

Документ подписан простой электронной подписью

Информация о владельце:

ФИО: Локтионова Оксана Геннадьевна

Должность: проректор по учебной работе

Дата подписания: 15.05.2017 11:05

Уникальный программный ключ:

0b817ca911e6668abb13a5d426d39e5f1c11eabbf73e9450f4a48511da56d089

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования

«Юго-Западный государственный университет»
(ЮЗГУ)

Кафедра нанотехнологий и инженерной физики



КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА И СТАТИСТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

Методические указания к выполнению лабораторных работ для
студентов направления подготовки
28.03.01 «Нанотехнологии и микросистемная техника»

Курск - 2017

УДК 53

Составители: А.В. Кузько, С.В. Соболев

Рецензент

Директор РИЦ, д.ф.-м.н., профессор А.П. Кузьменко

Квантовая механика и статистическая физика:
методические указания к выполнению лабораторных работ для
студентов направления подготовки 28.03.01 «Нанотехнологии и
микросистемная техника»/ Юго-Зап. гос. ун-т; сост.: Кузько А.В.,
Соболев С.В. Курск. 2017. 42 с.

Излагаются методические рекомендации по выполнению лабораторных работ, в которых изучаются сериальные закономерности в спектре излучения атома водорода, проверка квантовомеханического принципа суперпозиции методом компьютерного моделирования, квантовый гармонический осциллятор, расщепление спектральных линий электронов в магнитном поле и подтверждение разницы населенностей подуровней посредством ЭПР.

Методические указания соответствуют требованиям Федерального государственного образовательного стандарта высшего профессионального образования и учебному плану направления подготовки 28.03.01 Нанотехнологии и микросистемная техника, степень (квалификация) – бакалавр. Предназначены для студентов всех форм обучения.

Текст печатается в авторской редакции

Подписано в печать 15.12.17. Формат 60 x 84 1/16.

Усл. печ. л. 2,44. Уч.-изд. л. 2,21. Тираж 50 экз. Заказ . Бесплатно.

Юго-Западный государственный университет.

305040 Курск, ул. 50 лет Октября, 94.

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 1.

ИЗУЧЕНИЕ СЕРИАЛЬНЫХ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ В СПЕКТРЕ ИЗЛУЧЕНИЯ АТОМА ВОДОРОДА

Цель работы: знакомство с элементами квантово-механической теории строения атома водорода на примере изучения его спектральных закономерностей; расчет по значениям длин волн для серии Бальмера постоянной Ридберга и массы электрона.

Приборы и принадлежности: спектр излучения водородной газоразрядной трубки.

КРАТКАЯ ТЕОРИЯ

Плазма это ионизованный квазинейтральный газ. Ионизованный газ содержит свободные электроны, положительные и отрицательные ионы. Квазинейтральность означает, что суммарный заряд в любом малом по сравнению с размерами системы объеме равен нулю, является её ключевым отличием от других систем, содержащих заряженные частицы (например, электронные или ионные пучки). Поскольку при нагреве газа до достаточно высоких температур, он переходит в плазму, она называется четвёртым (после твёрдого, жидкого и газообразного) агрегатным состоянием вещества.

Типичные разряды в постоянном электрическом поле

Термин «газовый разряд» происходит от обозначения процесса разрядки конденсатора через цепь, включающую в себя газовый промежуток между электродами. При достаточно высоком напряжении в газе происходит пробой и возникает ионизованное состояние. Со временем разрядом стали называть всякий процесс протекания электрического тока через ионизованный газ, а также любой процесс возникновения ионизации под действием приложенного электрического поля. Поскольку в достаточной степени ионизованный газ светится, стали говорить: зажигается разряд, горит, гаснет.

С несколькими важнейшими видами разрядов можно познакомимся при помощи сравнительно простого эксперимента. Два металлических электрода А и К, подключаемых к источнику постоянного напряжения, вводят в стеклянную трубку. Трубку можно откачивать и наполнять разными газами при разных давлениях. При проведении опыта измеряют напряжение на электродах и ток в цепи. Это классическое устройство уже 150 лет служит для изучения разрядных процессов и не утратило своего значения и поныне.

Если подать на электроды небольшое напряжение, скажем десятки вольт, никаких видимых эффектов не произойдет, но сверхчувствительный прибор регистрирует протекание чрезвычайно слабого тока, может быть 10^{-15} А. Под действием космического излучения естественной радиоактивности

(гамма лучи, γ -фотоны) в газе образуются заряды. Поле вытягивает их к электродам противоположного знака, что дает ток. Можно получить ток до 10^{-6} А, если специально облучать газ радиоактивным или рентгеновским источником. Но все равно соответствующая ионизация слишком мала, чтобы газ светился. Разряд и электрический ток, которые возникают только благодаря действию постороннего ионизирующего агента или в результате эмиссии электронов или ионов с электродов под действием посторонних причин (например, вследствие накаливания катода), называют несамостоятельными. При увеличении напряжения несамостоятельный ток сначала возрастает, так как все большую часть зарядов удается вытянуть на электроды до того, как они прорекомбинируют. Но когда поле успевает вытягивать все образующиеся заряды, ток перестает расти и достигает насыщения, ибо он лимитируется скоростью образования ионов.

Далее, если увеличивать напряжение, при некотором его значении ток резко возрастает и появляется свечение. Это происходит пробой — один из важнейших разрядных процессов. При давлении $p \sim 1 \text{ торр} = 1 \text{ мм рт. ст.}$ и межэлектродном расстоянии $L \sim 1$ см напряжения пробоя составляют несколько сотен вольт. Пробой начинается с некоторого числа случайных или искусственно впрыснутых электронов, когда хотят стимулировать процесс. Но разряд немедленно приобретает самостоятельность и не нуждается больше в посторонней поддержке. В поле электрон ускоряется и набирает энергию. Достигнув потенциала ионизации атомов, он вырывает другой электрон, затрачивая на это приобретенную энергию. В результате такого акта ионизации появляются два медленных электрона. Они повторяют тот же цикл, и т. д. Так развивается электронная лавина и происходит размножение электронов. За 10^{-7} – 10^{-3} с газ ионизируется заметным образом, и электрический ток вырастает на несколько порядков.

Дальнейший ход процесса зависит от ряда условий. При небольших давлениях (например, 1–10 торр) и большом электрическом сопротивлении внешней цепи, которое не позволяет течь большому току, в результате пробоя зажигается тлеющий разряд (рис.1) — один из наиболее распространенных и важных типов разряда. Для него характерны небольшая сила тока ($i \sim 10^{-6}$ – 10^{-1} А в трубках радиусом $R \sim 1$ см) и довольно высокое напряжение (сотни и тысячи вольт). В достаточно длинной трубке (скажем, $L \sim 30$ см) при $p \sim 1$ торр образуется однородный по длине, красиво светящийся столб. Так делают красочные рекламные трубки для улиц.

Практически повсюду, за исключением приэлектродных областей, ионизованный газ в столбе электропейтрален, т. е. представляет собою плазму. Это — так называемый положительный столб тлеющего разряда. Плазма в чем ионизована очень слабо, до степени ионизации 10^{-8} – 10^{-6} , и в двух отношениях не равновесна. Электроны, непосредственно приобретающие энергию от поля, обладают средней энергией $\varepsilon \approx 1$ эВ и температурой $T_e \approx 10^4$ К. Между тем температура газа, в том числе и ионов, T не на много превышает температуру окружающей среды 300 К. Такое неравновесное состояние с сильным отрывом электронной и газовой

температур поддерживается из-за малой скорости выделения джоулева тепла при относительно больших теплоемкости газа и скорости его естественного охлаждения. Неравновесна и степень ионизации. Она на много порядков ниже термодинамически равновесной величины, соответствующей температуре электронов. Это происходит из-за большой скорости гибели зарядов в холодном газе.

