilhassa son zamanlarda bu hâllerin önemi, astrofizik dalında çok artmış; astrofizik ile ilgili problemler, bu hâllerin kendiliğinden iyonlaşması sayesinde açıklanabilmiştir. Meselâ Goudsmit ve Wu [22] 1934 yılında coronal yayınları

çizgilerinin genişliklerinin büyük olmasının sebebinin nötr He atomunun ikili uyarılmış hâlleri arasındaki geçişler vasıtasıyla açıklanabildiğini ileri sürdüler. Astrofiziksel ilginin yakın zamanlardaki canlanması, laboratuvar spektroskopisindeki yeni çalışmalar, güneş ve uzaydan gelen uzak-morötesi ışınların spektrumlarının gözlenmesinin kolayca sağlanması ile kamçılandı [23]. Bundan başka izotop ayırımı teknolojisinde kullanılmaya başlanılmasından sonra bu hâllerin önemi artmış ve birçok araştırma sahasının açılmasına sebep olmuştur. YB hâller yüzey teknolojisinde de çok büyük önem kazanmıştır. Auger spektroskopisinin gelişmesi sayesinde (ki bu spektroskopide YB hâller kullanılır) yüzeylerde bulunan esermiktardaki atom gruplarının teşhisi bile mümkün olmuştur [24].

Bütün bunlardan başka, atom, melekül ve iyonların YB hâllerinin enerjilerinin, çizgi-genişliklerinin ve bu hâller arasındaki geçiş ihtimâllerinin sadece hesabı bile fizik açısından önem taşımaktadır. Çünkü; bunlar, yukarda da belirttiğimiz gibi bağlı hâllerin çözülebildiği metodlarla çözülememekte, onlardan farklı özelliklere sahip olup başka yöntemler gerektirmektedir.

Ayrıca, bu hâllerin çizgi-şekli (line-profile veya line-shape) de birçok araştırmacının dikkatini çekmiş [9,25-36], bunların simetrik olmayan bir özelliğe sahip olmalarının ve çizgi-şeklindeki anormalliklerin sebepleri açıklamaya ve şekilleri tayin edilmeye çalışılmıştır [9].

Bu çalışmada, Türev Metodu ile Li atomunun bazı 2S rezonans enerjileri ve dalga fonksiyonları hesaplanırken [37] bulunan rezonans enerjilerinin yakınlarındaki enerjiler, bunlara karşılık gelen türev değerleri, rezonans enerjileri ve onların türevleri kullanılarak bu hâllerin çizgi-genişlikleri; dalga fonksiyonları kullanılarak da bu

hâllerin, kendiliğinden iyonlaşma ihtimalleri hesaplandı.

Ayrıca Fano'nun Konum Etkileşmesi Teorisi|9|, Türev Metodu ve Zaman Kararlılığı Teorisi'nden|19| yararlanarak çizgi-şekli için yeni bir ifade elde edildi ve uygulama olarak Zaman Kararlılığı Spektrumunun verileri|19| kullanılarak He atomunun $1S$ simetrisine sahip ilk iki YB hâlinin ($2s^2, 2p^2$) çizgi-şekli elde edildi.

Zaman Kararlılığı Spektrumu

$$(H^2 - 2\lambda H)\Psi = (\langle H^2 \rangle - 2\lambda \langle H \rangle)\Psi \quad (I.4)$$

denkleminin çözümlerinden elde edilmektedir |19|.

BÖLÜM II

LİTYUM ATOMUNUN $2s$ REZONANS DURUMLARININ ÇİZGİ-GENİŞLİKLERİ

Herhangi bir atom uyarılmış bir enerji seviyesinden daha alt bir seviyeye veya taban durumuna geçerken seçim kuralları çerçevesinde bir foton yayınlar. Foton yayınlayarak yapılan bu geçişlere ışımali veya radyasyonlu geçişler denir. Bu geçişlerin olma ihtimali, uyarılmış seviyenin çizgi genişliği ile doğru, yaşama süresi ile ters orantılıdır.

Şayet atom, taban durumu konumuna göre uyarılmış iki elektrona sahipse, bu atom, bir ikili uyarılmış enerji durumundadır ve enerji seviyesi birinci iyonlaşma eşiğinin üstündedir. Uyarılmış durumda bulunan bu elektronlar, bir tek elektronu sökmek için gerekli olan enerjiden daha fazla enerjiye sahip iseler, "ikili-uyarılmış" elektronlarda biri, daha düşük bir enerji seviyesine geçerken enerjisini diğer elektrona vererek o elektronun sistemi kendiliğinden terk etmesine ve dolaşmasıyla da atomun kendiliğinden iyonlaşmasına sebep olabilir [38]. Bu olay sonunda foton yayınlanmayıp elektron yayınlandığı için böyle geçişlere radyasyonsuz yani ışımsız geçişler elektron da kendiliğinden yayınlandığı için [aynı zamanda bu hadiseye literatürde madde-yayınlanması (matter-emission) da denilmektedir] bu olaya da kendiliğinden iyonlaşma olayı, bu hâllere de daha önce de belirttiğimiz gibi (YB), (KI) veya rezonans hâlleri denilmektedir.

YB hâller, gerçekte dalga fonksiyonları sürekli ve kesikli kısımları ihtiva eden atomik Hamiltonyen'in bir öz fonksiyonu tarafından karakterize edilirler [26]. Kesikli ve sürekli konumların etkileşmesi sonucunda atom, bazı seçim kurallarına uyarak başka hâllere radyasyonsuz geçiş yapar. YB hâllerden herhangi bir hâlin yaşama süresinin ve dolayısı ile çizgi-genişliğinin değeri, atmosferin yukarı tabakalarında ve diğer yerlerde etkili bir olay olan bozunup-yeniden birleşmenin (dissociative-recombination) oranını tahmin etmede çok önemlidir [23,39].

Bir atomun YB hâlinin radyasyonsuz ve bazı özel durumlarda radyasyonlu geçiş yapma ihtimâli, yani kısaca bozunma ihtimali de Γ ile gösterilen bu hâlin çizgi-genişliğine bağlı olup onunla doğru orantılıdır. Radyasyonsuz geçişlerin olma ihtimâli yeni elektron yayınlanması ($\sim 10^{-14}$ sn) genellikle foton yayınlanmasından ($\sim 10^{-9}$ sn) daha kısa zamanda olduğundan [40]; YB hâllerin çizgi-genişliği değeri, bu hâllerin kendiliğinden iyonlaşma ihtimâllerinin büyüklükleri hakkında daha çok bilgi verir.

Bu çalışmada, Fano'nun Konum Etkileşmesi (configuration-inter-tion) teorisinden [9] ve Türev Metodu'nun türetilmesinde ifade edile bir teoremden faydalanılarak bulunan YB hâllerin çizgi-genişliğini veren ifadeyi [19,41] kullanarak Li atomunun bazı 2S K.I hâllerinin çizgi-genişlikleri hesaplandı.

Fano, YB hâllerin teorisini, sistemin toplam dalga fonksiyonu nu sürekli ve kesikli kısımların toplamı şeklinde alarak geliştirmiştir.

$$\Psi = a \phi + \int dE' b_{E'} \psi_{E'} \quad (II.1)$$

Burada a ve b lineer parametreler olup birinci terim sistemin kesikli bölgesini, ikinci terim ise sürekli bölgesini temsil etmektedir. Ayrıca;

$$|a(E)|^2 = \frac{|V_E|^2}{(E-E_R)^2 + \pi^2|V_E|^2} \quad (\text{II.2})$$

ve çizgi-genişliği de

$$\Gamma = 2\pi|V_E|^2 \quad (\text{II.3})$$

şeklinde tarif edilir. Bu bağıntılar kullanılarak $|V_E| = |V_E|$, $E-E_R = \epsilon$ alınarak

$$\frac{|a(E_R)|^2}{|a(E)|^2} = \frac{4\epsilon^2 + \Gamma^2}{\Gamma^2} \quad (\text{II.4})$$

elde edilir. Burada E_R rezonans yani YB hâlin enerjisini, E ise rezonans enerjisi yakınında herhangi bir enerji değerini göstermektedir. Türev Metodu ifadesinin çıkarılmasında ispatlanan bir teoremin sonucu ve bu metodun düşünceleri yardımı ile ;

$$\frac{|a(E_R)|^2}{|a(E)|^2} = \frac{\sigma_\phi(E)}{\sigma_\phi(E_R)} \quad (\text{II.5})$$

elde edilir [19]. Burada $\sigma_\phi(E)$ Zaman Kararlılığı Teorisinde $\langle H^2 \rangle_\phi - \langle H \rangle_\phi^2$, Türev Metodun'da $|\partial \langle H \rangle_\phi / \partial \alpha|$ değerlerini ifade eder. (II.4) ve (II.5) eşitliklerinin sol tarafları eşit olduğundan sağ tarafları da eşitlenerek ;

$$\frac{\sigma_{\phi}(E)}{\sigma_{\phi}(E_R)} = \frac{4}{\Gamma^2} \epsilon^2 + 1 \quad (\text{II.6})$$

bulunur. Bu denklem $y = ax + b$ şeklinde düşünülüp en küçük kareler yöntemi (least-square fitting) yapılarak YB hâllerin çizgi-Genişliği Γ , rezonans enerjisi E_R , rezonans Hamiltoniyen'in beklenen değerinin türevi yani $|\partial \langle H \rangle / \partial \alpha|$, rezonans civarındaki enerjiler ve onların türevleri cinsinden ;

$$\Gamma = 2 \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (E_i - E_R)^2}{\sum_{i=1}^N \sigma_{\phi}(E_i) - N\sigma_{\phi}(E_R)}} \quad (\text{II.7})$$

olarak bulunur [19] .

Türev Metodu ile herhangi bir YB hâlin enerjisi bulunurken, gerçeğe en yakın enerji olarak $\delta |\partial \langle H \rangle / \partial \alpha|$ 'nın minimum olduğu enerji alınır (burada $\langle H \rangle$, Hamiltoniyen'in beklenen değeri, α ise bir Lagrangian parametresidir, yapılan hesaplarda bu parametre dalga fonksiyonunun lineer olmayan bir parametresi olarak alınmıştır). Enerjinin türevinin minimum olduğu noktayı bulmak için iterasyon yolu ile YB hâl enerjisinin sağında ve solunda birçok enerji değerleri ile bu lara karşılık gelen türev değerleri elde edilir. Denklem (II.7) deki indisi bu değerleri, N de bunların sayısını gösterir.

Li atomu için hesaplanan bazı 2S YB hâllerinin [21,37] ortalama çizgi-Genişlikleri hesaplandı, bu değerler Tablo I'de gösterilmiştir

Tablo. I Lityum atomunun bazı 2S kendiliğinden iyonlaşma hallerinin çizgi-genişlikleri

Konum	E_i (eV) *	Γ (eV)	Deney	Diğer Teoriler
$1s2s^2$	56.321	0.054	$0.05 \pm 0.03/42/$	$0.042/4$ $0.040/4$
$ (1s2s)^3 S3s $	61.950	0.004		$0.009/4$ $0.013/4$
$ (1s2s)^1 S3s $	63.194	0.010		
$ (1s2s)^3 S4s ?$	63.361	0.043		
$ (1s2s)^1 S4s ?$	63.478	0.019		
$1s2p^2$	63.545	0.131		
$ (1s2s)^3 S5s ?$	63.620	0.123		
$ (1s2s)^1 S5s ?$	63.755	0.039		
$ \dots ?$	64.097	0.063		

* Enerji değerleri Kaynak /21/ den alınmış ve çevirme faktörü olarak $R_\infty=13.60475$ eV kullanılmıştır.

YB hâllerin kısa olan yaşama süreleri, belirsizlik kuralına göre bu hâllerin çizgi-genişliklerinin büyük olmasına sebep olur. Tablodan da görüldüğü gibi Li atomunun 2S YB hâllerinin çizgi-genişlikleri $10^{-3} - 10^{-1}$ eV mertebesindedir. Bu değerler ise şimdiye kadar bulunan ve söylenen değerlere uygundur.

Mesela Goldberg, bu hâllerin 530 cm^{-1} lik bir çizgi-genişliği karşılık gelen 10^{-14} sn'lik bir yaşama süresine sahip olduklarını belirtir (ki bu değer 6.57×10^{-2} eV'luk bir çizgi-genişliğine karşılık gelir)* |23|. Mannervik Li atomu için bazı YB (doublet) hâllerin yaşama sürelerini $\sim 10^{-14}$ sn mertebesinde bulmuştur ki bu da ~ 0.0658 eV'luk bir çizgi-genişliğine karşılık gelir|45|. Holøien ise rölativistik olmaya bir yaklaşımla YB hâllerin yaşama sürelerinin 10^{-12} sn den daha küçük, yani çizgi genişliğinin $\sim 10^{-3}$ eV'den daha büyük olduğunu tesbit etmiştir|46|. Collin, kendiliğinden iyonlaşmanın çok kısa zamanda meydana geldiğini söyleyerek çizgi-genişliğinin büyüklüğü hakkında bilgi vermiştir ($10^{-4} - 10^{-1}$ eV)|47|. Bhatia ve Temkin, Li atomunun bazı ikili YB seviyeleri için çizgi-genişliklerini 0.007 - 0.04 eV basamağında bulmuşlardır|43|. Shore da K.İ olayının, ışımalı bozunmadan çok daha kısa zamanda meydana geldiğini ve bunların ortalama ömürlerinin 10^{-14} sn mertebesinde olduğunu belirterek çizgi-genişlikleri hakkında ($\sim 10^{-2}$ eV) bir fikir vermiştir|32|. Ziem ve arkadaşları da Li atomunun ($1s2s^2$) 2S hâli için çizgi-genişliğini 50 ± 30 meV olarak bulmuşlardır|42|. Rehmus ve Berry de birinci iyonlaşma eşiğinin üstünde bulunan rezonans hâllerinin yaşama sürelerinin $10^{-12} - 10^{-16}$ sn mertebesinde olduğunu belirterek bu hâllerin çizgi-genişliği hakkında bilgi vermişlerdir|48|

* Çevirme faktörü olarak $1 \text{ cm}^{-1} = 1,24 \times 10^{-4}$ eV kullanılmıştır.

Tablodan da görüldüğü gibi gerek deneylerle ve gerekse teorik hesaplamala yolu ile rezonans hâllerinin ayrı ayrı çizgi-ge-nişliklerini bulan ve hesaplayan yok denecek kadar azdır. Bunun sebebi ise YB hâllerin basit bir şekilde tanımlanamaması, bu hâlle-rin sürekli bölge ile de etkileşim halinde olması ve çizgi-şekille-rinin, herhangi bir bağlı durumun çizgi-şekli gibi simetrik olmayıp; antisimetrik bir yapı göstermesidir.

