Downloaded from ijpr-old.iut.ac.ir at 17:33 IRST on Saturday January 9th 2021

مجلهٔ پژوهش فیزیک ایران

مجلهٔ پژوهش فیزیک ایران، جلد ۱، شمارهٔ ۴، تابستان ۱۳۷۷

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

محمود سلطان الکتابی، احمد کیاست پور و محمد حسین نادری

گروه فیزیک، دانشگاه اصفهان

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

چکیده

در این مقاله، با به کارگیری نظریهٔ تقریب کولنی قدرت خط بینابی و نیروی نوسانگر مربوط به گذارهای مختلف اتمهای نقره و طلا را مورد مطالعه قرار داده‌ایم. نمودارهای کمیت $log(\lambda fg)$ (λ 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 اولیهٔ الکترون جهنده تغییرات به صورت خطی است. نقش تغییر عدد کوانتومی تکانهٔ زاویه ای کل، ΔJ، در میزان انحنا و شیب منحنیهای مربوط را نیز مورد بررسی قرار داده‌ایم. انحراف منحنیها از خط مستقیم، که نشانگر عدم موفقیت نظریهٔ تقریب کولنی در محاسبهٔ نیروی نوسانگر و قدرت خط بینابی اتم است، ناشی از اثر نیروهای تبادلی است.

نمودار کمیت $n^{*3}fg$ (n^* عدد کوانتومی مؤثر تراز بالا) را نیز برای گذارهای مختلف اتمهای نقره و طلا رسم کرده‌ایم. 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 تکانهٔ زاویه‌ای کل حالتهای اولیه و نهایی الکترون جهنده می‌دانیم.

۱. مقدمه

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 کنندهٔ 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 محاسبهٔ فراوانیهای نسبی عناصر در خورشید و ستارگان، از اهمیت چشمگیری برخوردارند [۱].

به منظور محاسبهٔ 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 بینابی اتمهای فلزی، به ویژه مس، طلا و نقره، از یک سو و از سوی دیگر، تقریبی بودن داده‌های نظری موجود محاسبهٔ بسیار دقیق کمیتهای مزبور را عملاً ناممکن ساخته است. روشهای آزمایشگاهی مبتنی بر برانگیزش لیزری گزینشی اتمها [۲-۷]، فلوئورسانی لیزر القاییده [۸]، بینابنمایی تقاطع تراز [۹ و ۱۰]، بینابنمایی لیزری

Downloaded from ijpr-old.iut.ac.ir at 17:33 IRST on Saturday January 9th 2021

تپی [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 محاسبهٔ کمیتهای یاد شده تاکنون روشهای مختلفی پرورانده شده‌اند، که به جز برای اتم هیدروژن (ساده‌ترین اتم) همگی تقریبی اند. در این میان، ساده‌ترین و نیز سرراست‌ترین این روشها، نظریهٔ 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 دست‌آورد. 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 نظریهٔ مزبور ویژگیهای قدرت خط و نیروی نوسانگر برای سریهای تیز و پخشیدهٔ 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 نظریهٔ تقریب کولنی. در رهیافت نظری دیگری که به الگوی پتانسیل موسوم است، نیروهای نوسانگر برای گذارهای مجاز دو قطبی الکتریکی در دستگاههای تک الکترونی Na، Mg^+، K و Ca^+ 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 تبادلی 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 بارهٔ نظریهٔ تقریب کولنی، با استفاده از نظریهٔ 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.

۲. مفاهیم اولیه

۲.۱. احتمال گذار، قدرت خط و نیروی نوسانگر

آهنگ گذار گسیل خود به خود از تراز برانگیختهٔ $|\gamma' J' M'>$ به تراز پایینتر $|\gamma J M>$ ، $[J'(J)]$، عدد کوانتومی تکانهٔ زاویه‌ای کل، $M'(M)$ عدد کوانتومی تصویر تکانهٔ زاویه‌ای کل بر روی محور z، $\gamma'(\gamma)$ عدد کوانتومی وابسته به کمیتی به غیر از تکانهٔ زاویه‌ای] با رابطهٔ زیر داده می‌شود [۱۷]

$$A_{J'J}=\frac{64\pi^4 e^2 a_0^2 k^3}{3h}\sum_q\left|\left\langle\gamma J M\left|P_q^{(1)}\right|\gamma' J' M'\right\rangle\right|^2 \quad (1)$$

که در آن

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

q امین مؤلفهٔ گشتاور دو قطبی کلاسیکی اتم در یکای ea_0 است. a_0 شعاع اتم بوهر، k عدد موج، N تعداد الکترونهای اتمی، e بار الکترون و h ثابت پلانک است.

با به کار گیری قضیهٔ ویگنر-اکارت [۱۷] چنین خواهیم داشت

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

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

$$\Delta J = J - J' = 0, \pm 1 \quad ; \quad J = 0 \not\leftrightarrow J' = 0 \quad (4\text{-الف})$$

و

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

این بدان معنی است که باید چنین داشته باشیم

$q = 0$ برای $M = M'$

$q = 1$ برای $M = M' + 1$

$q = -1$ برای $M = M' - 1$

که همان قواعد گزینش معمول است.

با ترکیب روابط (۱) و (۳) خواهیم داشت

Downloaded from ijpr-old.iut.ac.ir at 17:33 IRST on Saturday January 9th 2021

$$A_{J',J} = \frac{64\pi^4 e^2 a_0^2 k^3}{3h} S_{J',J} \sum_q \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & q & M' \end{pmatrix}^2 \quad (5)$$

که در آن

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

به قدرت خط موسوم است. با به کار بستن قواعد گزینشی که مربوط به نمادهای j- ۳ هستند [۱۸]، رابطهٔ (۵) به شکل زیر در خواهد آمد

$$A_{J',J} = \frac{64\pi^4 e^2 a_0^2 k^3}{3h(2J'+1)} S_{J',J} \quad (7)$$

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

$$gA_{J',J} = (2J'+1)A_{J',J} = \frac{64\pi^4 e^2 a_0^2 k^3}{3h} S_{J',J}$$

$$= 2/0261 \times 10^{-6} k^3 S_{J',J} \ (sec^{-1}) \quad (8)$$

در اینجا، k برحسب cm^{-1} (کایزر) و $S_{J',J}$ در یکای اتمی $e^2 a_0^2$ 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 می‌نامند. رابطهٔ (۵) گویای این واقعیت است که شدت نور گسیلی بین مؤلفه‌های مجزای خط، یعنی M و M' های مختلف، تقسیم می‌شود. کمیت دیگری که با استفاده از آن می‌توان قدرت خط بینابی را تعیین کرد، نیروی نوسانگر $f_{J',J}$ است [۱۷]،

$$f_{J',J} = \frac{8\pi^2 mca_0^2 k}{3h(2J+1)} S_{J',J} = \frac{(E_j - E_i)}{3(2J+1)} S_{J',J} \quad (9)$$

$(E_j - E_i)$، انرژی گذار از حالت بالایی j (با عدد کوانتومی تکانهٔ زاویه‌ای کل J') به حالت پایینی i (با عدد کوانتومی تکانهٔ زاویه‌ای کل J) برحسب ثابت ریدبرگ است. گفتنی است که این رابطه، بیانگر احتمال کل انتقال از یک حالت پایینی i به تعداد $(2J'+1)$ حالت بالایی j است.

