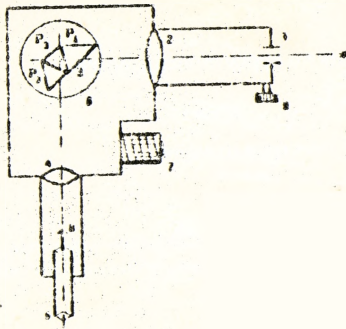


K-2



МИНИСТЕРСТВО
ОБРАЗОВАНИЯ И
НАУКИ
РЕСПУБЛИКИ
БЕЛАРУСЬ

БРЕСТСКИЙ
ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ
ИНСТИТУТ
КАФЕДРА ФИЗИКИ

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА К-2 (МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ)

Изучение линейчатых спектров атомов.

Брест 1996

УДК 53,076.5)

Методические указания по курсу общей физики.

Л: Лабораторная работа К-2.

Изучение линейчатых спектров атомов.

Брест, БрПИ, 1996

В методических указаниях рассмотрены принципиальные вопросы курса физики по разделу "Элементы атомной физики и квантовой механики".

Предназначены для студентов всех специальностей и всех форм обучения в БрПИ.

Авторы: доцент Н.И. Чопяц

к публикации на
стр. 10.

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА К-2

Изучение линейчатых спектров атомов.

1. ЦЕЛЬ РАБОТЫ: изучение линейчатых спектров атомов ртути, водорода, неона; идентификация линий спектров по градуировочной кривой монохроматора и рисункам спектров; определение постоянной Ридберга и постоянной Планка.

2. ПРИБОРЫ И ПРИНАДЛЕЖНОСТИ: универсальный монохроматор УМ-2, неоновая, водородная и ртутная лампы, рисунки спектров ртути, водорода, неона.

3. ОПИСАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ УСТАНОВКИ И ПОДГОТОВКА УСТАНОВКИ К ИЗМЕРЕНИЯМ. Для измерения длин волн спектральных линий в работе используется стеклянно-призмный монохроматор УМ-2, предназначенный для спектральных исследований в диапазоне от 380 до 1600 нм. Принципиальная оптическая схема монохроматора изображена на рис. 1.

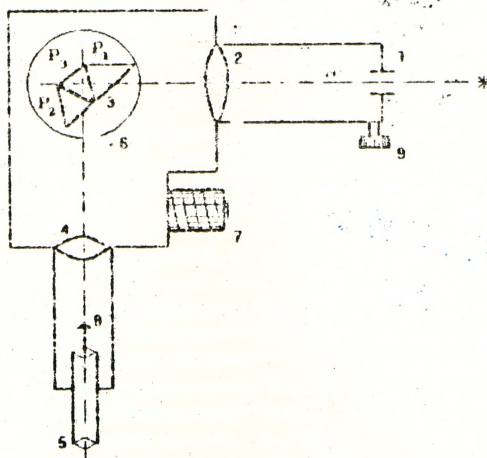


Рис. 1. Принципиальная оптическая схема монохроматора УМ-2.

ОСНОВНЫЕ УЗЛЫ И МЕХАНИЗМЫ МОНОХРОМАТОРА УМ-2

1 - входная щель, снабженная микрометрическим винтом 9, который позволяет открывать щель на нужную ширину (рабочая ширина щели 0,02 - 0,03 мм), 2-кollиматорный объектив; 3-сложная спектральная призма, установленная на поворотном столике 6 - призма состоит из 3-х стеклянных призм P1, P2, P3 из различных сортов стекла; поворотный столик 6 вращается вокруг вертикальной оси при помощи микрометрического винта с отчетным барабаном 7, на котором нанесена винтовая дорожка с градусными делениями. Вдоль дорожки скользят указатель поворота барабана. При вращении барабана призма поворачивается и в центре поля зрения появляется разный цвет участка спектра, зрительная труба 5 состоит из объектива 4 и окуляра 5; объектив 4 даёт изображение входной щели в своей фокальной плоскости, в этой плоскости расположен указатель 8, изображение рассматривается через окуляр 5. Спектральный прибор характеризуется угловой дисперсией и разрешающей способностью. **УГЛОВАЯ ДИСПЕРСИЯ** характеризует способность прибора пространственно разделять лучки различных длин волн. Мерой угловой дисперсии является отношение $d\alpha / d\lambda$, где $d\alpha$ - разность углов отклонения дисперсионных световых лучков с длинами волн, отличающимися на $d\lambda$. **РАЗРЕШАЮЩАЯ СПОСОБНОСТЬ** характеризует способность прибора разделять (разрешать) спектральные линии мало отличающиеся по длинам волн. За меру разрешающей способности принимают $\lambda / \delta\lambda$, где λ - длина волны спектральной линии, около которой производят измерения, а $\delta\lambda$ - наименьшая разность длин волн двух ещё разрешаемых линий.

