МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Фізичний факультет

ФІЗИКА АТОМА

ЛАБОРАТОРНИЙ ПРАКТИКУМ

Навчальний посібник
для студентів фізичного факультету

Київ - 2025

Фізика атома. Лабораторний практикум.

Навчальний посібник для студентів фізичного факультету
Київського національного університету імені Тараса Шевченка.

Укладачі:
Кутовий С.Ю., Пундик І.П., Кравченко В.М., Башмакова Н.В., Гринь Д.В.

Рецензенти:
Зеленський С.Є., *д.ф.-м.н., проф*.
Кудін В.Г., *к.ф.-м.н., доц*.

Рекомендовано до друку вченою радою фізичного факультету
(протокол № 13 від 23 квітня 2025 року)

Навчальний посібник «Фізика атома. Лабораторний практикум» відповідає програмі загального курсу «Фізика атома» і розрахований на студентів фізичного факультету Київського національного університету імені Тараса Шевченка. Пропоновані лабораторні роботи охоплюють основні теми, що розглядаються в курсі атомної фізики. В посібнику наведено опис лабораторних робіт з переліком основних контрольних запитань та списком рекомендованої літератури, схеми та характеристики спектральних приладів, які використовуються при їх виконанні, методики реєстрації та обробки спектрів, таблиці фізичних величин, необхідних для виконання лабораторних робіт, спектри деяких атомів та діаграми енергетичних переходів.
Посібник може бути корисним для студентів фізичних спеціальностей університетів.

Зміст

Передмова 3

Робота 1. Визначення питомого заряду електрона методом магнетрона 4

Робота 2. Абсолютно чорне тіло. Експериментальна перевірка закону Стефана-Больцмана 13

Робота 3. Дискретність енергетичної структури атома. Досліди Франка–Герца 25

Робота 4. Атом водню. Спектр випромінювання 33

Робота 5. Атом водню. Ізотопічний зсув 43

Робота 6. Енергетична структура нижчих збуджених станів атома ртуті 47

Робота 7. Розщеплення спектральних ліній у зовнішньому магнітному полі. Ефект Зеємана 53

Робота 8. Визначення енергії дисоціації двоатомної молекули за її електронно-коливальним спектром поглинання 62

Додаток 78

1.Загальна інформація про спектри 78

2.Методика реєстрації оптичних спектрів 80

Діафрагма Гартмана 82

3. Обробка спектрів. Визначення довжин хвиль досліджуваної речовин 83

4. Спектральні прилади 84

5. Спектри випромінювання деяких атомів 88

ПЕРЕДМОВА

Навчальний посібник «Фізика атома. Лабораторний практикум» розрахований на студентів фізичних спеціальностей університетів і відповідає програмі загального курсу «Фізика атома» для студентів III курсу фізичного факультету Київського національного університету імені Тараса Шевченка.

В практикумі з фізики атома студентам пропонується вісім лабораторних робіт, які охоплюють наступні теми курсу фізики атома: рух заряджених частинок в електричних і магнітних полях, закони теплового випромінювання, теорія Бора для атома водню, рівняння Шредінгера та його розв'язок для атома водню, багатоелектронні атоми, атом у зовнішньому магнітному полі, спектри атомів і молекул.

Лабораторні роботи практикуму можна розділити на дві групи: роботи, які не вимагають роботи зі спектральними приладами, та роботи, які виконуються на спектрографах різних типів і вимагають фотографування на плівку спектрів поглинання та/або випромінювання досліджуваної речовини.

В посібнику наведено описи лабораторних робіт з переліком основних контрольних запитань та списком рекомендованої літератури, схеми та характеристики спектральних приладів, які використовуються в практикумі, методики реєстрації спектрів та їх обробки. Також наведено таблиці фізичних величин, необхідних для виконання лабораторних робіт, спектри деяких атомів та діаграми енергетичних переходів.

Пропонований посібник є розвитком «Методичних вказівок до виконання лабораторних робіт з курсу «Атомна фізика» для студентів фізичного факультету» (за редакцією акад. І. С. Горбаня, укл. М. М. Білий, В. О. Губанов, та ін., Київ: КДУ, 1991). Додано описи двох нових лабораторних робіт, описи інших робіт зазнали суттєвої переробки і доповнення.

Лабораторна робота 1

ВИЗНАЧЕННЯ ПИТОМОГО ЗАРЯДУ ЕЛЕКТРОНА МЕТОДОМ МАГНЕТРОНА

***Мета роботи*:** Визначити питомий заряд електрона e/m методом магнетрона.

***Прилади та обладнання*:** магнетрон (лампа з коаксіальними електродами), електромагніт, блоки живлення магнетрона та електромагніта, амперметри для реєстрації анодного струму та струму через електромагніт.

Теоретичні відомості

Існує багато методів експериментального визначення *питомого заряду електрона* – відношення заряду електрона до його маси ($^e/_m$). Більшість із цих методів грунтується на вивченні траєкторії руху електрона в електричному та магнітному полях. Розглянемо деякі з цих методів.

Метод Томсона. Схему досліду, проведеного у 1897 році англійським фізиком Дж. Дж. Томсоном, який відкрив електрон, зображено на Рис. 1. Пучок електронів, що вилітають завдяки явищу термоелектронної емісії з нагрівного катода K і прискорюються електричним полем між катодом K і анодом A з круглим отвором посередині, проходить через отвір в діафрагмі $Д$. Між катодом і анодом прикладено різницю потенціалів U, що розганяє електрони до швидкості υ, такої, що $mv^2/2 = eU$. Після діафрагми електрони пролітають між горизонтально розташованими пластинами конденсатора, між обкладинками якого створюється перпендикулярне напрямку руху електронів постійне електричне поле з напруженістю E.

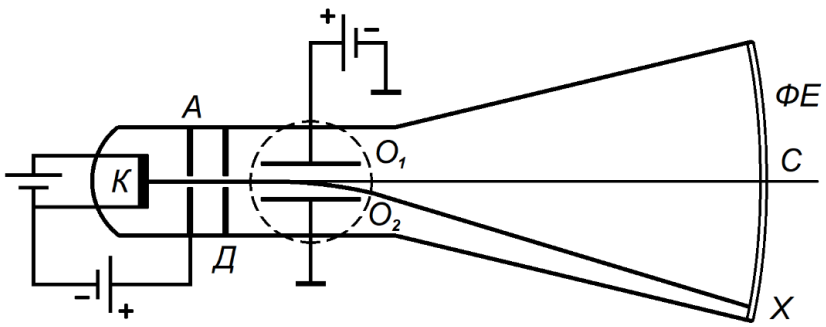


Рис. 1. Схема досліду Томсона.

На Рис.1 пунктирним колом окреслено область простору, у якій створюється магнітне поле з індукцією B, перпендикулярне до площини рисунка; O_1 та O_2 – обкладинки конденсатора, між якими створюється поперечне електричне поле з напруженістю E; $ФЕ$ – флюоресцентний екран, на якому у місці потрапляння пучка електронів утворюється світла пляма.

Нехай напрям магнітного поля є таким, що пучок електронів відхиляється донизу. Тоді за наявності лише магнітного поля (напруга на обкладинки конденсатора не подається) електрони рухатимуться в окресленій пунктиром області простору по дузі кола певного радіуса R, світла пляма на екрані зміститься вниз (викривлена лінія) і потраплятиме в деяку точку X. Потім одночасно з магнітним збуджують ще й електричне поле з напруженістю E і таким напрямком, щоб електрична сила $F_{ел} = -eE$, що діє на електрон, була напрямлена протилежно до магнітної сили $F_{мг} = -evB$ (у нашому випадку електрична сила напрямлена вгору).

Електричне поле підбирається такої величини, щоб його дія повністю скомпенсувала дію магнітного поля, внаслідок чого пучок електронів зовсім не відхилятиметься і потраплятиме у центр екрана (точку C).

За таких умов питомий заряд електрона визначатиметься формулою

$$\frac{e}{m} = \frac{E}{RB^2}, \qquad (1)$$

де R – радіус кривизни траєкторії руху електронів при проходженні ними області простору, в якому створене магнітне поле.

Метод Кірхнера. Цей метод ще називається *методом фільтра швидкостей*. Його запропонував німецький фізик Ф. Кірхнер у 1932 році. Пучок електронів, що прискорюється різницею потенціалів U_0 та колімується діафрагмою $Д_1$, проходить між обкладинками двох конденсаторів C_1 та C_2, між якими розміщено діафрагму $Д_2$ (Рис.2).

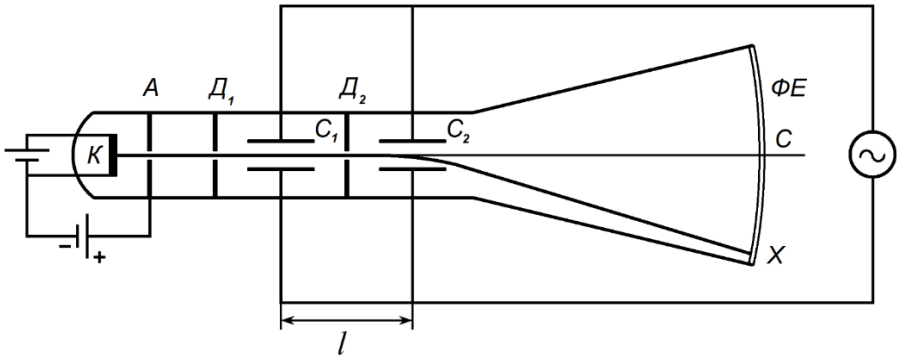


Рис. 2. Схема досліду Кірхнера.

На пластини обох конденсаторів синфазно подається різниця потенціалів U, що змінюється з часом за синусоїдальним законом з періодом T. Через діафрагму $Д_2$ будуть пролітати лише ті електрони, які пройшли між обкладинками конденсатора C_1, коли різниця потенціалів $U = 0$. За час t, за який електрони пролетять шлях l, різниця потенціалів U зміниться й електрони, пролітаючи між обкладинками конденсатора C_2, зазнають відхилення. Відхилення буде відсутнім лише у випадку, якщо

$$t = n\frac{T}{2}, \tag{2}$$

де n – ціле число.

З іншого боку

$$t = \frac{l}{\upsilon}, \tag{3}$$

де υ - швидкість електронів.

Швидкість можна знайти за прискорювальною різницею потенціалів з формули

$$\frac{m\upsilon^2}{2} = eU_0 \tag{4}$$

Використовуючи формули (2)-(4), можна отримати наступний вираз для питомого заряду електрона:

$$\frac{e}{m} = \frac{2}{U_0}\left(\frac{l}{nT}\right)^2. \tag{5}$$

Метод магнетрона. *Магнетрон* – це двоелектродна електронна лампа з коаксіальними циліндричними електродами (нагрівним катодом меншого радіуса $r_к$ (джерелом електронів) та анодом більшого радіуса r_a), поміщена всередину електромагніта (Рис. 3). Траєкторія руху електронів в такій лампі визначається дією електричного поля, напрямленого вздовж радіуса лампи (від анода до катода), та магнітного поля, напрямленого вздовж осі лампи, тобто рух електронів відбувається у схрещених електричному та магнітному полях.

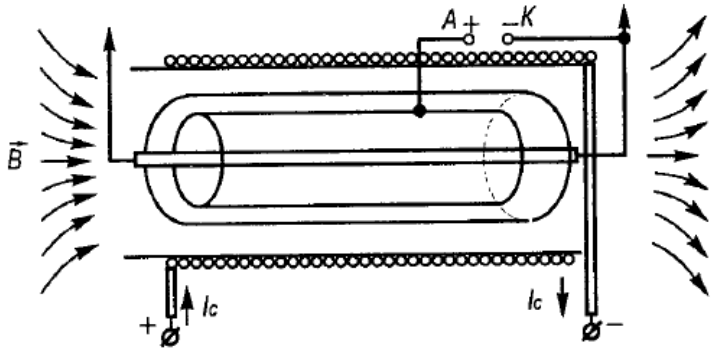


Рис. 3. . Будова і схема підключення магнетрона

При прикладанні напруги між катодом і анодом (анодної напруги U_a) і відсутності магнітного поля (відсутності струму через обмотку електромагніта) електрони, що вилітають з нагрівного катода, рухатимуться до анода вздовж радіуса магнетрона. При наявності магнітного поля траєкторія руху електронів викривлятиметься. Кривизна траєкторії збільшуватиметься при зростанні індукції магнітного поля (Рис.4).

При фіксованому значенні анодної напруги U_a анодний струм I_a (струм між катодом і анодом) не буде залежати від індукції магнітного поля B в інтервалі її значень від нуля до деякого критичного значення $B_{кр}$, оскільки всі електрони, що вилетіли з катода, будуть долітати до анода. При $B > B_{кр}$ всі електрони, що вилетіли з катода, знову повертатимуться до катода, не долітаючи до анода, і тому анодний струм зменшиться до нуля (Рис.5).

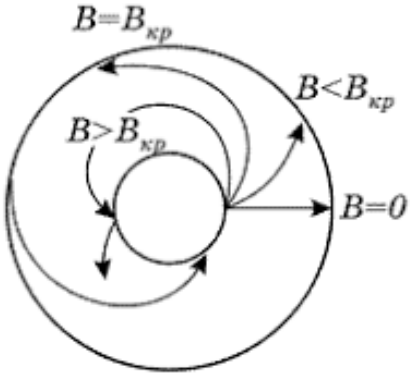


Рис. 4. Траєкторії руху електронів у магнетроні

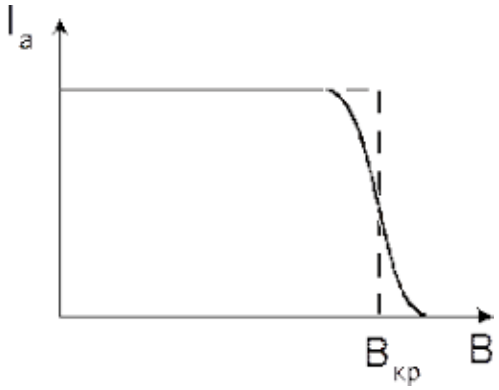


Рис. 5. Залежність анодного струму магнетрона від індукції магнітного поля

Експериментальна частина

Визначення питомого заряду електрона методом магнетрона полягає у вимірюванні критичного значення індукції магнітного поля $B_{кр}$, при якому спостерігається різке зменшення анодного струму (Рис.5). Зміна індукції магнітного поля B забезпечується зміною сили струму I_m в обмотці електромагніта. Електричну схему експериментальної установки зображено на Рис.6 (U_a – напруга між катодом і анодом магнетрона, $U_{нагр}$ – напруга нагрівання катода, $U_м$ – напруга, що подається на обмотку електромагніту).

Теоретичну залежність $I_a = f(B)$ наведено на Рис.5 (пунктирна лінія). Проте при експериментальних дослідженнях вищевказаної залежності матимемо криву, зображену на Рис.5 суцільною лінією.

Відмінність між теоретичною та експериментальною кривими зумовлена, головним чином, тим, що електрони, які вилітають при заданій температурі з катода, мають неоднакові швидкості, а також тим, що реальні електронні лампи не мають ідеальної геометрично правильної форми катода та анода. Все це призводить до того, що анодний струм при збільшенні індукції магнітного поля падає до нуля не стрибком, а у деякому інтервалі значень B.

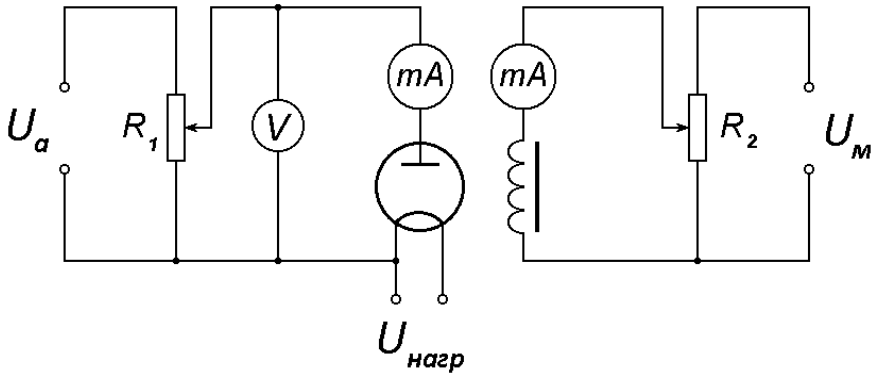


Рис. 6. Електрична схема експериментальної установки.

Критичне значення індукції магнітного поля $B_{кр}$ визначається з Рис.5 як абсциса точки перегину спадної ділянки на суцільній кривій. Вимірявши $B_{кр}$, можна розрахувати питомий заряд електрона за формулою

$$\frac{e}{m} = \frac{8U_a}{\left[B_{\text{кр}} r_a \left(1 - \left(\frac{r_k}{r_a}\right)^2\right)\right]^2}, \qquad (6)$$

де U_a – анодна напруга, r_k – радіус катода, r_a – радіус анода.

Виведення формули (6) наведено у Додатку до цієї роботи.

Порядок виконання роботи

1. Увімкнути блоки живлення магнетрона й електромагніта тумблером «Сеть». Дати їм прогрітися протягом не менше 20 хв.

2. Увімкнути тумблер "Анод" на блоці живлення магнетрона. За допомогою ручки «U_a» на блоці живлення магнетрона виставити анодну напругу так, щоб вона могла змінюватися в діапазоні від 100 до 200 В.

4. Виміряти залежність $I_a = f(I_m)$ для трьох значень U_a, вказаних викладачем.

5. З графіків залежності $I_a = f(I_m)$ для кожного значення U_a визначити величину $I_{m\,кр}$, при якій $I_a = 0$ ($I_{m\,кр}$ відповідає $B_{кр}$). Це можна зробити наступним чином. Спадну ділянку на залежності I_a від I_m

апроксимують відрізком прямої, яка перетинає початкову горизонтальну ділянку *AB* («плато») в т. *C*, а вісь абсцис – в т. *D* (Рис.7). Потім знаходять середину відрізка *CD* (т. *E*, яка є точкою перегину спадної ділянки кривої) й опускають з неї перпендикуляр на вісь абсцис, який перетинатиме останню в т. *F*. Абсциса цієї точки і дасть шукане значення $I_{m\,кр}$.

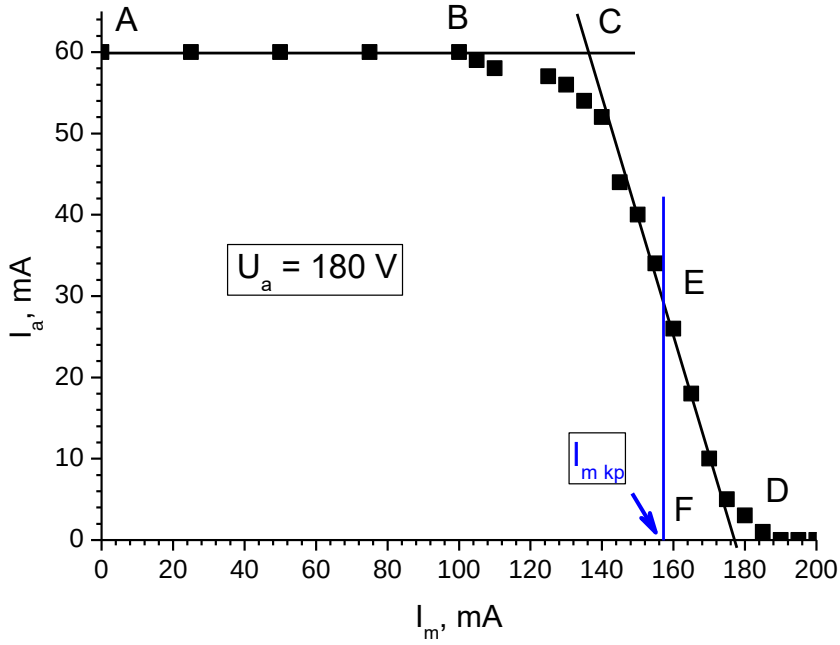


Рис. 7. Визначення $B_{кр}$ з експериментальної залежності анодного струму магнетрона від струму через обмотку електомагніту

6. За формулою $B_{\text{кр}} = kI_{m\text{кр}}$, де k – коефіцієнт пропорційності (різний для різних електромагнітів), розрахувати критичне значення індукції магнітного поля. Підставити результати вимірів у формулу (6) та визначити відношення e/m. Для магнетрона, що використовується у цій роботі: k = 0,089 мТл/мА, $r_к$ = 5,65 мм, r_a = 10,25 мм.

7. Обчислити середнє значення відношення e/m, його абсолютну та відносну похибки. Порівняти отриманий результат з табличним значенням.

Література

1. *Білий М. У., Охріменко Б. А.* Атомна фізика. Київ: «Знання», 2009. (§2.2, §10.4.2).

2. *Шпольский Э. В.* Атомная физика, т.1, М.: «Наука», 1974. (§4-10).

3. *Кучерук І. М., Горбачук І. Т., Луцик П. П.* Загальний курс фізики: Т.2. Електрика і магнетизм. Київ: «Техніка», 2001. (§8.7, 8.8).

4. Руководство к лабораторным занятиям по физике (Под ред. Л. Л. Гольдина. М.: «Наука», 1973. (Р.36).

5. *Сивухин Д. В.* Общий курс физики: Т. III. Электричество. М.:

«Физматлит», 2004.- (§86, 89, 101).

6. Веб-сторінка Національного Інституту Стандартів і Технологій США (NIST) з чинним значенням питомого заряду електрона: https://physics.nist.gov/cgi-bin/cuu/Value?esme

Контрольні запитання

1. Сили, що діють на заряджену частинку в електричному і магнітному полях.

2. Визначення питомого заряду електрона методами Томсона та Кірхнера. Фільтр швидкостей. Який з цих методів дає точніше значення питомого заряду електрона? Чому?

3. Як зміниться відношення e/m для релятивістських електронів?

4. Термоелектронна емісія. Формула Річардсона-Дешмена.

5. Будова та принцип дії магнетрона.

6. Що являє собою траєкторія руху електрона в магнетроні за відсутності магнітного поля? Як буде змінюватися траєкторія після увімкнення магнітного поля, направленого вздовж осі магнетрона, та поступового збільшення його індукції?

7. Як за допомогою магнетрона можна визначити питомий заряд електрона? Як визначається величина критичної індукції магнітного поля $B_{кр}$?

8. Чому анодний струм I_a зменшується в околі $B_{кр}$ поступово, а не стрибкоподібно?

9. $B = \mu H$. Чому дорівнює μ в даному випадку (у формулі (6), наприклад?)

10. Вивести формулу для визначення e/m за допомогою циліндричного магнетрона.

ДОДАТОК

Виведення робочої формули (6) для розрахунку e/m.

Сила, що діє на електрони в магнетроні під час їх руху від катода до анода, являє собою є *силою Лоренца*

$$\boldsymbol{F} = -e\boldsymbol{E} - e[\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B}],$$

де e – заряд електрона, $\boldsymbol{v}$ – його швидкість, $\boldsymbol{E}$ – напруженість електричного поля магнетрона, а $\boldsymbol{B}$ – індукція магнітного поля. Вектор $\boldsymbol{E}$ напрямлений вздовж радіуса магнетрона від анода до катода, а вектор $\boldsymbol{B}$ напрямлений вздовж осі магнетрона і дивиться на нас (Рис. Д.1).

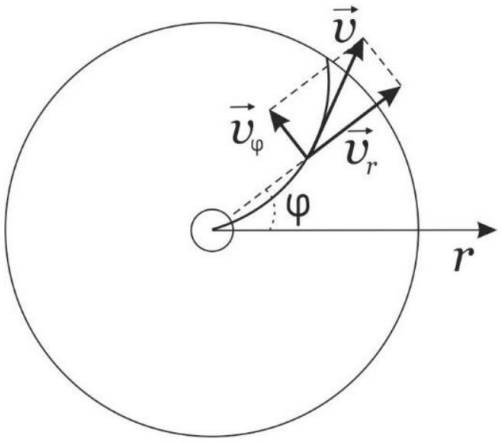


Рис. Д.1.

Рух електрона в циліндричному магнетроні зручно розглядати у циліндричній системі координат, у якій вісь z напрямлена вздовж осі магнетрона. Якщо розкласти вектор швидкості електрона $\boldsymbol{v}$ на радіальну $\boldsymbol{v}_r$ та азимутальну $\boldsymbol{v}_\varphi$ складові (див. Рис. Д.1), то можна записати:

$$\boldsymbol{v} = \boldsymbol{v}_r + \boldsymbol{v}_\varphi,$$
$$v^2 = v_r^2 + v_\varphi^2,$$

де

$$\boldsymbol{v}_r = \frac{d\boldsymbol{r}}{dt} = \dot{\boldsymbol{r}}, \quad \boldsymbol{v}_\varphi = \boldsymbol{r}\frac{d\varphi}{dt} = \boldsymbol{r}\dot{\varphi}.$$

Під час руху електрона момент імпульсу відносно осі z дорівнюватиме

$$L_z = rmv_\varphi.$$

Цей момент змінюватиметься під дією момента сили Лоренца (точніше, магнітної складової цієї сили), також напрямленого вздовж осі z і рівного

$$M_z = rF_\varphi = -rev_rB.$$

Цей момент сили Лоренца змінюватиме момент імпульсу електрона згідно із законом динаміки обертального руху

$$M_z = \frac{dL_z}{dt} = -rev_r B = \frac{d(rmv_\varphi)}{dt}.$$

Це співвідношення можна переписати у вигляді:

$$\frac{d(rmv_\varphi)}{dt} = -er\frac{dr}{dt}B = -\frac{1}{2}e\frac{d(r^2)}{dt}B. \qquad (Д.1)$$

Після інтегрування (Д.1) по часу:

$$rmv_\varphi = -\frac{1}{2}er^2B + const.$$

Стала інтегрування визначається з граничної умови: електрон, що вилітає з катода, починає свій рух у радіальному напрямку, тобто:

$$r = r_к: \quad v_\varphi = 0,$$

Звідки

$$const = \frac{1}{2}er_к^2B$$

Таким чином:

$$v_\varphi = -\frac{1}{2}\frac{e}{m}\frac{B}{r}(r^2 - r_к^2). \qquad (Д.2)$$

Зміна кінетичної енергіх електрона в магнетроні визначається дією електричного поля. Тому:

$$\frac{mv^2}{2} = \frac{m}{2}\left(v_r^2 + v_\varphi^2\right) = eU_a.$$

Після підстановки у цей вираз v_φ з (Д.2):

$$\frac{m}{2}\left[v_r^2 + \left(\frac{1}{2}\frac{e}{m}\frac{B}{r}(r^2 - r_к^2)\right)^2\right] = eU_a.$$

Якщо врахувати граничну умову: $r = r_a;\ \ v_r = 0$, яка реалізується при $B = B_{kp}$ (електрон дотикається до анода і повертає назад до катода), то

$$\frac{m}{2}\left(\frac{1}{2}\frac{e}{m}\frac{B_{кр}}{r_а}(r_a^2 - r_к^2)\right)^2 = eU_a.$$

звідки можна отримати розрахункову формулу (6):

$$\frac{e}{m} = \frac{8U_а}{\left[B_{кр}r_а\left(1-\left(\frac{r_к}{r_а}\right)^2\right)\right]^2}.$$

Лабораторна робота 2

ВИПРОМІНЮВАННЯ АБСОЛЮТНО ЧОРНОГО ТІЛА. ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНА ПЕРЕВІРКА ЗАКОНУ СТЕФАНА-БОЛЬЦМАНА

Мета роботи: Виміряти залежність потужності теплового випромінювання нагрітого тіла від його температури та порівняти її з відповідною залежністю для абсолютно чорного тіла.

Прилади та обладнання: Електрична пічка з термопарою, термостовпчик, пристрій з двома вольтметрами для вимірювання термо-ЕРС термопари та термостовпчика.

Теоретичні відомості

Будь-яке тіло в природі, температура якого вища за абсолютний нуль, є джерелом теплового випромінювання. Теплове випромінювання являє собою електромагнітні хвилі, що випромінюються за рахунок перетворення енергії хаотичного теплового руху атомів тіла, тобто його внутрішньої енергії, в енергію випромінювання.

Земля та інші планети Сонячної системи одержують енергію від Сонця саме у вигляді теплового випромінювання. Найпоширенішим штучним джерелом теплового випромінювання є звичайна лампа розжарення з вольфрамовою ниткою, що нагрівається електричним струмом до температури більше 2000 ^{0}C.

Теплове випромінювання є одним з видів теплопередачі (разом з теплопровідністю та конвекцією).

Абсолютно чорне тіло.

Абсолютно чорне тіло (АЧТ) – це фізична абстракція; АЧТ – це уявне тіло, яке повністю поглинає все електромагнітне випромінювання, що на нього падає. У той же час, АЧТ, як і будь-яке інше тіло, може випромінювати електромагнітні хвилі, тобто воно є джерелом теплового випромінювання. Причому випромінювання АЧТ (власне, його спектр), як і будь-якого іншого тіла, залежить лише від його температури і не залежить від температури навколишніх тіл (*закон Прево*).

Спектральна густина (енергії) випромінювання.