از رابطه های (۷) و (۹) چنین بر می‌آید که برای محاسبهٔ احتمال گذار و نیروی نوسانگر، لازم است که مقدار قدرت خط مشخص باشد. از سویی، برای محاسبهٔ قدرت خط باید تابعهای موج $|\gamma J>$ و $|\gamma' J'>$ مشخص باشند. این تابعها معمولاً برحسب پایهٔ مناسبی از ویژه تابعها بسط داده می‌شوند.

قویترین خطوط بینابی، مربوط به آن دسته گذارهایی هستند که برای آنها $\Delta J = \Delta L$ (L عدد کوانتومی تکانهٔ زاویه‌ای مداری است) [۱۷]. چنین خطوط بینابی را خطوط اصلی گویند. در میان خطوط اصلی خطی که مربوط به بیشترین مقدار J است، قویترین است و قدرت بقیهٔ خطوط با افزایش J کاهش می‌یابد. خطوط بینابی که مربوط به گذارهای با $\Delta J \neq \Delta L$ هستند، خطوط بینابی اقماری نام دارند.

۲.۲. نظریهٔ تقریب کولنی

از رابطه‌های (۶)، (۷) و (۹) چنین بر می‌آید که احتمال گذار، قدرت خط و نیروی نوسانگر را با در دست داشتن عناصر ماتریسی گشتاور دو قطبی الکتریکی که در تابش دخالت دارند می‌توان تعیین کرد. در نظریهٔ تقریب کولنی فرض بر این است که الکترون تحت تأثیر پتانسیلی با تقارن مرکزی است. از این رو، بخش زاویه‌ای عناصر ماتریسی را می‌توان جداگانه محاسبه کرد. محاسبهٔ بخش شعاعی عناصر ماتریسی نیز به کمک روش عددی و با تقریبی که برای تابع موج به کاربرده می‌شود، انجام می‌پذیرد. بدین ترتیب با در نظر گرفتن جفت شدگی L-S، رابطهٔ (۶) برای اتمهای هیدروژن گونه به شکل زیر در می‌آید [۱۴]

$$S_{J',J} = G(L)\,G(m)\,(a_0 e)^2 \sigma^2 \quad (10)$$

که در آن،

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

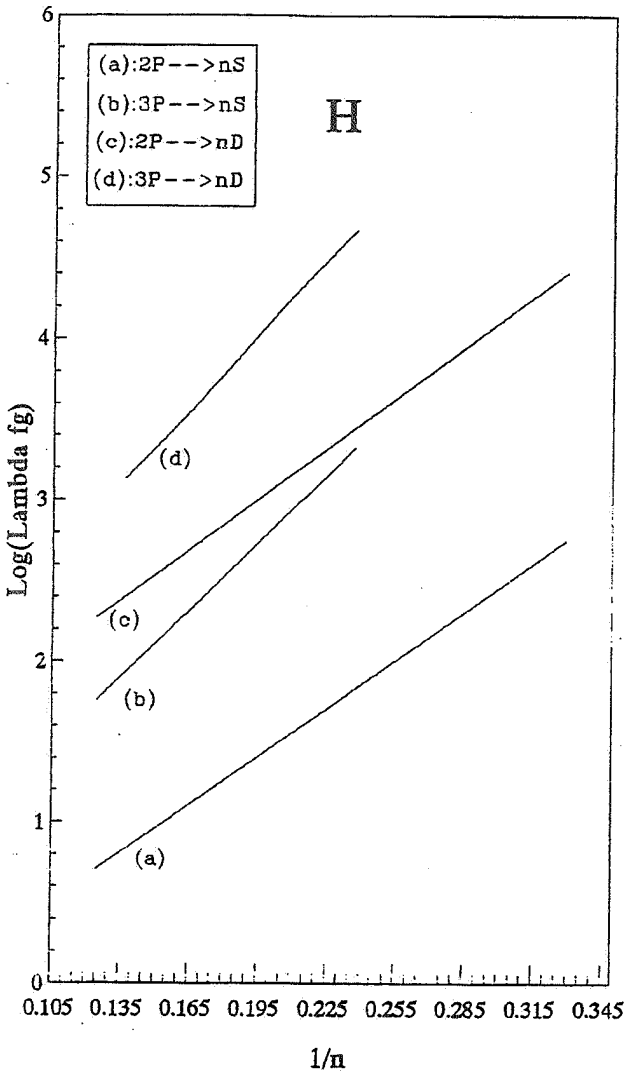
$$G(m) = (2S+1)(2L+1)(2L'+1)\ell_>(4\ell_>^2 - 1)W^2(\ell L \ell' L';L1) \quad (12)$$

و

$$\sigma^2 = \frac{1}{(4\ell_>^2 - 1)} \left[\int R^*_{n,\ell}(r)\, R_{n',\ell'}(r)\, r^3\, dr \right]^2 \quad (13)$$

در اینجا، $W(\ell L \ell' L';L1)$ ضریب راکاه، $\ell_>$ مقدار بزرگتر تکانهٔ زاویه‌ای مداری از بین دو مقدار ℓ و ℓ'، L_1 م عدد کوانتومی تکانهٔ زاویه‌ای مداری ناحیهٔ مغز و $R_{n,\ell}$ تابع موج شعاعی بهنجار شدهٔ الکترون جهنده است، که توسط معادلهٔ شرودینگر تحت

Downloaded from ijpr-old.iut.ac.ir at 17:33 IRST on Saturday January 9th 2021



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

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

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

همراه با دو شرط مرزی زیر:

۱) $lim_{r\to\infty} R_{n\ell}(r) = 0$

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

تابع موج شعاعی الکترون به دست می‌آید.

به منظور محاسبهٔ σ^2 لازم است که علاوه بر تابع موج شعاعی و عددهای کوانتومی ℓ و ℓ'، عدد کوانتومی مؤثر n_ℓ^* نیز که از رابطهٔ