Simetrik olmayan bir şeklin çizgi-genişliğini deneysel ola-rak ölçmek bile oldukça zor ve hassasiyet isteyen bir iştir. Bu tür teorik hesaplamalar ise kullanılan metodlara ve aynı zamanda fonksi-yon sayısına da çok bağlıdır. Meselâ Bhatia ve Temkin, yarı-projeksi-yon operatör (quasi-projection-operator) tekniğini kullanarak Li ato-munun bazı ikili YB hâllerinin enerjilerini ve çizgi-genişliklerini değişik sayıda fonksiyon kullanarak hesaplamışlardır. 8, 16, 28 ve 40 fonksiyon için ilk üç 2S YB hâllerinin enerji ve çizgi-ge-nişliklerini hesaplamış ve iyi sonuçlar olarak 40 fonksiyon için hesap-ladıkları değerleri ayrı bir tablo halinde vermişlerdir. İlk iki 2S hâlinin çizgi-genişlikleri, fonksiyon sayısının artmasıyla çok önemli olmayan bazı değişiklikler gösterirken; üçüncü 2S YB hâlin çizgi genişli-ğinde çok büyük ve anormal değişiklikler olmuştur. Bu hâlin çizgi-genişliği için 8, 16 ve 28 fonksiyon kullandıkları zaman sırasıyla 4×10^{-4} eV, 3×10^{-5} eV ve 0.023 eV değerlerini bulmuşlar fakat 40 fonksiyon kullandıkları zaman ise hiçbir değer vere-memişlerdir. Bu yüzden 40 fonksiyon için buldukları ve iyi değerler diye kabul et-tikleri değerleri ihtiva eden tablolarında bu üçüncü hâl için çizgi-ge-nişliği değeri verememektedirler.

Bu yüzden Li atomunun YB hâllerinin çizgi-genişlikleri konusu-da büyük bir eksiklik bulunmaktaydı. Yapılan bu çalışma ile bu konu-daki eksiklik kısmen de olsa giderildi ve Li atomunun ikinci iyonlaşma

eşliğinin altında yer alan bazı 2S YB hâllerinin çizgi-Genişlikleri literatüre kazandırılmış oldu. İlk 2S YB hâl için bulunan çizgi-Genişliği değerinin literatürde rastlanılan yegane deney[42] sonucu ile Bhatia ve Temkin'in[43,44] bulduğu değerlerden daha iyi uyduğu görülmektedir.

BÖLÜM III

LİTYUM ATOMUNUN $2S$ REZONANS DURUMLARININ GEÇİŞ İHTİMALLERİ

Kuantum mekanik sistemler, zaman içinde enerji durumlarını değiştirebilirler, yani çeşitli enerji seviyeleri arasında geçişler mümkün olabilir. Söz konusu geçişlerin birim zamandaki sayısı geçiş ihtimalini verir. Geçişlerin olabilmesi için enerji seviyelerinin durumlarına ve geçişlerin türüne göre çeşitli seçim kurallarının sağlanması gerekir. Yani her seviyeden diğer bütün seviyelere gelişigüzel geçişler olamaz. Bu durumda enerji bakımından daha yüksek bir seviyede bulunan bir atom birden fazla düşük seviyelere geçebilir, zira yüksek seviyeden olan toplam geçiş ihtimali, bu seviyenin bozunma ihtimali, düşük seviyelere olan tek tek geçiş ihtimallerinin toplamına eşittir [49].

Enerji seviyeleri arasındaki geçişler ya ışımalı ya da ışımatsızdır. Bu iki geçişin her ikisini de yapabilen hâller de vardır [50].

N-elektronlu herhangi bir atomun atomik hâllerinin bozunma şekillerine göre kabaca sınıflandırılması Tablo II'de gösterilmiştir.

Tablo II'nin sol tarafında görüldüğü gibi ışımalı geçişlerle karakterize edilebilen, LS etkileşmesi sonucu dipol geçişler yapabilen hâller ile daha yüksek geçişler (higherpole transitions) yapabilen hâllere kararlı hâller denir ki bu hâllerin en küçük yarı ömürleri $\sim 10^{-9}$ sn mertebesinde dir. Ayrıca yine Tablo II'nin sağ tarafında görülen ışımaz geçişlerle karakterize edilen hâllerin yarı ömürleri $\sim 10^{-10}$ sn mertebesinde dir.

Tablo II. Atomik hâllerin bozunma şekillerine göre sınıflandırılışı | 50 | .

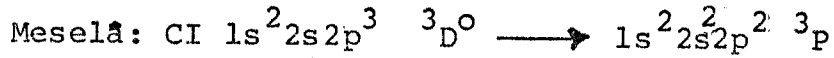
Bağlı Hâller

Işımalı Geçişler

1) "Normal" uyarılmış hâller:

LS etkileşmesinin izin verdiği elektrik dipol geçişleri;

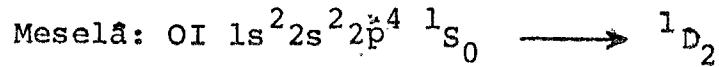
$$\tau \sim 10^{-8} - 10^{-9} \text{ sn};$$



2) Çok uzun ömürlü uyarılmış seviyeler:

a) Çoklu-kutup (higher-pole) geçişleri,

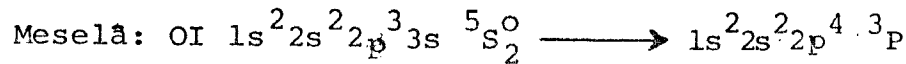
$$\tau \sim > 1 - 10^4 \text{ sn};$$



veya

b) Rölativistik etkinin girmesiyle izin verilmiş geçişler:

$$\tau \sim 10^{-3} - 10^{-6} \text{ sn};$$

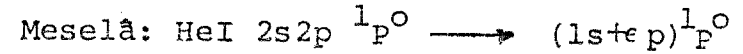


Bağlı Olmayan Hâller

Işımasız Geçişler

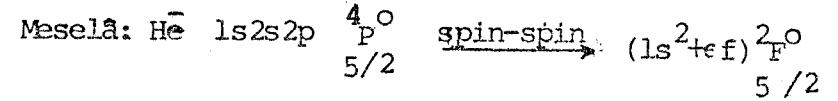
1) Coulombik kendiliğinden iyonlaşma

$$\tau \sim 10^{-10} - 10^{-15} \text{ sn};$$



2) Doğrudan rölativistik kendiliğinden

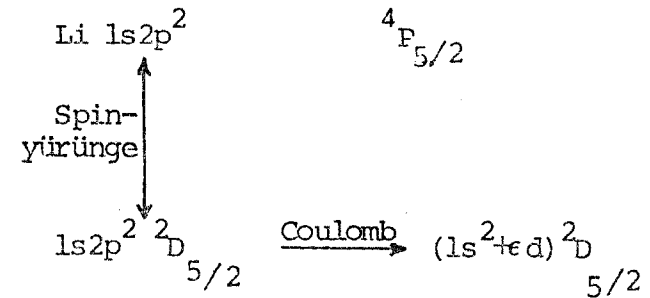
iyonlaşma $\tau \sim 10^{-4} - 10^{-7} \text{ sn};$



3) Rölativistik etkinin sebep olduğu Coulombik

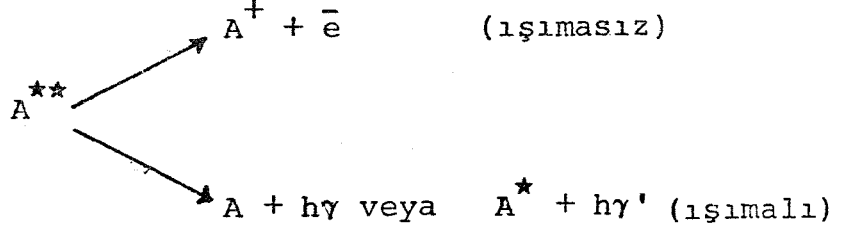
kendiliğinden iyonlaşma: $\tau \sim 10^{-5} - 10^{-7} \text{ sn};$

Meselâ:



meleriyle kendiliğinden bozunabilenler, doğrudan rölativistik etkileşmelerle kendiliğinden bozunabilenler ve rölativistik etkileşmelerin sebep olduğu Coulomb etkileşmeleriyle kendiliğinden bozunabilen hâllerdir ki bunlara da kararlı olmayan hâller denir. Bu sınıfa giren hâllerin en küçük yarı ömürleri $\sim 10^{-15}$ sn mertebesindedir.

Sözkonusu geçişleri yapabilen YB hâller, elektron vererek bozunabildikleri gibi, ışımali olarak da atomik sistemin yeni bir konumuna geçebilirler [51]. Bu ifadeyi aşağıdaki gibi gösterebiliriz.



Bu geçişlerden ışımasız olanlar elektronlar arasındaki Coulomb etkileşmesi sebebi ile meydana gelirler [51].

Bilindiği gibi hafif elementler için YB hâllerin yapabildikleri ışımasız geçiş ihtimalleri optik geçiş ihtimalinden çok daha büyüktür [38,52]. Herhangi bir atomun ışımali geçiş yapma ihtimali Z çekirdek yükünün artmasıyla artar, fakat buna karşılık ışımasız geçiş yapma ihtimalleri Z çekirdek yükünün artmasıyla hemen hemen hiç değişmeyip sabit kalır, bu yüzden çok iyonlaşmış sistemler için ($Z \sim 20$) ışımali geçiş yapma ihtimali ile, YB hâllerin ışımasız geçiş yapma ihtimalleri aynı mertebededir [53].

Coulomb etkileşmesi yolu ile meydana gelen tipik YB hâllerin geçiş ihtimalleri $10^{13} - 10^{15} \text{ sn}^{-1}$ mertebesindedir. Verilen bir kesikli hâli sürekli hâle bağlayan Coulomb operatörünün matris elemanı sıfır olursa, YB hâl yerine kendiliğinden iyonlaşma yapmayan çok uzun ömürlü

(metastable) bir hâl ifade edilmiş olur[51]. YB hâllerin ortalama ömürleri $10^{-15} - 10^{-13}$ sn mertebesinde olduğu halde "metastable" hâllerin ortalama ömürleri $\sim 10^{-5}$ sn mertebesinde dir.

"Metastable" haller ya daha düşük bir atomik enerji seviyesine ışımali geçiş yaparak ya da zayıf mağnetik etkileşmeler yolu ile kendiliğinden iyonlaşarak bozunurlar. Bu sebepten dolayı bazı araştırmacılar bunları YB hâller olarak da kabul ediyorlar[51].

İkili veya daha çok uyarılmış hâllerin ışımasız geçişleri, enerjinin, toplam açi momentumunun, spinin ve paritenin korunumundan elde edilen seçim kurallarına uygun olarak meydana gelir. Şayet bu korunum kanunlarının biri veya daha fazlası sağlanmazsa bu hâl, ışımasız olarak geçiş yapamayacaktır[54].

YB hallerin ışımasız geçiş ihtimalleri aşağıdaki formülle hesaplanabilir [39,55].

$$P_{ij} = \frac{|\langle \Psi_i | \sum_{k < \ell} \frac{1}{r_{k\ell}} | \Psi_j \rangle|^2}{\langle \Psi_i | \Psi_i \rangle \langle \Psi_j | \Psi_j \rangle} \quad (\text{III.1})$$

Burada Ψ_i ve Ψ_j sırasıyla geçişten önceki ve sonraki hâllerin dalga fonksiyonlarını, $r_{k\ell}$ ise k ve ℓ indisli elektronlar arasındaki mesafeyi göstermektedir ve toplam mümkün olan bütün farklı elektronlar arası mesafeler üzerinden alınmaktadır.

YB hâllerin ışımasız geçişlerini kontrol eden seçim kuralları [56] ; $\Delta J = 0$ ve $\Delta \pi = 0$ dir. Burada ΔJ -toplam açi momentumundaki

$\Delta\pi$ de paritedeki deęişmeyi göstermektedir. Eęer $L = S$ etkileşmesi varsa yörünge ve spin kuvantum sayılarının da deęişmemesi yani $\Delta L =$ ve $\Delta S = 0$ şartlarının da sağlanması gerekir. Birçok durumlarda özellikle hafif elementler için hâllerin spin yarılımları çok elektronlulardan daha azdır. Bu şartlar altında, herhangi bir YB hâlin ışımaz geçişi için sadece L, S ve paritenin korunumunu gerektiren seçim kuralları önemli olur. YB hâller ışımaz olarak (iyon + elektron) son durumuna geçiş yaptıkları zaman, dedektörlerle, yayınlanan elektronun spin ve açı momentumunu belirlemek mümkün olmadığı için, ilk YB hâl ile son iyon hâli arasındaki seçim kuralları aşağıdaki gibi tesbit edilebilir.:

a) İlk ve son hâllerin her ikisi de S simetrisinde (yani $L=0$) deęil ise, geçiş L deęerleri ve paritedeki sınırlamalar tarafından yasaklanmaz.

b) İlk veya son hâlin herhangi biri S simetrisine sahip ise,
1) Hâllerin pariteleri aynı ise dięer hâl bir S, D, G,.... durumundan birinde olmalıdır.

2) Eęer her iki hâlin paritesi farklı ise dięer hâl bir P, F, H, .. durumundan birinde olmalıdır.

c) Spin kuralı iki hâlin $2S + 1$ katsayıları arasındaki farkı l olmasını gerektirir.

Son kural ayrılan elektronun spin deęerinin $1/2$ olduęu gerçeğini ortaya koyuyor.

Burada herhangi bir konumun paritesi $\sum_i \ell_i$ ile hesaplanır, i elektron sayısını, ℓ_i ise i'yinci elektronun bulunduęu yörünge'nin kuvantum sayısını göstermektedir. Toplamın tek veya çift olması paritenin tek veya çift olduęuna işaret eder. Paritenin korunumu teklik ve çiftlik

lik arasındaki korunum demektir. Bu yüzden m̄selâ He atomunun $2p^2(3P)$ uyarılmış seviyesinden He^+ iyonunun temel enerji hali olan $1s(2S)$ seviyesine kendiliğinden iyonlaşması, $2p^2(3D)$ seviyesinden aynı son seviyeye olan geçiş serbest ise (bl) kuralından dolayı yasaklanmıştır.

Bu çalışmada Li atomu için hesaplanan /37/ $2S$ rezonans durumlarının dalga fonksiyonları kullanılarak ve taban durumu için bulunan dalga fonksiyonunun, Li^+ iyonun $(1s^2)$ taban durumu ile $(2s)$ durumunda bulunan elektronlar karşılık gelebileceği düşünülerek (III.1) formülü yardımı ile bu YB hâllerin bu taban durumuna geçiş ihtimalleri . yani kendiliğinden iyonlaşma ihtimalleri hesaplandı. Bulunan değerler Tablo III.de gösterilmiştir.

Bu tablodan da görüldüğü gibi Li atomunun $2S$ YB hâllerinin ışımsız olarak taban durumuna geçiş ihtimalleri $10^{13} - 10^{16} \text{ sn}^{-1}$ mertebesinde dir.

Geçiş ihtimallerinin dalga fonksiyonlarına çok hassas olmalarından dolayı, tam doğru değerler verebilmek için dalga fonksiyonlarını çok hassas hesaplamak gerekir. Şimdiye kadar geliştirilmiş teorilerle atomik sistemlerin elektron sayılarının artmasıyla YB hâllerinin dalga fonksiyonlarını hassas olarak bulmak oldukça zordur. Geçiş ihtimallerinin mertebeleri bile bazı çalışmalarda birbirini tutmamaktadır. Zaten doğrudan yaklaştırma metodları ile yapılan çalışmalarda değerlerde hatanın fazla olması, sözkonusu hâllerin karakteristik özelliklerinden ortaya çıkmaktadır. Üstelik rezonans durumları için hassas enerji değerlerinin verilebildiği çalışmalarda dahi dalga fonksiyonlarının çok iyi belirlendiği söylenemez. Bu sebepler dolaylı geçiş ihtimallerinin hassas olarak hesaplanmasına çok büyük ihtiyaç vardır. Bu yüzden Li atomunun $2S$ rezonans enerjileri bulunur

Tablo III. Li atomunun ikinci iyonlaşma eşiğinin altında yer alan bazı 2S YB hâllerinin kendiliğinden iyonlaşma ihtimalleri.