Для наблюдения спектра необходимо перед входной щелью установить на рейтерах источник излучения (ртутную лампу ДРН-250 или неоновую). Включить лампу и наблюдать за спектром в окуляр 5 зрительной трубы, вращая барабан 7, введи спектр в поле зрения, и изменяя ширину щели микровинтом 9 добиться наиболее четкого изображения спектра. Каждому положению барабана 7 соответствует на выходе монохроматора определенное значение длины волны, на барабане нанесена шкала в относительных единицах. Выбранную линию спектра подводят под стрелочку 8 в окуляре 5, вращением барабана 7. Сняв показания барабана (цифра стоящая против риски), записать соответствующую длину волны. Известно, что атомы данного вещества испускают кванты энергии (фотоны) вполне определенных частот, присутая данному сорту атомов, что, в свою очередь, определяется энергетической структурой атома. Поэтому атом каждого вещества имеет линейчатый спектр, не похожий на спектр любого другого вещества. В

данной работе приведены линейчатые спектры ртути, цинка и водорода на планшете. Заметим, что не все линии в этих спектрах одинаково интенсивны, есть более яркие линии и менее яркие. Чтобы найти нужную линию в наблюдаемом спектре, т.е. идентифицировать ее выбирают, как правило, наиболее яркие линии. Следует отметить, что в наблюдаемом спектре из-за присутствия примесей линий может быть гораздо больше, чем на рисунке (планшете).

4. ЗАДАНИЯ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ.

ЗАДАНИЕ 1. ГРАДУИРОВКА МОНОХРОМАТОРА.

Для проведения градуировки необходимо иметь источник света с линейчатым спектром. В данной работе для этих целей используется дуговая ртутная лампа ДРШ-250. Ее спектр с указанием яркости изображен на планшете. Около каждой линии указаны длины волн в нм.

Последовательность выполнения операций при градуировке:

1. Установить ртутную лампу ДРШ-250 на рейте.
2. Включить тумблер "Сеть" и "Лампа ДРШ", нажать кнопку "Пуск".
3. Открыть входную щель на 20-30 мкм с помощью микровинта 9.
4. Наблюдать через окуляр 5 спектр. Если линии не четкие, то с помощью микровинта 9 установить такую ширину щели, чтобы они были резкими.
5. Вращением барабана 7 подводить под стрелочку 8 последовательно все наиболее яркие линии, каждый раз записывая значения длины волны λ этих линий и показания по шкале барабана n в таблицу, составленную самостоятельно.
6. По полученным данным построить градуировочный график, откладывая по вертикали показания барабана n , а по горизонтали - длины волн λ в нм.

График строится на миллиметровой бумаге, размером не меньше 30х30 см.

ЗАДАНИЕ 2. ИЗМЕРЕНИЕ ДЛИН ВОЛН В СПЕКТРЕ ИЗЛУЧЕНИЯ ВОДОРОДА.

Вместо ртутной лампы на рельсе установить водородную лампу и включить её в сеть. Так же, как и в задании 1, отыскать линии в спектре водорода, обозначенные на планшете H_{α} и H_{β} (H_{α} - ярко-красная линия, H_{β} - зелёно-голубая). Вращением барабана подводить каждую линию спектра к стрелке в окуляре, каждый раз делая отсчет по барабану. Используя градуировочный график задания 1, по показаниям барабана определить длины волн этих линий, повторив измерения не менее трёх раз. Спектр зарисовать.

Из формулы (2) Приложения 1

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

вычислить постоянную Ридберга, принимая $n=3$ для линий H_α и $n=4$ для линий H_β . Полученное среднее значение сравнить с табличным.

Из формулы (12) Приложения 1

$$R = \frac{m_e \cdot e^4}{64 \pi^3 h^3 \epsilon_0^2 c}$$

определить постоянную Планка. Сравнить полученное значение с табличным. Сделать вывод по полученным результатам.

ЗАДАНИЕ 3. ИДЕНТИФИКАЦИЯ ЛИНИЙ СПЕКТРА НЕОНА ПО ГРАДУИРОВОЧНОЙ КРИВОЙ И РИСУНКАМ НА ПЛ. ШИТЕ.

1. Установить на резле неоновую лампу и включить её в сеть.
2. Так же как в заданиях 1 и 2, отыскать линии в спектре неона, изображенные на планшете, и записать показания барабана. Используя градуировочный график задания 1, по показаниям барабана определить длины волн для этих линий. Измерения проводить не менее трёх раз. Спектр зарисовать.

ПРИЛОЖЕНИЕ 1.

БОРОВСКАЯ ТЕОРИЯ ВОДОРОДОПОДОБНЫХ АТОМОВ.