$$n_\ell^* = \frac{1}{(E_{n\ell})^{1/2}} \qquad (15)$$

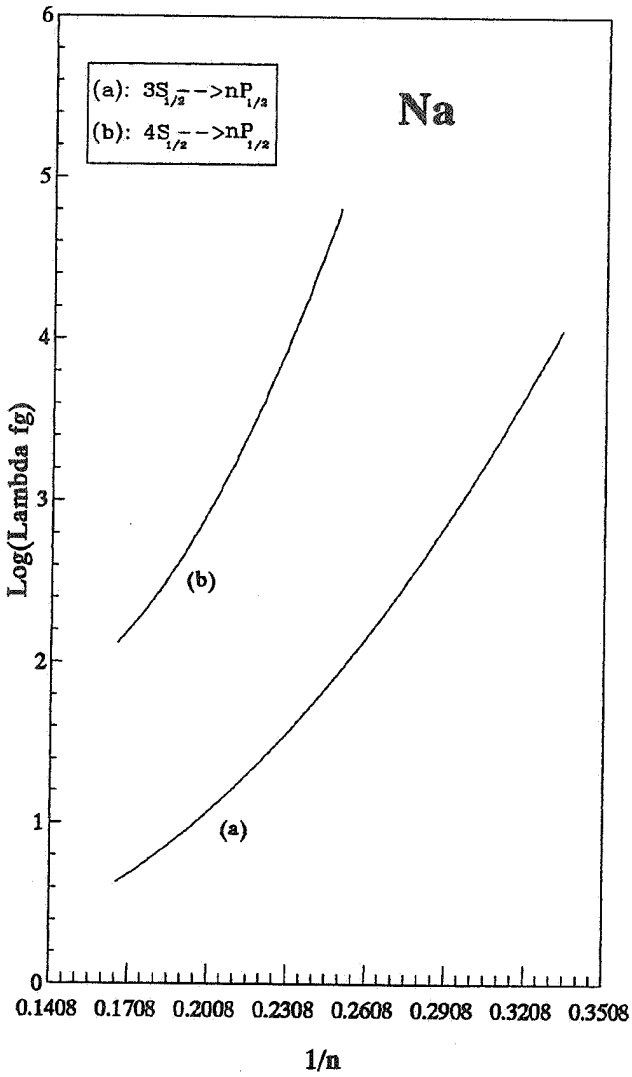
به دست می‌آید ($E_{n\ell}$ ارزش مطلق انرژی بستگی الکترون جهنده در یکای اتمی است) مشخص باشد. بدین ترتیب با دردست داشتن انرژی ترازهای اتم مورد مطالعه و تابعهای موج شعاعی، می‌توان قدرت خط بینابی و نیروی نوسانگر مربوط را محاسبه کرد.

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 برنامهٔ رایانه‌ای مبتنی برروش 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.

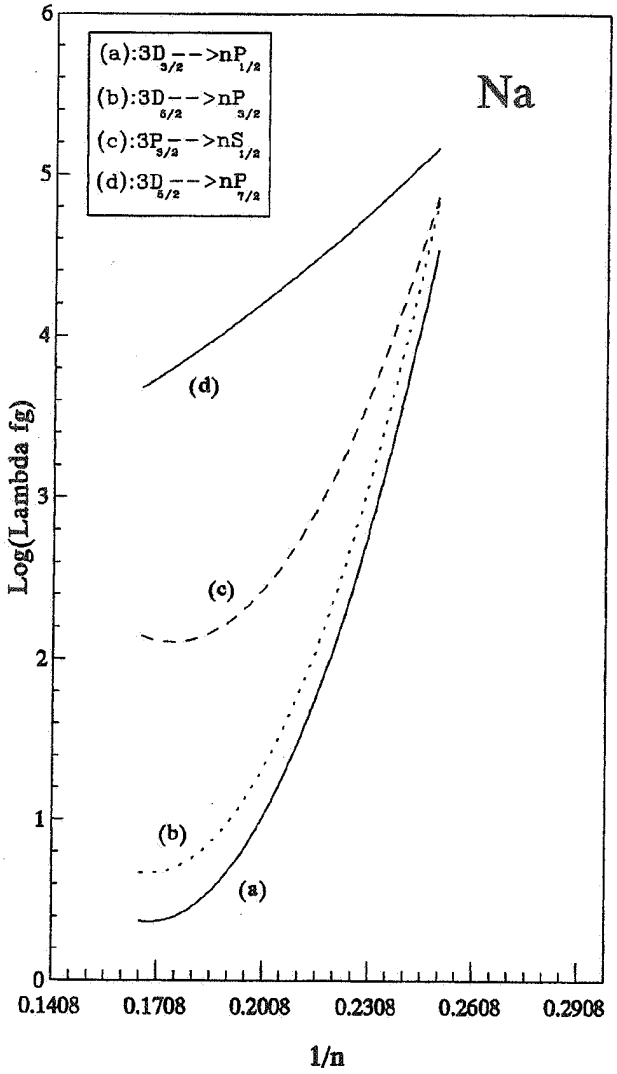
۳- بررسی نتایج عددی

بررسی قدرت خط ونیروی نوسانگر اتم مس نشان داده‌است که کمیت $\log(\lambda fg)$ (λ طول موج گذار و g بار آماری تراز بالایی است) برای کلیهٔ ترازهای برانگیختهٔ سریهای تیز و پخشیدهٔ این اتم با $\frac{1}{n}$ (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 سریهای تیز و پخشیدهٔ 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 $nP_{1/2} \to 3S_{1/2}$ و $nP_{1/2} \to 4S_{1/2}$ رسم کرده‌ایم. منحنیهای مربوط خلاف مورد اتم هیدروژن خطی نبوده و انحنای واضحی را نشان

Downloaded from ijpr-old.iut.ac.ir at 17:33 IRST on Saturday January 9th 2021



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

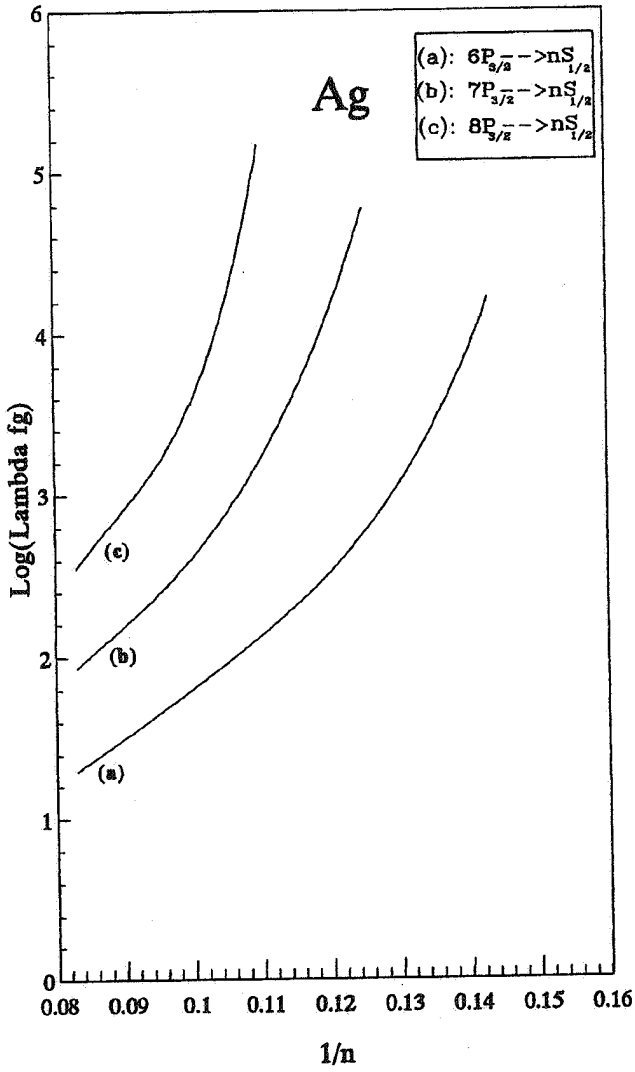


شکل ۳. نمودار تغییرات $\log(\lambda fg)$ برحسب $1/n$ برای گذارهای $D \to P$ و $P \to S$ در اتم سدیم. نیروی نوسانگر مربوط براساس الگوی پتانسیل به دست آمده‌است.

