

Atom Fizikinde Denel Yeni Bir Yöntem: Işın - Yaprak Tayflaması

Yazan:

Prof. Dr. Oktay Sinuioğlu
ODTÜ — YALE

ÖZET

Bu yazıda ışın tayflarından gök cisimlerindeki kimyasal öğelerin dağılımının bulunması için geçiş olasılığı A_{ij} 'in hesaplanması üzerine önce alışılmış denel ve kuramsal yöntemler verilmiş, sonra da son bir yıl içindeki denel ve kuramsal atom fiziki gelişmeleri anlatılmıştır.

SUMMARY

in this article, the theoretical and experimental methods to find the transition probability A_{ij} of the distribution of the chemical elements in the planets by means of spectrum of their lights are given and later developments in the field of atomic physics related to this subject are explained.

1. OTRİŞ

Yıldızlarda, güneşte kimyasal öğelerin dağılımı, bollukları bize kadar gelen ışınların tayflarına bakılarak bulunur. Demir olsun, oksijen, azot olsun, öğelerin bollukları, evrenin oluşumu kuramları için gökbilimde gerekli verilerdir, öğe bolluklarını tayflarda.1 çıkarmak içinse, ışık veren atomların uyarı hallerden [^] alt hallere⁽¹⁾ geçiş olasılıklarını (A_{ij}) bilmeliyiz. Bu temel veriler atom fizikinden gelir.

2. ALIŞILMIŞ DENEL VE KURAMSAL YÖNTEMLER

Bir atom gazından gelen ışığın yeğniliği, I , atomun önceki ⁽¹⁾ halindeki yoğunluğu (N_i) ile son ⁽²⁾ haline geçiş olasılığı (A_{ij}) çarpımına bağlıdır.*

$$I = N_i A_{ij} h_{\nu_{ij}} \quad (D)$$

Eskiden A_{ij} 'lerin bulunması için, laboratuvarında, gazlar fırınlarında, elektrik arklarında yüksek sıcaklıkta atomlaştırılır, oradan gelen ışığın yeğniliği ölçülürdü. Denklem (Dk) (1) gösteriyor ki böyle bir ölçmede N_i de kesinlikle bilinmelidir. N_i 'yi hesaplamak için ışıldevlngen (termodinamik) denge varsayılırdı ki, atomların ayrıca çarpışarak ışısız düşürgenmeleri işe

karışmasın. Pakat birkaç yıldır görüyoruz ki, meğer bu şekilde ölçülen pekçok atom geçiş olasılığı, çok kez, iki kat, hatta on kat bile hatalıymış, denge varsayımları yapılamazıma.. Aşağıda bahsedeceğimiz yeni deney ve kuramlar bunu son [^] iki yılda gösterdi ve sonunda yem ve güvenilir geçiş olasılıkları verecek yöntemleri sağladı. Yeni veriler, gökbilimde hatalı verilerden doğan bazı çıkmazları yoketti.**

Peki yeni deneylerden önce, alışlagelmiş kuramsal hesaplarla doğru A_{ij} 'ler bulunamıyor muydu? Hayır. Alışılmış atom yapı kuramları bağımsız elektron hareketlerine, yörüngeçlere dayanıyordu.*** Fakat burda da elektronların

* i ile f arası erke farklı J_e kargın ν_{if} titreşim sayılı (renkli) her ışık taneciği $q_{if} = h_{\nu_{if}}$ kadar erke taşır.

•* örneğin, gökcisimlerinde, güneşin retikküresi ile ısı küresinde demir bolluklarının aynı olması gerekirken 10 kat farklı çıkıyordu. Şimdi bolluklar tutuyor.

•• En kesin yörüngeç yöntemi, elektronların ortalama hareketlerini birbirine bağdaştıran Hartree - Fock yöntemidir. Bu bile, elektronlararası itişmeleri, yani «elektron kaçımını» ele almadığı için yeterli sonuçlar vermez.

birbirine olan her an itme etkileri, yani «elekttron kaçınıcı» [1, 2] hesaba katılmadıđından, geęiđ olasılıkları ok hatalı ıkıyordu. Demek ki gkbilimcilerin yetecek kadar, geęiđ olasılıđı verileri bulup kullanmaları ok gt.