Если давление газа высоко, порядка атмосферного, а сопротивление

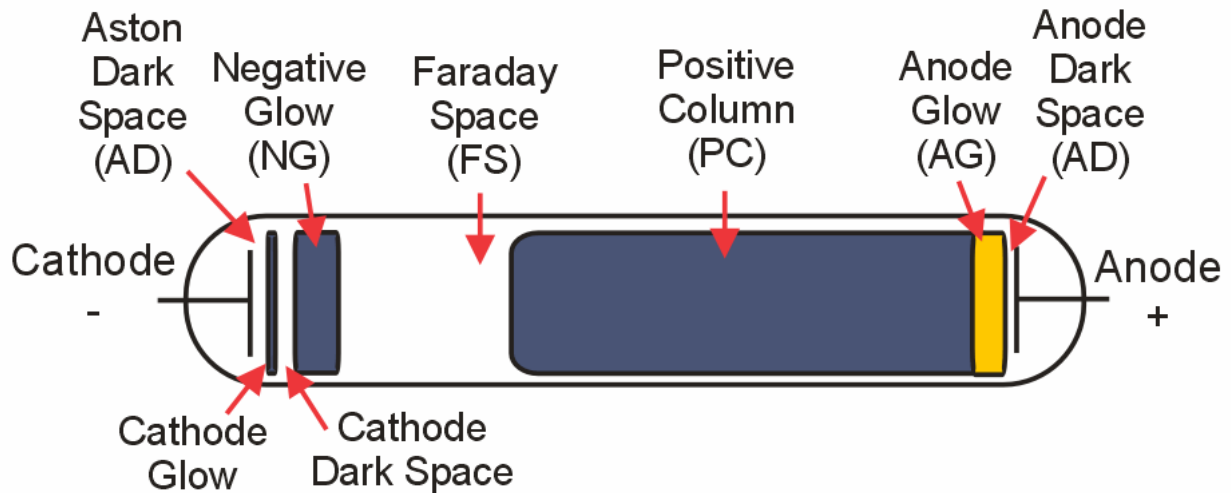


Рисунок 1 – Газоразрядная трубка

внешней цепи мало, так что цепь может пропустить сильный ток, вскоре после пробоя обычно зажигается дуговой разряд. Для дуги характерны сильный ток ($i > 1 \text{ A}$), низкое напряжение (десятки вольт) и ярко светящийся столб. В дуге выделяется большая мощность, стеклянная трубка довольно скоро разрушается от перегрева. Поэтому, зажигая дуговой разряд в замкнутом сосуде, нужно позаботиться об интенсивном отводе тепла от его стенок. Дугу часто зажигают прямо в открытом воздухе. Тогда тепло рассеивается в пространстве. В дуге атмосферного давления обычно образуется термодинамически равновесная, так называемая низкотемпературная плазма с $T_e \approx T \approx 10^4 \text{ K}$ и соответствующей таким температурам равновесной степени ионизации $10^{-3}—10^{-1}$. Дуговой разряд существенно отличается от тлеющего механизмом электронной эмиссии с катода (без катодной эмиссии не мог бы течь постоянный ток). В тлеющем разряде электроны вырываются с поверхности холодного металла под действием вытягиваемых на катод положительных ионов. В дуговом разряде из-за сильного тока катод разогревается либо по всей поверхности, либо локально, и происходит термоэлектронная эмиссия.

При давлениях $p \sim 1 \text{ атм}$, расстояниях между электродами $L > 10 \text{ см}$ и достаточно высоких напряжениях происходит искровой разряд. Пробой при этом осуществляется путем быстрого прорастания плазменного канала от одного электрода к другому. Потом происходит как бы короткое замыкание электродов сильноионизованным искровым каналом. Грандиозной формой искрового разряда является молния, для которой «электродами» служат заряженное электричеством облако и земля. В сильно неоднородных полях,

недостаточных для пробоя всего промежутка, может возникнуть коронный разряд. Светящаяся корона появляется около острий, где концентрируется поле, проводов, находящихся под напряжением, около линий электропередач.

Тлеющий разряд это плазма, образующаяся при прохождении электрического тока через газ при низком давлении. Он создается путем подачи напряжения между двумя металлическими электродами в стеклянной трубке, содержащей газ. Когда напряжение превышает определенное значение, называемое напряжением пробоя, газ в трубке ионизируется, становясь плазмой, и начинает проводить электричество, заставляющее его светиться светом определенного цвета. Цвет зависит от используемого газа. Тлеющий разряд широко используется в качестве источника света в таких устройствах, как неоновые лампы, люминесцентные лампы и телевизоры с плазменным экраном. Анализируя излучаемый свет, с помощью спектроскопии можно получить информацию об атомных взаимодействиях в газе, поэтому свечение разряда используется в физике плазмы и аналитической химии. Он также используется в технике для обработки поверхности (плазменное напыление).



Рисунок 2 – Водород в разрядной трубке

При тлеющем разряде атомы газа могут быть возбуждены в результате столкновений с ионами, электронами или другими атомами, которые были ранее возбуждены от столкновений. После возбуждения атомы достаточно быстро теряют свою энергию, эта энергия может быть потеряна различными способами. Наиболее важным является радиационный – потеря энергии за счет испускания фотона, который уносит энергию прочь. В оптической атомной спектроскопии, длина волны (частота) этого фотона может быть использован для идентификации атомов газа (то есть, для определения какой химический элемент находится в стеклянной трубке), а число фотонов прямо пропорционально концентрации этого элемента.

Оптическая спектроскопия

Внутри атома электроны существуют только на определенных энергетических уровнях (или атомных орбиталях). Атомные орбитали квантуются, то есть они существуют в виде определенных значений вместо

того, чтобы быть непрерывными. Электроны могут перемещаться между орбиталями, но при этом они должны поглощать или излучать энергию, равную разности энергий между её конкретными дискретными уровнями.

Оптическая спектроскопия делится на атомно-абсорбционную спектроскопию (спектр поглощения) и атомно-эмиссионную спектроскопию (спектр испускания).

В атомно-абсорбционной спектроскопии, свет заданной длины волны пропускают через совокупность атомов. Если длина волны источника света имеет энергию, соответствующую разности энергий между двумя уровнями энергии в атомах, часть света будет поглощаться. Различие между интенсивностью света определенной частоты ν , излучаемого из источника (например, лампы) и света, собираемого с помощью детектора дает информацию о поглощении фотонов с энергией $E=h\nu$. Это значение оптической плотности может быть использовано для определения концентрации данного элемента (или атомов) в образце.

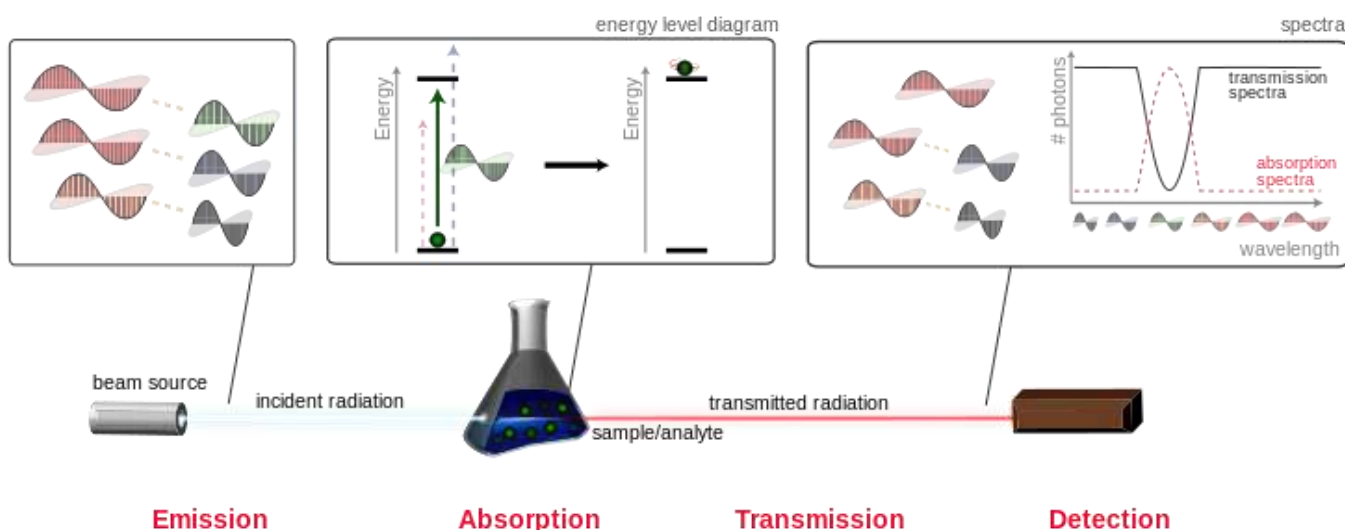


Рисунок 3 – Поглощение видимого спектра

Атомно-эмиссионная спектроскопия (AES) представляет собой метод химического анализа, который использует **спектр испускания света**, излучаемого из пламени, плазмы, дуги или искры. **Эмиссионный спектр, спектр излучения, спектр испускания** обычно представляется в виде горизонтальной цветовой полосы – результат расщепления света от объекта призмой, либо в виде **графика зависимости относительной интенсивности электромагнитного излучения исследуемого объекта от частоты**, либо в виде таблицы. Длина волны атомной спектральной линии дает идентичность элемента, а интенсивность излучаемого света пропорциональна числу атомов элемента. Например, возбужденные атомы и ионы плазмы испускают электромагнитное излучение на длинах волн, характерных для конкретного элемента.