İlk Konum	Kendiliğinden iyonlaşma		Başka Çalışmalar	
	İhtimali* (sn^{-1})	Deney		Teor
$1s2s^2$	2×10^{15}	$(7.57 \pm 4.55) \times 10^{13} / 57 /$	$3 \times 10^{14} / 58 -$	
$[(1s2s)^3 3s]$	2.5×10^{16}		$1.65 \times 10^{14} /$	
$[(1s2s)^1 3s] ?$	2.8×10^{15}			
$[(1s2s)^3 4s] ?$	3×10^{15}			
$[(1s2s)^1 4s] ?$	2.8×10^{16}			
$1s2p^2$	2.1×10^{13}		$2.8 \times 10^{12} / 5$	
$[(1s2s)^3 5s] ?$	4.5×10^{16}		$1.59 \times 10^{13} /$	
$[(1s2s)^1 5s]$	2.1×10^{15}			
$[\dots] ?$	1.1×10^{15}			

*Kendiliğinden iyonlaşma ihtimalinde l.a.z.b = $4.1336 \times 10^{16} sn^{-1}$ kullanılmıştır.

ken /37/ bilgisayar zamanı da gözönüne alındığından çok fazla sayıda fonksiyon kullanılmadığından, hâlleri temsil eden dalga fonksiyonları çok hassas olarak belirlenmemiş olabilir. Ayrıca her program hedef aldığı şeyi iyi belirlediğinden ve yukarıda sözü edilen program da rezonans enerjilerini hassas olarak hesaplamayı hedef aldığından dolayı kullanılan dalga fonksiyonlarının ve dolayısı ile hesaplanan geçiş ihtimallerinin çok hassas olduğu iddia edilemez. Ancak bu çalışmada kullanılan dalga fonksiyonlarının diğer çalışmalardaki (meselâ Kaynak 58-61) fonksiyonlardan daha hassas olduğu söylenebilir. Dolayısıyla bu çalışmada yapılan hesap sonuçlarının daha tutarlı olduğu iddia edilebilir.

Ayrıca çalışmanın bu bölümü ile Li atomunun bazı 2S rezonans hâllerinin kendiliğinden iyonlaşma ihtimalleri literatüre kazandırılmış oldu.

Çizgi-genişlikleri büyük olan enerji düzeylerinin geçiş ihtimallerinin de büyük olması gerekir. Tablo II ve Tablo III'ü karşılaştıracak olursak; kendiliğinden iyonlaşma ihtimali en büyük olan $[(1s2s)^3S 5s]$ seviyesinin çizgi-genişliği de S simetrisine sahip diğer seviyelerin genişliklerine nazaran daha büyüktür. Fakat çizgi-genişliği değeri en büyük olan $1s2p^2$ düzeyinin kendiliğinden iyonlaşma ihtimali diğer değerlere göre daha küçüktür. Bunu ancak şu şekilde açıklayabiliriz. Çizgi-genişliği, sözkonusu düzeyin sadece kendiliğinden iyonlaşma ihtimali ile değil aynı zamanda başka düzeylere olan ışımalı geçiş ihtimalleri ile de orantılıdır. Çizgi-genişliği büyük olup, kendiliğinden iyonlaşma ihtimali küçük olan düzeylerin diğer seviyelere olan ışımalı geçiş ihtimalleri büyüktür. O halde $1s2p^2$ enerji seviyesinin ışımalı geçiş ihtimali de diğer seviyelere göre daha büyüktür.

Tablo III deki deęerlerin konumlara gre deęiřmesi hakkında ise kesin bir kaide ıkartmak pek mmkn grlmyor. Yani st konumlara gidildike seviyelerin kendilięinden iyonlařma ihtimallerinin byklę hakkında kesin bir řey syleyemiyoruz.

BÖLÜM IV

REZONANS DURUMLARININ ÇİZGİ - ŞEKİLLERİ

Atomların, birinci iyonlaşma eşikleri üzerinde yer alan ve karakteristik özellikleri olan YB hâllerin ilk gözlemlendiği yıllarda (1925), bunların çizgi-şekillerinin diğer gözlenen çizgilerden farklı özellikte olmaları farkedildi. Shenstone|62|, Rice|25| ve diğerleri|26|, sözkonusu çizgilerin özelliklerini açıklayarak ait oldukları enerji seviyeleri hakkında yeni bilgiler elde etmeğe çalıştılar. Çizgi-şekillerinin teorik ve deneysel olarak araştırılması, atomların mekaniği ve özellikle elektronlar arasındaki bağlantı ve etkileşmeler hakkında geniş ölçüde bilgi sağladı|31|.

YB hâllerin bozunmasının, meydana geliş şekilleri ile aynı karakteri göstermeyeceği o yıllarda atomik soğurma spektrumunun kuantum teorisi ile gösterilmiştir|63,64|. Fakat deneysel olarak gözlenen bu çizgilerin teorik ifadeleri 1960'lı yıllara kadar doğru olarak verilemedi. 1961 yılında Fano |9| tarafından geliştirilen ve "Konum Etkileşmesi" denilen yeni bir teori ile deneylerde gözlenen şekillere uydurularak (fit edilerek) YB hâllerinin teorik çizgi-şekilleri elde edilmiştir.

Birinci iyonlaşma limitinin üzerindeki seviyeler geçiş için her iki elektronun da uyarılmasını gerektirdiğinden iki-elektronlu atomlardaki kendiliğinden iyonlaşmalar özellikle ilgi çekicidir|30|.

Fano sözkonusu çalışmasında elektronlar arasındaki etkileşme sürekli bölge ile kesikli hâllerin etkileşmesi olarak kabul ederek atomik bir sistemin toplam dalga fonksiyonunu

$$\Psi = a\phi + \int dE' b_{E'} \psi_{E'} \quad (IV.1)$$

kesikli ve sürekli kısımların toplamı şeklinde olarak

$$\sigma(E) = \frac{|\langle \Psi | T | i \rangle|^2}{|\langle \psi | T | i \rangle|^2} = \frac{(q + \epsilon)^2}{1 + \epsilon^2} \quad (IV.2)$$

ifadesinin çizgi-şeklini vereceğini belirtmiş ve bu ifade literatürde "Fano line-shape" olarak geçmiştir. Burada pay, toplam dalga fonksiyonundan herhangi bir i hâline, payda ise dalga fonksiyonun sürekli kısmını ihtiva eden kısımdan herhangi bir i hâline olan geçiş ihtimallerini göstermektedir. q'yu da

$$q = \frac{\langle \phi | T | i \rangle}{\pi V_E^* \langle \psi_E | T | i \rangle} \quad (IV.3)$$

olarak ifade etmiş ve çözümü kolay olmayan q için pozitif ve negatif değerler vererek rezonans çizgi-şekillerini elde etmiştir. Burada $\langle \phi | T | i \rangle$ matris elemanı

$$\phi = \phi + P \int dE' \frac{V_E \psi_{E'}}{E - E'} \quad (IV.4)$$

şeklinde tarif edilen, dalga fonksiyonunun değiştirilmiş (modified) kesikli hâli (bazı araştırmacılar [65] bunu toplam dalga fonksiyonu

olarak da alır) ile i sürekli hâli arasındaki geçiş operatörü elemanı, $V_E^* = \langle \psi | H | \phi \rangle^*$ toplam Hamiltonien'in dalga fonksiyonunun kesikli ve sürekli kısımları arasındaki beklenen değeri, T iki sürekli hâl arasındaki geçiş operatörü, $\langle \psi_E | T | i \rangle$ iki sürekli hâl arasındaki geçiş operatörü elemanıdır. "Fano çizgi-şekli" ile ifade edilen şekil, q 'nun pozitif değerleri için Blatt ve Weisskopf'un [66] çekişirdek fiziğinde rezonans enerjisi yakınında tesir kesiti (cross-section) ifadesinin enerjiye göre davranışı ile aynıdır.

Herhangi bir enerji seviyesinin yaşama süresi ve tesir kesiti, geçiş ihtimâli cinsinden ifade edilebildiği için [67]; Fano'nun geçiş ihtimâlleri oranından hareket ederek bulduğu çizgi-şekli ifadesi, tesir kesiti veya yaşama süreleri kullanılarak da bulunabilir. Herhangi bir enerji seviyesinin birim zamanda mümkün olan diğer bütün seviyelere olan geçiş ihtimâli, seviyenin yaşama süresi ile ters orantılı olduğundan, çizgi-şeklinin yeni bir ifadesi de yaşama süreleri cinsinden çıkarılabilir.

Tesir kesitinin

$$\sigma = (2\pi)^2 \frac{\epsilon_1 \epsilon_2}{F} S_f \bar{S}_i \delta(P_f - P_i) | \langle f | M | i \rangle |^2 \quad (IV.5)$$

ifadesi ile yaşama süresinin tersinin

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{2\pi} S_f \bar{S}_i \delta(P_f - P_i) | \langle f | M | i \rangle |^2 \quad (IV.6)$$

ifadelerinin geçiş ihtimâline aynı şekilde bağlı olduğu görülüyor [67]. Buradaki $\delta(P_f - P_i) \langle f | M | i \rangle$ ifadesi bütün uzay ve zaman üzerinden entegre edilen geçiş ihtimaline eşittir; yani

$$\delta (P_f - P_i) \langle f | M | i \rangle = \langle f | R | i \rangle \quad (IV.7)$$

dir. P_f ve P_i ise sistemin son ve ilk durumlarının momentumu olup $\delta (P_f - P_i)$ momentumun korunumunu, S_f ve S_i 'ler olay çeşidine göre hâllerin sipinleri ve polariteleri üzerinden toplam ve momentum üzerinden integralleri gösterir.

Bütün deneyler ve gözlemler sonlu bir zamanda yapıldığından geçiş ihtimâline karşılık gelen $|\langle f | R | i \rangle|^2$ anlamsız olup bunun yerine birim zamandaki geçiş ihtimâlleri ölçülebilir. Bu yüzden yaşama süreleri kullanılarak yeni bir çizgi-şekli ifadesinin bulunabileceği düşüncesi daha da kuvvetlenmiş oluyor.

Gerek "Fano çizgi-şekli" ifadesinden ve gerekse tesir kesitini çizgi-şeklini vermesinden faydalanılarak bu çalışmada da yaşama süreleri cinsinden yeni bir çizgi-şekli ifadesi çıkarıldı.

Şimdi YB hâllerin meydana geliş şekilleri ve kendiliğinden iyonlaşma ile bu hâllerin nasıl bozduklarını gözönüne alarak seviyeleri çizgi-şekillerinin nelere bağlı olabileceğini açıklamaya çalışalım.

Herhangi bir atomdaki YB hâllerin, birinci iyonlaşma eşiğinin üstünde ve sürekli bölge içine gömülmüş, çok kısa yarı-ömürlü, kararsız hâller oldukları bilinmektedir. Çok kısa bir süre içinde elektronlardan biri sürekli bölge içine iyonlaşacağından bu uyarılmış elektronlar arasındaki etkileşme, sürekli bölge ile kesikli seviyelerin etkileşmesi olarak düşünülür [9]. Konumların Etkileşmesi diye adlandırılan bu etkileşme, rezonans piklerinin yükselmesi veya düşmesi ile çizgilerin genişlemesi, yani simetrik olmayan anormal rezonans çizgilerin meydana gelmesine sebep olur [9,31]. Bu etkileşmelerin yokluğunda çizgi-şekli, bugün bir sürekliliğin üzerine simetrik bir soğurma veya vavınlanma

spektrumunun eklenmesinden ibaret olacaktı. Sürekli bölge ile kesikli çizgiler arasındaki etkileşme, genellikle YB hâllerin çizgilerinde katkıların basit toplamını yok eder ve dikkati çeken asimetrilerin ortaya çıkmasına sebep olur[33]. Ayrıca bu etkilerin (konum etkileşmeleri) foton soğurma spektrumlarında, rezonanstan düşük enerjili tarafta yapıcı, diğer tarafta yıkıcı etkiler gösterdiği 1935 yılında Ar spektrumlarında Beutler[27] tarafından farkedildi. Daha sonraki yıllarda Madden ve Codling de He, Ne ve Ar atomlarının YB hâllerini göledikleri deneylerinde bu etkileri farketmişlerdir[30].

Bütün bu etkiler dikkate alındığında sözkonusu hâllerin çizgişekli, sürekli bölgeyi temsil eden dalga fonksiyonunu doğrudan dahil etmeden de ifade edilebilir.

Herhangi bir YB hâle sürekli bölgenin etki etmediği düşünülecek olursa; bunun çizgişekli, bağlı hâllerin çizgişekillerinin uyduğu Lorentz dağılımı cinsinden

$$Y_1(E_i) = \frac{\Gamma^2/2}{(E_i - E_R)^2 + \Gamma^2/4} \quad (IV.8)$$

şeklinde ifade edilebilir. Burada E_R , rezonans enerjilerini, Γ , bu seviyenin çizgi-genişliğini, E_i de rezonans enerjisi yakınındaki değişken enerjileri göstermektedir.

