

## بررسی ویژگیهای قدرت خط و نیروی نوسانگر اتمهای نقره و طلا با استفاده از نظریه تقریب کولنی

محمود سلطان کتابی، احمد کیاست پور و محمد حسین نادری

گروه فیزیک، دانشگاه اصفهان

(دریافت مقاله: ۷۶/۷/۱۷ دریافت نسخه نهایی: ۷۷/۶/۲۵)

### چکیده

در این مقاله، با به کارگیری نظریه تقریب کولنی قدرت خط بینایی و نیروی نوسانگر مربوط به گذارهای مختلف اتمهای نقره و طلا را مورد مطالعه قرار داده ایم. نمودارهای کمیت  $\log(\lambda fg)$  (طول موج گذار،  $f$  نیروی نوسانگر و  $g$  بار آماری تراز بالایی گذار است) برحسب عکس عدد کوانتومی اصلی تراز بالاتر،  $1/n$ ، نشان می‌دهند که تنها برای مقادیر بزرگ عدد کوانتومی اصلی حالت اولیه الکترون جهنده تغییرات به صورت خطی است. نقش تغییر عدد کوانتومی تکانه زاویه ای کل،  $J$ ، در میزان انحنا و شیب منحنیهای مربوط را نیز مورد بررسی قرار داده ایم. انحراف منحنیها از خط مستقیم، که نشانگر عدم موفقیت نظریه تقریب کولنی در محاسبه نیروی نوسانگر و قدرت خط بینایی اتم است، ناشی از اثر نیروهای تبادلی است.

نمودار کمیت  $n^{*2}fg$  (عدد کوانتومی مؤثر تراز بالا) را نیز برای گذارهای مختلف اتمهای نقره و طلا رسم کرده ایم. این نمودارها نشان می‌دهند که  $f$  با وارون مکعب عدد کوانتومی مؤثر متناسب است و برای مقادیر بزرگ  $n^*$  این بستگی خطی است. البته برای برخی گذارها، حتی به ازای مقادیر بزرگ  $n^*$  انحراف چشمگیری از وابستگی خطی مشاهده می‌شود. این انحراف را ناشی از اثر عدد کوانتومی تکانه زاویه ای کل حالت‌های اولیه و نهایی الکترون جهنده می‌دانیم.

### ۱. مقدمه

خورشید و ستارگان، از اهمیت چشمگیری برخوردارند [۱]. به منظور محاسبه دقیق احتمال گذارها (و در نتیجه قدرت خط و نیروی نوسانگر) لازم است که داده‌های نظری و تجربی با یکدیگر مقایسه شوند. لیکن، محدودیتهای آزمایشی در تعیین احتمالهای گذار مربوط به خطوط بینایی اتمهای فلزی، به ویژه مس، طلا و نقره، از یک سو و از سوی دیگر، تقریبی بودن داده‌های نظری موجود محاسبه بسیار دقیق کمیت‌های مزبور را عملاً ناممکن ساخته است. روشهای آزمایشگاهی مبتنی بر برانگیزش لیزری گزینشی اتمها [۲-۷]، فلورسانسی لیزر القاییده [۸]، بینابنمایین تقاطع تراز [۹ و ۱۰]، بینابنمایین لیزری

احتمال گذار، قدرت خط و نیروی نوسانگر از جمله کمیت‌های اتمی هم ارز مهمی هستند که معمولاً در روابط حاکم بر اندرکنش تابش الکترومغناطیسی و ماده ظاهر می‌شوند. کمیت‌های مزبور که با مربع مقدار مطلق عناصر ماتریسی عملگر گشتاور دو قطبی الکتریکی الکترون اتم تابنده متناسبند، تعیین کننده کمیت‌های دیگری همچون نمارشکست و سطح مقطع جذب کلی، گسیل القایی و پراکندگی هستند. علاوه بر این، احتمالهای گذار اتمی و نیروهای نوسانگر متناظر در مطالعات اختر فیزیکی، مثلاً برای محاسبه فراوانیهای نسبی عناصر در

## ۲. مفاهیم اولیه

## ۱.۲. احتمال گذار، قدرت خط و نیروی نوسانگر

آهنگ گذار گسیل خود به خود از تراز برانگیخته  $|\gamma'J'M'\rangle$  به تراز پایینتر  $|\gamma JM\rangle$ ،  $J, J'$ ، عدد کوانتومی تکانه زاویه‌ای کل،  $M, M'$  عدد کوانتومی تصویر تکانه زاویه‌ای کل بر روی محور  $z$ ،  $\gamma, \gamma'$  عدد کوانتومی وابسته به کمیتی به غیر از تکانه زاویه‌ای با رابطه زیر داده می‌شود [۱۷]

$$A_{J', J} = \frac{64\pi^2 e^2 a^2 k^3}{3\hbar} \sum_q \left| \langle \gamma JM \mid P_q^{(1)} \mid \gamma'J'M' \rangle \right|^2 \quad (1)$$

که در آن

$$P_q^{(1)} = \sum_{i=1}^N r_q^{(1)}(i) \quad (2)$$

$q$  امین مؤلفه گشتاور دو قطبی کلاسیکی اتم در یکای  $ea$  است.  $a$  شعاع اتم بوهر،  $k$  عدد موج،  $N$  تعداد الکترونهاى اتمی،  $e$  بار الکترون و  $\hbar$  ثابت پلانک است.

با به کارگیری قضیه ویگنر-اکارت [۱۷] چنین خواهیم داشت

$$\langle \gamma JM \mid P_q^{(1)} \mid \gamma'J'M' \rangle = (-1)^{J-M} \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & q & M' \end{pmatrix} \langle \gamma J \parallel P^{(1)} \parallel \gamma'J' \rangle \quad (3)$$

که در آن،  $\begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & q & M' \end{pmatrix}$  به نماد  $z - 3$  معروف است. در اینجا، داریم

$$\Delta J = J - J' = 0, \pm 1 \quad ; \quad J = 0 \rightarrow J' = 0 \quad (4\text{-الف})$$

و

$$-M + q + M' = 0 \quad (4\text{-ب})$$

این بدان معنی است که باید چنین داشته باشیم

$$M = M' \quad \text{برای} \quad q = 0$$

$$M = M' + 1 \quad \text{برای} \quad q = 1$$

$$M = M' - 1 \quad \text{برای} \quad q = -1$$

که همان قواعد گزینش معمول است.

با ترکیب روابط (۱) و (۳) خواهیم داشت

تی [۱۱] و برانگیزش فرابنفش خلاء [۱۲] از جمله روشهای تجربی‌ای هستند که تاکنون به کمک آنها توانسته اند احتمال گذارهای اتمی و طول عمرهای تابشی مربوط به برخی عناصر را با دقت مناسبی تعیین کنند. از دیدگاه نظری، به منظور محاسبه کمیت‌های یاد شده تاکنون روشهای مختلفی پروراند شده‌اند، که به جز برای اتم هیدروژن (ساده‌ترین اتم) همگی تقریبی اند. در این میان، ساده‌ترین و نیز سراسرترین این روشها، نظریه تقریب کولنی است [۱۳]. در این نظریه، که نتایج آن با داده‌های تجربی همخوانی رضایتبخشی دارد، فرض بر آن است که الکترون در اتم تحت تأثیر پتانسیلی است که تقارن مرکزی دارد. از این رو، می‌توان بخش زاویه‌ای عناصر ماتریسی گشتاور دو قطبی الکترون اتم تابنده را به طور جداگانه محاسبه کرد و قسمت شعاعی عناصر ماتریسی مزبور را به روش عددی با تقریبی که برای تابع موج به کار گرفته می‌شود، به دست آورد. با به کارگیری این نظریه، احتمال گذارهای اتمی و طول عمرهای تابشی مختلف برای اتمهای مس، نقره و طلا محاسبه شده‌اند [۱۴]. علاوه بر این، با به کارگیری نظریه مزبور ویژگیهای قدرت خط و نیروی نوسانگر برای سریهای تیز و پخشیده اتم مس مورد مطالعه قرار گرفته‌اند [۱۵]. نتایج به دست آمده از این بررسی گویای وجود سازگاری مناسبی میان نتایج نظری و تجربی است و این خود، تأییدی است بر اعتبار نظریه تقریب کولنی. در هیافت نظری دیگری که به الگوی پتانسیل موسوم است، نیروهای نوسانگر برای گذارهای مجاز دو قطبی الکترونی در دستگاههای تک الکترونی  $Ca^+$  و  $K, Mg^+, Na$  محاسبه شده‌اند [۱۶]. در این روش، پتانسیل بلند برد کولنی با پتانسیلی جایگزین می‌شود که در آن علاوه بر در نظر گرفتن قطبیدگی مغز، اثرهای تبدلی و کوتاه برد نیز به حساب آورده می‌شوند. داده‌های به دست آمده از این روش با داده‌های حاصل از تقریب کولنی سازگاری بسیار خوبی دارند.