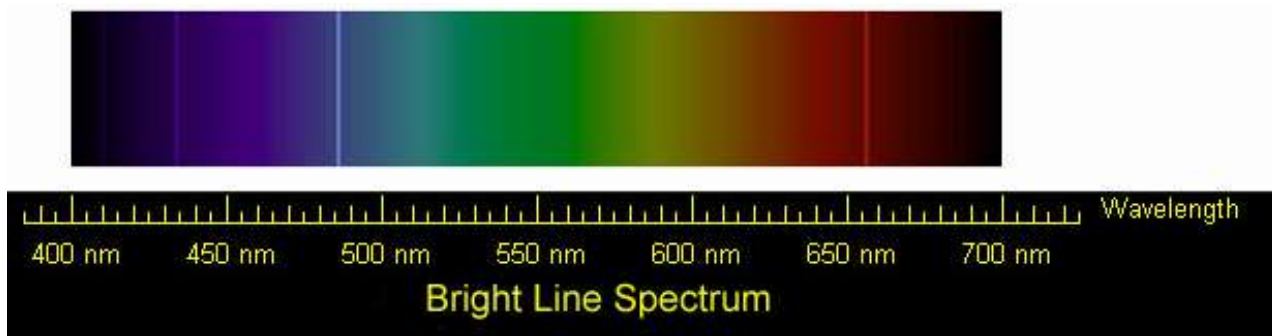


Рисунок 4 – Эмиссионный спектр излучения атомов водорода на фоне сплошного спектра в видимой области.

Серия Бальмера

Серия Бальмера — одна из спектральных серий атома водорода, наблюдающаяся для переходов между вторым энергетическим (первым возбуждённым) уровнем атома и вышележащими уровнями. В отличие от ультрафиолетовой серии Лаймана, связанной с переходами на основной уровень, четыре первые линии серии Бальмера лежат в видимой области спектра.

Названа в честь швейцарского математика Иоганна Бальмера, описавшего в **1885** году (19 век) эту серию формулой.

Серия была обнаружена в спектре Солнца. Благодаря распространённости водорода во Вселенной, серия Бальмера наблюдается в спектрах большинства космических объектов.

Данная серия образуется при переходах электронов с возбужденных энергетических уровней с главным квантовым числом $n > 2$ на второй уровень ($n=2$) в спектре излучения и со второго уровня на все вышележащие уровни при поглощении.

Переход с третьего энергетического уровня на второй обозначается греческой буквой α , с 4-го на 2-й – β и т. д. Для обозначения самой серии используется латинская буква **H**. Таким образом, полное обозначение спектральной линии, возникающей при переходе электрона с третьего уровня на второй — **H α** (произносится *Бальмер-альфа*).

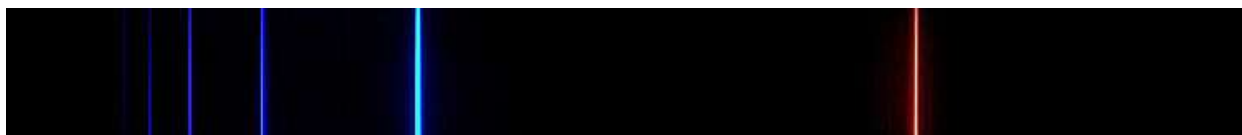


Рисунок 5 – Видимые линии излучения водорода в серии Бальмера. H α – красная линия справа, имеющая длину волны 656,3 нм. Две самые левые линии – H ϵ и H ζ , лежат уже в ультрафиолетовой области спектра и имеют длины волн 397,0 нм и 388,9 нм, соответственно.

Формула Бальмера

Для описания длин волн λ четырёх видимых линий спектра водорода И. Бальмер предложил формулу

$$\lambda = b \frac{m^2}{m^2 - 2^2}$$

где $n = 3, 4, 5, 6$; $b = 3645,6 \text{ \AA}$.

В настоящее время для серии Бальмера используют частный случай формулы Ридберга:

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

где λ – длина волны, $R \approx 109737,3157 \text{ см}^{-1}$ – постоянная Ридберга, m – главное квантовое число исходного уровня – натуральное число, большее или равное 3.

Первые 4 линии серии находятся в видимом диапазоне, остальные – в ультрафиолетовом:

Таблица 1

Обозначение	H α	H β	H γ	H δ	H ϵ	H ζ	H η	Граница серии
n	3	4	5	6	7	8	9	∞
Длина волны, нм	656,3	486,1	434,1	410,2	397,0	388,9	383,5	364,6

Граница серии соответствует захвату протоном свободного электрона с нулевой начальной энергией на второй (то есть первый возбуждённый) уровень. За границей в сторону более коротких длин волн простирается бальмеровский континуум — непрерывная (не линейчатая) часть спектра, соответствующая захватам протоном свободного электрона с произвольной положительной начальной энергией на второй уровень атома водорода.

Кроме серии Бальмера, существуют серии линий излучения, лежащие целиком (за исключением континуума серии) в инфракрасной области спектра (серии Пашена, Брэкета, – Пфунда и т. д., соответствующие переходам на 3-й, 4-й, 5-й... энергетические уровни), а также лежащая целиком в ультрафиолетовой области серия Лаймана, соответствующая переходам на основной уровень атома водорода.

История создания формулы Бальмера и её значение

Иоганн Бальмер не был спектрографистом. Его заслуга состоит в том, что он описал известный к тому времени спектр атомов водорода простой

формулой
$$\lambda = b \frac{m^2}{m^2 - 2^2}.$$

Будучи убеждённым последователем пифагорейцев, Бальмер считал, что тайну единства всех наблюдаемых явлений следует искать в различных комбинациях целых чисел. Существует версия, согласно которой Бальмер однажды похвастался, что может найти формулу для последовательности любых четырёх чисел, и его друг Эдуард Хагенбах-Бишофф на спор дал ему длины волн красной, зелёной, синей и фиолетовой линий водородного спектра. Бальмер не только описал длины волн четырёх известных линий

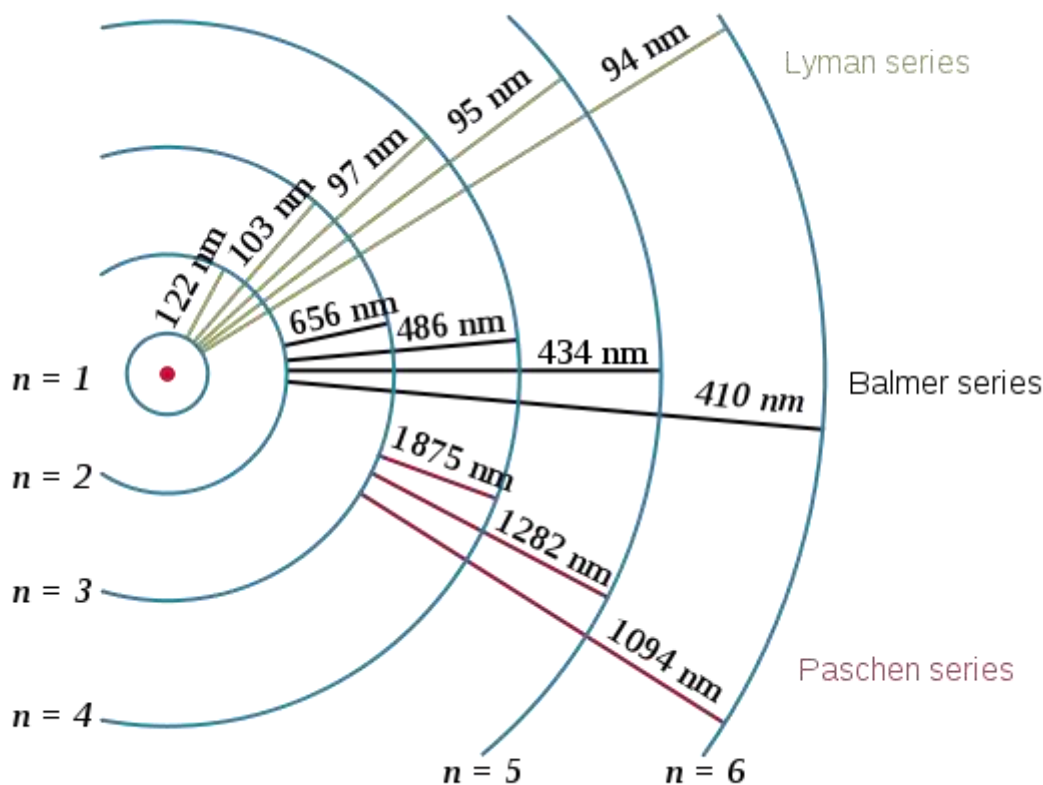


Рисунок 6 – Стационарные орбиты атома водорода и образование спектральных серий

водорода, но и предсказал существование пятой линии (при $n=7$) с длиной волны 397 нм, в ближней ультрафиолетовой области, которую наблюдал Ангстрем, и более дальних линий ряда, которые были обнаружены Г.Фогелем и У. Хаггинсом в спектрах белых звёзд.