Линейчатые спектры различных источников широко исследовались во второй половине 19 века, а атомная спектроскопия стала хорошо развитой областью науки. Возбуждённые атомы излучают линейчатые спектры, состоящие из отдельных линий. Эти линии образуют группы - так называемые серии. В 1885 году швейцарский преподаватель музыки Иоганн Бальмер установил, что длины волн видимой серии, испускаемой водородом, подчиняются закону:

$$\lambda = \lambda_0 \frac{n^2}{n^2 - 4}; \quad (1)$$

где λ_0 - константа; n - целое число, принимающее значение 3, 4, 5, ... В 1890 году шведский физик Ридберг придал формуле (1) более общий вид:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (2)$$

где коэффициент R называется постоянной Ридберга. В системе СИ она измеряется в m^{-1} .

Дальнейшие исследования показали, что в излучении водорода, кроме серии, описываемой формулой (2), имеется ещё несколько серий. Такие серии могут быть представлены аналогичными формулами. Это серия Лаймана, расположенная в ультрафиолетовой области:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n=2,3,4,\dots$$

Остальные серии расположены в инфракрасной области.

$$\text{Серия Пашена: } \frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n=4,5,6,\dots$$

$$\text{Серия Брэггера: } \frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n=5,6,7,\dots$$

$$\text{Серия Пфунда: } \frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n=6,7,8,\dots$$

Общей формулой для всех серий является обобщённая формула Бальмера, имеющая следующий вид:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right).$$

Хотя формула Бальмера с исключительной точностью соответствовала наблюдениям, никто не понимал, почему она правдива. Прошло почти 30 лет, прежде чем Нильс Бор дал физическую интерпретацию этой формулы. Как известно, в начале нашего века Резерфорд на основании проведённых опытов предложил модель атома с сосредоточенным в центре положительно заряженным ядром и электронами, движущимися по круговым орбитам вокруг ядра. Из предложенной модели атома вытекало, что электроны вокруг ядра движутся с огромными ускорениями.

Согласно же теории Максвелла ускоренно движущиеся заряды должны излучать электромагнитные волны, теряя при этом энергию. А это, в свою очередь, должно приводить к уменьшению расстояния между электроном и ядром, т.е. в результате электрон должен "упасть" на ядро,

как показывают расчеты, за время порядка 10^{-8} с. На самом деле в атоме такого не происходит.

Смелое предложение Бора заключалось в том, что классическая электромагнитная теория Максвелла просто неприменима к электрону, движущемуся по орбите вокруг ядра. Одновременно Бор предположил, что два члена в формуле Бальмера представляют собой полные энергии двух разрешенных орбит (или энергетических состояний) электрона в атоме водорода.

Чтобы преобразовать формулу Бальмера (2) в формулу для энергии фотона (кванта энергии) умножим обе части на hc (h - постоянная Планка, c - скорость света в вакууме), тогда получим:

$$\frac{hc}{\lambda} = hcR \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \text{ но } \frac{c}{\lambda} = \nu$$

(ν - частота излучения), так что

$$\frac{hc}{\lambda} = h\nu = E,$$

где E - энергия фотона.

Поэтому можем написать

$$E = h\nu = hcR \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{n^2} \right) = E_{n2} - E_{n1}, \quad (3)$$

где $E_{n2} = \frac{hcR}{2^2}$, $E_{n1} = \frac{hcR}{n^2}$.

Исходя из этого Бор сформулировал два постулата:

1. Энергия электрона в атоме не теряется на излучение, когда он движется по любой из орбит. Эти состояния называются стационарными состояниями рассматриваемой системы.

2. Электрон излучает (поглощает) энергию только тогда, когда он совершает переход между двумя стационарными состояниями, причем энергии испущенного (поглощенного) фотона в точности равны разности энергий электрона на этих орбитах

$$h\nu = E_{n2} - E_{n1}. \quad (4)$$

Бор внес радикальное изменение в существовавшие ранее представления об атоме, отрицая применимость классической электродинамики к внутриатомным явлениям.

Оказалось, что можно получить ряд дискретных разрешенных состояний энергии только при том радикальном предположении, что

момент импульса электрона может быть кратным величине $h / 2\pi = \hbar$. Условия квантования момента импульса Бора можно записать в виде формулы:

$$L = m_e v r_n = n\hbar, \quad (5)$$

где L - момент импульса электрона, m_e - масса электрона, v - скорость электрона, r_n - радиус n -ой орбиты, n - принимает значения целых чисел 1, 2, 3, ... и называется главным квантовым числом данного состояния.