Fakat biz biliyoruz ki gerçekte bu hâller, bağlı hâller gibi davranmaz. Bunlara etki eden sürekli bölgenin de katkısı vardır. Bazı hesaplarda sürekli kısmın etkisi genellikle ihmâl edildiğinden sürekli bölgenin katkısının rezonans seviyelerini δ (Γ) kadar kaydırdığını düşünüp meydana gelecek simetrik dağılım

$$y_2(E_i) = \frac{\Gamma^2/2}{[E_i - [E_R + \delta(\Gamma)]]^2 + \Gamma^2/4} \quad (IV.9)$$

şeklinde ifade edilebilir. Burada $\delta(\Gamma)$ çizgi-Genişliği cinsinden rezonans enerjisindeki bir miktar kaymayı göstermektedir. Denklem (IV. ve (IV9)'u ifade eden grafikler Şekil 2'de aynı eksenler üzerinde görülmektedir. Gözlenen çizgi-şeklini, sürekli bölgenin etkisinin olmadığı simetrik çizgi-şekli cinsinden

$$y(E_i) = Q \cdot y_1(E_i) \quad (IV.10)$$

şeklinde düşünecek olursak; Q , bağlı hâllerin çizgi-şekillerini YB hâllerin çizgi-şekline dönüştüren bir operatördür. Başka bir ifade ile Q , sürekli bölgenin katkısını ifade eden bir operatör olmalıdır. (IV.2) bağıntısına uygun olarak

$$Q = y_2^{-1}(E_i) \quad (IV.11)$$

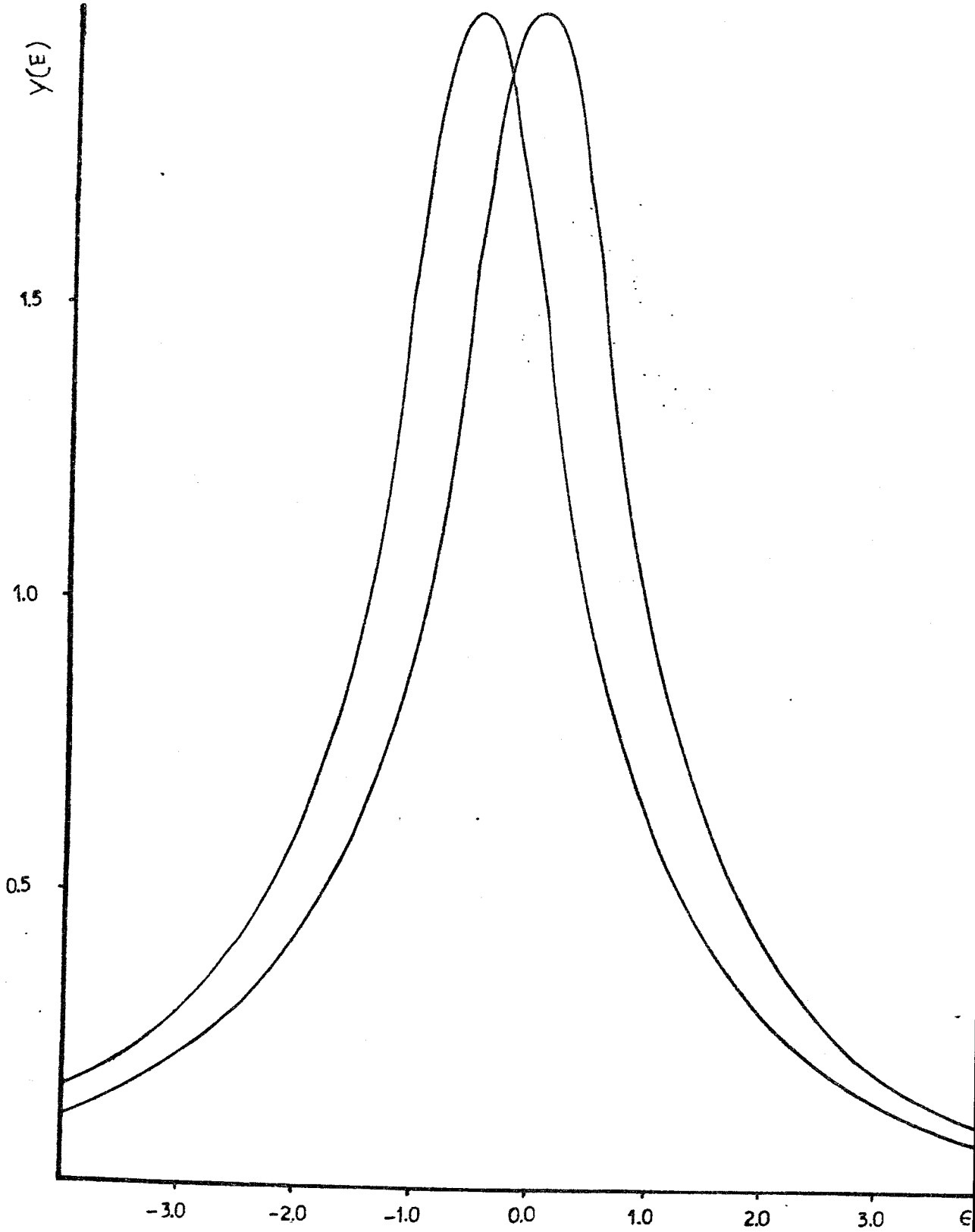
şeklinde olmalıdır. Böylece YB hâllerin çizgi-şeklini

$$y(E_i) = y_2^{-1}(E_i) \cdot y_1(E_i) \quad (IV.12)$$

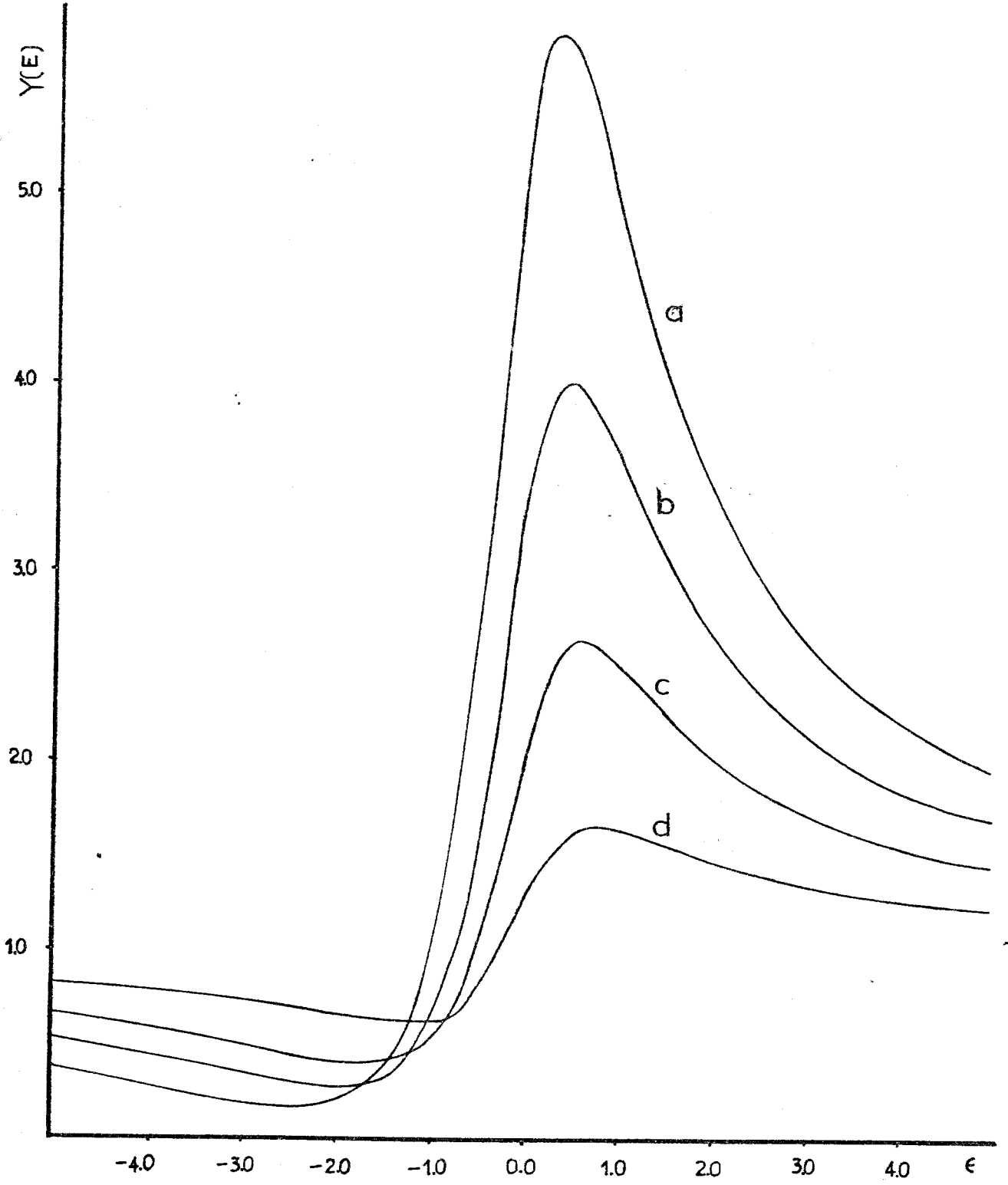
şeklinde ifade edebiliriz. $y_1(E_i)$ ve $y_2(E_i)$ değerleri yerlerine konacak olursa; YB hâllerin çizgi-şekli ifadesi

$$y(E_i) = \frac{(\epsilon \pm a)^2 + 1}{\epsilon^2 + 1} \quad (IV.13)$$

şeklinde elde edilir. Burada $\epsilon = (E - E_R) / (\Gamma/2)$ ve $a = \delta(\Gamma) / (\Gamma/2)$ temsil edilmişlerdir. $\delta(\Gamma)$ yerine çizgi-Genişliği cinsinden değerler



Şekil. 2 Birinin rezonans enerjisi, diğerlerinkine göre $\delta(\Gamma)$ kadar kaymış iki Lorentz dağılım eğrisinin aynı eksen üzerinde gösterimi.



Şekil. 3 (IV.13) Denklemnin çeşitli a değerleri için verdiği çizgi şekilleri. a , $a=2$; b , $a=3/2$; c , $a=1$; d , $a=1/2$ değerleri için çizilmiştir.

mesine rağmen [19] çizgi-şeklini, gözleendiği şekilde vermemektedir.

Z.K.T'nin spektrumu (Z.K.S), $\tau = 1/\sqrt{\sigma}$ karakteristik yaşama süresinin enerjiye göre değişiminden elde edilir [69]. τ yaşama süresinin birinci iyonlaşma limitinin üzerindeki enerjilere göre değişimi grafiğinde maksimum noktalar, rezonans durumuna karşılık gelir, çürükü; sürekli bölge içinde bulunan rezonans durumları çevrelerindeki enerjiye göre maksimum yaşama süresine sahiptir.

(IV.14) denklemini kullanılarak sistemin herhangi bir E_i enerjisi için H'nin toplam dalga fonksiyonundaki beklenen değerini

$$\langle H \rangle_{E_i} = \langle \Psi | H | \Psi \rangle_{E_i} = |a(E_i)|^2 \langle \phi | H | \phi \rangle_{E_i} + \langle \psi | H | \psi \rangle_{E_i} + \delta_i \quad (IV.15)$$

ve bu denklemin $E_i = E'_i$ deki beklenen değerini

$$\langle H \rangle_{E'_i} = \langle \Psi | H | \Psi \rangle_{E'_i} = |a(E'_i)|^2 \langle \phi | H | \phi \rangle_{E'_i} + \langle \psi | H | \psi \rangle_{E'_i} + \delta'_i \quad (IV.16)$$

şeklinde ifade edebiliriz. Burada

$$\delta_i = a(E_i) \langle \phi | H | \psi \rangle_{E_i} + a^*(E_i) \langle \psi | H | \phi \rangle_{E_i} \quad (IV.17)$$

$$\delta'_i = a(E'_i) \langle \phi | H | \psi \rangle_{E'_i} + a^*(E'_i) \langle \psi | H | \phi \rangle_{E'_i}$$

kısaltmaları yapılmıştır. Yukardaki açıklamalara ve Fano çizgi-şekline göre sürekli bölge içine düşen beklenen değerlerin birbirlerine göre oranının çizgi-şekli hakkında bilgi vermesi beklenir. $E'_i = E_R$ aldıktan sonra

$$q_i = \frac{\langle H \rangle_{E_i}}{\langle H \rangle_{E_R}} = \frac{|a(E_i)|^2 A_i + \delta_i + B_i}{|a(E_R)|^2 A_R + \delta_R + B_R} \quad (IV.18)$$

şeklinde ifade edebiliriz, Burada da

$$A_i = \langle \phi | H | \phi \rangle_{E_i}, \quad B_i = \langle \psi | H | \psi \rangle_{E_i} \text{ ve} \quad (\text{IV})$$

$$A_R = \langle \phi | H | \phi \rangle_{E_R}, \quad B_R = \langle \psi | H | \psi \rangle_{E_R}$$

yi temsil etmektedir. ψ , dalga fonksiyonunun sürekli kısmını temsil ettiğinden δ_i , δ_R , B_i ve B_R yi kesin olarak hesaplamak mümkün değildir. Ancak bunların katkılarını bir değişkene bağlı olarak ve bu değişkeni değiştirmek suretiyle çizgi-şekli elde edebiliriz. Bu yüzden bunların katkılarını

$$\delta_i + B_i = \alpha E_i \quad (\text{IV.20})$$

$$\delta_R + B_R = \alpha E_R$$

şeklinde düşünerek çizgi-şekli ifadesini

$$q_i = \frac{|a(E_i)|^2 \langle H \rangle_{\phi_{E_i}} + \alpha E_i}{|a(E_R)|^2 \langle H \rangle_{\phi_{E_R}} + \alpha E_R} \quad (\text{IV.21})$$

olarak yazabiliriz. Yukardaki denklemde $|a(E_i)|^2$ ve $|a(E_R)|^2$ ifadeleri yerlerine konursa;

$$q_i = \frac{\frac{(\Gamma/2\pi) \langle H \rangle_{\phi_{E_i}}}{(E_i - E_R)^2 + \Gamma^2/4} + \alpha E_i}{\frac{2}{\pi\Gamma} \langle H \rangle_{\phi_{E_R}} + \alpha E_R} \quad (\text{IV.22})$$

elde edilir.

$$W = \frac{\Gamma/2\pi}{(E_i - E_R)^2 + \Gamma^2/4} \quad (\text{IV.23})$$

$$D = \frac{1}{\frac{2 \langle H \rangle_{\phi_{E_R}}}{\pi\Gamma} + \alpha E_R} \quad (\text{IV.24})$$

kısaltmaları yapılarak

$$q_i = D[W \langle H \rangle_{\phi_{E_i}} + \alpha E_i] \quad (\text{IV.25})$$

elde edilir. Buradaki $\langle H \rangle_{\phi_{E_i}}$ ve $\langle H \rangle_{\phi_{E_R}}$ yerine Z.K.S'den aynı

birimde olan $\sqrt{\sigma_{E_i}}$ ve $\sqrt{\sigma_{E_R}}$ değerlerini kullanabiliriz.

(IV.25) denklemindeki α , çizgi-şeklinin karakteristiğine doğrudan tesir eden bir parametredir. α değeri değiştirilmek suretiyle gözlenen çizgi-şekli bulunabilir.

(IV.25) denklemi gözlenen spektrumların şiddeti ile doğrudan alakalıdır. Şiddet parametresi olarak da $E_R/\sqrt{\sigma_R}$ çarpanını (IV.25) denklemine koyarak

$$q_i = \frac{E_R}{\sqrt{\sigma_R}} \cdot D \cdot [W \sqrt{\sigma_{E_i}} + \alpha E_i] \quad (IV.26)$$

denklemini elde ederiz.