В 1886 году К. Рунге предложил использовать в формуле Бальмера вместо длины волны λ её частоту $\nu = c/\lambda$:

$$\nu = \frac{c}{b} \left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

где c — скорость света; $k = 2$; $m = 3, 4, 5, 6$; $b = 3645,6 \text{ \AA}$.

В 1890 году Й. Ридберг предложил записывать формулу в том виде, который она сохранила до сих пор:

$$\nu = cR \left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

В 1908 году В. Ритц выразил частоту волны в виде разницы двух термов:

$$\nu = \frac{cR}{k^2} - \frac{cR}{m^2} = T_k - T_m$$

предложив метод, впоследствии названный его именем.

Так предложенная Бальмером формула, описывающая четыре линии видимого спектра излучения водорода, получила развитие до принципов, позволяющих описать спектр любого химического элемента.

Безрезультатные попытки объяснить физический смысл формулы Бальмера продолжались почти 28 лет. В начале 1913 года Нильс Бор работал над тем, чтобы устранить противоречия между классическими законами физики и предложенной Резерфордом планетарной моделью атома. Спектроскопист Ханс Хансен посоветовал Бору обратить внимание на спектральные формулы. Впоследствии Бор неоднократно говорил: «Как только я увидел формулу Бальмера, все немедленно прояснилось передо мной»/

Целые числа в формуле оказались разрешёнными орбитами, а спектральные линии – следствием квантовых переходов электронов с одной орбиты на другую.

АТОМ ВОДОРОДА ПО ТЕОРИИ БОРА.

Бор исходил из предположения, что электроны обращаются по круговым орбитам. Зоммерфельд дополнил теорию Бора введением эллиптических орбит. Современная физика отказалась от представления об электронных орбитах. Вместо орбит введено понятие об энергетических уровнях атома. При этом номера уровней совпадают с номерами боровских орбит. Однако в целях наглядности иногда пользуются термином «орбита». На основании одного из постулатов теории Бора каждой стационарной орбите электрона соответствует стационарное состояние атома с определенным значением энергии. Стационарные состояния характеризуются дискретными значениями моментов импульсов электронов, которые подчиняются постулату Бора

$$L = mvr = \hbar n = \frac{h}{2\pi} n \quad (1)$$

где $L=mvr$ - момент импульса электрона; m - масса электрона; v - тангенциальная скорость электрона; r - радиус орбиты электрона в атоме, h - постоянная Планка, $n = 1, 2, 3, \dots$ главное квантовое число.

Электрон, двигаясь по круговой орбите с центростремительным ускорением под действием кулоновской силы притяжения к ядру, подчиняется II закону Ньютона

$$m a_{ц} = F_{кл} \\ m \frac{v^2}{r} = k \frac{e^2}{r^2} \quad (2)$$

Комбинируя квантовый и классический законы можно получить выражение для радиуса орбиты электрона

$$r = \frac{h^2}{4\pi^2 k m e^2} n^2. \quad (3)$$

Полная энергия электрона с учетом (2)

$$W = W_k + W_p = \frac{mv^2}{2} - k \frac{e^2}{r} = -k \frac{e^2}{2r}. \quad (4)$$

Подставляя (5) в (6) получаем

$$W_n = -k^2 \frac{2\pi^2 me^4}{h^2} \cdot \frac{1}{n^2}. \quad (5)$$

Следуя идеям Планка о том, что всякая энергия излучается и поглощается отдельными порциями - квантами, величина которых пропорциональна частоте излучения, Бор связал излучение и поглощение атомом кванта энергии с переходом атома из одного стационарного состояния с энергией в другое - с энергией следующим соотношением

$$W_m - W_n = h\nu = h \frac{c}{\lambda} = E_\phi \quad (6)$$

Подставляя (5) в (6) получаем

$$h \frac{c}{\lambda} = k^2 \frac{2\pi^2 me^4}{h^2} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad (7)$$

или

$$\frac{1}{\lambda} = k^2 \frac{2\pi^2 me^4}{h^3 c} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad (8)$$

Сравнивая (8) и $\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$ получаем

$$R = \frac{2\pi^2 k^2 me^4}{h^3 c} = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c}. \quad (9)$$

где ε_0 - электрическая постоянная.

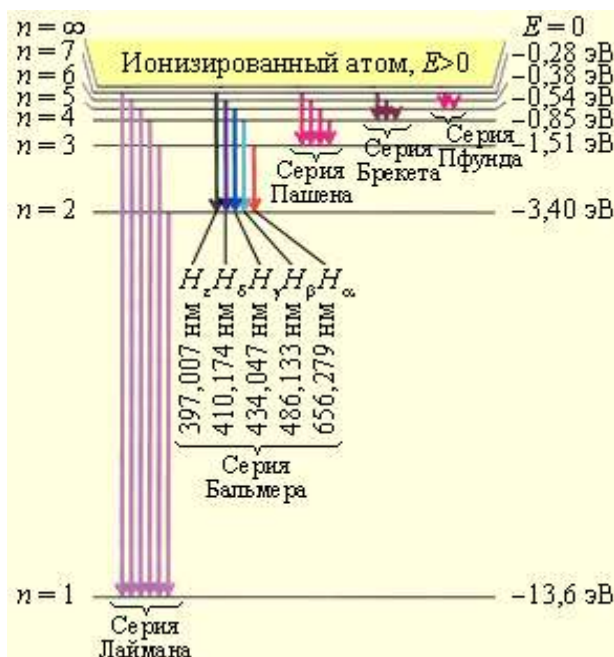


Рисунок 7 - Диаграмма энергетических уровней атома водорода. Показаны переходы, соответствующие различным спектральным сериям. Для первых пяти линий серии Бальмера в видимой части спектра указаны длины волн

При переходе электронов в атоме водорода на орбиту с наименьшей энергией ($n=1$) излучается серия линий, лежащих в ультрафиолетовой части спектра (серия Лаймана), при переходе на орбиту с $n=2$ излучаются линии серии Бальмера (линии этой серии лежат в видимой части спектра).

Задания к лабораторной работе и порядок действий при их выполнении

1. Ознакомьтесь с краткой теорией к лабораторной работе и схемой классической установки по наблюдению спектра испускания водорода. (Источником света является водородная трубка, возбуждение атомов, которой производится с помощью газового разряда, возникающего при высоких напряжениях).

атомов, которой производится с помощью газового разряда, возникающего при высоких напряжениях).

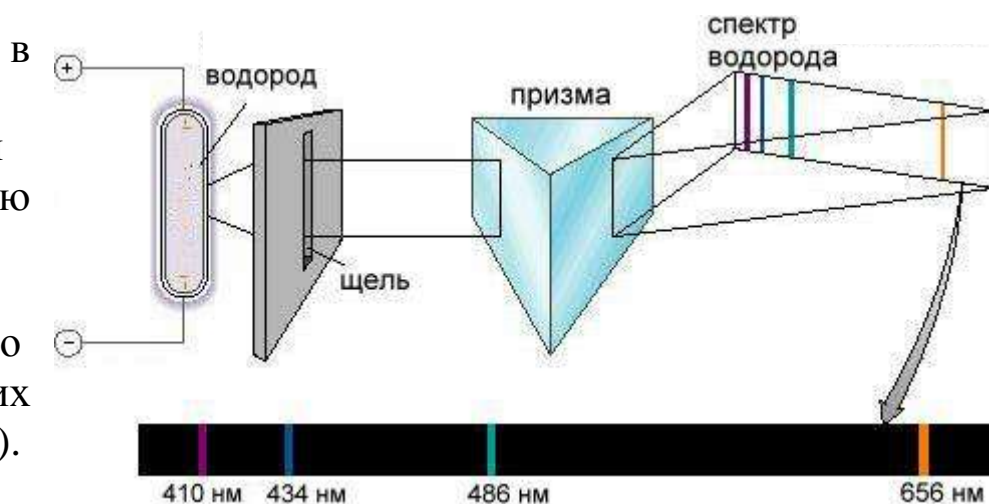


Рисунок 8 – Схема установки

2. Познакомьтесь со спектром излучения атомов водорода на фоне сплошного спектра в видимой области (рис.3).