Об'ємна густина енергії електромагнітного поля (в даному випадку в порожнині, теплонепроникні стінки якої випромінюють електромагнітні хвилі

$$u = \frac{1}{8\pi}(\boldsymbol{ED} + \boldsymbol{HB}), \qquad (1)$$

пов'язана з питомою інтенсивністю (теплового) неполяризованого випромінювання I досить простим співвідношенням

$$u = \frac{8\pi}{c} I \,, \qquad (2)$$

де c – це швидкість світла у вакуумі, $\boldsymbol{E}$, $\boldsymbol{D}$ – напруженість та індукція електричного поля, $\boldsymbol{H}$, $\boldsymbol{B}$ – напруженість та індукція магнітного поля.

Питома інтенсивність випромінювання I визначається зі співвідношення

$$d\Phi = I ds \cos\vartheta d\Omega, \qquad (3)$$

тобто I – це потік енергії $d\Phi$, що проходить за одиницю часу через одиничну площадку ds і поширюється в одиницю тілесного кута $d\Omega$ у напрямку, перпендикулярному до цієї площадки ($\vartheta = 0$). Можна показати, що при цьому весь потік (через одиничну площадку) визначатиметься формулою

$$\Phi = \pi I \qquad (4)$$

Оскільки теплове випромінювання характеризується суцільним спектром, то

$$u = \int_0^\infty \rho_\omega d\omega \qquad (5)$$

Тут ρ_ω - *спектральна об'ємна густина енергії випромінювання*, тобто об'ємна густина енергії рівноважного випромінювання в одиничному частотному інтервалі. Вона є функцією частоти і температури.

Відповідно, можна ввести *спектральну* поверхневу яскравість рівноважного випромінювання I_ω, по аналогії з (2):

$$\rho_\omega = \frac{8\pi}{c} I_\omega \,. \qquad (6)$$

Спектральна густина енергії випромінювання ρ_ω – дуже важлива функція, яка фігурує в різних галузях фізики. Природно, що вона інтенсивно досліджувалась, зокрема, методами значною мірою феноменологічної науки – термодинаміки.

З спектральною густиною випромінювання пов'язані важливі фізичні величини – випромінювальна E_ω та поглинальна A_ω здатності. *Випромінювальна здатність* – енергія, яка випромінюється з одиниці поверхні в одиничному інтервалі частот за одиницю часу; *поглинальна здатність* – доля енергії одиничного інтервалу частот, яка падає на тіло, і поглинається ним, перетворюючись в тепло; це величина безрозмірна, і може приймати значення від 0 до 1..

Г.Кірхгоф встановив важливе співвідношення між випромінювальною E_ω і поглинальною A_ω здатностями будь-якого тіла для заданої частоти випромінювання ω:

$$\frac{E_\omega}{A_\omega} = I_\omega = \frac{c}{8\pi} \rho_\omega \,. \qquad (7)$$

Тобто, в стані рівноваги з випромінюванням відношення випромінювальної здатності тіла E_ω до його поглинальної здатності A_ω є сталою величиною і дорівнює поверхневій яскравості випромінювання I_ω.

Якщо поглинальна здатність $A_\omega = 1$ для будь-якої частоти ω, тобто тіло поглинає всю енергію, що на нього падає, то таке тіло є *абсолютно чорним,* і для нього

$$E_\omega = I_\omega = \frac{c}{8\pi}\rho_\omega. \quad (8)$$

Тобто випромінювальна здатність АЧТ, як і спектральна густина енергії рівноважного випромінювання ρ_ω, також є універсальною функцією частоти і температури.

Вільгельм Він, скориставшись електромагнітною теорією світла та законами термодинаміки, отримав вираз для ρ_ω у вигляді

$$\rho_\omega = \omega^3 F\left(\frac{\omega}{T}\right). \quad (9)$$

Вже з такого виразу з неявною функцією *F* можна отримати важливі закони теплового випромінювання, а саме, закон *Стефана -Больцмана* для інтегральної густини енергії випромінювання:

$$u = aT^4 \quad (10)$$

та *закон зміщення Віна*:

$$\lambda_{\text{макс}} T = const = b\,, \quad (11)$$

де $\lambda_{\text{макс}}$ – довжина хвилі, що відповідає максимальній спектральній густині енергії випромінювання, *a* і *b* – сталі величини.

В подальших дослідженнях функції $F(\omega, T)$, тобто виразу для спектральної густини ρ_ω Дж. Релеєм і Дж. Джинсом було отримано формулу

$$\rho_\omega = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} kT. \quad (12)$$

Виявилось, що ця формула (*формула Релея-Джинса*) добре описує поведінку функції ρ_ω лише при *низьких* частотах (в інфрачервоній області спектра); при високих вона призводить, зокрема, до так званої «ультрафіолетової катастрофи» (необмеженого зростання спектральної густини енергії випромінювання при збільшенні його частоти).

В. Він отримав іншу формулу

$$A\omega^3 e^{-B\omega/T}, \quad (13)$$

яка, як виявилося, навпаки – добре описує поведінку функції ρ_ω при *високих* частотах (*A* і *B* – деякі сталі).

Дещо формально об'єднавши формули Релея-Джинса і Віна, можна отримати «правильну» формулу для ρ_ω – *формулу Планка*:

$$\rho_\omega = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/kT}-1}. \qquad (14)$$

Величезна заслуга Макса Планка полягає в тому, що він отримав цю формулу з фізичних міркувань, а саме виходячи з припущення, що *тіло, як сукупність випромінювальних центрів (гармонічних осциляторів), випромінює енергію квантами ħω, оскільки осцилятори можуть перебувати лише в певних дискретних енергетичних станах.*

Це було одним з перших свідчень квантової природи випромінювання, і крок до створення квантової механіки.

У цій роботі експериментально перевіряється закон Стефана Больцмана (10).

Спектр випромінювання АЧТ.

Найбільш чорні на вигляд реальні матеріали, такі, наприклад, як сажа чи чорний оксамит, поглинають до 99% випромінювання у видимому діапазоні спектра, проте інфрачервоне випромінювання поглинається ними значно гірше. Практичною моделлю АЧТ може бути порожнина з маленьким отвором і непрозорими, пофарбованими у чорний колір стінками (Рис.1), адже світло, потрапивши крізь отвір в порожнину, буде багаторазово відбиватися і поглинатися. Отже, такий отвір буде поглинати випромінювання як АЧТ. У такій порожнині встановиться теплова рівновага між випромінюванням і стінками. Через отвір назовні буде виходити практично таке ж саме випромінювання, яке б випромінювалося абсолютно чорною площадкою такої ж форми і розмірів.

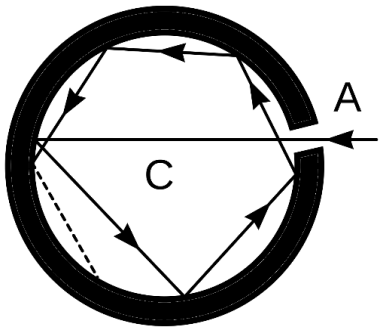


Рис. 1. Модель абсолютно чорного тіла.

Спектром випромінювання тіла називається залежність його випромінювальної здатності E_ω (або спектральної густини випромінювання ρ_ω) від частоти ω. У багатьох практично важливих випадках спектр випромінювання тіла зручно подавати як залежність випромінювальної здатності E_ν від лінійної частоти ν або випромінювальної здатності E_λ від довжини хвилі λ (E_ν і E_λ

визначаються енергією випромінювання тіла в одиничному інтервалі частот ν та довжин хвиль λ відповідно). Усі три види подання випромінювальної здатності пов'язані між собою наступними співвідношеннями:

$$E_\omega d\omega = E_\nu d\nu = E_\lambda d\lambda, \tag{15}$$

$$\omega = 2\pi\nu = \frac{2\pi c}{\lambda},\ d\omega = 2\pi d\nu = -\frac{2\pi c}{\lambda^2} d\lambda. \tag{16}$$

Таким чином, можна легко перейти від однієї змінної до іншої.

Враховуючи (8), (14) можна записати формулу для E_λ, що описує *спектр випромінювання АЧТ* як функцію довжини хвилі випромінювання та температури:

$$E_\lambda = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{exp(hc/\lambda kT)-1}, \tag{17}$$

де h – стала Планка, c – швидкість світла у вакуумі, k – стала Больцмана.

На Рис.2 показано спектри випромінювання АЧТ для різних абсолютних температур, значення яких вказані біля кожного спектра.

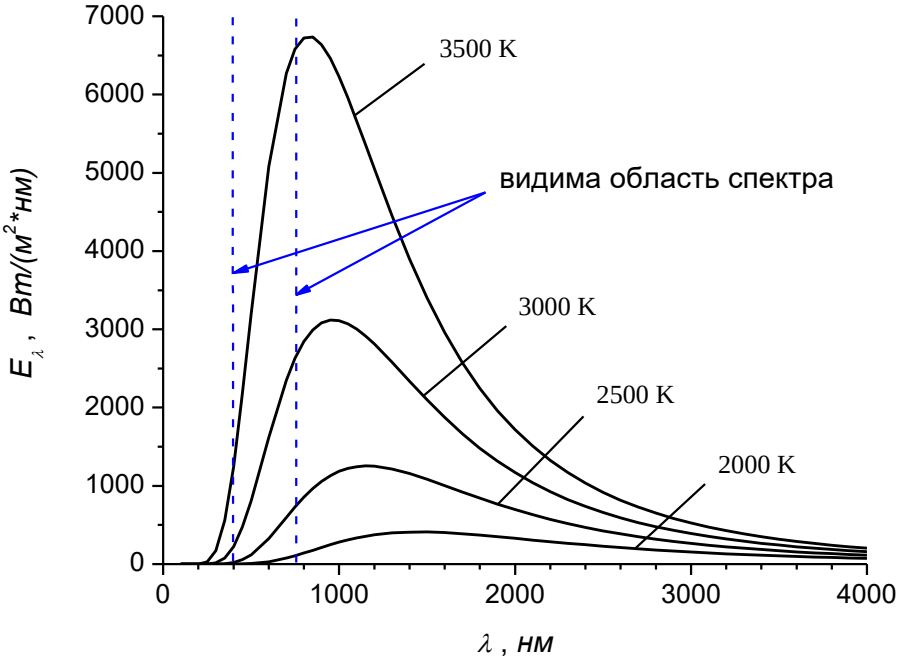


Рис. 2. Спектри випромінювання АЧТ для різних абсолютних температур.

З Рис.2 видно, що при збільшенні температури тіла максимум його випромінювальної здатності зміщується в область менших довжин хвиль. Для АЧТ довжина хвилі, що відповідає максимальній випромінювальній здатності, залежить лише від його температури T і визначається *законом зміщення Віна*:

$$\lambda_{\text{макс}} = \frac{b}{T}, \tag{18}$$

де T – абсолютна температура АЧТ, а b = 2898 *мкм*·К – *стала Віна*.

Кількість енергії, яка випромінюється тілом у вигляді ЕМХ усіх частот за одиницю часу з одиниці площі його поверхні, називається *енергетичною світністю* тіла j. Енергетична світність вимірюється у $Вт/м^2$ (в системі СІ). Енергетична світність АЧТ залежить лише від його температури і визначається *законом Стефана-Больцмана*

$$j_{\text{АЧТ}} = \sigma T^4, \tag{19}$$

де T – абсолютна температура АЧТ, а $\sigma = 5{,}67 \cdot 10^{-8}\ \frac{\text{Вт}}{\text{м}^2\text{К}^4}$ – *стала Стефана-Больцмана*.

Площа під кожною кривою на Рис. 2 дорівнює енергетичній світності тіла при даній температурі T (згідно із законом Стефана-Больцмана (19), енергетична світність пропорційна T^4).

Потік теплового випромінювання W (потужність випромінювання) з усієї поверхні тіла пропорційний площі S цієї поверхні:

$$W = S \cdot j. \tag{20}$$

Потік теплового випромінювання вимірюється у $Вт$.

На Рис. 3 зображено спектр випромінювання Сонця (суцільна лінія). Спектр Сонця близький до спектра АЧТ з температурою 6000 К (пунктирна лінія). На спектрі Сонця видно лінії поглинання його атмосфери. На рисунку вказано розподіл енергії випромінювання Сонця між ультрафіолетовою, видимою та інфрачервоною областями спектра.

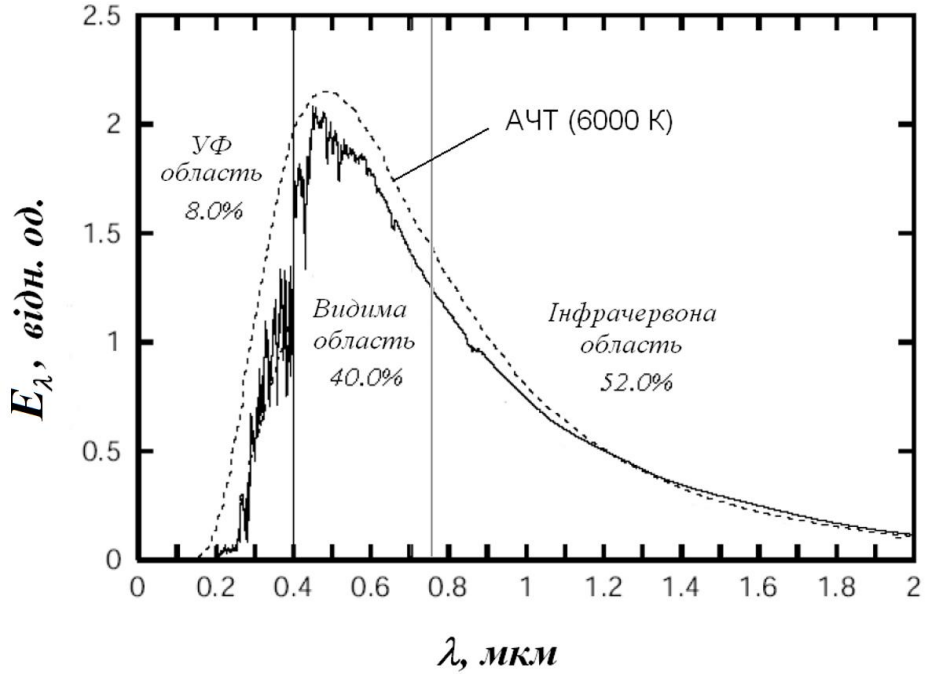


Рис. 3. Порівняння спектра випромінювання Сонця (суцільна лінія) зі спектром випромінювання АЧТ з температурою 6000 К.

Експериментальна частина

Моделлю абсолютно чорного тіла у цій роботі є закрита теплоізольована електрична пічка з маленьким круглим отвором. За допомогою термопари контактним способом вимірюється температура внутрішньої поверхні пічки, а за допомогою термостовпчика, який являє собою батарею хромель-копельових термопар, вимірюється приріст потоку теплового випромінювання (потужності випромінювання), що виходить з отвору пічки. Термо-ЕРС термостовпчика U_{TC} прямо пропорційна приросту потужності теплового випромінювання, що його опромінює:

$$U_{\text{TC}} = k(W(T) - W(T_0)), \qquad (21)$$

де $W(T_0)$, $W(T)$ – потужності теплового випромінювання, що виходить з отвору пічки при температурі навколишнього середовища (кімнатного повітря) T_0 та при температурі внутрішньої поверхні нагрітої пічки T ($T > T_0$), k – коефіцієнт пропорційності, який від температури не залежить.

Вираз (21) справедливий для випадку, коли можна знехтувати втратами потоку теплової енергії пічки через теплопровідність (і подальшу тепловіддачу у навколишнє середовище) матеріалу навколо отвору, з якого виходить випромінювання, та матеріалу корпуса термостовпчика. Якщо ж такими втратами знехтувати не можна (особливо при високих температурах пічки), то тоді маємо записати

$$U_{\text{TC}} = k[W(T) - A \cdot (T - T_0) - W(T_0)], \qquad (22)$$

де A – стала величина, яка визначається коефіцієнтами теплопровідності зазначених вище матеріалів. Вираз (22) показує, що не весь потік теплової енергії, що виходить безпосередньо з пічки, потрапляє на термостовпчик і реєструється ним.

Порядок виконання роботи

1. Встановити термостовпчик на штативі так, щоб втулка на передній панелі термостовпчика увійшла в отвір на передній панелі пічки.
2. Включити вимірювальний пристрій за допомогою вимикача “СЕТЬ” на його задній панелі і дати йому прогрітися протягом 5 хв (при цьому на індикаторах “мВ” та “°С” мають встановитися значення “0,00” та “000” відповідно.
3. Включити електропічку за допомогою вимикача “СЕТЬ” на її передній панелі (при цьому ручка “СКОРОСТЬ НАГРЕВА” на верхній кришці електропічки повинна перебувати в положенні “MIN”).
4. Включити вентилятор охолодження електропічки за допомогою

вимикача “ВЕНТ.” для запобігання перегрівання корпуса пічки.

5. Виміряти температуру кімнатного повітря в лабораторії t_K за допомогою кімнатного термометра.
6. Встановити ручку “СКОРОСТЬ НАГРЕВА” в положення “**3**” (при цьому пічка почне нагріватися). Виміряти залежність величини термо-ЕРС термостовпчика (відображається на індикаторі “мВ”) від *різниці* температур внутрішньої поверхні пічки і кімнатного повітря (відображається на індикаторі “°С”). В процесі вимірювання, значення термо-ЕРС та температури повинні змінюватися з часом досить повільно. Для забезпечення неперервного зростання температури пічки потрібно поступово збільшувати потужність, що підводиться до нагрівального елемента пічки. Для цього ручку “СКОРОСТЬ НАГРЕВА” в процесі вимірювання поступово повертають у бік більших значень.
7. Після досягнення на індикаторі “°С” різниці температур 800°С повернути ручку регулювання швидкості нагрівання пічки в положення “MIN”, виключити вимикач “СЕТЬ” на передній панелі пічки, а вентилятор залишити включеним (!).
8. Виключити вимірювальний пристрій за допомогою вимикача “СЕТЬ” на його задній панелі.
9. Після охолодження пічки протягом 15 хв виключити вентилятор.

Заходи безпеки

Під час виконання лабораторної роботи пічка нагрівається до температури, що на 800°С перевищує температуру кімнатного повітря. Тому, для уникнення опіків, забороняється торкатися її внутрішніх частин до її повного охолодження.

Категорично забороняється нагрівати пічку до різниці температур, більшої за 850°С, та залишати її включеною без нагляду. Неприпустимим є потрапляння на пічку крапель або бризок будь-яких рідин.

Категорично забороняється закривати вентиляційні отвори на кришці корпусу пічки та вимірювального пристрою. Після кожних двох годин роботи пічки потрібно робити перерву на 15-20 хв.

Завдання

1. Виміряти залежність термо-ЕРС термостовпчика U_{TC} від абсолютної температури T внутрішньої поверхні електропічки ($T = 273 + t_к + \Delta t$, де t_K – температура кімнатного повітря, виражена в градусах Цельсія, Δt – різниця температур

внутрішньої поверхні пічки й кімнатного повітря, яка вимірюється термопарою і відображається на індикаторі “°C” вимірювального пристрою). Крок зміни температури при вимірах ЕРС – 10-20*град*.

2. Побудувати графік залежності U_{TC} від x, де $x = T / T_{макс}$ ($T_{макс}$ – максимальна досягнута в експерименті температура пічки).
3. Проаналізувати отриману залежність U_{TC} від x. Апроксимувати її поліномами виду $\boldsymbol{a + bx^2 + cx^4}$ та $\boldsymbol{a + bx + cx^4}$ Пояснити вищу точність апроксимації одним з них.

Література

1. *Шпольский Э. В*. Атомная физика, т.1, М.: «Наука», 1974. (§80-89).
2. *Білий М. У., Охріменко Б. А.* Атомна фізика. Київ: «Знання», 2009. (§1.1,1.2)
3. *Горбань І. С.* Оптика. Київ: «Вища школа», 1979. (Р.11, §1).
4. *Сивухин Д. В.* Общий курс физики. Оптика. М.: «Наука», 1985. (§112-118).
5. *Кондиленко И. И., Коротков П. А.* Введение в атомную спектроскопию. Київ: «Вища школа», 1976. (Гл. IV, § 1).
6. *Брамсон М. А*. Инфракрасное излучение нагретых тел. М.: «Наука», 1964. (Гл.IV, §1,3,4).
7. Оптические измерения (А.М.Борбат, И.С.Горбань, Б.А.Охрименко, П.А.Суббота-Мельник, И.А.Шайкевич, А.А.Шишловский). Київ: «Техніка», 1967.
8. Веб-сторінка Національного Інституту Стандартів і Технологій США (NIST) з чинним значенням сталої Стефана-Больцмана: https://physics.nist.gov/cgi-bin/cuu/Value?sigma

Контрольні запитання

1. Три види процесів теплопередачі в природі. Теплове випромінювання, його властивості.

2. Абсолютно чорне тіло. Приклади тіл, близьких за своїми властивостями до АЧТ. Моделі АЧТ.

4. Випромінювальна здатність тіла. Спектр випромінювання. Зв’язок між різними видами подання спектрів випромінювання (E_ω, E_ν та E_λ). Закон Кірхгофа для теплового випромінювання.

5. Залежність спектра випромінювання АЧТ від його температури. Закон зміщення Віна.

6. Формула Релея-Джинса для спектральної густини енергії рівноважного

електромагнітного випромінювання. Формула Віна. Їх межі застосування та недоліки. Ультрафіолетова катастрофа.

7. Формула Планка для спектральної густини енергії рівноважного електромагнітного випромінювання. Зв'язок спектральної густини енергії випромінювання з випромінювальною здатністю тіла, що перебуває у рівновазі з випромінюванням.

8. Формули Релея-Джинса, Віна та Планка для спектральної густини випромінювання представити у вигляді $Z = X \cdot Y$ і пояснити фізичний зміст співмножників *X* та *Y.*

9. Закон Стефана-Больцмана для АЧТ. Вивести закон Стефана-Больцмана з формули Планка.

11. Поглинальна здатність тіла, її залежність від температури тіла та частоти випромінювання. Теплове випромінювання нечорних тіл. Залежність потужності теплового випромінювання нечорних тіл від температури.

12. Закон Фур'є для теплопровідності. Закон Ньютона для тепловіддачі.

13. Що являє собою термостовпчик? Чому термо-ЕРС термостовпчика прямо пропорційна потоку випромінювання, що на нього падає?

Додаток

Теплове випромінювання нечорних тіл

Для нечорних тіл, якими є всі реальні тіла в природі, випромінювальна здатність E_λ менша за випромінювальну здатність АЧТ і, як наслідок, вони в цілому випромінюють менше енергії, ніж АЧТ з такими ж температурою і площею поверхні. Згідно із законом Кірхгофа для теплового випромінювання, для нечорного тіла можна записати

$$E_\lambda = A_\lambda E_\lambda^{\text{АЧТ}},$$

де A_λ – це поглинальна здатність тіла, яка залежить від довжини хвилі випромінювання λ та температури тіла T, а також від матеріалу тіла та стану його поверхні. Для всіх реальних тіл $0 < A_\lambda < 1$.

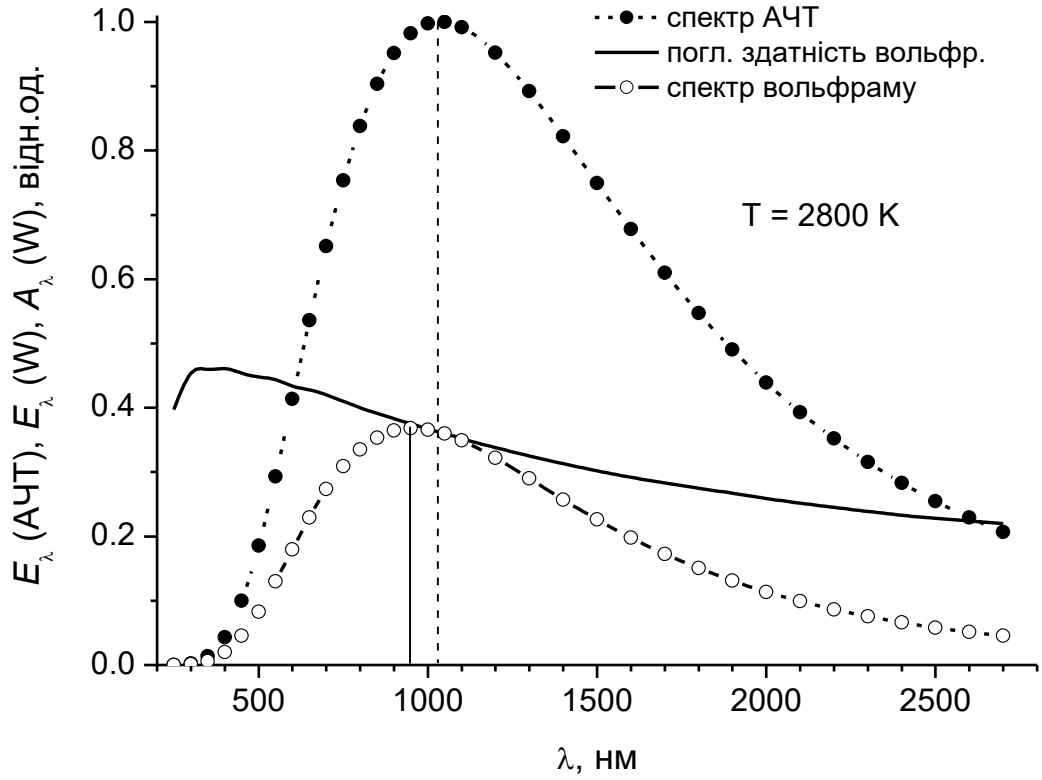


Рис. Д1. Спектри випромінювання АЧТ і вольфраму при Т = 2800 К. Поглинальна здатність вольфраму A_λ при тій же температурі.

На Рис.Д1 наведено порівняння спектрів випромінювання АЧТ та вольфраму (тугоплавкого металу, з якого виготовляють нитки в лампах розжарювання – теплових джерел світла) при одній і тій же температурі 2800 К. На рисунку також наведено залежність поглинальної здатності вольфраму A_λ від довжини хвилі для вказаної температури. З Рис.Д1 видно, що вольфрам випромінює менше енергії, ніж АЧТ з такою ж температурою, а також що максимум спектра випромінювання вольфраму зміщений в область менших довжин хвиль порівняно з

максимумом спектра АЧТ.

Для нечорних тіл закон Стефана-Больцмана може бути записаний у вигляді

$$j = \alpha(T) \cdot \sigma T^4,$$

де $\alpha(T)$ – *інтегральна поглинальна здатність* нечорного тіла (безрозмірна величина, яка для більшості речовин монотонно зростає з температурою). Відповідну залежність для вольфраму зображено на Рис.Д2.

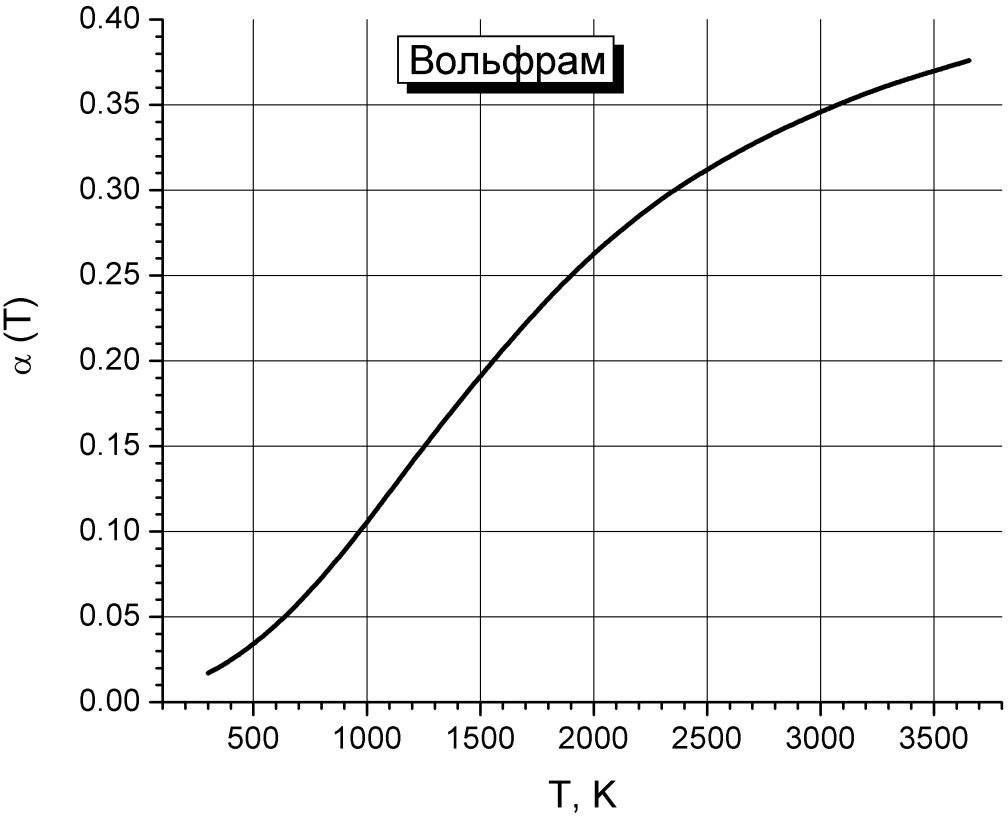


Рис. Д2. Залежність інтегральної поглинальної здатності вольфраму від температури [Брамсон, 1964].

Лабораторна робота 3.
ВИЗНАЧЕННЯ ПЕРШИХ ПОТЕНЦІАЛІВ ЗБУДЖЕННЯ АТОМА. ДОСЛІДИ ФРАНКА–ГЕРЦА

***Мета роботи*:** Методом Франка–Герца визначити перший потенціал збудження атомів досліджуваного газу та ідентифікувати цей газ.

