Министерство образования Республики Беларусь Учреждение образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники»

Кафедра физики

ВОЛНОВАЯ ОПТИКА И АТОМНАЯ ФИЗИКА

Лабораторный практикум

по курсу «Физика»

УДК 535 (075) ББК 22.34 я7 Л 12

Рецензент д-р физ.-мат. наук, проф. Н. Т. Квасов

Авторы:

Е. В. Андрианова, И. Л. Дорошевич, В. И. Мурзов, В. Б. Ранцевич

Волновая оптика и атомная физика : лаб. практикум по курсу «Физи-Л 12 ка» / Е. В. Андрианова [и др.]. – Минск : БГУИР, 2008. – 32 с. : ил. ISBN 978-985-488-279-6

Лабораторный практикум предназначен для организации самостоятельной работы студентов всех специальностей и форм обучения БГУИР на лабораторных занятиях. Практикум состоит из двух лабораторных работ «Изучение явления поляризации света» и «Изучение спектра излучения атома водорода», сформулированы их цели, приведены методические обоснования, описания экспериментальных установок, задания и контрольные вопросы.

Лабораторный практикум разработан на основе лабораторной базы физического факультета Белорусского государственного университета.

УДК 535 (075) ББК 22.34 я7

1. Лабораторная работа №2.19

ИЗУЧЕНИЕ ЯВЛЕНИЯ ПОЛЯРИЗАЦИИ СВЕТА

Цели работы:

- 1. Изучить теорию явления поляризации света.
- 2. Ознакомиться с принципом действия установки и методикой проведения эксперимента по изучению поляризации света.
 - 3. Провести анализ поляризованного света.

ТЕОРИЯ ЯВЛЕНИЯ ПОЛЯРИЗАЦИИ СВЕТА

Поляризация света. Как известно, световые волны есть волны электромагнитные. Опыт показывает, что за световое воздействие такой волны отвечает электрическое поле E. В связи с этим электрический вектор E волны называют световым вектором. В силу поперечности электромагнитной волны световой вектор всегда перпендикулярен направлению распространения волны.

Обычные источники света являются совокупностью огромного числа быстро высвечивающих элементарных излучателей (атомов или молекул), испускающих независимо друг от друга волны с различными направлениями светового вектора. Накладываясь друг на друга, эти волны образуют результирующую волну, в которой колебания светового вектора в различных направлениях быстро и беспорядочно сменяют друг друга и с равной вероятностью могут происходить во всех направлениях. Такой свет называется естественным, или неполяризованным. Из сказанного ясно, что поле неполяризованной световой волны обладает осевой симметрией.

У поляризованных световых волн, в отличие от неполяризованных, ориентация светового вектора в любой точке пространства с течением времени остается неизменной или меняется по определённому закону. В зависимости от характера этих изменений можно выделить различные состояния поляризации световых волн. Так, если колебания светового вектора происходят только в одной плоскости, свет называется плоско (или линейно) поляризованным. В эллиптически поляризованной световой волне конец светового вектора в данной точке пространства описывает эллипс, который называют эллипсом поляризации. Частным случаем эллиптической поляризации является линейная поляризация (эллипс вырождается в отрезок прямой). Другой частный случай — круговая поляризация (конец вектора E при этом описывает окружность). Эллиптически поляризованный свет может иметь правую или левую поляризацию. Если наблюдатель смотрит навстречу лучу, то при правой поляризации вектор вращается по часовой стрелке, а при левой — против часовой стрелки.

Свет, у которого изменения направления светового вектора в пространстве упорядочены лишь частично, называется частично поляризованным. Его можно рассматривать как смесь естественного и поляризованного света.

Как известно из механики, сложение двух взаимно перпендикулярных колебаний одной и той же частоты приводит к движению по эллипсу. Из этого следует, что свет любой поляризации всегда можно представить как наложение двух волн одинаковой частоты и линейно поляризованных во взаимно перпендикулярных направлениях. Поляризация волны определяется значениями разности фаз и амплитуд складываемых волн. Так, волна с линейной поляризацией получается при наложении волн с разностью фаз Dj = kp, где $k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. При $Dj = \pm p/2 + kp$ и одинаковых амплитудах складываемых волн результирующая волна будет поляризована по кругу. Если же амплитуды волн одинаковы, но разность фаз не имеет определённого значения (волны некогерентны), получается естественный свет. Во всех остальных случаях сложение волн даёт свет эллиптической поляризации.

Двойное лучепреломление. Явление двойного лучепреломления заключается в том, что упавшая на кристалл волна внутри кристалла разделяется на две волны, распространяющиеся в общем случае в различных направлениях с различными скоростями и имеющие различную поляризацию. Это явление наблюдается лишь в анизотропных средах и возникает вследствие зависимости скорости света от направления светового вектора волны. У двоякопреломляющих веществ имеются одно или два направления, вдоль которых свет с любым направлением светового вектора распространяется с одной и той же скоростью. Эти направления называются оптическими осями. Для кристаллов с одной оптической осью (одноосных кристаллов) плоскость, проходящая через оптическую ось и световой луч, называется главной плоскостью. Скорость одной из разделившихся волн в таких кристаллах не зависит от направления её распространения. Эта волна называется обыкновенной, плоскость её колебаний перпендикулярна главной плоскости. У другой волны, которая называется необыкновенной, световой вектор лежит в главной плоскости, а её скорость зависит от направления распространения. Ход обыкновенного и необыкновенного лучей можно найти из построения Гюйгенса, на подробностях которого мы останавливаться не будем.

Рассмотрим нормальное падение поляризованного света на поверхность пластинки, вырезанной параллельно оптической оси Y (рис. 1.1). Падающий на пластинку свет представим как совокупность двух волн, поляризованных вдоль оптической оси и перпендикулярно к ней. Первая из этих волн необыкновенная, вторая – обыкновенная. В пластинке обе волны распространяются в одном направлении, но с различными скоростями. Пройдя через пластинку толщиной d, волны приобретут дополнительную разность хода $d \times (n_0 - n_e)$, где n_0 и n_e – показатели преломления обыкновенного и необыкновенного лучей соответственно. Тогда на выходе из пластинки разность фаз между двумя рассматриваемыми волнами будет равна

$$\Delta j = \Delta j_0 + \frac{2p}{l} (n_0 - n_e) d.$$
 (1.1)

Здесь I — длина волны; Δj_0 — разность фаз между обыкновенным и необыкновенным лучами в момент падения на пластинку.

После выхода из пластинки обыкновенный и необыкновенный лучи, складываясь, дают в общем случае свет эллиптической поляризации. Покажем это.

Чтобы упростить рассмотрение данного вопроса, предположим, что $\Delta j_0 = 0$. Обозначим амплитуду колебаний обыкновенного луча через a, а необыкновенного – через b (см. рис. 1.1).

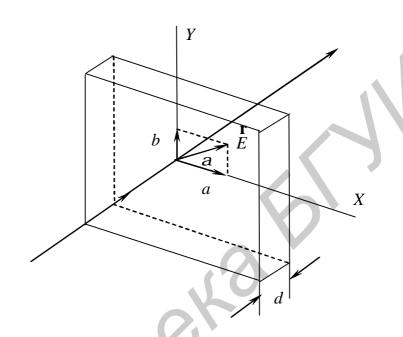


Рис. 1.1. Разделение луча на обыкновенную и необыкновенную составляющие

Тогда колебания светового вектора в обыкновенной и необыкновенной волне на выходе из пластины могут быть представлены в виде:

$$x = a \cdot \cos wt, \tag{1.2}$$

$$y = b \cdot \cos(wt - \Delta j), \tag{1.3}$$

где w — циклическая частота электромагнитной волны, а Δj — разность фаз, возникающая между лучами при прохождении ими кристаллической пластинки.

Определим из $(1.2) \cos w t$:

$$\cos w t = \frac{x}{a}.\tag{1.4}$$

Перепишем (1.3) в виде

$$\frac{y}{h} = \cos(wt - \Delta j) = \cos wt \cdot \cos \Delta j + \sin wt \cdot \sin \Delta j . \tag{1.5}$$

С учётом (1.4) равенство (1.5) примет вид

$$\sin wt \cdot \sin \Delta j = \frac{y}{b} - \frac{x}{a} \cos \Delta j . \tag{1.6}$$

Умножая (1.4) на $\sin\Delta\varphi$, запишем равенство:

$$\cos w \, t \cdot \sin \Delta j \, = \frac{x}{a} \cdot \sin \Delta j \, . \tag{1.7}$$

Возведём в квадрат левые и правые части равенств (1.6) и (1.7) и почленно просуммируем:

$$\sin^2 \Delta \boldsymbol{j} = \frac{x^2}{a^2} - \frac{2xy}{ab} \cos \Delta \boldsymbol{j} + \frac{y^2}{b^2}.$$
 (1.8)

Как следует из (1.8), представляющего уравнение эллипса с полуосями а и b, при прохождении через кристаллическую пластинку линейно поляризованный свет становится в общем случае эллиптически поляризованным.