(В спектре водородной трубки наряду с линиями атомного спектра наблюдается спектр молекулярного водорода. Поэтому начинать поиск линий нужно с наиболее интенсивной красной линии H_{α} . Вторая линия H_{β} - зеленовато-голубая. В промежутке между H_{α} и H_{β} располагается несколько красно-желтых и зеленых сравнительно слабых молекулярных полос. Третья линия H_{γ} - фиолетово-синяя. Перед этой линией располагаются две слабые размазанные молекулярные полосы синего цвета. Четвертая линия H_{δ} - фиолетовая. Ее удастся обнаружить в излучении лишь некоторых экземпляров водородных трубок)

3. Составьте таблицу и по имеющимся данным из рисунков 4, 5, 7 и таблицы 1 запишите длины волн спектральных линий водорода:

	линии спектра (цвет)	m	обозначение	длина волны, нм	постоянная Ридберга, 1/м
1	красная	3	H_{α}		
2	зеленовато-голубая	4	H_{β}		
3	фиолетово-синяя	5	H_{γ}		
4	фиолетовая	6	H_{δ}		

4. Используя формулу $\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{m^2}\right)$ вычислить для каждой линии спектра атомарного водорода постоянную Ридберга. Значения занести в таблицу (Расчеты приложить к отчету)
5. Вычислить среднее из этих значений и взять как окончательный результат. $R_{\text{сред}} =$
6. Оценить абсолютную и относительную погрешности измерения ΔR и δR .
7. Исходя из формулы $R = \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c}$ и значений табличных констант, рассчитать постоянную Планка

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

1. Какие спектры дают разреженные газы, состоящие из отдельных атомов?
2. Какие спектры дают при невысоком давлении газы, состоящие из молекул?
3. Какие спектры называются сплошными?
4. Каковы способы подведения энергии к атомам (молекулам) газа для наблюдения их спектров испускания?
5. Сформулируйте постулаты теории Бора.
6. Найдите радиусы первых трех боровских электронных орбит в атоме водорода.
7. Найдите значение кинетической, потенциальной и полной энергии электрона на первой и третьей орбитах в атоме водорода. Какой длине волны будет соответствовать спектральная линия, соответствующая переходу электрона с третьей орбиты на первую?
8. Какую наименьшую энергию должны иметь электроны, чтобы при возбуждении атомов водорода ударами этих электронов возникали линии всех серий водорода?
9. Найдите наименьшую и наибольшую длину волны спектральных линий водорода в видимой области спектра.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ранзер Ю.П. Физика газового разряда: Учебное руководство: Для вузов – М.: Наука, 1992. – 536 с.
2. Савельев И.В. Курс физики: Учеб.: В 3-х т. Т. 3: Квантовая оптика. Атомная физика. Физика твердого тела. Физика атомного

ядра и элементарных частиц.— М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1989. — 304 с.

3. <https://ru.wikipedia.org/wiki/Водород>

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 2.

Проверка квантовомеханического принципа суперпозиции методом компьютерного моделирования

Цель работы: Проверить, что сумма квадратов амплитуд отдельных состояний не дает наблюдаемой при прохождении волны через две щели дифракционной картины, моделируя распространение волн на компьютере.

Приборы и принадлежности: компьютер, доступ в Интернет.

КРАТКАЯ ТЕОРИЯ

Принцип суперпозиции в квантовой механике: если система может находиться в состоянии, описываемом волновой функцией Ψ_A или в состоянии, описываемом волновой функцией Ψ_B , то она может находиться и в состоянии, описываемом волновой функцией

$$\Psi_{AB} = a\Psi_A + b\Psi_B$$

(даже если состояния Ψ_A и Ψ_B взаимоисключают друг друга с классической точки зрения).

В этой формуле a , b - постоянные коэффициенты, зависящие от условий задачи (определяемые при решении уравнения Шредингера).

!Квантовомеханический принцип суперпозиции не имеет ничего общего с принципом суперпозиции, применяемом для описания физических полей (например, электростатического поля), который утверждает, что поле от нескольких источников есть сумма полей, создаваемых каждым источником по отдельности.

Отличительные особенности квантовомеханического принципа суперпозиции.

1. Пусть Ψ_A и Ψ_B – два возможных состояния системы, и пусть в первом из них некоторая физическая величина F имеет точное значение A , а во втором – точное значение B . С точки зрения классического принципа суперпозиции в состоянии $\Psi_{AB} = a\Psi_A + b\Psi_B$ величина F должна выражаться как через A , так и через B . В действительности же процесс измерения величины F в этом состоянии даёт либо A , либо B . При этом вероятности получения этих значений равны, соответственно, $|a|^2$ и $|b|^2$.

2. Наконец, сложение двух и более одинаковых квантово-механических состояний, в отличие от классических представлений, не приводит к новому квантовомеханическому состоянию, так как зависимости от координат и времени функций Ψ и $(a+b+c+\dots)\Psi$ совершенно одинаковы.

Принцип суперпозиции возникает из необходимости объяснения экспериментально наблюдаемых интерференционных явлений (дифракции), характерных для микрочастиц.

Опыт Юнга

Например, рассмотрим опыт с электронами аналогичный опыту Юнга со светом (фотонами), ставший экспериментальным доказательством волновой теории света в 1803 году.

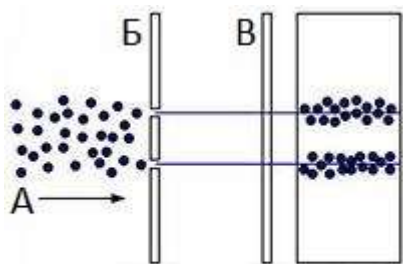


Рисунок 1 – Схема установки и картина почернения получающаяся при поочередном открывании щелей

Направим на преграду с двумя узкими щелями параллельный пучок монохроматических (т. е. обладающих одинаковой кинетической энергией) электронов (рис. 1). За преградой поставим фотопластинку. Вначале закроем одну щель и произведем экспонирование в течение некоторого времени. На фотопластинке почернеет полоса, расположенная напротив открытой щели. Закроем эту щель и откроем первоначально закрытую. Опять проведем экспонирование в течение того же времени. На фотопластинке появится вторая полоса, напротив другой открытой щели. Аналогично, следует ожидать, что

экспонирование при двух открытых щелях даст две черные размытые полосы напротив открытых щелей.

Наконец, откроем обе щели и подвергнем экспонированию в течение того же времени вторую пластинку. Картина почернения, получающаяся в последнем случае, изображена на рис. 2. Эта картина отнюдь не эквивалентна наложению первых двух картин. Она оказывается аналогичной картине, получающейся при интерференции двух когерентных световых волн. Характер картины свидетельствует о том, что на движение каждого электрона оказывают влияние оба отверстия.

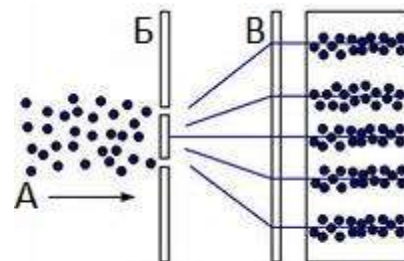


Рисунок 2 – Схема установки и картина почернения получающаяся при одновременно открытых щелях

Учёные, озадаченные изображением интерференции на экране, решили установить специальные датчики, чтобы зафиксировать через какую из прорезей прошла частица, или прошла каким-то образом сразу через две. И тут произошел интересный поворот в этом опыте. После того как за прорезями в перегородке установили наблюдение, проекционный экран фиксировал 2 обычные полосы, то что и ожидалось в самом начале. Но как только наблюдение за прорезями прекращалось, на экране вновь появлялось изображение волновой интерференции. Из этого можно сделать вывод, что сам факт наблюдения за частицами меняет их поведение; когда за ними не наблюдают, они ведут себя как волны, а когда наблюдают, как отдельные ожидаемые нами частицы (рис.1).

