

Министерство образования Республики Беларусь

Учреждение образования  
«Гомельский государственный университет  
имени Франциска Скорины»

**А. Н. ГОДЛЕВСКАЯ, В. Г. ШОЛОХ**

# **ФИЗИКА АТОМА И АТОМНЫХ ЯВЛЕНИЙ**

**Квантовые модели и экспериментальные основы  
спектроскопии в атомной физике**

Практическое пособие  
для студентов специальностей  
1-31 04 01 «Физика (по направлениям)»

Гомель  
ГГУ им. Ф. Скорины  
2015

УДК 535.33:539.18 (076.5)  
ББК 22.344я73+22.38я73  
Г592

Рецензенты:

кандидат физико-математических наук В. Н. Капшай;  
кандидат технических наук А. Н. Попов

Рекомендовано к изданию научно-методическим советом  
учреждения образования «Гомельский государственный  
университет имени Франциска Скорины»

**Годлевская, А. Н.**

Г592 Физика атомов и атомных явлений : Квантовые модели и экспериментальные основы спектроскопии в атомной физике : практическое пособие / А. Н. Годлевская, В. Г. Шолох ; М-во образования РБ, Гом. гос. ун-т им. Ф. Скорины. – Гомель: ГГУ им. Ф. Скорины, 2015. – 47 с.  
ISBN 978-985-439-942-3

В целях оказания помощи студентам в овладении базовыми знаниями, а также в подготовке к выполнению лабораторных работ в практическое пособие включены теоретические основы учебного материала по разделам «Основные положения квантовой механики» и «Излучение атомных систем» курса «Физика атомов и атомных явлений» и методические указания относительно порядка выполнения лабораторных работ с применением натуральных установок и компьютерных моделей.

Практическое пособие адресовано студентам физических специальностей 1-31 04 01 «Физика»; 1-31 04 03 «Физическая электроника»; 1-02 05 04-04 «Физика. Техническое творчество».

**УДК 535.33:539.18 (076.5)**  
**ББК 22.344я73+22.38я73**

**ISBN 978-985-439-942-3**

© Годлевская А. Н., Шолох В. Г., 2015  
© УО «Гомельский государственный  
университет им. Ф. Скорины», 2015

## Содержание

<b>Введение</b> .....	4
<b>Тема 1. Стационарное уравнение Шрёдингера</b> .....	5
<b>Лабораторная работа 1. Изучение стационарных состояний микрочастицы в прямоугольной потенциальной яме</b> .....	20
<b>Лабораторная работа 2. Исследование вероятности прохождения электроном потенциального барьера</b> .....	22
<b>Лабораторная работа 3. Изучение стационарных состояний одномерного гармонического осциллятора</b> .....	26
<b>Тема 2 Экспериментальные основы анализа спектров атомов</b> .....	28
<b>Лабораторная работа 4. Определение дисперсии и разрешающей способности спектральных приборов</b> .....	40
<b>Лабораторная работа 5. Изучение уширения спектральных линий</b> .....	44
<b>Литература</b> .....	47

## Введение

В ходе выполнения лабораторных работ физического практикума студенты осваивают современные методы измерения физических величин, изучают физические приборы и приобретают навыки экспериментальной работы на натуральных установках и в виртуальной лаборатории, учатся интерпретировать полученные результаты, применяя на практике теоретические знания.

В практическом пособии приведены краткие теоретические сведения, необходимые студентам для самостоятельной подготовки к выполнению лабораторных работ, методические указания относительно порядка их выполнения и вопросы, предназначенные для самоконтроля. Дополнительную информацию, необходимую при оформлении отчёта о лабораторной работе и подготовке к его защите, студенты могут найти в литературе, список которой имеется в практическом пособии.

В целях акцентирования внимания на физической сути решений квантовомеханических задач в данное практическое пособие включены лабораторные работы, в которых исследуются решения стационарного уравнения Шрёдингера для микрочастицы, движущейся в простейших модельных потенциальных полях.

Глубокое понимание закономерностей в спектрах сложных атомов базируется на знании физической природы излучения атома, а также устройства, принципа действия и основных характеристик спектрального прибора. Соответствующую подготовку студенты получают при изучении устройства и принципа действия спектральных приборов разного типа, их градуировке и определении основных характеристик и при исследовании контура спектральной линии.

Методические материалы адресованы студентам, обучающимся по специальностям 1-31 04 01 02 «Физика (производственная деятельность)», 1-31 04 01 03 «Физика (научно-педагогическая деятельность)», 1-31 04 01 04 «Физика (управленческая деятельность)», 1-31 04 03 «Физическая электроника», 1-02 05 04 04 «Физика. Техническое творчество».

# Тема 1. Стационарное уравнение Шрёдингера

## Теоретические основы

Квантовая механика является теорией, на основе которой объясняют основные свойства объектов микроскопических размеров: атомов, молекул, атомных ядер; в этой области науки изучают явления, происходящие в системах, линейные размеры которых порядка ( $10^{-7} \div 10^{-15}$ ) м. Основоположниками квантовой механики были Л. де Бройль, Н. Бор, Э. Шрёдингер, В. Гейзенберг, М. Борн, П. Дирак, В. Паули, Э. Ферми и др.

Основная задача квантовой механики состоит в отыскании функций состояния микрочастиц, обладающих корпускулярными и волновыми свойствами, в разных физических условиях. Для решения этой задачи необходимо *основное уравнение квантовой механики*, по своему значению в ней аналогичное уравнениям Ньютона в классической механике. Такое уравнение должно удовлетворять следующим требованиям:

1. Оно должно быть универсальным в том, что состояние частицы в любых физических условиях должно описываться  $\Psi$ -функцией, являющейся решением этого уравнения.

2. В общем случае это уравнение должно быть дифференциальным уравнением в частных производных по координатам и времени, так как оно должно описывать состояния движения частиц во времени и в пространстве.

3. В уравнении должна быть учтена связь полной энергии  $E$  и импульса  $p$ , характерная для классической механики, что обусловлено необходимостью выполнения *принципа соответствия*. В нерелятивистском приближении такая связь имеет вид:

$$E = \frac{p^2}{2m} + U.$$

4. Уравнение должно быть линейным по  $\Psi(\vec{r}, t)$ . Если функции  $\Psi_1(\vec{r}, t)$ ,  $\Psi_2(\vec{r}, t)$ , ...,  $\Psi_n(\vec{r}, t)$ , ... описывают возможные состояния движения частицы в заданных условиях, то любая линейная комбинация этих функций  $\Psi(\vec{r}, t) = \sum_n C_n \Psi_n(\vec{r}, t)$  также описывает возможное состояние движения этой частицы в тех же условиях. При этом величина  $|C_n|^2$  характеризует вероятность того, что при экспериментальных измерениях частица будет обнаружена в состоянии, которому соответствует функция  $\Psi_n(\vec{r}, t)$ .

Уравнение, удовлетворяющее перечисленным требованиям, было постулировано в 1926 году австрийским физиком Э. Шрёдингером. Оно имеет вид:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U(\vec{r}, t) \Psi,$$

где  $\Delta$  – оператор Лапласа,

$m$  – масса частицы,

$U(\vec{r}, t)$  – потенциальная энергия.

Это уравнение называют *временным (или общим) уравнением Шрёдингера*.

Для частицы, находящейся в стационарном состоянии, уравнение Шрёдингера имеет вид (*стационарное уравнение Шрёдингера*):

$$\Delta \Psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \Psi = 0. \quad (1.1)$$

Решением уравнения Шрёдингера в общем случае является функция состояния  $\Psi(x, y, z)$ , квадрат модуля которой  $|\Psi|^2 = \Psi^* \Psi$  имеет смысл *плотности вероятности* обнаружить частицу в точке пространства с координатами  $x, y, z$ . В соответствии с этим *вероятность* обнаружения частицы в малом объёме  $d\tau$  равна  $\Psi^* \Psi d\tau$ .

В соответствии со смыслом  $|\Psi|^2$  функция  $\Psi$  должна удовлетворять *стандартным* условиям: она должна быть во всем пространстве конечной, непрерывной и однозначной функцией, её первые производные по координатам также должны быть непрерывны.  $\Psi$ -функция должна удовлетворять условию нормировки

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \Psi d\tau = 1. \quad (1.2)$$

Решения стационарного уравнения Шрёдингера удовлетворяют этим требованиям при вполне конкретных условиях, например, при определённых дискретных значениях энергии, которая содержится в уравнении (1.1) в качестве параметра.

Определим состояния частицы, находящейся в одномерной прямоугольной бесконечно глубокой потенциальной яме. *Потенциальная яма* – ограниченная в пространстве область, в которой потенциальная энергия частицы, движущейся в силовом поле, меньше, чем по обе стороны от неё. При  $0 < x < a$  потенциальную энергию частицы будем считать равной нулю, а вне этого интервала – бесконечно большой (рисунок 1.1).

Выразим из уравнения (1.1) величину

$$\frac{\Delta\Psi}{\Psi} = \frac{2m}{\hbar^2}(U - E). \quad (1.3)$$

Так как вне интервала  $(0, a)$  потенциальная энергия бесконечно велика, то анализируя выражение (1.3), видим, что за пределами потенциальной ямы  $\Psi = 0$  и в таких модельных условиях частица при своём движении не может выйти за пределы области  $(0, a)$ . Так как  $\Psi$ -функция должна быть непрерывна во всей области варьирования координаты  $x$ , то она обращается в нуль и в точках  $x=0$  и  $x=a$ , то есть для функции  $\Psi(x)$  выполняются следующие граничные условия:  $\Psi(0) = \Psi(a) = 0$ .

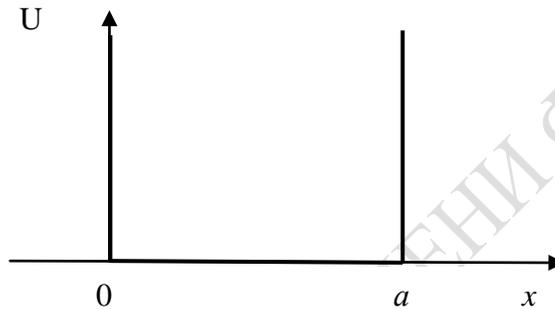


Рисунок 1.1 – Схематическое представление прямоугольной одномерной потенциальной ямы

Уравнение Шрёдингера для частицы, движущейся внутри ямы – в области, где потенциальная энергия равна нулю, – имеет вид:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + k^2 \Psi = 0, \quad (1.4)$$

где принято обозначение

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}. \quad (1.5)$$

Общее решение этого уравнения таково:

$$\Psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx).$$

Граничное условие  $\Psi(0) = 0$  выполнимо при  $B = 0$ , а из граничного условия  $\Psi(a) = 0$  следует, что

$$ak = n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.6)$$

На основании соотношений (1.5) и (1.6) получаем выражение для определения значений энергии микрочастицы в стационарных состояниях (уровней энергии):

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}. \quad (1.7)$$

Выражение (1.7) – правило квантования энергии частицы, локализованной в бесконечно глубокой потенциальной яме.

Из (1.7) следует, что минимальная энергия, соответствующая основному состоянию движения частицы, не равна нулю:

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}.$$

Микрочастице в этом состоянии соответствует функция

$$\Psi_1 = A \sin(\pi x/a),$$

которая не обращается в нуль ни в одной точке интервала  $(0, a)$ .

Из формулы (1.7) следует, что при уменьшении линейного размера ямы минимальная энергия микрочастицы увеличивается.

Амплитуду  $A$  (нормировочный множитель) можно определить, нормируя функцию  $\Psi(x) = A \sin(kx)$  на единицу:

$$\int_0^a \Psi^* \Psi dx = A^2 \int_0^a \sin^2(kx) dx = A^2 a/2 = 1.$$

Тогда нормировочный множитель

$$A = \sqrt{2/a},$$

и система собственных функций микрочастицы имеет вид:

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}. \quad (1.8)$$

Число стационарных состояний микрочастицы в бесконечно глубокой потенциальной яме не ограничено:  $n = 1, 2, 3, \dots$

Рассмотрим теперь состояния частицы, потенциальная энергия которой равна  $U_1$  при  $x \leq 0$ ;  $U_2$  – при  $x \geq a$ , а в интервале  $0 < x < a$  обращается в нуль (рисунок 1.2).

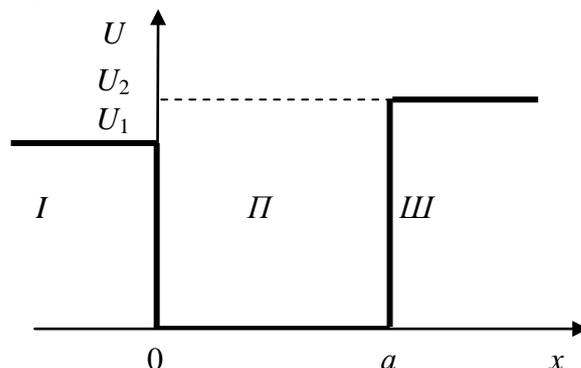


Рисунок 1.2 – Схематическое изображение одномерной асимметричной прямоугольной потенциальной ямы

Так как значения энергии, определяющие конфигурацию потенциальной ямы, конечны, то частица может находиться в любой области одномерного пространства  $-\infty \leq x \leq \infty$ . Поэтому нужно найти волновую функцию, соответствующую микрочастице в каждой из трёх областей, отмеченных на рисунке 1.2.