Запишем величину силы электростатического взаимодействия ядра с электроном:

$$F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r^2}. \quad (6)$$

Нормальное ускорение, обусловленное этой силой

$$a_n = \frac{V^2}{r_n} = \frac{F}{m_e} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r_n^2 m_e}. \quad (7)$$

Из уравнения (5) находим $V = \frac{n\hbar}{m_e r_n}$, тогда $\frac{V^2}{r_n} = \frac{n^2 \hbar^2}{m_e^2 r_n^3} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r_n^2 m_e}$

откуда

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2 4\pi\epsilon_0}{m_e e^2}. \quad (8)$$

Индекс n указывает, что радиус соответствует данному значению квантового числа n . Запишем формулу для полной энергии электрона n -ой орбиты:

$$E_n = E_{\text{пот}} + E_{\text{кин}}$$

Найдем $E_{\text{пот}}$. Как известно, потенциальная энергия заряда q в точке с потенциалом φ равна $E_{\text{пот}} = q\varphi$. Поэтому потенциальная энергия электрона ($q = -e$) в поле ядра с зарядом $+e$ с учетом того, что

$\varphi = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e}{r_n}$ будет равна: $E_{\text{пот}} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r_n}$ и с учетом формулы (7)

получим формулу для кинетической энергии: $E_{\text{кин}} = \frac{m_e V_n^2}{2} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r_n}$

Сравнивая выражения для потенциальной и кинетической энергий, получаем $E_{\text{кин}} = -E_{\text{пот}} / 2$.

Тогда полная энергия с учетом выражения (8)

$$E_n = E_{\text{пот}} / 2 = - \frac{m_e e^4}{32 \pi^2 \epsilon_0^2 h^2} \cdot \frac{1}{n^2} \quad (9)$$

Таким образом, пользуясь условием квантования момента импульса, Бор получил ряд дискретных энергетических состояний. Энергия данного состояния зависит от значения главного квантового числа n этого состояния. Разность энергий состояний с главными квантовыми числами n_2 и n_1 , с учетом выражения (9) равна:

$$\Delta E = E_{n_2} - E_{n_1} = \frac{m_e e^4}{32 \pi^2 \epsilon_0^2 h^2} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (10)$$

Если электрон совершает переход между состояниями n_2 и n_1 , где $n_2 > n_1$, то величина обратная длине волны излучения будет определяться следующим образом: $\frac{1}{\lambda_{21}} = \frac{\nu_{21}}{c} = \frac{h\nu_{21}}{hc} = \frac{\Delta E}{hc}$. Подставив вместо ΔE в выражение (10) и заменив h на $h = h / 2\pi$, получим:

$$\frac{1}{\lambda_{21}} = \frac{m_e e^4}{64 \pi^2 \epsilon_0^2 h^3 c} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (11)$$

Подставляя в это выражение численные значения основных констант, Бор нашел, что величина перед скобками близка к экспериментальному значению постоянной, определенному из спектра водорода:

$$R = \frac{m_e e^4}{64 \pi^2 \epsilon_0^2 h^3 c} \quad (12)$$

Таким образом, Бору удалось почти в точности описать спектр атома водорода.

В приведенном здесь вычислении предполагалось, что электрон вращается по круговой орбите около покоящегося ядра, тогда как в действительности электрон и ядро вращаются относительно их общего центра масс. Поправка на этот эффект равна отношению массы электрона m_e к массе протона m_p . Эта поправка переводит численное значение R (формула 12) в значение, полученное из измерений спектра водорода. Для других атомов поправка оказалась меньшей.

Подставляя в формулу (11) значения $n_1 = 2$, Бор вычислил длины волн в серии Бальмера.

Первые пять орбит боровского атома водорода показаны на рис. 2. На этой же схеме указаны переходы для спектральных серий, соответствующие $n_1 = 1, 2$ и 3. Энергия электронов на этих орбитах (энергетические состояния) показаны на диаграмме уровней энергии рис. 3.

Бор затруднялся дать надлежащее объяснение фундаментального значения такой странной смеси классической динамики и гипотезы квантования. Так, боровская теория для водородоподобных атомов оказалась неприменимой даже для атома гелия.

Эти противоречия боровской теории были разрешены новой механикой, созданной Шредингером, Гейзенбергом, Дираком и другими, получившей название волновой и квантовой механики.

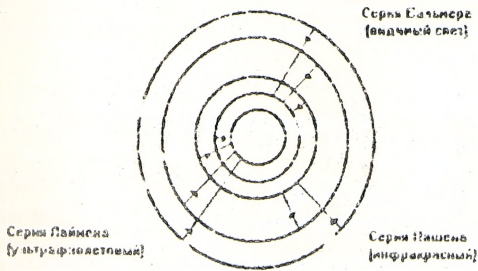


Рис. 2. Орбиты в модели Бора атома водорода.