Позже этот опыт был проведён по-другому, и наблюдение установили перед проекционным экраном, то есть когда частица уже прошла через перегородку. Тут можно было ожидать что частица, каким-то образом пройдя через 2 отверстия одновременно, будет зафиксирована непосредственно перед попаданием на экран, но в момент, когда датчики фиксации включались, частицы вновь начинали вести себя как обычно, будто прошли через какую-то одну прорезь (рис.1). Здесь, в этом опыте создаётся

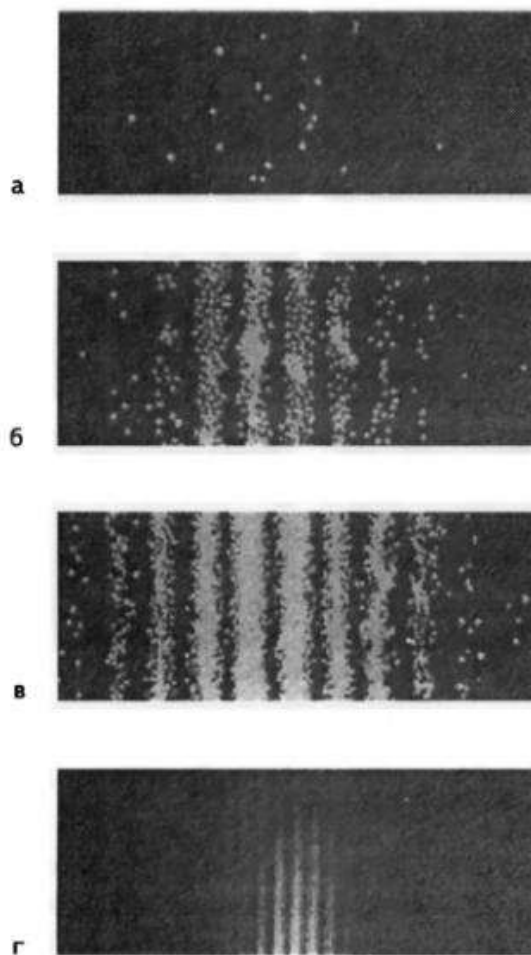


Рисунок 3 – Возникновение интерференционной картины в опыте с двумя щелями. На фотографии (г) показана реальная картина интерференции электронов в опыте с двумя щелями, в результате которого на пленке зарегистрированы миллионы электронов. Эта интерференционная картина совпадает с картиной интерференции фотонов. Если бы пленку рассматривали в различные моменты времени, например, после того, как на нее попали 28 электронов, затем 1000 электронов, а потом 10000 электронов, то соответствующие распределения засвеченных зерен фотоэмульсии выглядели бы примерно так, как это показано на рисунках (а), (б) и (в), с той лишь разницей, что засвеченные зерна имели бы меньший размер, чем показанные здесь белые точки. Обратите внимание на то, что в области интерференционных минимумов вообще нет точек. Вероятность засвечивания любого участка пленки определяется волновой теорией независимо от того, засвечивается ли она электронами или фотонами. [Рис. (а), (б), (в) — из *E.R.Huggins, Physics 1, W.A.Benjamin Inc.*. Рис. (г) — С. Jonsson.

впечатление, что отдельная частица (тот же фотон), в момент попытки фиксации, как бы вернулась немного назад во времени и прошла через прорезь обычным способом, а не как при интерференции.

Оказалось так же, что дифракция частиц не является следствием взаимодействия нескольких частиц, **волновые свойства проявляют даже отдельные частицы** (рис. 3)- опыт Фабриканта (дифракция единичных фотонов и электронов) в 1949 г.

Объяснение

Объясним этот опыт исходя из **квантовомеханического принципа суперпозиции**: если частица попадает на преграду с двумя отверстиями, она может пройти либо через отверстие А (состояние Ψ_A и) или отверстие В (состояние Ψ_B). С классической точки зрения это взаимоисключающие состояния. Каждое из этих состояний дало бы на экране за преградой только размытое пятно от каждого отверстия, т.к. на экран падала бы либо волна Ψ_A , либо Ψ_B :

$$\rho_A(x) = |\Psi_A|^2 \text{ (плотность попаданий частиц от щели А)}$$

$$\rho_B(x) = |\Psi_B|^2 \text{ (плотность попаданий частиц от щели В)}$$

$$\text{Суммарная плотность была бы: } \rho_{AB}(x) = |\Psi_A|^2 + |\Psi_B|^2 = \rho_A + \rho_B$$

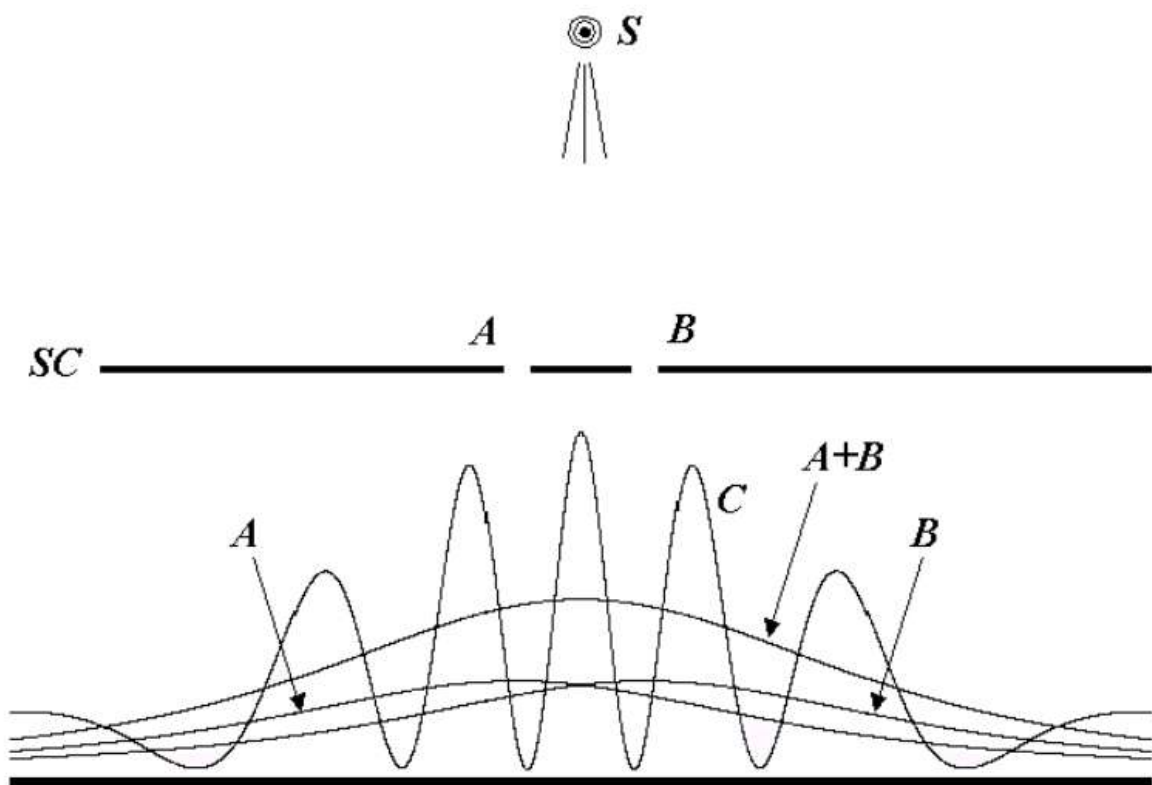


Рисунок 4 – Двухщелевой эксперимент Юнга.

Однако многочисленные эксперименты показывают, что на самом деле на экране наблюдается не сумма двух пятен от двух щелей, а более сложная

картина – система дифракционных минимумов и максимумов, которые можно объяснить только если на экран падает волна $\Psi = \Psi_A \pm \Psi_B$

$$\rho_{A+B} = |\Psi_A \pm \Psi_B|^2 = |\Psi_A|^2 + |\Psi_B|^2 \pm 2|\Psi_A \Psi_B| \neq \rho_A + \rho_B$$

Многочисленные эксперименты показывают, что при возникновении альтернатив в системе, складываются не вероятности состояний, а их волновые функции, откуда и вытекает необходимость принципа суперпозиции.

Принцип суперпозиции имеет чрезвычайно важное значение, поскольку он приводит к большому числу эффектов, характерных только для квантовых систем. Например, ковалентная химическая связь возникает за счет притяжения ядер к электронной плотности между ядрами, усиленной за счет интерференционного эффекта, т.е. за счет суперпозиции состояний электронов на атомах А и В.

Задания к лабораторной работе и порядок действий при их выполнении

1. 1) Волны прошедшие через две щели образуют дифракционную картину, только если складываются их амплитуды, т.е. амплитуды обоих состояний.

2) Сумма квадратов амплитуд отдельных состояний не дает наблюдаемой картины. Ознакомьтесь со схемой опыта Юнга.