در این مقاله پس از معرفی احتمال گذار و قدرت خط به عنوان مفاهیم اولیه، و توضیح مختصری در باره نظریه تقریب کولنی، با استفاده از نظریه مزبور ویژگیهای قدرت خط و نیروی نوسانگر را برای گذارهای مختلف اتمهای نقره و طلا مورد تجزیه و تحلیل قرار می‌دهیم. علاوه بر این، نتایج به دست آمده را با نتایج مربوط به اتم هیدروژن و اتم سدیم، که نیروی نوسانگر مربوط به گذارهای مختلف آن براساس الگوی پتانسیل به دست آمده است، مقایسه می‌کنیم.

مشخص باشد. از سویی، برای محاسبه قدرت خط باید تابعهای موج  $\langle \gamma J \rangle$  و  $\langle \gamma J' \rangle$  مشخص باشند. این تابعها معمولاً برحسب پایه مناسبی از ویژه تابعها بسط داده می شوند.

قویترین خطوط بینایی، مربوط به آن دسته گذارهایی هستند که برای آنها  $\Delta J = \Delta L$  (عدد کوانتومی تکانه زاویه ای مداری است) [۱۷]. چنین خطوط بینایی را خطوط اصلی گویند. در میان خطوط اصلی خطی که مربوط به بیشترین مقدار  $J$  است، قویترین است و قدرت بقیه خطوط با افزایش  $J$  کاهش می یابد. خطوط بینایی که مربوط به گذارهای با  $\Delta J \neq \Delta L$  هستند، خطوط بینایی اقماری نام دارند.

### ۲.۲. نظریه تقریب کولنی

از رابطه های (۶)، (۷) و (۹) چنین بر می آید که احتمال گذار، قدرت خط و نیروی نوسانگر را با در دست داشتن عناصر ماتریسی گشتاور دو قطبی الکتریکی که در تابش دخالت دارند می توان تعیین کرد. در نظریه تقریب کولنی فرض بر این است که الکترون تحت تأثیر پتانسیلی با تقارن مرکزی است. از این رو، بخش زاویه ای عناصر ماتریسی را می توان جداگانه محاسبه کرد. محاسبه بخش شعاعی عناصر ماتریسی نیز به کمک روش عددی و با تقریبی که برای تابع موج به کار برده می شود، انجام می پذیرد. بدین ترتیب با در نظر گرفتن جفت شدگی  $L-S$ ، رابطه (۶) برای اتمهای هیدروژن گونه به شکل زیر در می آید [۱۴]

$$S_{J',J} = G(L)G(m)(a_e)^2 \sigma^2 \quad (10)$$

که در آن،

$$G(L) = \frac{(\gamma J + 1)(\gamma J' + 1)}{\gamma S + 1} W^2(LJL'J'; S1) \quad (11)$$

$$G(m) = (\gamma S + 1)(\gamma L + 1)(\gamma L' + 1) \ell_{>}(\gamma \ell_{>} - 1) W^2(\ell L \ell' L'; L_1 1) \quad (12)$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{(\gamma \ell_{>} - 1)} \left[ \int R_{n,\ell}^*(r) R_{n',\ell'}(r) r^3 dr \right]^2 \quad (13)$$

در اینجا،  $W(\ell L \ell' L'; L_1 1)$  ضریب راکاه،  $\ell_{>}$  مقدار بزرگتر تکانه زاویه ای مداری از بین دو مقدار  $\ell$  و  $\ell'$ ،  $m$ ،  $L$  عدد کوانتومی تکانه زاویه ای مداری ناحیه مغز و  $R_{n,\ell}$  تابع موج شعاعی بهنجار شده الکترون جهنده است، که توسط معادله شرودینگر تحت

$$A_{J',J} = \frac{64\pi^4 e^2 a_e^2 k^3}{3h} S_{J',J} \sum_q \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & q & M' \end{pmatrix}^2 \quad (5)$$

که در آن

$$S_{J',J} \equiv \left| \langle \gamma J \parallel P^{(1)} \parallel \gamma J' \rangle \right|^2 \quad (6)$$

به قدرت خط موسوم است. با به کار بستن قواعد گزینشی که مربوط به نمادهای  $J$ - $J'$  هستند [۱۸]، رابطه (۵) به شکل زیر در خواهد آمد

$$A_{J',J} = \frac{64\pi^4 e^2 a_e^2 k^3}{3h(\gamma J' + 1)} S_{J',J} \quad (7)$$

با در نظر گرفتن بار آماری،  $g$ ، احتمال گذار چنین خواهد شد

$$gA_{J',J} = (\gamma J' + 1) A_{J',J} = \frac{64\pi^4 e^2 a_e^2 k^3}{3h} S_{J',J} \\ = 2/0.261 \times 10^{-6} k^3 S_{J',J} (\text{sec}^{-1}) \quad (8)$$

در اینجا،  $k$  برحسب  $\text{cm}^{-1}$  (کایزر) و  $S_{J',J}$  در یکای اتمی  $e^2 a_e^2$  است. شدت نور گسیلی بستگی به  $S_{J',J}$  دارد، یعنی  $I \propto k^4 S_{J',J}$ ، از این روست که  $S_{J',J}$  را قدرت خط گسیلی بین مؤلفه های مجزای خط، یعنی  $M$  و  $M'$  های مختلف، تقسیم می شود. کمیت دیگری که با استفاده از آن می توان قدرت خط بینایی را تعیین کرد، نیروی نوسانگر  $f_{J',J}$  است [۱۷]،

$$f_{J',J} = \frac{8\pi^2 m c a_e^2 k}{3h(\gamma J + 1)} S_{J',J} = \frac{(E_j - E_i)}{3(\gamma J + 1)} S_{J',J} \quad (9)$$

$(E_j - E_i)$  انرژی گذار از حالت بالایی  $j$  (با عدد کوانتومی تکانه زاویه ای کل  $J$ ) به حالت پایینی  $i$  (با عدد کوانتومی تکانه زاویه ای کل  $J'$ ) برحسب ثابت ریذبرگ است. گفتنی است که این رابطه، بیانگر احتمال کل انتقال از یک حالت پایینی  $i$  به تعداد  $(\gamma J' + 1)$  حالت بالایی  $j$  است.

از رابطه های (۷) و (۹) چنین بر می آید که برای محاسبه احتمال گذار و نیروی نوسانگر، لازم است که مقدار قدرت خط

(۲) نقطه‌ای است که در آنجا تغییرات عناصر ماتریسی گشتاور دو قطبی الکترون کمینه است،

تابع موج شعاعی الکترون به دست می‌آید.

به منظور محاسبه  $\sigma^2$  لازم است که علاوه بر تابع موج شعاعی و عددهای کوانتومی  $\ell$  و  $\ell'$ ، عدد کوانتومی مؤثر  $n_0^*$  نیز که از رابطه

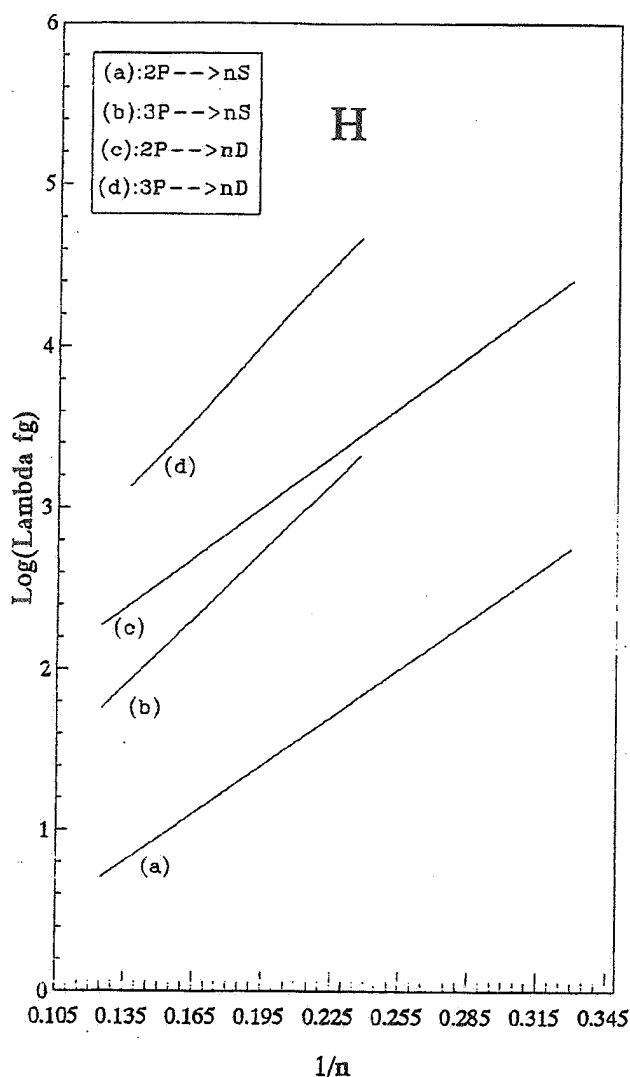
$$n_0^* = \frac{1}{(E_{n_0})^{1/2}} \quad (15)$$

به دست می‌آید  $E_{n_0}$  ارزش مطلق انرژی بستگی الکترون جهنده در یکای اتمی است) مشخص باشد. بدین ترتیب با در دست داشتن انرژی ترازهای اتم مورد مطالعه و تابعهای موج شعاعی، می‌توان قدرت خط بینایی و نیروی نوسانگر مربوط را محاسبه کرد.