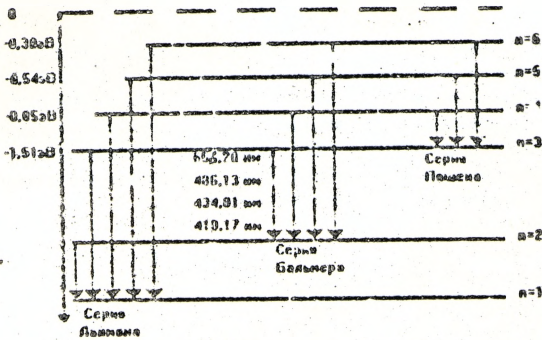


Рис. 3. Схема энергетических уровней атома водорода. (Показан ряд линий трех спектральных серий.)

ПРИЛОЖЕНИЕ 2.

Основные представления квантовой механики

В механике Ньютона состояние частицы в некоторый момент времени определяется заданием ее координат и вектора скорости в этот момент. Эволюция состояния описывается вторым законом Ньютона в том смысле, что если известно состояние в некоторый момент времени и известны характеристики взаимодействия частицы с окружением, выражаемые в понятии силы, а также масса частицы, то с помощью второго закона Ньютона можно найти состояние частицы в любой будущий момент времени. Известные в любой момент координаты частицы и вектор ее скорости позволяют ввести представление о траектории частицы как о кривой, вдоль которой движется частица. Опыты по дифракции микрочастиц (например, опыты Девисона-Джермера по дифракции электронов на кристаллах) показали, однако, что представление о том, что микрочастица движется по некоторой определенной траектории, не соответствует реальному положению вещей. Поскольку явление дифракции характерно для волн любой природы, то можно сказать, что наблюдаемая на опыте дифракция микрочастиц свидетельствует о наличии у микрочастицы волновых

двойств. В связи с этим говорят о корпускулярно-волновом дуализме микрочастиц: в одних опытах поведение микрочастиц соответствует представлению о микрочастице как об обычной частице, локализованной в некоторой малой области пространства, а в других опытах поведение микрочастиц соответствует представлению о микрочастице как о некоторой волне, заполняющей все пространство. Важно в связи с этим понимать, что микрочастица - это не обычное (в ньютоновском смысле) частица и не обычная волна - микрочастица это объект, обладающий и корпускулярными и волновыми свойствами, которые в различных опытах проявляются в большей или меньшей степени. Даже если в некотором эксперименте на первый план выступают корпускулярные свойства микрочастицы, представление о микрочастице как об обычной ньютоновской частице, имеющей точно определенные значения координат и скорости, носит приближенный характер. Этот факт описывает соотношение неопределенностей Гейзенберга, которое для одномерного движения микрочастицы вдоль некоторой оси X имеет вид:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \sim \hbar, \quad (13)$$

где $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, $h = 6,67 \cdot 10^{-34}$ Дж·с - постоянная Планка, значок (~) означает "по порядку величины", Δx - неопределенность, с которой известна координата x , Δp_x - неопределенность, с которой известна проекция импульса на ось X. Для обычной ньютоновской частицы, для которой координата и импульс известны точно, было бы $\Delta x = \Delta p_x = 0$, что противоречит соотношению (13), так что микрочастицу действительно нельзя считать обычной ньютоновской частицей. Несколько отбывая ситуацию, можно сказать, что соотношение неопределенностей (13) определяет точность, с которой можно пользоваться представлением о микрочастице как об обычной частице в механике Ньютона, т.е. границы применимости понятия об обычной ньютоновской частице. В связи с тем, что соотношение неопределенностей ограничивает представление о микрочастице как об обычной ньютоновской частице, движущейся по определенной траектории описание движения микрочастицы в квантовой механике является менее детальным чем в механике Ньютона.

Состояние микрочастицы в квантовой механике определяется заданием волновой функции (пси-функции), зависящей в общем случае от координат и времени $\Psi = \Psi(X, Y, Z, t)$. Эта функция принимает комплексные значения и непосредственный физический смысл имеют лишь математические выражения с участием этой функции.

принимавшие действительные значения. Простейшим примером такого выражения является квадрат модуля волновой функции $|\Psi|^2 = \Psi \cdot \Psi^*$ где Ψ^* - комплексно сопряжённая функция. За некоторыми исключениями, детали которых в дальнейшем рассматриваться не будут, величина $d\omega = |\Psi|^2 dV$ определяет вероятность нахождения микрочастицы в элементарном объёме dV . Величину $d\omega/dV$ называют плотностью вероятности, поэтому говорят, что квадрат модуля волновой функции в некоторой точке пространства даёт плотность вероятности нахождения частицы в этой точке. Из этого свойства волновой функции вытекает условие нормировки:

$$\iiint |\Psi|^2 dV = 1,$$

где тройной интеграл берётся по всему пространству. Это условие выражает тот факт, что сумма вероятностей нахождения микрочастицы в отдельных элементарных объёмах равна единице, либо факт нахождения микрочастицы во всём пространстве - достоверное событие, коль скоро волновая функция описывает частицу. Из смысла величины $|\Psi|^2$ вытекает также ряд других свойств волновой функции, имеющих очевидный смысл: конечность, однозначность и непрерывность. Укажем также без обоснования, что частные производные волновой функции по координатам также должны быть непрерывными за исключением точек, в которых потенциальная энергия частицы обращается в плюс бесконечность. Эти условия налагаемые на волновую функцию, называются стандартными.