1965'te, deney ve kuramda birbirinden habersiz fakat sonradan bařa bař giden, iki ayrı geliřme oldu. Deneyde «Iřın - Yaprak Tayflm» keřfedilirken, kuramda da, yeni «Aık Kabuk ok Elektron Kuramı» bulundu. Bu iki geliřmenin sađladıđı A_{if} verileri řimdi % 3—10 kesinliktedir. Birbirlerini tuttukları gibi, gkbilimde de birbirini tutan bollukların bulunmasına faydalı oldular.

S. IřIN - YAPRAK TAYFLAMASI

1965'te Bashkin'in bulduđu bu yeni yntemde [3], atomların geęiř olasılıkları (1/saniye) veya uyan hal mrleri (Tsaniye), Dk. (1)'e lzum kalmadan, dođrudan dođruya llr.

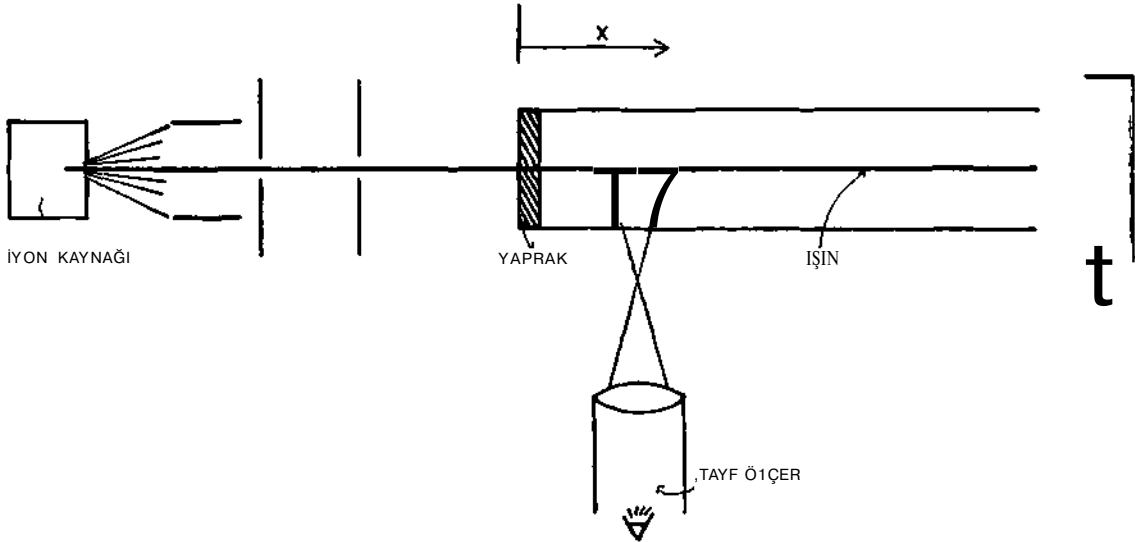
$$T = \frac{1}{A_{if}} \quad (2)$$

Birka bin elektron - voltluk (keV) devim erkeřiyle bir kaynaktan ıkan atomlar bir iřın halinde gelip, ok ince (200 Å kadar) bir karbon yaprađına arparlar, ince yaprak, bu erkeli iřını durduramaz, atomlar gelir geerler. Yalnız geerken biraz uyarılırlar. İlk birkaı uyan hale geerler. Tabii iyonlaıp, uyan halde iyonlara dnenleri de olur.

řekil 1'de grldđ gibi, řimdi bu uyarık atomlar, karbon yaprađın br yanına geer gemez, bařlarlar dřrgenmeđe, dřrgenip iřık salmađa. Hem giderler hem iřık salarlar artık. Bu ara unutmayalım ki, rneđin 1 keV, devim erkesi ile gelen ktlesi m , bir atomun hızı,* saniyede 10^7 santimetre, yani saatte 400.000 km. Bir yandan da bu atomun uyanık halinde kalıř mr $1 \ll 10^{-8}$ saniye. Demek ki, mr bitinceyedek, birka cm yol katedecek, ederken de iřıđını salıp snecek.

$$* 1 \text{ keV} = 1,6 \times 10^{-12} \text{ erg} = \frac{1}{2} mv^2$$

ve $v \approx 1,4 \times 10^7 \text{ cm/saniye.}$



řekil 1.