در این پژوهش، با استفاده از مقادیر انرژی ترازهای اتمهای نقره و طلا [۱۹] و به کارگیری تقریب کولنی، مقادیر قدرت خط و نیروی نوسانگر مربوط به گذارهای مجاز مختلف این دو اتم را برای نخستین بار محاسبه کرده‌ایم. با استفاده از یک برنامه رایانه‌ای مبتنی بر روش چلسکی هر گروه از این داده‌ها را به یک چند جمله‌ای کمترین مربعات تقریب زده‌ایم و سپس با رسم منحنیهای مربوط، ویژگیهای این دو کمیت را مورد تجزیه و تحلیل قرار داده‌ایم.

### ۳- بررسی نتایج عددی

بررسی قدرت خط و نیروی نوسانگر اتم مس نشان داده‌است که کمیت  $\log(\lambda fg)$  (طول موج گذار و  $g$  بار آماری تراز بالایی است) برای کلیه ترازهای برانگیخته سربهای تیز و پخشیده این اتم با  $\frac{1}{n}$  (عدد کوانتومی اصلی تراز بالاتر) متناسب است [۱۵] و [۲۱]. این بستگی به جز برای اولین عضو هر سری، که از خط مستقیم انحراف دارد، خطی است. اگر نمودار  $\log(\lambda fg)$  را برحسب  $\frac{1}{n}$  برای سربهای تیز و پخشیده اتم هیدروژن رسم کنیم، دیده می‌شود که چنانکه انتظار داریم، منحنیهای مربوط با تقریب بسیار خوبی خطی هستند (شکل ۱). پیش از آن که، به بررسی منحنیهای مربوط به اتمهای نقره و طلا بپردازیم، بهتر آن است که مورد اتم سدیم را که مقادیر نیروی نوسانگر آن براساس الگوی پتانسیل محاسبه شده است [۱۶]، در نظر بگیریم. در شکل ۲، نمودار تغییرات  $\log(\lambda fg)$  را برحسب  $\frac{1}{n}$  برای گذارهای  $nP_{1/2} \rightarrow nP_{3/2}$  و  $nP_{3/2} \rightarrow nP_{5/2}$  سلسله منحنیهای مربوطه را نشان



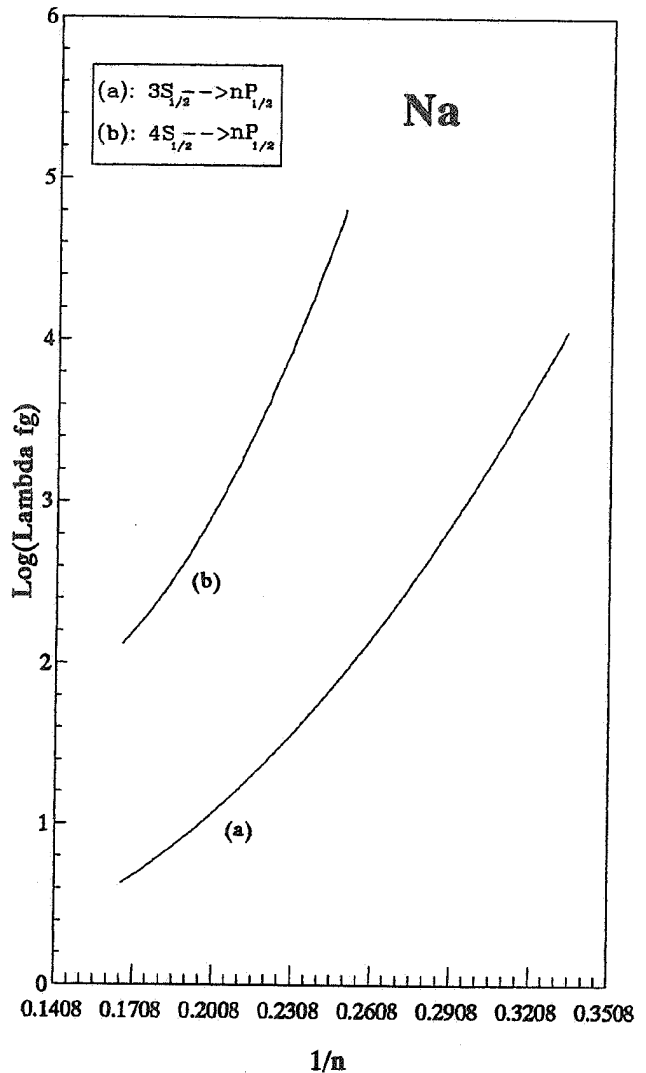
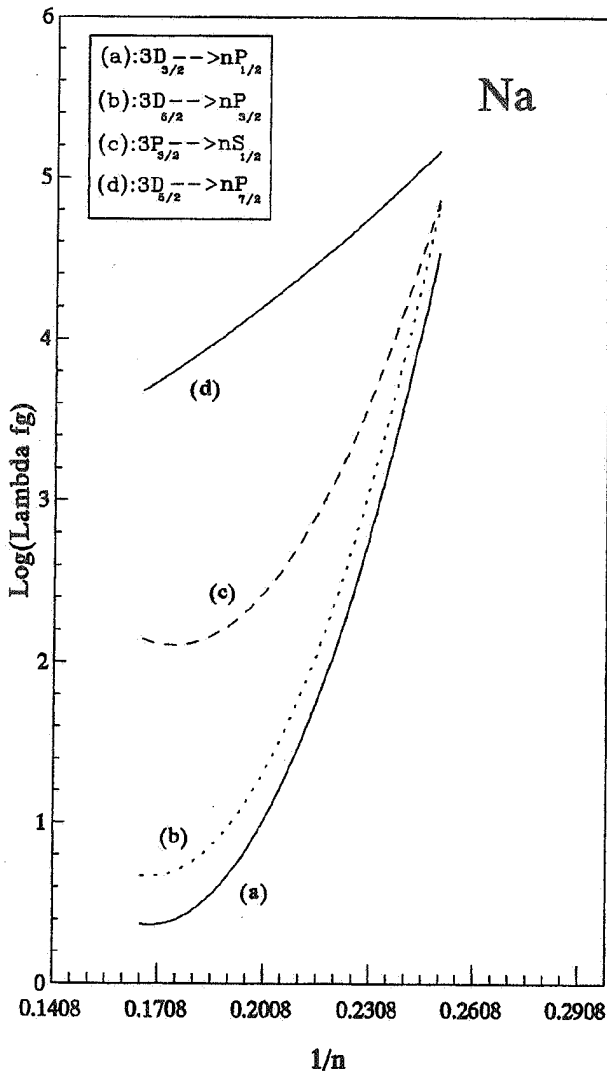
شکل ۱. نمودار تغییرات  $\log(\lambda fg)$  برحسب  $1/n$ ، برای گذارهای  $nP \rightarrow nD$  و  $nP \rightarrow nS$  در اتم هیدروژن.