Уравнение Шрёдингера для микрочастицы, движущейся в областях *I*, *II*, *III*, соответственно имеет вид:

$$\begin{aligned} \Psi_I''(x) + k_1^2 \Psi_I(x) &= 0, \quad \text{где } k_1 = \sqrt{\frac{2m(E - U_1)}{\hbar^2}}; \\ \Psi_{II}''(x) + k_2^2 \Psi_{II}(x) &= 0, \quad \text{где } k_2 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}; \\ \Psi_{III}''(x) + k_3^2 \Psi_{III}(x) &= 0, \quad \text{где } k_3 = \sqrt{\frac{2m(E - U_2)}{\hbar^2}}. \end{aligned} \quad (1.9)$$

Рассмотрим частный случай, когда значение полной энергии частицы удовлетворяет условию:  $E < U_2 < U_1$ . При этом решения уравнения Шрёдингера для микрочастицы, движущейся в областях *I*, *II*, *III*, соответственно будут иметь вид:

$$\begin{aligned} \text{при } x \leq 0 & \quad \Psi_I = ae^{k_1 \cdot x}, \\ \text{при } 0 > x > a & \quad \Psi_{II} = b \sin(k_2 x + \alpha), \\ \text{при } x \geq a & \quad \Psi_{III} = ce^{-k_3 x}. \end{aligned}$$

Учитывая непрерывность  $\Psi$ -функции и её производной на границах потенциальной ямы, получим систему трансцендентных уравнений

$$\operatorname{tg}(\alpha) = k_2 / k_1, \quad \operatorname{tg}(k_2 a + \alpha) = -k_2 / k_3. \quad (1.10)$$

Решая графически систему этих уравнений с учётом определений, введённых для величин  $k_1$ ,  $k_2$ ,  $k_3$  в (1.9), получаем набор собственных значений энергии  $E$  микрочастицы, образующих дискретный спектр. Число значений энергии в рассматриваемой задаче конечно и зависит от высоты более низкого потенциального барьера. При  $U_1 = U_0$  уровень  $E_n$  появляется при значении  $U_0$ ,

удовлетворяющем условию  $\sqrt{\frac{2ma^2 U_0}{\hbar^2}} = n\pi$ , в котором  $n = 1, 2, 3, \dots$ ,

$n_{\max}$ . Например, для электрона, который движется в потенциальной яме, имеющей ширину  $a = 0,6 \cdot 10^{-9}$  м и ограниченной потенциальными барьерами высотой  $U_1 = 5$  эВ и  $U_2 = 10$  эВ, имеется два решения системы (1.10):

$$E_1 = 0,67 \text{ эВ}, E_2 = 2,59 \text{ эВ},$$

то есть внутри потенциальной ямы для рассматриваемой частицы реализуемы только два стационарных состояния; соответствующие им два уровня энергии показаны на рисунке 1.3.

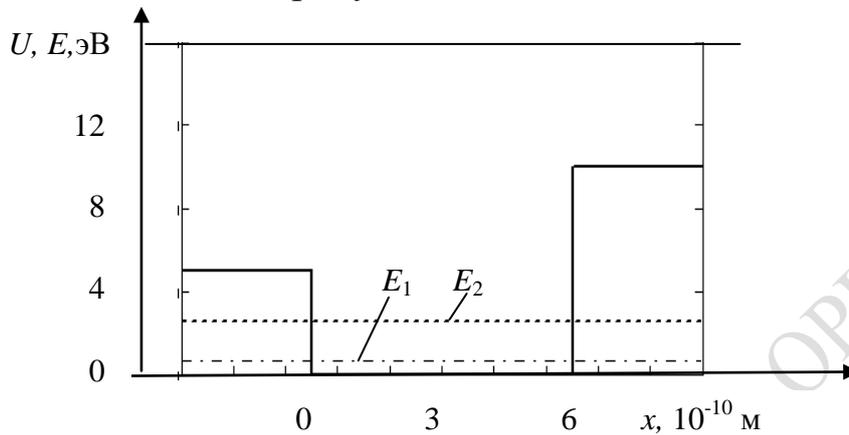


Рисунок 1.3 – Собственные значения энергии электрона

В результате решения уравнения (1.1) определяются также собственные функции  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$ , соответствующие состояниям с энергиями  $E_1$  и  $E_2$ . Зависимость квадрата модуля этих функций состояния от координаты  $x$  представлена на рисунке 1.4.

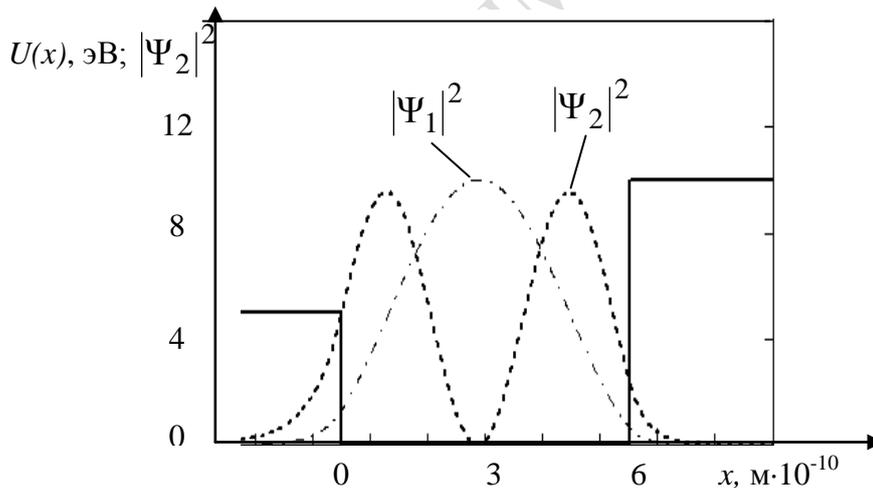


Рисунок 1.4 – Распределение плотности вероятности обнаружения электрона по координате

Анализируя графики функций  $|\Psi_1|^2$  и  $|\Psi_2|^2$ , видим, что распределение плотности вероятности обнаружить электрон в области потенциальной ямы в каждом из возможных состояний различно. Ни в одном из этих состояний плотность вероятности обнаружения частицы не равна нулю на границе областей с разной потенциальной энергией, как это имело место при движении частицы в бесконечно глубокой потенциальной яме. Кроме того, существует вероятность обнаружения

частицы за пределами потенциальной ямы, быстро уменьшающаяся при удалении от её границ.

*Потенциальный барьер* – ограниченная в пространстве область, в которой потенциальная энергия частицы, движущейся в силовом поле, больше, чем по обе стороны от неё.

Целью квантовомеханического рассмотрения задачи о прохождении частицы через потенциальный барьер является определение коэффициента отражения  $R$ , являющегося мерой вероятности того, что частица останется в «добарьерной» области пространства, и коэффициента прозрачности (прохождения)  $D$ , характеризующего вероятность того, что частица преодолет потенциальный барьер.

Рассмотрим сначала одномерное движение частицы, имеющей массу  $m$  и энергию  $E$ , вдоль оси  $x$  в области одномерного прямоугольного потенциального барьера бесконечной ширины, конфигурация которого представлена на рисунке 1.5.

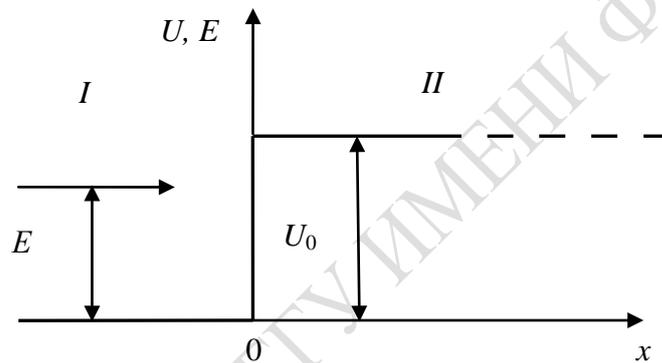


Рисунок 1.5 – Одномерное движение частицы в области прямоугольного потенциального барьера бесконечной ширины

Обозначим высоту потенциального барьера  $U_0$ . Так как  $U_0$  не зависит от времени, следует решить стационарное уравнение Шрёдингера для частицы, которая движется свободно в области пространства  $I$  –

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi_I(x)}{dx^2} = E \Psi_I(x), \quad (1.11)$$

и в потенциальном поле  $U_0$  в области пространства  $II$  (рисунок 1.5) –

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi_{II}(x)}{dx^2} + U_0 \Psi_{II}(x) = E \Psi_{II}(x). \quad (1.12)$$

Введём обозначения

$$\frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE} = k_1, \quad \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - U_0)} = k_2. \quad (1.13)$$

Общее решение уравнения (1.11) имеет вид:

$$\Psi_I = a_1 e^{ik_1 x} + b_1 e^{-ik_1 x} \equiv \Psi_I^{(+)} + \Psi_I^{(-)}. \quad (1.14)$$

Если учесть, что в стационарных состояниях волновая функция гармонически зависит от времени, то  $\Psi_I$  следует трактовать как суперпозицию падающей  $\Psi_I^{(+)}$  и отражённой  $\Psi_I^{(-)}$  волн де Бройля. Коэффициент отражения  $R$  вводится на основе аналогии между дебройлевскими и световыми волнами и определяется как отношение интенсивностей отражённой и падающей волн де Бройля:

$$R = \frac{|b_1|^2}{|a_1|^2}.$$

Если считать амплитуду падающей волны де Бройля равной единице ( $a_1 = 1$ ), то коэффициент отражения волны де Бройля от потенциального барьера определяется величиной

$$R = |b_1|^2. \quad (1.15)$$

Вид решений уравнения (1.12) зависит от соотношения энергии частицы  $E$  и высоты потенциального барьера  $U_0$ .

Выделим два частных случая.

Пусть  $E \geq U_0$ . При этом решение уравнения (1.12) имеет вид:

$$\Psi_{II} = a_2 e^{ik_2 x} \equiv \Psi_{II}^{(+)}. \quad (1.16)$$

Коэффициент прохождения частицы через потенциальный барьер  $D$  также вводится на основе аналогии между дебройлевскими и световыми волнами и определяется как отношение интенсивностей прошедшей и падающей волн де Бройля:

$$D = \frac{|a_2|^2}{|a_1|^2} \cdot \frac{k_2}{k_1} = |a_2|^2 \cdot \frac{k_2}{k_1}. \quad (1.17)$$

В формуле (1.17) принято, что  $|a_1| = 1$ .

Чтобы найти амплитуды  $b_1$  и  $a_2$ , воспользуемся условиями непрерывности волновой функции и первой её производной на границе потенциального барьера, из которых следует, что при  $x = 0$

$$\Psi_I(x=0) = \Psi_{II}(x=0), \quad 1 + b_1 = a_2; \quad (1.18)$$

$$\Psi_I'(x=0) = \Psi_{II}'(x=0), \quad k_1 - k_1 b_1 = k_2 a_2. \quad (1.19)$$

Решая систему уравнений (1.18) и (1.19), получим:

$$b_1 = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}, \quad a_2 = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}. \quad (1.20)$$

Тогда в соответствии с формулами (1.15) и (1.17) коэффициенты отражения и прохождения частицы будут определяться следующим образом:

$$R = |b_1|^2 = \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2, \quad (1.21)$$

$$D = \frac{|a_2|^2 k_2}{|a_1|^2 k_1} = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}. \quad (1.22)$$

Анализируя формулу (1.22), заметим, что коэффициент прозрачности барьера-ступеньки зависит от полной энергии микрочастицы. Данная зависимость, рассчитанная для электрона при  $U_0 = 2,14$  эВ, представлена на рисунке 1.6.

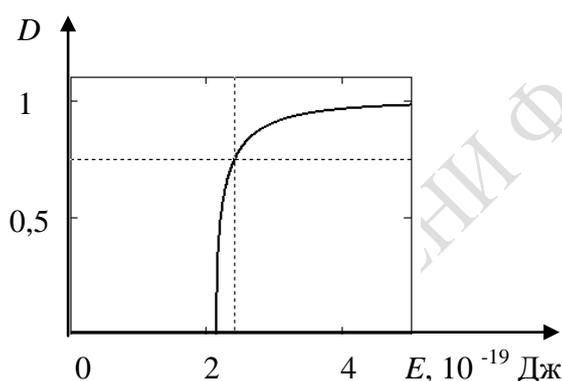


Рисунок 1.6 – Зависимость коэффициента прозрачности барьера-ступеньки от энергии электрона

Полученный результат существенно отличается от того, который получен при описании движения частицы в рамках классической теории. В соответствии с представлениями классической механики частица, энергия которой  $E \geq U_0$ , всегда (т.е. с вероятностью, равной единице) проникает в область барьера (с полной потерей кинетической энергии, если  $E = U_0$ ). При квантовомеханическом описании движения частицы при  $E \geq U_0$  имеется определённая вероятность отражения частицы от потенциального барьера; отражение будет полным (то есть  $R = 1$ ), если  $E = U_0$ .

Предположим теперь, что  $E < U_0$ . При этом решение уравнения (1.12), удовлетворяющее требованию конечности  $\Psi$ -функции, в области II имеет вид:

$$\Psi_{II} = a_2' e^{-kx}, \quad (1.23)$$

где

$$ik = k_2, \quad k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}. \quad (1.24)$$

В рассматриваемых условиях амплитуды  $a_2'$  и  $b_1$  являются комплексными величинами, и коэффициент отражения равен единице:

$$R = \left| \frac{k_1 - ik}{k_1 + ik} \right|^2 = 1. \quad (1.25)$$

Коэффициент прозрачности при этом

$$D = 1 - R = 0. \quad (1.26)$$

Несмотря на это, имеется вероятность проникновения частицы внутрь потенциального барьера. Действительно,

$$|\Psi_{II}|^2 = |a_2'|^2 e^{-2kx} \neq 0. \quad (1.27)$$

Этот результат противоречит полученному в классической механике выводу о невозможности проникновения частицы в область потенциального барьера, если  $E < U_0$ .