Аналогом второго закона Ньютона в классической механике является временное уравнение Шредингера для волновой функции, описывающее эволюцию состояния микрочастицы:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi - U(x, y, z, t) \cdot \Psi, \quad (14)$$

где $i = \sqrt{-1}$ - мнимая единица, m - масса частицы, U - потенциальная энергия частицы, Δ - оператор Лапласа (в декартовой прямоугольной системе координат он записывается в виде $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$).

Можно показать, что если частица находится в стационарном силовом поле, т.е. потенциальная энергия не зависит от времени, а именно: $U(X, Y, Z, t) = U(X, Y, Z)$, то энергия частицы сохраняется. Такие состояния называются стационарными. Волновая функция стационарного состояния может быть записана в виде:

$$\Psi(X, Y, Z, t) = e^{-iEt/\hbar} \psi(X, Y, Z), \quad (15)$$

где функция $\psi(X, Y, Z)$ является функцией только координат, E - энергия частицы. Смысл термина, стационарное состояние можно пояснить следующим образом. Из формулы (15) имеем

$$\Psi^* = \psi^*(x, y, z) e^{+iEt/\hbar}$$

и $|\Psi|^2 = \psi^2(X, Y, Z)$, т.е. плотность вероятности нахождения микрочастицы в любой точке пространства не зависит от времени. Подставляя функцию (15) в уравнение (14) получим уравнение Шредингера для стационарных состояний или стационарные уравнения Шредингера:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + [E - U(X, Y, Z)] \cdot \psi = 0. \quad (16)$$

Если известен вид функции $U(X, Y, Z)$, то решая уравнение (16) с учётом стандартных условий, налагаемых на функцию ψ , можно найти волновые функции стационарных состояний, а, следовательно, и вообще все величины, характеризующие частицу в квантовой механике. Особенностью уравнения (16) является то, что при $E \geq 0$ оно имеет решение при любых значениях энергии E . В этих случаях говорят, что состояния образуют сплошной спектр. Можно показать, что при этом величина $|\Psi|^2$ не обращается в нуль при стремлении координат X, Y, Z к бесконечности. Физически это означает, что частица оказывается не связанной с источником поля и может уходить от него на бесконечность, что соответствует так называемому инфинитному движению. Типичным примером такого движения является рассеяние частицы на силовом центре, например, рассеяние электрона на протоне. При $E < 0$ решение уравнения (16) существует не при всех возможных значениях E , а только при некоторых значениях E_1, E_2, \dots , образующих дискретный ряд значений. О таких состояниях говорят, что они принадлежат

дискретному спектру. Можно показать, что они соответствуют состоянию частицы, в котором она связана с силовым центром и не может уйти от него на бесконечность (фигурное движение). Проиллюстрируем особенности решения уравнения (16) на примере одномерного движения электрона с зарядом $(-e)$ в поле покоящегося в точке $x = 0$ пр. иона с зарядом $(+e)$. В этом случае потенциальная энергия электрона равна:

$$U = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|x|}$$

Поскольку для одномерного случая $\Delta = d^2/dx^2$, уравнения (16) можно записать в виде:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |x|} \psi = E \cdot \psi. \quad (17)$$

Рассмотрим далее только случай $E < 0$, т.е. случай связанных состояний.

Удобно перейти в уравнении (17) к безразмерным переменным ξ (кси) и κ (каппа):

$$\xi = 2\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} X, \quad \kappa = \frac{me^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}}. \quad (18)$$

После несложных преобразований (17) примет вид:

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + \left(\frac{\kappa}{|\xi|} - \frac{1}{4} \right) \psi = 0. \quad (19)$$

Рассмотрим сначала случай $\kappa > 0$. При $\xi \rightarrow \infty$ уравнение (19) переходит в уравнение ($\psi_\infty = \lim_{\xi \rightarrow \infty} \psi$):

$$\frac{d^2\psi_\infty}{d\xi^2} - \frac{1}{4} \psi_\infty = 0.$$

Решение этого уравнения, удовлетворяющее условию конечности, имеет вид $\psi_\infty = e^{-\frac{1}{2}\xi}$. При конечных ξ представим функцию ψ в виде