تقریب کولنی به دست می‌آید. در این تقریب، فقط شکل مجانبی تابع موج الکترونی خارج از ناحیه مغز در نظر گرفته می‌شود. به بیان دیگر، با معرفی شعاعی موسوم به شعاع قطع  $r_c$  از سهم مربوط به ناحیه  $r < r_c$  چشم پوشی می‌شود. با انتگرالگیری عددی از معادله

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + \frac{\gamma Z_c}{r} + \gamma E_{n\ell} \right] R_{n\ell}(r) = 0 \quad (14)$$

همراه با دو شرط مرزی زیر:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} R_{n\ell}(r) = 0 \quad (1)$$

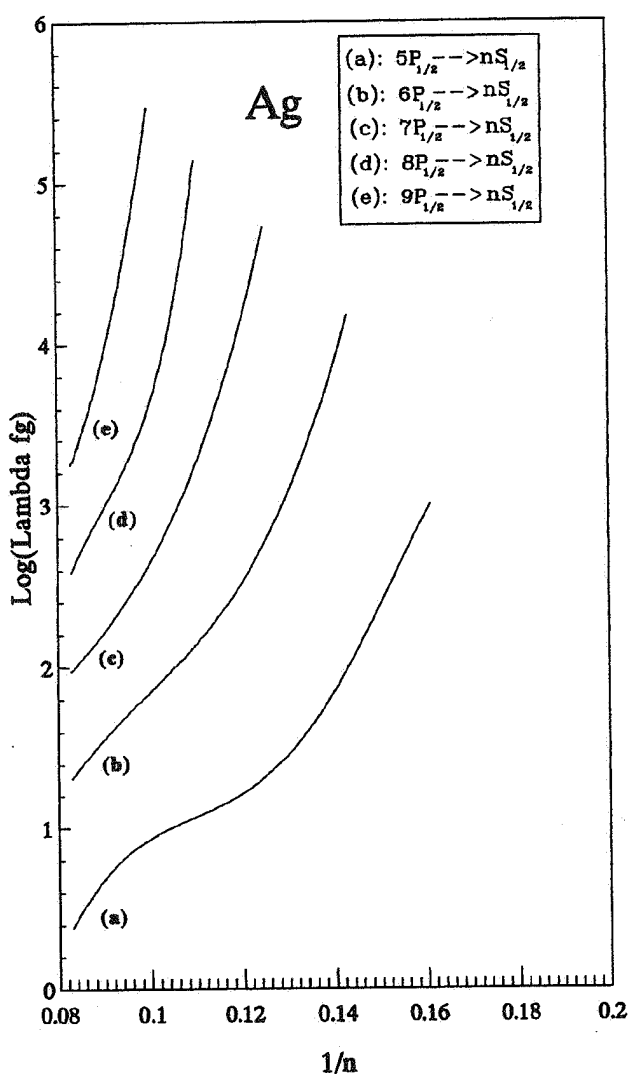


شکل ۳. نمودار تغییرات  $\log(\lambda fg)$  برحسب  $1/n$  برای گذارهای  $D \rightarrow P$  و  $S \rightarrow P$  در اتم سدیم. نیروی نوسانگر مربوط براساس الگوی پتانسیل به دست آمده است.

شکل ۲. نمودار تغییرات  $\log(\lambda fg)$  برحسب  $1/n$  برای گذارهای  $3S_{1/2} \rightarrow nP_{1/2}$  و  $4S_{1/2} \rightarrow nP_{1/2}$  در اتم سدیم. نیروی نوسانگر مربوط براساس الگوی پتانسیل به دست آمده است.

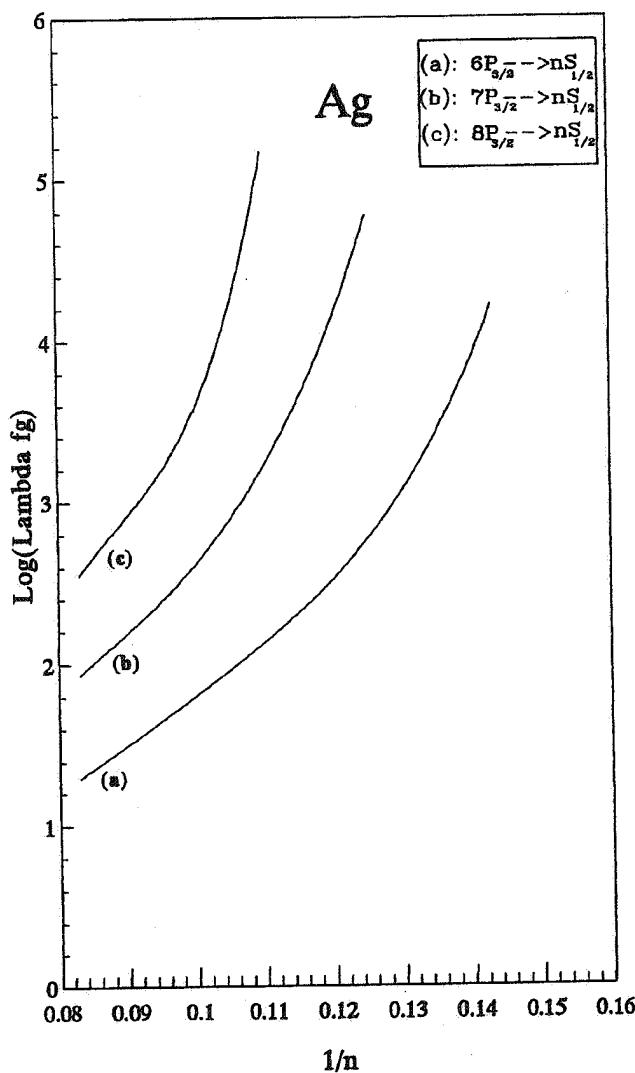
است که در چنین وضعیتی نظریه تقریب کولنی در پیشگویی قدرت خط و نیروی نوسانگر ناموفق است. دلیل این امر را می توان در برهمکنش الکترون جهنده با الکترونی از ناحیه مغز جستجو کرد. بزرگی نیروی متناظر با این برهمکنش، که به نیروی تبدالی موسوم است، به ویژه در مواردی که الکترون جهنده به ناحیه مغز نزدیک است، زیاد است. این نیرو نقش مهمی را در ساختار اتمی ایفا می کند و در مواردی باعث بروز ناهنجاریهایی در ساختار ریز و بس ریز اتمها می شود [۲۰]. اکنون، به بررسی نتایج مربوط به اتم نقره می پردازیم. شکل

می دهند. شکل ۳ با توجه به قواعد گزینش، منحنیهای مشابهی را برای گذارهای  $D \rightarrow P$  و  $P \rightarrow S$  نشان می دهد. همانطور که دیده می شود، منحنیهای  $\log(\lambda fg)$  برحسب  $1/n$  با کاهش مقدار  $n$  خطی می شوند و برای  $n$  های بزرگ انحراف از خط مستقیم دیده می شود. مقدار این انحناء، به مقادیر  $L$  و  $J$  حالت اولیه و نهایی گذار بستگی دارد به طوری که با افزایش این دو مقدار منحنی مربوط، به خط مستقیم نزدیک می شود (منحنی  $d$  در شکل ۳). بدین ترتیب نتیجه می گیریم که برای مقادیر کوچک  $L$  و  $J$  نمی توان پتانسیل را متقارن کروی در نظر گرفت. (آشکار