Найдём далее коэффициент прозрачности  $D$  одномерного прямоугольного потенциального барьера шириной  $d$  и высотой  $U_0$ , схематически изображённого на рисунке 1.7, в предположении, что для движущейся к нему частицы выполняется условие  $E > U_0$ .

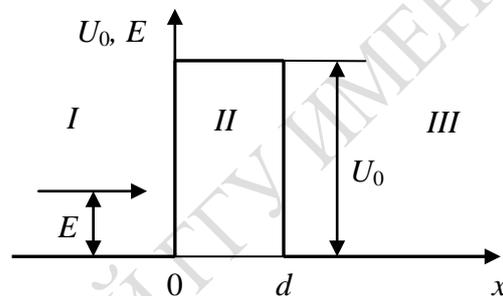


Рисунок 1.7 – Одномерное движение частицы в области прямоугольного потенциального барьера конечной ширины

В соответствии с методикой, использованной при решении предыдущей задачи, можем получить решение уравнения Шрёдингера, соответствующее движению частицы в каждой из трёх областей пространства  $I, II, III$  (рисунок 1.7) соответственно:

$$\begin{aligned} \Psi_I &= a_1 e^{ik_1 x} + b_1 e^{-ik_1 x}; \\ \Psi_{II} &= a_2 e^{-kx} + b_2 e^{kx}; \end{aligned} \quad (1.28)$$

$$\Psi_{III} = a_3 e^{ik_1(x-d)},$$

где величины  $k_1$  и  $k$  определяются по формулам (1.13) и (1.24).

Коэффициент прозрачности в рассматриваемых условиях определяется по формуле

$$D = |a_3|^2. \quad (1.29)$$

Амплитуду волны де Бройля  $a_3$  найдём, решая систему линейных алгебраических уравнений, представляющих условия непрерывности волновой функции и её первой производной на границах  $I$  и  $II$ , а также  $II$  и  $III$  областей пространства. В результате получим

$$a_3 = \frac{4kk_1}{(k_1 + ik)(k - ik_1)} e^{-kd}. \quad (1.30)$$

Тогда коэффициент прохождения имеет вид:

$$D = |\Psi_{III}|^2 = |a_3|^2 = \frac{16}{\left(\frac{k}{k_1} + \frac{k_1}{k}\right)^2} \cdot e^{-2kd}. \quad (1.31)$$

Полученный результат с учётом выражений (1.11) и (1.24) можно записать следующим образом:

$$D = D_0 e^{\frac{-2d}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}}. \quad (1.32)$$

Если  $k_1$  и  $k$  – величины одного порядка, то  $D_0$  имеет значение, близкое к единице, и коэффициент прозрачности  $D$  определяется экспоненциальным множителем. Отметим также, что в области  $III$  частица имеет ту же энергию  $E$ , что и в области  $I$ . Прохождение частицы, энергия которой  $E < U_0$ , через потенциальный барьер называется *туннельным эффектом*.

Зависимость коэффициента прозрачности прямоугольного потенциального барьера, высота которого  $U_0 = 2,1 \cdot 10^{-19}$  Дж и ширина  $d = 5 \cdot 10^{-9}$  м, от полной энергии электрона при  $E < U_0$  представлена на рисунке 1.8.

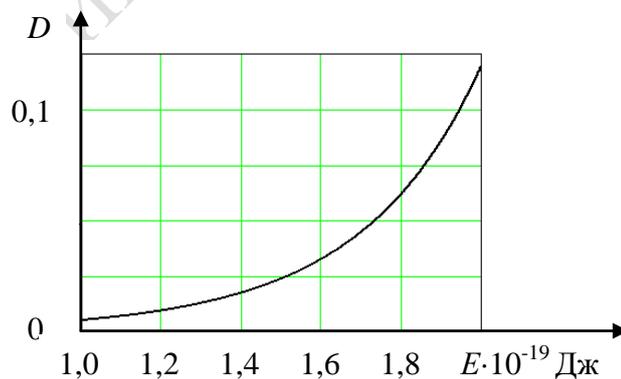


Рисунок 1.8 – Зависимость коэффициента прозрачности прямоугольного потенциального барьера от полной энергии электрона ( $E < U_0$ )

При решении задачи об определении коэффициентов прохождения и отражения микрочастиц при условии  $E > U_0$  также получают результаты, противоречащие выводам классического описания. В со-

ответствии с классической механикой частицы с энергией  $E$  большей  $U_0$  не должны отражаться от барьера:  $R = 0$ ,  $D = 1$ , и барьер полностью прозрачен. В квантовой механике даже при  $E > U_0$ , как правило,  $R > 0$ ,  $D < 1$ , и некоторая доля частиц отражается от барьера так же, как частично отражаются световые волны на границе двух сред.

На рисунке 1.9 представлена зависимость коэффициента прозрачности прямоугольного потенциального барьера от полной энергии электрона. Она рассчитана для электрона, движущегося в области потенциального барьера, высота которого  $U_0 = 2,1 \cdot 10^{-19}$  Дж и ширина  $d = 5 \cdot 10^{-9}$  м. Осцилляции на графике зависимости  $D(E)$  объясняются интерференцией волн де Бройля, которые являются решениями уравнения Шрёдингера в рассматриваемых здесь условиях.

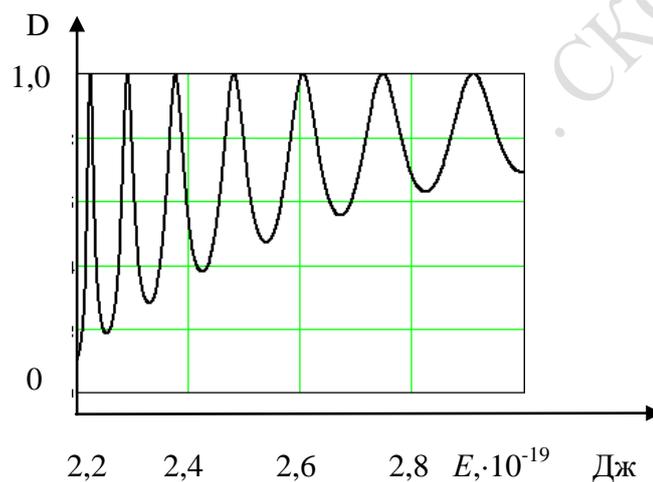


Рисунок 1.9 – Зависимость коэффициента прозрачности прямоугольного потенциального барьера от полной энергии электрона ( $E > U_0$ )

Можно показать, что при  $E \gg U_0$  результаты квантовой механики согласуются с результатами классической механики (выполняется принцип соответствия).

В обеих рассмотренных ситуациях (при  $E < U_0$  и при  $E > U_0$ ) имеет место равенство  $R + D = 1$ , что соответствует выполнению закона сохранения числа частиц в рассматриваемых процессах.

В классической физике *гармоническим осциллятором* называют частицу, на которую действует сила, прямо пропорциональная величине отклонения частицы от положения равновесия и направленная к нему, и решение задачи о его состояниях возможно на основе второго закона Ньютона (динамическое описание). В квантовой механике информацию о состояниях гармонического осциллятора получают в результате решения уравнения Шрёдингера.

Пусть осциллятор одномерен и положению его равновесия соответствует точка  $x = 0$ . Тогда потенциальная энергия гармонического

осциллятора (и явный вид оператора потенциальной энергии) определяется функцией

$$U = \frac{kx^2}{2}, \quad (1.33)$$

где  $k$  – коэффициент упругости.

В положении равновесия потенциальная энергия  $U(x=0) = 0$ .

Следовательно, в квантовой механике задачу о гармоническом осцилляторе можно свести к задаче о движении частицы в параболической потенциальной яме (рисунок 1.10).

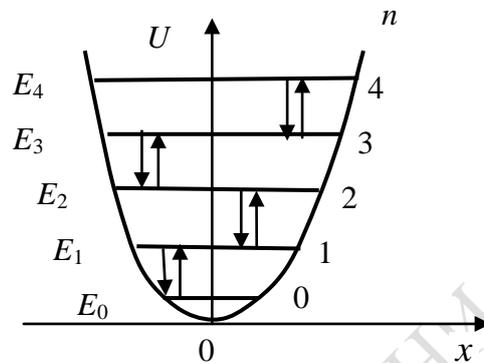


Рисунок 1.10 – Потенциальная яма, соответствующая гармоническому осциллятору

В такой модельной ситуации уравнение Шрёдингера для стационарных состояний одномерного осциллятора имеет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi}{dx^2} + \frac{kx^2}{2} \Psi = E \Psi. \quad (1.34)$$

Введём новые переменные

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar \omega_0}; \quad \xi = x \cdot \sqrt{\frac{k}{\hbar \omega_0}} \quad (1.35)$$

и преобразуем (1.34) к виду:

$$\frac{d^2 \Psi}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2) \Psi = 0. \quad (1.36)$$

Решая уравнение (1.36) с учётом требования конечности  $\Psi$ -функции, получим условие

$$\lambda_n = 2n + 1. \quad (1.37)$$

Комбинируя формулы для  $\lambda_n$  (1.35) и (1.37), можно получить выражение для собственных значений энергии:

$$E_n = \hbar \omega_0 (n + 1/2), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (1.38)$$

Анализируя (1.38) видим, что спектр энергий гармонического осциллятора дискретен (то есть энергия квантована) и энергетические уровни эквидистантны (рисунок 1.10). Кроме того, из (1.38) следует, что при  $n=0$  осциллятор имеет отличную от нуля минимальную (так называемую «нулевую») энергию:  $E_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2} \neq 0$ ; то есть осциллятор не может находиться на дне потенциальной ямы. Можно показать, что величина  $E_0$  – наименьшее значение энергии, совместимое с соотношением неопределённостей.

Сравнивая диаграммы энергетических уровней для частиц, находящихся в бесконечно глубокой потенциальной яме, потенциальной яме конечной глубины и для гармонического осциллятора, видим, что *закономерность в изменении возможных значений энергии микрообъекта зависит от формы потенциальной кривой  $U(x)$ .*

Волновая функция гармонического осциллятора  $\Psi_n$ , соответствующая собственному значению энергии  $E_n$ , выражается формулой:

$$\Psi = C_n \cdot P_n(\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right), \quad (1.39)$$

где  $C_n$  – нормировочные коэффициенты;

$P_n(\xi)$  – полином Эрмита  $n$ -й степени.

На рисунке 1.11 сплошными кривыми изображены распределения плотности вероятности обнаружения микрочастицы в состояниях  $\Psi(x)$  при  $n = 0, 1, 2$ . Вертикальные линии проведены через точки, соответствующие амплитудным значениям координат *классического осциллятора* с энергиями  $E_0, E_1, E_2$  (соответственно фрагменты *а, б, в* на рисунке 1.11). Штриховые кривые соответствуют *классическому распределению* плотности вероятности  $P_{\text{кл}}(x) = dw_{\text{кл}}/dx$ , где  $dw_{\text{кл}}$  – вероятность нахождения материальной точки на участке от  $x$  до  $x + dx$ .

Классический осциллятор колеблется с частотой  $\omega_0 = \sqrt{k/m}$ , где  $m$  – масса частицы, и испускает излучение только частоты  $\omega_0$ . В соответствии с *правилами отбора по колебательному квантовому числу  $n$*  разрешёнными являются только квантовые переходы, в которых это квантовое число изменяется на единицу (рисунок 1.10):

$$\Delta n = \pm 1. \quad (1.40)$$

В квантовой механике это правило выводится при расчёте вероятностей переходов между стационарными состояниями осциллятора.

Применяя в правиле частот Бора формулы (1.38) и (1.40), получим, что в спектре излучения квантовомеханического гармонического осциллятора должна регистрироваться *только одна* спектральная ли-

ния, которой соответствует частота  $\omega_0$ , что согласуется с результатом классического описания.

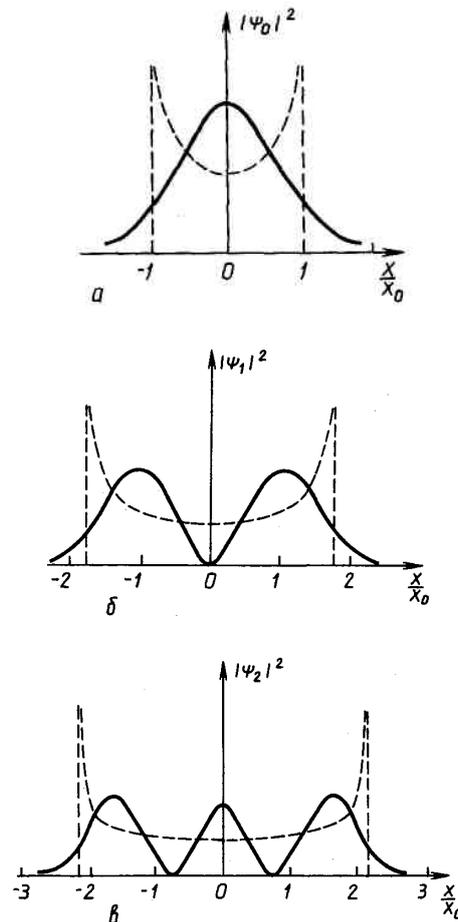


Рисунок 1.11 – Распределение плотности вероятности для гармонического осциллятора в состояниях с энергией  $E_0, E_1, E_2$

Решение вышерассмотренных задач можно осуществить в математической системе Mathcad, для чего составлены специальные программы.