$\psi_0 = e^{-\kappa \xi} f(\xi)$, где $f(\xi)$ - новая неизвестная функция. Подстановка этого выражения в (19) приводит к следующему уравнению для $f(\xi)$

$$\xi \frac{d^2 f}{d\xi^2} - \xi \frac{df}{d\xi} + \kappa f = 0 \quad (20)$$

Легко видеть, что при $\xi \rightarrow 0$ должно быть $f(\xi) \rightarrow 0$. Если бы это было не так, то при $\xi \rightarrow 0$ функция ψ также оставалась бы конечной, но тогда из (19) следовало бы, что $\frac{d^2 \psi}{d\xi^2} \rightarrow 0$, но тогда это означало бы разрыв производной $d\psi/d\xi$, что противоречит условиям налагаемым на функцию ψ , указанным выше. Поэтому при разложении функции $f(\xi)$ в ряд Тейлора постоянное слагаемое отсутствует. Получим, следовательно, разложение в виде:

$$f(\xi) = \sum_{k=1}^{\infty} a_k \xi^k \quad (21)$$

$$\text{Тогда } \frac{df}{d\xi} = \sum_{k=1}^{\infty} k a_k \xi^{k-1}, \quad \frac{d^2 f}{d\xi^2} = \sum_{k=1}^{\infty} k(k-1) a_k \xi^{k-2}.$$

Подставляя эти выражения в (20), получим:

$$\sum_{k=1}^{\infty} k(k-1) a_k \xi^{k-1} = \sum_{k=1}^{\infty} (k-\kappa) a_k \xi^k,$$

или, что тоже самое

$$\sum_{k=0}^{\infty} k(k+1) a_{k+1} \xi^k = \sum_{k=0}^{\infty} (k-\kappa) a_k \xi^k. \quad (22)$$

Начиная с $k=1$ коэффициенты при соответствующих степенях ξ^k должны быть равны. Это приводит к следующему соотношению между коэффициентами a_{k+1} и a_k , называемому рекуррентным

$$a_{k+1} = a_k \frac{k - \kappa}{k(k+1)}, \quad k=1, 2, \dots \quad (23)$$

Если бы ряд (21) был бесконечным, то при $k \rightarrow \infty$ из (23) мы бы имели $\frac{a_{k+1}}{a_k} = \frac{1}{k+1}$. Такое отношение характерно для ряда функции e^ξ :

$$e^\xi = 1 + \frac{\xi}{1!} + \frac{\xi^2}{2!} + \dots + \frac{\xi^k}{k!} + \dots$$

Но тогда мы бы имели с конечными значениями функции $\Psi(\xi) = \Gamma(\xi) e^{-\xi/2}$ при $\xi \rightarrow \infty$. Для конечности функции $\Psi(\xi)$ необходимо, чтобы ряд (21) был полиномом, т.е. обрывался на некотором n -м члене. Условием того, что $a_{n+1} = 0$ является, как это видно из (22) равенство $\kappa = n$. Используя (18), получим, что уравнение (17) имеет решение удовлетворяющее стандартным условиям, при следующих значениях энергии

$$E_n = - \frac{m e^4}{32 \pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}, \quad (24)$$

т.е. мы имеем дискретный спектр. Иначе говоря говоря, при таком движении электрон может иметь не любые значения энергии, а лишь такие, которые выражаются формулой (24), где $n=1, 2, \dots$ - целое число. Соответствующая волновая функция запишется в виде:

$$\Psi_n(\xi) = e^{-\xi/2} \sum_{k=0}^{n-1} a_k \xi^k$$

Чтобы получить решение при $\xi < 0$, вводим переменную (тета) $\eta = -\xi$ и уравнение примет вид:

$$\frac{d^2 \Psi}{d\eta^2} + \left(\frac{\kappa - 1}{\eta} - \frac{1}{4} \right) \Psi = 0,$$

т.е. точно такой же вид относительно переменной η , какой вид имеет уравнение (19) относительно ξ . Выражение для E_n остается, следовательно, в силе, а соответствующая волновая функция имеет вид

$$\Psi_n(\xi) = e^{-\xi/2} \sum_{k=0}^{n-1} a_{k,n} (-\xi)^{k+1/2}$$

Анализ трёхмерного движения электрона в поле неподвижного протона, т.е. рассмотрение атома водорода математически значительно сложнее, хотя формальное выражение для потенциальной энергии имеет такой же вид, как и в случае одномерного движения:

$$U = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

где r - расстояние от электрона до протона. В отличие от одномерного движения у электрона появляются новые физические характеристики: момент импульса и его проекция на физически выделенное направление, в качестве которого выступает либо направление внешнего электрического или магнитного поля, либо, если внешнее поле отсутствует, направление магнитного поля самого протона. Поэтому волновая функция, являющаяся решением уравнения Шредингера, зависит теперь от трёх целых чисел, обозначаемых n, l, m_l .