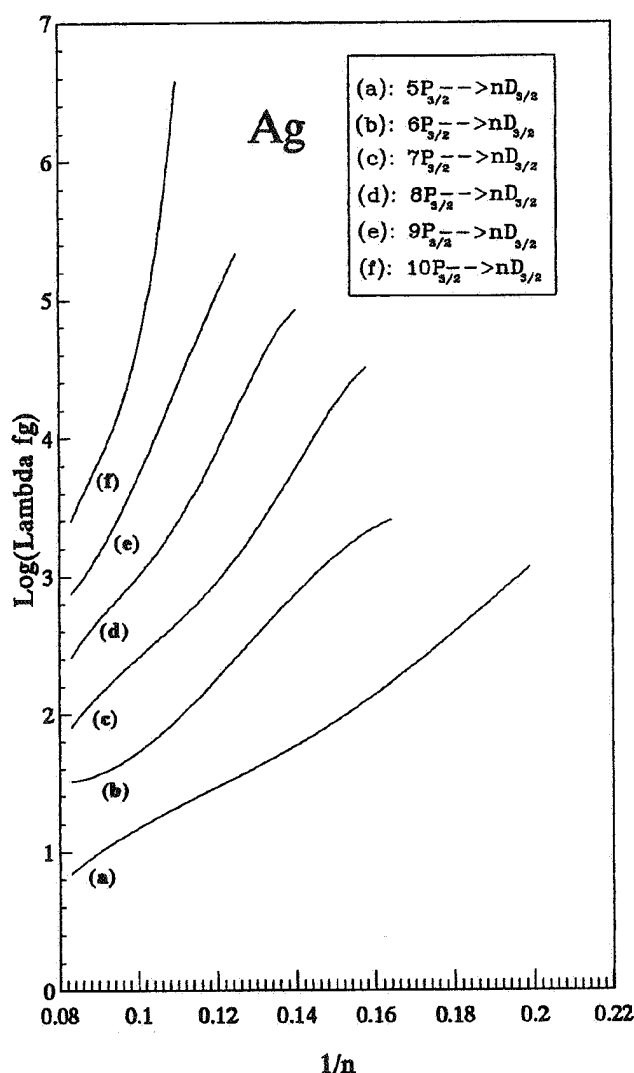
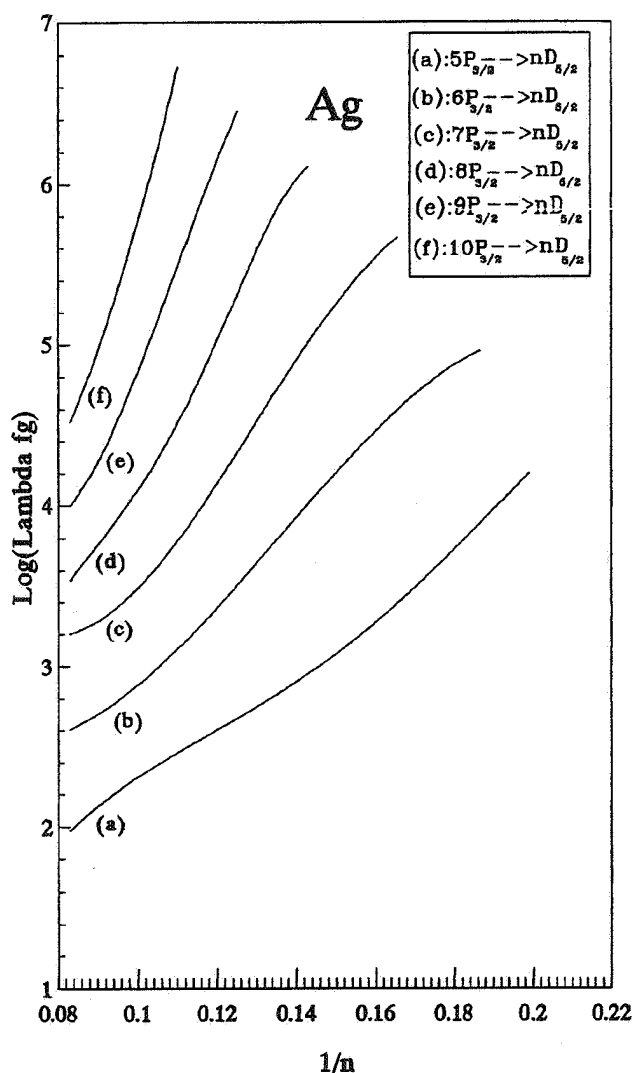
شکل ۵. نمودار تغییرات  $\log(\lambda fg)$  برحسب  $1/n$  برای گذارهای  $nS_{1/2} \rightarrow 5P_{1/2}$  در اتم نقره.

انحنای منحنی آشکارا تغییر می‌کند. البته با افزایش مقدار  $n'$ ، تغییرات به شکل خطی در می‌آیند. از مقایسه شکل‌های (۴) و (۵) مشخص می‌شود که نه تنها عدد کوانتومی اصلی حالت اولیه، بلکه تغییر عدد کوانتومی تکانه زاویه‌ای کل  $\Delta J$  نیز بر میزان انحراف منحنی‌های از خط مستقیم تأثیر می‌گذارد. به طوری که برای مقادیر کوچک  $n'$ ، تأثیر  $\Delta J$  بسیار چشمگیر است. دلیل این امر ناشی از نزدیکی الکترون جهنده به ناحیه مغز و بزرگی نیروهای تبادلی است. در شکل ۶، گذارهای  $nD_{3/2} \rightarrow nP_{3/2}$  را مورد نظر قرار داده‌ایم. نمودارهای مربوط، هم برای مقادیر کوچک  $n$  و هم مقادیر بزرگ  $n$  از خط



شکل ۴. نمودار تغییرات  $\log(\lambda fg)$  برحسب  $1/n$  برای گذارهای  $nS_{1/2} \rightarrow nP_{3/2}$  در اتم نقره.

۴ نمودارهای  $\log(\lambda fg)$  را برحسب  $1/n$  برای گذارهای  $nS_{1/2} \rightarrow nP_{3/2}$  نشان می‌دهد. از این منحنی‌ها چنین برمی‌آید که بستگی  $\log(\lambda fg)$  به  $1/n$ ، تنها در محدوده‌ای از مقادیر  $n$  خطی است. با افزایش مقدار  $n'$  شیب منحنی زیاد می‌شود. به بیان دیگر، با دور شدن الکترون جهنده از ناحیه مغز تغییرات نیروی نوسانگر نسبت به عدد کوانتومی اصلی حالت نهایی گذار سریعتر می‌شود. در شکل ۵ منحنی‌های مربوط به گذارهای  $nS_{1/2} \rightarrow nP_{1/2}$  نشان داده شده‌اند. شیب این منحنی‌ها نسبت به شیب منحنی‌های شکل ۴ افزایش یافته است. به ویژه برای منحنی (a)، که به گذار  $nS_{1/2} \rightarrow 5P_{1/2}$  مربوط است، جهت

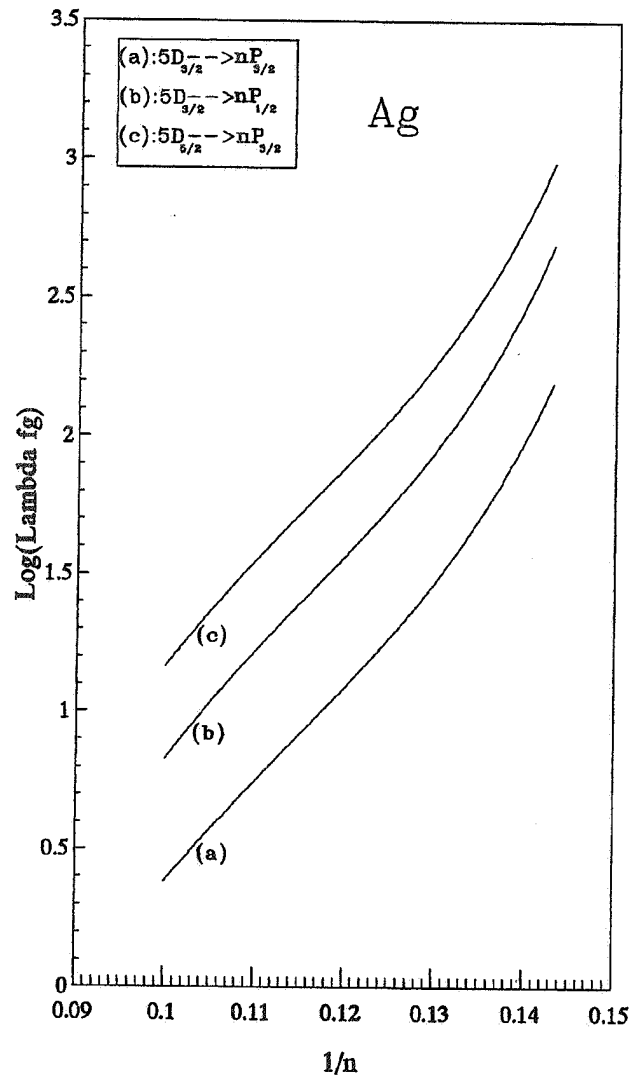
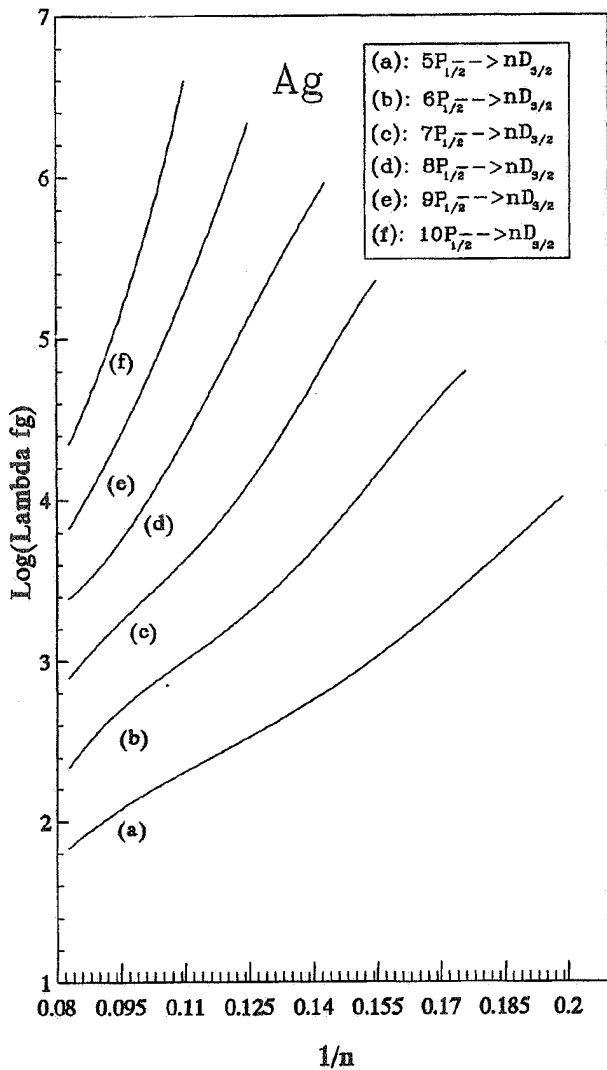


شکل ۷. نمودار تغییرات  $\log(\lambda fg)$  برحسب  $1/n$  برای گذارهای  $n^1P_{3/2} \rightarrow nS_{5/2}$  در اتم نقره.