### Вопросы для самоконтроля

1. Каким требованиям удовлетворяет основное уравнение квантовой механики в нерелятивистском приближении?
2. Запишите стационарное и общее уравнения Шрёдингера.
3. Каков физический смысл решений уравнения Шрёдингера?
4. Каковы стандартные условия, которым должны удовлетворять решения уравнения Шрёдингера?
5. Каковы логические этапы решения стационарного одномерного уравнения Шрёдингера для частицы в прямоугольной потенциальной яме бесконечной глубины?

6. Как трактуются коэффициенты отражения и прохождения при движении частицы в области потенциального барьера?

7. Какова последовательность решения задачи о стационарных состояниях частицы, проходящей через прямоугольный потенциальный барьер бесконечной ширины? Каковы особенности её решений?

8. Как оценить вероятность прохождения частицы через прямоугольный потенциальный барьер конечной ширины?

9. Каковы методика решения квантово-механической задачи о гармоническом осцилляторе и особенности решений этой задачи?

## **Лабораторная работа 1. Изучение стационарных состояний микрочастицы в прямоугольной потенциальной яме**

**Цель работы:** определить функции состояния и возможные значения энергии электрона, находящегося в прямоугольной одномерной асимметричной потенциальной яме; исследовать влияние основных параметров потенциальной ямы на спектр значений энергии электрона и вероятность его обнаружения в заданной области пространства.

### **Задание 1. Подготовка к выполнению компьютерного эксперимента**

#### **Порядок выполнения работы**

1. Изучите стационарное и нестационарное уравнения Шрёдингера и условия их применения.

2. Ознакомьтесь с алгоритмом решения уравнения Шрёдингера применительно к задачам о частице, движущейся в области асимметричной прямоугольной потенциальной ямы.

3. Изучите методику работы с объектами компьютерного приложения Mathcad.

### **Задание 2. Исследование влияния ширины прямоугольной асимметричной потенциальной ямы на решения стационарного уравнения Шрёдингера**

#### **Порядок выполнения работы**

1. Задайте конкретные значения ширины потенциальной ямы порядка  $10^{-9}$  м и высоты стенок асимметричной потенциальной ямы, выбирая их в диапазоне (2 ÷ 12) эВ, и с использованием компьютерной

модели, реализованной на основе приложения Mathcad, определите возможные значения полной энергии электрона и распределение плотности вероятности его обнаружения в каждом состоянии. Сохраните значения заданных параметров и результаты (значения полной энергии в стационарных состояниях, диаграмму энергетических уровней, распределение плотности вероятности электрона) в электронном документе Microsoft Word. Сохранение информации выполните посредством опций «Вставка \ Специальная вставка \ Точечный рисунок». Возможно также сохранение скриншота нажатием клавиши Print Screen.

2. Повторите пункт 1 при тех же значениях высоты стенок потенциальной ямы, задавая 3 ÷ 5 значений её ширины в пределах, указанных преподавателем.

3. Анализируя полученные результаты, установите, как изменяется при увеличении ширины потенциальной ямы:

- а) число возможных состояний электрона;
- б) энергия электрона в основном состоянии;
- в) вероятность обнаружения электрона, находящегося в основном состоянии, за пределами потенциальной ямы (используйте для этого метод графического интегрирования);

г) используя решения в условиях, при которых получено три стационарных состояния электрона, определите в каждом из них значения координат, соответствующие максимальной плотности вероятности обнаружения частицы. Для этого используйте опцию «Трассировка» в программной среде Mathcad.

4. Сформулируйте выводы.

### **Задание 3. Исследование влияния относительной высоты стенок прямоугольной асимметричной потенциальной ямы на решения стационарного уравнения Шрёдингера**

#### **Порядок выполнения работы**

1. Задайте конкретные значения ширины потенциальной ямы порядка  $10^{-9}$  м и высоты стенок асимметричной потенциальной ямы, выбирая их в диапазоне (2 ÷ 12) эВ и с использованием компьютерной модели, реализованной на основе приложения Mathcad, определите возможные значения полной энергии электрона и распределение плотности вероятности его обнаружения в каждом состоянии. Сохраните в электронном документе Microsoft Word значения заданных парамет-

ров, полной энергии в стационарных состояниях, диаграмму энергетических уровней, распределение плотности вероятности обнаружения электрона.

2. Повторите пункт 1 при тех же значениях ширины потенциальной ямы и высоты потенциального барьера  $U_1$  и значениях высоты потенциального барьера  $U_2$ , указанных преподавателем.

3. Анализируя полученные результаты, установите, как при увеличении отношения  $U_2/U_1$  изменяется:

- а) число возможных состояний электрона;
- б) энергия электрона в основном состоянии;
- в) отношение вероятностей обнаружения электрона в области  $x < 0$  и в области  $x > a$  в его основном состоянии (используйте для этого метод графического интегрирования);

- г) величина  $\frac{E_{i+1} - E_i}{E_{i+2} - E_{i+1}}$  (используйте решения в условиях, при

которых получено не менее трёх стационарных состояний электрона; для определения значений энергии используйте опцию «Трассировка» в программной среде Mathcad).

4. Истолкуйте результат, относящийся к основному состоянию микрочастицы внутри потенциальной ямы, на основе соотношений неопределённостей.

5. Сформулируйте выводы.

## **Лабораторная работа 2. Исследование вероятности прохождения электроном потенциального барьера**

**Цель работы:** определить вероятность прохождения электрона через одномерные прямоугольные потенциальные барьеры разной конфигурации; проанализировать зависимость коэффициента прохождения электрона от параметров квантовомеханической задачи.

### **Задание 1. Подготовка к выполнению компьютерного эксперимента**

#### **Порядок выполнения работы**

1. Изучите стационарное и нестационарное уравнения Шрёдингера и условия их применения.

2. Ознакомьтесь с алгоритмом решения уравнения Шрёдингера применительно к задачам о частице, движущейся в области потенциального барьера.

3. Изучите методику работы с объектами компьютерного приложения Mathcad.

## **Задание 2. Исследование зависимости коэффициента прозрачности барьера-ступеньки от потенциальной и полной энергии электрона**

### **Порядок выполнения работы**

1. Пользуясь приложением Mathcad, выберите фрагмент компьютерной программы, соответствующий задаче о прохождении частицы через одномерный прямоугольный барьер бесконечной ширины (рисунок 1.5) и задайте значение потенциальной энергии электрона  $U_0$ , соответствующее диапазону  $(2 \div 10) \cdot 10^{-19}$  Дж. Получите решения уравнения Шрёдингера в виде графика, отображающего зависимость коэффициента прохождения электрона через барьер-ступеньку, от полной энергии частицы  $D(E)$ . Установите на шкале энергий системы координат  $(D, E)$  границы диапазона варьирования полной энергии электрона  $(0 \div 20) \cdot 10^{-19}$  Дж.

2. Используя опцию «Трассировка», определите значение полной энергии электрона, соответствующее значению  $D = 0,5$ . Сохраните значения заданных параметров и результаты (график зависимости  $D(E)$  и результаты трассировки) в электронном документе Microsoft Word. Сохранение графической информации выполните посредством опций «Вставка \ Специальная вставка \ Точечный рисунок». Возможно также сохранение скриншота нажатием клавиши Print Screen.

3. Повторите действия, описанные в пунктах 1 и 2, при трёх других значениях  $U_0$  из указанного выше диапазона.

4. Проанализируйте, как зависит от высоты барьера-ступеньки полная энергия электрона, при которой  $D = 0,5$ . Сформулируйте выводы.

## **Задание 3. Исследование зависимости коэффициента прозрачности одномерного прямоугольного потенциального барьера от его параметров и полной энергии электрона**

### **Порядок выполнения работы**

1. Пользуясь приложением Mathcad, выберите фрагмент компьютерной программы, соответствующий задаче о прохождении частицы через одномерный прямоугольный барьер конечной ширины

(рисунок 1.7) и задайте значение потенциальной энергии электрона  $U_0$ , соответствующее диапазону  $(2 \div 5) \cdot 10^{-19}$  Дж, и значение ширины барьера из интервала  $(2 \div 9) \cdot 10^{-9}$  м. Получите решения уравнения Шрёдингера в виде графика, отображающего зависимость коэффициента прохождения электрона через барьер, от полной энергии частицы  $D(E)$ . Установите на шкале энергии системы координат  $(D, E)$  границы диапазона варьирования полной энергии электрона  $(1 \div 5) \cdot 10^{-19}$  Дж, соблюдая условие  $E < U_0$ .

2. Используя опцию «Трассировка», определите значение полной энергии электрона, при котором  $D = 0,02$ . Сохраните значения заданных параметров (график зависимости  $D(E)$  и результаты трассировки) в электронном документе Microsoft Word.

3. Повторите действия, описанные в пунктах 1 и 2, при трёх других значениях  $U_0$  из указанного в пункте 1 диапазона.

4. Проанализируйте, как зависит от высоты барьера полная энергия электрона, при которой  $D = 0,02$ . Сформулируйте выводы.

5. Повторите действия, описанные в пунктах 1 и 2, при трёх других значениях ширины барьера  $d$  из указанного в пункте 1 диапазона.

6. Проанализируйте, как зависит от ширины барьера полная энергия электрона, при которой  $D = 0,02$ . Сформулируйте выводы.

7. Задайте значение потенциальной энергии электрона  $U_0$ , соответствующее диапазону  $(2 \div 5) \cdot 10^{-19}$  Дж, и значение ширины барьера  $5 \cdot 10^{-9}$  м. Получите решения уравнения Шрёдингера в виде графика зависимости  $D(E)$ . Установите на шкале энергии системы координат  $(D, E)$  границы диапазона варьирования полной энергии электрона  $(2 \div 6) \cdot 10^{-19}$  Дж, соблюдая условие  $E > U_0$ .

8. Используя опцию «Трассировка», определите координаты  $i$ -го и  $k$ -го максимумов на кривой  $D(E)$ . Сохраните значения заданных параметров, график зависимости  $D(E)$  и результаты трассировки в электронном документе Microsoft Word.

9. Повторите действия, описанные в пунктах 7 и 8, при трёх других значениях  $U_0$  из указанного в пункте 7 диапазона.

10. Определите значения длины волны де Бройля  $\lambda_{\text{Бр}} = h[2m(E_\xi - U_0)]^{-1/2}$ , соответствующие каждому из выделенных максимумов ( $\xi = i, k$ ). Проанализируйте, как зависит  $\lambda_{\text{Бр}}$  от высоты потенциального барьера  $U_0$ . Сформулируйте выводы.

11. Задайте значение  $U_0 = 2,1 \cdot 10^{-19}$  Дж. Получите решения уравнения Шрёдингера в виде графика зависимости  $D(d)$ . Установите на оси абсцисс системы координат  $(D, d)$  границы диапазона варьирования ширины барьера  $(0 \div 8) \cdot 10^{-9}$  м. Установите на оси ординат в полях для аргументов следующие значения полной энергии электрона:  $E_1 = 1,0 \cdot 10^{-19}$  Дж,  $E_2 = 2,0 \cdot 10^{-19}$  Дж,  $E_3 = 3,0 \cdot 10^{-19}$  Дж,  $E_4 = 3,5 \cdot 10^{-19}$  Дж,  $E_5 = 4,0 \cdot 10^{-19}$  Дж,  $E_6 = 5,0 \cdot 10^{-19}$  Дж.

12. Используя опцию «Трассировка», определите значения ширины потенциального барьера, при которых  $D(E_1) = D(E_2) = 0,2$ . Сохраните значения параметров, графики зависимостей  $D(d)$  и результаты трассировки в электронном документе Microsoft Word.

13. Используя опцию «Трассировка», определите значения  $d$ , соответствующие максимуму *одного и того же порядка* на кривых  $D(d)$ , рассчитанных при значениях полной энергии электрона  $E_3, E_4, E_5, E_6$ . Сохраните результаты трассировки в электронном документе Microsoft Word.

14. Определите длины волн  $\lambda_{\text{Бр}}$ , которые соответствуют максимумам, выделенным в пункте 13, по формуле  $\lambda_{\text{Бр}} = h[2m(E_{\xi} - U_0)]^{-1/2}$ .

15. Сформулируйте выводы о результатах работы.

#### **Задание 4. Исследование вероятности прохождения электроном двухступенчатого потенциального барьера**

##### **Порядок выполнения работы**

1. Пользуясь приложением Mathcad, выберите фрагмент компьютерной программы, соответствующий задаче о прохождении частицы через одномерный комбинированный ступенчатый потенциальный барьер и задайте значения: потенциальной энергии электрона  $U_0 = 9 \cdot 10^{-19}$  Дж, ширины барьера  $l = 2 \cdot 10^{-9}$  м, высоты барьера  $U_1$ , соответствующее диапазону  $(2 \div 8) \cdot 10^{-19}$  Дж. Получите решения уравнения Шрёдингера в виде графика зависимости коэффициента прохождения электрона через барьер от полной энергии частицы  $D(E)$ . Установите на шкале энергии системы координат  $(D, E)$  границы диапазона варьирования полной энергии электрона  $(9,1 \div 13,0) \cdot 10^{-19}$  Дж. Используя опцию «Трассировка», определите значение коэффициента прозрачности барьера  $D$ , соответствующее пол-

ной энергии электрона  $E = 1,0 \cdot 10^{-18}$  Дж. Сохраните в электронном документе Microsoft Word значения заданных параметров, график зависимости  $D(E)$  и результаты трассировки.

2. Повторите действия, описанные в пункте 1, при трёх других значениях  $U_1$  из указанного в пункте 1 диапазона.

3. Проанализируйте, как изменяется коэффициент прохождения при увеличении ширины потенциального барьера и  $E = \text{const}$ . Сформулируйте выводы.