Ориентация осей эллипса и соотношение между ними будут зависеть от поляризации падающего на пластинку света, толщины и ориентации пластинки.

Прохождение света через поляризатор. Поляризаторы представляют собой устройства для получения линейно поляризованного света. К наиболее распространённым типам поляризаторов относятся различные поляризационные призмы (Николя, Глана и др.) и поляроидные плёнки.

Действие этих приборов основано на том, что они пропускают световые колебания лишь в определённой плоскости, которую называют плоскостью поляризатора. В поляризационных призмах это достигается за счёт пространственного разделения обыкновенного и необыкновенного лучей, в поляроидах — за счёт дихроизма, т.е. неодинакового поглощения обыкновенного и необыкновенного лучей.

При прохождении линейного поляризованного света через поляризатор последний пропустит не все колебания E_0 , а только его составляющую E, лежащую в плоскости поляризатора РР (рис. 1.2). Если амплитуда колебаний в падающей волне E_0 , то в пропущенной – $E_0 \cdot \cos y$, где y – угол между плоскостью колебаний падающего света и плоскостью поляризатора. Поскольку интенсивность световой волны пропорциональна квадрату её амплитуды, для интенсивности света I на выходе из поляризатора получим

$$I = I_0 \cos^2 y \,, \tag{1.9}$$

где I_0 — интенсивность падающего на по-ляризатор линейно поляризованного света. Это соотношение носит название закона Малюса.

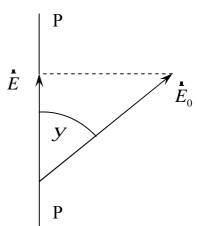


Рис. 1.2. Изменение амплитуды колебаний при прохождении света через поляризатор

ТЕОРИЯ МЕТОДА

Для получения и анализа поляризованного света, как правило, используют поляризаторы в сочетании с кристаллическими пластинками, вырезанными параллельно оптической оси.

Выше отмечалось, что при прохождении линейно поляризованного света через кристаллическую пластинку его поляризация в общем случае становится эллиптической.

Рассмотрим некоторые частные случаи.

1. Разность хода, создаваемая пластинкой между обыкновенным и необыкновенным лучами, удовлетворяет условию

$$\Delta = d(n_0 - n_e) = \pm \frac{1}{4} + kI , \qquad (1.10)$$

где $k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Такая пластинка называется пластинкой в четверть длины волны (пластинка в I/4). Из формулы

$$\Delta j = \frac{2p}{l} \Delta, \tag{1.11}$$

описывающей взаимосвязь между разностью фаз и разностью хода, следует, что на выходе из пластинки в четверть длины волны разность фаз равна $\pm \frac{p}{2} + 2pk$. Подставив это значение разности фаз в формулу (1.8), получаем уравнение

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{h^2} = 1. \tag{1.12}$$

Следовательно, после прохождения пластинки в I/4 линейно поляризованный свет становится эллиптически поляризованным. Однако, если оси пластинки расположены так, что угол $a=45^{\circ}$ (см. рис. 1.1), то амплитуды колебаний векторов E обыкновенного и необыкновенного лучей будут равны (a=b), а на выходе из пластинки свет окажется поляризованным по кругу. При этом положительное значение разности фаз соответствует поляризации по левому кругу, а отрицательное — по правому. При a=b получаем уравнение окружности:

$$x^2 + y^2 = a^2. (1.13)$$

2. Для пластинки в половину длины волны (пластинка в 1/2) разность хода равна

$$\Delta = d(n_0 - n_e) = \frac{1}{2} + kI, \qquad (1.14)$$

где $k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Этой разнице хода соответствует разность фаз:

$$\Delta j = p + 2kp. \tag{1.15}$$

Подстановка данного выражения в (1.8) приводит к уравнению

$$\frac{x}{a} + \frac{y}{b} = 0. {(1.16)}$$

Следовательно, выходящий из полудлинноволновой пластинки свет остаётся линейно поляризованным, но плоскость колебаний вектора \tilde{E} зеркально симметрично отражается относительно осей пластинки (рис. 1.3). На рис. 1.3 изображено направление колебаний вектора \tilde{E} до (1) и после (2) пластинки.

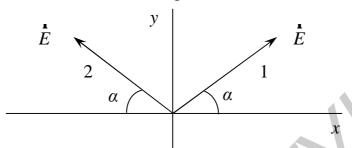


Рис. 1.3. Направление колебаний вектора \hat{E} до (1) и после (2) пластинки

3. Для пластинки в целую длину волны разность хода равна

$$d(n_0 - n_e) = kI , (1.17)$$

где $k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Учитывая, что в этом случае разность фаз между обыкновенным и необыкновенным лучами составляет $\Delta j = 2kp$, получаем после подстановки в (1.8) уравнение, описывающее поляризацию излучения:

$$\frac{x}{a} - \frac{y}{b} = 0. \tag{1.18}$$

Это означает, что при прохождении света через пластинку в целую длину волны, он остается линейно поляризованным, причем не изменяет направление плоскости колебаний.

Анализ поляризованного света

Анализ поляризованного света производится с помощью поляризаторов и кристаллических пластинок. Его можно разделить на два этапа. На первом этапе анализ производится только с помощью одного поляризатора.

Если при вращении поляризатора интенсивность света будет изменяться от некоторого максимального значения до нуля, то это означает, что падающий на поляризатор свет является линейно поляризованным.

Если при повороте поляризатора интенсивность проходящего через него света остается неизменной, то свет может быть либо естественным, либо светом круговой поляризации.

Если же при повороте поляризатора интенсивность света изменяется от некоторого максимального до минимального, не равного нулю значения, то падающий на поляризатор свет имеет эллиптическую поляризацию, или является светом частично поляризованным.

Для того чтобы отличить свет круговой поляризации от естественного, и свет, поляризованный по эллипсу, от частично поляризованного света (являющегося смесью света линейно поляризованного с естественным), применяется оптическая система: пластинка в четверть волны – поляризатор.

При прохождении света круговой поляризации через пластинку 1/4 между обыкновенным и необыкновенным лучами появляется дополнительная разность фаз в p/2. Это приводит к тому, что на выходе из пластинки свет становится линейно поляризованным. Свет естественный после прохождения пластинки остаётся естественным, изменяя свою внутреннюю структуру, т.е. вместо совокупности хаотически расположенных относительно оси распространения линейных осцилляторов будет наблюдаться совокупность эллипсов с хаотическим расположением их осей. С помощью расположенного за пластинкой поляризатора легко отличить линейно поляризованный свет от естественного.

Для того чтобы различить свет эллиптической поляризации и частично поляризованный, необходимо с помощью поляризатора определить направление осей эллипса. Установив кристаллическую пластинку в I/4 таким образом, чтобы её оси составляли угол $\pm p/4$ по направлению к большой оси эллипса, пропускают свет через данную пластинку. Свет, поляризованный эллиптически, пройдя через пластинку и получив дополнительную разность фаз в p/2, останется эллиптически поляризованным, изменив при этом ориентацию осей эллипса. При прохождении через четвертьволновую пластинку частично поляризованного света его составляющая, имеющая линейную поляризацию, превратится в свет круговой поляризации, а естественная составляющая, как отмечалось выше, лишь изменит свою внутреннюю структуру. При пропускании такого излучения через поляризатор интенсивность прошедшего через него света не будет зависеть от угла поворота плоскости поляризатора.

Описание экспериментальной установки

Источником света в данной установке является полупроводниковый лазер (Π), который генерирует монохроматическое (I =636,6 нм), линейно поляризованное излучение. Пройдя сквозь двулучепреломляющую пластинку (Π) и анализатор (поляризатор) (A), свет попадает на фотодиод ($\Phi \Pi$), ток которого прямо пропорционален интенсивности падающего света.

