13.2. Kuantum Atomu

Yukarıdaki formüller klasik harmonik salınım kullanılarak bulunmuştur. Bu nedenle tam olarak doğru değildir. Doğru olan kuantum mekaniği kullanılarak bulunmasıdır. Bu kuramda çizgi soğurması, bir atom bir düzeyden yüksek erkeli bir başka düzeye uyarıldığı zaman olur ve her geçişte bir **h**ν fotonu soğurulur. Böyle kuantum düzeyindeki soğurucu elektrona ait dalga denkleminin çözümü,

$$\mathbf{k'} = (\mathbf{N}\ \mathbf{e}^2 / \mathbf{m}c)(\boldsymbol{\gamma} / 4\pi)\{ 1 / [(\nu - \nu_o)^2 + (\boldsymbol{\gamma} / 4\pi)^2] \}$$

ile aynı biçimdedir, ancak **N** ve $\boldsymbol{\gamma}$ nın anlamı klasik anlamlarından farklıdır.

Önce doğal genişlemiş çizgi profilinin sonlu bir genişliğe sahip olmasının fiziksel yorumu nedir ? Ona bakalım. **Klasik olarak anlamı** : titreşen bir elektron, **bir mekanik osilatör gibi**, üzerine düşen kendi rezonans frekansından biraz farklı bir frekansa da yanıt verebilir. Kuantum mekaniğine göre ise, bir çizginin genişliği, erke düzeylerinin sonlu bir genişliğe sahip olmasının bir sonucudur. Heisenberg'in belirsizlik ilkesine göre,

$$\boldsymbol{\Delta t} \,.\, \Delta E \approx \mathbf{h} / 2\pi$$

dir. Burada ΔE erke düzeyinin genişliği ve $\boldsymbol{\Delta t}$ onun **ömrüdür**, yani bir **elektronun bir düzeyde kalma süresidir**.

13.2. Kuantum Atomu(Devamı)

Δt ≈ 10^{-8} sn olduğuna göre ΔE de **sonludur**. O halde **atom**, bir düzeyden bir başka erke düzeyine geçişte $E_1 + \Delta E_1 / 2$ ve $E_1 - \Delta E_1 / 2$ arasındaki bütün düzeyler ile $E_2 + \Delta E_2 / 2$ ve $E_2 - \Delta E_2 / 2$ arasındaki bütün enerji düzeylerindeki geçişleri **yapabilir**. Temel düzeyin ömrü uzundur ; dolayısıyle ΔE çok küçük ve düzey keskindir.

Kuantum mekaniğine göre κ_ν' nün ifadesindeki **N** ve γ nın **değiştirilmesi gerekir**. Önce γ nın yerine gelecek terimi (**parametreyi**) bulalım. Görüldüğü gibi klasik sönüm sabiti γ, titreşim sönme hızını belirler. Bir başka değişle γ^{-1} ilgili erke düzeyinin yaşam süresi yani ömrüdür. Eğer **atom** bir ışınım alanı içinde değilse uyarılmış **n** inci erke düzeyinden alt düzeylere **ancak kendiliğinden** düşebilir. Bu durumda kendiliğinden salma katsayısı (**olasılığı**) $\mathbf{A_{nm}}$ nin tanımından,

$$dN_n / dt = - N_n \sum_{m<n} A_{nm} = - N_n \Gamma_n \qquad ....(a)$$

Burada $\Gamma_n = \sum_{m<n} A_{nm} = 1 / T_n$ dir. T_n , **n** düzeyindeki atomun ortalama

yaşam süresidir (ömrüdür). (**a**) ifadesi integre edilirse,

$$N_n = N_{n,o} \exp (- \Gamma_n \mathbf{t})$$

bulunur. Burada $N_{n,o}$ başlangıçta **n** kuantum düzeyinde bulunan atomların sayısıdır.

13.2. Kuantum Atomu(Devamı)

Eğer **atom** kuvvetli bir ışınım alanı içinde ise (**YTD de**) zorlama ile ışınım ve soğurma işlemleri ile de düzey değiştirecektir. O zaman

$$\Gamma_n = \sum_{m=1}^{n-1} A_{nm} + \sum_{m=1}^{n-1} B_{nm} U_{\nu_{nm}} + \sum_{m'=n+1}^{\infty} B_{nm'} U_{\nu_{nm'}} \qquad ......(b)$$

Klasik kurama göre çizginin yarı genişliği bütün dalga boyları için sabitti, yani **çizginin doğal genişliği sabitti**. Burada ise Γ , geçiş olasılıklarına bağlı, yüksek geçiş olasılıkları olan çizgiler daha geniştir. **U**(ν), ν frekansında **ışınım yoğunluğudur**.

13.2. Kuantum Atomu(Devamı)

Planck formülünden

$$U(\nu) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\frac{1}{e^{h\nu/kT}-1}$$

konur ve

$$B_{nm} = \frac{g_m}{g_n}\cdot B_{mn} \quad , \qquad A_{nm} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3}\cdot B_{nm}$$

bağıntıları kullanılırsa (**b**) ifadesi şu şekli alır :

$$\Gamma_n = \sum_{m=1}^{n-1}\frac{A_{nm}}{1-e^{-h\nu/kT}} + \sum_{m'=n+1}^{\infty}\frac{\frac{g_{m'}}{g_n}\cdot A_{m'n}}{e^{h\nu_{nm'}/kT}-1}$$

γ **yerine kullanılacak olan budur**.

