



GONÇALO GARCÊS SOBREIRA RODRIGUES BAPTISTA
BSc in Physics Engineering

X-RAY RESONANT RAMAN SCATTERING

SPECTRA SIMULATION FROM FIRST PRINCIPLES
FOR COPPER BELLOW IONIZATION THRESHOLD
USING HIGH-PERFORMANCE COMPUTING

MASTER IN PHYSICS ENGINEERING

NOVA University Lisbon

Draft: February 12, 2023

X-RAY RESONANT RAMAN SCATTERING

SPECTRA SIMULATION FROM FIRST PRINCIPLES
FOR COPPER BELOW IONIZATION THRESHOLD
USING HIGH-PERFORMANCE COMPUTING

GONÇALO GARCÊS SOBREIRA RODRIGUES BAPTISTA

BSc in Physics Engineering

Advisers: Jorge Felizardo Machado

Auxiliary Professor, NOVA University Lisbon

Mauro António Guerra

Auxiliary Professor, NOVA University Lisbon

Abstract

The work performed on this thesis comes as part of the effort to further understand the highly convoluted structure present on Copper's x-ray emission spectra, where, as with many other transition metals, a skewness can be observed on the $K_{\alpha_{1,2}}$, K_{β} and L transition lines. These line originate due to the radiative relaxation of the atom's electronic structure post-ionization of inner shell electrons. However, it is possible that the observed skewness is due to copper's satellite states' transitions.

Throughout this thesis, a study will be performed for the satellite states formed by the excitation of the inner-shell electron, where the ionization process did not occur.

Multiple atomic structure calculations will be performed using the *ab initio* state of the art [Multiconfiguration Dirac-Fock General Matrix of Elements \(MCDFGME\)](#) code for different excited states configurations (from an electron in the 4s orbital up to n=??).

The obtained results will then be used in the analysis of experimental data obtained from a High-Precision [Double Crystal Spectrometer \(DCS\)](#), located in Paris, in a synchrotron line.

Due to the complexity of the calculations, the process can become quite hefty in terms of computational power and time. Therefore, further similar and more complex studies will be performed by implementing and running a script in the *Oblivion* supercomputer located at the University of Évora.

Keywords: Excited State, Diagram Lines, [MCDFGME](#), [DCS](#), High Performance Computing

Resumo

Independentemente da língua em que a dissertação está escrita, geralmente esta contém pelo menos dois resumos: um resumo na mesma língua do texto principal e outro resumo numa outra língua.

A ordem dos resumos varia de acordo com a escola. O comportamento padrão para o template [NOVathesis LaTeX](#) (`novathesis`) é ter em primeiro lugar o resumo *na mesma língua do texto principal* e depois o resumo *na outra língua*. Por exemplo, se a dissertação for escrita em português, a ordem dos resumos será primeiro em português e depois em inglês, seguido do texto principal em português. Se a dissertação for escrita em inglês, a ordem dos resumos será primeiro em inglês e depois em português, seguido do texto principal em inglês. O template `novathesis` (L^AT_EX) irá ordenar automaticamente os resumos por uma ordem apropriada. No entanto, esta ordem pode ser personalizada adicionando

```
\abstractorder(<MAIN_LANG>):={<LANG_1>,...,<LANG_N>}
```

ao ficheiro `5_packages.tex`. Por exemplo, para um documento escrito em Alemão com resumos em Alemão, Inglês e Italiano (por esta ordem), pode usar-se:

```
\abstractorder(de):={de,en,it}
```

Relativamente ao seu conteúdo, os resumos não devem ultrapassar uma página e frequentemente tentam responder às seguintes questões (é imprescindível a adaptação às práticas habituais da sua área científica):

1. Qual é o problema?
2. Porque é que é um problema interessante/desafiante?
3. Qual é a proposta de abordagem/solução?
4. Quais são as consequências/resultados da solução proposta?

Palavras-chave: Primeira palavra-chave, Outra palavra-chave, Mais uma palavra-chave, A última palavra-chave

Contents

List of Figures	v
List of Tables	vi
Acronyms	viii
1 Introduction	1
1.1 Theoretical Introduction	1
1.1.1 Characteristic x-rays	1
1.1.2 The Dirac Equation	2
1.2 State of the Art	2
1.3 Objective list	2
1.4 Work Plan	2

List of Figures

1.1	Photoionization	1
1.2	Resonant Photoexcitation	1

List of Tables

Acronyms

MCDFGME Multiconfiguration Dirac-Fock General Matrix of Elements (*p. [ii](#)*)

DCS Double Crystal Spectrometer (*p. [ii](#)*)

novathesis NOVAthesis LaTeX (*p. [iii](#)*)

Introduction

1.1 Theoretical Introduction

1.1.1 Characteristic x-rays

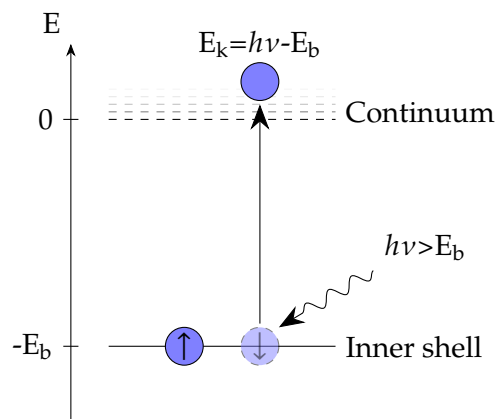


Figure 1.1: Photoionization

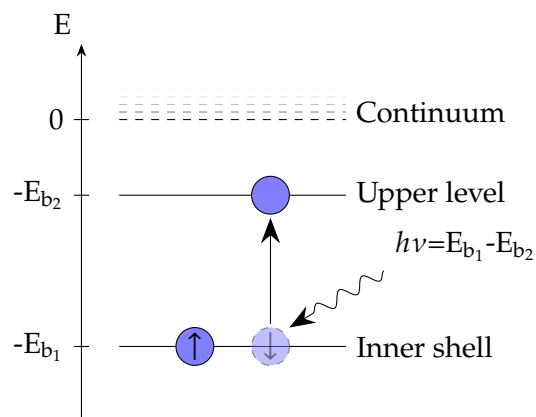


Figure 1.2: Resonant Photoexcitation

1.1.2 The Dirac Equation

1.1.2.1 Breit Interaction

1.2 State of the Art

1.3 Objective list

1.4 Work Plan



2023 X-ray research on scattering Gonçalo Baptista