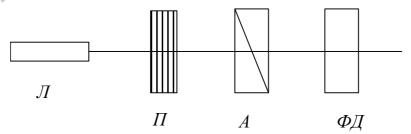


Рис. 1.4. Принципиальная схема установки

порядок выполнения лабораторной работы

- 1. Исследование лазерного излучения проводят при извлечённой из установки пластинке. Для этого, вращая анализатор (поляризатор), через каждые 10° регистрируют величину фототока. На участках, где фототок приближается к нулю, измерения проводят через каждые 5° . В полярных координатах строят график зависимости силы фототока от положения анализатора. Проверяют соответствие экспериментально полученного графика закону Малюса. Для этого в полярной системе координат строят график зависимости $I = I_0 \cdot \cos^2 y$, где I_0 максимальное значение силы фототока, y угол, отсчитываемый от одного из максимумов на экспериментальном графике.
- 2. Устанавливают анализатор в положение, при котором его ось перпендикулярна вектору E. При этом фототок должен быть равен нулю. Устанавливают в установку пластинку в четверть длины волны. Оставляя неподвижным анализатор, вращают пластинку и измеряют силу фототока при различных положениях осей пластинки. Строят в полярных координатах график и объясняют полученный результат.
- 3. При взаимно перпендикулярной ориентации оси поляризатора к плоскости колебаний вектора E лазерного излучения (в отсутствие пластинки фототок равен нулю) устанавливают пластинку I/4 в одно из положений, при котором фототок близок к нулю, а затем поворачивают пластинку на угол, равный 45° . Поворачивая анализатор, измеряют зависимость силы фототока от ориентации анализатора. Строят в полярных координатах график и объясняют полученный результат.
- 4. С помощью графика определяют отношение полуосей эллипса поляризации, равное $\sqrt{I_{\max}/I_{\min}}$, где I_{\max} и I_{\min} максимальное и минимальное значения интенсивности прошедшего через анализатор света.
- 5. Скрещивают ось поляризатора и плоскость колебаний вектора \bar{E} лазерного излучения и устанавливают пластинку I/2. Вращают пластинку и производят измерение зависимости силы фототока от положения пластинки. В полярных координатах строят график и объясняют полученный результат.
- 6. Используя результаты предыдущего упражнения, устанавливают пластинку I/2 в одно из положений, в котором её оптическая ось образует угол 45° с вектором E падающего света. Вращая анализатор, проводят анализ света, выходящего из пластинки. Строят график в полярных координатах и с его помощью определяют отношение полуосей эллипса.

Контрольные вопросы

- 1. Какие возможны состояния поляризации света?
- 2. В чём заключается сущность явления двулучепреломления?
- 3. Каковы основные закономерности двулучепреломления в одноосных кристаллах?
- 4. Как можно получить свет линейной, эллиптической и круговой поляризации?
 - 5. Как отличить свет естественный от света, поляризованного по кругу?
- 6. Как отличить эллиптически поляризованный свет от частично поляризованного?
- 7. Почему на графике зависимости, соответствующей полному обороту пластинки при скрещённых анализаторе и векторе \vec{E} , получается 4 лепестка?

Литература

- 1. Ландсберг, Г. С. Оптика / Г. С. Ландсберг. М. : Наука, 1976. С. 370–387.
- 2. Савельев, И. В. Курс общей физики. В 3 т. Т. 2 / И. В. Савельев. М. : Наука, 1982. С. 419–434.
- 3. Сивухин, Д. В. Общий курс физики. Оптика / Д. В. Сивухин. М. : Наука, 1980. С. 455–479.

2. Лабораторная работа №3.8

ИЗУЧЕНИЕ СПЕКТРА ИЗЛУЧЕНИЯ АТОМА ВОДОРОДА

Цели работы:

- 1. Наблюдение спектра испускания атомарного водорода и измерение длин волн видимой области.
 - 2. Проверка формулы Бальмера.
- 3. Определение постоянной Ридберга, энергии ионизации и уровней энергии атома водорода.

ЭМПИРИЧЕСКИЕ СПЕКТРАЛЬНЫЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ

К началу XX в. на основе обширного экспериментального материала было установлено:

- 1. Оптические спектры атомарных газов состоят из отдельных узких линий.
 - 2. Набор частот в спектре каждого элемента строго индивидуален.
- 3. Частоты спектра поглощения составляют часть множества частот спектра испускания того же элемента.
- 4. У каждого элемента имеется свой дискретный набор положительных чисел, называемых *спектральными термами*: T_1 , T_2 , T_3 , ...; обратные длины волн всех спектральных линий этого элемента являются разностями его термов:

$$\frac{1}{I_{nn'}} = T_{n'} - T_n. \tag{2.1}$$

Данное утверждение составляет содержание *комбинационного принципа Ритца*.

5. Спектральные термы атома водорода с большой точностью описываются эмпирически найденным выражением:

$$T_n = \frac{R}{n^2}, \quad n=1, 2, 3, \dots$$
 (2.2)

Термы (2.2) называются бальмеровскими, $R = (1,097373177 \pm 0,000000083) \cdot 10^7 \text{ м}^{-1} -$ постоянной Ридберга.

РАССМОТРЕНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ ЗАКОНОВ СОГЛАСНО КЛАССИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ

Законы классической механики и классической электродинамики в применении к атому как к системе, состоящей из ядра и электронов, приводят к следующим выводам:

- такая система неустойчива по отношению к столкновениям с другими атомными системами - она не возвращается после столкновения в свое первоначальное состояние;
- любое возможное движение электронов в атоме сопровождается непрерывной потерей энергии на электромагнитное излучение;
- набор частот этого излучения совпадает со спектром гармоник движения электронов. Так, гармонически колеблющийся электрон давал бы одну спектральную линию, периодически (но не гармонически) движущийся – набор линий с кратными частотами: v_0 , $2v_0$, $3v_0$,...; при апериодическом движении – спектр излучения был бы непрерывен.

Таким образом, не только спектральные законы, но даже само существование атома как устойчивой системы не находят своего объяснения в классической теории. Как известно, в полном объеме оно было получено лишь в результате создания и разработки квантовой механики и квантовой электродинамики.

ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ ЧАСТИЦЫ

Пси-функция и операторы динамических переменных

Состояние частицы в квантовой механике описывается комплекснозначной функцией координат и времени $\Psi(x, y, z, t) = \Psi(r, t)$, называемой **волновой** ϕ ункцией или *пси-функцией* частицы, причем функции Ψ и $c\Psi$, где c – произвольное комплексное число, описывают одно и то же состояние.

Если частица может находиться в состояниях, описываемых функциями $\Psi_{1}, \Psi_{2}, ..., \Psi_{n}$ (*n* – любое), то существует состояние, описываемое функцией

$$\Psi = \sum_{i=1}^{n} c_i \Psi_i ,$$

где c_i – произвольные комплексные числа. Это утверждение носит название принципа суперпозиции состояний.

Таким образом, множество пси-функций образует комплексное линейное пространство, называемое пространством состояний частицы.

Скалярным произведением (Ψ_1, Ψ_2) пси-функций называют величину $(\Psi_1, \Psi_2) = \int_{\mathbb{R}^3} \Psi_1^* \binom{\mathbf{r}}{r} t \Psi_2 \binom{\mathbf{r}}{r} t dV$,

$$(\Psi_1, \Psi_2) = \int_{\mathbb{R}^3} \Psi_1^* (\mathbf{r}, t) \Psi_2 (\mathbf{r}, t) dV,$$

где символ «*» означает комплексное сопряжение, dV = dx dy dz, а интегрирование производится по всему трехмерному координатному пространству R^3 . Если $(\Psi, \Psi) = 1$, то пси-функция называется *нормированной*.

Содержательный смысл нормированной пси-функции устанавливается следующим утверждением: величина

$$dP = \Psi^*(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t)dV = |\Psi(\mathbf{r},t)|^2 dV$$
 (2.3)

есть $\epsilon eposmhocmb$ нахождения частицы в момент времени t в окрестности точки с радиусом-вектором r внутри элемента объема dV, содержащего эту точку.

Таким образом, квадрат модуля $|\Psi(\mathbf{r},t)|^2$ имеет смысл **плотности вероятности** нахождения частицы в точке с радиусом-вектором $\overset{\bullet}{r}$ в момент времени t.

Если вероятность (2.3) не зависит от времени, то состояние частицы называют стационарным. В этом случае её пси-функция представляется в виде

$$\Psi(r,t) = f(t)y(r),$$

где $|f(t)|^2 = 1$, и поэтому

$$|\Psi(\mathbf{r},t)|^2 = |y(\mathbf{r})|^2.$$

Поскольку поведение микрочастиц можно изучать лишь по результатам их действия на подчиняющиеся законам классической физики макроскопические приборы, то для описания частиц в квантовой механике также используются понятия классической физики. Основными динамическими переменными, описывающими состояние частицы в классической механике, являются её радиусвектор \dot{r} и импульс \dot{p} . Все другие переменные, используемые для описания движения частицы, являются их функциями: A = f(r, p) (возможно еще и времени t явно, т.е. A = f(r, p, t)). Эти функциональные связи сохраняют и в квантовой механике, заменяя в них динамические переменные r и p операторами, действующими в пространстве состояний микрочастицы (в пространстве пси-функций), в соответствии со следующими определениями.