***Прилади та обладнання*:** Газонаповнена лампа з невідомим газом, прилад ФПК-02 (система живлення та реєстрації), осцилограф.

Загальні відомості.

Як відомо, атом складається з важкого позитивно зарядженого ядра і електронів, які оточують його. За класичною механікою, така система знаходитиметься у рівновазі лише за умови, якщо електрони обертатимуться навколо ядра по якихось орбітах. Однак, із точки зору класичної електродинаміки, такий атом був би нестійкий, тому що при русі з прискоренням електрони повинні були б випромінювати енергію у вигляді електромагнітних хвиль і, отже, поступово падати на ядро, причому, як показують розрахунки, досить швидко (пікосекунди). Разом з тим і частота обертання при цих умовах повинна була б неперервно змінюватися, і в результаті мав би спостерігатися суцільний спектр замість різких спектральних ліній. Той факт, що цього насправді не спостерігається й атоми випромінюють чіткі спектральні лінії, вказує на їхню стійкість, що суперечить класичній електродинаміці.

Згідно теорії Бора, при переході з одного стаціонарного стану E_m в інший E_n атоми випромінюють або поглинають світло тільки строго певної частоти, тобто монохроматичне (умова частот Бора):

$$\hbar\omega_{mn} = E_\text{m} - E_\text{n} \qquad (1)$$

В теорії Бора сформульовано певні постулати, і обидва вони суперечать вимогам класичної електродинаміки, тому що за першим постулатом атоми не випромінюють, незважаючи на те, що електрони, які утворюють їх, здійснюють прискорений рух (наприклад, обертання по замкнених орбітах), згідно другого, у формі (1), виходить, що випромінені частоти не мають нічого спільного з частотами періодичного руху електронів.

Проте квантові постулати Бора знайшли безпосереднє експериментальне підтвердження в дослідах Дж. Франка й Ґ. Герца (1913). Ідея дослідів полягає в наступному: атоми або молекули

розрідженого газу обстрілюються повільними електронами; при цьому досліджується розподіл швидкостей електронів до і після зіткнень. Якщо зіткнення відбуваються пружно, то розподіл швидкостей у результаті зіткнень не змінюється, і навпаки, при непружних зіткненнях частина електронів втрачає свою енергію, віддаючиїї атомам, з якими вони зазнали зіткнення, і розподіл швидкостей змінюється.

В результаті дослідів Франка-Герца виявилося, що:

- При швидкостях електронів, які є меншими за деяку критичну швидкість, зіткнення відбувається цілком пружно, тобто електрон не передає атому своєї енергії, а відбивається від нього, змінюючи лише напрямок своєї швидкості.
- При певних критичних швидкостях електронів удар відбувається непружно, тобто електрон втрачає свою енергію й передає її атому, який при цьому переходить в інший стаціонарний стан – збуджений, - який характеризується більшою енергією.

Таким чином, атом або взагалі не сприймає енергію (пружний удар), або сприймає її тільки в кількостях, рівних різниці енергій у двох стаціонарних станах.

Для доказу існування непружних зіткнень Франком і Герцем була використана установка, схема якої показана на Рис.1.

У трубці, заповненій парами ртуті під відносно високим тиском (близько 1 мм рт.ст.), було чотири електроди: термокатод, прискорювальний електрод (анод), сітка та колектор. Електрони, що вилітали з термокатода внаслідок термоелектронної емісії, прискорювалися негативною різницею потенціалів між катодом та анодом. Далі електрони проходили через діафрагму в аноді і рухалися в проміжку між анодом та сіткою.

Різниця потенціалів між анодом та сіткою дорівнювала нулю, тому у цьому проміжку електрони могли змінювати свою кінетичну енергію лише завдяки зіткненням з атомами ртуті; електрони зазнавали численних зіткнень і зрештою попадали на колектор. Між сіткою та колектором підтримувалася деяка мала різниця потенціалів ~0.5 В, яка затримувала електрони з енергією менше 0.5 еВ, – тобто призначення сітки полягало в тому, щоб перехоплювати електрони, що майже повністю втратили свою енергію внаслідок непружних зіткнень. За допомогою гальванометра G, з'єднаного з амперметром, визначалася вольт-амперна характеристика (ВАХ) – залежність сили струму I_a в колі колектора від прискорюючої напруги $U_{приск}$.

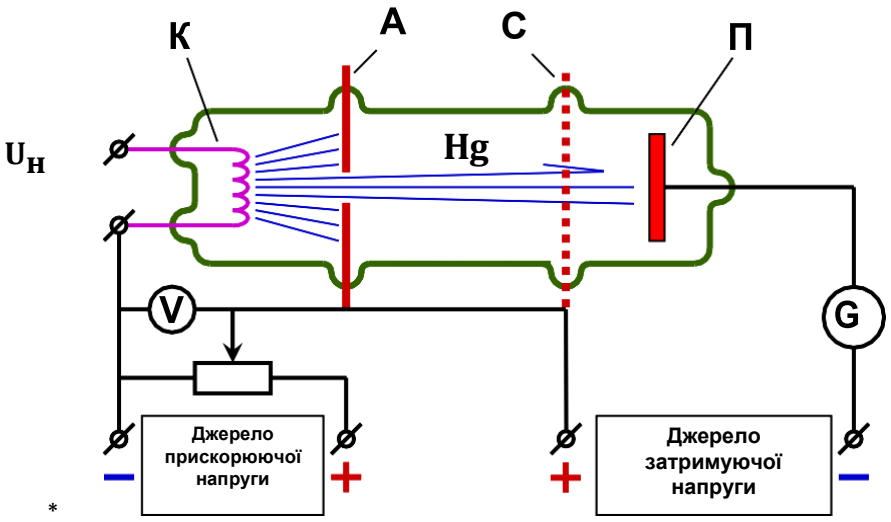


Рис.1. Схема досліду Франка-Герца.
К – термокатод, А – прискорюючий електрод (анод), С – сітка,
П – пластинка - колектор електронів, G - гальванометр

При збільшенні прискорювального потенціалу (напруги) від нуля струм спочатку зростав, причому крива струму мала звичайний вигляд вольтамперних характеристик термоелектронних приладів. Але при різниці потенціалів близько 4.1 В струм різко падав, а потім знову зростав до потенціалу 9.0 В, при якому знову спостерігалося різке падіння струму і нове його зростання до потенціалу 13.9 В. Таким чином, уся крива (рис.2) являє собою ряд чітких максимумів, розташованих на відстані 4.9 В один від одного. Той факт, що відстань між двома сусідніми максимумами завжди становила (з точністюдо 0.1 В) 4.9 В, а перший максимум виникає при потенціалі близько 4.1 В, пояснюється тим, що до накладеного потенціалу додається контактна різниця потенціалів, за рахунок якої вся крива зміщується ліворуч, не змінюючи відстані між максимумами.

Наявність максимумів на кривій залежності сили струму від прискорюючого потенціалу пояснюється так. Доти, поки енергія електрона не досягне 4.9 В, він зазнає з атомами ртуті пружні зіткнення, і струм зростає зі збільшенням потенціалу за звичайним законом. При потенціалі 4.9 В удар стає непружним, електрон віддає при зіткненні атому ртуті всю свою енергію. Ці електрони не потраплять на колектор, оскільки будуть затримані сіткою, зарядженою до +0.5 В, і струм колектора різко впаде. Якщо енергія електронів помітно перебільшує $7.84 \cdot 10^{-12}$ ерг (прискорюючий потенціал 4.9 В), то такі електрони, втративши частину своєї енергії при непружному зіткненні, зберігають достатній запас енергії, а тому, незважаючи на наявність позитивно

зарядженої сітки, досягають колектора – струм знову починає зростати. Якщо прискорюючий потенціал досить великий (більший за 9.8 В), то на своєму шляху електрон може мати два або більше непружних співударів. Саме в цьому й полягає причина періодичного повторення максимумів.

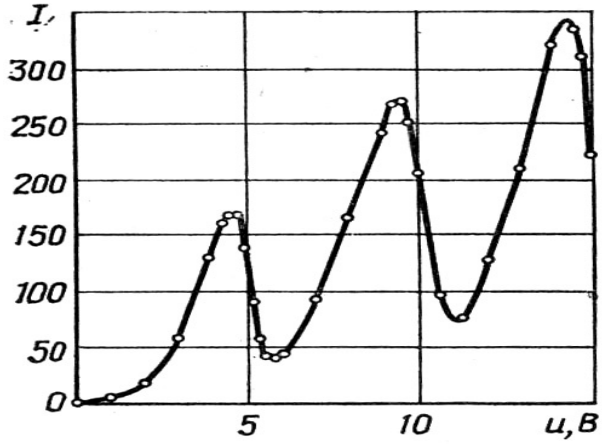


Рис.2. Залежність сили струму від прискорюючої напруги (для Hg).

Таким чином, енергія 4.9 еВ має особливе значення для атомів ртуті. Меншу енергію вони сприйняти не можуть, тому що при меншій енергії електронів, що їх бомбардують, удар відбувається цілком пружно; енергію 4.9 еВ вони вже сприймають повністю. Але це й означає згідно з першим постулатом Бора, що атом ртуті може мати не будь-які запаси енергії, а тільки деякі конкретні. Якщо E_1 – запас енергії "незбудженого" атома ртуті, то наступне можливе значення енергії атома буде E_1+4.9 еВ. Прискорювальний потенціал 4.9 В називається "*першим критичним потенціалом*" або "*резонансним потенціалом*" ртуті. Такі ж резонансні потенціали знайдені й для інших атомів. Наприклад, резонансний потенціал калію рівний 1.63 В, натрію – 2.12 В, гелію – 21.0 В і т. д.

Зрозуміло, що, крім енергії, що відповідає першому критичному потенціалу, атоми можуть мати й інші, більш високі ступені енергії збудження. Ці більш високі ступені збудження можуть бути також знайдені за допомогою методу електронних зіткнень. Для визначення вищих рівнів енергії необхідно обрати такі умови досліду, щоб тиск газу був якомога менше. Це суттєво тому, що при високому тискові число зіткнень електрона з атомами газу настільки велике, що електрону досить набрати енергію, яка є рівною або трохи переважаючою перший критичний потенціал, щоб імовірність її передачі атому зробилася досить значною. При досить низькому тискові й досить високому прискорювальному потенціалі відкривається можливість збудження й до більш високих стаціонарних станів.

Однак безпосередньо отримані з досліду значення критичних потенціалів ще не дають справжніх значень рівнів енергії, тому що

можливість двократної або взагалі багатократної віддачі енергії все ще не виключається. Це зрозуміло з наступного прикладу. За безпосередніми спостереженнями в парах ртуті маємо наступні значення критичних потенціалів: 4.9; 9.8; 11.2; 13.5; 14.7; 16.0; 17.6; 19.3; 20.2; 21.2 В. У дійсності ж усі ці потенціали є комбінаціями двох основних: a=4.9 В і b=6.7 В, причому друге значення окремо зовсім не спостерігається. Насправді, легко бачити, що 9.8=2a; 11.2≈a+b; 13.5=2b; 17.6≈a+2b; 21.2=3a+b і т.д. Таким чином, інтерпретація максимумів, що утворюються, є далеко не простою.

Значно наочніше вищі рівні енергії можна визначити за допомогою методу, запропонованого Юзом, Рожанським і Мак-Мілланом. Ідея досліду полягає в наступному: строго однорідний пучок електронів з енергією, що перебільшує найбільш високий рівень збудження досліджуваних атомів, пускається у розріджений газ. При непружних зіткненнях різні електрони втрачають частину своєї енергії, що відповідає можливим рівням збудження атомів. Оскільки газ є сильно розрідженим, то ймовірність повторних зіткнень є досить малою. Якщо тепер розкласти у спектр швидкостей пучок електронів, що зазнали зіткнення, то цей спектр одразу дасть усі значення втрат енергії, а разом з тим і всі можливі рівні енергії.

Описані методи дозволяють знаходити *різниці* значень енергії в різних стаціонарних станах. Наприклад, ми можемо сказати, що для атома ртуті різниця E_2–E_1 дорівнює 4.9 еВ. Однак значення енергій E_1, E_2, E_3, ..., E_n цими методами не можуть бути знайденими. Для того, щоб знайти ці значення, необхідно визначити, яку енергію треба затратити, щоб від атома, який перебуває в певному енергетичному стані, повністю відірвати електрон. Тобто задача про знаходження абсолютних значень енергій E_1, E_2, E_3, ..., E_n є задачею про визначення *потенціалів іонізації* в різних енергетичних станах. Існує досить багато різних методів визначення іонізаційних потенціалів (див.літ.).

Слід зауважити, що при зіткненні електронів з атомами багатьох речовин можуть утворюватися від'ємні іони, якщо речовина має електронну спорідненість. Такі речовини непридатні для досліду. Тому для досліду беруть речовини, атоми яких не здатні з'єднуватись з електронами при даних швидкостях. Це інертні гази, водень і пари металів (найзручніше – ртуть).

2. Експериментальна установка. Хід роботи. Завдання.

Прилад ФПК-02 для визначення резонансних потенціалів.

Прилад призначений для ознайомлення із загальними закономірностями процесів збудження атомів електронним ударом та вимірювання перших потенціалів збудження. Прилад забезпечує можливість проводити вивчення залежності анодного струму газонаповненої лампи (тріода) від напруги катод-сітка з максимумами і мінімумами, характерними для досліду Франка-Герца на екрані осцилографа.

***Принцип роботи*.** Принцип роботи приладу полягає в отриманні на екрані осцилографа залежності анодного струму I_a газонаповнювальної лампи (тріода з катодом, який підігрівається) від напруги «катод-сітка» $U_{кс}$ при фіксованій напрузі «анод-сітка» з наступним вимірюванням напруги в характерних точках.

До складу приладу входить *об'єкт дослідження* і *пристрій вимірювання.* Об'єкт дослідження встановлюється на штативі і з'єднується з вимірювальним пристроєм за допомогою кабелю. Об'єкт дослідження виготовлено на основі манометричної лампи *ПМИ-2*, наповненої інертним газом.

Прилад працює наступним чином. З генератора пилкоподібної напруги на лампу подаються імпульси амплітудою близько 40 В. Крім того на об'єкт дослідження подається регульована напруга розжарювання $U_н$ і напруга запирання $U_{зап}$, які забезпечують нормальний режим роботи лампи. Вимірювальним пристроєм анодний струм лампи I_a перетворюється в напругу, пропорційну до струму і подається на вхід осцилографа. На екрані осцилографа відображається залежність струму I_a від напруги $U_{кс}$. Вимірювальний пристрій при цьому формує на екрані осцилографа маркер, який можна переміщувати на екрані осцилографа за допомогою ручок «ГРУБО» і «ТОЧНО». При наведені маркера на потрібні точки графіка, значення опорної напруги збігається із значенням миттєвої пилкоподібної напруги, що дозволяє виміряти напругу $U_{кс}$ за допомогою цифрового вимірювача напруги.

Примітка: Декілька причин призводять до того, що ВАХ не є ідеальною (тобто не збігається з теоретичною кривою):

- Розкид електронів по енергіям із-за просторового заряду в прикатодній області, високої температури термоемісійного катоду і, у випадку катода прямого розжарювання, падіння

потенціалу на ньому;

- Залежність перерізу збудження від енергії електрона. При енергіях електрона, близьких до енергії збудження атома існує висока ймовірність тимчасового захоплення електрона атомом зі створенням негативного іона. Після цього буде відбуватися автовідривання, і атом повертається в основний стан.
- Вклад у подолання гальмівного поля вносить тільки повздовжня складова швидкості електронів, а не повна швидкість, яка змінюється при пружних зіткненнях;
- Наявність контактної різниці потенціалів між катодом і анодом, і катодом і сіткою, яка виникає з-за того, що робота виходу електрона з катоду менша від роботи виходу з аноду;
- Просторовий потенціал, який створюється самими електронами. Його вплив буде максимальний в області найбільшої густини електронів – поблизу катода і буде проявлятися в першу чергу на першому максимумі.

Порядок виконання роботи

- Встановити на осцилографі розгортку 5 мс/под; вибрати підсилення в межах 0.5-2 В/см.
- Ввімкнути осцилограф і за допомогою ручок «↔», «↕», встановити розгортку променя в центрі екрану.
- Ввімкнути вимірювальний пристрій. При цьому повинен засвітитися об’єкт дослідження (лампа). Для встановлення робочого режиму лампи, її потрібно витримати включеною *не менше 10 хв.*
- Відрегулювати синхронізацію осцилографа для отримання стійкої картинки на екрані. У випадку нечіткості осцилограми відрегулюйте її за допомогою ручки НАКАЛ вимірювального приладу.
- За допомогою ручок ГРУБО і ТОЧНО рухати маркер по осцилограмі, поєднуючи лівий край маркера з характерними точками (мінімуми або максимуми) та проводити виміри $U_{кс}$ по індикатору вимірювального приладу.
- Після закінчення роботи відключити прилад від мережі. Режим роботи приладу вимагає наступне: – *через кожні 2 години роботи робиться перерва на 10-15 хв.*

Завдання.

Визначити перший потенціал збудження атомів газу, що міститься в лампі та ідентифікувати цей газ порівнянням отриманих результатів з літературними даними (див. таблицю).

Таблиця. Перші потенціали збудження деяких газів.

Газ	H_2	He	Ne	Ar	Kr	Xe	Hg	Cs
$U_{зб}$,В	11.2	20.9	16.6	11.6	10.0	8.5	4.9	1.4

Примітка: 1 еВ = $1{,}602\times10^{-19}$ Дж = $1{,}602\times10^{-12}$ ерг.

Література.

1. *Шпольский Э. В*. Атомная физика, т.1, М.: «Наука», 1974. (§90-96).
2. *Находкін М. Г. Харченко Н. П.* Атомна фізика, Київ: ВПЦ «Київський університет», 2012. (§2.6, 3.8)
3. *Білий М. У.* Атомна фізика, Київ.: «Вища школа», 1973. (р.3, §2).

Контрольні запитання

1. Схема та ідея дослідів Франка та Герца. Що вони показали?
2. Постулати Бора.
3. Перший потенціал збудження. Вищі потенціали. Чому вони відрізняються чисельно? Потенціал іонізації.
4. Суть і мета вдосконалення експериментальної методики, запропонованого Герцем.
5. Реалізація збуджень атома на вищі рівні. Вигляд вольт-амперної характеристики.
6. Що таке контактна різниця потенціалів? На що вона впливає в досліді Франка та Герца?
7. Порівняти експериментальну криву (залежність сили струму від прискорюю чого потенціалу) з теоретичною. Пояснити відмінності.

Лабораторна робота 4.

СПЕКТР ВИПРОМІНЮВАННЯ АТОМАРНОГО ВОДНЮ

***Мета роботи**:* Дослідити видимий спектр атомарного водню, визначити довжини хвиль перших трьох ліній серії Бальмера та величину сталої Рідберга.

Обладнання: Лампа воднева ДВС-25 з системою живлення, лампа ртутна ДРТ, спектрограф КСА-1, касета для плівки, світлочутлива плівка.

Теоретичні відомості

1. Спектром випромінювання (поглинання, відбивання, пропускання) називається повна сукупність монохроматичних хвиль з урахуванням їх інтенсивностей, що випромінюються (поглинаються, відбиваються, пропускаються) речовиною. Описуватись спектри можуть як графічно, так і аналітично чи таблично. Зазвичай, це залежність інтенсивності або пов'язаної з нею величини від частоти або довжини хвилі чи хвильового числа.

Спектри випромінювання, як і спектри поглинання, поділяються на три типи: лінійчаті, смугасті та суцільні (неперервні). Лінійчаті спектри складаються окремих чітких ліній, які відповідають дискретним значенням λ, переважно такі спектри властиві атомарним газам. Для молекулярних газів характерними є смугасті спектри, в яких їх монохроматичні складові утворюють групи (смуги), що складаються з багатьох тісно розташованих ліній. Суцільні спектри належать рідинам та твердим тілам.

В основі спектрального аналізу (методики визначення хімічного складу речовини) лежить той факт, що кожен хімічний елемент характеризується притаманним лише йому лінійчатим спектром.

Експериментально встановлено, що розміщення ліній у спектрі випромінювання атомарного водню підлягає певній закономірності (Рис.1). Ці лінії можна об'єднати в серії, які спостерігаються в ультрафіолетовій (серія Лаймана), видимій (серія Бальмера), близькій інфрачервоній (серія Пашена) та в далекій інфрачервоній (серій Бреккета, Пфунда та ін.) областях. В межах однієї серії лінії нумеруються літерами грецького алфавіту.

В 1885р. Бальмер встановив, що довжини хвиль чотирьох ліній випромінювання ($H_\alpha, H_\beta, H_\gamma, H_\delta$) видимого діапазону можна описати формулою:

$$\lambda = B\frac{n^2}{n^2-4}, \qquad (1)$$

де n = 3,4,5,6. При підстановці в формулу Бальмера наступних цілих чисел $n = 7,8\ldots$ можна отримати значення довжин хвиль ліній атомарного водню, що лежать в ультрафіолетовому діапазоні. Зазвичай формулою Бальмера користуються в наступному вигляді:

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{1}{B}\frac{n^2-4}{n^2} = \frac{4}{B}\left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2}\right) = R\left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2}\right), \qquad (2)$$

де $\tilde{\nu}$ -хвильове число (см$^{-1}$) спектральної лінії. Це обернена довжина хвилі або ж число хвиль, що вкладаються в 1 см. R — стала Рідберга.

Зі збільшенням n зменшуватиметься різниця хвильових чисел сусідніх ліній (лінії розташовуватимуться густіше), а при значенні $n \to \infty$ отримаємо граничне значення серії Бальмера $\tilde{\nu} = R / 2^2$. Спостереження також показують, що зі збільшенням n інтенсивність ліній зменшується.

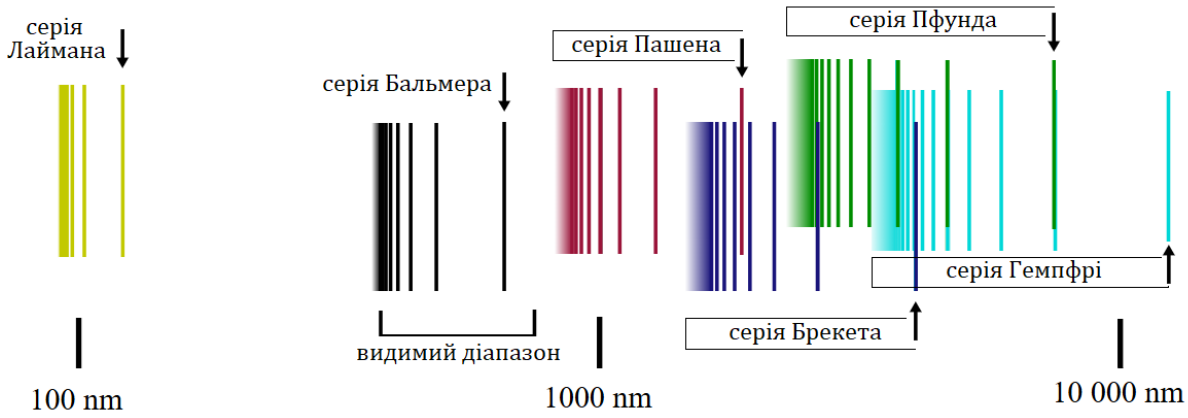


Рис.1. Спектр випромінювання атома водню. Стрілками позначено розташування перших ліній (α-ліній) в кожній з серій.

Хвильові числа спектральних ліній атомарного водню, що належать до інших серій визначаються простим співвідношенням, яке називають узагальненою формулою Бальмера:

$$\tilde{\nu}_{m,n} = R\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right) = \frac{R}{m^2} - \frac{R}{n^2}. \qquad (3)$$

Тут m та n- цілі числа, причому: для серії Лаймана - m=1, n=2,3,4…, для серії Бальмера - m=2, n=3,4,5…, для серії Пашена - m=3, n=4,5,6…, і т.д.

Таким чином хвильове число спектральної лінії можна представити як різницю функцій цілих чисел $\tilde{\nu}_{m,n} = T(m) - T(n)$. Такі функції називаються спектральними термами, і знаючи систему термів певного атому, можна отримати хвильове число будь-якої спектральної лінії цього атому. Суть комбінаційного принципу полягає в тому, що *різниця*

хвильових чисел двох спектральних ліній, що належать до однієї серії, визначає хвильове число спектральної лінії іншої серії цього ж атому. Слід відмітити також, що для всіх серій однаковими будуть різниці

$$\Delta\tilde{\nu}_n = \tilde{\nu}_{m,n} - \frac{R}{m^2} = -\frac{R}{n^2} \tag{4}$$

2. Фізичний зміст комбінаційного принципу та поняття термів добре розкриває теорія Бора. Модель атома, яка не тільки пояснила серійні закономірності, але й дозволила незалежно визначати сталу Рідберга, була побудована Нільсом Бором (1913р.) Згідно його припущення (другий постулат Бора) частота лінії в спектрі випромінювання (чи поглинання) визначається різницею енергій електрона в початковому та кінцевому станах:

$$2\pi\hbar\nu = E_n - E_m, \tag{5}$$

де $\hbar = h\ /\ 2\pi$ - стала Планка.

Хвильове число спектральної лінії (різниця хвильових чисел, що відповідають початковому та кінцевому станам):

$$\tilde{\nu}_{m,n} = \frac{\nu_{m,n}}{c} = \frac{E_n}{2\pi\hbar c} - \frac{E_m}{2\pi\hbar c} = T(m) - T(n) \tag{6}$$

Таким чином

$$T(n) = -\frac{E_n}{2\pi\hbar c} \tag{7}$$

Тоді енергія стаціонарного стану наступним чином визначатиметься через сталу Рідберга:

$$E_n = -2\pi R\hbar c/n^2 \tag{8}$$

Бор також показав, що стала Рідберга виражається через інші універсальні константи. Врахування умови квантування моменту імпульсу електрона $L = n\hbar$ (n – цілі числа) в планетарній моделі воднеподібного атома (взаємодія між ядром та електроном - за законом Кулона) дозволяє визначити радіуси орбіт a_n та енергії E_n стаціонарних станів електрона. Для атома водню орбіти будуть коловими.

$$a_n = n^2\frac{\hbar^2}{kme^2} \qquad E_n = -\frac{k^2me^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}, \tag{9}$$

де m – маса, e - заряд електрона, k – коефіцієнт пропорційності, залежний від вибору системи одиниць. $k = 1\ /\ 4\pi\varepsilon_0$ в системі СІ, або ж $k = 1$ в системі СГС.

Для сталої Рідберга:

$$R = \left(\frac{me^4}{4\pi\hbar^3 c}\right)_{\text{СГС}} = \left(\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c}\right)_{\text{СІ}}. \quad (10)$$

Значення сталої, виражене через світові константи з достатньо високою точністю співпадає зі значенням сталої Рідберга, розрахованим за допомогою узагальненої формули Бальмера при використанні значень хвильових чисел, отриманих зі спектрів атомарного водню.

Ввівши позначення $R = R_y / hc$, спектр енергій електрона в атомі водню можна записати в більш простому вигляді:

$$E_n = -R_y/n^2 \quad (11)$$

Такий же спектр енергій електрона в атомі водню ($E < 0$, стани зв'язані) можна отримати з рівняння Шредінгера для стаціонарних станів

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\Delta + U\right)\psi = E\psi, \quad (12)$$

де $U = -\frac{ke^2}{r}$ – потенціальна енергія електрона в атомі водню.

Для терма $T(n)$, як функції стану (залежить від енергії чи хвильового числа, що відповідає певному стану):

$$T(n) = \frac{R_y}{2\pi\hbar c n^2} = \frac{R_y}{hcn^2} = \frac{R}{n^2}. \quad (13)$$

Розмірність $T(n)$ - обернена довжина. Тобто терм (додатня величина, що є функцією n, головного квантового числа) - це хвильове число, яке відповідає певному стаціонарному стану з енергією E_n. Таким чином хвильове число будь-якої спектральної лінії якраз і буде різницею двох відповідних термів, що відповідають стаціонарним станам, між якими відбувається перехід (див. рис.2).