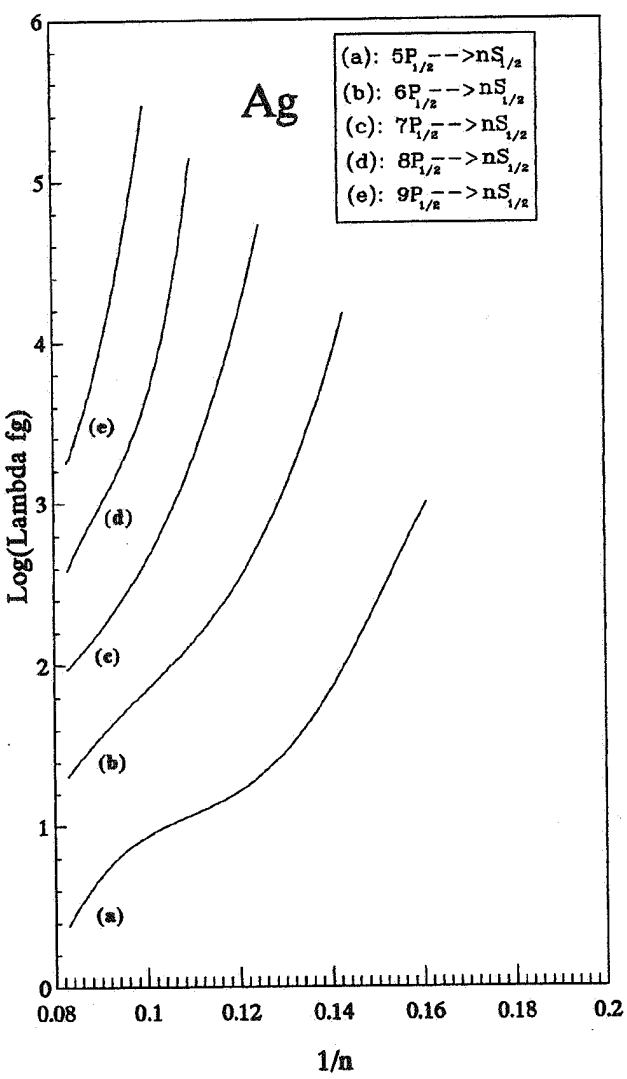
می‌دهند. شکل۳ با توجه به قواعد گزینش، منحنیهای مشابهی را برای گذارهای $D \to P$ و $P \to S$ نشان می‌دهد. همانطور که دیده می‌شود، منحنیهای $log(\lambda fg)$ برحسب $\frac{1}{n}$ با کاهش مقدار n خطی می‌شوند و برای n های بزرگ انحراف از خط مستقیم دیده می‌شود. مقدار این انحنا، به مقادیر L و J حالت اولیه و نهایی گذار بستگی دارد به طوری که با افزایش این دو مقدار منحنی مربوط، به خط مستقیم نزدیک می‌شود (منحنی d در شکل۳). بدین‌ترتیب نتیجه می‌گیریم که برای مقادیر کوچک L و J، نمی‌توان پتانسیل را متقارن کروی در نظر گرفت. (آشکار است که در چنین وضعیتی نظریهٔ تقریب کولنی در پیشگویی قدرت خط و نیروی نوسانگر ناموفق است.) دلیل این امر را می‌توان در برهمکنش الکترون جهنده با الکترونی از ناحیهٔ مغز جستجو کرد. بزرگی نیروی متناظر با این برهمکنش، که به نیروی تبادلی موسوم است، به ویژه در مواردی که الکترون جهنده به ناحیهٔ مغز نزدیک است، زیاد است. این نیرو نقش مهمی را در ساختار اتمی ایفا می‌کند و در مواردی باعث بروز ناهنجاریهایی در ساختار ریز و بس ریز اتمها می‌شود [۲۰].

اکنون، به بررسی نتایج مربوط به اتم نقره می‌پردازیم. شکل

Downloaded from ijpr-old.iut.ac.ir at 17:33 IRST on Saturday January 9th 2021



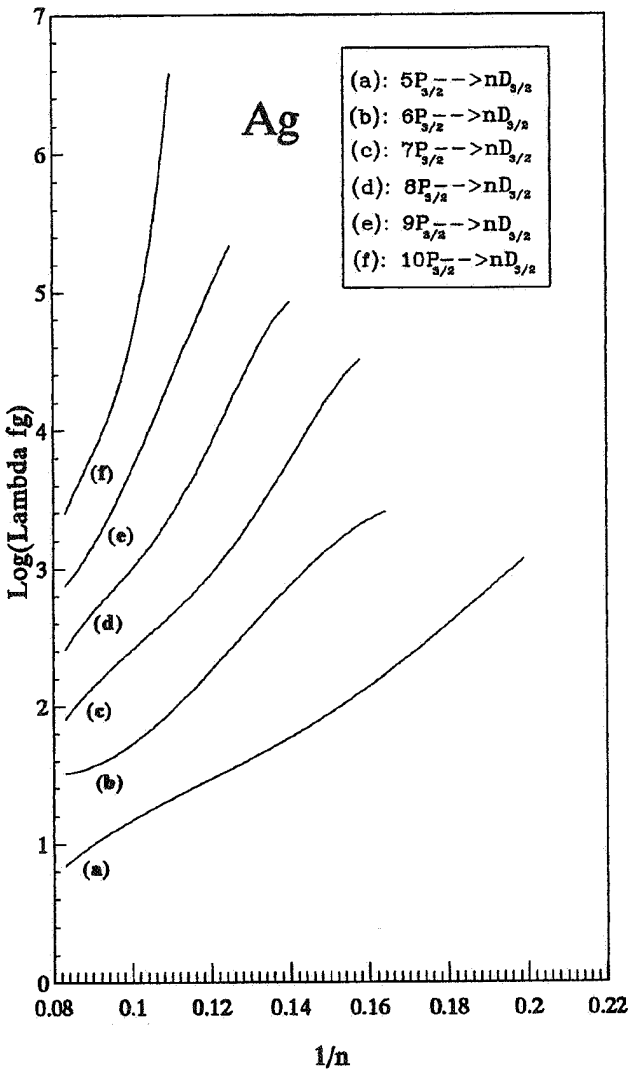
شکل ۴. نمودار تغییرات $\log(\lambda fg)$ برحسب $1/n$ برای گذارهای $n'P_{3/2} \rightarrow nS_{1/2}$ در اتم نقره.