Любое действие над функцией Ч, преобразующее её в некоторую функцию Ψ_1 , можно формально представить в виде

$$\hat{A}\Psi = \Psi_1$$
,

где символ \hat{A} называют *оператором*, действующим на функцию Ψ . Например, оператор $\hat{A} = \frac{\partial}{\partial r}$ преобразует функцию Ψ в её частную производную по

переменной
$$x$$
: $\Psi_1 = \frac{\partial \Psi}{\partial x}$, т.е. $\hat{A}\Psi = \frac{\partial \Psi}{\partial x}$.

Оператор \hat{A} называется *линейным*, если для любых функций Ψ_1 и Ψ_2 выполняется равенство

$$\hat{A}(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2) = c_1\hat{A}\Psi_1 + c_2\hat{A}\Psi_2$$
,

где c_1 и c_2 – произвольные комплексные числа. Оператор \hat{A}^+ называется *сопряженным* оператору \hat{A} , если для любых Ψ_1 и Ψ_2 выполняется равенство

$$(\hat{A}^{\dagger}\Psi_1, \Psi_2) = (\Psi_1, \hat{A}\Psi_2).$$

Оператор называется *самосопряженным*, если $\hat{A}^{+} = \hat{A}$, т.е. для любых Ψ_{1} и Ψ_2 справедливо равенство

$$(\hat{A}\Psi_1, \Psi_2) = (\Psi_1, \hat{A}\Psi_2).$$

Линейные самосопряженные операторы называются также эрмитовыми.

Основные алгебраические операции на множестве операторов определяются следующим образом:

$$(\hat{A} \pm \hat{B}) \Psi = \hat{A} \Psi \pm \hat{B} \Psi ,$$

$$\hat{A} \hat{B} \Psi = \hat{A} (\hat{B} \Psi) .$$

Динамическим переменным в квантовой механике ставятся в соответствие **эрмитовы операторы**, действующие в пространстве пси-функций. При этом основным уравнением квантовой механики является уравнение вида

$$\hat{A}\Psi = a\Psi$$
,

где a — некоторое число, называемое собственным значением оператора \hat{A} ; функция Ψ в этом случае называется собственной функцией оператора \hat{A} , принадлежащей собственному значению a.

Все собственные значения эрмитова оператора – действительные числа.

Множество собственных значений оператора называют *спектром его собственных значений*. Спектр собственных значений может быть дискретным (квантованным), когда возможны только отдельные значения $a_1, a_2, ..., a_n, ...$, либо полосатым, когда значения a лежат в интервалах $a_1 \le a \le a_2$, $a_3 \le a \le a_4$, ..., $a_n \le a \le a_{n+1}$, ..., либо непрерывным (сплошным), когда возможны все значения a, заполняющие числовую ось. Наконец, возможен также смешанный спектр, состоящий из счётного и несчётного подмножеств собственных значений.

Динамическим переменным $\overset{\bullet}{r}$ и $\overset{\bullet}{p}$ ставятся в соответствие операторы $\overset{\bullet}{r}$ и $\overset{\bullet}{p}$, действия которых в пространстве пси-функций $\Psi=\Psi(\overset{\bullet}{r},t)$ определяются так:

$$\mathbf{r} \Psi = \mathbf{r} \Psi,
\mathbf{r} \Psi = -i\mathbf{h} \nabla \Psi,$$

где $\mathbf{h} = 1,054 \cdot 10^{-34}$ Дж·с – постоянная Планка, ∇ – оператор набла, i – мнимая единица $(i^2 = -1)$. Символически это записывается в виде

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}, \quad \mathbf{r} = -i\mathbf{h}\nabla.$$
(2.4)

Время t в квантовой механике оператором не является. Так же как и в классической механике, t выступает в роли **эволюционного параметра** состояний частицы. Тогда, в соответствии со сказанным выше, классической динамической переменной A = f(r, p, t) в квантовой механике ставится в соответствие оператор

$$\hat{A} = f\left(\begin{matrix} \mathbf{r} & \mathbf{r} \\ r, p, t \end{matrix}\right) \tag{2.5}$$

при условии эрмитовости (самосопряженности) оператора \hat{A}

Физический смысл спектра собственных значений эрмитова оператора, поставленного в соответствие динамической переменной, устанавливается следующим утверждением:

спектр собственных значений эрмитова оператора, поставленного в соответствие динамической переменной, исчерпывает все возможные результаты её измерения.

Собственные функции при этом описывают состояния микрочастицы, в которых динамическая переменная имеет определённые значения, равные собственным значениям рассматриваемого оператора. В частности, это состояния, в которые переходит частица при измерении динамической переменной.

Момент импульса классической частицы $L = r \times p$, где знак «×» означает векторное произведение. В соответствии с (2.4) и правилом (2.5) оператор момента импульса запишется так:

$$\overset{\mathbf{r}}{L} = \overset{\mathbf{r}}{r} \times \overset{\mathbf{r}}{p} = -i \overset{\mathbf{r}}{\mathbf{h}} \overset{\mathbf{r}}{r} \times \nabla ,$$
(2.6)

или в проекциях на координатные оси:

$$\hat{L}_{x} = \hat{y}\hat{p}_{z} - \hat{z}\hat{p}_{y} = -i\mathbf{h}\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right),\tag{2.7}$$

$$\hat{L}_{y} = \hat{z}\hat{p}_{x} - \hat{x}\hat{p}_{z} = -i\mathbf{h}\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right),\tag{2.8}$$

$$\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = -i\mathbf{h}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right). \tag{2.9}$$

Модуль момента импульса частицы в квантовой механике определяется в задаче на собственные функции и собственные значения оператора *квадрата момента импульса*

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2. \tag{2.10}$$

Другой важнейшей функцией $\overset{\bullet}{r}$ и $\overset{\bullet}{p}$ является полная механическая энергия частицы в силовом поле $\overset{\bullet}{F}(\overset{\bullet}{r}) = -\nabla U(\overset{\bullet}{r})$:

$$E = \frac{\overset{\mathbf{r}}{p}^{2}}{2m} + U(\overset{\mathbf{r}}{r}),$$

где m — масса частицы, U(r) — ее потенциальная энергия. Соответствующий оператор энергии, называемый *оператором Гамильтона*, согласно правилу (2.5), имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\mathbf{r}^2}{2m} + U(\mathbf{r}^r) = -\frac{\mathbf{h}^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}^r), \qquad (2.11)$$

где ∇^2 — оператор Лапласа. Возможные значения энергии микрочастицы определяются в задаче на собственные функции и собственные значения оператора Гамильтона (2.11).

Нетрудно показать, что все введённые операторы являются эрмитовыми.

Уравнение Шрёдингера

Основным динамическим уравнением квантовой механики, описывающим эволюцию состояния частицы во времени, является *уравнение Шрёдингера:*

$$i\mathbf{h}\frac{\partial\Psi(\overset{\mathbf{r}}{r},t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(\overset{\mathbf{r}}{r},t), \tag{2.12}$$

где \hat{H} — оператор Гамильтона, в общем случае зависящий параметрически от времени t:

$$\hat{H} = \frac{\stackrel{\mathbf{r}}{p}^{2}}{2m} + U(\stackrel{\mathbf{r}}{r},t) = -\frac{\mathbf{h}^{2}}{2m}\nabla^{2} + U(\stackrel{\mathbf{r}}{r},t).$$

Здесь функция U(r,t) описывает нестационарное силовое поле $F(r,t) = -\nabla U(r,t)$.

Уравнение Шрёдингера (2.12) следует рассматривать как исходное основное положение теории, справедливость которого доказывается тем, что вытекающие из него следствия с высокой степенью точности согласуются с опытными данными.

Если силовое поле стационарное, т.е. U = U(r), то решение уравнения (2.12) можно представить в виде

$$\Psi(\mathbf{r},t) = e^{-\frac{i}{\mathbf{h}}Et} y(\mathbf{r}), \tag{2.13}$$

где E – энергия частицы, значения которой определяются в задаче на собственные функции и собственные значения оператора Гамильтона (2.11):

$$\hat{H}y(r) = Ey(r). \tag{2.14}$$

Уравнение (2.14) для функции $y\binom{1}{r}$, следующее из уравнения (2.12) при подстановке в него функции (2.13), называют *стационарным уравнением Шрёдингера*.

Состояния частицы, описываемые пси-функциями (2.13), называются *стационарными*.

Функция y(r), удовлетворяющая уравнению (2.14), должна иметь некоторые общие свойства для любых полей U(r), а именно: она должна быть однозначной, ограниченной и непрерывной во всем координатном пространстве R^3 , а также обладать непрерывными частными производными во всех точках, кроме тех, где функция U(r) делает бесконечно большой скачок. Частица не может проникнуть в области пространства, где потенциальная энергия принимает бесконечно большое значение $U=\infty$. Поэтому на границах этих областей псифункция должна обращаться в нуль. Перечисленные требования носят название *стандартных условий*.

КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ АТОМА ВОДОРОДА

Атом водорода представляет собой связанное состояние двухчастичной системы, состоящей из протона (ядро атома) и электрона. Потенциальная энергия их кулоновского взаимодействия описывается функцией

$$U(r) = -\frac{ke^2}{r} = -\frac{\tilde{e}^2}{r},\tag{2.15}$$

где $k = 9 \cdot 10^9$ м/Ф, $e = 1.6 \cdot 10^{-19}$ Кл, r - расстояние между ними, $\tilde{e} = e\sqrt{k}$.

Поскольку масса протона m_p намного больше массы электрона m_e ($m_p = 1836 \, m_e$), то при описании состояний атома водорода можно, не делая большой ошибки, использовать для этого пси-функции электрона, движущегося в силовом поле (2.15) *неподвижного* протона, помещённого в начало координат.

Таким образом, в рассматриваемом приближении стационарные состояния атома водорода описываются решениями стационарного уравнения Шрёдингера (2.14) с оператором Гамильтона:

$$\hat{H} = -\frac{\mathbf{h}^2}{2m_e} \nabla^2 - \frac{\partial \hat{\mathbf{c}}}{r} \,. \tag{2.16}$$

Так как функция (2.15) является центрально-симметричной, то уравнение (2.16) удобно решать в сферических координатах:

$$x = r \sin q \cos j,$$

$$y = r \sin q \sin j,$$

$$z = r \cos q,$$

 $z=r\cos q,$ где $0\leq r<\infty$, $0\leq q\leq p$, $0\leq j<2p$. Оператор Лапласа в сферических координатах имеет следующий вид:

$$\nabla^2 = \Delta_r + \frac{1}{r^2} \Delta_{q,j} \quad , \tag{2.17}$$

где

$$\Delta_{r} = \frac{1}{r} \frac{\partial^{2}}{\partial r^{2}} r,$$

$$\Delta_{q,j} = \frac{1}{\sin q} \frac{\partial}{\partial q} \left(\sin q \frac{\partial}{\partial q} \right) + \frac{1}{\sin^{2} q} \frac{\partial^{2}}{\partial j^{2}}$$
(2.18)

- соответственно *радиальная* и *угловая* части оператора Лапласа.

Далее нетрудно показать, что оператор квадрата момента импульса (2.10) в сферических координатах очень просто выражается через угловую часть оператора Лапласа:

$$\overset{\mathbf{r}}{L}^2 = -\mathbf{h}^2 \Delta_{q,j} \ . \tag{2.19}$$

Тогда с учётом формул (2.17) и (2.18) оператор Гамильтона (2.16) и стационарное уравнение Шрёдингера (2.14) перепишутся в виде

$$\hat{H} = -\frac{\mathbf{h}^{2}}{2m_{e}} \frac{1}{r} \frac{\partial^{2}}{\partial r^{2}} r + \frac{1}{2m_{e}r^{2}} \overset{\mathbf{F}}{L^{2}} - \frac{\mathbf{g}_{0}^{2}}{r},$$

$$\left(-\frac{\mathbf{h}^{2}}{2m_{e}} \frac{1}{r} \frac{d^{2}}{dr^{2}} r + \frac{1}{2m_{e}r^{2}} \overset{\mathbf{F}}{L^{2}} - \frac{\mathbf{g}_{0}^{2}}{r}\right) y(r, q, j) = Ey(r, q, j). \tag{2.20}$$

Поскольку в соответствии с (2.19) и (2.18) оператор квадрата момента импульса действует только на угловые переменные, то решение уравнения (2.20) естественно искать в виде

$$y(r,q,j) = R(r)Y(q,j).$$
 (2.21)

Потребуем теперь, чтобы функция угловых переменных Y(q,j) была одновременно собственной функцией операторов \hat{L}^2 и \hat{L}_z (в сферических координатах $\hat{L}_z = -i\mathbf{h}\partial/\partial j$), т.е.

$$\hat{L}^{\mathbf{r}}_{2} Y(\mathbf{q}, \mathbf{j}) = L^{2} Y(\mathbf{q}, \mathbf{j}),
\hat{L}_{z} Y(\mathbf{q}, \mathbf{j}) = l_{z} Y(\mathbf{q}, \mathbf{j}).$$
(2.22)

В квантовой механике доказывается, что собственные значения L^2 и l_z , а также принадлежащие им собственные функции $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ определяются двумя целыми числами l и m:

$$L^{2} = \mathbf{h}^{2} l(l+1), \qquad (2.23)$$

$$l_{z} = \mathbf{h} m,$$

$$L^{2} = \mathbf{h}^{2} l(l+1),$$

$$l_{z} = \mathbf{h} m,$$

$$X_{lm}(q, j) = \frac{1}{\sqrt{2p}} P_{lm}(\cos q) \cdot e^{imj},$$

где $l=0,\ 1,\ 2,\ 3,\ ...,\ m=-l,-l+1,...,\ 0,...,\ l-1,\ l$ (всего 2l+1 значений), $P_{lm}(\cos q)$ — нормированные присоединённые полиномы Лежандра (их можно найти в специальных справочниках или в справочных данных математических компьютерных сред). Числа l и m называют соответственно орбитальным (или азимутальным) и магнитным квантовыми числами, функции $X_{lm}(\theta,\varphi)$ называют сферическими функциями.

Подставляя теперь (2.21) в (2.20) и учитывая (2.22) и (2.23), приходим к уравнению для радиальной функции R(r):

$$\left(-\frac{\mathbf{h}^{2}}{2m_{e}}\frac{1}{r}\frac{d^{2}}{dr^{2}}r + \frac{\mathbf{h}^{2}l(l+1)}{2m_{e}r^{2}} - \frac{\tilde{e}^{2}}{r}\right)R(r) = ER(r). \tag{2.24}$$

Вместо радиальной функции R(r) удобно рассматривать функцию

$$\Phi(r) = rR(r), \tag{2.25}$$

для которой из (2.24) очевидно следует уравнение

$$\left(-\frac{\mathbf{h}^{2}}{2m_{e}}\frac{d^{2}}{dr^{2}} + \frac{\mathbf{h}^{2}l(l+1)}{2m_{e}r^{2}} - \frac{\tilde{e}^{2}}{r}\right)\Phi(r) = E\Phi(r).$$
(2.26)

Если теперь вместо r и E ввести безразмерные величины

$$r = \frac{r}{r_R}, \quad e = \frac{E}{R_v}, \tag{2.27}$$

$$r_B = \frac{\mathbf{h}^2}{m_e \tilde{e}^2} = 0.53 \cdot 10^{-10} \,\text{M}, \qquad R_y = \frac{m_e \tilde{e}^4}{2\mathbf{h}^2} = 13.6 \,\text{9B},$$
 (2.28)

то уравнение (2.26) перепишется в виде

$$\frac{d^2\Phi}{dr^2} + \left(e + \frac{2}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)\Phi = 0.$$
 (2.29)

Атомную единицу длины r_{B} называют *боровским радиусом*, а атомную единицу энергии R_{v} – *ридбергом*.

Решения дифференциального уравнения (2.29), описывающего связанные состояния системы протон—электрон, должны удовлетворять граничным условиям

$$\Phi(r)|_{r=0} = 0, (2.30)$$

$$\Phi(r)|_{r\to\infty} = 0, \tag{2.31}$$

следующим из условия конечности пси-функции во всех точках пространства (см. *стандартные* условия), а также условия нормировки

$$\iint_{R^3} \mathbf{v}(\mathbf{r})^2 dV = \int_{0}^{\infty} R^2(r) r^2 dr = \int_{0}^{\infty} \Phi^2(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = 1.$$

Здесь учтено, что в сферических координатах $dV = r^2 \sin q \, dr \, dq \, dj$ и

$$\iint_{(\Omega)} |Y_{lm}(q,j)|^2 \sin q \, dq \, dj = 1,$$

где интегрирование производится по полному телесному углу (Ω) (т.е. от 0 до π по θ и от 0 до 2p по j). Физически условие (2.31) означает, что в связанном состоянии вероятность найти электрон на бесконечно большом расстоянии от протона равна нулю.

Найдём теперь асимптотическое поведение функции $\Phi(r)$ при больших значениях переменной r. Пренебрегая в этом случае двумя слагаемыми, содержащими r в скобках уравнения (2.29), по сравнению с конечной величиной e, приходим к уравнению

$$\frac{d^2\Phi}{dr^2} + e\Phi = 0,$$

общее решение которого очевидно имеет вид

$$\Phi(r) = c_1 e^{-lr} + c_2 e^{lr}, \qquad (2.32)$$

где c_1 и c_2 – произвольные константы, $l = \sqrt{-e}$.