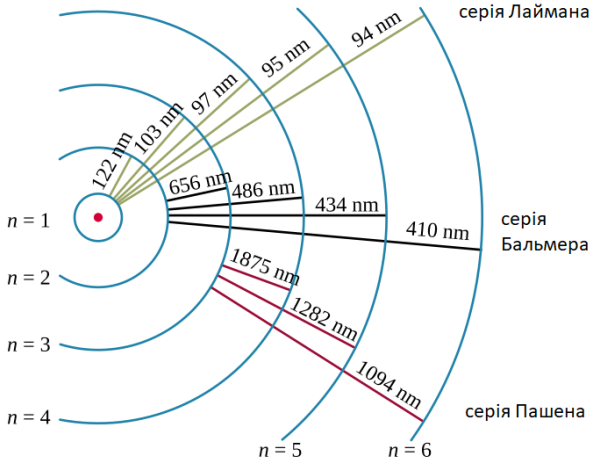


Рис.2а. Електронні переходи в атомі водню

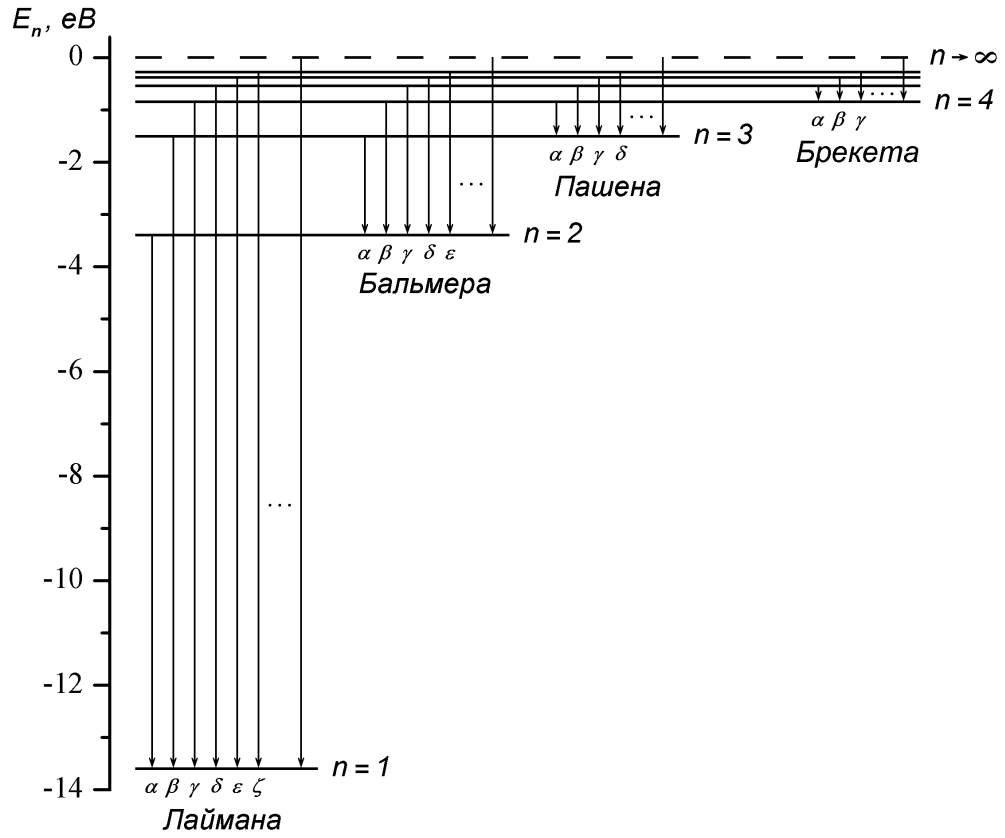


Рис.2б. Енергетична діаграма електронних переходів в атомі водню

Схожі серійні залежності спостерігаються також для інших воднеподібних систем, зокрема в оптичних спектрах екситонів (зв'язані стани електрона та дірки) та домішкових центрів (донорів чи акцепторів) в напівпровідниках.

3. Теорія Бора передбачає існування лише кругових траєкторій електрона, тоді як в моделі атома Бора-Зоммерфельда, стаціонарні орбіти є еліптичними. Умови квантування, сформульовані Зоммерфельдом, задають два квантові числа: радіальне n_r та кутове n_φ, які визначають величини радіального та кутового узагальнених імпульсів. Ці квантові числа наступним чином задають параметри траєкторії:

$$b_{n,n_\varphi} = \frac{n_\varphi}{n_r+n_\varphi} a_n = \frac{n_\varphi}{n} a_n \qquad (13)$$

де b та a – мала та велика півосі, $n = n_r + n_\varphi = 1,2,3, \ldots$ – головне квантове число, $n_\varphi = 1,2,3, \ldots$ – орбітальне квантове число, яке набуває значень $1 \leq n_\varphi \leq n$.

Величини великих півосей співпадають з відповідними значеннями радіусів колових орбіт і, як і енергія, визначаються лише одним (головним) квантовим числом n, тоді як величини малих півосей визначаються обома квантовими числами. Таким чином, без врахування спіну, стаціонарні стани воднеподібного атома виявляються n-кратно

виродженими. Іншими словами, при певному стаціонарному значенні енергії атома E_n існує n станів руху (орбіти з різними n_φ) електрона. Енергетично розділити вироджені стани можливо за допомогою зовнішніх полів, зокрема магнітного поля (ефект Зеємана).

4. Такий же спектр енергій $E_n = -R_y/n^2$ електрона в атомі водню ($E < 0$, стани зв'язані) можна отримати зі стаціонарного рівняння Шредінгера

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U\right)\psi = E\psi, \tag{14}$$

де $U = -\frac{ke^2}{r}$ – потенціальна енергія (кулонівська) електрона в атомі водню. Власні значення оператора Гамільтона $\hat{H}$ – E_n визначають значення енергії стаціонарних станів електрона в атомі водню; індекс n тут – значення головного квантового числа n, яке є власним числом оператора енергії (оператора Гамільтона), а власні функції оператора $\hat{H}$ – $\psi(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ - визначають просторовий розподіл електронної густини.

Задача про атом водню – це задача про рух в полі центральних сил; задача характеризується сферичною симетрією. В сферичних координатах рівняння Шредінгера (14) можна розділити на дві частина – радіальну та кутову.

Кутова частина гамільтоніана – оператор Лежандра – є оператором кутового моменту. Розв'язками кутової частини є сферичні функції $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$, в склад яких входять поліноми Лежандра. Власними числами оператора Лежандра є два квантових числа – орбітальне l та магнітне m. Квантове число l визначає квадрат моменту кількості руху електрона в полі центральних сил (величину орбітального моменту), а квантове число m – задає проекцію моменту L_z кількості руху електрона на вісь OZ, тобто число m - власне число оператора проекцію моменту імпульсу L_z. Квантове число $m = 0, \pm 1, \pm 2 \ldots \pm l$ називається магнітним квантовим числом, оскільки значення L_z дозволяє через гіромагнітне співвідношення знайти проекцію магнітного моменту. Крім того, виродження по квантовому числу m знімається повністю лише в магнітному полі.

Радіальна частина хвильової функції залежить від квантових чисел n та l. Межі зміни головного квантового числа n – від 1 до ∞, квантового числа l – від 0 до $n-1$. Воно відповідає числу n_φ в моделі Бора-Зоммерфельда, але змінюється в дещо інших межах. Наявність n-кратного

виродження по l станів з енергією E_n означає існування станів руху з різними l, тобто з різними значеннями моменту кількості руху

$$L = \hbar\sqrt{l(l+1)}.$$

Оскільки m набуває $2l+1$ дискретних значень, матимемо наступну кількість хвильових функцій $\psi(r,\theta,\varphi)$, що відповідатимуть одному й тому ж значенню енергії E_n:

$$\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = n^2 \qquad (15)$$

З урахуванням спіну (власного моменту імпульсу електрона) для заданого значенні n має місце $2n^2$-кратне виродження.

5. Спін - власний момент імпульсу електрона – природним чином не фігурує ні в теорії Бора, ні у Шредінгера. Рівняння Шредінгера, зокрема, не є релятивістським і не узгоджується з теорією відносності. Задача про рух електрона в центральному полі коректно розв'язується за допомогою рівняння Дірака, в якому коректно враховуються релятивістські ефекти, наявність власного моменту – спіна – і взаємодії його з орбітальним моментом, тобто спін-орбітальна взаємодія. Розв'язок рівняння Дірака дає наступний вираз для енергії електрона у водневоподібному атомі:

$$E_n = \frac{RZ^2}{n^2} - \frac{\alpha RZ^4}{n^3}\left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n}\right). \qquad (16)$$

Тут α – *стала тонкої структури* (≈1/137), R - стала Рідберга, Z – заряд ядра водневоподібного атома, j – число повного моменту імпульса електрона ($j = l \pm s$, тобто $j = l \pm 1/2$), n – головне квантове число.

Можна бачити, що другий доданок малий у порівнянні з першим, тобто, по суті, це є поправка до виразу для енергії електрона, отриманого в теоріях Бора та Шредінгера. Але ця поправка є принциповою, оскільки вказує на наявність тонкої структури енергетичного рівня завдяки залежності енергії не лише від числа n – головного, а й від числа j. Тобто, енергетичний рівень, який відповідає стану з певним головним квантовим числом n є складним.

Прийнято квантові числа окремих електронів позначати малими літерами, а атомів – в загальному випадку систем з багатьма електронами – великими. Оскільки у водню і воднеподібних атомів є лише один електрон, то квантові числа окремого електрона і всієї системи – тобто атома – співпадають.

Терми атома позначаються так: $n^{\varkappa}L_j$, де $\varkappa = 2s+1$ – мультиплетність, L – літера, яка відповідає певному значенню числа орбітального моменту (S: $L=0$, P: $L=1$, D: $L=2$, ..), j – число повного

моменту.

Для водню, наприклад: $n = 2$. Тоді $l = 0{,}1$, тобто це S- та P-стани; $s = 1/2$ завжди, бо це система з одним електроном; відповідно, $\varkappa = 2$, теж завжди для водневоподібних систем; $j = l \pm 1/2$, тобто $^1/_2$ та $^3/_2$. Отже, стани атома водню з $n = 2$ такі: $2^2S_{1/2}$, $2^2P_{1/2}$, $2^2P_{3/2}$. Причому енергія термів $2^2S_{1/2}$, $2^2P_{1/2}$ однакова і відрізняється від енергії терму $2^2P_{3/2}$, оскільки енергія залежить від чисел n та j, але не залежить від l, згідно (16). Для порівняння: в теорії Бора $n = 2$ – це один енергетичний рівень, за Шредінгером – теж один енергетичний рівень, але три стани квантової системи, тобто, як кажуть, має місце *виродження за всіма квантовими числами*, крім n.

Детальніше про спін-орбітальний зв'язок див. опис ЛР6.

Експериментальна частина

В якості джерела досліджуваного випромінювання використовується газорозрядна трубка ДВС-25.

Спектр випромінювання експонується на фотоплівку за допомогою спектрографа КСА-1 зі скляною оптикою. В якості спектру порівняння для визначення довжин хвиль отриманих спектральних ліній атомарного водню використовується спектр випромінювання ртуті.

Спектр порівняння та спектр досліджуваного випромінювання фотографуються на одну й ту ж саму плівку за допомогою діафрагми Гартмана, яка дозволяє здійснити обидві експозиції без зміщення касети.

Після обчислення довжин хвиль ліній випромінювання атомарного водню, потрібно обчислити значення сталої Рідберга та порівняти її з табличним або розрахованим через фундаментальні константи.

Якщо визначено довжини хвиль принаймні трьох ліній однієї серії, то числа m та n можна вважати заздалегідь невідомими. В такому випадку матимемо систему рівнянь:

$$\tilde{\nu}_{n_i} = \frac{1}{\lambda_{n_i}} = \frac{R}{m^2} - \frac{R}{n_i^2}, \qquad (17)$$

в якій кількість невідомих буде на одиницю більшою за кількість рівнянь. Оскільки m та n – невеликі цілі числа, то систему можна розв'язувати перебором, починаючи з $m = 1$, та враховуючи, що $n_i > m$.

Інший спосіб розв'язку – графічний. Залежність хвильових чисел однієї серії $\tilde{\nu}_{n_i}$ від $1/n_i^2$ є лінійною, тому розв'язання системи можна звести до вибору з двомірного масиву точок, утворених перетином функцій $y = \tilde{\nu}_i$ та $x = 1 \,/\, n_i^2$ принаймні трьох, що належать одній прямій.

Кутовий коефіцієнт такої прямої визначатиме R, а відношення модуля кутового коефіцієнта до вільного члена задаватиме серію (визначатиме значення числа m).

Порядок виконання роботи. Завдання.

1. Ознайомитись з оптичною схемою реєстрації та схемою самого спектрографа КСА-1. Провести юстування оптичної системи таким чином, щоб на виході монохроматора візуально спостерігати три яскраві лінії випромінювання водню.

2. Сфотографувати отриманий спектр на плівку. Діафрагма Гартмана при цьому має відкривати лише центральну частину вхідної щілини монохроматора. Після реєстрації спектру закрити вихідну щілину монохроматора, не зміщуючи та не закриваючи касету.

3. Зняти або змістити поворотне дзеркало та провести юстування для випромінювання ртуті (реперний спектр) таким чином, щоб рівномірно освітленою була вхідну щілина монохроматора. Провести реєстрацію реперного спектру на плівку (відкрити вихідну щілину) за умови, що діафрагма Гартмана закриває центральну частину вхідної щілини.

4. Після завершення експозиції та обробки плівки визначити довжини хвиль та хвильові числа отриманих спектральних ліній випромінювання атомарного водню. Детально процедура реєстрації спектрів та обробки плівки описана в Додатку.

5. З розв'язку системи рівнянь (17) або за допомогою графічного методу ідентифікувати спостережувані спектральні лінії та отримати значення сталої Рідберга. Результати порівняти з табличними.

Література.

1. *Шпольский Э. В*. Атомная физика, т.1,2. М.: «Наука», 1974. (т1: §103-113; т.2: §51-58,73-74).

2. *Находкін М. Г. Харченко Н. П.* Атомна фізика, Київ: ВПЦ «Київський університет», 2012. (§4.1-4.4, 8.1-8.9).

3. *Білий М. У., Охріменко Б. А.* Атомна фізика. Київ: «Знання», 2009. (§4.3-4.4, 5.1-5.3).

4. https://uk.wikipedia.org/wiki/Спектральні серії водню.

Контрольні запитання

1. Чому спектр атомарного водню являє собою сукупність дискретних спектральних ліній?
2. На яких експериментальних фактах ґрунтуються постулати Бора? Сформулюйте їх. Які інші моделі атома знаєте?
3. Який фізичний зміст головного квантового числа n? Чи пов'язане введення цього числа з квантуванням якоїсь фізичної величини? Чи залежить енергія атома водню від інших квантових чисел?
4. Комбінаційний принцип Рідберга-Рітца. Серії випромінювання. Чому лінії випромінювання атома водню утворюють серії, розташовані в різних ділянках спектра (ультрафіолетовій, видимій, інфрачервоній)? Яка серія досліджується в роботі?
5. Яка розмірність сталої Рідберга? Який фізичний зміст сталих R та R_y?
6. Що таке Борівський радіус? Яким він буде для екситона?
7. Чи можна описати спектральні серії воднеподібних іонів за допомогою узагальненої формули Бальмера?
8. Що таке спектральний терм? В чому полягає суть комбінаційного принципу? Чи справедливий принцип для лінійчатих спектрів атомів інших хімічних елементів?
9. Які недоліки теорії Бора? Де межі її застосування?
10. Рівняння Шредінгера для атома водню. Його розв'язки. Фізичний зміст хвильової функції. Квантові числа. Умови квантування.
11. Теорія Бора-Зомерфельда. Яка відповідність між квантовими числами, введеними в цій теорії та тими, що з'являються при розв'язку рівняння Шредінгера?
12. Чому в експериментальному спектрі спостерігається дуже багато ліній, крім ліній досліджуваної серії?

Лабораторна робота 5.

ВИЗНАЧЕННЯ ІЗОТОПІЧНОГО ЗСУВУ В СПЕКТРІ ВИПРОМІНЮВАННЯ АТОМАРНОГО ВОДНЮ

Мета роботи: Визначити ізотопічний зсув ліній H_β та H_γ серії Бальмера у спектрі атомарного водню, вирахувати відношення мас електрона і протона, та питомий заряд електрона e/m.

Обладнання: Лампа воднево-дейтерієва ДДС-30 з системою живлення, лампа ртутна ДРТ, спектрограф ДФС-13, касета для плівки, світлочутлива плівка.

Теоретичні відомості

В 1932 р. Юрі, Брікуедде та Мерфі в спектрі воднево-дейтерієвої суміші, збагаченої важким ізотопом ^2H шляхом випаровування рідкого водню, виявили низькочастотні супутники ліній $H_\alpha, H_\beta, H_\gamma$, та H_δ серії Бальмера.

Було передбачено, що зсув цих супутників відносно основних ліній ^1H (так званий "ізотопічний" зсув), обумовлений залежністю сталої Рідберга від маси ядра. Експериментально залежність сталої Рідберга від маси ядра також спостерігається в спектрах воднеподібних іонів He^+, Li^{2+}, Be^{3+},...

Наступний вираз для спектру енергій електрона в атомі водню отримувався в рамках теорії Бора (без урахування спін-орбітальної взаємодії) в наближенні нерухомого ядра.

$$E_n = -\frac{R_y}{n^2} = -\frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^2 n^2}, \qquad (1)$$

де h - стала Планка, m – маса, e - заряд електрона, ε_0 – діелектрична стала, $n = 1,2,3, \ldots$

Таке наближення добре працює тільки якщо масу ядра можна вважати нескінченно великою в порівнянні з масою електрона. Оскільки співвідношення маси ядра атома водню до маси електрона становить близько 1840 разів, то для точнішого визначення спектру енергій електрона в атомі водню слід розглядати рух ядра та електрона довкола їх спільного центру мас. Для точного розв'язку такої задачі двох тіл маємо замість маси електрона підставити зведену масу ядра та електрона:

$$\mu = \frac{m_e M_Я}{m_e + M_Я} = m_e \left(\frac{1}{1 + m_e/M_Я}\right). \qquad (2)$$

При підстановці μ замість маси електрона в E_n матимемо:

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{8\varepsilon_0^2 h^2 n^2}\left(\frac{1}{1+m_e/M_я}\right) \quad (3)$$

Для сталої Рідберга:

$$R = \frac{R_y}{hc} = \frac{\mu e^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c} = \frac{m_e e^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c}\left(\frac{1}{1+m_e/M_я}\right), \quad (4)$$

Для важких атомів ($M_я \to \infty$) стала Рідберга наближатиметься до значення, розрахованого в наближенні нерухомого ядра:

$$R \to \frac{m_e e^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c} = R_\infty, \quad (5)$$

Таким чином, положення спостережуваних Юрі ліній-супутників (обумовлені електронними переходами в атомах дейтерію) серії Бальмера в спектрі воднево-дейтерієвої суміші добре співпадають з положеннями, обчисленими за формулою Бальмера зі значенням сталої Рідберга для ізотопу ^2H, з масою ядра в два рази більшою за масу легкого ізотопу водню ^1H.

Хвильове число будь-якої лінії серії Бальмера визначається як:

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right), \quad (6)$$

де $n = 3,4,5, \ldots$, а стала R розрахована з урахуванням маси ядра.

Маса ядра одного з важких ізотопів водню – дейтерію (D) приблизно вдвічі більша за масу ядра легкого ізотопу (H):

$$M_я^D = 2M_я^H \quad (7)$$

Таким чином величину ізотопічного зсуву в спектрі атомарного водню для серії Бальмера можна визначити як:

$$\Delta\tilde{\nu}_n = \tilde{\nu}_n^H - \tilde{\nu}_n^D = (R^D - R^H)\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right) \approx \frac{m_e}{2M_я^H}\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right)R_\infty, \quad (8)$$

де відношення мас m_e / $M_я^H$ визначатиме відношення мас електрона та протона (ядра протію).

Значення сталих Рідберга для дейтерію та протію R^D та R^H можна подати у вигляді:

$$R_D = \frac{R_\infty}{1+m_e/M_я^D}, \qquad R_H = \frac{R_\infty}{1+m_e/M_я^H}, \quad (9)$$

тоді відношення маси електрона до маси протона визначатиметься виразом:

$$\frac{m_e}{M_я^H} = \frac{R_D - R_H}{R_H}\left(\frac{M_я^D + m_e}{M_я^D - M_я^H}\right). \quad (10)$$

Маси ядер дейтерію та протію можна виразити як:

$$M_я^H = \frac{H}{N_A} - m_e, \qquad M_я^D = \frac{D}{N_A} - m_e, \tag{11}$$

де H та D – атомні маси водню та дейтерію, N_A – стала Авогадро.

Враховуючи, що стала Фарадея (заряд моля електронів) $F = N_A e$, матимемо вираз для визначення питомого заряду електрона:

$$\frac{e}{m} = \frac{F}{N_A m_e} = \frac{FR_H(M_я^D - M_H)}{N_A(R_D - R_H)(M_я^D + m_e)M_я^H} = \frac{FR_H(D-H)}{(R_D - R_H)D(H - N_A m_e)}. \tag{12}$$

В цьому виразі $N_A m_e$ – маса моля електронів є значно меншою за атомну масу водню, тому:

$$\frac{e}{m} = F\frac{R_H}{(R_D - R_H)H}\left(\frac{D-H}{D}\right), \tag{13}$$

відображає спектроскопічний спосіб визначення питомого заряду електрона.

Експериментальна частина

В якості джерела досліджуваного випромінювання використовується воднево-дейтерієва лампа. Спектр випромінювання експонується на фотоплівку за допомогою спектрографа ДФС-13 з дифракційною ґраткою. В якості спектру порівняння використовується спектр випромінювання ртуті. Ізотопічний зсув $\Delta\lambda_n = \lambda_n^D - \lambda_n^H$ визначається для двох ліній β та γ серії Бальмера.

Відношення маси електрона до маси протона визначається за формулою (8).

Скориставшись формулою (13), можна визначити питомий заряд електрона.

Після обчислення отримані величини слід порівняти з табличними. Питомий заряд електрона також можна порівняти з отриманим в результаті виконання лабораторної роботи №1.

Порядок виконання роботи. Завдання.

1. Ознайомитись з оптичною схемою реєстрації та схемою самого спектрографа ДФС-13. Провести юстування оптичної системи таким чином, щоб на виході монохроматора візуально спостерігати β та γ лінії випромінювання водню.

2. На одній плівці з розмежуванням по висоті, але без зміщення плівки та без зміни спектрального діапазону, почергово зареєструвати

спостережуваний спектр випромінювання водню та реперний спектр випромінювання ртуті.

3. Після проявлення та фіксації плівки, визначити довжини хвиль отриманих спектральних ліній та провести їх класифікацію.

4. Користуючись формулою (8), знайти відношення маси електрона до маси протона та порівняти експериментально отримане значення з табличним.

5. За формулою визначити питомий заряд електрона. Отриману величину порівняти з табличним значенням а також з отриманим в результаті виконання лабораторної роботи №1.

Література.

1. *Шпольский Э. В*. Атомная физика, т.1, М.: «Наука», 1974. (§103-111).

2. *Находкін М. Г. Харченко Н. П.* Атомна фізика, Київ: ВПЦ «Київський університет», 2012. (§2.3).

3. *Білий М. У., Охріменко Б. А.* Атомна фізика. Київ: «Знання», 2009. (§4.3-4.4).

4. Література до ЛР4.

Контрольні питання

1. Що таке ізотопічний зсув? Яким чином енергія атома залежить від маси ядра? Фізичний зміст сталих Рідберга R і R_∞.
2. В якому напрямку (в шкалі частот) будуть зміщені лінії серії Лаймана тритію по відношенню до ліній тієї ж серії для дейтерію?
3. Для якої серій та для яких саме ліній ізотопічний зсув в спектрі атомарного водню буде максимальним?
4. Як змінюватиметься величина ізотопічного зсуву різних атомів при збільшенні маси ядра атома?
5. Яка розмірність сталої Рідберга? Який фізичний зміст сталих R_H та R_D?
6. З яких елементарних частинок складаються ядра атомів протію дейтерію та тритію? Оцініть величину зміщення в спектрі позитронію та мезоатому по відношенню до протію (для ліній, що відповідають переходу цих «атомів» в перший збуджений стан).
7. Чи відомі вам історичні приклади використання залежності сталої Рідберга від маси ядра для інтерпретації спектрів воднеподібних іонів?
8. Чи можна для спектроскопічного способу визначення заряду скористатися значенням довжин хвиль відповідних ліній різних атомів?

9. Рівняння Шредінгера для атома водню. Його розв’язки. Фізичний зміст хвильової функції. Квантові числа. Умови квантування.

Лабораторна робота 6.

ЕНЕРГЕТИЧНА СТРУКТУРА НАЙНИЖЧИХ ЗБУДЖЕНИХ СТАНІВ АТОМА РТУТІ

Мета роботи: Проаналізувати експериментальний спектр випромінювання атома ртуті та побудувати енергетичну діаграму нижчих збуджених станів цього атома.

Прилади та обладнання: Лампа ртутна ДРТ з системою живлення, лампа на парах заліза Fe (для порівняння), спектрограф КСА-1 касета для плівки, світлочутлива плівка.

Загальні відомості

При визначенні структури термів багатоелектронних атомів потрібно брати до уваги *принцип тотожності* (нерозрізненності) частинок, та *принцип Паулі.*

Принцип тотожності: *В системах однакових мікрочастинок можливі переходи, що приводять до експериментально нерозрізненних станів.*

Базуючись на цьому принципі, можна показати, що хвильова функція системи квантових частинок може бути або симетричною щодо перестановок частинок, або антисиметричною.

Покажемо це на прикладі двочастинкової системи. Хвильова функція системи – $\psi(x_1, x_2)$. Введемо оператор перестановки $\hat{P}$, який міняє місцями частинки, тобто $\hat{P}\psi(x_1, x_2) = \psi(x_2, x_1) = a\psi(x_1, x_2)$. Оскільки частинки (тобто, власне, стани) нерозрізненні, то функції станів $\psi(x_2, x_1)$ та $\psi(x_1, x_2)$ можуть відрізнятись лише множником. Подіявши оператором перестановки $\hat{P}$ ще раз, отримаємо, очевидно, початковий стан $\psi(x_1, x_2)$:

$$\hat{P}^2\psi(x_1, x_2) = \hat{P}\psi(x_2, x_1) = \hat{P}a\psi(x_1, x_2) = a^2\psi(x_1, x_2) = \psi(x_1, x_2). \quad (1)$$

Отже, власним значенням оператора $\hat{P}^2$ є $a^2 = 1$, а власними значеннями оператора $\hat{P}$ є, відповідно, ± 1. Отже, $\psi(x_1, x_2) = \pm\psi(x_2, x_1)$. Тобто, принцип тотожності приводить до певної симетрії квантової системи – при перестановці частинок хвильова функція стану системи або змінює знак (є антисиметричною щодо перестановок), або не змінює (є симетричною щодо перестановок). Це означає, що *стан системи є симетричним щодо положення частинок, що до неї входять* (оскільки фізичний зміст має квадрат модуля хвильової функції).

Принцип Паулі. Паулі сформулював ці наслідки принципу тотожності у вигляді твердження, що:

У природі є два типи мікрочастинок – бозони, з цілим спіном, та ферміони, з півцілим. Системи бозонів характеризуються симетричними щодо перестановок функціями стану, а ферміони (в т.ч. електрони, які характеризуються спіновим числом 1/2) – антисиметричними щодо перестановок функціями.

З цього твердження випливає, що *у певному стані не може перебувати більш ніж один електрон*; оскільки стан характеризується набором чотирьох квантових чисел – n, l, m_l, m_s – то це означає, що в квантовій системі не може бути більше одного електрона з певним набором цих квантових чисел. Останнє формулювання часто і називають принципом Паулі.

Типи зв'язку в атомах.

В рамках *векторної моделі* повний момент (імпульсу) атома $\boldsymbol{J}$ визначається векторною сумою $\boldsymbol{J=L+S}$ орбітального моменту $\boldsymbol{L}$ системи електронів, та спінового $\boldsymbol{S}$**.** Зазначимо, що ми тут оперуємо не з фізичними величинами – моментами, а з відповідними їм квантовими числами. Так, момент як фізична величина (орбітальний, наприклад) визначається виразом $|\boldsymbol{L}| = \hbar\sqrt{L(L+1)}$. Проте для систематики атомних станів зручно оперувати відповідними квантовими числами – орбітальним – L, спіновим - S, числом повного моменту – J. Відповідно, квантові числа окремих електронів є l_i, s_i. Розрізняють два типи зв'язку – *L-S* – зв'язок Рассела-Саундерса, або ж *нормальний*, та *j-j* зв'язок.

***L–S* – зв'язок**. При такому зв'язку вважається, що взаємодія окремих орбітальних моментів різних електронів між собою сильніша, ніж взаємодія орбітального та спінового моментів окремого електрона. Те ж саме – для взаємодії спінових моментів. Тобто спочатку визначаються результуючі орбітальний $\boldsymbol{L}$ та спіновий $\boldsymbol{S}$ моменти, а повний момент $\boldsymbol{J}$ є їх сумою.

Максимальний момент реалізується, якщо всі окремі моменти співнапрямлені, інші значення моментів – векторні суми відповідних моментів окремих електронів:

$$\boldsymbol{L} = \sum \boldsymbol{l}_i, \quad \boldsymbol{S} = \sum \boldsymbol{s}_i, \quad \boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S}\,. \tag{2}$$

У випадку системи з двох електронів, які характеризуються орбітальними моментами $\boldsymbol{l}_1$ та $\boldsymbol{l}_2$ і, відповідно, орбітальними квантовими числами l_1 та l_2, сумарний орбітальний момент буде визначатись числом

L, що може набувати значень:

$$L = l_1 + l_2, \quad l_1 + l_2 - 1, \ldots \; l_1 - l_2 \,, \tag{3}$$

тобто $2l + 1$ значення, де l – менше з чисел l_1, l_2.

Терми атома, в якому реалізується L–S-зв'язок позначаються: ${}^{\varkappa}L_j$, де $\varkappa = 2s + 1$ – мультиплетність, L – літера, яка відповідає певному значенню числа орбітального моменту (S: $L = 0$, P: $L = 1$, D: $L = 2, F$: $L = 3, \ldots$), j – число повного моменту.