### **Лабораторная работа 3. Изучение стационарных состояний одномерного гармонического осциллятора**

**Цель работы:** проанализировать влияние жёсткости и массы одномерного гармонического осциллятора на собственные значения его энергии и распределение плотности вероятности обнаружения частицы в разных состояниях.

#### **Задание 1. Подготовка к выполнению компьютерного эксперимента**

##### **Порядок выполнения работы**

1. Изучите стационарное и нестационарное уравнения Шрёдингера и условия их применения.

2. Ознакомьтесь с алгоритмом решения уравнения Шрёдингера применительно к задаче об одномерном гармоническом осцилляторе.

3. Изучите методику работы с объектами компьютерного приложения Mathcad.

#### **Задание 2. Исследование влияния жёсткости гармонического осциллятора на решения стационарного уравнения Шрёдингера**

##### **Порядок выполнения работы**

1. Пользуясь приложением Mathcad, получите решения уравнения Шрёдингера для собственных функций и собственных значений энергии гармонического осциллятора, масса которого  $m = 1,0 \cdot 10^{-26}$  кг, выбирая значение жёсткости из интервала  $\kappa = (1 \div 30)$  Дж/м<sup>2</sup>. Сохраните значения заданных параметров, таблицу значений полной энергии, диаграмму энергетических уровней и

графики распределения плотности вероятности по координате  $x$  в электронном документе Microsoft Word.

2. Повторите пункт 1 при трёх–четырёх других значениях жёсткости осциллятора из вышеуказанного интервала.

3. Проводя графическое интегрирование, определите вероятность обнаружения осциллятора за пределами потенциальной ямы в каждом из стационарных состояний. Сравните результаты, полученные при выполнении задания 2.

4. Проанализируйте влияние жёсткости осциллятора на разность энергий, соответствующих значениям колебательного квантового числа  $n$  и  $n+1$ , и на вероятность обнаружения осциллятора, находящегося в основном состоянии, за пределами параболической потенциальной ямы.

### **Задание 3. Исследование влияния приведённой массы гармонического осциллятора на решения стационарного уравнения Шрёдингера**

#### **Порядок выполнения работы**

1. Пользуясь приложением Mathcad, получите решения уравнения Шрёдингера для собственных функций и собственных значений энергии гармонического осциллятора, жёсткость которого  $\kappa = 10 \text{ Дж/м}^2$ , выбирая значение приведённой массы из интервала  $m = (1 \div 10) \cdot 10^{-26} \text{ кг}$ .

2. Сохраните значения заданных параметров и результаты (таблицу значений полной энергии, диаграмму энергетических уровней и графики распределения плотности вероятности по координате  $x$ ) в электронном документе Microsoft Word.

3. Повторите п.1 при трёх–четырёх других значениях приведённой массы осциллятора из вышеуказанного интервала.

4. Проводя графическое интегрирование, определите вероятность обнаружения осциллятора за пределами потенциальной ямы в каждом из стационарных состояний. Сравните результаты, полученные при выполнении задания 3.

5. Проанализируйте влияние приведённой массы осциллятора на разность энергий, соответствующих значениям колебательного квантового числа  $n$  и  $n+1$ , и на вероятность обнаружения осциллятора, находящегося в основном состоянии, за пределами параболической потенциальной ямы.

## Тема 2. Экспериментальные основы анализа спектров атомов

### Теоретические основы

Общим свойством спектров атомарных систем является их линейчатый характер. Спектры атомов характеризуются строгой индивидуальностью длин волн и относительной интенсивности спектральных линий. Этот факт является физической основой качественного элементного спектрального анализа, цель которого состоит в установлении наличия химических элементов в анализируемой пробе.

Спектральный анализ обычно производят по *последним линиям* элемента, называемым так по той причине, что при уменьшении концентрации анализируемого элемента в образце они исчезают из спектра последними. Это наиболее чувствительные линии элемента, соответствующие невысоким ступеням возбуждения атома.

Целью *полного качественного спектрального анализа* является установление элементного состава исследуемого образца на основе идентификации всех его спектральных линий. При *частичном качественном анализе* предполагается установление фактического наличия или отсутствия в образце одного или нескольких заданных элементов. При этом, пользуясь таблицами спектральных линий, определяют, есть ли в спектре исследуемой пробы *последние линии заданного элемента*.

Целью *количественного атомного спектрального анализа* является определение концентрации анализируемых элементов в пробе. Его физической основой является зависимость интенсивности спектральных линий анализируемого химического элемента от его концентрации в пробе. При проведении количественного анализа выбирают пары линий примеси и элемента, которые называют *аналитическими парами*.

*Аналитическая пара* – это две спектральные линии, одна из которых принадлежит спектру основы образца, а другая – спектру элемента-примеси, относительная интенсивность которых изменяется при изменении концентрации примеси. В аналитическую пару включают линии основы и элемента, которые соответствуют частицам одинаковой кратности ионизации; мало отличаются по интенсивности; характеризуются близкими энергиями возбуждения и поэтому в спектре расположены близко друг к другу.

Сравнивая яркость линий анализируемой примеси с яркостью одной или нескольких линий основы образца, можно определить концентрацию примеси.

При проведении спектрального анализа необходимо учитывать спектроскопические и фотометрические характеристики используемого спектрального прибора. Объем и качество информации, получаемой при спектроскопических исследованиях, зависят не только от правильного выбора типа собственно *спектрального прибора*, но и от режима работы источника излучения, режима работы и типа приёмника излучения. Поэтому в настоящее время под спектральным прибором в широком смысле слова понимают установку, в состав которой включены источник излучения, осветительная система, собственно спектральный прибор и приёмник излучения с усилительно-регистрирующим комплексом.

Собственно спектральный прибор – это оптический прибор, предназначенный для разложения электромагнитного излучения оптического диапазона в спектр по длинам волн или частотам и для регистрации этих спектров.

Классификацию спектральных приборов можно произвести по разным признакам:

- по методу получения спектра (призмённые, дифракционные, интерференционные и т. п.);
- по методу его регистрации (визуальная, фотографическая, фотоэлектрическая);
- по рабочей области спектра (приборы для работы в видимой, инфракрасной, ультрафиолетовой области спектра) и др.

В каждом спектральном приборе, предназначенном для пространственного разделения спектральных компонентов, можно выделить три основные части, различающиеся своим устройством и назначением: входной коллиматор, диспергирующая система, выходной коллиматор (рисунок 2.1).

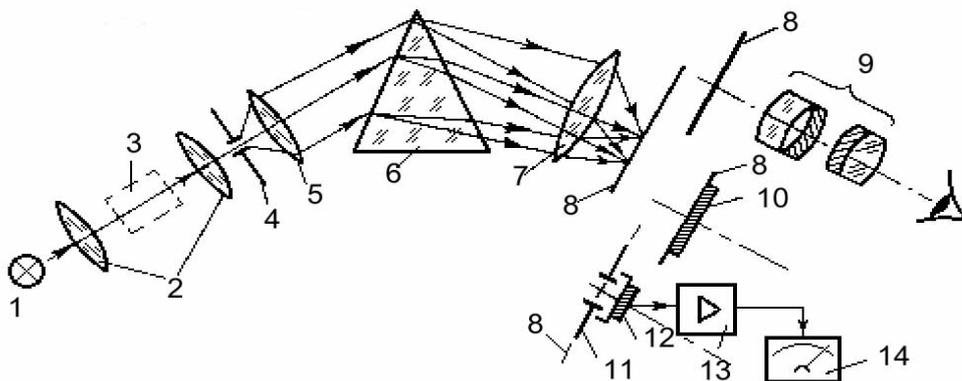
Входной коллиматор предназначен для получения параллельного пучка излучения; он состоит из объектива 5 и находящейся в его фокальной плоскости входной щели 4 прибора (рисунок 2.1).

Функции диспергирующего устройства 6 могут выполнять одна или несколько призм, дифракционная решетка, интерферометр.

Выходной коллиматор состоит из объектива 7, в фокальной плоскости 8 которого формируется столько изображений входной щели, сколько монохроматических составляющих имеется в спектре анализируемого излучения. Полученный спектр регистрируется способом, соответствующим назначению прибора (при использовании стилоскопа наблюдается визуально; спектрографа – фотографируется на фотопластинку, спектрофотометра – производится фотоэлектрическая регистрация).

Каждый спектральный прибор характеризуется следующими основными параметрами: угловой и линейной дисперсией, разрешающей

способностью, областью дисперсии, светосилой и фотометрической точностью, вертикальным и горизонтальным увеличением.



- 1 – источник света; 2 – конденсор; 3 – кюветное отделение;  
 4 – входная щель; 5 – объектив входного коллиматора;  
 6 – диспергирующий элемент; 7 – объектив выходного коллиматора;  
 8 – фокальная плоскость объектива; 9 – окуляр; 10 – фотопластинка;  
 11 – выходная щель; 12 – фотоприёмник; 13 – усилитель фототока;  
 14 – регистрирующее устройство

Рисунок 2.1 – Принципиальная схема спектрального прибора

Угловая дисперсия определяется отношением углового расстояния  $d\Theta$  между монохроматическими пучками, выходящими из объектива камеры (зрительной трубы) спектрального прибора, к разности соответствующих им длин волн  $d\lambda$ :  $D_{\Theta} = d\Theta/d\lambda$ . Для призмных спектральных приборов (при работе в условиях минимального отклонения)

$$D_{\Theta} = \frac{d\Theta}{d\lambda} = \frac{2 \sin \frac{A}{2}}{\sqrt{1 - n^2 \sin^2 \frac{A}{2}}} \cdot \frac{dn}{d\lambda}, \quad (2.1)$$

где  $A$  – преломляющий угол призмы (двугранный угол между входной и выходной гранями в главном сечении призмы);

$\frac{dn}{d\lambda}$  – дисперсия материала призмы.

Угловая дисперсия дифракционных приборов определяется по формуле

$$D_{\Theta} = \frac{d\Theta}{d\lambda} = \frac{k}{d \cos \Theta}, \quad (2.2)$$

где  $k$  – порядок дифракции;  
 $d$  – постоянная решетки;  
 $\Theta$  – угол дифракции.

*Линейная дисперсия*, по определению равная отношению расстояния  $dx$  между двумя монохроматическими изображениями входной щели прибора (спектральными линиями) к соответствующей разнице длин волн  $d\lambda$  ( $D_x = dx/d\lambda$ ), прямо пропорциональна угловой дисперсии:

$$\frac{dx}{d\lambda} = \frac{f}{\sin \varepsilon} \frac{d\Theta}{d\lambda}, \quad (2.3)$$

где  $f$  – фокусное расстояние камерного объектива;

$\varepsilon$  – угол наклона его фокальной плоскости, обусловленного хроматической аберрацией камерного объектива и астигматизмом, вносимым призмой.

Для характеристики спектрографов часто пользуются величиной обратной линейной дисперсии:  $d\lambda/dx$ .

*Разрешающая способность*  $R$  характеризуется минимальным спектральным интервалом  $\delta\lambda$  между монохроматическими линиями  $\lambda$  и  $\lambda + \delta\lambda$ , которые разрешимы данным спектральным прибором:  $R = \lambda/(\delta\lambda)$ . Причиной ограничения разрешимого интервала является дифракция оптического излучения на входной щели прибора. Разрешающая способность определяется в соответствии с критерием Рэля. Она зависит от типа и характеристик диспергирующего устройства. Для призмленного прибора

$$R = T \frac{dn}{d\lambda} \left( 1 + \frac{\Phi_0 s}{\lambda} \right). \quad (2.4)$$

Здесь  $T$  – длина оснований всех призм, расположенных по ходу луча,  $\Phi_0$  – светосила объектива коллиматора,  $s$  – ширина щели.

Для дифракционного прибора

$$R = kN, \quad (2.5)$$

где  $N$  – число штрихов в решетке,  $k$  – порядок дифракции.

*Областью дисперсии* спектрального прибора называют тот интервал длин волн в спектре, в котором имеется однозначная связь между длиной волны излучения и положением соответствующей спектральной линии в спектре.

*Светосила* спектрального прибора  $P$  характеризует его фотометрические свойства. Светосилу определяют как отношение освещённости или светового потока  $\Phi$  на выходе прибора к монохроматической яркости  $B$  входной щели прибора:  $P = \Phi/B$ . Светосила зависит от ряда геометрических и спектроскопических параметров прибора, величины потерь излучения на всём пути от источника до приёмника излучения, а также от метода регистрации спектра.

Существованием для каждого прибора минимальных значений уровня шумов  $\delta\Phi$  и разрешаемого интервала  $\delta\lambda$  ограничивается его информационная способность. Если заданы яркость источника  $B$ , регистрируемый участок спектра  $\delta\lambda$  вблизи  $\lambda$  и уровень регистрируемых шумов  $\delta\Phi$ , то информационная способность прибора прямо пропорциональна произведению светосилы на разрешающую способность. В большинстве практических ситуаций произведение  $PR$  остаётся практически постоянным для каждого прибора.

Формулы (2.4) и (2.5) получены в предположении, что входная щель бесконечно узкая. Разрешающая способность реального спектрального прибора зависит от ширины щели.

Ширина  $s'$  и высота  $h'$  изображения входной щели прибора в фокальной плоскости выходного объектива определяются по формулам

$$s' = s \frac{f_2 \omega}{f_1 \sin \varepsilon}; \quad h' = h \frac{f_2}{f_1}, \quad (2.6)$$

где  $s$  – ширина,

$h$  – высота входной щели,

$f_1$  и  $f_2$  – фокусное расстояние объектива входного и выходного коллиматора соответственно,

$\omega$  – угловое увеличение призмы или решётки,

$\varepsilon$  – угол наклона фокальной поверхности выходного объектива.