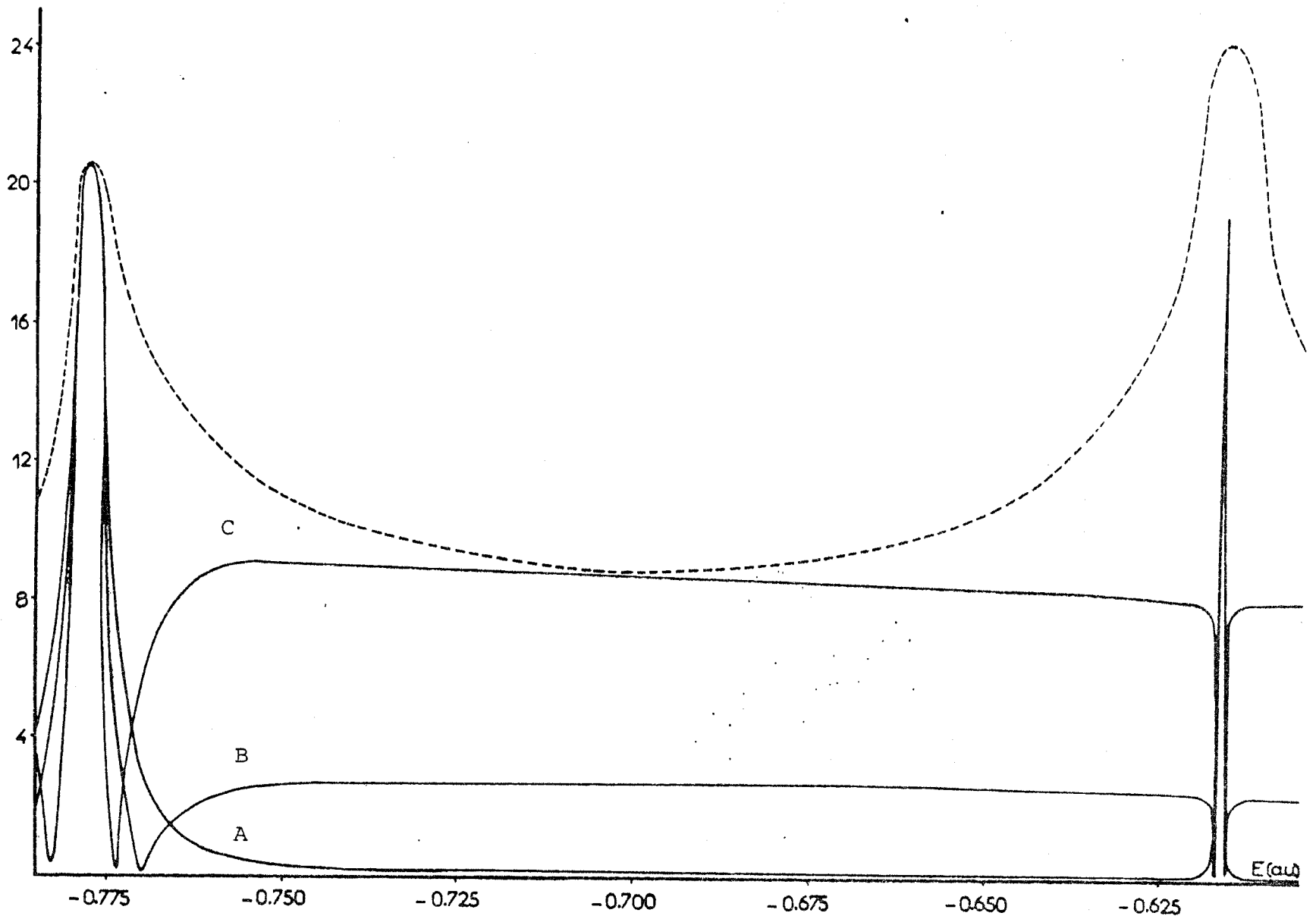
Bilindiği gibi şiddet her zaman pozitif bir kemiyettir. Dolayısıyla Denk. (IV.26) ile verilen ifadenin mutlak değeri bize hakiki çizgi şeklini verecektir, yani;

$$q_i = \left| \frac{E_R}{\sqrt{\sigma_R}} \cdot D \cdot [W_i \sqrt{\sigma_{E_i}} + \alpha E_i] \right| \quad (IV.27)$$

olmalıdır.

Denklem (IV.27), YB hâllerin çizgi-şeklini, toplam dalga fonksiyonunda sürekli bölgeyi temsil eden kısmını doğrudan kullanmadan veren yeni bir ifadedir. Yukarıda da belirtildiği gibi α katsayısı, çizgi-şekline doğrudan tesir eder ve çizgi-şeklinin karakteristiğini tayin eder. α 'nın büyüklüğü bize sürekli bölgenin etkisi ve katkısı hakkında fikir verir (IV.27) ile ifade edilen rezonans çizgi-şeklini sözü edilen α katsayısına göre değişimi, He atomunun $(2s^{21})S$ ve $(2p^2)$ hâlleri için Z.K.S ile birlikte şekil 4'de gösterilmiştir.

Bu şekilden de görüldüğü gibi α 'nın değerindeki küçük değişim çizgi-şeklinde büyük ve önemli değişiklikler meydana getirmektedir. α 'nın değeri arttıkça YB hâllerin çizgi-şekillerinin belirgin ve diğer şekillerden ayarıcı özelliği olan asimetriklik ve minimumların meydana gelişi de artmakta ve belirginleşmektedir. Sürekli bölgenin katsayısını α parametresi tayin ettiğinden ve simetriksizliğin ve minimumların meydana gelmesine de sürekli bölgenin katkısı sebep olduğundan; α değerinin artması sürekli bölgenin artmasını göster-



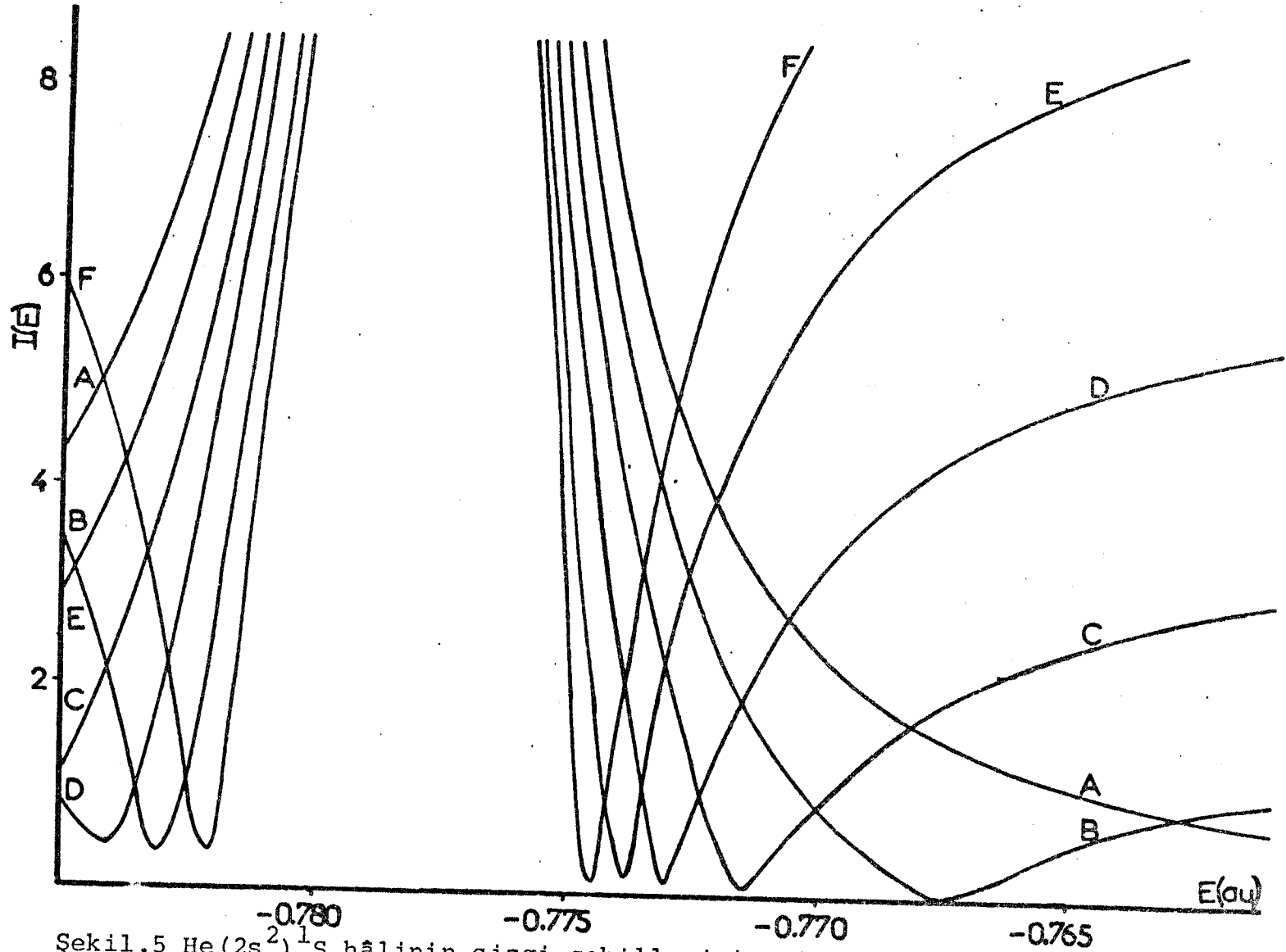
Şekil. 4 . $\text{He}(2s^2)^1S$ ve $\text{He}(2p^2)^1S$ hâllerinin çeşitli α parametrelerine göre çizgi-şekilleri. α_1 , $\text{He}(2s^2)^1S$, α_2 , $\text{He}(2p^2)^1S$ durumu için parametreler olmak üzere: A, $\alpha_1=0.0$, $\alpha_2=0.2947$; B, $\alpha_1=0.8$, $\alpha_2=13.58$; C, $\alpha_1=2.0$, $\alpha_2=35.37$ değerleri için, ke-

Şekil 5 ve 6 da ise sırayla $(2s^2)^1S$ ve $(2p^2)^1S$ hâllerinin çizgi-şekillerinin minimumlarının çeşitli α 'lara göre değişimi görülmektedir. Yukarıda da izah ettiğimize uygun olarak her iki hâl için de α 'nın değerlerinin artmasına paralel olarak minimumların daha belirgin olduğu açıkça görülmektedir. Ayrıca bu şekillerden, $(2s^2)^1S$ ve $(2p^2)^1S$ simetrisine sahip rezonans hâllerinin çizgi-şekillerini veren α parametrelerinin farklı olduğu görülmektedir. $(2p^2)^1S$ K.f hâlinin çizgi-şeklini veren α_2 parametreleri, $(2s^2)^1S$ K.f hâlinin çizgi-şeklini veren α_1 parametrelerinden daha büyüktür. Sürekli bölgedeki K.f hâllerinin, iyonlaşma eşiğine göre konumları göz önünde bulundurulduğunda $(2p^2)^1S$ 'ni $(2s^2)^1S$ 'den daha yüksek bir konumda olduğu, enerji diyagramında ise yüksek konumlara doğru çıkıldıkça enerjinin mutlak değerinin küçüldüğü görülmektedir. Denklem (IV.27) deki çizgi-şekli ifadesinde sürekli bölgenin katkısını gösteren α parametreleri enerjilerle çarpım halinde geldiğinden mutlak değerce küçük seviyelere, yani iyonlaşma eşiğinden yukarı doğru gidildikçe α parametrelerinin değerlerinin büyümesi gerekir. α_2 'nin α_1 'e göre değişimi Şekil 7 de gösterilmiştir. Bu şekilden $\alpha_2 \cong k \alpha_1$ olduğu görülmektedir.

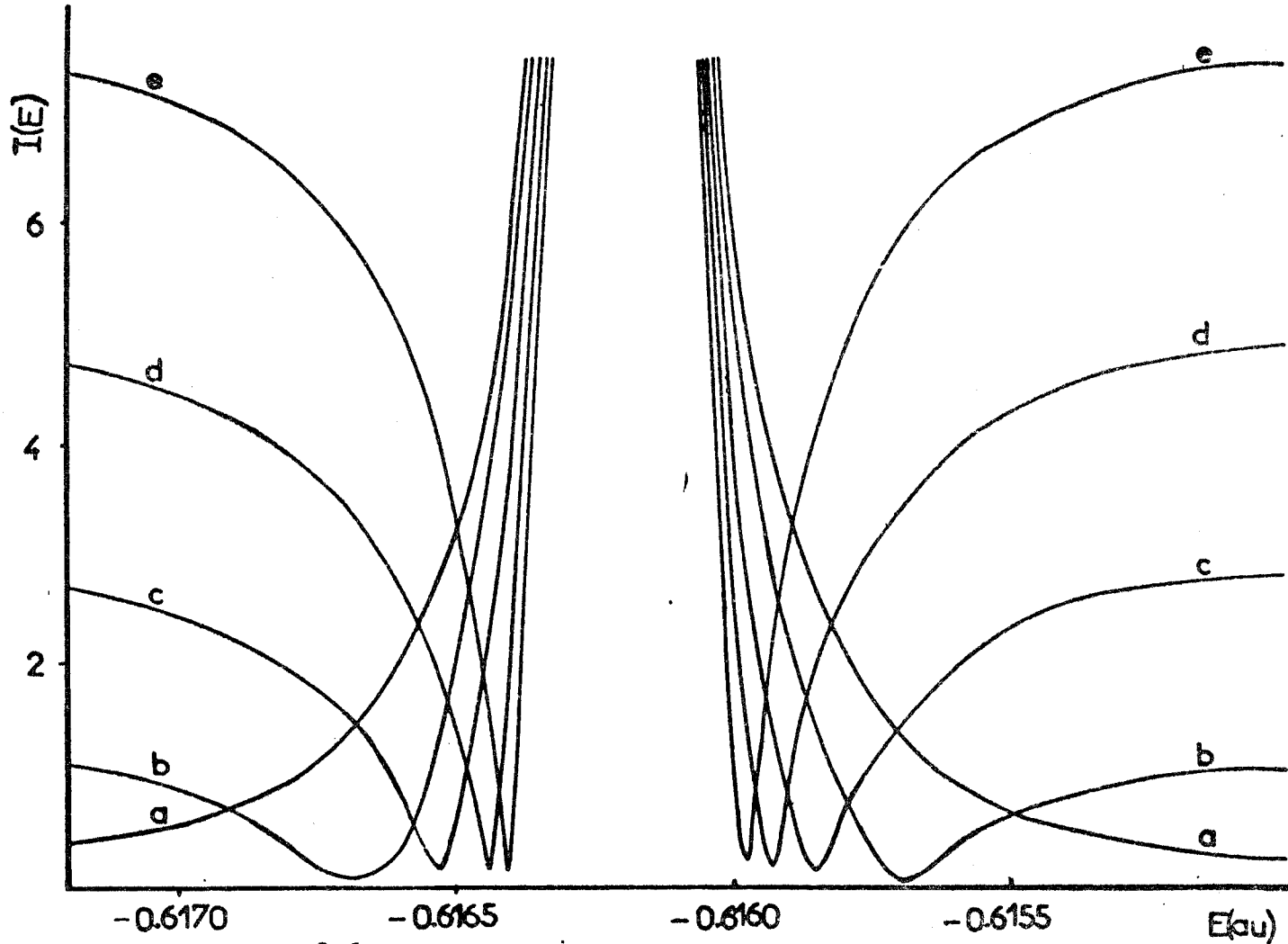
$\alpha = 0$ değeri, yani sürekli bölgenin katkısının olmadığı durum için ise ifademiz

$$q_i = \left| \frac{E_R}{\sqrt{\sigma_R}} \cdot \frac{\sqrt{\sigma_i}}{\sqrt{\sigma_R}} \cdot \frac{\Gamma^2}{4[(E_i - E_R)^2 + \Gamma^2/4]} \right| \quad (IV)$$