Для прикладу розглянемо систему з двох електронів, d (число l=2) та p (l=1): максимальне значення орбітального числа L реалізується, якщо моменти співнапрямлені, тобто $L = l_1 + l_2 = 2 + 1 = 3$. Це F-стан. Мінімальне значення моменту, отже, і відповідного числа – якщо моменти антипаралельні, тобто $L = l_1 - l_2 = 2 - 1 = 1$. Це P-стан. Проміжні значення реалізуються при орієнтації моментів l_1, l_2. під певним кутом, з вимогою умов просторового квантування, тобто значення квантових чисел L мають бути цілими з кроком 1. Тобто, в даному випадку, можливе ще одне значення L, а саме – 2 (D-стан).

Подібна процедура виконується і для знаходження результуючого спінового моменту ***S.*** Оскільки спінове число електронів ½, то нескладно бачити, що для результуючого спінового числа можливі значення 0 та 1 (½–½ та ½+½).

Те ж саме – і для числа повного моменту J:

$$J=L+S,\ L+S-1,\ L+S-2,\ldots,|L-S|. \tag{4}$$

Таким чином, маємо стани P, D, F з мультиплетністю $\varkappa$=1 та 3, тобто синглетні ${}^1P_1$, ${}^1D_2$, ${}^1F_3$, та триплетні ${}^3P_{0,1,2}$, ${}^3D_{1,2,3}$, ${}^3F_{2,3,4}$ стани (терми).

Детальніше про позначення термів атома див. ЛР4.

Мультиплетність $\varkappa$ визначає кількість значень числа J (при $L>S$), а також число проекцій $2S + 1$ спіна на вісь. Сукупність станів атома з даною електронною конфігурацією при заданих значеннях чисел L і S звичайно називається *термом*.

Енергія магнітної спін-орбітальної взаємодії пропорційна скалярному добутку моментів (***LS***), відповідно, енергія рівня в мультиплеті залежності від J визначається виразом:

$$E_J = \xi(L,S)(\boldsymbol{LS}) = \xi(L,S)\frac{1}{2}((J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)), \tag{5}$$

де $\xi(L,S)$ – стала для даного терма величина (т.зв. *фактор мультиплетного розщеплення*).

З цього можна отримати, що відстань між сусідніми рівнями з квантовими числами (J) та $(J+1)$

$$\Delta E_{(LS)(J,J+1)} = \xi(L,S)(J+1) \quad (6)$$

є пропорційною більшому значенню квантового числа J. Це є *правило інтервалів Ланде*, яке є наближеним тією мірою, якою є наближеним застосування зв'язку Рассела-Саундерса.

Зазначимо, що для легких елементів мультиплетне розщеплення дуже мале (про нього часто говорять, як про тонку структуру), в той час як для важких атомів воно досягає сотень та тисяч $см^{-1}$. Часто лінії, які належать до одного мультиплету, лежать на протилежних кінцях видимої області спектра. Зокрема, це спостерігається для атома ртуті, у видимій частині спектра якої інтенсивні зелена, синя та фіолетова (друга) лінії належать до одного мультиплету

Правило Лапорта. В дипольному наближенні в системах з інверсією дозволеними є переходи між станами з різною парністю. Парність означає зміну/незміну знаку хвильової функції стану при операції інверсії (зміна знаку всіх координат) і визначається як $(-1)^L$. Видно, що терми з парним L є парними і навпаки.

J-J зв'язок

J-J зв'язок менш поширений, ніж L-S зв'язок. Він частіше реалізується при класифікації термів важких атомів (при великих Z). У випадку j - j зв'язку енергія взаємодії орбітальних і спінових моментів окремих електронів менша за енергію спін-орбітальної взаємодії, тобто

$$E_{l-l}, E_{s-s}, < E_{l-s}. \quad (7)$$

Відповідно, в цій моделі спочатку знаходять сумарні моменти $\boldsymbol{j}_i$ спінового та орбітального руху для кожного електрона, а потім знаходять сумарний моменту кількості руху всіх електронів.

$$\boldsymbol{J} = \sum \boldsymbol{j}_i = \sum(\boldsymbol{l}_i + \boldsymbol{s}_i). \quad (8)$$

Атом ртуті. Атом ртуті (Z=80) характеризується електронною конфігурацією зовнішніх оболонок $5d^{10}6s^2$, тобто в ньому на зовнішній оболонці є два електрони. Як було показано раніше, в наближенні зв'язку Рассела-Саундерса спінове квантове число такого атома може приймати значення S=0 і S=1, відповідно, терми атома ртуті розділяються на синглетні і триплетні. Основним термом атома ртуті є терм $^1S_0$.

У спектрі випромінювання атомів ртуті спостерігається інтенсивні резонансні лінії:

λ=1849.5 Å, що відповідає переходу $^1P_1 \rightarrow {}^1S_0$ (терми конфігурацій $6s6p$ та $6s^2$);

λ=2336.5 Å, що відповідає інтеркомбінаційному (ΔS=1) переходу

$^3P_1 \rightarrow {}^1S_0$ (терми конфігурацій *6s6p* та $6s^2$);

λ=4077.8 Å (перша фіолетова), що відповідає інтеркомбінаційному переходу $^1S_0 \rightarrow {}^3P_1$ (терми конфігурацій *6s7s* та *6s6p*);

Ці довжини хвиль, крім довжин хвиль, які визначаються експериментально, необхідно знати для побудови енергетичної діаграми (рівнів енергії) найнижчих збуджених станів атома ртуті.

Експериментально визначаються довжини хвиль випромінювання у видимій області спектра, а саме: зелена, синя та фіолетова (друга), що відповідають переходам між станами $^3S \rightarrow {}^3P$ (терми конфігурацій *6s7s* та *6s6p*).

Порядок виконання роботи. Завдання.

1. Отримати плівку з лініями випромінювання ртуті в зелено-фіолетовій області видимого спектра. В якості опорного спектру використати спектр випромінювання заліза. Оптична схема спектрографа КСА-1 та спектри випромінювання парів заліза наведено в Додатку.
2. Обробити плівку, визначити три необхідні довжини хвиль переходів між вказаними вище станами, тобто мультиплетного переходу $^3S \rightarrow {}^3P$. Процедура обробки спектрів описана в Додатку.
3. Побудувати та пояснити енергетичну діаграму найнижчих рівнів атома ртуті (сформовану конфігураціями 6*s*6*s*, 6*s*6*p*, 6*s*7*s*), використовуючи три задані значення довжин хвиль та три, визначені експериментально, і враховуючи при цьому правила побудови термів, зокрема, правило інтервалів Ланде та правило Гунда.

Література.

1. *Шпольский Э. В*. Атомная физика, т.2, М.: «Наука», 1974. (Гл.VII, VIII).
2. *Находкін М. Г. Харченко Н. П.* Атомна фізика, Київ: ВПЦ «Київський університет», 2012. (Гл.9, 11, 14).
3. *Білий М. У., Охріменко Б. А.* Атомна фізика. Київ: «Знання», 2009. (§6.1-6.3).
4. *Ельяшевич М. А.* Атомная и молекулярная спектроскопия, М.: ГИМФЛ, 1962. (ч.II, гл.7,9,10).

Контрольні запитання.

1. Принцип тотожності частинок. Принцип Паулі для квантових частинок.
2. Стани квантової системи. Квантові числа.
3. Векторна модель атома. Правила визначення орбітального, спінового та повного механічного моменту багатоелектронного атома.
4. Спін-орбітальна взаємодія. Енергія атома з урахуванням спін-орбітальної взаємодії. Зв'язок Рассела-Саундерса, *j-j* зв'язок.
5. Поняття терму. Мультиплетність. Терми в багатоелектронних системах.
6. Правило Маделунга: послідовності заповнення електронних підоболонок. Правило інтервалів Ланде: відстані між компонентами мультиплету. Правила відбору. Правило Лапорта.
7. Правила Гунда для визначення терма з найменшою енергією.
8. Про що свідчить порушення правила інтеркомбінаційної заборони (правила відбору $\Delta S = 0$)?
9. Чому в спектральному приладі КСА-1 касета з плівкою встановлюється в площині, не перпендикулярній до напряму променів?

Лабораторна робота 7.

РОЗЩЕПЛЕННЯ СПЕКТРАЛЬНИХ ЛІНІЙ У ЗОВНІШНЬОМУ МАГНІТНОМУ ПОЛІ (ЕФЕКТ ЗЕЄМАНА)

Мета роботи: Визначити величину нормального Зеєманівського розщеплення спектральної лінії атома неону в магнітному полі.

Прилади та обладнання: Газорозрядна неонова лампа з системою живлення, електромагніт, реостат з амперметром для задання струму через електромагніт, веберметр, спектрограф ИСП-51 з інтерферометром Фабрі-Перо, поляризатор, фотоплівка, касета.

Загальні відомості.

Ефект Зеємана полягає в тому, що спектральні лінії в магнітному полі зазнають розщеплення на кілька компонент. Розрізняють *простий*, або ж *нормальний* ефект – розщеплення на три компоненти, та *складний* (*аномальний*) ефект – розщеплення на більш ніж три компоненти. Ефект названо аномальним тому, що пояснення Лоренца рамках класичної електродинаміки передбачає розщеплення не більше, ніж на три компоненти.

Ефект передбачений Лоренцом, спостерігався на досліді в 1896 р. Зеєманом. Виявилось, що при спостереженні перпендикулярно до напряму магнітного поля спектральні лінії зазнають розщеплення на три компоненти, даючи симетричну картину (див. рис.1). Величина розщеплення (в $см^{-1}$) виражалась формулою

$$\Delta\nu = \frac{e}{2mc^2}H, \qquad (1)$$

яка показувала зміщення двох бічних компонент розщеплення відносно центральної, незміщеної (нормальний триплет Лоренца). Лінії триплету поляризовані лінійно – крайні компоненти (σ) – перпендикулярно до поля $\boldsymbol{H}$, середня (π) – паралельно. При спостереженні вздовж магнітного поля середня незміщена компонента відсутня, а крайні поляризовані циркулярно (колова поляризація), див. Рис.1.

Ефект Зеємана – і нормальний, і аномальний, - коректно пояснюється в рамках квантової механіки.

Теорія ефекта Зеємана.

В рамках векторної моделі атома, електрон, який рухається навколо ядра, має певний механічний момент; крім того, електрон характеризується певним власним механічним моментом – спіном. Оскільки електрон має електричний заряд, то він має і певний магнітний (дипольний) момент. Зв'язок між магнітним та механічним

моментами електрона задається *гіромагнітним співвідношенням*

$$\frac{|\boldsymbol{\mu}|}{|\boldsymbol{M}|} = -g\frac{e}{2mc} \qquad \text{або ж} \qquad \boldsymbol{\mu} = -g\frac{e}{2mc}\boldsymbol{M}. \tag{2}$$

Тут $\boldsymbol{\mu}$ **–** магнітний момент**,** $\boldsymbol{M}$ **–** механічний момент (момент імпульсу) електрона, g – *фактор Ланде*. Причому для орбітального руху електрона $g = 1$, а для власного (спіна) $g = 2$.

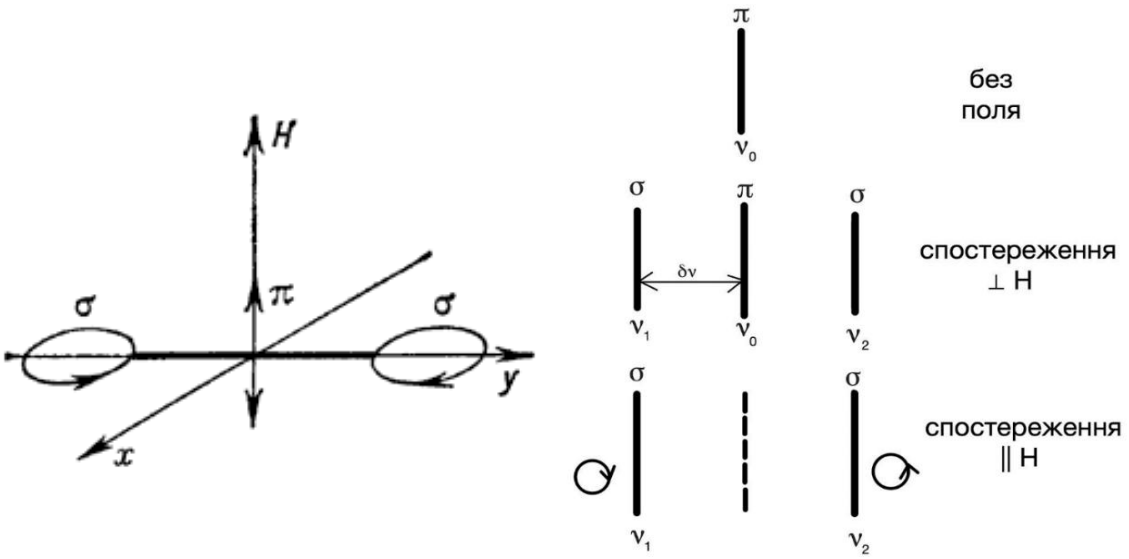


Рис.1. Спостереження простого триплету Лоренца.

Повний момент електрона є сумою орбітального та власного моментів, відповідний повний магнітний момент не є антипаралельним до повного механічного моменту, як в (2), завдяки різним значенням g-фактора. Крім того, завдяки закону збереження механічного моменту має місце прецесія моментів навколо напряму результуючого моменту. Це дещо ускладнює розрахунки відповідних величин для атома, тобто багатоелектронної системи, але можна отримати, що g-фактор для атома має вигляд

$$g = 1 + \frac{J(J+1)+S(S+1)-L(L+1)}{2J(J+1)}. \tag{3}$$

Далі, якщо атом помістити у магнітне поле (слабке), то додаткова енергія магнітного диполя у цьому полі, або ж добавка до енергії рівня

$$\Delta E = -(\boldsymbol{\mu}_J \boldsymbol{H}). \tag{4}$$

І, з врахуванням (2), (3)

$$\Delta E = g m_J \frac{e\hbar}{2mc} H = g m_J M_B H, \tag{5}$$

де M_B – магнетон Бора, m_J- магнітне квантове число повного моменту.

Відповідно, енергія переходу між енергетичними рівнями системи змінилась:

$$\hbar\omega = E_1 - E_2 \;\rightarrow \hbar(\omega + \Delta\omega) = (E_1 + \Delta E_1) - (E_2 + \Delta E_2)\,. \tag{6}$$

І зміну енергії переходу можна виразити як

$$\hbar\Delta\omega = (\Delta E_1 - \Delta E_2) = (m_1 g_1 - m_2 g_2) M_B H. \quad (7)$$

Для зміни частоти переходу (в см$^{-1}$) маємо

$$\Delta\nu = (m_1 g_1 - m_2 g_2)\frac{e}{2mc^2} H. \quad (8)$$

Таким чином, можна бачити, що, якщо $g_1 = g_2$, тобто g-фактори однакові для рівнів, між якими відбувається перехід, то спостерігається простий ефект Зеємана, якщо ж різні – то складний.

Так, зокрема, якщо $S_1 = S_2 = 0$ (перехід між синглетними рівнями), то $g_1 = g_2 = 1$, згідно правил відбору $\Delta m = 0, \pm 1$, отже $m_1 - m_2 = 0, \pm 1$, і спостерігається простий триплет Лоренца з величиною розщеплення згідно (1). Те ж саме можна отримати, якщо спін взагалі не враховувати. Якщо $g_1 = g_2 \neq 1$, то ефект простий (спостерігається розщеплення на три компоненти), але величина розщеплення задається формулою

$$\Delta\nu = g\frac{e\hbar}{2mc^2} H. \quad (9)$$

Якщо ж $g_1 \neq g_2$, то комбінацій $(m_1 g_1 - m_2 g_2)$ може бути більше, ніж три, і, отже, спостерігається складний ефект Зеємана.

Зауважимо, що наведений розгляд справедливий для *слабких* магнітних полів. Критерій слабого поля – добавки до енергії рівня в магнітному полі – суттєво менші за величину спін-орбітального (мультиплетного) розщеплення, тобто зовнішнє поле є суттєво слабшим за внутрішні поля, які обумовлюють спін-орбітальну взаємодію. Відповідно, сильним зовнішнім полем вважають поле, яке розриває спін-орбітальну взаємодію, поняття результуючого момента *J* втрачає смисл, а складний ефект Зеємана переходить (у певному наближенні) в простий. Це є *ефект Пашена-Бака*, і в цій лабораторній роботі не розглядається.

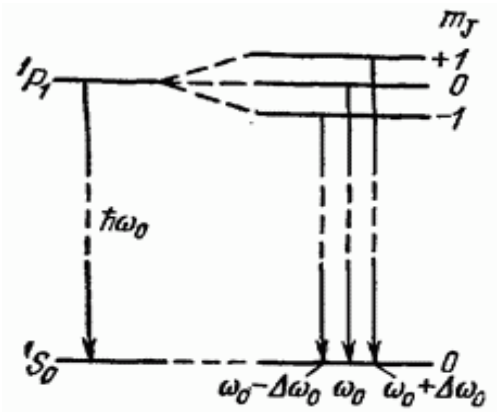


Рис.2. Триплет Лоренца.

Експеримент.

Метою даної роботи є спостереження простого (нормального) ефекту Зеємана та деяких його закономірностей. В роботі ефект Зеємана спостерігається на жовтій лінії неону λ=5852.49 Å - перша яскрава жовта лінія в спектрі неону, яка обумовлена переходом між синглетними рівнями $^1P_1 \rightarrow {}^1S_0$ (див. рис. 2 та 3).

Оскільки величина розщеплення в магнітному полі становить долі

ангстрема, а спектрограф ІСП-51, який застосовуєтьсяв даній роботі, має лінійну дисперсію в області 6000 Å приблизно ~30.4 Å/мм, безпосередньо в спектрі розщеплення практично непомітне.

Наприклад, для лінії з довжиною хвилі λ=5000 Å у магнітному полі H=20000 Гс (2 Тл), розщеплення приблизно рівне 0.28 Å. Тому в роботі для непрямого спостереження ефекту Зеємана і реєстрації розщеплення застосовується інтерферометр Фабрі-Перо, який об'єднаний з спектрографом, і завдяки якому підвищується роздільна здатність методу.

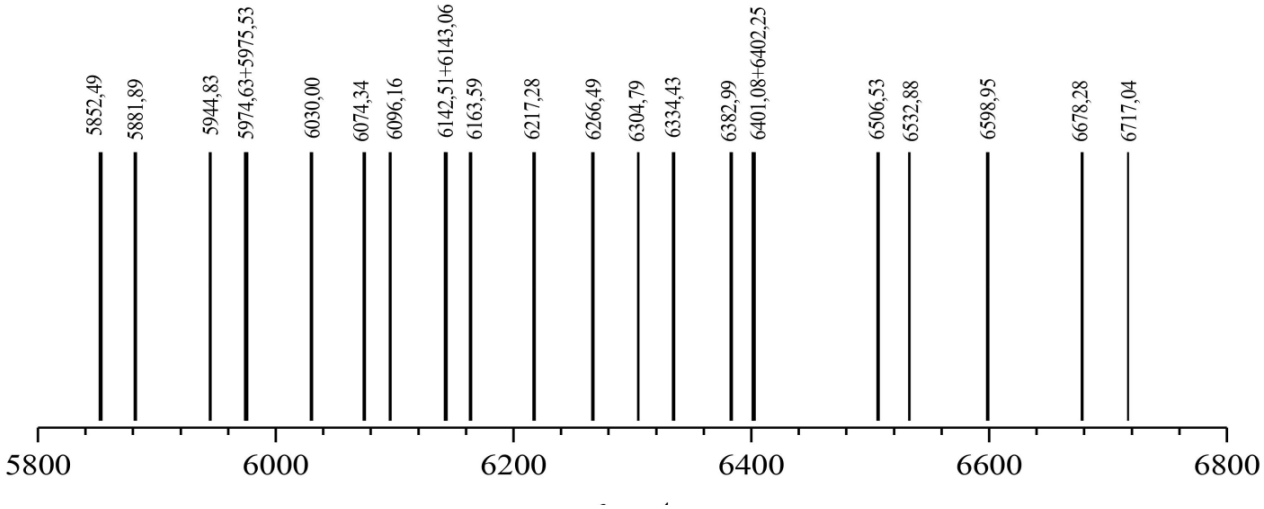


Рис.3. Спектр неону.

Схема експериментальної установки наведена на Рис. 4.

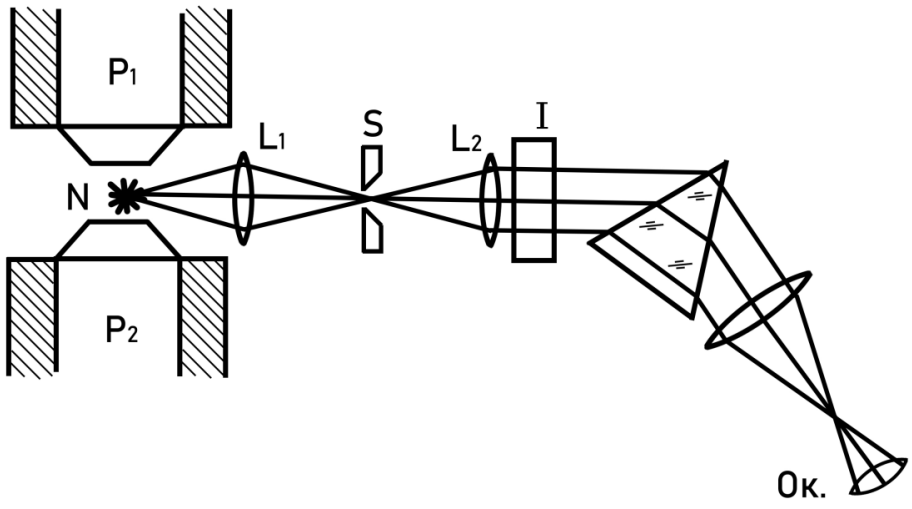


Рис.4. Схема експериментальної установки. *N* – джерело світла (неонова трубка), *P* – полюси електромагніту, L_1, L_2 – лінзи (об'єктив), *S* – вхідна щілина спектрографа і поляризатор, *I* – інтерферометр,

Електромагніт живиться від автотрансформатора, що подає

напругу на випрямляч. Величина магнітного поля вимірюється за допомогою пробної котушки (S=2,25 см^2, n=16 витків), поміщеної між полюсами магніту, і кінці якої виведені до мілівеберметра. Похибка мілівеберметра для даного опору котушки ~1,5 %. Неонова трубка живиться від трансформатора через баластний опір.

Інтерферометр Фабрі-Перо. Інтерферометр Фабрі-Перо – багатопроменевий інтерференційний спектральний прилад з високою роздільною здатністю, який застосовують, зокрема, для дослідження тонкої структури спектральних ліній: розділення компонент складної структури смуг, точного визначення довжин хвиль, визначення ширин компонент, визначення величини розщеплення та відносної інтенсивності компонент в складній структурі смуг. При одночасному опроміненні інтерферометра хвилями з близькими довжинами хвиль, інтерференційні смуги розщеплюються, тобто для кожної компоненти складної спектральної смуги спостерігаються свої системи інтерференційних кілець, і є можливість аналізувати та порівнювати інтерференційні картини, отримані для різних компонент складної смуги.

Інтерферометр Фабрі-Перо складається (рис.5) з двох розміщених паралельно пластин, покритих напівпрозорим шаром металу з високим коефіцієнтом відбивання (~0.9). Віддаль між пластинами точно фіксується спеціальними кільцями з кварцу чи інвару (матеріали з низьким коефіцієнтом термічного розширення). При падінні світла на інтерферометр має місце явище багатопроменевої інтерференції, і в фокальній площині лінзи L_2 формується система інтерференційних смуг (кілець) рівного нахилу. Світло, що падає вздовж поверхні конуса з кутом φ, дає світле кільце при виконанні умови $m\lambda = 2dncos\vartheta$. Тут λ – довжина хвилі падаючого світла; n – коефіцієнт заломлення середовища між пластинами (звичайно це повітря, і можна вважати $n = 1$); d – товщина проміжку між пластинами; m – порядок інтерференції. Оскільки $cos\vartheta$ має максимальне значення при $\vartheta = 0$, то центральне кільце відповідає найвищому порядку інтерференції. Для всіх кілець поблизу центрального також можна вважати $cos\vartheta = 1$. При цьому вноситься похибка, не більша 0.1-0.2% для довжин хвиль в діапазоні ~5000Å при товщинах d~1-10 мм. І тоді формулу $m\lambda = 2dncos\vartheta$ можна записати у вигляді $m = 2d\frac{1}{\lambda} = 2d\tilde{\nu}$, або ж $\delta m = 2d\delta\tilde{\nu}$; ($\tilde{\nu}$ - хвильове число).

У роботі використовується еталон (інтерферометр) Фабрі-Перо, що

являє собою кварцеву плоско-паралельну пластину товщиною 5мм, покриту з однієї сторони напівпрозорим шаром алюмінію з коефіцієнтом відбивання ~0.8-0.9.

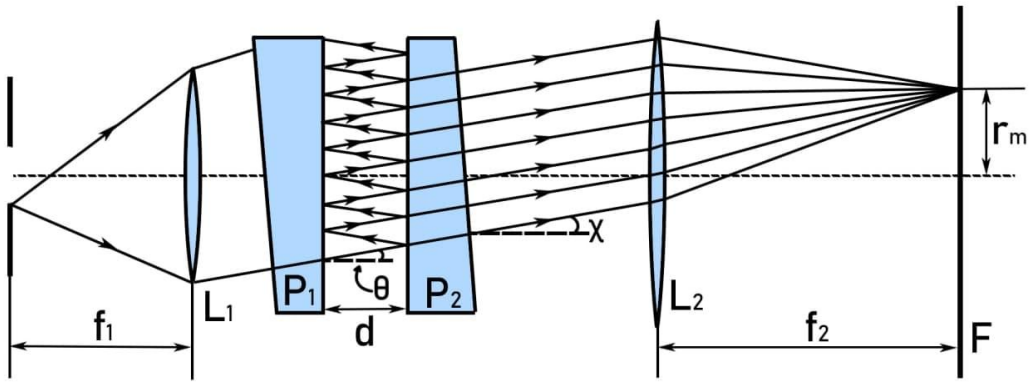


Рис.5. Схема інтерферометра Фабрі-Перо. L_1, L_2 – лінзи (об'єктиви), P_1, P_2 – пластини інтерферометра, d – товщина інтерферометра (відстань між пластинами), r_m - радіус m – світлого інтерференційного кільця

Область вільної дисперсії Δλ - гранична ширина спектрального інтервалу випромінювання, що падає на інтерферометр, при якому на інтерференційній картині не відбувається перекривання сусідніх порядків. Співпадіння m-го порядку інтерференції для довжини хвилі (λ+Δλ) з (m+1)-м порядком для довжини хвилі λ відбудеться, якщо різниця ходу є Δ=m(λ+Δλ)=(m+1)λ, звідки для області дисперсії Δλ можна отримати, враховуючи, що максимальне значення порядку $m = \frac{2d}{\lambda}$: $\Delta\lambda = \frac{\lambda^2}{2d}$. Так, для товщини інтерферометра 0.5 см $\Delta\lambda = 0.25\ A$, тобто область вільної дисперсії порядку десятих долей ангстрема. Відповідно, інтерферометр Фабрі-Перо, як прилад високої роздільної здатності є приладом вузьких спектральних інтервалів і потребує попередньої монохроматизації, і для цього він об'єднується з спектрографом. В цій роботі застосовано спосіб *внутрішнього паралельного пучка*, коли інтерферометр розміщується всередині спектрографа, після призми; основна перевага такого розташування в тому, що не виникає спотворення форми кілець самою призмою, що може привести до неточного визначення діаметру кілець. Джерело світла знаходиться в фокусі лінзи L_1, яка спрямовує паралельний пучок світла на вхідну щілину спектрографа; там же розміщено і поляризатор. Далі світло попадає на призму спектрографа і на інтерферометр J. Після

інтерферометра світловий пучок лінзою L_2 фокусується у вихідній площині спектрографа і формує в ній систему кілець, яка фотографується на плівку.

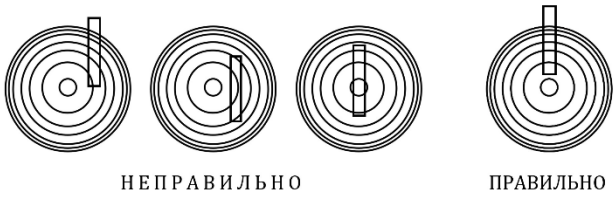


Рис.6. До процесу юстування.

Юстуванням (переміщенням лінзи L_2) можна досягти одночасної різкості спектральних ліній та перерізаючих їх інтерференційних кілець; правильне розташування кілець показано на Рис.6, і досягається зміною нахилу інтерферометра до оптичної осі.

Обробка спостережень

Розглядаються дві близькі лінії, λ_1 та λ_2, віддаль між якими у хвильових числах дорівнює $\delta\tilde{\nu}$. Відповідні кільця будуть відрізнятись на долю порядкового числа δm:

$$\delta\tilde{\nu} = \frac{\delta m}{2d}. \qquad (10)$$

Величину δm можна визначити *методом однобічних смуг*, вимірюючи діаметри кілець, розміщених по один бік від центру (див. далі).