Если ширина геометрического изображения щели  $s'$  равна расстоянию между двумя линиями, разрешимыми в соответствии с критерием Рэлея, то ширину щели  $s = s_0$  называют *нормальной*. Уменьшение ширины щели  $s$  сопровождается уменьшением величины  $s'$  только до определенного значения ширины щели  $s_0$  (рисунок 2.2).

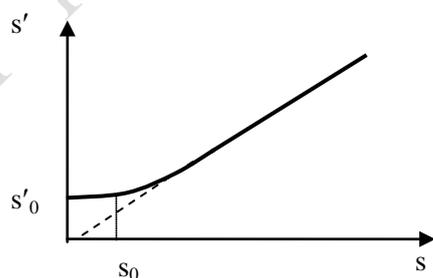


Рисунок 2.2 – Зависимость ширины изображения спектральной линии от ширины щели

Бесполезно использовать входную щель, ширина которой  $s < s_0$ , так как при выполнении этого неравенства ширина изображения щели остаётся практически постоянной, но его освещённость уменьшается.

Интервал длин волн  $\Delta\lambda$ , занимаемый спектральной линией в фокальной плоскости, часто называют спектральной шириной щели.

Обычно спектральная ширина щели определяется дифракционным уширением линии  $\Delta\lambda_d$ , шириной геометрического изображения щели  $\Delta\lambda_{щ}$  и уширением самой спектральной линии  $\Delta\lambda_y$ :

$$\Delta\lambda = \Delta\lambda_d + \Delta\lambda_{щ} + \Delta\lambda_y. \quad (2.7)$$

Дифракционное уширение  $\Delta\lambda_d$  линий легко найти, зная теоретическую разрешающую способность прибора. Величина  $\Delta\lambda_{щ}$  для спектрографа равна ширине изображения щели  $s'$ , умноженной на обратную линейную дисперсию:

$$\Delta\lambda_{щ} = s' \cdot \frac{d\lambda}{dx}. \quad (2.8)$$

Если спектральная линия, излучаемая источником, имеет ширину  $\Delta\lambda_{и} \ll \Delta\lambda$ , то каждый элементарный спектральный интервал  $d\lambda$  линии в плоскости спектра формируется в виде равномерно освещённого прямоугольника, площадь которого  $h \cdot s'$ . Эти изображения смещены друг относительно друга вследствие дисперсии прибора. Так как  $\Delta\lambda_{и} \ll \Delta\lambda$ , можно считать, что результирующее геометрическое изображение в плоскости спектра имеет прежние размеры  $h \cdot s'$ , только края его немного размыты, что обусловлено конечностью величины  $\Delta\lambda_{и}$ .

Ширина спектральной линии  $\Delta\lambda$  определяется не только параметрами спектрального прибора, но и другими факторами, связанными с физической природой излучения (неопределённость энергии в стационарных состояниях) и условиями, в которых находится излучающий атом, то есть факторами, определяющими величину  $\Delta\lambda_y$ .

В соответствии с правилом частот Бора, при переходе из одного стационарного состояния в другое атом излучает квант энергии, частота которого  $\nu_0$  определяется через энергии стационарных состояний:

$$\nu_0 = \frac{|E_n - E_k|}{h}. \quad (2.9)$$

Однако в действительности при переходе  $E_n \leftrightarrow E_k$  излучение атома представлено набором частот  $\nu = \nu_0 \pm \Delta\nu$ , то есть спектральные линии не являются бесконечно узкими ( $\Delta\nu \neq 0$ ), а имеют некоторую ширину. Основными причинами уширения спектральных линий частиц вещества, находящегося в газовой фазе, в отсутствие внешних электрических и магнитных полей являются естественное, доплеровское, и ударное уширение.

Ширину спектральных линий, соответствующих излучению покоящейся свободной квантовой системы, называют *естественной шириной*. Естественное уширение спектральных линий обусловлено

природой физических процессов испускания и поглощения излучения. Теоретическое описание явления естественного уширения спектральных линий проводится в рамках как классической, так и квантовой теории излучения.

Воспользуемся квантовомеханическим соотношением неопределённостей для времени и энергии

$$\delta E \cdot \tau \geq \hbar, \quad (2.10)$$

где  $\tau$  – время жизни (среднее время пребывания) квантовой системы в рассматриваемом стационарном состоянии.

Из соотношения (2.10) непосредственно вытекает, что бесконечно узким является тот уровень энергии, которому соответствует  $\tau \rightarrow \infty$ , что характерно только для основного энергетического уровня. Естественная ширина возбужденных уровней, характеризующихся малыми значениями  $\tau \sim (10^{-8} \div 10^{-4})$  с, может быть достаточно большой.

Значение времени жизни атома (молекулы) на энергетическом уровне, которое связано с изменением состояния в результате излучательного перехода, определяется коэффициентами Эйнштейна. В эмиссионных спектрах определяющими являются спонтанные переходы, вероятность которых характеризуется коэффициентом Эйнштейна  $A_{ik}$ . Реальная схема энергетических уровней атомной системы содержит большое число уровней энергии. При этом время жизни на  $i$ -м энергетическом уровне определяется суммой вероятностей спонтанных переходов с рассматриваемого  $i$ -го на все нижележащие  $j$ -е энергетические уровни (рисунок 2.3). Аналогичные рассуждения применимы и к  $k$ -му энергетическому уровню.

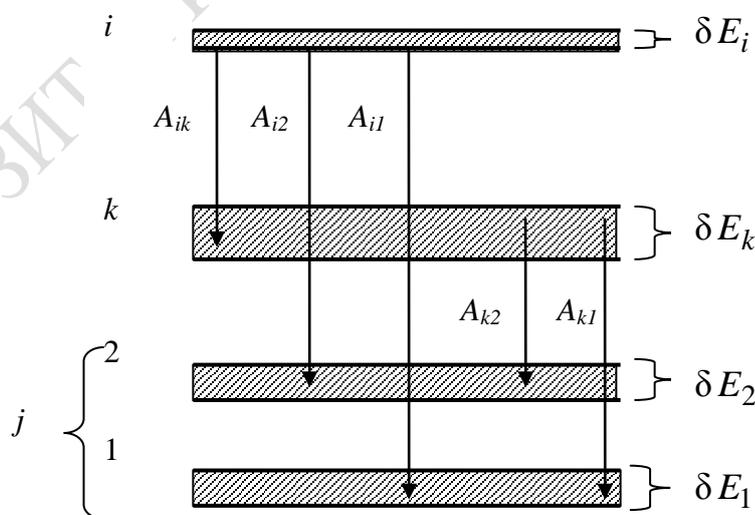


Рисунок 2.3 – Спонтанные переходы между энергетическими уровнями

Таким образом, время жизни атома (молекулы) на рассматриваемых уровнях определяется по формулам

$$\tau_i = \frac{1}{\sum_j A_{ij}} = \frac{1}{A_i} \text{ и } \tau_k = \frac{1}{\sum_j A_{kj}} = \frac{1}{A_k}, \quad (2.11)$$

где  $A_{ij}$  – коэффициент Эйнштейна, характеризующий вероятность спонтанных излучательных переходов с  $i$ -го на  $j$ -й уровень за единицу времени;

$A_i$  – суммарная вероятность спонтанных излучательных переходов атома за единицу времени с  $i$ -го уровня на все другие уровни;

$A_{kj}$  – коэффициент Эйнштейна, характеризующий вероятность спонтанных излучательных переходов с  $k$ -го на  $j$ -й уровень за единицу времени;

$A_k$  – суммарная вероятность спонтанных излучательных переходов атома за единицу времени с  $k$ -го уровня на все другие уровни.

Тогда естественную ширину  $i$ -го энергетического уровня с учётом (2.10) можно выразить следующим образом:

$$\delta E_i \approx \hbar \cdot A_i. \quad (2.12)$$

Естественная ширина спектральной линии, обусловленная квантовыми переходами между  $i$ -м и  $k$ -м уровнями, с учётом выражений (2.10)–(2.12) определяется по формуле

$$\delta \nu_{ik} \approx \frac{1}{2\pi} \left( \frac{1}{\tau_i} + \frac{1}{\tau_k} \right) = \frac{1}{2\pi} (A_i + A_k). \quad (2.13)$$

Таким образом, при квантовомеханическом описании естественная ширина спектральной линии определяется суммой вероятностей спонтанных излучательных переходов атома (молекулы), могущих произойти из исходного и конечного состояний за единицу времени.

В приведённом выше квантовомеханическом описании выявлена физическая природа естественного уширения спектральных линий, но не дано объяснения формы их *контура*, то есть зависимости *спектральной плотности излучения*  $W_\nu$  от его частоты  $\nu$ . Эта задача успешно решается как в рамках классической, так и в рамках квантовой электродинамики. При этом спектральное распределение энергии, излучаемой в единицу времени, описывается одинаковой формулой:

$$\varphi_{\text{ест}}(\nu) = \frac{\bar{W}(\nu)}{W(\nu_0)} = \left( \frac{\gamma_0}{2} \right)^2 \cdot \frac{1}{4\pi^2(\nu - \nu_0)^2 + (\gamma_0/2)^2}. \quad (2.14)$$

В формуле (2.14)  $\varphi_{\text{ест}}(\nu)$  – относительная интенсивность излучения,  $W(\nu_0)$  – максимальное значение спектральной плотности энергии

излучения. Выражением (2.14) описывается *естественный контур* спектральной линии, называемый также *дисперсионным* или *лорентц-цовским* контуром. Схематически он представлен на рисунке 2.4.

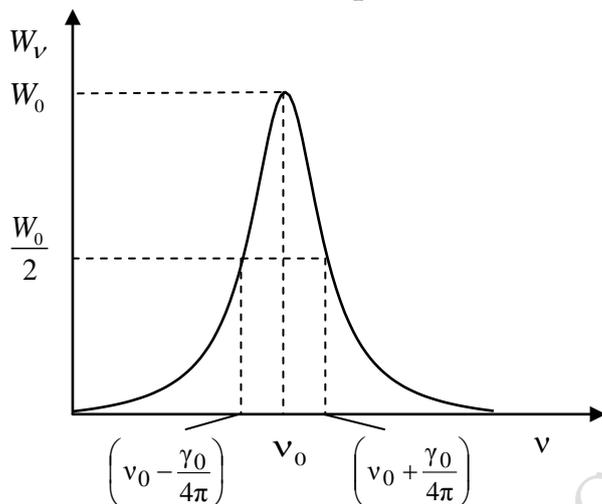


Рисунок 2.4 – Дисперсионный (лорентцовский) контур спектральной линии

Анализируя формулу (2.14), легко найти полуширину  $\delta\nu_{1/2}$  спектральной линии, оцениваемую как разность частот, при которых относительная спектральная интенсивность равна половине её максимального значения:

$$\delta\nu_{1/2} = \frac{\gamma_0}{2\pi}. \quad (2.15)$$

В классической теории величина  $\gamma_0$  равна коэффициенту затухания классического излучателя частоты  $\nu_0$ , что не соответствует экспериментальным данным. Для перехода к соотношениям, полученным в квантовой теории и подтверждённым на опыте, в формулах (2.14) и (2.15) вместо коэффициента затухания классического излучателя  $\gamma_0$  следует использовать величину  $\gamma_{ik}$ , связанную с вероятностными характеристиками  $A_i$  и  $A_k$  соотношением

$$\gamma_{ik} = A_i + A_k.$$

Если переход совершается между возбуждённым ( $i$ -м) и основным ( $k$ -м) состояниями атома, то, так как  $A_k = 0$ , последнее соотношение принимает вид:

$$\gamma_{ik} = A_i.$$

Для экспериментального измерения естественной ширины спектральных линий разработана специальная методика.

Соответствие между результатами квантовой и классической теории имеет место только для интенсивных электрических дипольных переходов, для которых  $\gamma_{ki} \sim 10^8 \text{ с}^{-1}$  и ширина спектральных линий  $\Delta\lambda_{\text{кв}} \sim 10^{-5} \text{ нм}$ .

Обычно наблюдаемая в спектроскопических опытах ширина спектральных линий существенно больше их естественной ширины. Указанное несоответствие объясняется наличием других причин уширения спектральных линий – связанных с тепловым движением и столкновением частиц, а также обусловленных их взаимодействием и воздействием электрических и магнитных полей.

Рассмотрим основные факторы, обуславливающие уширение спектральных линий и полос в спектрах газов, дополнительное к естественному уширению.

Сущность *доплеровского уширения* заключается в зависимости частоты поглощаемого или испускаемого частицей излучения от скорости её поступательного движения. Если частица движется со скоростью  $\vec{v}$  под углом  $\vartheta$  к направлению распространения излучения, то доплеровское изменение частоты определяется следующим образом:

$$\nu - \nu_0 = \nu_0 (\nu/c) \cos \vartheta, \quad (2.16)$$

где  $\nu_0$  – частота излучения неподвижного атома (молекулы).

Движение частиц имеет хаотический характер, и при тепловом равновесии в системе их распределение по скоростям определяется законом Максвелла – Больцмана. С учётом этого закона получено следующее выражение для относительного распределения интенсивности в пределах спектральной полосы:

$$\varphi_{\text{доп}}(\nu) = \exp\left[-\beta(\nu - \nu_0)^2\right], \quad (2.17)$$

где

$$\beta = \frac{mc^2}{2kT} \cdot \frac{1}{\nu_0^2}. \quad (2.18)$$

В формуле (2.17)  $m$  – масса частицы,  $k$  – постоянная Больцмана,  $T$  – температура, выраженная в единицах абсолютной шкалы.