Уравнение Шредингера позволяет рассчитать энергетический спектр атома водорода и других более сложных атомов. Однако экспериментальное определение уровней энергии атомов показывает, что полного совпадения предсказанной теории с опытом нет. Точные измерения обнаружили тонкую структуру уровней, т.е. все уровни, кроме основного, расщеплены на ряд очень близких подуровней. Объяснить это расхождение удалось с помощью предположения, что электрон обладает спином. Согласно этому предположению электрон и большинство других элементарных частиц наряду с орбитальным моментом обладают еще собственным механическим моментом импульса. Этот собственный момент (s) и называют спином (от английского *spin* - вращаться, вертеться). Таким образом с учётом спина, состояние электрона определяется четырьмя квантовыми числами: n, l, m_l, s ; n - главное квантовое число определяет энергию атома;

- 18 -

$$E_n = -\frac{\pi e^4}{32 \pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \cdot \frac{-2}{n^2} \quad (n=1,2,3,\dots) \quad (25)$$

(обратите внимание, что это выражение совпадает с формулой (24) для одного из случаев и с формулой (9), вытекающей из теории Лорда), l называется азимутальным квантовым числом и определяет момент импульса электрона в атоме:

$$M = \hbar \sqrt{l(l+1)}; \quad l=0,1,2,\dots,n-1.$$

m_l - магнитное квантовое число, определяет проекцию этого момента импульса на физически выделенное направление Z :

$$M_z = m_l \hbar; \quad m_l = -l, (-l+1), \dots, -1, 0, 1, \dots, l.$$

m_s - спиновое квантовое число, которое может принимать значения $\pm \frac{1}{2}$ и определяет проекцию спина на заданное направление. В многоэлектронных атомах действует в дополнение к вышеуказанному новый принцип, вытекающий из уравнения Шредингера - принцип Паули.

По принципу Паули или принципу запрета: в атоме не может существовать двух электронов с одинаковыми квантовыми числами, т.е. если один атомный электрон находится в квантовом состоянии, характеризуем набором квантовых чисел n, l, m_l, m_s , то другие электроны данного атома уже не могут находиться в этом квантовом состоянии.

Из равенства (25) для различных n_i и n_k , получается:

$$2\pi\hbar\nu_{k1} = E_{n_k} - E_{n_1} = \frac{me^4 Z^2}{32 \pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_k^2} \right), \quad (26)$$

где $n_k > n_1$, т.к. $\nu/\lambda = \omega/c$, то из (26) следует:

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{me^4 Z^2}{64\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 c} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_k^2} \right) \quad (27)$$

Эта формула совпадает с обобщенной серийной формулой Бальмера. Причём из сравнения этих формул видно, что:

$$R = \frac{me^4 Z^2}{64 \pi^3 \epsilon_0^2 c h^3} \quad (28)$$

Эта формула справедлива для водорода и водородоподобных атомов.

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ.

1. Постулаты Бора.
2. Теория атома водорода по Бору.
3. Назовите серии спектра водорода и к какой области спектра они принадлежат.
4. Природа линейчатых спектров.
5. Написать уравнение Шредингера для одномерного кулоновского потенциала и сформулировать стандартные условия.
6. Какой вид имеет решение уравнения Шредингера для одномерного кулоновского потенциала? Как из стандартных условий вытекает дискретность энергетического спектра при $E < 0$?
7. Как называются квантовые числа n, l, m_l и что определяет каждое из них?

ЛИТЕРАТУРА.

1. Деллаф А.А., Яворский Б.М. Курс физики, т.3, М., 1979, §§ 13.3, 13.4.
2. Савельев И.В., Курс общей физики, т.3, М., 1973, §§ 62, 63, 69.
3. Лансберг Г.С., Оптика, М., 1976, §§ 294, 295, 297, 298.
4. Уродов В.И., Стриженов В.С., Практикум по физике, Минск, 1973.
5. Марион Дж., Физика и физический мир, М., Мир, 1975.

УЧЕБНОЕ ИЗДАНИЕ

Составители: Р. И. Чопчи
А. А. Гладышук
Т. А. Новикова
М. И. Швед

Методические указания по курсу общей физики. Лабораторная работа К-2. Изучение линейчатых спектров атомов. Брест, БрПИ, 1995

Ответственный за выпуск А. А. Гладышук.

Редактор Т. В. Строкач.

Подписано к печати 05.07.95 г. формат 60x84/16.

Бумага офсет. Усл. п. л. 1,38. Уч. изд. л. 1,25.

Тираж 100 экз. Заказ № 274 Бесплатно.

Отпечатано на ротационной машине БрПИ. 224017 Брест,

ул. Московская, 267