Порядок інтерференції в центрі системи в загальному випадку не обов'язково буде цілим числом. Нехай для однієї лінії він буде $m_1 + \delta m_1$, де m_1 – ціле число, а δm_1 - деяка дробова частина порядку. Для іншої лінії порядок в центрі буде $m_2 + \delta m_2$. Через те, що λ_1 та λ_2 дуже мало відрізняються, практично $m_1 = m_2$, (наприклад, для двох ліній з довжиною хвилі біля 5000Å, які віддалені на 0.2 см$^{-1}$, величини m_1 та m_2 відрізняються всього на 10^{-5}), і тоді:

$$\delta m = (m_1 + \delta m_1) - (m_2 + \delta m_2) = \delta m_1 - \delta m_2. \qquad (11)$$

Якщо $D_1, D_2 \ldots D_p, D_{p+1}$ – система діаметрів кілець для першої лінії, а $d_1, d_2 \ldots d_p, d_{p+1}$ –система діаметрів кілець для другої лінії, то різницю порядків можна визначити із співвідношення [Ельяшевич, 3]

$$\delta m = \delta m_1 - \delta m_2 = \frac{D_{p+1}^2 - d_{p+1}^2}{\Delta}, \qquad (12)$$

де $\Delta = \frac{8f^2}{n}$, а f – фокусна віддаль лінзи L_2. Причому, оскільки різниця хвильових чисел $\delta\tilde{\nu} \sim \delta m$, згідно з (10), то величина $D_{p+1}^2 - d_{p+1}^2$ є сталою для всіх p, тобто не залежить від порядку інтерференції.

Знаючи різницю порядків δm, за формулою (10) можна визначити різницю хвильових чисел.

Різниця порядків визначається *методом однобічних смуг* [Ельяшевич, 3]: виміри проводяться на частинах кілець, що розміщені по один бік центра системи. При використанні цього методу можна обрати для вимірів більш чітку сторону системи кілець. Прилад від'юстовано так, що центр системи кілець розміщено вище, або нижче краю щілини спектрографа, і виміри проводять, використовуючи, наприклад, кільця з 8-го по 15-е, рахуючи від центра.

У випадку з двома компонентами A і B одержуємо картину, схематично показану на рис.7. Нехай $A_1, A_2, A_3, \ldots$ – система діаметрів кілець для першої лінії, а $B_1, B_2, B_3, \ldots$ – для другої лінії.

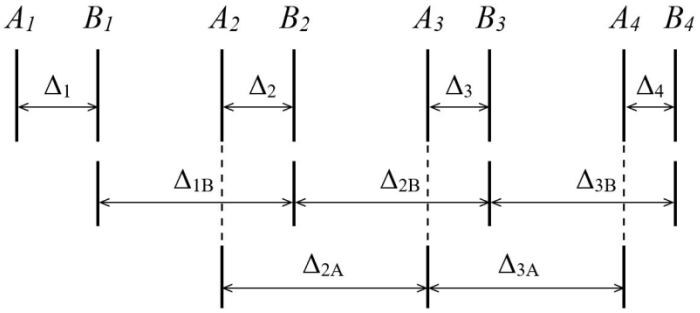


Рис.7. До методу однобічних смуг.

І якщо виміряти інтервали:

$A_1B_1 = \Delta_1, \quad A_2B_2 = \Delta_2, \quad A_3B_3 = \Delta_3, \ldots$

$B_1B_2 = \Delta_{1B}, \quad B_2B_3 = \Delta_{2B}, \ldots$

$A_2A_3 = \Delta_{2A}, \quad A_3A_4 = \Delta_{3A}, \ldots$

То для обрахування δm з досить високою точністю (~0.1%) можна застосувати формулу [3]:

$$\delta m = \frac{2\Delta_2}{\Delta_{1B}+\Delta_{2A}} = \frac{2\Delta_3}{\Delta_{2B}+\Delta_{3A}} = \frac{2\Delta_4}{\Delta_{3B}+\Delta_{4A}} = \cdots \qquad (12)$$

Оскільки квадрати діаметрів кілець утворюють арифметичну прогресію, то відстань між послідовними порядками зменшується по параболічному закону.

Хороше наближення до реального значення δm дає усереднення ряду отриманих згідно (12) незалежних значень δm, при їх достатній кількості.

Порядок виконання роботи

1. Ознайомитись з схемою спектрографа, іншим обладнанням та методикою виконання роботи.
2. Перевірити установку лінз та дзеркала на рекомендованих віддалях. Спостерігати спектр неону на матовому склі, або за

допомогою лінзи.

3. Подати живлення на електромагніт; поступово підвищуючи струм, спостерігати розщеплення ліній в магнітному полі візуально. Зробити фотографію спектра Ne при значенні струму через електромагніт 2.5 А. Зняти покази мілівеберметра при відсутності та наявності магнітного поля. Поляризатор орієнтувати перпендикулярно до магнітного поля, щоб на плівці зафіксувати інтерференційні картини (системи кілець) від двох крайніх компонент триплету.
4. Обробити результати за методом "однобічних" смуг, визначити величину зеєманівського розщеплення спектральних ліній, порівняти його з теоретичним

Література

1. *Шпольский Э. В*. Атомная физика, т.2, М.: «Наука», 1974. (т.1:§76-78; т.2:§78-79).
2. *Находкін М. Г. Харченко Н. П.* Атомна фізика, Київ: ВПЦ «Київський університет», 2012. (§17.1-17.4).
3. *Білий М. У., Охріменко Б. А.* Атомна фізика. Київ: «Знання», 2009. (§7.1-7.2).
4. *Ельяшевич М. А.* Атомная и молекулярная спектроскопия, М.: ГИФМЛ, 1962. (Гл.14).
5. *Толанский С.* Спектроскопия высокой разрешающей силы. (пер. с англ.), М.: ИЛ, 1955. (*S. Tolansky*. High resolution spectroscopy. London, 1947.)

Контрольні запитання

1. Пояснити та порівняти терміни: «простий–складний», та «нормальний–аномальний» ефект Зеємана.
2. Пояснити з точки зору класичної електродинаміки розщеплення спектральних ліній в магнітному полі (ефект Зеємана за Лоренцом).
3. Гіромагнітне співвідношення. g-фактор (Ланде).
4. Отримати та пояснити формулу (8). Критерій «простий\складний» ефект Зеємана.
5. Поляризація спектральних компонент нормального зеєманівського розщеплення при спостереженні а) перпендикулярно і б) паралельно напрямку магнітного поля.
6. Ефект Зеємана у сильному полі (ефект Пашена-Бака). Критерій «сильного» поля.
7. Для чого у роботі використовується інтерферометр Фабрі-Перо? Як виглядав би спектр за відсутності інтерферометра?

Лабораторна робота №8.

ВИЗНАЧЕННЯ ЕНЕРГІЇ ДИСОЦІАЦІЇ ДВОАТОМНОЇ МОЛЕКУЛИ ЗА ЇЇ ЕЛЕКТРОННО-КОЛИВАЛЬНИМ СПЕКТРОМ ПОГЛИНАННЯ

Мета роботи: Визначити енергію дисоціації збудженого стану двохатомної молекули йоду за його електронно-коливальним спектром.

Прилади та обладнання: Кювета з парами йоду, лампа розжарювання, ртутна лампа ВСБ-2 з блоком живлення, спектрограф ДФС-13, касета для плівки, світлочутлива плівка.

Загальні відомості

Основні закономірності, які спостерігаються в атомних спектрах обумовлені структурою електронних оболонок, і, відповідно, електронними станами атомів. Здатність атомів формувати ті чи інші хімічні зв'язки, і, отже, формувати складнішу структуру – молекулу - також визначається властивостями електронних оболонок (причому зовнішніх) атомів. Але прояв властивостей молекули – це прояв властивостей *сукупності* атомів, які пов'язані хімічними зв'язками. Зрозуміло, що відмінності структур атома та молекули як сукупності атомів, проявляється і в оптичних спектрах молекули, які є суттєво складнішими у порівнянні з відносно простими лінійчатими атомними спектрами. Однією з причин такої складності є наявність у молекули більшої кількості ступенів вільності – крім електронних з'являються коливальні та обертальні ступені вільності.

При цьому велике значення має той факт, що маса ядер набагато (на 3-5 порядків) більша за масу електронів, $M \gg m$, тобто швидкості руху ядер малі порівняно зі швидкостями електронів $v_{\text{яд}} \ll v_{\text{ел}}$. Це дає можливість розділити задачу визначення енергетичних рівнів молекули на дві частини. Спочатку визначаються рівні енергії E_n системи електронів при нерухомих ядрах, розміщених на певних заданих відстанях одне від одного. Знайшовши енергії такої квантової системи, ми знаходимо *електронні терми* молекули. Причому, на відміну від атома, де енергетичні рівні (значення енергії) є певними *числами*, для молекули електронні терми є *функціями* параметрів – відстаней між ядрами в молекулі; оскільки в E_n включено і електростатичну енергію взаємодії ядер одне з одним – то E_n, по суті, – повна енергія молекули при заданому положенні ядер. Далі розглядається рух ядер при заданому електронному стані; це зводиться до того, що ядра розглядаються як частинки, що взаємодіють між собою за законом $E_n(R)$, де E_n – відповідний електронний

терм. Тобто одне складне рівняння замінюється системою двох простіших рівнянь. Таке – адіабатичне – наближення, або ж наближення Борна-Оппенгеймера, є достатньо простим і дає досить точні результати. Зрозуміло, що енергія молекули так само, як і енергія атома квантується.

Детальніше:

Адіабатичне наближення (Борна - Опенгеймера).

Молекула складається з електронів і ядер, які взаємодіють за рахунок електричних сил (кулонівська взаємодія). Сукупності координат ядер $\{R_I\}$ та електронів $\{r_i\}$ позначимо як $\boldsymbol{R}$ та $\boldsymbol{r}$. Оскільки ядра на кілька порядків важчі від електронів, то вони рухаються значно повільніше електронів. Основне наближення полягає в тому, що спочатку розраховують орбітальний рух електронів при нерухомих ядрах, а вже потім розраховують рівноважні положення ядер, характеристики обертального та коливального руху ядер і їх вплив на енергії електронів. Таким чином, $\boldsymbol{R}$ є параметром електронної задачі.

Повний гамільтоніан системи:

$$H(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r}) = T_I(\boldsymbol{R}) + T_i(\boldsymbol{r}) + V(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r}). \qquad \text{(a)}$$

де $T_I(\boldsymbol{R}) = -\sum_I \frac{\hbar^2}{2M_I}\Delta_I$ і $T_i(\boldsymbol{r}) = -\sum_i \frac{\hbar^2}{2m_i}\Delta_i$ - кінетична енергія ядер і електронів, відповідно, $V(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r})$ - потенціальна енергія взаємодії ядер з ядрами, електронів з електронами і електронів з ядрами. Власна функція гамільтоніана записується у вигляді:

$$\psi(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r}) = \varphi_n(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r})\Phi_n(\boldsymbol{R}). \qquad \text{(b)}$$

де n – набір квантових чисел (n,l,m).

В адіабатичному наближенні спочатку розв'язується рівняння Шредінгера для електронів при фіксованому $\boldsymbol{R}$, тобто нерухомих ядрах:

$$\{T_i(\boldsymbol{r}) + V(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r})\}\varphi_n(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r}) = E_n(\boldsymbol{R})\varphi_n(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r})\,. \qquad \text{(c)}$$

Далі власна функція (b) підставляється у загальне рівняння $H(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r})$. Нехтуючи похідними $\frac{\partial\varphi_n(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r})}{\partial\boldsymbol{R}}$, $\frac{\partial^2\varphi_n(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r})}{\partial\boldsymbol{R}^2}$ (адіабатичне наближення), отримаємо:

$$(T_I(\boldsymbol{R}) + E_n(\boldsymbol{R}))\Phi_n(\boldsymbol{R}) = E\,\Phi_n(\boldsymbol{R})\,. \qquad \text{(d)}$$

Знаючи електронні енергії $E_n(\boldsymbol{R})$, що даються розв'язками рівняння (c), можна розв'язати рівняння (d) і тим самим знайти повний розв'язок. Тобто, в адіабатичному наближенні рівняння $H\psi = E\psi$ зводиться до системи двох рівнянь (c) і (d).

В процесі розв'язку рівняння (d) враховується відносно повільний рух ядер; для визначення найнижчої енергії (основного стану) нехтують кінетичною енергією ядер T_I і мінімізують електронну функцію $E_n^0(\boldsymbol{R})$, вважаючи $\frac{\partial E_n^0(\boldsymbol{R})}{\partial R_I} = 0$ для всіх $\{R_I\}$. Звідси знаходять рівноважні положення ядер $\boldsymbol{R}_0$. З (b),(d) видно, що функція $E_n(\boldsymbol{R})$ відіграє роль потенціальної енергії для руху ядер, і визначається розподілом електронної густини (функція $\varphi_n(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r})$). Далі, розкладаючи в ряд функцію потенціальної енергії $E_n^0(\boldsymbol{R})$ в околі $\boldsymbol{R}_0$, враховують коливання ядер відносно положень рівноваги.

Рух молекули складається з поступального переміщення молекули

як цілого і з руху ядер відносно їхнього центру інерції. Останній можна розділити на коливальний та обертальний, – але лише при *малих* коливаннях (так що це задача про гармонічний осцилятор) відносно положення рівноваги (мінімум кривої $E_n(R)$), і «не різких» обертальних рухах (що характеризуються невеликими значеннями квантових чисел – обертального K, та коливального v – тобто для *слабо збуджених станів молекул*, що лежать відносно невисоко над основним рівнем, і неврахуванні спіна ($S = 0$). У цьому випадку у адіабатичному наближенні енергію молекули можна подати як суму енергій електронного, коливального та обертального рухів.

$$E = E_e + E_v + E_r. \quad (1)$$

Де E_e - електронна енергія ($U_n(R)$), E_v - коливальна, E_r - ротаційна (обертальна);

$$E_v = \hbar\omega(v + 1/2); \quad (2)$$

(ω – частота малих коливань відносно положення рівноваги, v – коливальне квантове число).

При таких наближеннях (формі кривої U_n) $\omega \sim 1/\sqrt{M}$; тому і інтервали між коливальними рівнями $\Delta E_v \sim \frac{1}{\sqrt{M}}$:

$$\Delta E_v = \left(\hbar\omega\left(v'' + \frac{1}{2}\right) - \hbar\omega\left(v' + \frac{1}{2}\right)\right) \sim {}^{1}/_{\sqrt{M}}. \quad (3)$$

Обертальна енергія:

$$E_r = B_m J(J + 1); \quad (4)$$

тут $B(R) = \hbar^2/2MR^2 = \hbar^2/2I$, B - *ротаційна стала*, B_m – її значення в мінімумі кривої потенціальної енергії $U_n(R)$, I - момент інерції молекули; M – маса ядра (приведена), J – число повного моменту імпульсу молекули, що складається з моменту імпульсу електронів і обертального моменту ядер.

Інтервали ΔE_r між обертальними рівнями містять в знаменнику момент інерції, тобто пропорційні $1/M$. Для інтервалів між електронними рівнями ΔE_e взагалі немає залежності від маси M. Оскільки параметром теорії двоатомних молекул є відношення $\beta = m/M$ (m - маса електрона), то $\Delta E_e >> \Delta E_v >> \Delta E_r$. Тобто коливний рух ядер розщеплює електронні терми на порівняно близькі коливальні рівні, а ці рівні, в свою чергу, розщеплені на ще більш тонку структуру обертальних рівнів.

Враховуючи це, енергію молекули можна представити у вигляді

$$E = E_{1(e)}\left(\frac{m}{M}\right)^0 + E_{2(v)}\left(\frac{m}{M}\right)^{1/2} + E_{3(r)}\left(\frac{m}{M}\right)^1.$$

В молекулі електронна енергія має порядок кількох електронвольт (*eB*), коливальна – соті долі *eB*, обертальна – тисячні-десятитисячні долі *eB*. Ця відмінність у величинах енергій проявляється в тому, що електронні, коливальні і обертальні спектри істотно різняться діапазонами довжин хвиль чи частот. Енергетичну діаграму при цьому можна представити у вигляді системи рівнів, де кожному електронному стану відповідає система коливальних рівнів, як «тонкої структури» електронного терма; в свою чергу, система обертальних рівнів є «тонкою структурою» коливального терма. Щодо молекули йоду, то, оскільки вона має досить великий момент інерції, обертальний спектр проявляється у вигляді незначної розмитості коливальних смуг, відповідно, наявність обертального спектру у нашому випадку можна не враховувати.

При переході з одного електронного стану в інший змінюються всі частини повної енергії – електронна, коливальна, обертальна:

$$\Delta E_e = (E_e'' - E_e') + (E_v'' - E_v') + (E_r'' - E_r'). \qquad (5)$$

При цьому утворюється смугастий електронно-коливально-обертальний спектр, окремі смуги в якому відповідають різним ΔE_v при заданому ΔE_e, а окремі лінії у смугах – різним ΔE_r при заданих ΔE_e та ΔE_v. Якщо ΔE_e=0, тобто електронний стан не змінюється, то маємо коливально-обертальний спектр

$$\Delta E_v = (E_v'' - E_v') + (E_r'' - E_r'). \qquad (6)$$

Якщо $\Delta E_e = 0$ і $\Delta E_v = 0$, тобто змінюється тільки обертальна енергія молекули, то виникає суто обертальний спектр молекули.

Зрозуміло, що спектри молекул значно складніші, ніж відносно прості лінійчасті спектри атомів.

При подальших наближеннях поділ енергії на незалежні коливну і обертальну частини виявляється вже неможливим, з'являються коливально-ротаційні члени, що містять одночасно K та v. Крім того, необхідно враховувати наявність спіна, а також реалізацію вищих збуджених станів. В результаті енергетична структура суттєво відрізняється від простої схеми, описаної вище, зокрема, в залежності від величини т.зв. взаємодії «спін-вісь» (молекулярний аналог атомної взаємодії «спін-орбіта», детальніше див. Ландау, т.III [1], Ельяшевич [2]).

Позначення електронних термів молекул. Для атомних термів однією з основних характеристик була класифікація за квантовим числом L повного орбітального моменту атома – (терми *S, P, D, F*...). Для молекул така класифікація, строго кажучи, некоректна – електричне поле кількох ядер, в тому числі і двох, не має центральної симетрії, що

було дуже важливим для атома (тобто наявність сферичної симетрії, яка обумовлює виконання закону збереження повного моменту імпульсу), і отже, закон збереження повного орбітального моменту $\boldsymbol{L}$ несправедливий.

Проте для двоатомних молекул має місце аксіальна симетрія поля щодо осі, що проходить через обидва ядра, – отже, виконується закон збереження проекції орбітального моменту на вісь – а, отже, можлива класифікація за значенням проекції $\boldsymbol{L}_z$ моменту. Зручним квантовим числом тепер є модуль квантового числа m_L оператора проекції моменту імпульсу – Λ=0,1,2…

Позначаються молекулярні терми відповідними грецькими літерами, тобто замість L тепер Λ, S–Σ, P–Π, D–Δ…, але треба мати на увазі, що тут Λ відповідає значенням не моменту $\boldsymbol{L}$, а проекції моменту $\boldsymbol{L}_z$. Позначення молекулярних термів за спіновим числом (повний спін електронів молекули – $\boldsymbol{S}$) такі ж, як і для атомних термів; при $\boldsymbol{S}\neq 0$ має місце виродження кратності $(2S+1)$. Приклади: терм $^3\Pi$: $S=1$, $\Lambda=1$; $^5\Delta$: $S=2$, $\Lambda=2$. Відповідно, стани окремих молекулярних електронів позначаються σ,π,δ,φ,γ… і розрізняються за значеннями молекулярного квантового числа $\lambda = |m_L|$.

Сенс такої класифікації в тому, що для молекул сферична симетрія не реалізується - як для атомів, а тому квантове число L стає «поганим» (тобто тепер воно не пов'язане з певним законом збереження); оскільки для лінійних молекул зберігається аксіальна симетрія, то її стани можна описувати квантовим числом $\lambda=|m_L|$. Для нелінійних молекул зберігається аксіальна симетрія *зв'язків*, тому стани багатоатомних молекул також можна характеризувати числом $\lambda=|m_L|$. Енергія σ-електронів (λ=0) найнижча, далі – π-електрони (λ=1), ще вища енергія у δ-електронів. Звичайно доводиться мати справу з основними та слабо збудженими станами молекул, тому важливими для розгляду є саме σ- та π-електрони. Молекулярні зв'язки є σ-зв'язками, π- чи δ-зв'язками, залежно від того, якими електронами (σ, π, δ і т.д.) вони сформовані.

Молекула йоду I_2 складається з двох атомів йоду, що мають електронну конфігурацію $(\mathrm{Kr})4d^{10}5s^25p^5$. Основним електронним термом (енергетичним рівнем) атома йоду є $^2P_{3/2}$; основним електронним термом молекули йоду – $^1\Sigma_g^+$, збудженими електронними термами для I_2 є $^3\Pi_{0u}$, $^3\Pi_{1u}$,$^1\Sigma_g^+$, та ін.

Електронно-коливальні спектри

Розв'язуючи рівняння Шредінгера для двоатомної молекули в гармонічному наближенні (тобто для гармонічного осцилятора) і для фіксованого електронного стану, ΔE_e=0, можна отримати значення енергії коливань молекули:

$$E_v = \hbar\omega(v + 1/2); \qquad (2)$$

Рівні енергії гармонічного осцилятора еквідистантні з $\Delta E_v = \hbar\omega$, а спектр складається з лише однієї лінії з центром на частоті ω – згідно правилу відбору $\Delta v = \pm 1$ для квантової системи з еквідистантними рівнями.

Однак, як виявляється, навіть у найпростішому випадку спектр двохатомної молекули не описується формулою (2). Це пов'язано з тим, що необхідно враховувати ангармонізм коливання ядер, ним знехтувати не можна. Відповідно, потенціал в рівнянні Шредінгера для цієї задачі вже не є гармонічним (тобто типу kr^2). Експериментально це проявляється, зокрема, в тому, що у наближенні ангармонічного осцилятора правило відбору тепер $\Delta v = \pm 1, \pm 2, \pm 3,\ldots$, спектр складається з багатьох ліній і більше відповідає реальному. Розв'язуючи квантовомеханічну задачу про коливальний рух молекули більш строго (з урахуванням кубічної залежності потенціальної енергії взаємодії від амплітуди коливання ядер), наприклад, методами теорії збурень, можна отримати вираз для коливальної енергії для ангармонічного осцилятора:

$$E_v = \hbar\omega\left(v + \frac{1}{2}\right) - \hbar\omega x\left(v + \frac{1}{2}\right)^2 + \hbar\omega y\left(v + \frac{1}{2}\right)^3 + \cdots \qquad (7)$$

де x, y – коефіцієнти ангармонічності, причому $y \ll x \ll 1$. Потенціальна енергія молекули вже не описуватиметься квадратичною залежністю від відстані між ядрами і не може бути представленою правильною параболою (рис. 1). Енергетичні рівні в такій системі не еквідистантні, згущуються при зростанні енергії, і при певному значенні коливального числа $v = v_{гр}$ зливаються: $\Delta E_{v_{гр}, v_{гр}+1} = 0$. Правила відбору також змінюються; тепер, взагалі кажучи, Δv при коливальному переході довільне. В загальному випадку енергія переходу між коливальним рівнями задається досить складним виразом $\Delta E_{v1,v2} = f(v_1, v_2, \omega, x, y)$.

Наближення ангармонічного осцилятора дає непогані результати, і надалі в цій роботі ми виходимо саме з цього наближення. При цьому для практичних розрахунків можна знехтувати третім доданком в (5), і користуватись формулою

$$E_v = \hbar\omega\left(v + \frac{1}{2}\right) - \hbar\omega x\left(v + \frac{1}{2}\right)^2. \quad (8)$$

Так, тоді для енергії переходу з основного стану у перший збуджений ($v_2 = 1, v_1 = 0$) можна отримати:

$$\Delta E_{v1=0,v2=1} = \hbar\omega(1 - 2x). \quad (9)$$

Тобто відстань навіть між двома найнижчими коливальними рівнями не є $\hbar\omega$, хоча і близька до цієї величини.

Примітка 1. Варто зауважити, що теоретична задача розрахунку потенціальних кривих є дуже складною – відповідно, важливими є методи побудови потенціальних кривих на основі експериментальних даних. Найбільш зручною з цієї точки зору функцією, яка задає потенціальну криву, є потенціал Морзе: $V(R) = D_e\left(1 - e^{-a(R-R_e)}\right)^2$, де R - відстань між атомами; R_e - рівноважна відстань; D_e – «глибина ями»; параметр a задає «ширину» потенціалу (чим менше a, тим ширша яма), $a = \omega\sqrt{M/2D_e} = \sqrt{k_e/2D_e}$, k_e - константа пружності в мінімумі потенціальної ями. Таким чином, $V(R)$ визначається трьома емпіричними параметрами - R_e, D_e, ω. Відстань між рівнями зменшується при наближенні енергії до енергії дисоціації. Графічно крива енергії з потенціалом Морзе мало відрізняється від кривої з ангармонічним потенціалом. Причому при достатньо точному розв'язку рівняння Шредінгера з потенціалом Морзе для енергії отримується якраз формула (8).

Енергія дисоціації знаходиться як різниця глибини ями D_e і енергії найнижчого стану (рис.1). тобто енергія дисоціації (глибина ями) D_e дещо більша, ніж справжня енергія D_0, необхідна для дисоціації, на енергію «нульових коливань» найнижчого (v=0) коливального рівня.

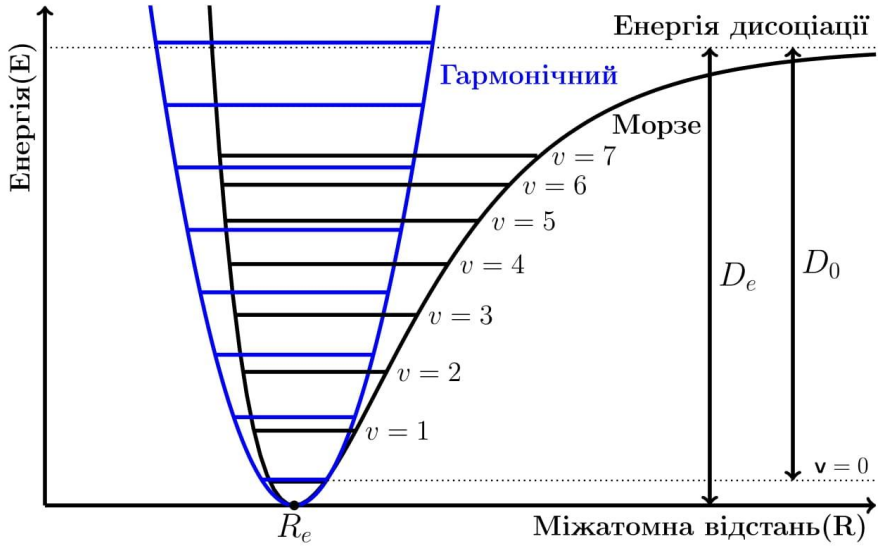


Рис.1. Потенціальні криві електронного стану в припущенні гармонічного потенціалу та потенціалу Морзе

Принцип Франка-Кондона стверджує, що електронний перехід відбувається без змін у положенні ядер молекули, тобто електронні переходи відбуваються набагато швидше, ніж молекулярні коливання, завдяки $M \gg m$. При цьому найбільш інтенсивними будуть переходи**,** при яких імпульси и координати ядер не змінюються. Переходи, при яких імпульси чи координати ядер суттєво змінюються, є малоймовірними.

У незбудженій молекулі йоду ядра знаходяться у вузькій області поблизу положення рівноваги (мінімум потенціальної кривої), середнє значення імпульсу дорівнює нулю, тобто ядра перебувають у «спокої». Інтенсивним буде перехід у такі коливальні стани збудженого електронного стану, в яких ядра також перебувають у «спокої», тобто у класичних точках повороту. Це переходи $v' = 0 \rightarrow v'' > 0$, і є "вертикальними переходами". Перехід $v' = 0 \rightarrow v'' = 0$ відбувається при помітній зміні координат ядер (власне, рівноважних положень) і є відносно малоймовірним.

Такі «вертикальні переходи» на схемі зображуються вертикальними стрілками. «Вертикальних» переходів може бути досить багато, але максимальна інтенсивність переходу реалізується, якщо значення *інтегралу перекриття* комбінуючих коливальних рівнів $\int \varphi_v''(R)\, \varphi_v'(R) dR$ досягає максимуму (це називають «*квантовомеханічним формулюванням» принципу Франка-Кондона*). Тобто для інтенсивних переходів інтеграл перекриття коливальних станів має бути якомога більшим. Ця умова реалізується якраз для вертикальних переходів, оскільки вони відбуваються, як правило, між нижнім основним коливальним станом, максимум розподілу якого знаходиться «посередині» параболи (потенціальної кривої) при $R = R_0$, та верхнім збудженим, для якого розподіл такий, що максимуми знаходяться біля класичних "точок повороту", де швидкість ядер мінімальна, тобто біля власне кривої *U(R)*; перекриття є найбільшим при близьких значеннях *R* – тобто при «вертикальних» переходах.

Також, як правило, відстань рівноважного положення для збудженого електронного стану більша, ніж для основного, тому смуга випромінювання (люмінесценції) зсунута у довгохвильову область («червоний» зсув) відносно смуги поглинання. Це є с*токсів зсув* (у цьому випадку) – тобто відмінність спектральних положень смуг поглинання і люмінесценції (див.рис.2).