Нетрудно понять, что условие (2.31) будет выполнено, если e < 0, а $c_2 = 0$. Учитывая это, представим решение уравнения (2.29) в виде

$$\Phi(r) = e^{-r\sqrt{-e}} f(r), \tag{2.33}$$

где f(r) – новая искомая функция, обращающаяся в соответствии с (2.30) в нуль при r=0.

Подставляя (2.33) в (2.29), после несложных вычислений приходим к уравнению для функции f(r):

$$\frac{d^2 f}{dr^2} - 2\sqrt{-e} \frac{df}{dr} + \left(\frac{2}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) f = 0.$$
 (2.34)

Решение этого уравнения будем искать в виде ряда по степеням переменной r. Ясно, что обращающееся в нуль при любых l в точке r=0 решение уравнения (2.35) должно начинаться с r^{l+1} . Поэтому f(r) будем искать в виде

$$f(\mathbf{r}) = \mathbf{r}^{l+1} \sum_{k=0}^{\infty} c_k \mathbf{r}^k, \qquad (2.35)$$

где c_k – пока неизвестные коэффициенты ряда, k – индекс суммирования. Для их нахождения подставим (2.35) в (2.34) и соберём одинаковые степени r. Эта подстановка даёт

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left\{ c_{k+1} \left[(k+l+2)(k+l+1) - l(l+1) \right] + c_k \left[2 - 2\sqrt{-e} \left(k+l+1 \right) \right] \right\} r^{k+l} = 0.$$
 (2.36)

Равенство (2.36) должно выполняться при всех значениях переменной r от 0 до ∞ . Это возможно лишь в том случае, если коэффициенты при каждой степени r равны 0, т.е. когда

$$c_{k+1}[(k+l+2)(k+l+1)-l(l+1)]+c_{k}[2-2\sqrt{-e}(k+l+1)]=0$$

для любого значения k. Эта формула даёт рекуррентное соотношение между коэффициентами c_k и c_{k+1} :

$$c_{k+1} = \frac{2\left[\sqrt{-e}(k+l+1)-1\right]}{(k+l+2)(k+l+1)-l(l+1)}c_k, \qquad k = 0, 1, 2, 3, \dots$$
 (2.37)

Первый коэффициент c_0 , конечно, произволен, так как уравнение (2.34) однородное. Придав ему какое-либо значение, найдём из соотношения (2.37) коэффициент c_1 ; по c_1 найдём c_2 и т. д. Вычисляя все c_k , мы получим искомое решение в виде ряда (2.36). Если этот ряд содержит бесконечное число членов, то предел отношения соседних коэффициентов при $k \to \infty$

$$\frac{c_{k+1}}{c_k} \to \frac{2\sqrt{-e}}{k}$$

совпадает с таким же пределом отношения соседних коэффициентов в разложении

$$e^{2r\sqrt{-e}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\left(2\sqrt{-e}\right)^k}{k!} r^k.$$

Это приводит к неправильному по сравнению с условием (2.31) асимптотическому поведению функции

$$\Phi(r)$$
 ~ $r^{l+1}e^{-r\sqrt{-e}}e^{2r\sqrt{-e}}$ ~ $r^{l+1}e^{r\sqrt{-e}}
ightarrow \infty$ при $r
ightarrow \infty$.

Поэтому ряд (2.35) при некотором максимальном значении

$$k = k_{\text{max}} = n_r \ge 0$$

должен обрываться, т. е. для всех $k \ge n_r$ коэффициенты $c_{k+1} = 0$. Функция f(r) должна при этом стать полиномом степени

$$n = n_r + l + 1. (2.38)$$

Для этого необходимо, чтобы выполнялось равенство

$$\sqrt{-e} = \frac{1}{n_r + l + 1} = \frac{1}{n},$$

при котором, как это следует из (2.27), имеет место квантование энергии

$$E_n = -\frac{R_y}{n^2}, \qquad n = 1, 2, 3, \dots$$
 (2.39)

Число n, определяющее возможные значения энергии, или, иначе, $\it уровни$ энергии атома водорода, называют $\it главным$ $\it квантовым$ числом. Пси-функции стационарных состояний, соответствующие значению энергии $\it E_n$, нумеруются тремя квантовыми числами $\it n, l, m$ и определяются формулами

$$\Psi_{nlm}(\overset{\mathbf{r}}{r}) = e^{-\frac{r}{r_B n}} \left(\frac{r}{r_B}\right)^l \sum_{k=0}^{n-l-1} c_k \left(\frac{r}{r_B}\right)^k Y_{lm}(q, \mathbf{j}), \qquad (2.40)$$

где n = 1, 2, 3, ...; l = 0, 1, 2, n-1; m = -l, -l+1, ..., 0, l-1, l;

$$c_{k+1} = \frac{2[(k+l+1)-n]}{n[(k+l+2)(k+l+1)-l(l+1)]}c_k,$$

причём при каждом заданном n исходный коэффициент c_0 находится из условия нормировки $(\Psi_{nlm}, \Psi_{nlm}) = 1$.

- 1. Ключевыми для квантовых представлений понятиями являются: *стационарные состояния*, *уровни энергии* и переходы из одного стационарного состояния в другое, называемые также *квантовыми переходами*.
- 2. Следует различать понятия *стационарное состояние* и *уровень энергии*. Данному уровню энергии может принадлежать как одно, так и несколько различных стационарных состояний. В первом случае уровень называют *невырожденным*, во втором говорят о *вырождении* уровня соответствующей *кратности*.

Состояние атома с наименьшим значением энергии называют *основным*. Также называют и соответствующий ему уровень энергии.

Подсчитаем, сколько различных пси-функций принадлежат значению энергии (2.40) (уровню энергии E_n) для атома водорода. При каждом l мы имеем 2l+1 функций, отличающихся значением числа m. Но l пробегает при заданном n значения от 0 до n-1. Поэтому полное число функций равно

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

Таким образом, каждому уровню энергии E_n принадлежат n^2 различных пси-функций. Это означает, что каждый энергетический уровень атома водо-

рода при n>1 (т.е. за исключением основного) является n^2 -кратно выроженным.

3. Конкретной атомной системе (атому, молекуле и т.п.) ставят в соответствие *диаграмму* (схему) уровней энергии (рис. 2.1).



Рис. 2.1. Типичная схема уровней энергии атома

На подобных диаграммах принято откладывать значения энергии атома по оси ординат (снизу вверх и, как правило, в электрон-вольтах и в линейном масштабе). Соответственно уровни энергии изображаются горизонтальными прямыми, а квантовые переходы — вертикальными или наклонными стрелками.

4. Стационарное состояние с наименьшей энергией E_1 называется *основным*. Остальные стационарные состояния – *возбужденными*.

Разность энергий $\bar{E}_2 - E_1 = W_1 = eV_1$ называется **резонансной** энергией, а V_1 — **первым потенциалом возбуждения** (e — элементарный электрический заряд).

5. Предел $E_{\infty} = 0$, к которому сходятся дискретные уровни энергии атома E_1 , E_2 , E_3 , ..., является *границей ионизации*. Значения энергии, бо́льшие чем E_{∞} , соответствуют системе, состоящей из иона и несвязанного с ним электрона.

При энергиях атома $E < E_{\infty}$ говорят о *связанных* состояниях; разность $E_{\infty} - E_n$ равна энергии связи E_n^{cs} электрона в атоме (т.е. минимальной работе сторонних сил, необходимой для удаления электрона из атома, находящегося в стационарном состоянии с энергией E_n). Связанным состояниям соответствуют

дискретные уровни энергии. При $E > E_{\infty}$ энергетический спектр непрерывен (состояния *рассеяния*).

Понятно, что энергия связи электрона в невозбужденном атоме, т. е. $E_1^{cs}=E_{_\infty}-E_1=W_0=eV_0$, представляет собой энергию (а V_0 – потенциал) ионизации этого атома.

- 6. На диаграммах ось энергии связи E_{cs} направлена сверху вниз, т.е. противоположно оси энергии атома E. Начало отсчета (нуль) на оси E_{cs} совпадает с положением границы ионизации.
- 7. Абсолютно устойчиво лишь основное состояние в нем атом может находиться неограниченно долго. Из любого же возбужденного стационарного состояния атом без видимого внешнего воздействия неизбежно перейдет в одно из стационарных состояний с меньшей энергией. Таким образом, *среднее время* жизни t каждого из возбужденных стационарных состояний конечно. Типичное значение t для атомов порядка 10^{-8} с; это достаточно большой промежуток времени по атомным масштабам.
 - 8. Квантовые переходы подразделяются на:
 - спонтанные и вынужденные,
 - излучательные и безизлучательные,
- переходы с увеличением энергии *процессы возбуждения* и с ее уменьшением *процессы девозбуждения*,
- переходы между состояниями дискретного спектра энергии, переходы из дискретного в непрерывный (ионизация) и наоборот (захват).