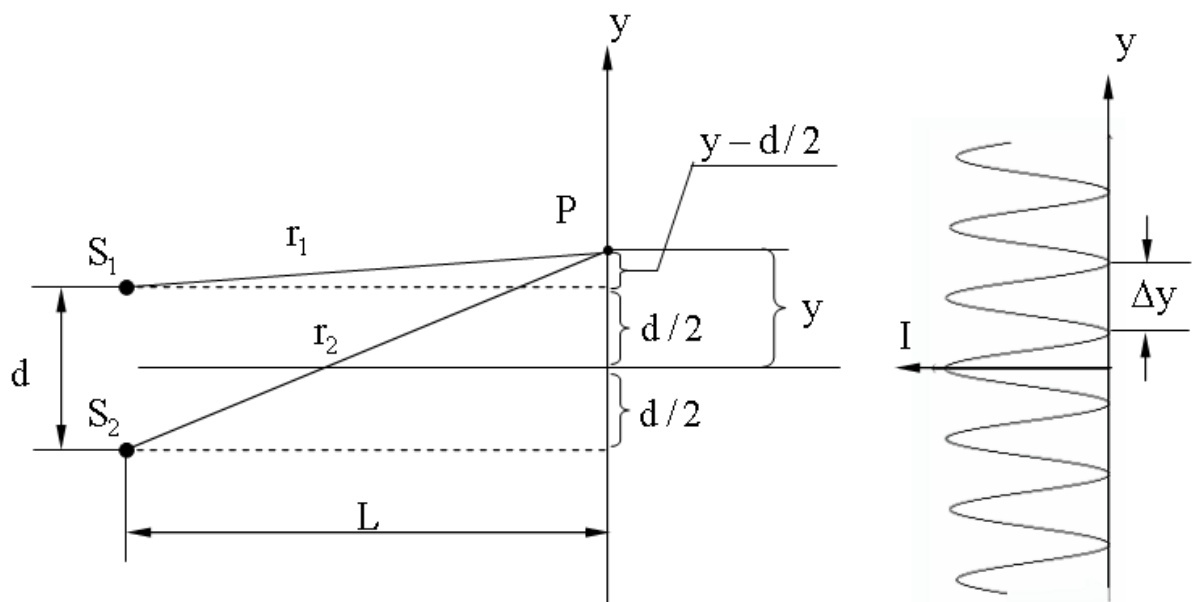


Рисунок 5 – Схема, поясняющая используемые в моделировании геометрические параметры

Проверим это, моделируя распространение волн на компьютере (расчет с помощью системы аналитических

вычислений Mathematica 5.0 для Windows, более новую trial версию можно скачать на сайте www.wolfram.com).

2. Для проверки того, что интенсивность на экране при сложении волн не зависит от времени воспользуемся нижеприведенной программой на языке Mathematica. Ее можно скопировать в окно системы Mathematica и построить график, нажав Shift+Enter. Знаки (* и *) выделяют комментарии, которые нужно опустить.

(* Два точечных источника (щели) создают картину на экране. *)

(* Рассчитаем интенсивность от щелей на экране *)

(* если складываются амплитуды (ВФ) или их квадраты *)

(* Дано: *)

$L = 4000$ (* Расстояние от щелей до экрана *)

$d = 20$ (* Расстояние между щелями *)

$\lambda = 1$ (* Длина волны *)

$V = 100$ (* Скорость волны *)

(* Расчеты: *)

$\nu = V/\lambda$ (* Частота волны *)

$\omega = 2\pi\nu$ (* Циклическая частота *)

$k = 2\pi/\lambda$ (* Волновое число *)

$r_1 = \text{Sqrt}[L^2 + (y - d/2)^2]$ (* Расстояние от щели 1 до точки y на экране *)

$r_2 = \text{Sqrt}[L^2 + (y + d/2)^2]$ (* Расстояние от щели 2 до точки y на экране *)

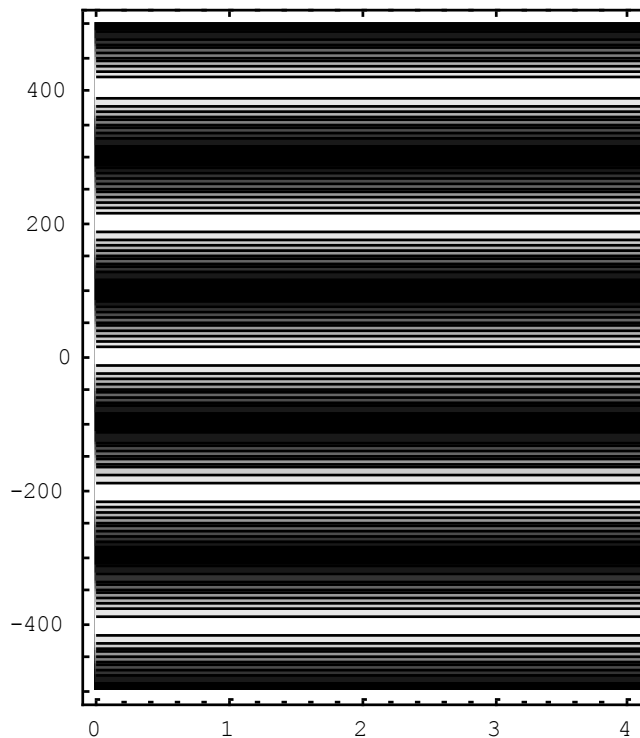
$Y_1 = \text{Exp}[-I*(\omega*t - k*r_1)]/\text{Sqrt}[r_1]$ (* Волновая функция 1 (цилиндрическая волна) *)

$Y_2 = \text{Exp}[-I*(\omega*t - k*r_2)]/\text{Sqrt}[r_2]$ (* Волновая функция 2 (цилиндрическая волна) *)

(* Интенсивность на экране (плотность попадания частиц) определяется как квадрат модуля ВФ: $\text{Abs}[Y]^2$ *)

(* Проверим, что интенсивность на экране при сложении волн не зависит от времени: *)

`ContourPlot[Abs[Y1 + Y2]^2, {t, 0, 5}, {y, -500, 500}]`



(* На графике по горизонтали – время, по вертикали – координата на экране. Цвет – значение интенсивности. *)

(* Видно, что с течением времени интенсивность не меняется. *)

(* Значит, далее можно рассматривать интенсивность в любой момент времени, например $t=0$ *)

3. Интенсивность на экране при сложении волновых функций по принципу суперпозиции $|Y1+Y2|^2$

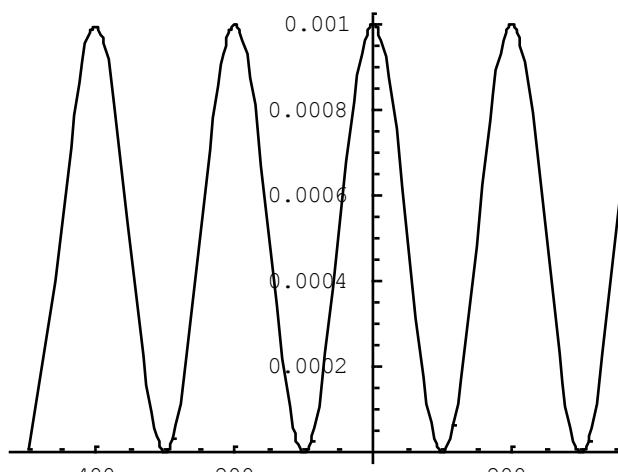
Для доказательства квантовомеханического принципа суперпозиции создайте еще один файл, скопируйте текст программы, в блоке определения численных значений введите строку $t=0$, а вместо строки

```
ContourPlot[Abs[Y1 + Y2]^2, {t, 0, 5}, {y, -500, 500}]
```

введите

```
Plot[Abs[Y1 + Y2]^2, {y, -500, 500}]
```

Для построения графика нажмите **Shift+Enter**.