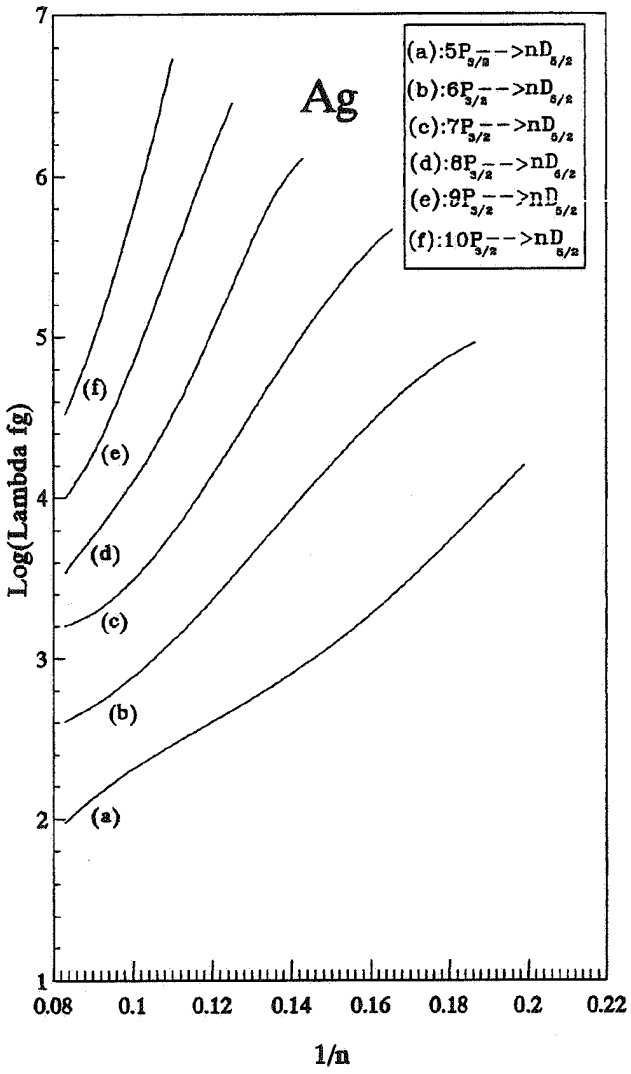
شکل ۵. نمودار تغییرات $\log(\lambda fg)$ برحسب $1/n$ برای گذارهای $n'P_{1/2} \rightarrow nS_{1/2}$ در اتم نقره.

۴ نمودارهای $log(\lambda fg)$ را برحسب $\frac{1}{n}$ برای گذارهای $n'P_{3/2} \rightarrow nS_{1/2}$ نشان می‌دهد. از این منحنیها چنین برمی‌آید که بستگی $log(\lambda fg)$ به $\frac{1}{n}$، تنها در محدوده ای از مقادیر n خطی است. با افزایش مقدار n' شیب منحنی زیاد می‌شود. به بیان دیگر، با دور شدن الکترون جهنده از ناحیهٔ مغز تغییرات نیروی نوسانگر نسبت به عدد کوانتومی اصلی حالت نهایی گذار سریعتر می‌شود. در شکل ۵ منحنیهای مربوط به گذارهای $n'P_{1/2} \rightarrow nS_{1/2}$ نشان داده شده‌اند. شیب این منحنیها نسبت به شیب منحنیهای شکل ۴ افزایش یافته است. به ویژه برای منحنی (a)، که به گذار $5P_{1/2} \rightarrow nS_{1/2}$ مربوط است، جهت انحنای منحنی آشکارا تغییر می‌کند. البته با افزایش مقدار n'، تغییرات به شکل خطی در می‌آیند. از مقایسهٔ شکلهای (۴) و (۵) مشخص می‌شود که نه تنها عدد کوانتومی اصلی حالت اولیه، بلکه تغییر عدد کوانتومی تکانهٔ زاویه‌ای کل ΔJ نیز برمیزان انحراف منحنیهای از خط مستقیم تأثیر می‌گذارد. به طوری که برای مقادیر کوچک n'، تأثیر ΔJ بسیار چشمگیر است. دلیل این امر ناشی از نزدیکی الکترون جهنده به ناحیهٔ مغز و بزرگی نیروهای تبادلی است. در شکل ۶، گذارهای $n'P_{3/2} \rightarrow nD_{3/2}$ را مورد نظر قرار داده‌ایم. نمودارهای مربوط، هم برای مقادیر کوچک n و هم مقادیر بزرگ n از خط

Downloaded from ijpr-old.iut.ac.ir at 17:33 IRST on Saturday January 9th 2021



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



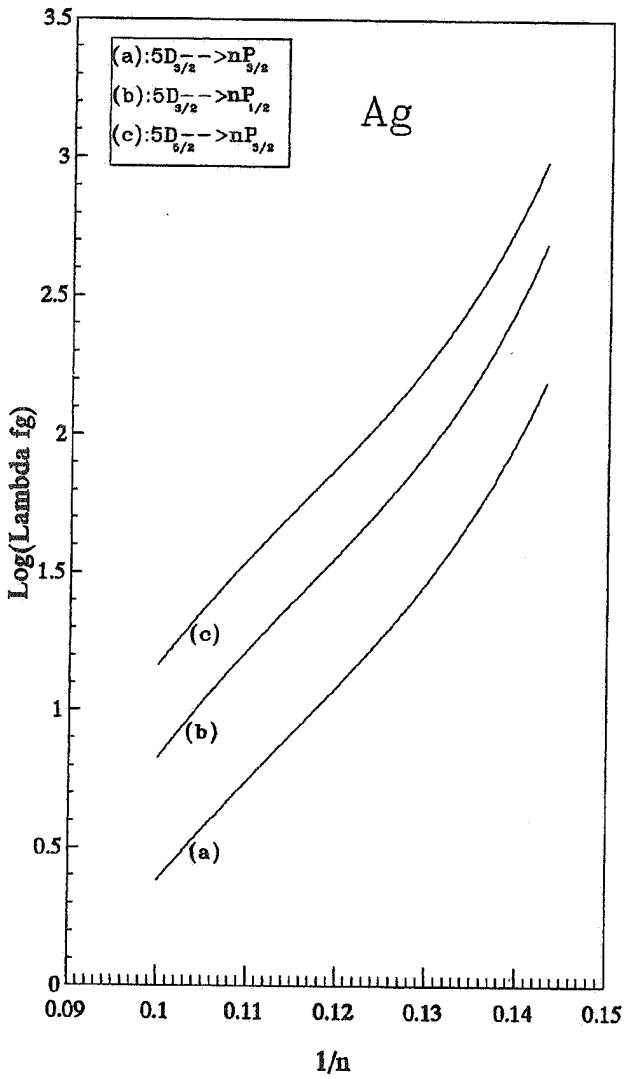
شکل ۷. نمودار تغییرات $\log(\lambda fg)$ برحسب $1/n$ برای گذارهای $n'P_{3/2} \rightarrow nS_{5/2}$ در اتم نقره.

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 $n'P_{3/2} \rightarrow nD_{5/2}$ 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 ΔJ 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 $n'P_{1/2} \rightarrow nD_{3/2}$ در شکل ۹ رسم شده‌اند. همان طور که انتظار داریم، برای مقادیر بزرگ n' منحنیهای تقریباً به شکل خط راست در می‌آیند. منحنیهای مشابهی را برای گذارهای $n'F_{5/2,7/2} \rightarrow nD_{3/2,5/2}$ به دست آورده‌ایم، که بیانگر همان رفتار کلی کمیت $log(\lambda fg)$ هستند که تاکنون از آنها سخن گفته‌ایم.