Используя формулы (2.17) и (2.18), можно получить для полуширины доплеровского контура следующее выражение:

$$\delta\nu_{1/2(\text{доп})} = 2\nu_0 \sqrt{(2kT/mc^2) \ln 2}. \quad (2.19)$$

В результате численных оценок показано, что при обычных условиях ширина доплеровского контура на несколько порядков превосходит естественную ширину спектральной линии.

Продолжительность временного интервала, в течение которого возбуждённый атом (молекула) излучает энергию, меньше естественного времени жизни вследствие его (её) взаимодействия с другими атомами (молекулами). Сущность *ударного уширения* состоит в том, что частица может осуществлять квантовый переход с  $i$ -го энергетического уровня на нижележащие энергетические уровни не только

испускающая спонтанное излучение, но и в результате соударения с другой частицей. Обозначим символом  $C_i$  вероятность безызлучательного квантового перехода частицы, обусловленного соударениями, за единицу времени. Тогда, учитывая формулу (2.10), ширину  $i$ -го уровня энергии можно представить следующим образом:

$$\delta E_i \approx \hbar(A_i + C_i), \quad (2.20)$$

откуда для ширины спектральной линии получим:

$$\delta \nu_{ik} \approx \frac{1}{2\pi}(A_i + C_i + A_k + C_k). \quad (2.21)$$

Рассматриваемое явление качественно аналогично интерпретируют и в классической теории. Наиболее простое выражение для контура спектральной линии, обусловленного столкновениями, таково:

$$\varphi_{\text{ст}}(\nu) = \left(\frac{\gamma_{\text{ст}}}{2}\right)^2 \cdot \frac{1}{4\pi^2(\nu - \nu_0)^2 + (\gamma_{\text{ст}}/2)^2}. \quad (2.22)$$

Видим, что формула (2.22) описывает лорентцовский контур спектральной линии, имеющий место при естественном уширении (2.14), но постоянная затухания  $\gamma_{\text{ст}}$  здесь имеет иной смысл. В рамках газокинетических представлений применительно к столкновениям одинаковых частиц постоянная затухания определяется по формуле

$$\gamma_{\text{ст}} = 1/\tau_{\text{ст}}, \quad (2.23)$$

где  $\tau_{\text{ст}}$  – среднее время между двумя последовательными столкновениями (среднее время свободного пробега).

Учитывая, что  $\tau_{\text{ст}} = l_0/\nu$ , средняя длина свободного пробега  $l_0 = 1/\sqrt{2}\pi d_{\text{эф}}^2 N_0$ , модуль средней скорости частиц  $\nu = \sqrt{8RT/\pi\mu}$ , где  $d_{\text{эф}}$  – эффективный диаметр атома,  $N_0 = N_A p/RT$  – объёмная концентрация атомов,  $p$  – давление,  $N_A$  – число Авогадро,  $\mu$  – молярная масса вещества, можно получить величину ударного уширения:

$$\Delta \nu_{\text{Л}} = \frac{4\pi d_{\text{эф}}^2 p N_A}{\sqrt{\pi\mu RT}}. \quad (2.24)$$

В результате численных оценок показано, что при обычных условиях полуширина ударного контура также превосходит естественную полуширину спектральной линии на несколько порядков.

Реальный контур индивидуальных спектральных линий частиц вещества, находящегося в газообразном состоянии, формируется в результате наложения естественного, доплеровского и ударного контуров. В частных ситуациях может оказаться преобладающей одна из двух последних причин уширения. Например, при низких давлениях и высоких температурах форма спектральных линий лёгких частиц

является практически доплеровской, а при высоких давлениях основное значение, как правило, имеет ударное уширение. В зависимости от типа уширения реальный контур спектральной линии получается симметричным или асимметричным.

Дополнительное уширение спектральных линий может быть обусловлено конфигурационным взаимодействием частиц (эффект Яна – Теллера), воздействием электрических (эффект Штарка) и магнитных полей (эффект Зеемана), спин-орбитальным взаимодействием (мультиплетное расщепление), Ван-дер-Ваальсовым взаимодействием и др.

Заметим в заключение, что при большой концентрации атомов контур линии испускания может искажаться вследствие самопоглощения (реабсорбции) излучения в источнике света.

### Вопросы для самоконтроля

1. Какова цель и физическая основа качественного атомного спектрального анализа и каковы методы его реализации?
2. Какие виды качественного атомного спектрального анализа существуют?
3. Какова цель и физическая основа количественного атомного спектрального анализа?
4. Какую пару спектральных линий называют аналитической?
5. Каково назначение и принципиальная схема спектрального прибора? Какие основные узлы выделяют в спектральных приборах? Каково назначение каждого из них?
6. Какие разновидности спектральных приборов различают в соответствии с разными признаками их классификации?
7. Перечислите основные параметры и характеристики спектрального прибора.
8. По каким формулам вычисляются угловая и линейная дисперсия, а также разрешающая способность призмного и дифракционного спектрального прибора? Какой физический смысл имеют эти понятия?
9. По каким методикам производят определение линейной дисперсии и разрешающей способности спектральных приборов?
10. Каков физический смысл коэффициентов Эйнштейна для спонтанных и вынужденных переходов в атоме?
11. По каким причинам спектральные линии в спектре атома не являются бесконечно узкими?
12. Как объясняют естественное уширение спектральной линии в рамках классической и квантовомеханической теории?
13. Как хаотическое движение частиц влияет на ширину спектральных линий: а) вследствие столкновений; б) вследствие эффекта Доплера?

## Лабораторная работа 4. Определение дисперсии и разрешающей способности спектральных приборов

**Цель работы:** изучить устройство, основные параметры и характеристики спектральных приборов; экспериментально определить дисперсию и разрешающую способность спектрографа ИСП-30 и виртуального спектрального прибора.

**Приборы и принадлежности:** спектрограф ИСП-30, спектрограмма излучения железа, спектропроектор ПС-18, атлас и таблицы спектральных линий железа, компьютерная модель эмиссионных спектров атомных систем.

### Задание 1. Изучение правил работы с приборами и компьютерной моделью «The Elements Spectra»

#### Порядок выполнения работы

1 Изучите теоретический материал по теме «Спектральные приборы, их параметры и характеристики».

2 Изучите устройство и правила эксплуатации спектрографа ИСП-30 и спектропроектора ПС-18.

3 Изучите правила работы с компьютерной моделью «The Elements Spectra» эмиссионных спектров атомных систем, рабочее окно которой изображено на рисунке 2.5.

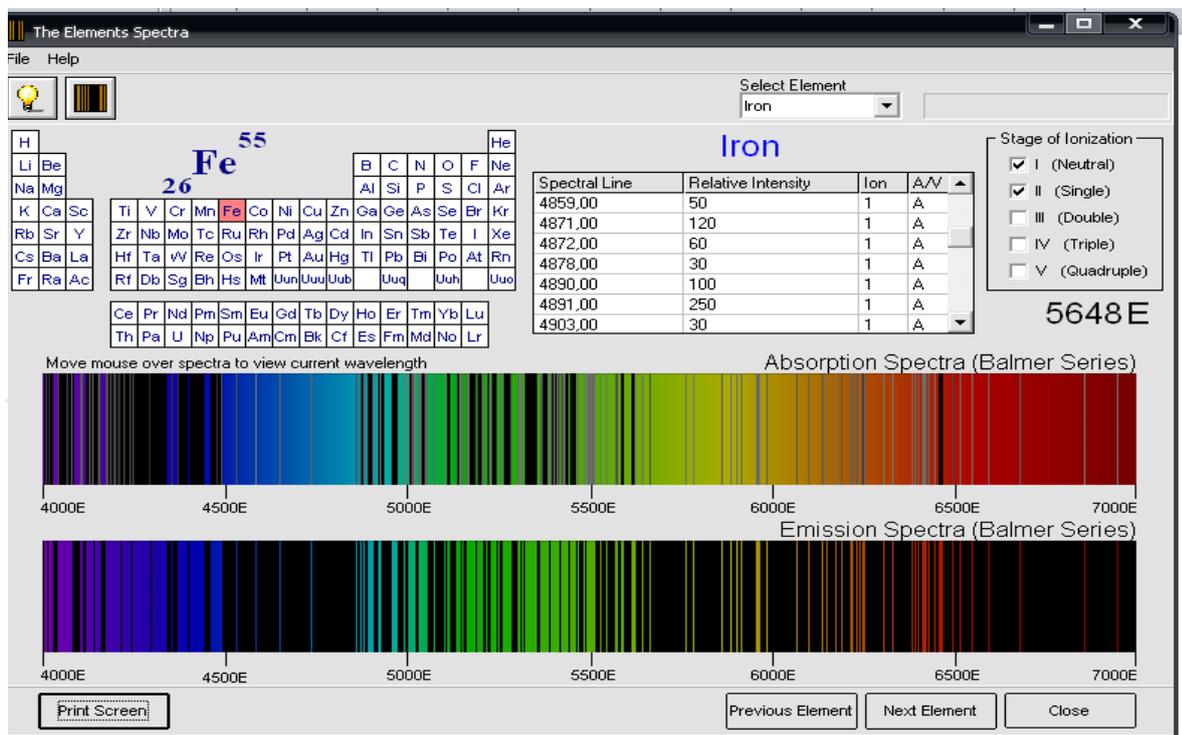


Рисунок 2.5 – Рабочее окно компьютерной программы «The Elements Spectra»

Пользуясь данной программой, можно получать изображения спектров испускания и поглощения нейтральных атомов и ионов разных химических элементов и определять длины волн и относительные интенсивности для спектральных линий. Выбор элемента производится в окне Select Element или нажатием химического символа в периодической таблице элементов.

## **Задание 2. Определение зависимости линейной дисперсии спектрографа от длины волны излучения**

### **Порядок выполнения**

1. Пользуясь спектропроектором ПС-18, фотопластинкой с изображением эмиссионного спектра железа в диапазоне  $300 \div 500$  нм и атласом спектральных линий железа, установите в табличной форме соответствие между значениями длин волн и делениями шкалы спектрографа. Постройте дисперсионную кривую (градуировочный график) спектрографа  $\lambda = f(x)$ . Для построения используйте не менее  $15 \div 20$  точек.

2. Разделите интервал длин волн, в котором произведена градуировка спектрографа, на три равных части. В средней области каждой из этих частей выберите три пары линий. Для каждой пары линий определите разность длин волн  $\Delta\lambda$  и соответствующий им интервал делений шкалы  $\Delta x$ . Вычислите значения линейной дисперсии  $D_x = \Delta x / \Delta\lambda$  прибора и определите её среднее значение в каждой выделенной части спектра.

3. Сравните полученные результаты. Сделайте вывод о характере зависимости линейной дисперсии спектрографа ИСП-30 от длины волны.

## **Задание 3. Определение зависимости разрешающей способности спектрографа от длины волны излучения**

### **Порядок выполнения**

1. В каждой из областей спектра, выделенных при выполнении задания 2, выберите пару спектральных линий, находящихся на пределе разрешения. Пользуясь атласом спектральных линий, определите длины волн этих линий, величину разрешаемого интервала  $\delta\lambda$  и вычислите разрешающую способность  $R = \lambda / \delta\lambda$ .

2. Сформулируйте выводы о характере зависимости линейной дисперсии и разрешающей способности спектрографа ИСП-30 от длины волны.

3. Пользуясь данными таблицы 2.1, постройте график зависимости показателя преломления кварцевого стекла от длины волны в диапазоне 300 ÷ 500 нм и определите дисперсию  $\frac{dn}{d\lambda}$  кварцевого стекла вблизи длин волн, соответствующих спектральным линиям, использованным при выполнении пункта 2 в задании 2. Сделайте вывод о характере зависимости  $\frac{dn}{d\lambda}(\lambda)$ .

4. Сведите в самостоятельно составленную таблицу результаты, полученные при выполнении заданий 2 и 3, и сравните их с результатами теоретического анализа зависимости параметров призматических спектральных приборов от длины волны (формулы (2.3) и (2.4)). Объясните полученные зависимости, сопоставляя формулы (2.3) и (2.4) с зависимостью дисперсии кварцевого стекла от длины волны  $\frac{dn}{d\lambda}(\lambda)$ .

Таблица 2.1 – Зависимость показателя преломления  $n$  плавленого кварцевого стекла от длины волны  $\lambda$

$\lambda$ , нм	$n$	$\lambda$ , нм	$n$
274,87	1,4962	434,05	1,4669
303,41	1,4859	435,83	1,4668
340,37	1,4787	467,82	1,4644
396,85	1,4706	479,99	1,4636
404,66	1,4697	508,58	1,4619

#### **Задание 4. Определение характеристик виртуального спектрального прибора**

##### **Порядок выполнения работы**

1. Пользуясь компьютерной моделью «The Elements Spectra» эмиссионных спектров атомных систем, выведите на экран эмиссионный спектр железа в интервале 400 ÷ 700 нм. Выберите в окне Stage of ionization позицию, соответствующую нейтральному и однократно ионизированному атому.

2. Сопоставьте изображение спектра железа, выданное преподавателем (на рисунке 2.5 представлена его уменьшенная копия), с изображением спектра на экране монитора.

3. Определите положение какой-нибудь одной линии по шкале (рисунок 2.5) и выделите эту же спектральную линию в окне Emission Spectra (Balmer Series) кликом курсора. При этом в поле под окном Stage of ionization изобразится значение длины волны, соответствующей выбранной спектральной линии. Запишите в таблицу полученные результаты.

Повторите такие же действия для других  $15 \div 20$  спектральных линий железа в выделенном интервале спектра. При определении длины волны следует выбирать линии, которым соответствует высокая относительная интенсивность. Информация о длинах волн и относительной интенсивности спектральных линий содержится в таблице, расположенной слева от окна Stage of ionization.