شکل ۶. نمودار تغییرات  $\log(\lambda fg)$  برحسب  $1/n$  برای گذارهای  $n^1P_{3/2} \rightarrow nS_{3/2}$  در اتم نقره.

در مجموع می‌توانیم چنین نتیجه بگیریم که: (الف) با افزایش عدد کوانتومی اصلی حالت اولیه الکترون جهنده، منحنیهای تغییرات  $\log(\lambda fg)$  برحسب  $1/n$  به شکل خط مستقیم در می‌آیند. به بیان دیگر، اتم رفتار هیدروژن گونه‌ای از

مستقیم منحرف می‌شوند. اما تا آنجا که به  $n$  مربوط می‌شود، منحنیها برای مقادیر بزرگ  $n$  به خط مستقیم نزدیکند. نمودارهای تغییرات کمیت  $\log(\lambda fg)$  برای گذارهای  $n^1P_{3/2} \rightarrow nD_{5/2}$  رفتاری مشابه با نمودارهای شکل ۶ دارند، تنها با این تفاوت که در این مورد شیب آنها بیشتر است (شکل ۷). این تفاوت شیب ناشی از اثر مقدار  $\Delta J$  است، که پیش از این نیز بدان اشاره کردیم (شکلهای ۴ و ۵). در شکل ۸ نمودارهای مربوط به گذارهای با  $\Delta J = 0, 1$  را نشان داده‌ایم. همانطور که دیده می‌شود، بازهم برای مقادیر کوچک  $n$ ، منحنیها از خط راست منحرف می‌شوند. نمودارهای مربوط به گذارهای



شکل ۹. نمودار تغییرات  $\log(\lambda fg)$  برحسب  $1/n$  برای گذارهای  $nD_{3/2} \leftarrow nP_{1/2}$  در اتم نقره.

شکل ۸. نمودار تغییرات  $\log(\lambda fg)$  برحسب  $1/n$  برای گذارهای  $nP \leftarrow nD$ ، با  $\Delta J = 0, 1$ ، در اتم نقره.

شیب نمودارهای مربوط دارد. برای آن دسته از گذارهایی که  $\Delta J = \Delta L$  است، قدرت خط بینایی و نیروی نوسانگر بیشترین مقادارهای خود را خواهند داشت.

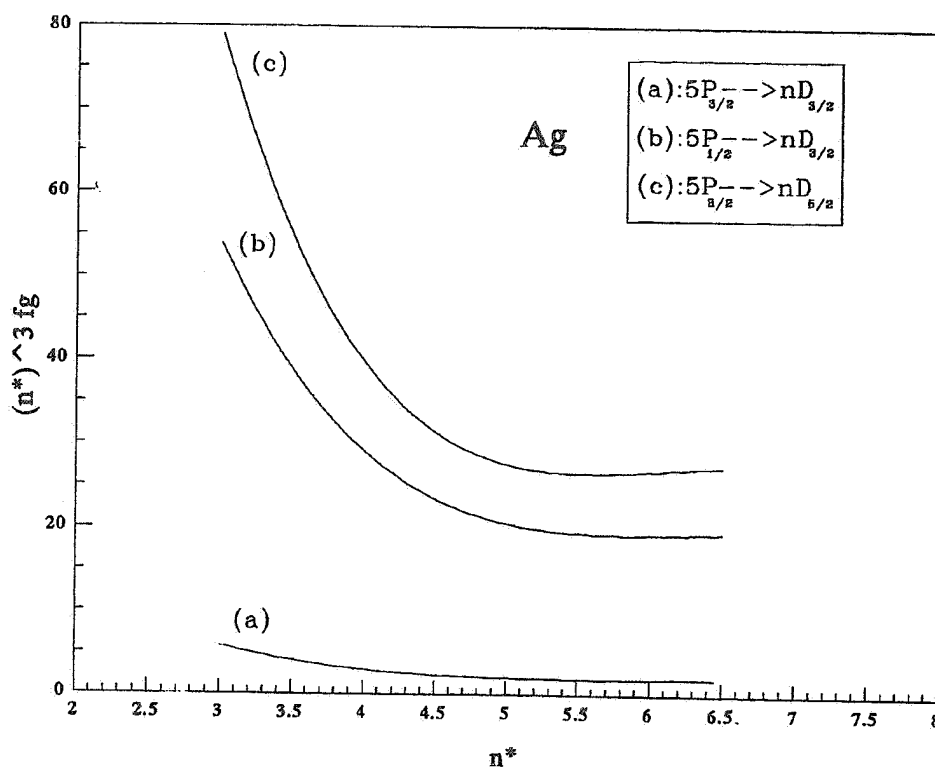
بررسی نیروی نوسانگر برای هر یک از سریهای خطوط بینایی اتم هیدروژن نشان داده است که این کمیت با وارون مکعب عدد کوانتومی اصلی تراز بالایی متناسب است [۱۵] و برای اتمهای سنگینتر بستگی مشابهی را انتظار داریم، تنها با این تفاوت که به جای  $n$  باید عدد کوانتومی مؤثر  $n^*$  را در نظر بگیریم. منحنی  $n^3 fg$  برحسب  $n$  برای خطوط بینایی تیز و پخشیده اتم هیدروژن با تقریب بسیار خوبی خطی هستند. از

خود نشان می دهد. این، خود گویای موفقیت تقریب کولنی در پیشگویی نیروی نوسانگر و قدرت خط بینایی اتم مورد مطالعه است.

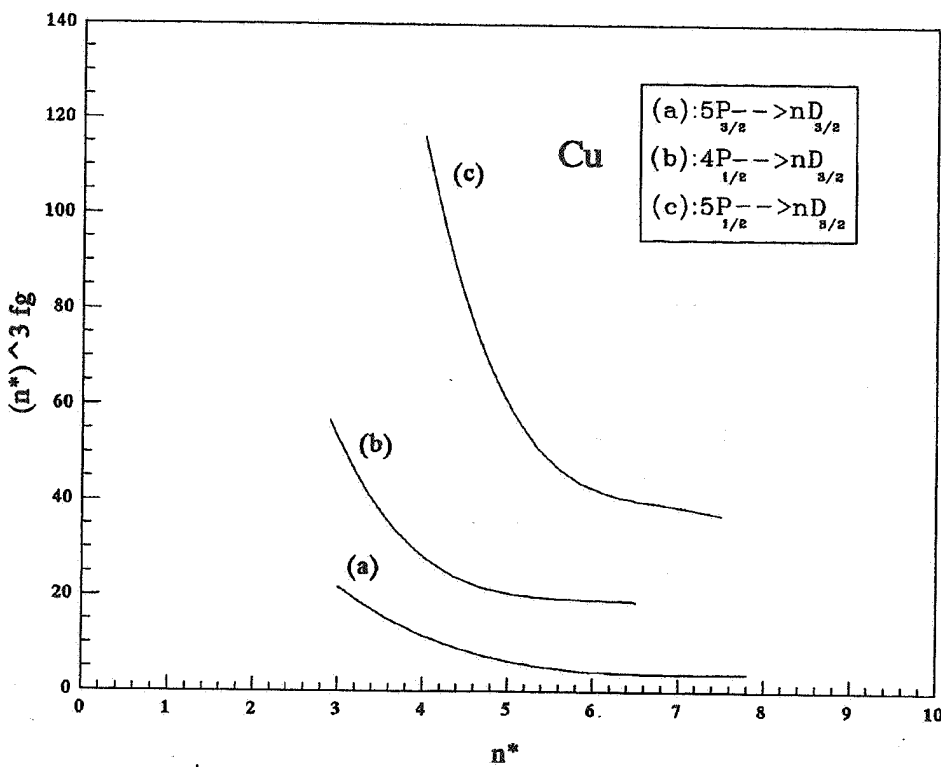
ب) تغییر انحنای منحنیها، پس از یک مقدار معین  $n$  اتفاق می افتد. به عبارت دیگر در فاصله معینی از ناحیه مغز به بعد، اتم مورد مطالعه رفتاری شبیه به اتم هیدروژن دارد و تقریب کولنی معتبر است. این فاصله، همان شعاع قطع  $r_c$  است که پیش از این به آن اشاره کردیم.