Çizelge 1. Atom halleri geçiş olasılıklarının ölçen titreşir - kuvveti fin kuramsal ve deneysel değerlerinin karşılaştırılması:

İyon	Geçiş	λ A (Å) (ışın dalga boyu)	f Hartree-Fock Yörüngeç Yöntemi (RHF)	f (NBS) ^m (eski değerler)	f (Çok-Elektron kuramı) (Yeni Yöntem)	f (Deneysel değerler)
Cn	$1s^2 2s^2 2p (2P) \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^2 (2D)$	1335	0.263	0.17 (0.121)	0.125	0.114(±0.011)
Nn	$1s^2 2s^2 2p^2 (3p) \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^3 (3D)$	1085	0.236	0.17 ,	0.100	0.109 (± 0.011) ^c 0.101 (±0.006) ^d
NH	$1s^2 2s^2 2p^2 (3p) - * 1g^1 2s^2 2p^3 (3P)$	916	0.170	0.22	0.137	0.131(±0.007) ^d
OT	$1s^2 2s^2 2p^2 (3p) \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^3 (3S)$	645	0.334	0.23	0.218	0.189(±0.016) ^d
Nm	$1s^2 2s^2 2p (2P) \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^2 (2D)$	991	0.213	0.18	0.114 ,	0.103 (±0.010) ^d
Nra	$1s^2 2s^2 2p (2P) \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^2 (2P)$	686	0.577	0.45	0.399	0.416(±0.075) ^d
Ora	$1s^2 2s^2 2p^2 (3P) \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^3 (3D)$	834	0.200	0.15	0.100	0.102 (±0.002) ^e
Ora	$1s^2 2s^2 2p^2 (1D) \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^3 (1D)$	600	0.534	0.37	0.297	— —
ORV	$1s^2 2s^2 2p (2P) \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^2 (2D)$	789	0.179	0.15	0.106	0.091 (±0.002) ^e

- önceden kullanılan metinde, kaynak 4'te gösterilen NBS değerleri
- Yeni Atom-Yapısı Kuramıyla (Kaynak 5-7) bulunan değerler. Kaynak:- O. Sınanoğlu, «Atom Fiziği» (Birinci Uluslararası Atam Fiziği Çağrılı Bildirileri) (V. Hughes yayımcıları) (Plenuru Basimevi, New York 1969), Kaynak 7'deki hesaplar.
- G. M. Lawrence ve B.D. Savage; Phys. Rev. 141, 67 (1966).
- L. Heroux; Phys. Rev. 153, 156 (1967).
- W. S. Bickel, Phys. Rev. 162, 7 (1967).

Bu biçim bir atom ışığının saldıđı ışık yeđinliđi karbon yaprakta kuvvetli başlar, birkaç cm boyunca gitgide azalır. Biz, bu zayıflayan ışın kalemine yandan bir tayf ölçerle bakarsak, bildiđimiz çizgisel bir tayf görürüz. Yalnız belli bir çizgi, boylu boyunca aynı kalınlık ve yeđinlikte olacađına *gitgide* cılızlaşan bir çizgi olur. Yeđinliđin uzaklıđa (x) karşın çizenekleştirilmesiyile, Dk (3)'ten,

$$I(x) = I_0 e^{-\frac{x}{v \cdot \tau}} \quad (3)$$

$$\frac{I}{I_0} = \frac{x}{v \cdot \tau}$$

kolayca bulunur.

ömür, T 'dan, A_{if} 'in Dk. (1)'e göre bulunması için v_k titreşim sayılı, yani bu renkli ışığın hangi uyarı halden hangi alt hale geçiş sonucu saldıđını bilmeliyiz.

Bu çođunlukla bilinebiliyor. Yalnız bazan, birkaç hal arası geçişler karışabiliyor. O zaman «basamaklaşma» olayı var diyoruz ve -c 'dan asıl gerekli A_{if} 'leri kolay çıkaramıyoruz.