13.3. Osilatör Şiddeti

Şimdi de (**a**) denklemindeki **N** nin **ne anlama geldiğini bulalım**. **N**, birim oylumdaki klasik titreşici (elektron) sayısı idi. Bu **elektronlar** tarafından birim oylumda dω doğrultusunda çizgi profili boyunca **saniyede soğurulan erke** şöyle verilmişti :

$$N \cdot \mathrm{I}_\nu \frac{\pi e^2}{mc} d\omega \qquad \ldots.(*)$$

Diğer taraftan **kuantum atomunun n** ninci alt erke düzeyinden **m** ninci üst erke düzeyine geçerken birim oylum tarafından dω doğrultusunda **saniyede soğurulan erke**,

$$N_n \cdot B_{nm} \cdot U_{\nu_{nm}} \cdot h\nu_{nm} \cdot \frac{d\omega}{4\pi}$$

olacaktır. Burada $\mathbf{N_n}$, **n** düzeyindeki **atomların yoğunluğu**, $\mathbf{B_{nm}}$ Einstein katsayısı, $U_{\nu_{nm}}$ **ışınım yoğunluğudur**.

13.3. Osilatör Şiddeti(Devamı)

$$U_{\nu_{nm}} = \frac{4\pi}{c} \cdot \mathrm{I}_{\nu_{nm}}$$

koyarsak

$$N_n \cdot B_{nm} \cdot \mathrm{I}_{\nu_{nm}} \cdot \frac{h\nu_{nm}}{c} \cdot d\omega \qquad ....(**)$$

(*****) ve (******) ile verilen bu iki ifade eşitlenirse, doğal frekansı $\nu_o = \nu_{nm}$ olan klasik elektronlar **kuantum atomlar tarafından** **soğurulan erke kadar erke soğurmuş olacaklardır**. O halde,

$$\frac{N}{N_n} = \frac{mh\nu_{nm}}{\pi e^2} B_{nm}$$

Bu orana osilatör şiddeti denir ve **f** ile gösterilir :

13.3. Osilatör Şiddeti(Devamı)

$$f_{nm} = \frac{mh\nu_{nm}}{\pi e^2} \cdot B_{nm}$$

Demek ki çizgi profilini veren (**k'**) soğurma katsayısında **N** yerine **$N_n f_{nm}$** koymak gerekir. **N = $N_n f_{nm}$** olduğuna göre bir **kuantum atom** tarafından yapılan soğurma, **f** **klasik osilatör tarafından yapılan soğurmaya denktir**.

f_{nm} ifadesinde **B_{nm}** katsayısı **A_{mn} cinsinden ifade edilir** ve

γ [= $(8\pi^2 / 3)(\mathbf{e}^2 / \mathbf{mc}^3)\nu^2$] **kullanılırsa**,

$$A_{nm} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} B_{nm} \quad \Rightarrow \quad B_{nm} = \frac{c^3}{8\pi h\nu^3} A_{nm} = \frac{c^3}{8\pi h\nu^3} \frac{g_m}{g_n} A_{mn}$$

$$f_{nm} = \frac{g_m}{g_n} \frac{mc^3}{8\pi e^2 \nu^2} A_{mn} = \frac{g_m}{g_n} \frac{1}{3\gamma} A_{mn}$$

13.3. Osilatör Şiddeti(Devamı)

Aynı şekilde salma osilatör şiddeti

$$f_{mn} = \frac{mh\nu_{nm}}{\pi e^2} \cdot B_{mn}$$

ile tanımlanırsa,

$$f_{mn} = -\frac{g_n}{g_m} \cdot f_{nm} = -\frac{A_{mn}}{3\gamma}$$

bulunur. Genellikle salma ile ilgili osilatör şiddeti (**-**) **işaretli alınır**.

k' ile verilen soğurma katsayısının **kuantum karşılığı** aşağıda verildiği gibi olur:

13.3. Osilatör Şiddeti(Devamı)

$$k^{'} = \kappa_\nu \rho = N \cdot a_\nu = \frac{\pi \quad e^2}{mc} \cdot N_n \cdot f \cdot \frac{\Gamma_n / 4\pi^2}{(\nu - \nu_o)^2 + (\frac{\Gamma_n}{4\pi})^2}$$

Bu durumda bir atom başına düşen soğurma (**N$_n$** = 1),

$$\int_0^\infty \alpha_\nu \, d\nu = \frac{\pi e^2}{mc} \cdot f \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Gamma_n / 4\pi^2}{(\nu - \nu_o)^2 + (\frac{\Gamma_n}{4\pi})^2} d(\nu - \nu_o)$$

$$= \frac{\pi e^2}{mc} \cdot f$$

Birim hacimdeki ortalama soğurma katsayısı,

$$\kappa^{'} = \overline{\kappa} \rho = \frac{\pi e^2}{mc} \cdot N_n \cdot f$$

yazılabilir.