Если при переходе атома из стационарного состояния с энергией E_n в другое стационарное состояние с энергией $E_{n'} < E_n$ происходит излучение света (такие переходы называются также *радиационными*), то его частота, согласно *условию частота* определяется следующей формулой:

$$W_{nn'} = \frac{E_n - E_{n'}}{h}. (2.41)$$

h Подставляя в (2.41) выражение (2.39) и учитывая, что $w_{nn'} = 2pc/l_{nn'}$, получаем формулу, совпадающую, учитывая (2.2), с эмпирической формулой (2.1):

$$\frac{1}{I_{nn'}} = R \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right), \tag{2.42}$$

где n'=1, 2, 3, ...; n=n'+1, n'+2, n'+3, ...;

$$R = \frac{R_{y}}{2phc} = \frac{m_{e}\tilde{e}^{4}}{4ph^{3}c} = \frac{m_{e}k^{2}e^{4}}{4ph^{3}c}$$
(2.43)

– постоянная Ридберга.

Формулу (2.42), определяющую длины волн спектра излучения атома водорода, называют *обобщенной формулой Бальмера*.

В соответствии с (2.39) картина уровней энергии атома водорода имеет вид, представленный на рис. 2.2.

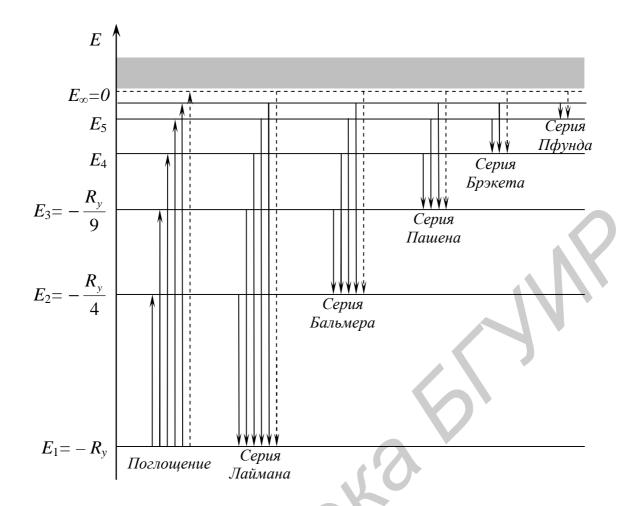


Рис. 2.2. Уровни энергии и спектр излучения атома водорода

С помощью диаграммы на рис. 2.2 и формулы (2.39) легко установить, что:

1. Энергия ионизации атома водорода равна

$$W_0 = E_{\infty} - E_1 = R_y.$$

Таким образом, постоянная R_{v} имеет смысл энергии ионизации этого атома.

2. Резонансная энергия (первый потенциал возбуждения) атома водорода составляет

$$W_1 = eV_1 = E_2 - E_1 = \frac{3}{4}R_y.$$

На рис. 2.2 квантовые переходы, как это принято, сгруппированы в *спек- тральные серии*. Каждая серия объединяет переходы с фиксированным нижним уровнем энергии и переменными верхними уровнями. Определенной серии соответствует свое число n' в формуле (2.42). Первые пять серий названы по именам их первооткрывателей; все линии каждой из этих серий попадают в одну из следующих спектральных областей:

n'=1 – серия Лаймана – далекий ультрафиолет;

n' = 2 — серия Бальмера — видимая и близкая ультрафиолетовая область;

n' = 3 — серия Пашена — близкая инфракрасная область;

n' = 4 — серия Брэкета — средняя инфракрасная область;

n' = 5 — серия Пфунда — далекая инфракрасная область.

В радиоастрономических исследованиях газовых туманностей регистрируются линии, соответствующие очень большим значениям n' и n, например, линия с длиной волны λ =15,7 м (n = 701, n' = 700).

В спектре поглощения холодного атомарного водорода наблюдается лишь серия Лаймана.

В данной работе изучается <u>серия Бальмера</u> в спектре испускания атома водорода. Длины волн линий этой серии определяются **формулой Бальмера** (при n'=2 в обобщенной формуле Бальмера (2.42)):

$$\frac{1}{I} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right). \tag{2.44}$$

Квантовое число n для первых четырёх линий серии Бальмера, лежащих в видимой области спектра, принимает значения 3, 4, 5, 6. Эти линии обозначаются соответственно H_a , H_b , H_g , H_d .

Описание экспериментальной установки

Свечение водорода создаётся в газоразрядной лампе при пропускании через неё электрического тока от высоковольтного источника. Для наблюдения спектра и измерения длин волн спектральных линий используется монохроматор.

Экспериментальная установка состоит из монохроматора типа МУМ, водородной лампы ТВС-15 в кожухе и источника питания лампы. Монохроматор и лампа крепятся с помощью рейтеров на двойном рельсе. Оптическая схема установки представлена на рис. 2.3.

Универсальный монохроматор МУМ представляет собой спектральный прибор с вогнутой отражательной дифракционной решеткой 10 и входной щелью 5 постоянной ширины 0,05 мм. Вместо выходной щели в

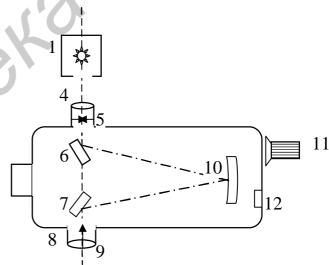


Рис. 2.3. Оптическая схема установки

монохроматоре установлены окуляр 9 и указатель 8 в виде острия, на которое при сканировании спектра можно выводить нужную спектральную линию.

Сканирование спектра производится поворотом решётки с помощью рукоятки 11, находящейся на боковой стенке справа. При этом длина волны спектральной линии, совмещённой с указателем 8, определяется непосредственно по цифровому механическому счётчику 12 с точностью до $\pm 0,2$ нм. Водородная лампа 1 устанавливается перед конденсорной линзой 4, закреплённой в блоке входной щели монохроматора. Поступающее в щель излучение направляется зеркалом 6 на дифракционную решётку 10, где разлагается на монохроматические компоненты и, отразившись от зеркала 7, попадает в окуляр 9.

Источник питания водородной лампы содержит следующие узлы: повышающий трансформатор $220~\mathrm{B}\times3000~\mathrm{B}$, блок конденсаторов, предназначенных для повышения устойчивости горения лампы, выключатель и индикатор включения. Кожух лампы обеспечивает безопасное подключение высокого напряжения и свободное перемещение лампы вдоль рельса.

ПОРЯДОК ВЫПОЛНЕНИЯ ЛАБОРАТОРНОЙ РАБОТЫ

Подготовка установки к работе

- 1. Ознакомьтесь с оптической схемой установки, приведенной в методическом описании данной лабораторной работы.
- 2. Убедитесь в наличии окуляра 6 (рис. 2.4) на передней стенке монохроматора 4 и входной щели 8 постоянной ширины 0,5 мм, расположенной на задней стенке монохроматора.
- 3. Включите тумблер 1 на источнике питания водородной лампы 2.
- 4. С помощью рукоятки 3, находящейся на боковой стенке монохроматора 4 (описание монохроматора типа

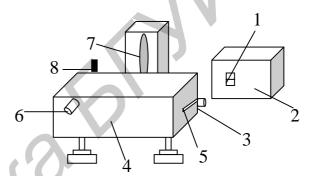


Рис. 2.4. Схема установки

МУМ приведено в методическом пособии к данной лабораторной работе), выставьте на цифровом счётчике 5 длину волны, соответствующую красной спектральной линии (≈650 нм).

ЗАДАНИЕ 1

1. Плавно поворачивая рукоятку 3, в окуляре 6 наблюдайте яркую линию красного цвета H_a из серии Бальмера. При необходимости произведите фокусировку окуляра, немного перемещая его вдоль оптической оси. Яркость спектральных линий можно регулировать перемещением водородной лампы 7 вдоль рельсы (окно лампы должно находиться от задней стенки монохроматора на расстоянии 15–25 см).

ВНИМАНИЕ! Спектр излучения водородной лампы содержит множество спектральных линий, в большинстве относящихся к молекуле водорода H_2 . На фоне молекулярного (линейчатого) спектра линии спектра атомарного водорода выглядят значительно ярче.