Используя результаты измерений, постройте градуировочный график виртуального прибора, откладывая по оси абсцисс величину  $x = Ck$ , где  $C = 2$  мм/дел – масштабный коэффициент.

4. Определите линейную дисперсию виртуального спектрального прибора. Сравните градуировочные графики спектрографа ИСП-30 и виртуального спектрального прибора и, анализируя их совместно с формулами (2.3) и (2.4), сделайте вывод о типе диспергирующего устройства в виртуальном приборе.

5. Определите разрешающую способность  $R = \lambda / \delta\lambda$  виртуального прибора, определяя длины волн для нескольких пар спектральных линий, находящихся на пределе разрешения в разных участках спектрограммы.

6. Предполагая, что фокусное расстояние  $f$  объектива выходного коллиматора для виртуального прибора равно 2780 мм, воспользуйтесь формулой (2.3) в отсутствие наклона фокальной плоскости (то есть при  $\varepsilon = \pi/2$ ) и результатами, полученными в пункте 4 настоящего задания, и определите угловую дисперсию виртуального спектрального прибора  $D_{\Theta} = d\Theta / d\lambda$ .

7. Используя найденное значение  $D_{\Theta}$  и зависимость (2.2), принимая в ней  $m = 1$  и  $\cos\Theta = 1$ , определите период дифракционной решётки  $d$ . По формуле (2.5) вычислите разрешающую способность виртуальной дифракционной решётки, имеющей длину  $L = 100$  мм.

8. Сравните результаты выполнения задания 4 с результатами, полученными при выполнении заданий 2 и 3, сформулируйте выводы.

9. Сравните параметры, определённые вами для виртуального спектрографа, с параметрами реальных дифракционных спектральных

приборов, приведёнными в разделе «Приложение» учебного пособия В.В. Лебедевой «Техника оптической спектроскопии» (М.: издательство Московского университета, 1986, с. 330–337), и определите, какой из них может быть признан прототипом виртуального прибора.

## **Лабораторная работа 5. Изучение уширения спектральных линий**

**Цель работы:** изучение причин уширения спектральных линий атомов; экспериментальное определение ширины спектральной линии ртути.

**Приборы и принадлежности:** спектрограф ДФС-8, ртутные лампы ПРК-4 и ДРШ-250, спектрограммы излучения ртути, микрофотометр МФ-4.

### **Задание 1. Теоретическая и методическая подготовка к выполнению работы**

#### **Порядок выполнения работы**

1. Изучите причины уширения спектральных линий и теоретическое описание распределения интенсивностей в них.
2. Изучите устройство, принцип действия дифракционного спектрографа ДФС-8 и его основные характеристики.
3. Изучите устройство, принцип действия микрофотометра МФ-4 и методику работы на нём.

### **Задание 2. Экспериментальное определение уширения спектральной линии ртути**

#### **Порядок выполнения работы**

1. Пользуясь микрофотометром МФ-4, произведите фотометрирование группы из 3 ÷ 4 линий вблизи  $\lambda = 435,8$  нм в спектре ртути, зарегистрированном с использованием лампы ДРШ-250. На основе результатов фотометрирования, сведённых в таблицу, постройте график зависимости  $S_1 = S_1(x)$ . (Здесь  $S$  – плотность почернения,  $x$  – координата фотометрируемого элемента, отсчитанная по микрометрическому винту микрофотометра).

2. По графику функции  $S = S(x)$  определите положения  $x_i$  максимумов почернения, соответствующие каждой спектральной линии с длиной волны  $\lambda_i$ , и, комбинируя их, определите значения дисперсии спектрографа в соответствии с формулой

$$D_n = \frac{x_k - x_i}{\lambda_k - \lambda_i} \quad (\text{здесь } i, k = 1, 2, 3, 4; i \neq k)$$

и его среднюю дисперсию

$$\bar{D} = \frac{1}{n} \sum_n D_n.$$

3. Определите полуширину  $\Delta x_1$  спектральной линии  $\lambda = 435,8$  нм в спектре ртути, зарегистрированном с использованием лампы ДРШ-250.

4. Определите соответствующий данной линии спектральный интервал  $\Delta \lambda_1$  по формуле  $\Delta \lambda_1 = \frac{\Delta x_1}{\bar{D}}$ , где  $\bar{D}$  – среднее значение дисперсии прибора.

5. Произведите фотометрирование линии с длиной волны  $\lambda = 435,8$  нм в спектре ртути, зарегистрированном с использованием лампы ПРК-4, и, выполняя действия, описанные в пунктах 2 – 4, определите  $\Delta \lambda_2$ .

6. Принимая  $s = 0,1$  мм,  $\omega = 1$ ,  $\sin \varepsilon = 1$  и  $f_1 = f_2$ , воспользуйтесь формулами (2.6) и (2.8) и определите  $\Delta \lambda_{\text{ш}}$ .

7. Пренебрегая в формуле (2.7) величиной  $\Delta \lambda_d$ , и используя найденные значения  $\Delta \lambda_1$  и  $\Delta \lambda_2$ , определите величину уширения  $\Delta \lambda_{y1}$  и  $\Delta \lambda_{y2}$  спектральной линии  $\lambda = 435,8$  нм в спектре каждой из ламп.

### **Задание 3. Определение естественной ширины спектральной линии, величины её доплеровского и ударного уширения**

#### **Порядок выполнения работы**

1. Пользуясь формулами (2.13), (2.19), (2.24), сведениями, представленными на рисунке 2.6 и в таблице 2.2, рассчитайте естественное, доплеровское и ударное уширение спектральной линии  $\lambda = 435,83$  нм спектра ртути. Учтите, что эффективный диаметр атома ртути  $d_{\text{эф}} = 2 \cdot 10^{-9}$  м.

2. Сравните полученные значения  $\Delta\lambda_{y1}$  и  $\Delta\lambda_{y2}$  и объясните их различие, принимая во внимание режим газового разряда в лампах ДРШ-250 и ПРК-4 (таблица 2.2) и результаты вычислений. Сформулируйте выводы.

Таблица 2.2 – Температура и давление паров ртути в лампе

Тип лампы	Температура, К	Давление, $10^5$ Па
ДРШ-250	1000	15,195
ПРК-4	500	1,013

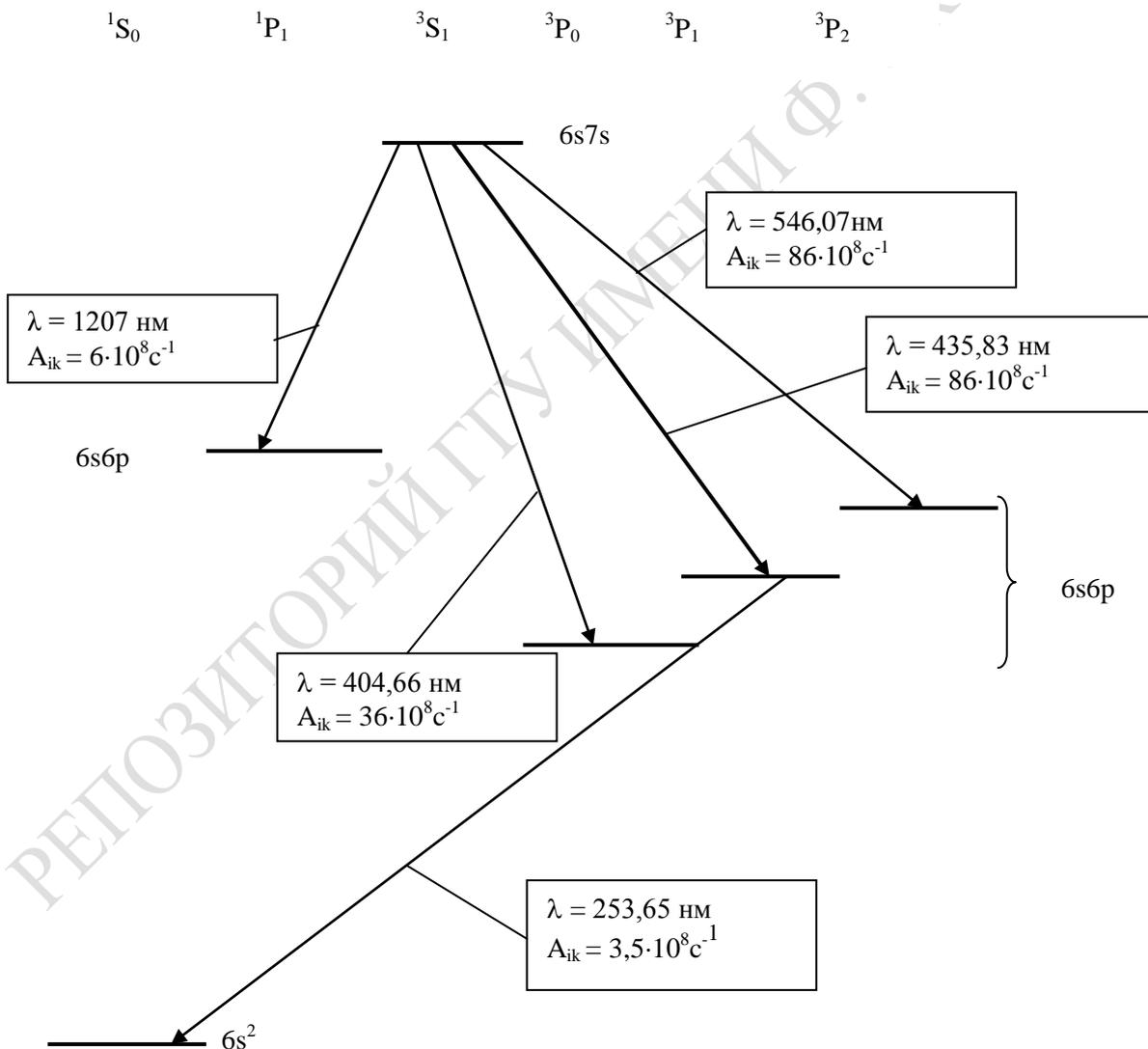


Рисунок 2.6 – Схема энергетических уровней и вероятности переходов атома ртути

## Литература

1. Ахиезер, А. И. Атомная физика: справочное пособие / А. И. Ахиезер. – Киев: Наукова думка, 1988. – 268 с.
2. Годлевская, А. Н. Физика атома и атомных явлений: тексты лекций для студентов физических специальностей университета / А. Н. Годлевская, В. Г. Шолох. – Гомель: ГГУ им. Ф. Скорины, 2006. – 202 с.
3. Граков, В. Е. Физика атома: лабораторный практикум / В. Е. Граков, А. А. Сокольский, Г. Ф. Стельмах; под ред. А. П. Клищенко. – Мн.: БГУ, 2006. – 200 с.
4. Емельянов, В. А. Методы обработки результатов измерений в лаборатории физпрактикума: учеб. пособие / В. А. Емельянов, Д. Г. Лин, В. Ф. Шолох. – Мн.: Бестпринт, 1997. – 90 с.
5. Зайдель, А. Н. Техника и практика спектроскопии / А. Н. Зайдель, Г. В. Островская, Ю. И. Островский – М.: Наука, 1976. – 392 с.
6. Линднер, Г. Картины современной физики / Г. Линднер. – М.: Мир, 1977. – 272 с.
7. Матвеев, А. Н. Атомная физика: учеб. пособ. для студентов вузов / А. Н. Матвеев. – Т. V – М.: Высш. шк., 1989. – 439 с.
8. Нагибина, И. М. Фотографические и фотоэлектрические спектральные приборы и техника эмиссионной спектроскопии: учеб. пособие / И. М. Нагибина, Ю.К. Михайловский. – Л.: Машиностроение, 1981. – 247 с.
9. Практикум по атомной физике / В. Б. Авраменко [и др]; под ред. Л.И. Киселевского. – Минск: Университетское, 1989. –176 с.
10. Сивухин, Д. В. Общий курс физики: атомная и ядерная физика : в V т. / Д. В. Сивухин. – М.: Наука, 1986. – Ч. I. Атомная физика. – 416 с.
11. Физический энциклопедический словарь / гл. ред. А. М. Прохоров; редкол.: Д. М. Бонч-Бруевич [и др.]. – М.: Советская энциклопедия, 1984. – 944 с.
12. Шпольский, Э. В. Атомная физика. / Э. В. Шпольский. – М.: Наука, 1974. – Т. 2. Основы квантовой механики и строение электронной оболочки атома. – 447 с.
13. Яворский, Б. М., Справочник по физике для инженеров и студентов вузов / Б. М. Яворский, А. А. Детлаф, А. К. Лебедев. – 8-е изд. – М.: Оникс, Мир и образование, 2006. – 1056 с.

Производственно-практическое издание

Годлевская Анна Николаевна,  
Шолох Валентина Григорьевна

## **ФИЗИКА АТОМА И АТОМНЫХ ЯВЛЕНИЙ**

### **Квантовые модели и экспериментальные основы спектроскопии в атомной физике**

Практическое пособие  
для студентов специальностей  
1-31 04 01 «Физика (по направлениям)»

Редактор *В. И. Шкредова*  
Корректор *В. В. Калугина*

Подписано в печать 09.01.2015. Формат 60×84 1/16.  
Бумага офсетная. Ризография. Усл. печ. л. 2,8.  
Уч.-изд. л. 3,1. Тираж 25 экз. Заказ 21.

Издатель и полиграфическое исполнение:  
учреждение образования  
«Гомельский государственный университет  
имени Франциска Скорины».

Свидетельство о государственной регистрации издателя, изготовителя,  
распространителя печатных изданий № 1/87 от 18.11.2013.  
Специальное разрешение (лицензия) № 02330 / 450 от 18.12.2013.  
Ул. Советская, 104, 246019, Гомель.