پ) برای مقادیر کوچک عدد کوانتومی اصلی حالت اولیه الکترون، مقدار  $\Delta J$  گذار اثر چشمگیری بر میزان انحنا و

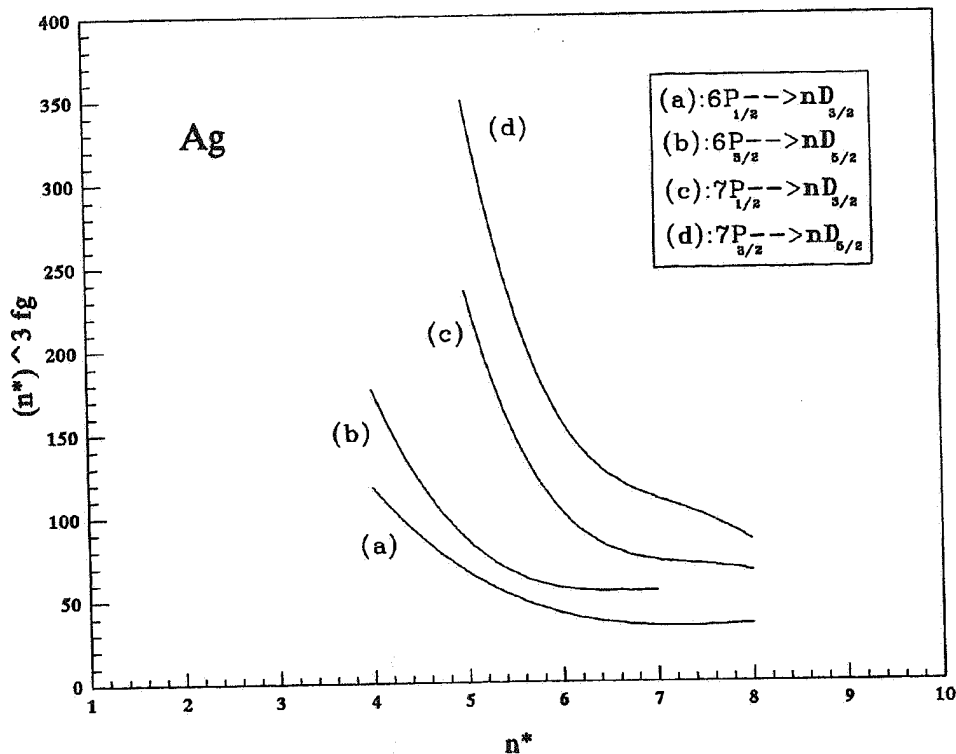




شکل ۱۰. نمودار تغییرات  $n^*{}^3 fg$  برحسب  $n^*$  برای گذارهای  $5P_{1/2,3/2} \rightarrow nD_{3/2,5/2}$  در اتم نقره.



شکل ۱۱. نمودار تغییرات  $n^*{}^3 fg$  برحسب  $n^*$  برای گذارهای  $P_{1/2,3/2} \rightarrow nD_{3/2}$  در اتم نقره.



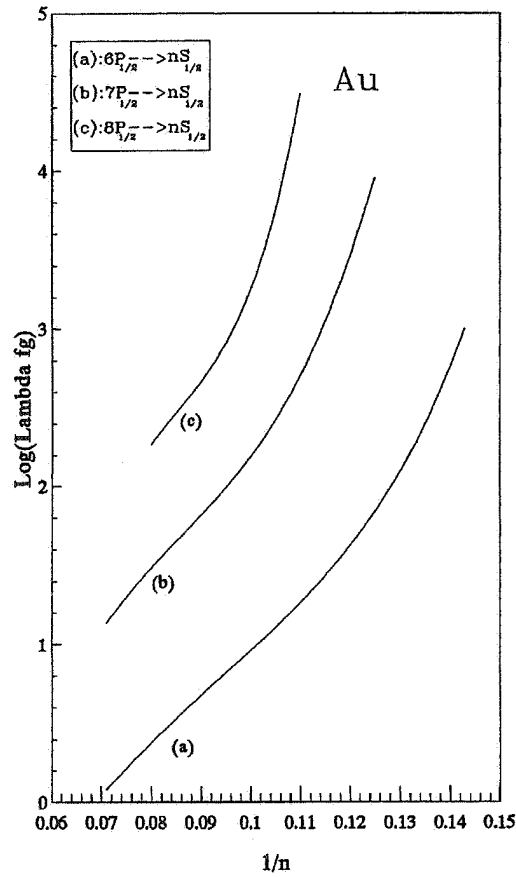
شکل ۱۲. نمودار تغییرات  $n^{*3}fg$  برحسب  $n^*$  برای گذارهای  $nD_{3/2,5/2} \rightarrow 6P_{1/2,3/2}$  در اتم نقره.

براساس نظریه تقریب کولنی، مقادیر قدرت خط و نیروی نوسانگر را برای گذارهای مجاز مختلف در اتم طلا نیز محاسبه کرده‌ایم. بررسی نمودار تغییرات کمیت  $\log(\lambda fg)$  برحسب  $\frac{1}{n}$  و نمودار تغییرات کمیت  $n^{*3}fg$  برحسب  $n^*$  برای گذارهای مختلف اتم طلا نشان می‌دهد که همان نتایجی که پیش از این در مورد اتم نقره به دست آوردیم، کماکان در مورد اتم طلا نیز برقرارند. برخی نمودارهای مربوط در شکل‌های ۱۳، ۱۴ و ۱۵ آورده شده‌اند.

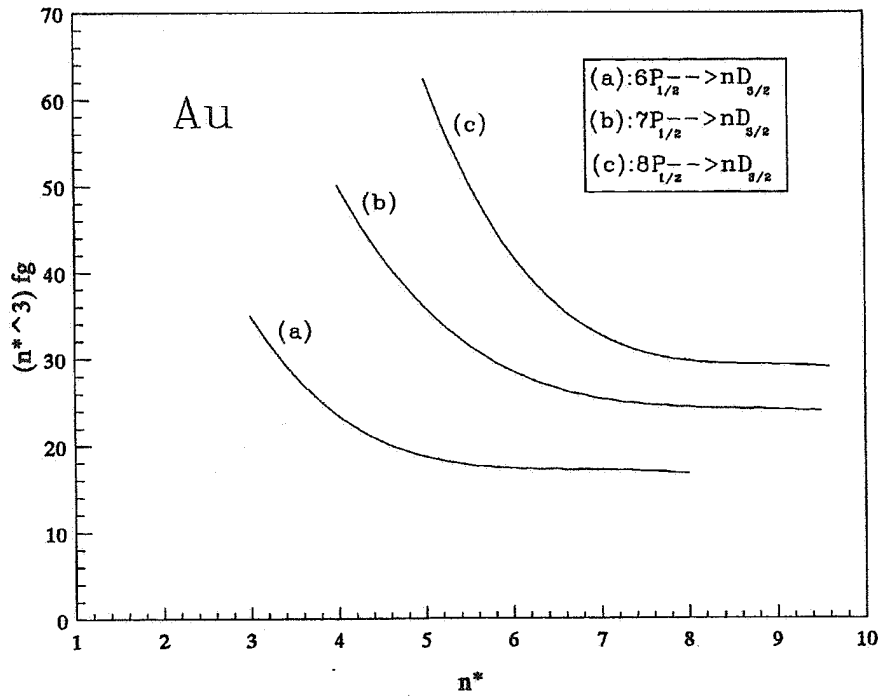
#### ۴. جمع‌بندی کلی

براساس نظریه تقریب کولنی، قدرت خط و نیروی نوسانگر مربوط به گذارهای مجاز مختلف را برای اتم‌های نقره و طلا محاسبه کرده‌ایم. بررسی نتایج عددی نشان می‌دهند که وابستگی کمیت  $\log(\lambda fg)$  به عکس عدد کوانتومی اصلی تراز بالاتر،  $\frac{1}{n}$ ، فقط برای مقادیر بزرگ عدد کوانتومی اصلی حالت اولیه الکترون جهنده خطی است. در این میان، تغییر عدد کوانتومی تکانه زاویه‌ای کل نیز در مقدار انحنا و شیب نمودارهای مربوط مؤثر است. انحراف منحنیها از خطوط مستقیم، ناشی از اثر نیروهای تبادلی است. نمودار تغییرات