- 2. Поворачивая рукоятку 3 в сторону уменьшения длин волн, наблюдайте остальные линии видимого диапазона серии Бальмера:
 - линию H_b зелено-голубого цвета,
 - линию H_g фиолетово-синего цвета,
 - линию H_d темно-фиолетового цвета.

ВНИМАНИЕ! Наблюдать линию H_d значительно труднее остальных линий, т. к. её интенсивность невелика.

3. Схематически зарисуйте наблюдаемый спектр, соблюдая интервалы между линиями.

ЗАДАНИЕ 2

1. Проведите измерения длин волн, соответствующих линиям H_a , H_b , H_g и H_d . При этом каждую линию располагайте строго посередине выходной щели (окуляра), а соответствующие значения длин волн определите с точностью до 0,2 нм по цифровому счётчику. Результаты измерений занесите в табл. 2.1.

Таблица 2. 1

Линия	H_a	H_b	H_{g}	H_d
n				
Цвет				
<i>I</i> , 10 ⁻⁹ м				
R_n , 10^7 m ⁻¹				

2. По формуле $R = \frac{4n^2}{l(n^2-4)}$, (где n – главное квантовое число), полученной из формулы (2.44) методического описания данной лабораторной работы, рассчитайте значения постоянной Ридберга для каждой из четырёх (N=4) спектральных линий и внесите их в табл. 2.1.

3. По формулам
$$\overline{R} = \frac{1}{N} \sum_{n=3}^{3+(N-1)} R_n$$
 и $\mathbf{S}_R = \sqrt{\frac{1}{N(N-1)} \sum_{n=3}^{3+(N-1)} (R_n - \overline{R})^2}$

вычислите среднее арифметическое значение постоянной Ридберга \overline{R} и оцените среднеквадратичное отклонение σ_R от \overline{R} . Запишите окончательный результат экспериментального определения постоянной Ридберга в виде

$$R = R \pm s_R$$
.

4. Сравните полученное экспериментальное значение постоянной Ридберга с её теоретическим значением, вычисленным по формуле

$$R = \frac{m_e k^2 e^4}{4 p \mathbf{h}^3 c} \,.$$

Значения констант приведены ниже.

5. Сделайте вывод.

ЗАДАНИЕ 3

1. По экспериментальному значению постоянной Ридберга вычислите значение атомной единицы энергии R_{ν} (ридберга) по формуле

$$R_{y} = Rhc$$
.

- 2. Переведите значение ридберга R_{y} в электрон-вольты.
- 3. Сравните полученное экспериментальное значение ридберга R_y с его теоретическим значением, которое вычислите по формуле

$$R_{y} = \frac{m_{e}k^{2}e^{4}}{2\mathbf{h}^{2}}.$$

4. Вычислите в электрон-вольтах энергии восьми нижних уровней по формуле

$$E_n = -\frac{R_y}{n^2},$$

где n – главное квантовое число. Результаты вычислений внесите в табл. 2.2.

Таблица 2.2

n	1	2	3	4	5	6	7	8
E_n , эВ								

- 5. По данным табл 2.2 в масштабе 1 эВ : 1 см постройте диаграмму уровней энергии атома водорода и отметьте на ней стрелками квантовые переходы, соответствующие сериям Лаймана, Бальмера и Пашена.
 - 6. Вычислите в электрон-вольтах энергию ионизации W_0 атома водорода $W_0 = E_{\scriptscriptstyle \infty} E_{\scriptscriptstyle 1} = R_{\scriptscriptstyle \gamma}$.
- 7. Вычислите в электрон-вольтах резонансную энергию W_1 атома водорода

$$W_1 = E_2 - E_1 = \frac{3}{4} R_y.$$

Значения констант

$$c = 2,99792 \cdot 10^{8} \text{ м/c}$$

$$h = 6,6262 \cdot 10^{-34} \text{ Дж·c}$$

$$h = 1,05459 \cdot 10^{-34} \text{ Дж·c}$$

$$e_{0} = 8,85419 \cdot 10^{-12} \text{ Ф/м}$$

$$k = \frac{1}{4pe_{0}} = 8,98755 \cdot 10^{9} \frac{\text{H} \cdot \text{M}^{2}}{\text{K}\pi^{2}}$$

$$e = 1,60219 \cdot 10^{-19} \text{ Кл}$$

$$m_{e} = 9,10953 \cdot 10^{-31} \text{ кг}$$

$$m_{p} = 1,67265 \cdot 10^{-27} \text{ кг}$$

$$m_{p} = 1836,2$$

$$1 \text{ эВ} = 1,60219 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$$

Контрольные вопросы

- 1. Какой вид имеют бальмеровские термы? Формула Бальмера? Обобщенная формула Бальмера?
- 2. Как формулируется комбинационный принцип Ритца? Какова его связь с условием частот Бора?
- 3. Чему равна постоянная Ридберга, как она связана с энергией ионизации атома водорода и с фундаментальными постоянными?
- 4. Какие важнейшие свойства атома не находят своего объяснения в классической теории?
- 5. Дайте определение пси-функции частицы и сформулируйте принцип суперпозиции состояний.
- 6. Как определяется нормированная пси-функция и каков содержательный смысл её квадрата модуля?
 - 7. Какие состояния частицы называют стационарными?
- 8. Дайте определение эрмитова оператора и запишите выражения операторов координат и проекций импульса частицы на координатные оси в пространстве пси-функций $\Psi(r,t)$. Как определяются операторы физических величин (динамических переменных), являющиеся их функциями?
- 9. Каков физический смысл спектра собственных значений эрмитова оператора, поставленного в соответствие динамической переменной? Перечислите возможные виды спектров собственных значений.
- 10. Дайте определение оператора Гамильтона и запишите нестационарное и стационарное уравнения Шрёдингера. Перечислите стандартные условия, которым должна удовлетворять пси-функция.
- 11. Запишите стационарное уравнение Шрёдингера для атома водорода и формулу его энергетического спектра. Каков общий вид пси-функций, описывающих стационарные состояния атома водорода?
- 12. Что такое кратность вырождения уровня энергии? Чему равна кратность вырождения n-го уровня энергии атома водорода?
- 13. Перечислите квантовые числа, нумерующие стационарные состояния атома водорода и операторы динамических переменных, собственные значения которых определяются этими числами.
- 14. Как интерпретируется условие частот Бора на основе представлений о фотонах?
- 15. К какому типу относится каждый из переходов a, b, ..., h, изображённых на рис. 2.1? Какой из них соответствует наибольшей, а какой наименьшей длине волны излучения?
- 16. Какой уровень энергии атома называют основным? Что называется резонансной энергией? Резонансным потенциалом? Потенциалом ионизации?
- 17. Что называется спектральной серией? Каким квантовым переходам соответствуют и в области каких частот лежат серии Лаймана, Бальмера, Пашена, Брэкета и Пфунда в спектре излучения атома водорода?
- 18. Какие атомные системы называются водородоподобными? Как изменится обобщённая формула Бальмера для водородоподобных ионов?

Литература

- 1. Шпольский, Э. В. Атомная физика. Т.1 / Э. В. Шпольский. М., 1984.
- 2. Ландсберг, Г. С. Оптика / Г. С. Ландсберг. М., 1976.
- 3. Сивухин, Д. В. Атомная физика / Д. В. Сивухин. М., 1986.
- 4. Савельев, И. В. Курс общей физики. Т.3 / И. В. Савельев. М., 1987.
- 5. Грашин, А. Ф. Квантовая механика / А. Ф. Грашин. М., 1974.
- 6. Граков, В. Е. Практикум по атомной физике / В. Е. Граков, А. А. Со-кольский. Минск, 2002.

СОДЕРЖАНИЕ

 Лабораторная работа №2.19 Изучение явления поляризации света 		3
изуление явления поляризации света		
2. Лабораторная работа №3.8		1.0
Изучение спектра излучения атома водор	ода	12

Учебное издание

Андрианова Елена Вилоровна Дорошевич Ирина Леонидовна Мурзов Виктор Иванович Ранцевич Валерий Брониславович

ВОЛНОВАЯ ОПТИКА И АТОМНАЯ ФИЗИКА

Лабораторный практикум

по курсу «Физика»

Редактор Е. Н. Батурчик Корректор М. В. Тезина

Подписано в печать 25.06.2008. Гарнитура «Таймс».

Уч.-изд. л. 1,8.

Формат 60×84 1/16. Печать ризографическая. Тираж 350 экз. Бумага офсетная. Усл. печ. л. 1,98. Заказ 559.

Издатель и полиграфическое исполнение: Учреждение образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники» ЛИ №02330/0056964 от 01.04.2004. ЛП №02330/0131666 от 30.04.2004. 220013, Минск, П. Бровки, 6