Якщо потенціальні криві основного та збудженого електронних станів характеризуються *однаковими* рівноважними відстанями R_0 (таке

буває, але рідко), то найбільш інтенсивним переходом буде чисто електронний перехід ΔE_{e00}, без зміни коливального стану ($v' = 0 \rightarrow v'' = 0$). У цьому випадку стоксів зсув буде рівний нулю.

Навпаки, стоксів зсув буде тим більшим, чим більше будуть відрізнятись рівноважні відстані R_0 та R_0' основного та збудженого станів молекули.

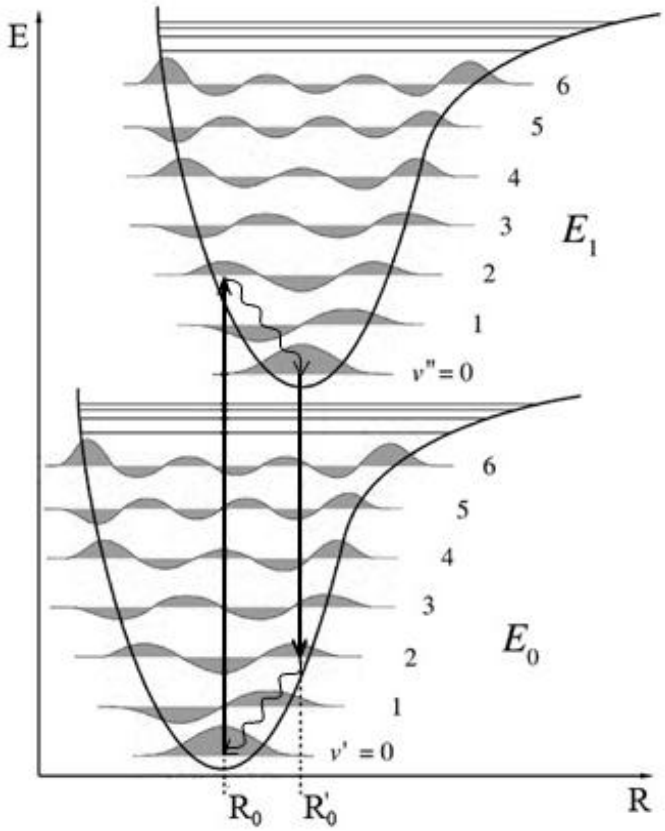


Рис.2. До Стоксового зсуву. Потенціальні криві основного (E_0) та першого збудженого (E_1) електронних станів, коливальна структура цих станів.

Таким чином, згідно з викладеним вище, електронно-коливальний спектр (поглинання) молекули можна описати формулою (10):

$$\Delta E_{ev} = \Delta E_e + \hbar\omega''\left(v'' + \frac{1}{2}\right) - \hbar\omega'' x''\left(v'' + \frac{1}{2}\right)^2 - \left[\hbar\omega'\left(v' + \frac{1}{2}\right) - \hbar\omega' x'\left(v' + \frac{1}{2}\right)^2\right]. \quad (10)$$

Ця формула дає всі можливі переходи між різними коливальними рівнями двох електронних станів. У ній ΔE_{ev} – енергія електронно-коливального («*вібронного*») переходу, ΔE_e – енергія суто електронного переходу, тобто переходу з мінімуму потенціальної кривої незбудженого стану в мінімум збудженого; ω'', x'' і ω', x' - коливальні частоти і константи ангармонізму збудженого та незбудженого електронного стану молекули, відповідно. Коливальний квант $\hbar\omega$ молекули йоду за порядком величини приблизно рівний ~200 см$^{-1}$, енергії ж електронних

переходів порядку 15-20·10^3 см$^{-1}$, тому на рисунках енергетичні масштаби, очевидно, не дотримано.

Значення параметрів ω, x, взагалі кажучи, різні для різних електронних станів, оскільки, як правило, для збуджених станів зв'язок слабший, рівноважна відстань між ядрами більша, «яма» потенціальної енергії ширша. Відповідно, частота коливань у збуджених електронних станах нижча, ніж в основному. Тому, звичайно $\omega'' < \omega'$, відповідно, відстань між коливальними рівнями у збудженому електронного стану менша.

Формулу (10) можна переписати у вигляді

$$\Delta E_{ev} = \Delta E_e + \left[\left(\frac{1}{2}\hbar\omega'' - \frac{1}{4}\hbar\omega''x''\right) - \left(\frac{1}{2}\hbar\omega' - \frac{1}{4}\hbar\omega'x'\right)\right] + \\ +(\hbar\omega''v'' - \hbar\omega''x''v''^2) - (\hbar\omega'v' - \hbar\omega'x'v'^2) = \\ = \Delta E_{e00} + (\hbar\omega''v'' - \hbar\omega''x''v''^2) - (\hbar\omega'v' - \hbar\omega'x'v'^2). \quad (11)$$

де член

$$\Delta E_{e00} = \Delta E_e + \left[\left(\frac{1}{2}\hbar\omega'' - \frac{1}{4}\hbar\omega''x''\right) - \left(\frac{1}{2}\hbar\omega' - \frac{1}{4}\hbar\omega'x'\right)\right]. \quad (12)$$

Не залежить від v' і v'', тобто він є власною частотою переходу $(n' = 1,\ v' = 0 \leftrightarrow\ n'' = 2,\ v'' = 0)$ з врахуванням енергії нульових коливань, і якийобумовлює так звану 0↔0 смугу. Для молекули йоду частота цього переходу, визначена за спектрами фотолюмінесценції, становить 15979.7 см$^{-1}$ (червона область спектру). На практиці можна знехтувати різницею енергій нульових коливань незбудженого $(n' = 1)$ і збудженого $(n'' = 2)$ електронних станів молекули, так що $\Delta E_{e00} = \Delta E_e$.

Слід зауважити, що при достатньо низьких температурах, в тому числі і при кімнатній, більшість молекул газу знаходиться на найнижчому коливальному рівні з $v' = 0$ основного електронного стану. Тому при поглинанні при кімнатній температурі мають переважати переходи із вказаного нижнього коливального рівня $(v' = 0)$ основного електронного стану на різні коливальні рівні $(v'' = 0,1,2\ \ldots)$ збудженого електронного стану. Таким чином, виникає серія смуг, яка називається *нульовою поперечною серією Деландра*. Разом з тим не виключена можливість появи в спектрі поглинання кількох серій смуг. Так, наприклад, для парів йоду 36% молекул при кімнатній температурі знаходиться в збудженому стані $v' = 1$, оскільки $kT \sim \hbar\omega$, тому в спектрі поглинання з'являється і друга серія смуг $(v' = 1 \rightarrow v'' = 0,1,2,3\ \ldots)$. Ці серії частково накладаються.

Оскільки переходи в нульовій серії відбуваються з нульового

коливального рівня $v' = 0$ основного електронного стану в різні коливальні стани $v'' = 0,1,2 \ldots$ збудженого електронного стану, то в електронному спектрі поглинання молекули йоду проявляється коливальна структура збудженого електронного стану. Енергії переходів нульової серії, знехтувавши відмінністю між ω'' та ω', а також між x'' та x' можна описати формулою

$$\Delta E_{e0v} = \Delta E_{e00} + \hbar\omega'' v''(1 - x'') - \hbar\omega'' x'' v''^2 \,. \qquad (13)$$

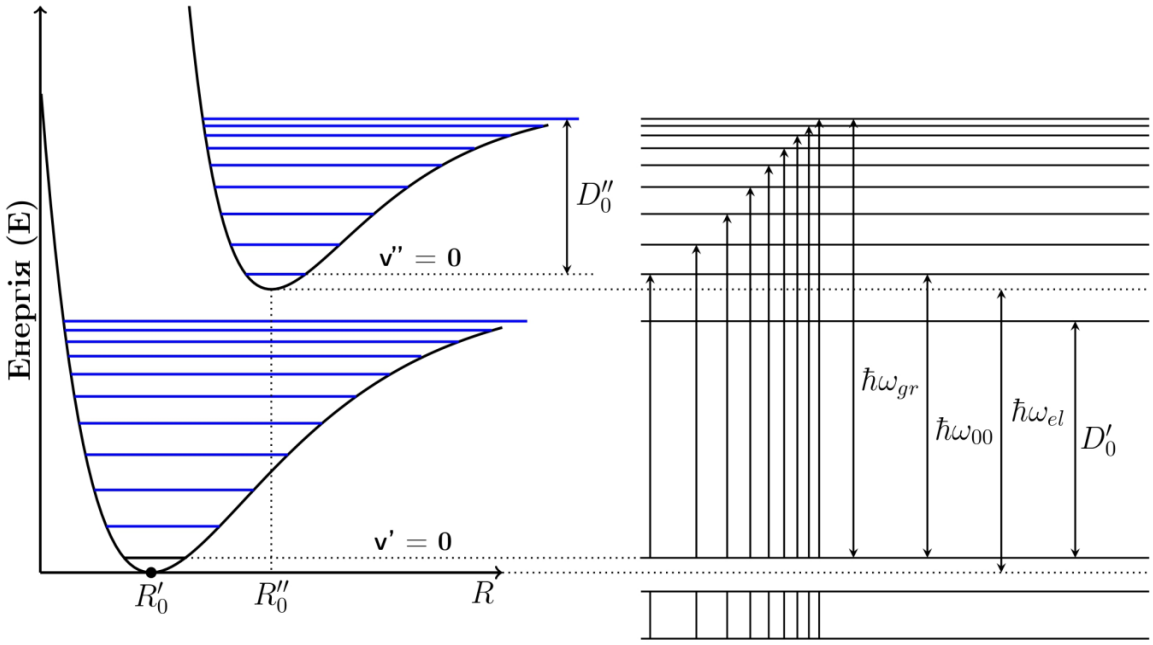


Рис.3. Електронно-коливальні переходи між основним та першим збудженим електронними станами.

Із збільшенням коливального квантового числа v відстань між сусідніми смугами певної серії монотонно зменшується, наближаючись до нуля. Відповідно, серії дискретних смуг поглинання згущуються в бік коротких хвиль і переходять у суцільний спектр поглинання. Цій межі відповідає в області кожної системи смуг максимальне (граничне) квантове число $v_{гр}$. У спектрі поглинання смуги поступово сходяться до межі дисоціації верхнього електронного стану, за якою починається суцільний (неперервний) спектр поглинання, який відповідає фотодисоціації молекули.

Межі сходження дискретного спектра відповідає енергія $\Delta E_{\text{гр}} = \hbar\omega_{\text{гр}}$. Згущення коливальних рівнів при наближенні до цієї межі (рівень дисоціації) пов'язане із загальною властивістю рівнів енергії: вони розміщаються тим тісніше, чим ширша потенціальна яма. При цьому суттєвим є сам закон наближення кривої потенціальної

енергії до границі, оскільки від характеру цього закону залежить загальна кількість коливальних енергетичних рівнів для даної молекули. Так, якщо потенціальна енергія швидко прямує до границі, то число рівнів скінченне і відносно невелике; наприклад, для молекули водню їх усього 14.

Визначення енергії дисоціації двоатомної молекули (йоду).

1. Спектроскопічний метод.

Наявність у 0-ій серії Деландра чіткої межі сходження смуг у спектрі поглинання дозволяє визначити енергію дисоціації двохатомної молекули спектроскопічним методом.

Нехай D_0'' - енергія дисоціації збудженого електронного стану, тоді:

$$\Delta E_{ev\text{гр}} = \Delta E_{e00} + D_0''. \quad (14)$$

Таким чином, якщо відоме значення $\hbar\omega_e$, то, знаючи $\hbar\omega_{\text{гр}}$, можна визначити енергію дисоціації молекули у першому збудженому електронному стані за формулою (при наближенні $\Delta E_{e00} = \Delta E_e$):

$$D_0'' = \Delta E_{ev\text{гр}} - \Delta E_e. \quad (15)$$

або

$$D_0'' = \hbar\omega_{\text{гр}} - \hbar\omega_{00}. \quad (16)$$

Для молекули йоду частота 0–0 переходу ω_{00}, виміряна за спектрами фотолюмінесценції, дорівнює 15979.7 см$^{-1}$.

2. Метод екстраполяції.

Енергію дисоціації двохатомної молекули можна визначити і іншим методом, а саме методом графічної екстраполяції. Суть цього наближеного методу полягає в наступному.

З формули (8)

$$E_v = \hbar\omega\left(v + \frac{1}{2}\right) - \hbar\omega x\left(v + \frac{1}{2}\right)^2 \quad (8)$$

можна отримати вираз для енергії переходу (або ж *«перших різниць*») між сусідніми коливальними рівнями

$$\Delta_1 E_v = E_{v+1} - E_v = \hbar\omega[1 - 2x(v+1)]. \quad (17)$$

Зокрема, енергія переходу з основного стану у перший збуджений ($v = 0 \to v = 1$) становить величину (і це є максимальна «перша різниця»):

$$\Delta_1 E_{01} = E_1 - E_0 = \hbar\omega[1 - 2x]. \quad (18)$$

Для різниць між "першими різницями", тобто «других різниць» енергії можна отримати вираз

$$\Delta_2 E_v = \Delta_1 E_{v,v-1} - \Delta_1 E_{v+1,v} = 2\hbar\omega x\,. \quad (19)$$

Із формул (17,19) видно, що перші різниці $\Delta_1 E_v$ лінійно зменшуються зі зростанням числа v, а другі різниці $\Delta_2 E_v$ залишаються сталими. Перші різниці між енергіями (частотами, хвильовими числами) електронних переходів для нульової серії визначають коливальні енергії (частоти) молекули у збудженому електронному стані. Ці енергії (частоти) зменшуються зі збільшенням квантового числа v'' відповідно до формули (17). Другі різниці дають можливість визначити експериментально величину $\omega'' x''$.

Зазначимо, що залежність $\Delta_1 E_{v,v+1}(v)$ лінійна, згідно формул (8),(17), де у виразі для E_v залишено лише два доданки. При роботі з якісною спектрограмою, на якій зафіксовано велике число електронно-коливальних переходів, можна помітити, що залежність $\Delta_1 E_{v,v+1}(v)$ при великих значеннях v починає відхилятися від прямої у міру зростання вкладів членів третього і четвертого ступеня. Очевидно, це дозволяє визначити необхідні параметри більш точно, проте в цій роботі таке завдання не ставиться.

Для максимально можливого граничного квантового числа $v_{\text{гр}}$ «перша різниця» $\Delta_1 E = 0$, що дає $v_{\text{гр}} = \frac{1}{2x} - 1$, або ж з достатньою точністю $v_{\text{гр}} = \frac{1}{2x}$, оскільки $x \ll 1$.

Екстраполюючи графічну залежність $\Delta_1 E_{v,v+1}(v)$ на $v = -1$, і обчисливши середнє значення других різниць, можна отримати величину коливального кванта $\hbar\omega$:

$$\hbar\omega = \Delta_1 E_{01} + \langle \Delta_2 E_v \rangle = \hbar\omega[1 - 2x] + 2\hbar\omega x = \hbar\omega. \qquad (20)$$

а за допомогою формули (8) для переходу $v'' = 0 \rightarrow v'' = v''_{\text{гр}}$, підставляючи значення $v'' = v''_{\text{гр}} = \frac{1}{2x''}$ можна отримати вираз для енергії дисоціації збудженого стану

$$D''_0 = \frac{\hbar\omega''}{4x''} = \frac{\hbar\omega''^2}{4x''\omega''} \quad . \qquad (21)$$

Зазначимо, що визначити $v_{\text{гр}}$ можна графічно, з тієї ж залежності $\Delta_1 E_{v,v+1}(v)$, екстраполюючи її в сторону більших чисел v до $\Delta_1 E_v = 0$, - нульове значення першої різниці реалізується при $v_{\text{гр}}$.

Зі збільшенням коливального квантового числа v відстані між коливальними рівнями зменшуються і при деякому граничному квантовому числі $v_{\text{гр}}$ молекула дисоціює. Енергія молекули при $v_{\text{гр}}$ відповідає енергії дисоціації молекули. Причому реальну енергію дисоціації D_0 потрібно відраховувати не від мінімуму потенціальної

енергії, а від рівня $v = 0$ – основного коливального стану молекули, – для якого (з формули (8) при $v = 0$):

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}\left(1 - \frac{x}{2}\right), \qquad (22)$$

(у випадку гармонічного осцилятора, найменша енергія $E_0 = \hbar\omega/2$).

Завдання і хід виконання

Після попереднього вивчення оптичної схеми спектрографа ДФС-13, який використовується у даній роботі, а також усієї установки, завдання виконується у такій послідовності:

1. З'юстувати оптичну систему установки так, щоб при візуальному спостереженні суцільний спектр був достатньо яскравим у всій видимій області.

2. Сфотографувати на плівку спектр поглинання парів йоду і спектр випромінювання ртуті (реперний), який необхідний для визначення частот ліній поглинання йоду. Для цього світло від джерела реперного спектра (ртутна лампа ВСБ-2-Hg) за допомогою поворотного дзеркала спрямувати на щілину спектрографа. Діафрагмою Гартмана закрити середину щілини спектрографа і сфотографувати спектр. Потім, не зміщуючи і не закриваючи касету, діафрагму встановити так, щоб була відкрита середина щілини, зняти (змістити) дзеркало і направити на щілину світло від лампи розжарювання (галогенова з W-спіраллю), яка дає досить інтенсивний практично неперервний спектр випромінювання у видимій області, і яке пройшло через кювету, заповнену парами йоду I_2. Умови фотографування спектрів зазначені на робочому місці.

3. Оскільки повністю вся серія Деландра на плівці не відображається, потрібно знайти точку відліку (репер) для подальшої ідентифікації ліній поглинання відповідної серії Деландра. За таку реперну точку зручно прийняти положення 5483 А (близько до положення зеленої лінії ртуті), яка відповідає коливальному числу $v'' = 25$ нульової серії Деландра і $v'' \simeq 28$ першої серії (положення уточнити обчисленнями). (рис.4).

Примітка 2. Оскільки переходи 0-серії відбуваються з початкового стану з меншою, порівняно з відповідним станом для 1-серії, енергією, то перехід у стан $v'' = 0$, що є першою лінією в серії, для 0-серії відповідає більшій різниці енергій – а значить коротшій довжині хвилі. Оскільки крок смуг поглинання для початків серій практично однаковий та монотонно зменшується в бік коротких хвиль з наближенням до межі сходження, то в одному і тому ж місці плівки крок 0-серії буде більшим за крок 1-серії,

оскільки початок 0-серії зміщений в бік коротших хвиль порівняно з початком 1-серії. За цими ознаками можна досить легко ідентифікувати на плівці кожну з цих двох серій.

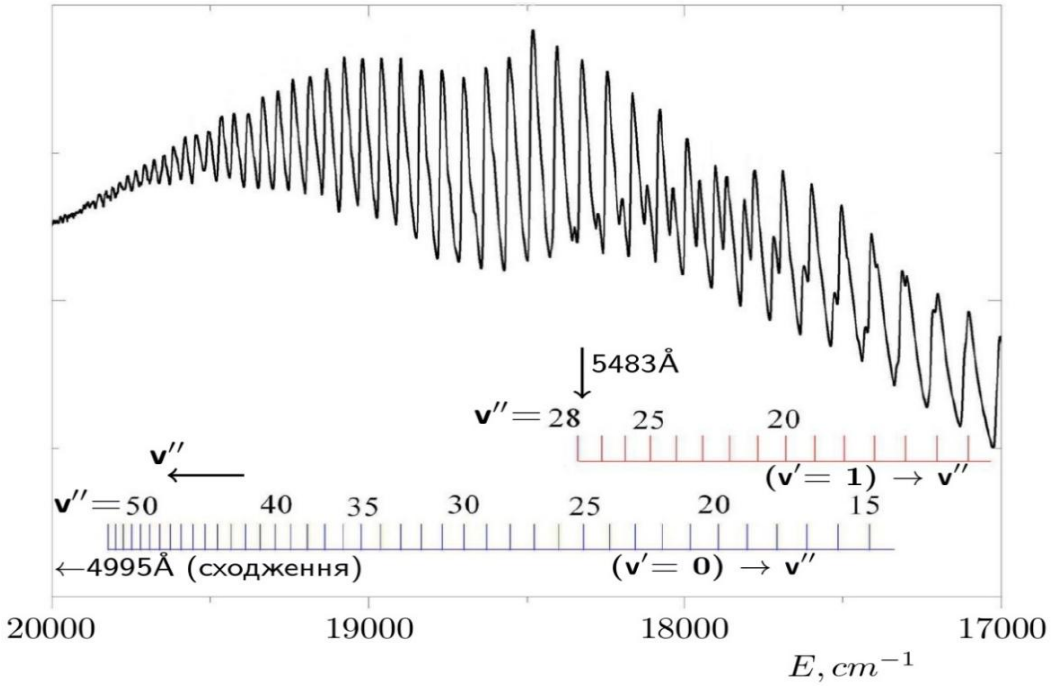


Рис.4. Нульова та перша серії Деландра.

Далі за стандартною методикою, описаною в Додатку, визначити довжини хвиль (і хвильові числа) ліній поглинання для нульової та першої серій Деландра.

4. За допомогою формул (17,19) обчислити перші та другі різниці, обчислені дані з п.3,4 занести до таблиці для обох (нульової та першої) серій Деландра.

0-Серія (1-серія) Деландра					
№	x, пксл	λ, Å	ν, см$^{-1}$	$\Delta_1\nu$	$\Delta_2\nu$
репер					
0					
1					
…					

5. Екстраполюючи залежності $\Delta_1 E_{v,v+1}$ на $v = -1$, визначити величини коливальних частот ω', ω''для обох серій. З усередненого значення других різниць визначити величину параметра $\omega'' x''$, і за формулою (21) визначити енергію дисоціації D_0'' першого збудженого електронного стану $^3\Pi_{0u}$ молекули йоду. Також визначити графічно $v_{\text{гр}}$.

6. Визначити енергію дисоціації D_0'' молекули йоду в збудженому електронному стані спектроскопічним методом. Для цього знайти якомога точніше граничну частоту, що відповідає границі переходу

смугастого спектра в суцільний, та оцінити енергію дисоціації D_0'' молекули йоду в збудженому електронному стані за формулою (16). Порівняти результати пп.5,6 між собою, а також з літературними даними.

Обрахунки зручніше проводити в хвильових числах, а не в енергіях, оскільки, наприклад, другі різниці є величинами порядку 1-3 $см^{-1}$.

(1 $см^{-1}$ = 1,240·10^{-4} еВ).

Література:

[1]. *Л. Ландау, Е. Лившиц*. Квантовая механика. Т.III, М.: «Наука», 1974. (Гл.XI, XIII).

[2]. *Ельяшевич М. А.* Атомная и молекулярная спектроскопия, М.: ГИФМЛ, 1962. (Ч.III, Молекулярная спектроскопия).

[3]. *Білий М. У., Охріменко Б. А.* Атомна фізика. Київ: «Знання», 2009. (Р.9).

[4]. *Находкін М. Г. Харченко Н. П.* Атомна фізика, Київ: ВПЦ «Київський університет», 2012. (Гл.18, 19).

Контрольні запитання.

1. Що таке молекула? Типи молекулярного зв'язку: іонний, ковалентний, водневий. Природа іонного та ковалентного зв'язку. Що спільного та відмінного між іонним та ковалентним зв'язком? Природа обмінної взаємодії.
2. Обертальні спектри молекул. Обертальна енергія двоатомної молекули в моделях жорсткого та нежорсткого ротатора.
3. Спектр енергій квантового гармонічного осцилятора. Коливальне квантове число. Нульова енергія осцилятора. Правило відбору.
4. Ангармонічний осцилятор. Потенціал Морзе. Енергетичний спектр такого осцилятора. Сталі ангармонічності.
5. Коливальні спектри молекул.
6. Електронно-коливальні спектри. Правила відбору.
7. Принцип Франка-Кондона. Квантовомеханічне формулювання. Інтеграл перекриття. Парабола Кондона. Стоксів зсув.
8. Поздовжні та поперечні серії Деландра. Які серії спостерігаються в даній роботі? Схема переходів для цих серій.
9. Дисоціація. Енергія дисоціації двохатомної молекули. Як її можна визначити експериментально? Для якого стану молекули енергія дисоціації більша, для основного чи для збудженого? Чому?
10. У чому полягає відмінність спектра поглинання речовини від її спектра випромінювання? Які умови потрібно створити для спостереження таких спектрів?

Додаток

1.Загальна інформація про спектри

Спектри, які досліджують в практикумі з атомної фізики, можна поділити на два типи: *спектри поглинання* та *спектри випромінювання.* Спектром випромінювання (поглинання, відбивання, пропускання) називається повна сукупність монохроматичних хвиль з відображенням їх інтенсивностей, що випромінюються (поглинаються, відбиваються, пропускаються) речовиною. Описуватись спектри можуть як графічно, так і аналітично чи таблично. Зазвичай, це залежність інтенсивності або пов'язаної з нею величини від частоти (або довжини хвилі чи хвильового числа).

Спектри випромінювання, як і спектри поглинання, в свою чергу поділяються на три типи: ***лінійчаті, смугасті*** та ***суцільні (неперервні)*** (Рис.1).

Лінійчаті спектри складаються окремих чітких ліній, які відповідають дискретним значенням λ (або хвильових чисел, або частот), зазвичай такі спектри властиві окремим атомам. Основні закономірності, які спостерігаються в атомних спектрах обумовлені структурою електронних оболонок, і, відповідно, електронними станами атомів. Вид лінії (вертикальна, горизонтальна чи інше) також залежить від виду щілини, адже лінія, яку ми бачимо на плівці (через спектрометр) — це зображення щілини спектрометра.

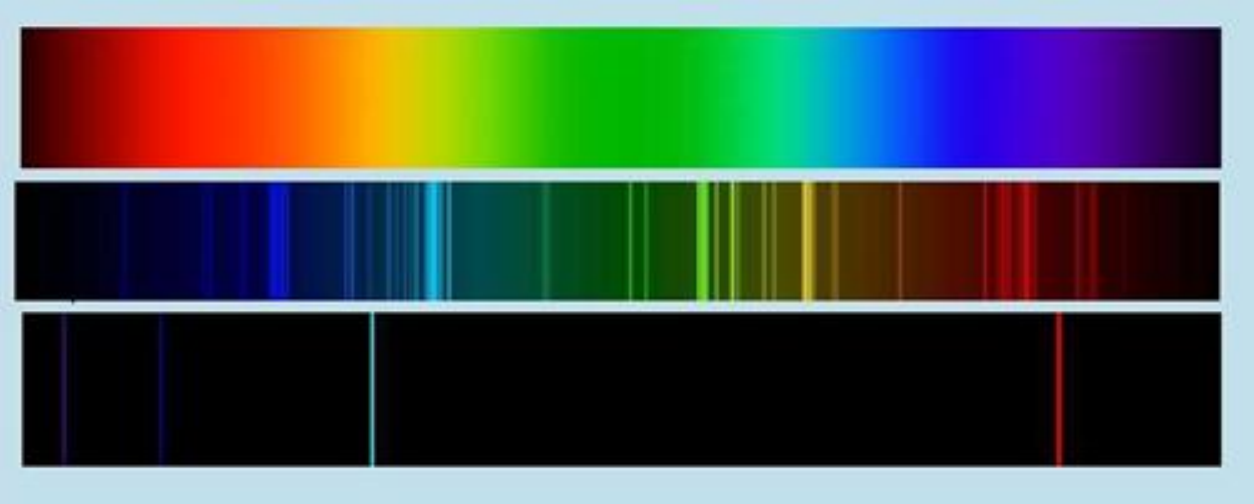


Рис.1. Види спектрів. Згори вниз: неперервний, смугастий і лінійчастий спектри.

Спектральні лінії вдається об'єднувати в окремі групи, у яких частоти (або довжини хвиль, або хвильові числа) та інтенсивності мають певні закономірності. Такі сукупності ліній називаються

спектральними серіями. Кожна серія починається з головної найбільш довгохвильової лінії. Головна лінія серії здебільшого найбільш інтенсивна лінія серії. Серія закінчується границею серії $\lambda_{гр}$ із найкоротшою довжиною хвилі, до якої збігаються спектральні лінії серії. За межами границі кожної серії в напрямку збільшення хвильових чисел (енергій) розташована зона суцільного спектра.

Кожний атом має свій характерний набір спектральних ліній. Це свідчить, що спектральні закономірності тісно зв'язані із закономірностями будови атомів, і тому спектри використовуються на практиці для аналізу атомного складу речовини.

Найпростішими лінійчастими спектрами є спектри атома водню або водневоподібних газів, які описуються спектральними закономірностями, і були вперше встановлені емпірично. Ці закономірності називають *комбінаційним принципом Рідберга-Рітца*. Детально спектри водневоподібних атомів вивчається в роботах №4-5.

Молекулярні спектри принципово відрізняються від лінійчастих атомних спектрів. Річ у тім, що в молекулі існують одночасно три види рухів: електронний, коливальний і обертальний. Внаслідок цього спектри молекул значно складніші, ніж спектри атомів. У видимій і ультрафіолетовій областях замість лінійчастих спектрів з'являються *смугасті спектри*, що складаються з окремих більш-менш широких смуг, а самі смуги складаються з окремих ліній. Це так звані електронні спектри, пов'язані з одночасною зміною як коливального і обертального, так і електронного стану молекули. У близькій інфрачервоній області знаходяться коливальні спектри молекули, які також складаються з окремих смуг. У далекій інфрачервоній і мікрохвильовій областях розміщені лінійчасті обертальні спектри молекул. В цьому практикумі молекулярні спектри вивчається на прикладі спектру ,поглинання молекули йоду (I_2) в лабораторній роботі №8.