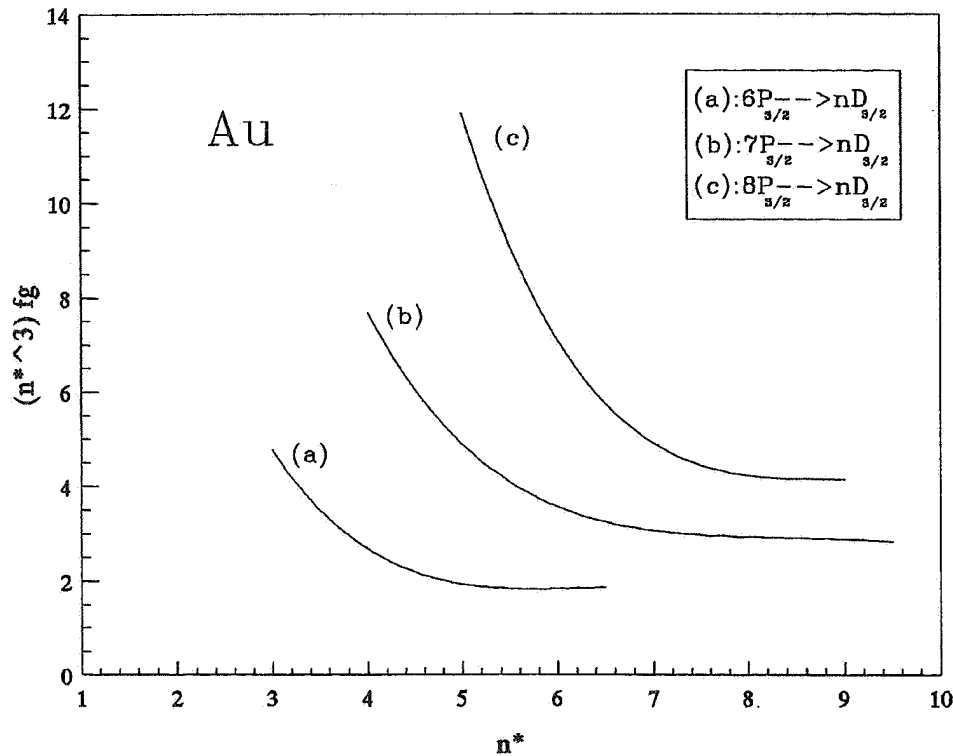
این رو، انتظار داریم که برای اتم‌های چند ظرفیتی تک الکترونی نیز منحنی تغییرات  $n^{*3}fg$  برحسب  $n^*$  خطی باشد. در شکل ۱۰، نمودار مربوط به گذارهای  $nD_{3/2,5/2} \rightarrow 6P_{1/2,3/2}$  را در اتم نقره رسم کرده‌ایم. همان طور که دیده می‌شود، با افزایش مقدار  $n^*$ ، تغییرات کمیت  $n^{*3}fg$  کند می‌شود. به طوری که برای مقادیر بزرگ  $n^*$ ، منحنیهای مربوط به شکل افقی در می‌آیند. [این نتیجه برای اتم سدیم نیز بر اساس الگوی پتانسیل به دست آمده است (۱۶)]. علاوه بر این، اثر مقدار  $\Delta J$  ی گذار نیز به خوبی مشخص است. برای  $\Delta J = 0$  منحنی مربوط در گستره وسیعتری از مقادیر  $n^*$  خطی است. این موضوع با نتایج حاصل از بررسی سیستماتیک عام نیروی نوسانگر اتمها سازگاری کامل دارد [۱۷]. به منظور مقایسه، نمونه ای از این منحنیها را برای گذارهای  $nD_{3/2} \rightarrow 6P_{1/2,3/2}$  در اتم مس رسم کرده‌ایم (شکل ۱۱). بررسیهای دقیقتر نشان می‌دهند که منحنیهای مربوط، برای مقادیر بزرگ  $n^*$  و برخی گذارهای معین خطی نیستند و انحرافهای چشمگیری از خود نشان می‌دهند (منحنی d شکل ۱۲). انتظار داریم که عدد کوانتومی  $J$  ی حالت‌های اولیه و نهایی اتمی در انحرافهای مزبور نقش داشته باشند.



شکل ۱۳. نمودار تغییرات  $\log(\lambda fg)$  برحسب  $1/n$ ، برای گذارهای  $nP_{1/2} \rightarrow nS_{1/2}$  در اتم طلا.



شکل ۱۴. نمودار تغییرات  $n^{*3} fg$  برحسب  $n^*$  برای گذارهای  $nP_{1/2} \rightarrow nD_{3/2}$  در اتم طلا.



شکل ۱۵. نمودار تغییرات  $n^{*3}fg$  بر حسب  $n^*$  برای گذارهای  $nD_{3/2} \rightarrow nP_{3/2}$  در اتم طلا.

مقادیر بزرگ  $n^*$  این بستگی خطی است. در اینجا نیز عدد کوانتومی تکانه زاویه‌ای حالت‌های اولیه و نهایی الکترون جهنده در انحراف منحنی‌های مربوط نقش دارد.

به نظر مؤلفین، محاسبه قدرت خط و نیروی نوسانگر اتم‌های نقره و طلا با استفاده از روش الگوی پتانسیل و مقایسه نتایج حاصل با نتایج پژوهش حاضر، زمینه پژوهش دیگری به حساب می‌آید که خود، محک مناسبی است برای بررسی سازگاری این روش و روش تقریب کولنی.

کمیت  $\log(Afg)$  بر حسب  $\frac{1}{n}$  را براساس داده‌های حاصل از الگوی پتانسیل برای برخی گذارهای مجاز اتم سدیم نیز رسم کرده‌ایم. این نمودارها گویای همان نتایجی است که در مورد اتم‌های نقره و طلا، براساس نظریه تقریب کولنی به دست آورده‌ایم. این، نشانگر سازگاری میان دو رهیافت نظری متفاوتی است که برای محاسبه قدرت خط و نیروی نوسانگر به کار می‌روند. علاوه بر این، نمودار کمیت  $n^{*3}fg$  بر حسب  $n^*$  برای گذارهای مختلف اتم‌های نقره و طلا نشان می‌دهند که نیروی نوسانگر با وارون مکعب عدد کوانتومی مؤثر تراز بالاتر متناسب است و برای

### مراجع

۱. س. سونبرگ، بینابنمایی اتمی و مولکولی، جنبه‌های بنیادی و کاربردهای عملی، ترجمه احمد کیاست پور، محمود سلطان الکتابی و محمد حسین نادری، انتشارات دانشگاه اصفهان، چاپ اول (۱۳۷۶).
۲. J Carlson and L Sturesson, *Z. Phys. D-Atoms, Molecules and Clusters*, 14 (1989) 281.
۳. A Gaupp, P Kuske and H J Andra, *Phys. Rev. A*, 26 (1982) 3351.
۴. W Ansbacher, Y Li and E H Pinnington, *Phys. Lett A*, 139 (1989) 165.
۵. R N Gosselein, E H Pinnington and W Ansbacher, *Phys. Rev. A*, 38 (1988) 4887.
۶. J Carlsson, L Sturesson, and S Svanberg, *Z. Phys. D-Atoms, Molecules and Clusters*, 11 (1989) 287.

- (1989) 68.
۱۵. م. سلطان‌الکتابی، مجله پژوهشی دانشگاه اصفهان "علوم پایه"، جلد چهارم، شماره‌های ۱ و ۲، پاییز ۱۳۷۰.
16. C Laughlin, *Physica Scripta*, Vol. 45 (1992) 238.
17. R D Cowan, *The Theory of Atomic Structure and Spectra*, University of California Press, (1981).
18. M E Rose, *Elementary Theory of Angular momentum*, Wiley, NY, (1957).
19. C E Moore, *Atomic Energy Levels*, NBC Circular No. 467 (U.S government publication office, Washington D.C 1958).
20. R M Sternheimer, J E Rodgers and T P Das, *Phys.*
7. J Carlsson, P Joensson and L Sturesson, *Z. Phys. D-Atoms, Molecules and Clusters*, 16 (1990) 87.
8. P Hannaford and R M Lowe, *Opt. Eng.*, 22 (1983) 532.
9. M Soltanolkotabi and R Gupta, *Phys. Lett A*, 96 (1983) 399.
10. M Soltanolkotabi and R Gupta, *Physica C* (Amsterdam), 123 (1984) 386.
11. J Bengtsson, J Larsson and S Svanberg, *Phys. Rev. A*, 42 (1990) 5457.
12. J Bengtsson, P Joensson, J Larsson and S Svanberg, *Z. Phys. D*, 22 (1991) 437.
13. D R Bates and A Damgaard, *Phil. Trans. Roy.*
14. M Soltanolkotabi, *J. Sci. I. R. Iran*, Vol. 1, No. 2