Çizelge 1'de bazı C,N,O, v.b. geçişleri olasılıkları gösterilmiştir. Eski yöntemlere dayanan NBS deđerleri ile, yeni yöntem sonuçları arası farklar özellikle görüldüor.

4. YENİ ATOM - YAPI KURAMI SONUÇLARI İLE KARŞILAŞTIRMA

Dediđimiz gibi, bilinen yörüngeç, H. F. gibi yöntemler de, yem olasılık ölçmelerini tutan sonuçlar vermiyordu. 1965'ten bu yana atomların uyarık halleri için önemli elektron kaçınımları etkilerini içine alan yeni bir atom-yapı kuramı geliştirildi [1, 2, 5]. Burda Schrödinger denkleminin çözümü olan, N-elektronlu dalga işlevlerine çok yaklaşıyor, elektron - elektron itmeleri incelikle işitiliyor. Diyoruz ki, dalga işlevin (*th*), ancak «yük dalga işlevi» ($J >$) adlı [6] büyük bir kısmı geçiş olasılıkları hesaplamam etkiler Bu kısım J/c 'ler, uyarık ve alt haller için kesinlikle, bilgi işlemde kullanılarak, yeni kuramın yöntemleri i'e, hesaplanılabiliyorlar. Geçiş olasılıđı, «elektrik çiftücaı işleri» nin ($e 2 | r_i$) iki hal arası bir matris ögesi karesiyile orantılı:

$$a_{if} \propto \langle \psi_i | \frac{1}{r_c} | \psi_f \rangle \quad (4)$$

Bu yazıda Y'eni Atom-Yapı Kuramına daha fazla deđinmeyeceđiz. O konuyu daha, yakından tanımak İsteyen okuyucu, başka bir yazımıza başvurabilir. Burada řu kadarı ile yetinelim ki, Kuramla Dk. (4) yoluyla bulunan A_{if} deđerleri, yeni deneyleri, ufak deney sapsmaları sınırlan içinde, Çizelge 1'de gösterildiđi gibi, tutuyor. Bazı hesaplar 1968'den beri, deneylerden önce yapılmış, bu suretle o A_{if} 'ler ilk kez, kuramsal yoldan bulunmuştu. Sonraki deneyler, böylece kuramı da dođrulamış oldu.

5. SONUÇ

Görülüyor ki son bir iki yılda, eski durumun tersine, artık, hem yeni Atom Kuramı, hem yeni denel yöntemler, atom geçiş olasılıklarını kesinlikle verebiliyorlar. Bu atom verileri, böylece, gökbilimde olsun, havaküre, iyonküre fiziđinde, etomfiziđinde ve kimyad olsun, daha kesinlikle kullanılabiliyorlar.

KAYNAKLAR

1. Elektron kaçınımları temel kuramlar için bk.: O. Sinanođlu; «Atom ve Moleküllerin Çok Elektronlu Kuramı»,
a) Advs. Chem. Phys. 6 316 (1964);
b) Advs. Chem. Phys. 14,237(1968), ve
2. O. Sinanođlu ve K. A. Brueckner; «Atomlarda Elektron Kaçınımları» (Yale Üniversitesi Basımevi, New-Haven, A.B.D. ve Londra, İngiltere, 1970).
3. S. Baskin; «Bilinci Işın - Yaprak Tayflaması Uluslararası Toplantısı Bildirileri» (Academic Presa Yayınevi, New York, 1965).
4. NBS (A. B. D. -jlsal özölçemeleme Kurumu) Atom Geçiş Olasılıkları Cetvelleri (NBS. Vaşington, 1969).
5. «Yeni Nicem Kimyası (Modern •Quantum Chemistry) — ts.anbul Dersleri» (Uluslararası Nato - Yaz Okulu, İstanbul 1964) (J. Wiley Co., Ne w-York 1965) (Yayımcı : O. Sinanođlu) (O. Sinanođlu ve H. J. Sinanođlu Bölümleri).
6. O. Sinanođlu; «Atom Fiziđi» (1. Uluslararası Atom Fiziđi Çađrılı Bildirileri), (V. Haykes yayımcıları) (Plenum Basımevi, New York, 1969).
7. P. Westhaus ve O. Sinanođlu; Physical Review, 183, 56 (1969).