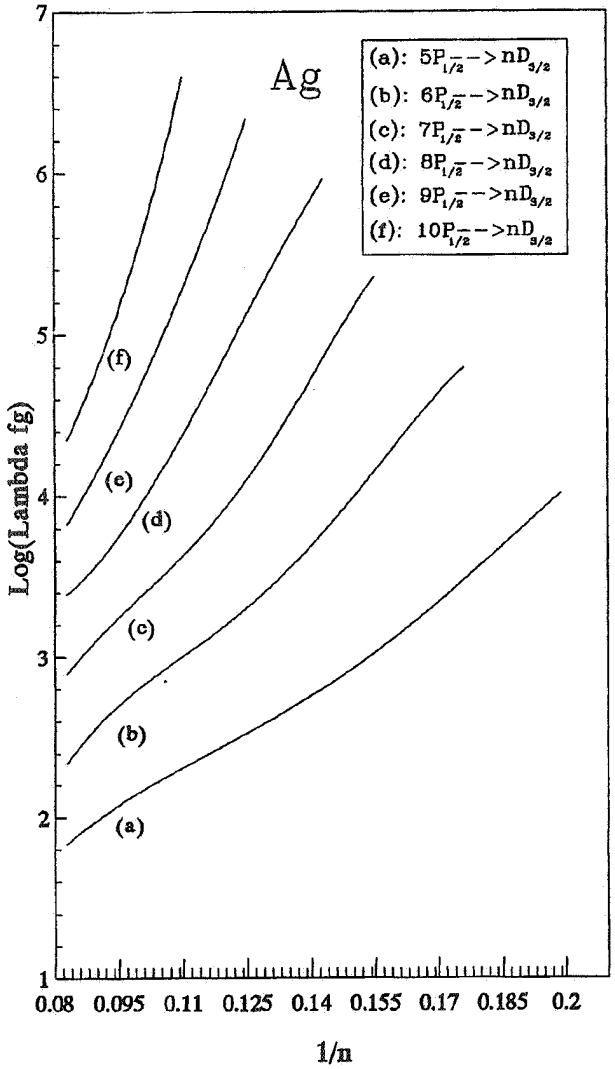
در مجموع می‌توانیم چنین نتیجه بگیریم که:

الف) با افزایش عدد کوانتومی اصلی حالت اولیهٔ الکترون جهنده، منحنیهای تغییرات $log(\lambda fg)$ برحسب $\frac{1}{n}$ به شکل خط مستقیم در می‌آیند. به بیان دیگر، اتم رفتار هیدروژن گونه‌ای از

Downloaded from ijpr-old.iut.ac.ir at 17:33 IRST on Saturday January 9th 2021



شکل ۸. نمودار تغییرات $\log(\lambda fg)$ برحسب $1/n$ برای گذارهای $5D \rightarrow nP$، با $\Delta J = 0, 1$، در اتم نقره.



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

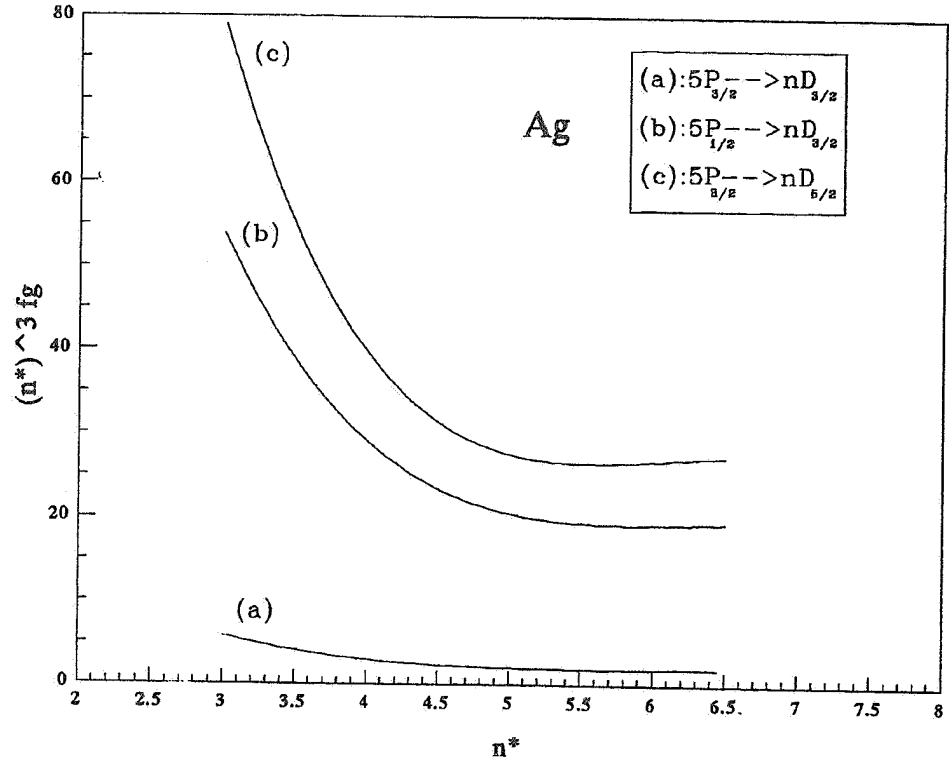
خود نشان می‌دهد. این، خودگویای موفقیت تقریب کولنی در پیشگویی نیروی نوسانگر و قدرت خط بینابی اتم مورد مطالعه است.

ب) تغییر انحنای منحنیها، پس از یک مقدار معین n اتفاق می‌افتد. به عبارت دیگر در فاصلهٔ 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.