Суцільні (*неперервні*) спектри характерні для рідин та твердих тіл. Зокрема, всі нагріті тіла, згідно закону Стефана-Больцмана, випромінюють неперервний спектр. Детальніше випромінювання нагрітих тіл вивчається в роботі №2.

Для отримання спектрів випромінювання в даному лабораторному практикумі використовуються лампи певних типів (ртутна лампа, лампа розжарювання, воднево-дейтерієва лампа тощо). Світло від лампи фокусується за допомогою лінз на щілину

спектрографа. Для запису двох спектрів на одну плівку в схемі установки використовують діафрагму Гартмана та дзеркало.

Для реєстрації спектрів поглинання необхідно використовувати джерело з близьким до суцільного спектром випромінювання. На шляху поширення світла від такого джерела розташовують речовину, для якої потрібно отримати спектр поглинання. В спектрографі на фоні неперервного спектру випромінювання спостерігаються чорні лінії досліджуваного спектру поглинання.

2.Методика реєстрації оптичних спектрів.

Лабораторні роботи №4-8 виконуються з використанням спектрографів різного типу (ИСП-51, КСА-1, ДФС-13) і вимагають фотографування на плівку спектрів поглинання та/або випромінювання атомів чи молекул. Схеми спектрографів та їхні характеристики наведено далі, в п.2.

Після фотографування спектрів плівку необхідно обробити певним чином (процеси проявки та фіксації) і далі, згідно завдань до конкретної роботи, визначити з плівки необхідні параметри. Для проявлення та закріплення (фіксації) плівки в практикумі готуються спеціальні розчини. Час проявки та закріплення плівки залежить від чутливості плівки, якості проявника та температури розчинів. Відповідні параметри наведено в таблиці, яка знаходиться в практикумі.

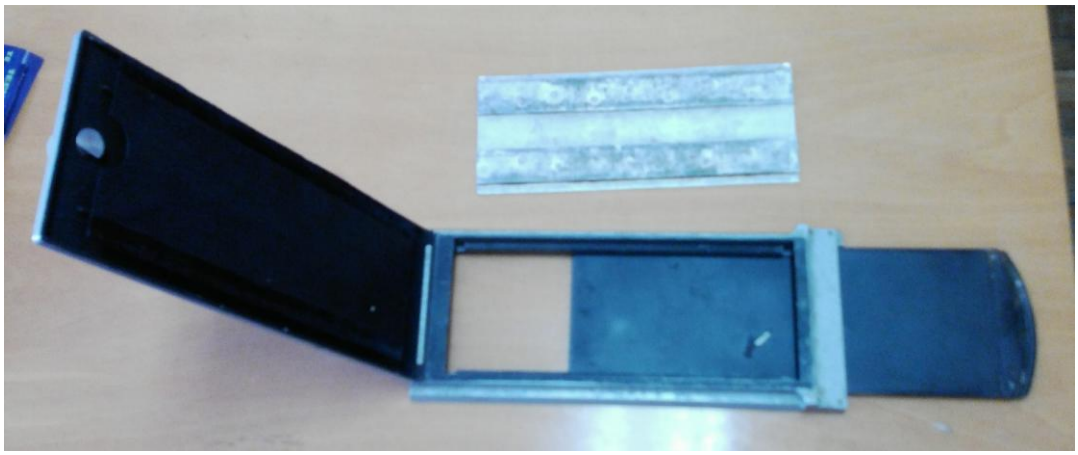


Фото 1: Касета для плівки.

Для фотографування спектрів досліджуваних речовин в практикумі використовуються спеціальні касети, в які заправляється плівка (Фото1). Плівка розташовується в касеті таким чином, щоб емульсія (чутлива поверхня плівки), яка нанесена на внутрішню сторону плівки, скрученої в рулон, знаходилася з боку рухомої частини

(«шторки») касети. Заправлена і закрита касета фіксується в спектрографі спеціальними затискачами (Фото 2).

Заправлення плівки в касету та проявку плівки необхідно виконувати в спеціальних світлонепроникних боксах. Перед початком роботи з плівкою рекомендується потренуватися проводити всі ці операції при світлі з «модельною» плівкою



Фото 2. Спектрограф ДФС-13. Загальний вигляд.

Зафіксована в спектрографі касета готова для реєстрації спектрів. Далі шторка касети майже повністю висувається, але таким чином, щоб вона ще залишалася в касеті і не допускала попадання світла на плівку через щілини в касеті.. Після цього затвор спектрографа відкривають і фіксують час початку експозиції. Час експозиції спектру залежить від чутливості плівки, ширини щілини та типу лампи, яка використовується в роботі. Конкретний час експозиції для кожної лабораторної роботи також наведено в таблиці, яка є в лабораторії.

Експериментатор має вибрати оптимальну ширину вхідної щілини приладу. Надто широка щілина призводить до розширення спектральних ліній, що ускладнює розрізнення близько розташованих ліній через їх можливе перекриття. Натомість занадто вузька щілина зменшує інтенсивність світлового потоку настільки, що слабкі спектральні лінії можуть повністю зникнути.

Максимальна світлосила спектрального приладу досягається за умови так званої «нормальної» ширини щілини. Ця ширина відповідає умові, коли нульовий максимум дифракційної картини, створеної вхідною щілиною, повністю покриває перший оптичний елемент (дзеркало, об"єктив, гратку, тощо). У цьому режимі світловий потік максимально ефективно використовується всіма компонентами приладу, і прилад вважається повністю "заповнений світлом".

На практиці оптимальна ширина щілини встановлюється експериментально під час візуального спостереження за формою спектральних ліній. По мірі зменшенні ширини щілини, лінії спочатку стають вужчими а при подальшому зменшенні - тьмянішими. В момент коли лінії перестають звужуватися, тоді і треба зупинити регулювання.

Оптимальна ширина щілини для кожної роботи різна, звичайний діапазон ширин – 20-100 *мкм*. Регулюється ширина щілини мікрометричним гвинтом з відліковим барабаном.

На час налаштування освітлення щілину можна розкрити ширше, проте важливо не забути її знову зменшити до необхідного значення перед фотографуванням.

Діафрагма Гартмана

В роботах 4,5,6 та 8 необхідно сфотографувати на одну плівку два спектри: спектр досліджуваної речовини та спектр порівняння («реперний»). Щоб спектри різних зразків не накладалися (часто це унеможливлює ідентифікацію спектральних ліній), використовується *діафрагма Гартмана* (Рис.2), яку встановлюють перед вхідною щілиною

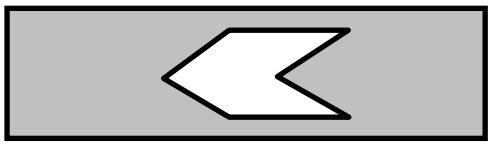
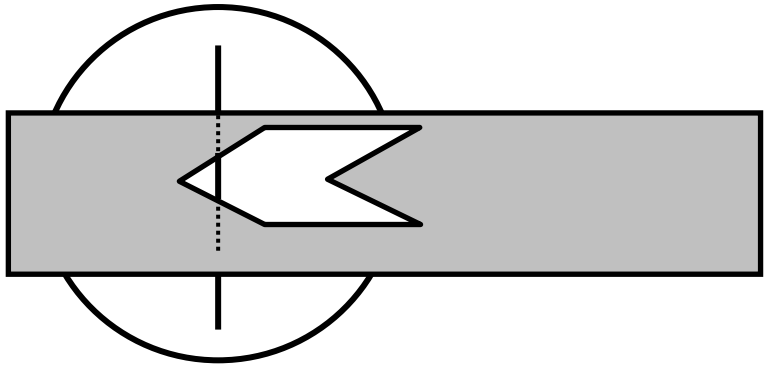


Рис.2. Діафрагма Гартмана

спектрографа. Діафрагму Гартмана можна переміщувати в горизонтальному напрямі перпендикулярно до щілини, і, в залежності від положення діафрагми відкривати доступ світла до різних ділянок щілини. Це дає можливість фотографувати досліджуваний і еталонний спектр на одну плівку без зміни положення касети, що є дуже важливим для збереження взаємного положення спектрів. Звичайно (не завжди) діафрагму розміщують таким чином, щоб при записі спектру досліджуваної речовини світло попадало на середню частину щілини, а при записі спектру порівняння – на крайні частини щілини (Рис.3а,б). Так одержується потрібна спектрограма, оточена з обох боків спектрограмою порівняння.

а)



б)

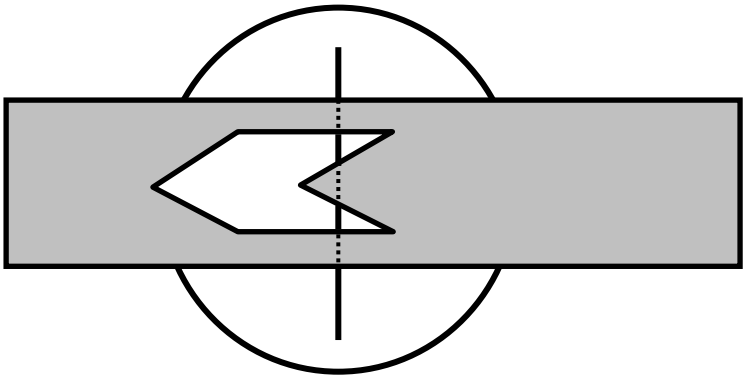


Рис.3. Діафрагма Гартмана (“ластівчин хвіст ”). Положення для освітлення різних частин вхідної щілини спектрографа.

3. Обробка спектрів. Визначення довжин хвиль досліджуваної речовини.

Після проявлення, закріплення, ретельного промивання та просушування плівки, проводять оцифрування плівок та вимірювання положень ліній в спектрограмі. Вимірювання положень ліній на плівках можна виконувати за допомогою програмних засобів з лінійкою та за допомогою вимірювального мікроскопа-компаратора Мир-12. При роботі зі сканованою плівкою розташування ліній доцільно визначати в пікселях.

Лінії в спектрі порівняння (еталонному спектрі), так звані «нормалі», слід обирати по обидва боки та якомога ближче до досліджуваних ліній. Якщо відстань між правою та лівою «нормалями» не перевищує ~40 Å, то для визначення довжини хвилі досліджуваної лінії можна використовувати лінійну інтерполяцію:

$$\lambda^x = \lambda_1 + \frac{\lambda_2 - \lambda_1}{l_2 - l_1}(l_x - l_1)$$

або

$$\lambda^x = \lambda_2 - \frac{\lambda_2 - \lambda_1}{l_2 - l_1}(l_2 - l_x),$$

де λ^x – довжина хвилі досліджуваної лінії, λ_1 та λ_2 – довжини хвиль лівої та правої реперних ліній в спектрі порівняння, l_x, l_1 та l_2 – положення досліджуваної та реперних (ототожнених) ліній на фотоплвці.

Якщо положення ліній задано в одиницях довжини (відповідає реальному розташуванню ліній на плівці без будь-якого масштабування), то коефіцієнт $\frac{\lambda_2-\lambda_1}{l_2-l_1}$ буде середньою оберненою лінійною дисперсією $d\lambda/\, dl$.

Для призмових приладів значення оберненої лінійної дисперсії є функцією довжини хвилі. Тому у випадку відсутності близьких до досліджуваної лінії «нормалей» (реперів) в спектрі порівняння слід користуватися інтерполяційними формулами другого порядку з використанням принаймні трьох ліній реперів.

Для більш точного визначення положення ліній в спектрі необхідно побудувати графік залежності $\lambda_i\,(l_i)$ для всіх реперних ліній в спектрі порівняння, після чого інтерполювати отриману залежнсть поліномом або степеневою функцією і за перетином даної функції зі значеннями l_x для положення ліній досліджуваного спектру визначити необхідні довжини хвиль λ^x.

4.Спектральні прилади.

Спектрограф КСА-1

КСА-1 - спектрограф кварцево-скляний, автоколімаційного типу; в практикумі використовується варіант із скляною оптикою (робочий діапазон - 3600-6000Å).

Прилад має високу обернену дисперсію та, відповідно, роздільну здатність. Загальна реальна довжина спектру 670 *мм*. На плівці довжиною 24 *см* (довжина касети) вміщується лише частина видимого спектра. Для зйомки всього діапазону видимого світла необхідно зробити три знімки, при цьому необхідно змінювати налаштування приладу: варіювати кут повороту диспергуючої призми, кут нахилу касети, відстань між об'єктивом та фокальною площиною. Ці переміщення відбуваються одночасно автоматично за допомогою рукоятки барабана зміни довжин хвиль. Під час виконання лабораторної роботи досліджується лише певна частина видимого спектру; спектрограф можна налаштувати так, що потрібний фрагмент спектру буде вміщуватися на один знімок.

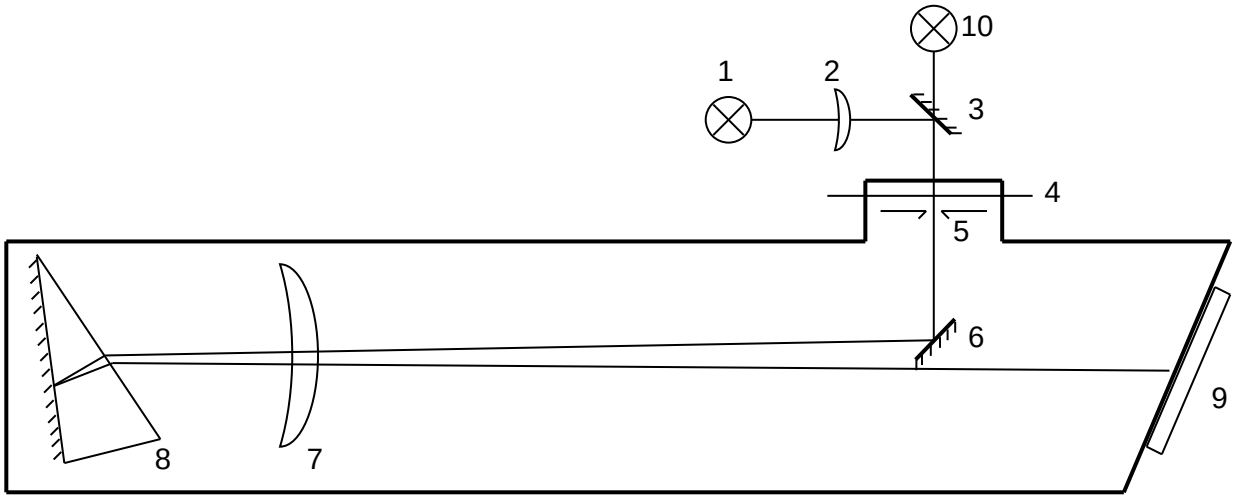


Рис 4. Оптична схема спектрографа КСА-1

Промінь світла від джерела 1 проходить через конденсорну лінзу 2 і за допомогою дзеркала 3 проектується на вхідну щілину 5 спектрографа. Діафрагма Гартмана 4 дозволяє обмежити певну ділянку щілини. Світло, що пройшло через щілину, відбивається від дзеркала 6, проходить через об'єктив 7 паралельним пучком, падає на призму 8, відбивається від її дзеркальної грані, проходить через призму вдруге, фокусується об'єктивом 7 в фокальній площині 9, формуючи спектр досліджуваного джерела.

За вхідною щілиною встановлений механічний затвор (на схемі не показано), який відкривається і закривається за допомогою ручки "затвор".

Обернена дисперсія спектрографа нерівномірна: вона менша в ультрафіолетової частині спектру і більша в червоній. Приблизні значення оберненої дисперсії наведені в Таблиці 1.

Таблиця 1. Обернена дисперсія спектрографа КСА-1

Довжина хвилі, нм	Обернена дисперсія, нм/мм
350	0.36
400	0.55
500	1.20
600	2.15

Спектрограф ДФС-13

Для отримання високої дисперсії в широкому діапазоні спектру використовуються спектрографи на основі дифракційних ґраток, які забезпечують практично однакову дисперсію по всьому робочому діапазону. Спектрограф ДФС-13 має фокусну відстань дзеркала 4000мм.

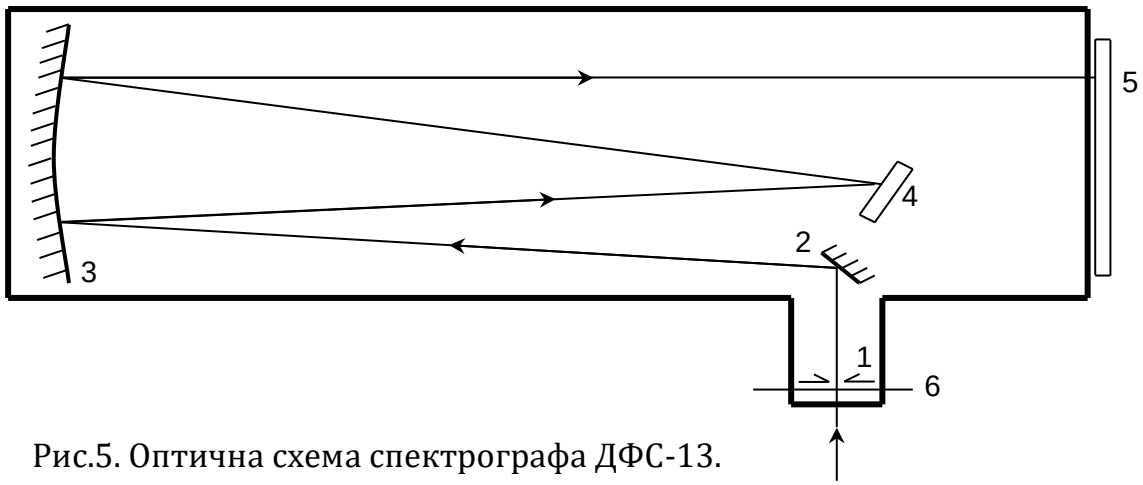


Рис.5. Оптична схема спектрографа ДФС-13.

Світло від джерела проходить через освітлювальну систему та вхідну щілину 1, після чого за допомогою дзеркала 2 потрапляє на сферичне дзеркало 3. Відбившись від нього, світло падає на дифракційну ґратку 4. Розкладений в спектр пучок повертається до дзеркала 3 і, відбившись від нього, фокусується в площині 5, де і розміщена касета з плівкою. За необхідності, перед вхідною щілиною розміщується діафрагма Гартмана 6."

Зміна спектрального діапазону відбувається шляхом повороту барабана довжин хвиль, який повертає дифракційну ґратку навколо своєї осі.

За вхідною щілиною встановлений механічний затвор (на схемі не показано), який відкривається і закривається за допомогою ручки "затвор".

До приладу додаються ґратки в 600 чи 1200шт/мм. Робота зазвичай проводиться у першому порядку, оскільки діапазон кутів повороту ґратки обмежений геометрично.

Спектрограф ДФС-13 має обернену лінійну дисперсію 4.0-4,5Å/мм в першому порядку для ґратки 600шт/мм.

Спектрограф ІСП-51

Трипризменний скляний спектрограф ІСП-51 є універсальним приладом для видимої і ближньої інфрачервоної ділянки спектру, що охоплює діапазон від 4000 до 10000 Å.

Оптичну схему приладу ІСП-51 з камерою УФ-84 наведено на Рис.6.

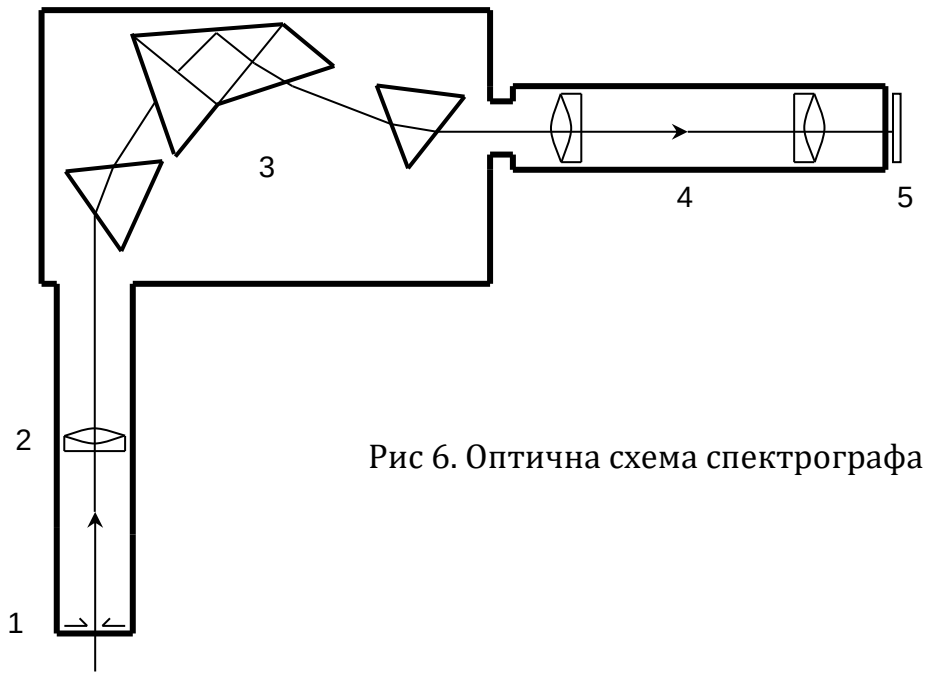


Рис 6. Оптична схема спектрографа ІСП-51

1. Щілина;
2. Об'єктив коліматора;
3. Трипризменна диспергуюча система постійного відхилення;
4. Об'єктив камери;
5. Фокальна площина.

Призми виготовлені з просвітленого флінту і мають однакові заломлюючі кути 63° при загальній базі призм рівній 210 мм. Середня призма є призмою з постійним кутом відхилення (призма Аббе). Узгоджений поворот усіх трьох призм забезпечує їх установку в мінімумі відхилення для середнього променю пучка, незалежно від положення призм. Коліматор і камера приладу ІСП-51 легко знімаються. В лабораторній роботі для одержання достатньої величини дисперсії прилад працює з камерою УФ-84 яка має фокусну відстань 800мм.

5. Спектри випромінювання деяких атомів.

Нижче наведено спектри випромінювання деяких атомів, потрібні для використання в якості реперних, а також актуальні довжини хвиль ртуті та серії Бальмера водню.

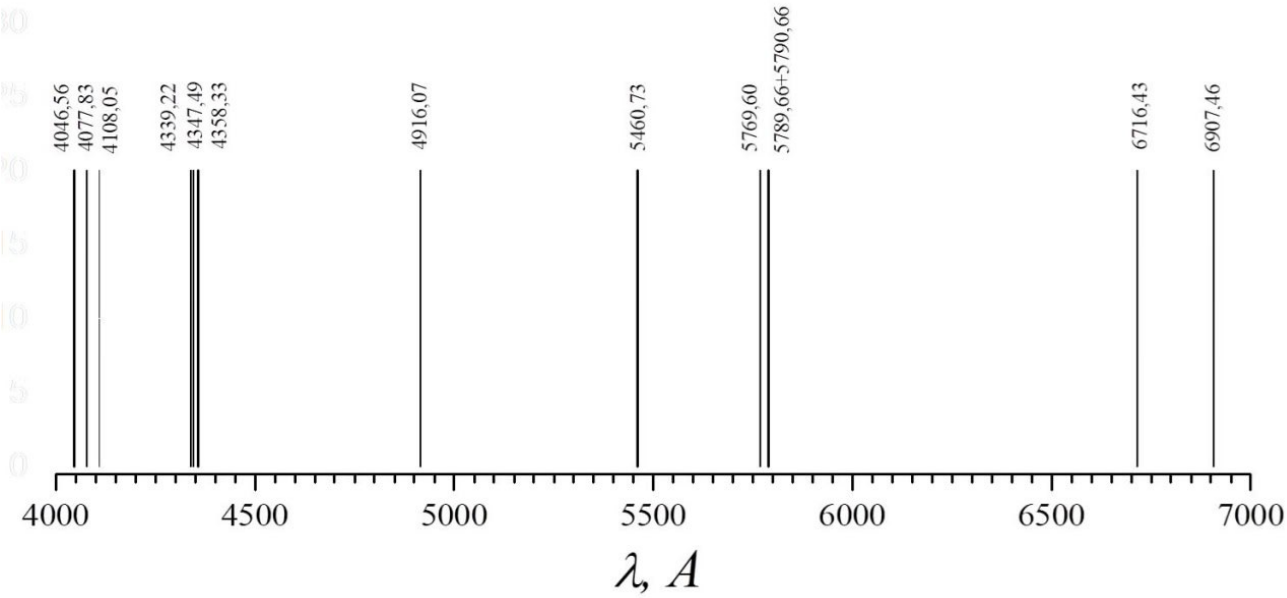


Рис.7. Спектр випромінювання парів ртуті.

Таблиця 1. Довжини хвиль ліній ртуті.

Лінії ртуті, Å	λ, Å
Жовтий дублет	5790.66 5769.60
Зелена	5460.73
Синя	4358.33
Фіолетова I	4046.56

Таблиця 2. Довжини хвиль ліній серії Бальмера водню та дейтерію.

Водень	λ, Å	Дейтерій	λ, Å
H_α	6562,85	D_α	6561,00
H_β	4861,33	D_β	4859,99
H_γ	4340,47	D_γ	4339,28
H_δ	4101,74	D_δ	4100,62

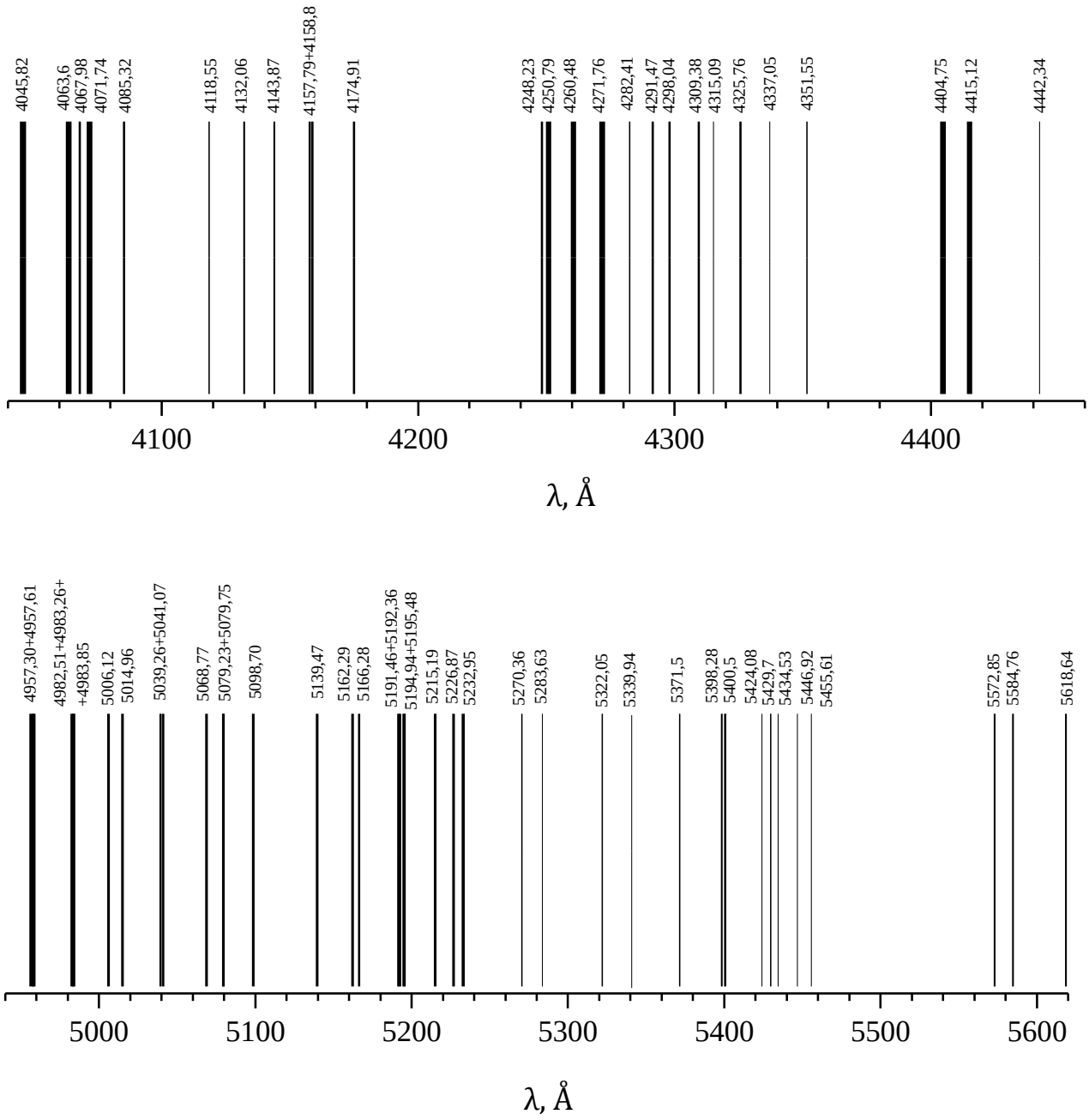


Рис.9. Спектри випромінювання парів заліза в різних діапазонах.

Автори вдячні Шовкоплясу О.С., Тисячному В.В., Борисенку Ю.В., Зазубик Д.В. за важливі зауваження і допомогу в роботі.