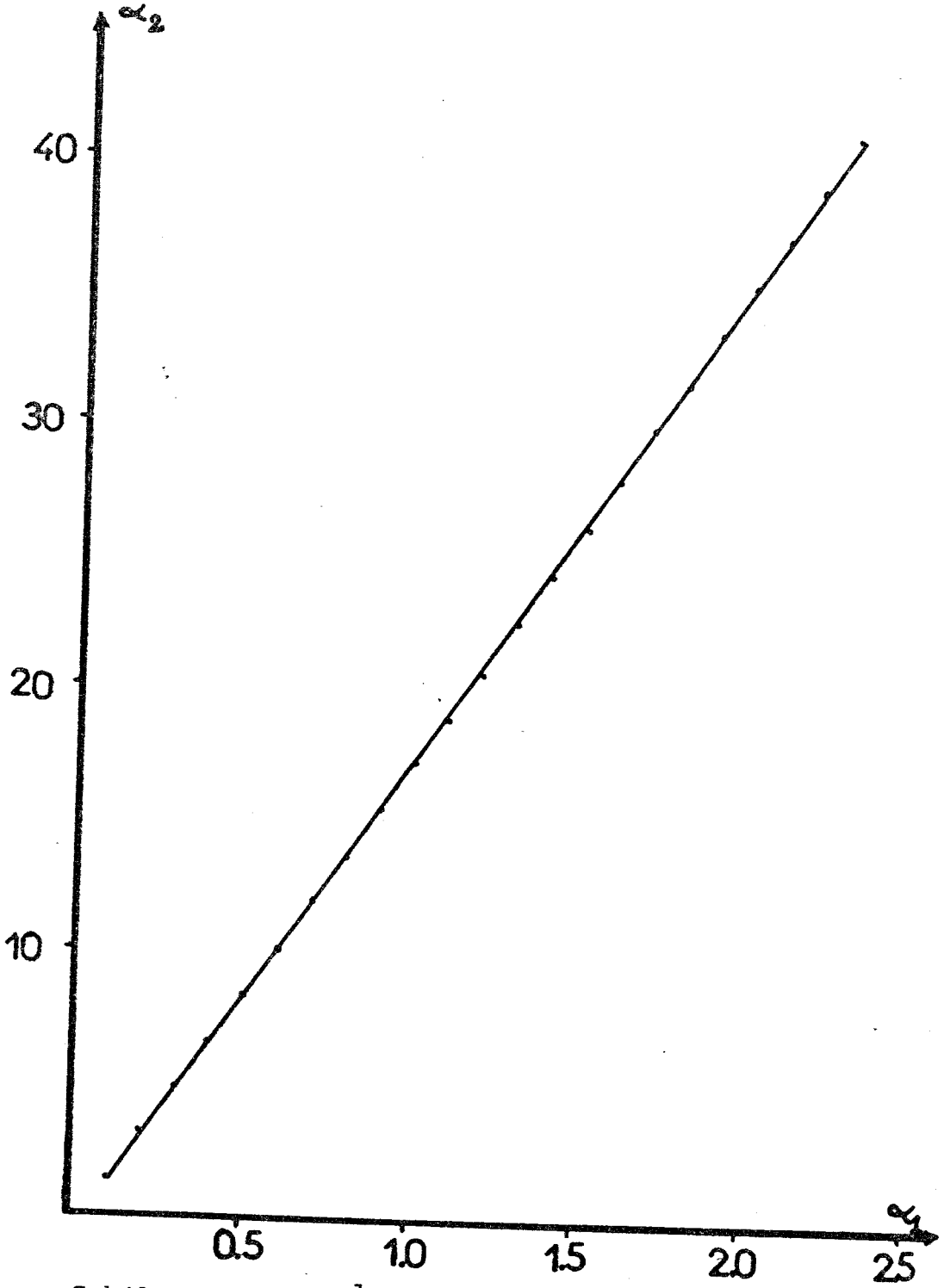
şeklinde olmaktadır. Bu ifadeden de görüldüğü gibi çizgi-şeklinin Lorentz-dağılımı ile Z.K.S nun çarpımının belli bir oranı kadar büyütmesi şekli olması gerekir. Yani şekil olarak rezonans çizgi-şekli değil de bağıl hâllerin çizgi-şekline yuması gerekir. Şekil 4, 5 ve 6 da da



Şekil.5 $\text{He}(2s^2)^1S$ hâlinin çizgi-şekillerinin minimumlarının çeşitli α parametreleri için değişimi. A, $\alpha=0.0$; B $\alpha=0.5$; C, $\alpha=1.0$; D, $\alpha=1.5$; E, $\alpha=2.0$; F, $\alpha=2.4$ değerleri için çizilmiştir.



Şekil.6. $\text{He}(2p^2)^1S$ hâlinin çizgi-şekillerinin minimumlarının çeşitli α parametrelerine göre değişimi. a, $\alpha=0.0$; b, $\alpha=8.319$; c, $\alpha=17.13$; d, $\alpha=26.14$; e, $\alpha=35.37$ değerleri için çizilmiştir.

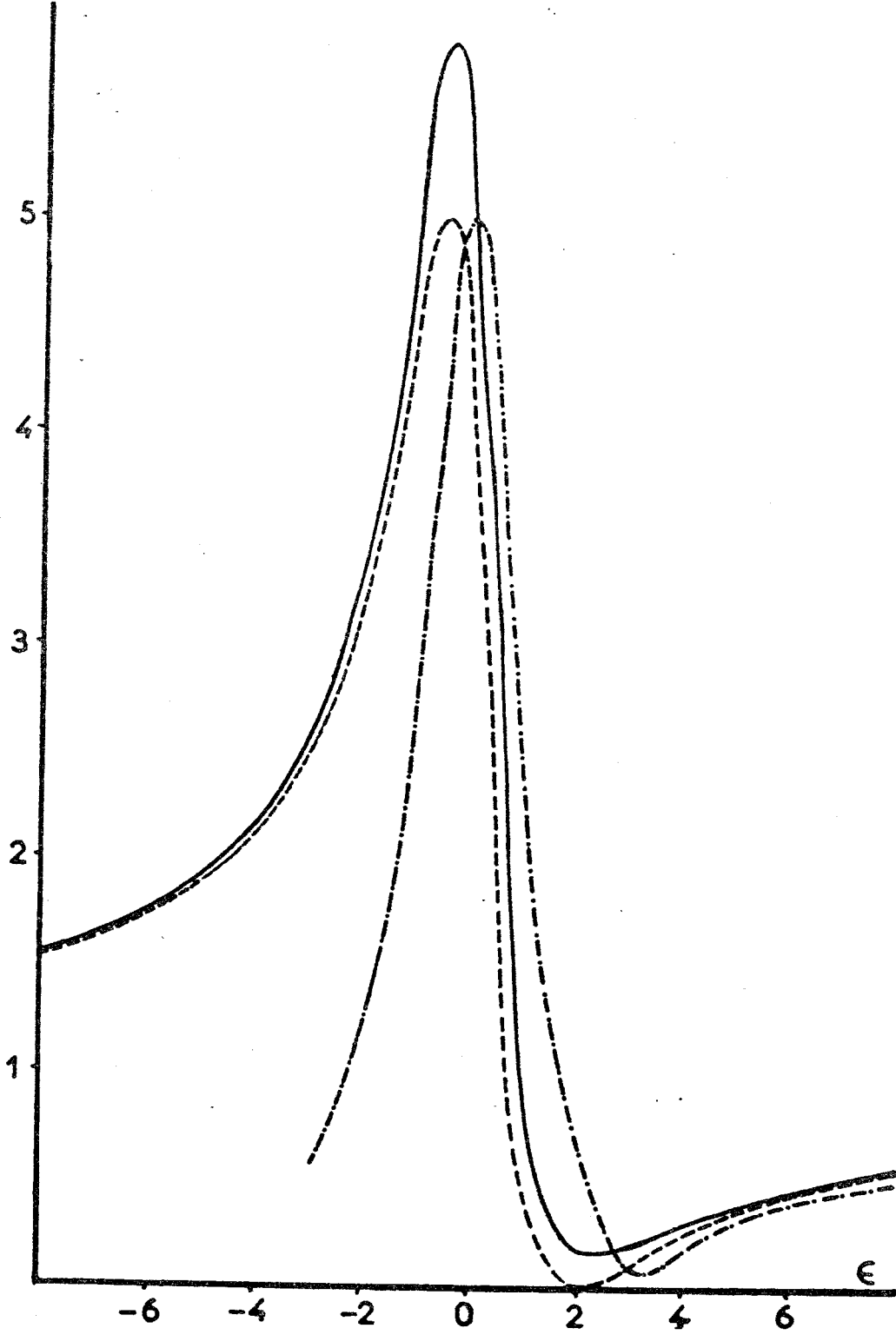


Sekil. 7 He $(2p^2)^1$ hâlinin çizgi-şekli parametrelerinin He $(2s^2)^1$ s parametrelerine göre değişimi.

rüldüğü gibi $\alpha = 0$ için rezonans çizgi-şekillerinin karakteristik özelliği olan minimumlar görülmemektedir ki bu durum ZKS nun çizgi-şekillerini benzemektedir.

Ayrıca Şekil 4,5 ve 6 da görüldüğü gibi bütün $\alpha > 0$ değerleri için rezonansın her iki tarafında minimum elde edilmemekte ve Şekil 8 de görüldüğü gibi bazı α değerlerinde yalnızca tek tarafta minimumlar elde edilmektedir. Bu şekiller DenkIV.2 ile elde edilen ve $q < 0$ için Fano çizgi-şekli ile uygunluk içindedir.

He $(2s^2)^1S$ hâli için Denklem (IV.13), Fano çizgi-şekli ve Denklem (IV.27) Şekil 8'de aynı anda gösterilmiştir. Görüldüğü gibi her üç çizgi-şekli de gözlenen karakteristikleri göstermektedir.



Şekil.8. Denk (IV.13) ve Denk. (IV.27) nin verdiği çizgi-şekilleri ile Fano çizgi-şekli. Sürekli çizgi, Denk. (IV.13) ün $a = -2$; kesikli çizgi- Fano formalizminin $q = -2$; kesikli-noktalı çizgi ise Denk. (IV.27) nin $\alpha=0.7$ değerleri için çizilmiştir. [Denk(IV.27) nin verdiği değerler Fano çizgi-şekli değerlerine normalize edilmiştir.]

E K L E R

Ek: 1 Geçiş İhtimalleri programı

00000 F O R T R A N S I O N P R O B A B I L I T Y C A L C U L A T I O N P R O G R A M

```

IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
DIMENSION CI(21),CJ(21),IN(21),JN(21),KN(21),LN(21),MN(21),NN(21),
IM(21),JM(21),KM(21),LM(21),MM(21),NM(21)
REAL*4 FUNTN1(20),FUNTN2(20)
COMMON/FACTOR/ FAC(60),DFAC(50)
COMMON/ENT/ KAP,IE1,IE2,IE3
COMMON/ENT2/ KAP1
COMMON/MNTCP/ MB,NB
COMMON/DORT/ DORTPI
COMMON/SPIN/ ISPIN
COMMON/ABKW/ AAK(8,8,8,10),ABK(8,10,2),AK(12,14,16,6)
READ(5,9) KAP1,KAP,IE1,IE2,IE3,MB,NB,MAXRI,MAXRIJ,ISPIN

```

```

9  FORMAT(16I5)
  READ(5,10) (FUNTN1(I),I=1,20)
10  FORMAT(20A4)
  READ(5,11) NDIM,V1,B,B1,B2,B3
11  FORMAT(I4,2D23.16,3D10.3)
  READ(5,12) (IN(I),JN(I),KN(I),LN(I),MN(I),NN(I),I=1,NDIM)
12  FORMAT(13(6I1))
  READ(5,13) (CI(I),I=1,NDIM)
13  FORMAT(3D23.16)
  READ(5,10) (FUNTN2(I),I=1,20)
  READ(5,11) NDEM,V2,G,G1,G2,G3
  READ(5,12) (IM(J),JM(J),KM(J),LM(J),MM(J),NM(J),J=1,NDEM)
  READ(5,13) (CJ(J),J=1,NDEM)
  WRITE(6,90) KAP1,KAP,IE1,IE2,IE3,MB,NB,MAXRI,MAXRIJ,ISPIN

90  FORMAT(/2X,"INPUT DATA FOR TRANSITION PROBABILITY CALCULATIONS:"
*//2X,"KAP1=",I2," KAP=",I2," IE1=",I2," IE2=",I2," IE3=",I2,
* " MB=",I2," NB=",I2," MAXRI=",I2," MAXRIJ=",I2," ISPIN=",I2)
  WRITE(6,50)
50  FORMAT(/2X,120(" "))
  WRITE(6,100) (FUNTN1(I),I=1,20)
100  FORMAT(/2X,20A4," FIRST FUNCTION")
  WRITE(6,110) NDIM,V1,B,B1,B2,B3
110  FORMAT(/2X,"NDIM=",I2," V1=",D23.16," B=",D23.16," B1=",D10.3,
* " B2=",D10.3," B3=",D10.3)
  WRITE(6,120) (IN(I),JN(I),KN(I),LN(I),MN(I),NN(I),I=1,NDIM)
120  FORMAT(/15(2X,6I1))
  WRITE(6,130) (CI(I),I=1,NDIM)
130  FORMAT(/3(2X,D23.16))
  WRITE(6,50)
  WRITE(6,200) (FUNTN2(I),I=1,20)
200  FORMAT(/2X,20A4," SECOND FUNCTION")
  WRITE(6,210) NDEM,V2,G,G1,G2,G3
210  FORMAT(/2X,"NDEM=",I2," V2=",D23.16," G=",D23.16," G1=",D10.3,
* " G2=",D10.3," G3=",D10.3)
  WRITE(6,120) (IM(I),JM(I),KM(I),LM(I),MM(I),NM(I),I=1,NDEM)
  WRITE(6,130) (CJ(I),I=1,NDEM)
  WRITE(6,60)
60  FORMAT(/2X,120(" ")/)
  DORTPI=4.000*3.1415926535897900
  A=1.000
  A1=B*B1+G*G1
  A2=B*B2+G*G2
  A3=B*B3+G*G3
  FAC(1)=1.000
  DO 30 I=2,57
30  FAC(I)=FAC(I-1)*DFLOAT(I-1)
  DFAC(1)=1.000
  DFAC(2)=1.000
  DO 33 I=3,45
33  DFAC(I)=DFAC(I-2)*DFLOAT(I-2)
  CALL AKBKW(A,A1,A2,A3,MAXRI,MAXRIJ,KAP,IE1,IE2,IE3)
  V12=VVR(NDIM,NDEM,CI,CJ,IN,IM,JN,JP,KA,KB,LA,LM,MN,MM,NN,NN,A,A1,
* A2,A3)
  V12=V12*V12
  GI=DORTPI/2.000*V12/(V1+V2)

```

C
C
C

SUBROUTINE AKBKW(A,AL1,AL2,AL3,MAXRI,MAXRIJ,KAP,IE1,IE2,IE3)

THIS SUBPROGRAM CALLS THE NECESSARY INTEGRAL ROUTINES.

IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON/ABKW/ AAK(8,8,8,10),ABK(8,10,2),AW(12,14,16,6)

COMMON/ENT2/KAP1
KALMAX=2*MAXRIJ+4
DO 100 L=1,KALMAX

L1=L-2
DO 100 M=1,KALMAX

M1=M-2
DO 100 N=1,KALMAX

N1=N-2
IF((L1/2)*2-L1) 20,21,20

20 IF((M1/2)*2-M1) 30,21,30

30 IF((N1/2)*2-N1) 40,21,40

40 KAR=KAP1
GO TO 23

21 CONTINUE
KAR=KAP

23 CONTINUE
DO 100 KA=1,KAR

KA1=KA-1
AAK(L,M,N,KA)=AK(L,M1,N1,KA1)

100 CONTINUE
DO 200 L=1,KALMAX

L1=L-2
IF((L1/2)*2-L1) 50,61,50

50 KAR=KAP1
GO TO 63

61 CONTINUE
KAR=KAP

63 CONTINUE
DO 200 KA=1,KAR

KA1=KA-1
DO 200 IS=1,IE1

IS1=IS-1
ABK(L,KA,IS)=BK(L,KA1,IS1)

200 CONTINUE
IWIMAX=2*(MAXRI+KAP+IE2+IE3)-4

IWJMAX=2*(MAXRI+MAXRIJ+2*IE3)-2
IWKMAX=2*(MAXRI+2*MAXRIJ+KAP+IE1+IE3)-8

DO 300 I=2,IWIMAX
I1=I

DO 300 J=1,IWJMAX
J1=J-2*IE3+2

DO 300 K=1,IWKMAX
K1=K-2*(KAP+2*IE1)+6

IF(AL2.EQ.AL3) GO TO 3
IF(AL1.EQ.AL2) GO TO 2

AW(I,J,K,1)=W(I1,J1,K1,AL1,AL2,AL3)

AW(I,J,K,2)=W(I1,J1,K1,AL1,AL3,AL2)

AW(I,J,K,3)=W(I1,J1,K1,AL2,AL1,AL3)

AW(I,J,K,4)=W(I1,J1,K1,AL2,AL3,AL1)

AW(I,J,K,5)=W(I1,J1,K1,AL3,AL1,AL2)

AW(I,J,K,6)=W(I1,J1,K1,AL3,AL2,AL1)

GO TO 300

2 AW(I,J,K,1)=W(I1,J1,K1,AL1,AL2,AL3)

AW(I,J,K,2)=W(I1,J1,K1,AL1,AL3,AL2)

AW(I,J,K,3)=AW(I,J,K,1)

AW(I,J,K,4)=AW(I,J,K,2)

AW(I,J,K,5)=W(I1,J1,K1,AL3,AL1,AL2)

AW(I,J,K,6)=AW(I,J,K,5)

GO TO 300

3 AW(I,J,K,1)=W(I1,J1,K1,AL1,AL2,AL3)

AW(I,J,K,2)=AW(I,J,K,1)

AW(I,J,K,3)=W(I1,J1,K1,AL2,AL1,AL3)

AW(I,J,K,4)=W(I1,J1,K1,AL2,AL3,AL1)

AW(I,J,K,5)=AW(I,J,K,3)

AW(I,J,K,6)=AW(I,J,K,4)

300 CONTINUE

RETURN

END

```
REAL FUNCTION VVR*(NCDIM, NDEM, CI, CJ, IA, IM, JN, JM, KN, KM, LN, LM, MN, MM,  
* NN, NN, A, A1, A2, A3)  
IMPLICIT REAL*8(A-H, O-Z)  
DIMENSION CI(1), CJ(1), IN(1), IM(1), JA(1), JM(1), KN(1), KM(1), LN(1),  
* LM(1), NN(1), NM(1), MN(1), MM(1)  
VVR=0.000  
DO 20 I=1,NDIM  
DO 20 J=1,NDEM  
CKC=CI(I)*CJ(J)  
IG=IN(I)  
IB=IM(J)  
JG=JN(I)  
JB=JM(J)  
KG=KN(I)  
KB=KM(J)  
LG=LN(I)  
LB=LM(J)  
MG=MN(I)  
MB=MM(J)  
NG=NN(I)  
NB=NN(J)  
VA=CKC*(NM(IG, IB, JG, JB, KG, KB, LG, LB, MG, MB, NG, NB, A, A1, A2, A3))  
20 VVR=VVR+VA  
RETURN  
END
```

```

REAL FUNCTION VMN=8(IG,IB,JG,JB,KG,KB,LG,LB,MG,MB,NG,NB,A,A1,A2
1)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
DIMENSION EV(36)
COMMON/SPIN/ ISPIN
EV(1)=2.000*VGB(IG,IB,JG,JB,KG,KB,LG,LB,MG,MB,NG,NB,A,A1,A2,A3)
EV(2)=2.000*VGB(IG,JB,JG,IB,KG,KB,LG,MB,PG,LB,NG,NB,A,A1,A2,A3)
EV(3)=-VGB(IG,KB,JG,JB,KG,IB,LG,NB,PG,MB,AG,LB,A,A1,A2,A3)
EV(4)=-VGB(IG,IB,JG,KB,KG,JB,LG,LB,PG,NB,AG,MB,A,A1,A2,A3)
EV(5)=-VGB(IG,JB,JG,KB,KG,IB,LG,MB,PG,NB,AG,LB,A,A1,A2,A3)
EV(6)=-VGB(IG,KB,JG,IB,KG,JB,LG,NB,PG,MB,AG,MB,A,A1,A2,A3)
EV(7)=2.000*VGB(JG,IB,IG,JB,KG,KB,MB,LB,LG,MB,NG,NB,A,A1,A2,A3)
EV(8)=2.000*VGB(JG,JB,IG,IB,KG,KB,MB,LB,LG,MB,NG,NB,A,A1,A2,A3)
EV(9)=-VGB(JG,KB,IG,JB,KG,IB,PG,MB,LG,MB,NG,LB,A,A1,A2,A3)
EV(10)=-VGB(JG,IB,IG,KB,KG,JB,PG,MB,LG,KB,NG,MB,A,A1,A2,A3)
EV(11)=-VGB(JG,JB,IG,KB,KG,IB,PG,MB,LG,NB,NG,LB,A,A1,A2,A3)
EV(12)=-VGB(JG,KB,IG,IB,KG,JB,PG,MB,LG,LB,NG,MB,A,A1,A2,A3)
EV(13)=-VGB(KG,IB,JG,JE,IG,KB,NG,MB,MG,LB,LG,NB,A,A1,A2,A3)
EV(14)=-VGB(KG,JB,JG,IE,IG,KB,NG,MB,MG,LB,LG,NB,A,A1,A2,A3)
EV(15)=2.000*VGB(KG,KB,JG,JB,IG,IB,AG,NB,PG,MB,LG,LB,A,A1,A2,A3)
EV(16)=-VGB(KG,IB,JG,KB,IG,JB,NG,LB,MB,MB,AG,MB,A,A1,A2,A3)
EV(17)=2.000*VGB(KG,JB,JG,KB,IG,IB,AG,MB,PG,MB,AG,MB,A,A1,A2,A3)
EV(18)=-VGB(KG,KB,JG,IB,IG,JB,NG,NB,MB,MB,AG,MB,A,A1,A2,A3)
EV(19)=-VGB(IG,IB,KG,JB,JG,KB,LG,LB,NG,MB,MB,NG,NB,A,A1,A2,A3)
EV(20)=-VGB(IG,JB,KG,IB,JG,KB,LG,MB,NG,LB,MB,NG,NB,A,A1,A2,A3)
EV(21)=-VGB(IG,KB,KG,JB,JG,IB,LG,NB,NG,MB,MB,AG,MB,A,A1,A2,A3)
EV(22)=2.000*VGB(IG,IB,KG,KB,JG,JB,LG,LB,AG,NB,MB,MB,A,A1,A2,A3)
EV(23)=-VGB(IG,JB,KG,KB,JG,IB,LG,MB,NG,NB,MB,AG,MB,A,A1,A2,A3)
EV(24)=2.000*VGB(IG,KB,KG,IB,JG,JB,LG,NB,AG,MB,MB,AG,MB,A,A1,A2,A3)
EV(25)=-VGB(JG,IB,KG,JB,IG,KB,MB,LB,NG,MB,AG,MB,A,A1,A2,A3)
EV(26)=-VGB(JG,JB,KG,IB,IG,KB,MB,MB,NG,LB,AG,MB,A,A1,A2,A3)
EV(27)=2.000*VGB(JG,KB,KG,JB,IG,IB,PG,NB,NG,MB,AG,MB,A,A1,A2,A3)
EV(28)=-VGB(JG,IB,KG,KB,IG,JB,PG,MB,AG,MB,AG,MB,A,A1,A2,A3)
EV(29)=2.000*VGB(JG,JB,KG,KB,IG,IB,PG,MB,AG,MB,AG,MB,A,A1,A2,A3)
EV(30)=-VGB(JG,KB,KG,IB,IG,JB,MB,NG,LB,AG,MB,A,A1,A2,A3)
EV(31)=-VGB(KG,IB,IG,JB,JG,KB,AG,LB,LG,MB,MB,NG,NB,A,A1,A2,A3)
EV(32)=-VGB(KG,JB,IG,IB,JG,KB,NG,MB,AG,LB,MB,NG,NB,A,A1,A2,A3)
EV(33)=-VGB(KG,KB,IG,JB,JG,IB,NG,NB,AG,LB,MB,AG,MB,A,A1,A2,A3)
EV(34)=2.000*VGB(KG,IB,IG,KB,JG,JB,AG,LB,AG,MB,MB,AG,MB,A,A1,A2,A3)
EV(35)=-VGB(KG,JB,IG,KB,JG,IB,NG,MB,AG,LB,MB,AG,MB,A,A1,A2,A3)
EV(36)=2.000*VGB(KG,KB,IG,IB,JG,JE,NG,NB,AG,LB,MB,AG,MB,A,A1,A2,A3)
IF (ISPIN=2) 110,110,111
111 CONTINUE
EV(1)=0.500*EV(1)
EV(2)=-0.500*EV(2)
EV(5)=-EV(5)
EV(6)=-EV(6)
EV(7)=-0.500*EV(7)
EV(8)=0.500*EV(8)
EV(9)=-EV(9)
EV(10)=-EV(10)
EV(14)=-EV(14)
EV(15)= 0.500*EV(15)
EV(16)=-EV(16)
EV(17)=-0.500*EV(17)
EV(20)=-EV(20)
EV(21)=-EV(21)
EV(22)= 0.500*EV(22)
EV(24)=-0.500*EV(24)
EV(25)=-EV(25)
EV(27)=-0.500*EV(27)
EV(29)= 0.500*EV(29)
EV(30)=-EV(30)
EV(31)=-EV(31)
EV(34)=-0.500*EV(34)
EV(35)=-EV(35)
EV(36)= 0.500*EV(36)
110 CONTINUE
VMN=0.000
DO 10 I=1,36
10 VMN=VMN+EV(I)
RETURN
END

```

```
REAL FUNCTION VGB*(IG,IB,JG,JB,KG,KB,LG,LB,NG,MB,NB,A,A1,A2,A3
*)
  IMPLICIT REAL*(A-H,O-Z)
  DIMENSION EVGB(3)
  IGB=IG*IB
  JGB=JG*JB
  KGB=KG*KB
  LGB=LG*LB
  MGB=NG*MB
  NGB=NG*NB
  EVGB(1)=ENTEGL(IGB,JGB,KGB,LGB,MGB,NGB-1,A,A1,A2,A3)
  EVGB(2)=ENTEGL(IGB,JGB,KGB,LGB,MGB-1,NGB,A,A1,A2,A3)
  EVGB(3)=ENTEGL(IGB,JGB,KGB,LGB-1,MGB,NGB,A,A1,A2,A3)
  VGB=0.000
  DO 10 I=1,3
10  VGB=VGB+EVGB(I)
  RETURN
  END
```

C
C
C

REAL FUNCTION ENTEG*(I,J,K,L,M,N,A,AL1,AL2,AL3)

THIS SUBPROGRAM COMPUTES THE INTEGRALS.

```

IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON/ENT2/KAP1
COMMON/ENT/KAP,IE1,IE2,IE3
COMMON/ABKW/ AAK(8,8,8,10),ABK(8,10,2),AW(12,14,16,6)
COMMON/DORT/DORTPI
TOP1=0.000
IF((L/2)*2-L) 20,21,20
20 IF((M/2)*2-M) 30,21,30
30 IF((N/2)*2-N) 40,21,40
40 KAR=KAP1
GO TO 23
21 CONTINUE
KAR=KAP
23 CONTINUE
CO 500 KAPA=I,KAR
KA=KAPA-1
TK1=AAK(L+2,M+2,N+2,KA+1)/(2*KA+1)**2
IF(TK1.EQ.0.000) GO TO 500
TOP2=C.000
DO 400 IS11=1,IE1
IS1=IS11-1
TK2=ABK(L+2,KA+1,IS1+1)
IF(TK2.EQ.0.000) GO TO 400
TOP3=0.000
DO 300 IS21=1,IE2
IS2=IS21-1
TK3=ABK(M+2,KA+1,IS2+1)
IF(TK3.EQ.0.000) GO TO 300
TOP4=0.000
DO 200 IS31=1,IE3
IS3=IS31-1
TK4=ABK(N+2,KA+1,IS3+1)
IF(TK4.EQ.0.000) GO TO 200
I2=I+2
J2=J+2
K2=K+2
KA2=KA+2
IS12=2*(IS1+IS2)
IS13=2*(IS1+IS3)
IS23=2*(IS2+IS3)
II2=2*(KAP+IE1+IE3)-6
II1=2*IE3-2
IND11=I2+KA2+IS23
IND12=J2+KA2+IS13
IND13=K2+KA2+IS12
IND21=J2+M+2*(IS1-IS3)+II1
IND22=K2+M+2*(IS1-IS2)+II1
IND23=I2+M+2*(IS2-IS3)+II1
IND24=K2+L+2*(IS2-IS1)+II1
IND25=I2+M+2*(IS3-IS2)+II1
IND26=J2+L+2*(IS3-IS1)+II1
IND31=K2+L+M-KA2-IS12+II2
IND32=J2+L+N-KA2-IS13+II2
IND33=I2+M+N-KA2-IS23+II2
W1=AW(IND11,IND21,IND31,1)
W2=AW(IND11,IND22,IND32,2)
W3=AW(IND12,IND23,IND31,3)
W4=AW(IND12,IND24,IND33,4)
W5=AW(IND13,IND25,IND32,5)
W6=AW(IND13,IND26,IND33,6)
TCP5=W1+W2+W3+W4+W5+W6
TOP4=TOP4+TK4*TOP5
200 CONTINUE
TOP3=TOP3+TK3*TOP4
300 CONTINUE
TOP2=TOP2+TK2*TOP3
400 CONTINUE
TOP1=TOP1+TK1*TOP2
500 CONTINUE
ENTE=TOP1*DORTPI**3
RETURN
END

```

C
C
C

REAL FUNCTION AK=8(L,H,N,K)

THIS SUBPROGRAM COMPUTES INTEGRAL COEFFICIENTS.

```
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
IF(K) 10,10,11
10 AK=1.000
RETURN
11 IF((L.EQ.0).OR.(M.EQ.0).OR.(N.EQ.0)) GO TO 12
GO TO 13
12 AK=0.000
RETURN
13 A1=AK1(L,K)
IF(A1) 14,12,14
14 A2=AK1(H,K)
IF(A2) 15,12,15
15 A3=AK1(N,K)
AK=A1*A2*A3
RETURN
END
```

C
C
C

```
REAL FUNCTION AK1*(L,K)
THIS SUBPROGRAM COMPUTES INTEGRAL COEFFICIENTS.
IMPLICIT REAL*(A-H,O-Z)
COMMON/FACTOR/ FAC(60),DFAC(50)
IF(L) 10,11,11
10 IF(I+L) 13,12,13
12 AK1=1.000
RETURN
13 IF((L/2)*2-L) 24,25,24
25 AK1=2.000**K*FAC(K-L/2)/(FAC(-L/2)*DFAC(2*K+1))
RETURN
24 AK1=DFAC(2*K-L)/(DFAC(-L)*DFAC(2*K+1))
RETURN
11 IF((L/2)*2-L) 16,15,16
15 AK1=0.000
RETURN
16 IF(L-2*K) 20,20,21
20 AK1=DFAC(2*K-L)*DFAC(L+2)/((-1)**((L+1)/2)*DFAC(2*K+1))
RETURN
21 AK1=(-1)**(-K)*DFAC(L+2)/(DFAC(L-2*K+2)*DFAC(2*K+1))
RETURN
END
```


C
C
C

```
REAL FUNCTION BK*(L,K,I)
THIS SUBPROGRAM COMPUTES INTEGRAL COEFFICIENTS.
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON/FACTOR/ FAC(60),DFAC(50)
IF(I) 10,10,11
10 BK =1.000
RETURN
11 IF(L) 20,100,100
20 IF(L+1) 22,100,22
22 IF((L/2)*2-L) 24,25,24
25 BK=FAC(K+I-L/2)*DFAC(2*I-L-1)*DFAC(2*K+3)
BK=BK/(FAC(I+1)*FAC(K-L/2)*DFAC(-L-1)*DFAC(2*K+2*I+3))
RETURN
24 BK=DFAC(2*(K+I)-L)*DFAC(2*K+3)*FAC(I-(L+1)/2)
BK=BK/(FAC(I+1)*FAC(-(L+1)/2)*DFAC(2*K-L)*DFAC(2*K+2*I+3))
RETURN
100 BK=0.000
RETURN
END
```

C
C
C

REAL FUNCTION W=8(I,J,K,A,B,C)

THIS SUBPROGRAM COMPUTES THE MAIN INTEGRALS, THAT IS THE THREE-ELECTRON INTEGRALS.

IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
COMMON/FACTOR/ FAC(60),DFAC(50)
COMMON/MNTOP/ MB,NB

AB=A*B

BC=B*C

ABC=AB*C

ARABC=A/ABC

ABCB=AB/ABC

IJ=I*J

IJK=IJ*K

IF((I.GE.0).AND.(J.GE.0).AND.(K.GE.0)) GO TO 300

IF((J.LT.0).AND.(K.GE.0)) GO TO 400

IF(K.LT.0) GO TO 150

W=0.000

RETURN

300 TOP1=0.000

KP1=K+1

DO 100 M=1,KP1

TK1=FAC(J+M)/(FAC(M)*C**(KP1-M+1))

TOP2=0.000

JPM=J+M

DO 200 N=1,JPM

TOP2=TOP2+FAC(I+N)/(FAC(N)*((B+C)**(J+M-N+1))*((A+B+C)**(I+N)))

200 CONTINUE

TOP1=TOP1+TK1*TOP2

100 CONTINUE

W=FAC(K+1)*TOP1

RETURN

400 CONTINUE

DL=DLOG10(BC/ABC)

TPP1=0.000

TPP2=0.000

T1=FAC(K+1)/(C**(K+1)*BC**(J+1)*ABC**(I+1))

T2=-FAC(I+1)*FAC(K+1)/(A**(I+1)*C**(K+1))

KP1=K+1

DO 401 MU=1,KP1

M=MU-1

IF(J+M+1) 415,415,416

416 CONTINUE

TP1=FAC(J+M+1)*(C/BC)**M/FAC(M+1)

GO TO 445

415 CONTINUE

TN=0.000

DO 444 LL=1,I

TN=TN+ABABC**LL/DFLOAT(LL)

444 CONTINUE

TPP2=TPP2+C**M*(DL+TN)/FAC(M+1)

GO TO 401

445 CONTINUE

TOP2=0.000

JM1=J+M+1

DO 402 NU=1,JM1

N=NU-1

TOP2=TOP2+FAC(I+N+1)*(BC/ABC)**N/FAC(N+1)

402 CONTINUE

TPP1=TPP1+TP1*TOP2

401 CONTINUE

W=T1*TPP1+T2*TPP2

RETURN

```
150  Y1=FAC(I+1)/(A*ABC**(IJK+1))
      T2=ABCB**NB/C
      TOP1=0.000
      DO 70 NU=1,NB
      IN=I+J*NU
      ITEH1=IN+1
      ITEH2=I*NU+1
      IF((ITEH1.GT.57).OR.(ITEH2.GT.57)) GO TO 910
      TEHLIK=FAC(ITEH1)/FAC(ITEH2)
      GO TO 930
910  TEHLIK=ACAIP(ITEH1,ITEH2)
930  T3=ABABC**NU*TEHLIK
      INN=IN+K+NB
      ITEH1=INN+1
      ITEH2=IN+NB+1
      IF((ITEH1.GT.0).AND.(ITEH2.GT.0)) GO TO 1002
      T4=0.000
      GO TO 1003
```

```
1002 CONTINUE
      IF(ITEH2.GT.57) GO TO 940
      T4=FAC(ITEH1)/FAC(ITEH2)
1003 CONTINUE
      GO TO 950
940  T4=ACAIP(ITEH1,ITEH2)
950  CONTINUE
      TOP2=0.000
      DO 90 NU=1,NB
      JNN=IN+K+NU
      ITEH1=JNN+1
      ITEH2=IN+NU+1
      IF((ITEH1.GT.0).AND.(ITEH2.GT.0)) GO TO 1004
      T5=0.000
      GO TO 1005
1004 CONTINUE
      IF(ITEH2.GT.57) GO TO 920
      T5=FAC(ITEH1)/FAC(ITEH2)
1005 CONTINUE
      GO TO 960
920  T5=ACAIP(ITEH1,ITEH2)
960  CONTINUE
      TOP2=TOP2+ABCB**NU*T5
90  CONTINUE
      T6=T2*T4*TOP2/AB
      TOP1=TOP1+T3*T6
70  CONTINUE
      W=Y1*TOP1
      RETURN
      END
```

C
C
C

REAL FUNCTION ACAIP=8(I,J)

THIS SUBPROGRAM COMPUTES THE LARGE FACTORIALS.

```
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
IF(I-J) 30,40,50
40 ACAIP=1.000
   RETURN
30 CONTINUE
   I1=I+1
   N=1
   DO 10 M=I1,J
10  K=K*M
   ACAIP=1.000/DFLOAT(K)
   RETURN
50 K=1
   J1=J+1
   DO 20 M=J1,I
20  K=K*M
   ACAIP=DFLOAT(K)
   RETURN
END
```



```
350 CONTINUE
15 FCFMAT(7/9X,"F(I)"//2X,"K3 K",12X,"4(I)"//9X,"LINE SHAPF 1"
16X,"LINE SHAPF 2"//5(4X,12C"="))//5(4X,F12.8)
ZMIN=Z(1)
ZMAX=Z(1)
DO 32 I=1,5
  DO 32 J=1,5
    IF(ZZ(I,J).LE.ZMIN) ZMIN=ZZ(I,J)
    IF(ZZ(I,J).GE.ZMAX) ZMAX=ZZ(I,J)
32 CONTINUE
DFL7=F(H)=L(A)
```

```
DFL7=ZMAX-ZMIN
DO 13 I=1,5
  DO 19 J=1,5
    II=80+ABS(ZZ(IN,I)-ZMAX)/DFL7+0.5
    JJ=120+ABS(ZZ(I,1)-ZMAX)/DFL7+1.5
    GO TO(17,18,39,20,21),IA
17 F(II,JJ)=YILO7Z
  GO TO 19
38 F(II,JJ)=SIF7P
  GO TO 2
39 F(II,JJ)=ARTI
  GO TO 9
20 F(II,JJ)=YA
  GO TO 9
21 F(II,JJ)=MA
19 CONTINUE
18 CONTINUE
16 WRITE(6,8) ((F(I,K),K=1,121),I=1,31)
1E FCFMAT(15(/),(5X,121A1))
777 STOP
END
```

KAYNAKLAR

1. P. Auger, J. Phys. Radium 6 , 183 (1926);
" " Ann. Phys. (Paris) 6 , 183 (1926)
2. D.R. Hartree, Proc. Cambridge Phys. Soc. 24, 89 (1928)
3. J.C.Slater, Phys. Rev. 36, 57 (1930)
" " " "Quantum Theory of Atomic Structure" I. II. Ciltler,
Mack Grawhill, New York (1960)
4. O.Sinanoğlu, J.Chem. Phys. 36, 706, 3198 (1962);
O.Sinanoğlu and İ. Öksüz, Phys. Rev. Lett. 21, 507 (1968);
İ.Öksüz and O.Sinanoğlu, Phys. Rev. 181, 42, 54 (1969)
5. R.P. Madden and K.Codling, "Autoionization",
(Ed. A. Temkin), (U.S.A.) (1966)
6. R.Burch, G. Paul. J. Andra and L. Lipsky, Phys. Rev. A. 12, 1808
(1975)
7. Mohammed Ahmet and Lester Lipsky, Phys. Rev. A, 12, 1, 1176 (1975)
8. F. Feshbach, Ann. Phys. 5 , 375 (1962)
F.Feshbach, Ann. Phys, 19, 387 (1962)
9. U.Fano, Phys. Rev., 124, 1866 (1961)
10. P.G. Burke, Proc. Phys. Soc., 82, 443 (1962)
11. J.F. Perkins, Phys. Rev. 178 80 (1969)

12. Ed. A. Temkin, "Autolonization", (U.S.A.) (1966)
13. E.Holþien, Proc. Phys. Soc., A. 71, 357 (1958)
14. T.F.U. Malley, S.Geltman, Phys. Rev. A. 137, 1344 (1965)
15. H.S. Taylor, Adv. Chem Phys., 18, 91 (1970)
H.S. Taylor, A.U.Hazi, Phys. Rev. A, 14, 2071 (1976)
16. G.D. Doolen, M. Hidalgo, J. Nuttall ve R.W. Stagat, Atom. Phys. 3, 257 (1973)
17. Iskender Öksüz, Doçentlik Tezi, Ankara (1974);
18. Ş.Erkoç, T.Uzer and İ.Öksüz, Phys. Rev. A, 15, 1805 (1977);
Ş.Erkoç and İ.Öksüz, Phys. Scripta, 18, 175 (1978)
Ş.Erkoç J.Phys. B: Atom. Molec Phys. 12, 705 (1979)
İ.Öksüz and Ş.Erkoç, FICAP, 45, Berkeley, California (1976)
19. Ş. Erkoç, Doktora Tezi, Ankara (1977)
20. Ş.Erkoç and İ. Öksüz, Phys. Scripta, 20, 657 (1979)
21. M.Şimşek, S.Şimşek and Ş. Erkoç, Chem. Phys. Lett. 91, 456 (1982)
22. S.Goudsmit and T. Y. Wu. Astrophys J. 80, 154 (1934)
23. Leo Goldberg, "Auotoionization", (Ed. A. Temkin), (U.S.A.) (1966)
24. A. Weissmann and K.Müller, Surface Science Reports, 1, 251 (1981)
oradaki kaynaklar
25. O.K.Rice, J. Chem. Phys. 1, 375 (1933)
26. U. Fano. Nuovo Çimento, 12, 156 (1935)
27. H. Beutler, Z. Physik, 93. 177 (1935)

28. W.R.S. Garton and K. Codling, Proc. Phys. Soc. (London) 75, 87 (1960)
29. R. Platzman, J. Phys. Radium, 21, 853 (1960)
30. R.P. Madden and K. Codling, Phy. Rev. Lett., 10, 516 (1963)
31. U.Fano and J.W. Cooper, Phys. Rev., 137, A1364 (1965)
32. Bruce W. Shore, Reviews of Modern Physics, 39, 439 (1967)
33. U. Fano and J.W. Cooper, Reviews of Modern Physics, 40, 441 (1968)
34. Bruce W. Shore, Phys. Rev. 171, 43 (1968)
35. K. Seigbahn, et.al. "ESCA Applied to freee Molecules", North-Holl
Pub. Comp. Amst. (1969)
36. Yu. I. Geller, V.F. Lukinykh, A.K. Popov and V.V. Slabko, Opt.
Spectrosc. (USSR), 51, 407 (1981)
37. M.Şimşek, Doktora Tezi, Malatya (1983)
38. E.U. Condon and G.H. Shoortley, "Theory of Atomic Spectra",
Cambridge University Press (1970)
39. B.H. Bransden and A. Dalgarno, Proc. Phys. Soc. 66. 904, 911 (1953)
40. H.G. Berry, Phys. Scripta, 12, 5 (1975)
41. Ş.Erkoç and İ.Öksüz, Chem. Phys. Lett. 66, 587 (1979)
42. P.Ziem, R.Bruch and N. Stollerfoht, J. Phys. B, 8, L480 (1975)
43. A.K. Bhatia and A. Temkin, Phys. Rev. A. 13, 2322 (1976)
44. A.K. Bhatia, Phys. Rev. A, 18, 2523 (1978)

45. S.Mannervik, Phys. Scripta, 22, 575 (1980)
46. E.Holϕien, Nucl. Inst. and Meths., 90, 229 (1970)
47. J.E. Collin, Endeavour, 1, 122 (1977)
48. Paul Rehmus and R. Stephen Berry, Phys. Rev. A, 23, 416 (1981)
49. C.Nicolaides and O. Sinanođlu "New Directions In Atomic Physics"
(Ed. E.U. Condon and O. Sinanođlu) Vol. II., New Haven, Yale Uni
Press. 139 (1972)
50. Cleanthis A. Nicolaides, Nucl. Inst. and. Meths., 110, 231 (1971)
51. P. Feldman and R. Novick, Phys. Rev. 160, 143 (1967)
52. G.Wentzel, Z. Physik, 43, 524 (1927)
53. M.C. Chidichimo, J.Phys. B: At. Mol. Phys., 14, 3091 (1981)
54. G.Herzberg "Atomic Spectra and Atomic Structure" New York Dover
Publ. (1944)
55. E.M.S. Burhop, "The Auger Effect and Other Radiationless Transitions"
Cambridge Univ. Press. (1952)
56. M.E. Rudd and J.H. Macek, "Case Studies in Atomic Physics",
North-Holland Publ. Co., 3, Nr. 2 November (1972)
57. P.Ziem, U. Leithaaser and N. Stolterfoht, Abstracts of Papers
(Seattle, USA), 865 (1975)
58. R.Kh. Propin, Opt. Spectrosc (USSR), 8, 158 (1960)
59. R.Kh. Propin. Opt. Spectrosc (USSR), 10, 308 (1961)

60. R.Kh. Propin, Opt. Spectrosc (USSR), 17, 332 (1964)
61. U.I. Safronova and V.S. Senashenko, Opt. Spektrosc (USSR),
42, 462 (1977)
62. A.G. Shenstone, Phys. Rev. 38, 873 (1931)
63. P.A.M. Dirac, Z. Physik, 44, 594 (1927)
64. V.Weiskopf and E.P. Wigner, Z. Physik, 65, 54 (1930)
65. M. Oppenheimer and H. Doyle, Phys. Rev. A, 13 665 (1976)
66. J.M. Blatt and V.F. Weiskopf "Theoretical Nuclear Physics "(John
Wiley and Sons, Inc., New York), 401 (1952)
67. J.M. Jauch and F. Rohrlich, The Theory of Photon, and Electron
New York (1980),
68. İ.Öksüz, Profesörlük Tezi, Ankara (1979)
69. İ.Öksüz, Phy. Rev. A. 13,1507 (1976).