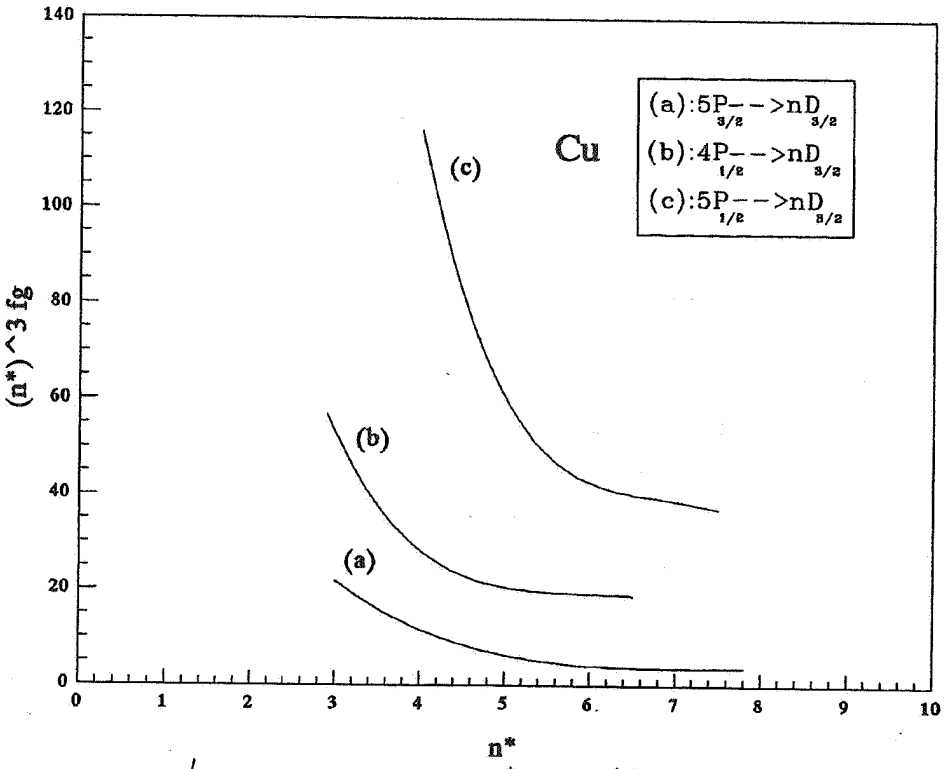
پ) برای مقادیر کوچک عدد کوانتومی اصلی حالت اولیهٔ الکترون، مقدار ΔJ ی گذار اثر چشمگیری بر میزان انحنا و شیب نمودارهای مربوط دارد. برای آن دسته از گذارهایی که $\Delta J = \Delta L$ است، قدرت خط بینابی و نیروی نوسانگر بیشترین مقدارهای خود را خواهند داشت.

بررسی نیروی نوسانگر برای هر یک از سریهای خطوط بینابی اتم هیدروژن نشان داده است که این کمیت با وارون مکعب عدد کوانتومی اصلی تراز بالایی متناسب است [۱۵ و ۲۱]. 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 بینابی تیز و پخشیدهٔ اتم هیدروژن با تقریب بسیار خوبی خطی هستند. از

Downloaded from ijpr-old.iut.ac.ir at 17:33 IRST on Saturday January 9th 2021

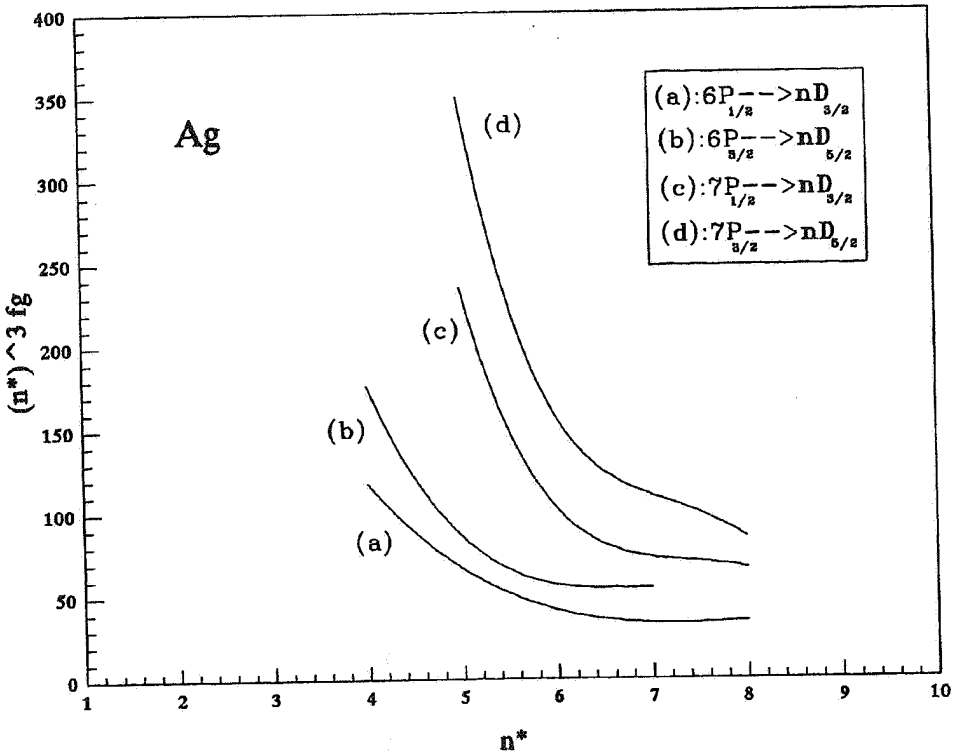


شکل ۱۰.نمودار تغییرات $n^{*3}fg$ برحسب n^* برای گذارهای $5P_{1/2,3/2} \rightarrow nD_{3/2,5/2}$ در اتم نقره.



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

Downloaded from ijpr-old.iut.ac.ir at 17:33 IRST on Saturday January 9th 2021



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

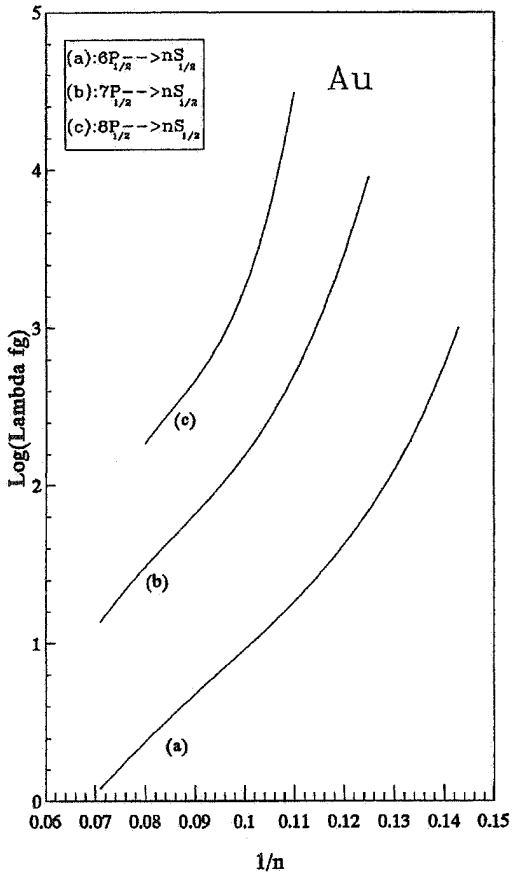
این رو، انتظار داریم که برای اتمهای چند ظرفیتی تک الکترونی نیز منحنی تغییرات $n^{*3}fg$ برحسب n^* خطی باشد. در شکل ۱۰، نمودار مربوط به گذارهای $5P_{1/2,3/2} \rightarrow nD_{3/2,5/2}$ را در اتم نقره رسم کرده‌ایم. همان طور که دیده می‌شود، با افزایش مقدار n^*، تغییرات کمیت $n^{*3}fg$ کند می‌شود. به طوری 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 ΔJ ی گذار نیز به خوبی مشخص است. برای $\Delta J = 0$ منحنی مربوط در گسترهٔ 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 $n'P_{1/2,3/2} \rightarrow nD_{3/2}$ در اتم مس رسم کرده‌ایم (شکل ۱۱). بررسیهای دقیقتر نشان می‌دهند که منحنی های 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.

براساس نظریهٔ 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.

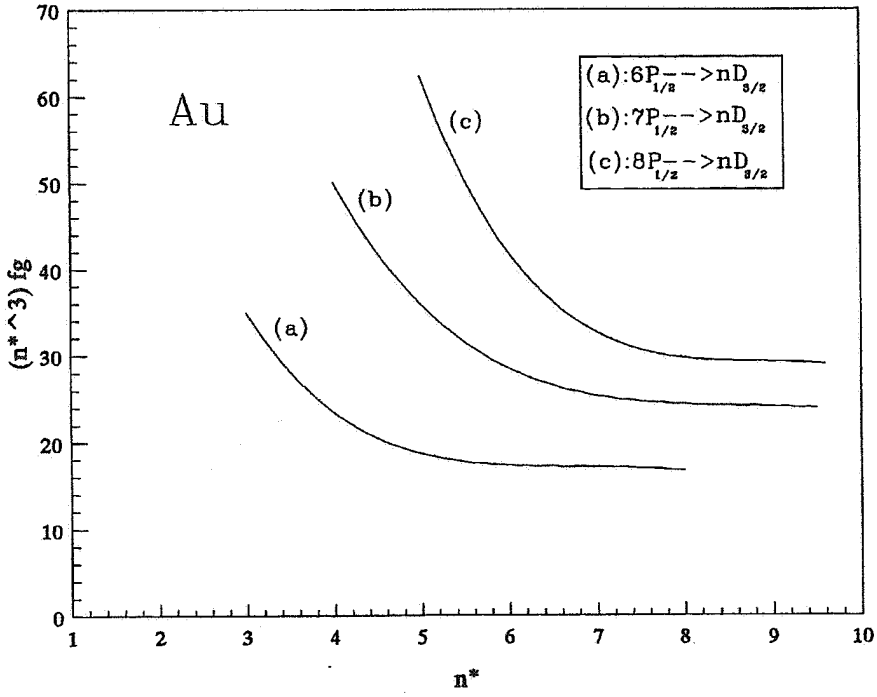
۴. جمعبندی کلی

براساس نظریهٔ 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 اولیهٔ الکترون جهنده خطی است. در این میان، تغییر عدد کوانتومی تکانهٔ 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

Downloaded from ijpr-old.iut.ac.ir at 17:33 IRST on Saturday January 9th 2021

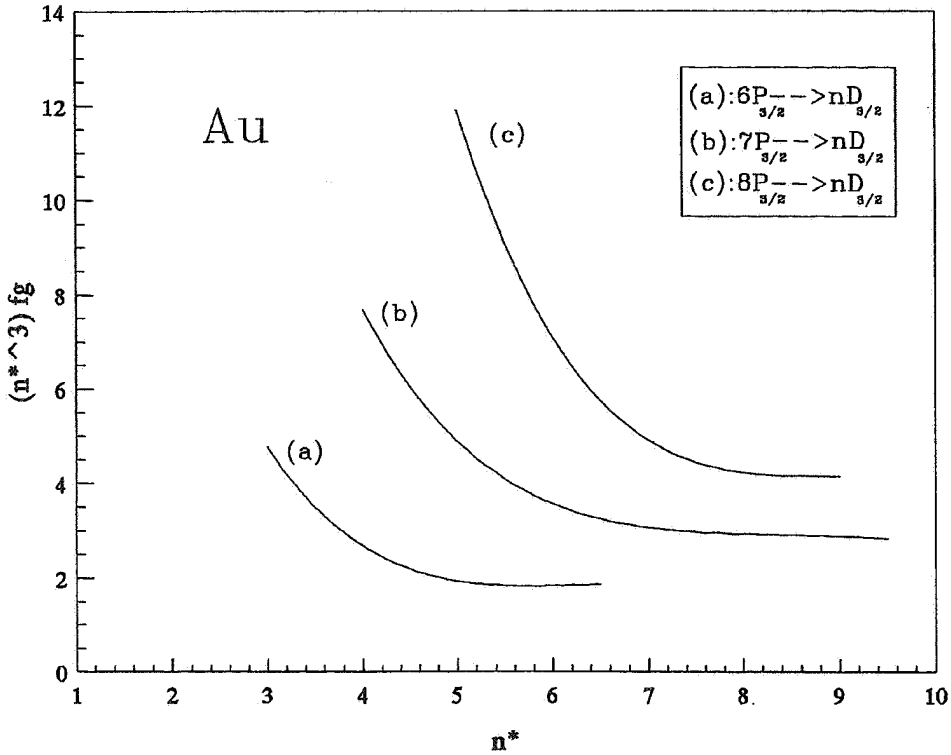


شکل ۱۳. نمودار تغییرات $\log(\lambda fg)$ برحسب $1/n$، برای گذارهای $n'P_{1/2} \rightarrow nS_{1/2}$ در اتم طلا.



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

Downloaded from ijpr-old.iut.ac.ir at 17:33 IRST on Saturday January 9th 2021



شکل ۱۵. نمودار تغییرات $n^{*3}fg$ برحسب n^* برای گذارهای $n^1P_{3/2} \rightarrow nD_{3/2}$ در اتم طلا.

کمیت $log(\lambda fg)$ برحسب $\frac{1}{n}$ 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 نظریهٔ تقریب کولنی به دست آورده‌ایم. این، نشانگر سازگاری میان دو رهیافت نظری متفاوتی است که برای محاسبهٔ قدرت خط و نیروی نوسانگر به کار می‌روند. علاوه بر این، نمودار کمیت $n^{*3}fg$ برحسب 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 مقادیر بزرگ n^* این بستگی خطی است. در اینجا نیز عدد کوانتومی تکانهٔ زاویه‌ای حالتهای اولیه و نهایی الکترون جهنده در انحراف منحنیهای مربوط نقش دارد.

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

مراجع

۱. س. سونبرگ، *بینابنمایی اتمی و مولکولی، جنبه های بنیادی و کاربردهای عملی*، ترجمهٔ احمد کیاست پور، محمود سلطان الکتابی و محمد حسین نادری، انتشارات دانشگاه اصفهان، چاپ اول (۱۳۷۶).

2. J Carlson and L Sturesson, *Z. Phys. D-Atoms, Molecules and Clusters*, **14** (1989) 281.

3. A Gaupp, P Kuske and H J Andra, *Phys. Rev. A,* **26** (1982) 3351.

4. W Ansbacher, Y Li and E H Pinnington, *Phys. Lett A,* **139** (1989) 165.

5. R N Gosselin, E H Pinnington and W Ansbacher, *Phys. Rev. A,* **38** (1988) 4887.

6. J Carlsson, L Sturesson, and S Svanberg, *Z. Phys. D-Atoms, Molecules and Clusters*, **11** (1989) 287.

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 (1989) 68.

۱۵. م. سلطان الکتابی، *مجلهٔ 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 Cirular No. 467 (U.S government publication office, Washington D.C 1958).

20. R M Sternheimer, J E Rodgers and T P Das, *Phys.*

21. G Pichler, *Fizika*, **4**(1972) 179.

Downloaded from ijpr-old.iut.ac.ir at 17:33 IRST on Saturday January 9th 2021