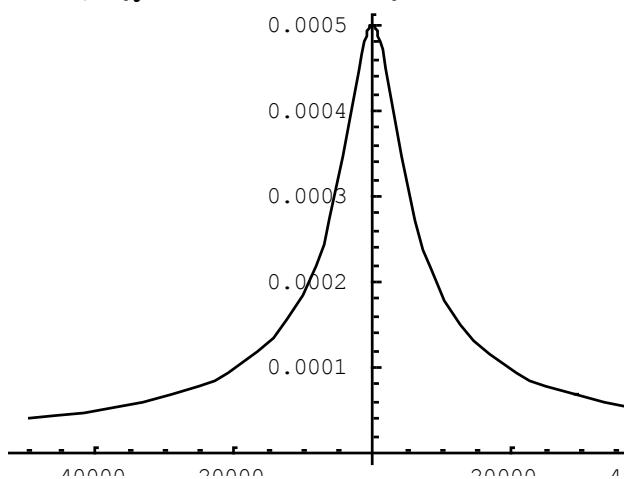
(* Интенсивность на экране при сложении волновых функций по принципу суперпозиции $|Y1+Y2|^2$ *)

(* Совпадает с экспериментом – максимумы и минимумы ☺*)

3. **Интенсивность на экране при сложении квадратов амплитуд $|Y1|^2+|Y2|^2$**

Введите еще одну строку

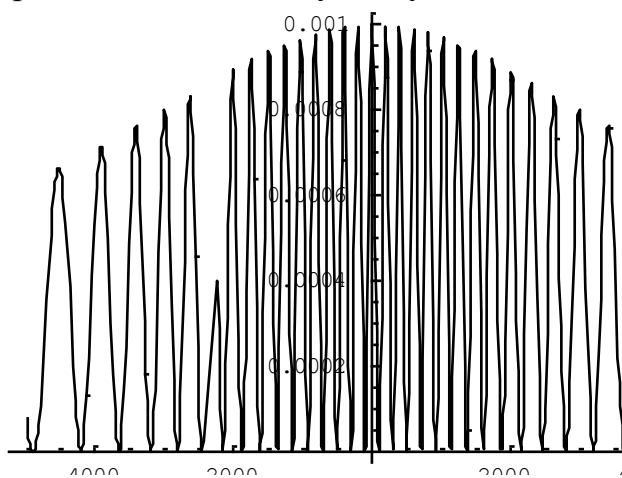
```
Plot[(Abs[Y1]^2 + Abs[Y2]^2), {y, -50000, 50000}]
```



(* Два слившихся пятна - не совпадает с экспериментом ☹*)

(* Таким образом, с экспериментом совпадает только процесс, в котором учитывается принцип суперпозиции *)

4. В пункте 3 замените пределы изменения y на $\{y, -50000, 50000\}$, получите



КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

1. В чем состоит принцип суперпозиции в квантовой механике?
2. Может ли волновая функция подчиняться нелинейному уравнению?
3. Что такое волновая функция в импульсном представлении?
4. Как получить волновую функцию в импульсном представлении, зная эту функцию в координатном представлении?
5. Как найти среднее значение физической величины в состоянии ?

6. Каков физический смысл собственных значений оператора физической величины?
7. Какова связь между собственным значением оператора физической величины и средним значением этой величины?
8. Что называется спектром оператора?
9. Чем отличается принцип суперпозиции в квантовой механике от принципа суперпозиции в классической физике, например, для электростатических полей?

ИНФОРМАЦИОННЫЕ ИСТОЧНИКИ

1. <http://andreyv.github.io/wxmaxima/>
2. Савельев И.В. Курс физики: Учеб.: В 3-х т. Т. 3: Квантовая оптика. Атомная физика. Физика твердого тела. Физика атомного ядра и элементарных частиц.— М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1989. — 304 с.

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 3.

КВАНТОВЫЙ ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР

В классической физике гармоническим осциллятором называют частицу, на которую действует сила, пропорциональная отклонению частицы от положения равновесия и направленная к нему. В положении равновесия потенциальная энергия минимальна ($U(x=0) = 0$). В квантовой механике понятие силы не используется.

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

$$U = \frac{kx^2}{2}, \quad (1)$$

где k - коэффициент упругости. Следовательно, в квантовой механике задачу об осцилляторе можно свести к проблеме частицы, движущейся в параболической потенциальной яме (смотри рисунок 1). В таком подходе уравнение Шрёдингера для стационарных состояний одномерного осциллятора имеет вид:

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

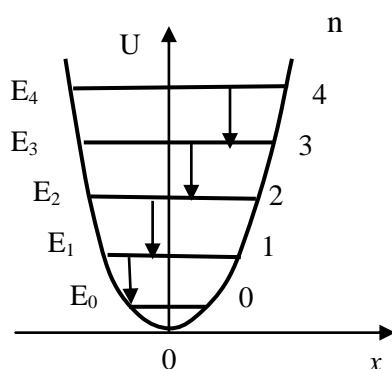


Рисунок 1 - Потенциальная яма для гармонического осциллятора

Введем новые переменные

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}; \quad \xi = x\sqrt{\frac{k}{\hbar\omega}} \quad (3)$$

и преобразуем (2):

$$\frac{d^2\Psi}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2)\Psi = 0. \quad (4)$$

При условии $\xi^2 \gg \lambda$ асимптотическое решение уравнения (4) имеет вид

$$\Psi_{ac} = e^{\pm\xi^2/2}, \quad (5)$$

Решение со знаком (+) следует отбросить как противоречащее требованию конечности волновой функции. Волновую функцию Ψ будем искать в виде

$$\Psi = \Psi_{ac} \cdot \nu(x) = e^{-\xi^2/2} \cdot \nu(x), \quad (6)$$

а функцию $\nu(x)$ представим в виде ряда:

$$\nu(x) = a_0 + a_1 \cdot \xi + a_2 \cdot \xi^2 + \dots + a_k \cdot \xi^k + \dots \quad (7)$$

С использованием выражений (6) и (7) уравнение (4) приобретает вид:

$$\sum_{k=2}^{\infty} k(k-2)a_k \xi^{k-2} - 2\xi \sum_{k=1}^{\infty} k a_k \xi^{k-1} + (\lambda - 1) \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k = 0. \quad (8)$$

Приравнявая нулю сумму коэффициентов при одинаковых степенях ξ в последнем уравнении, получаем следующие рекуррентные соотношения:

$$a_{k+2} = a_k (2k - \lambda + 1) / [(k+2)(k+1)]. \quad (9)$$

При $k \rightarrow \infty$ получаем $a_{k+2} / a_k \approx 2/k$.

Это означает, что функция (7), представляемая бесконечным рядом, растёт как e^{ξ^2} . Тогда функция (6) при $\xi \rightarrow \infty (x \rightarrow \infty)$ стремится к бесконечности. Для того, чтобы волновая функция оставалась во всем пространстве конечной, необходимо оборвать ряд (7) на n -ом члене, то есть потребовать, чтобы при $a_n \neq 0$ выполнялось условие $a_{n+2} = 0$. Тогда из (9), приравнявая его правую часть к нулю, получим

$$\lambda_n = 2n + 1. \quad (10)$$

Условие (10) с учетом (3) позволяет получить выражение для собственных значений энергии:

$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2), \quad (11)$$

где $n=0,1,2,\dots$

Из (11) следует, что спектр энергий гармонического осциллятора дискретен (т.е. энергия квантована) и энергетические уровни эквидистантны (смотри рисунок 1). Кроме того, из выражения для энергии следует, что при $n=0$ осциллятор имеет минимальную (нулевую) энергию $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \neq 0$, то есть осциллятор не может достичь дна ямы. Величина E_0 - наименьшее значение энергии, совместимое с соотношением неопределенностей.

Волновая функция Ψ_n , принадлежащая собственному значению энергии E_n , выражается формулой:

$$\Psi = C_n \cdot P_n(\xi) \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right), \quad (12)$$

где $P_n(\xi)$ - полином Эрмита n -й степени, C_n - нормировочные коэффициенты.

Примером частиц, совершающих малые колебания, могут служить атомы и молекулы в твердом теле. Экспериментально удастся доказать наличие нулевой энергии и нулевых колебаний атомов путем наблюдения рассеяния света кристаллами. Рассеяние света обусловлено колебаниями атомов. По мере уменьшения температуры амплитуда колебаний, согласно классической теории, должна неограниченно уменьшаться, а вместе с тем должно исчезать и рассеяние света. Между тем опыт показывает, что интенсивность рассеянного света по мере уменьшения температуры стремится к некоторому предельному значению, указывающему на то, что и при температуре абсолютного нуля колебания атома не прекращаются. Этот факт подтверждает наличие нулевых колебаний атомных систем.

Классический осциллятор колеблется с циклической частотой $\omega = \sqrt{k/m}$, где m - масса частицы, и излучает свет лишь с одной частотой ω . Казалось бы, что в соответствии с правилом частот Бора в квантовом случае вследствие эквидистантности энергетических уровней возможно излучение со всевозможными кратными частотами $N\omega$ (N - целое число). В действительности

этого не происходит. Возможность кратных частот исключается *правилами отбора* по *колебательному квантовому числу n* . Разрешенными являются лишь квантовые переходы, в которых это квантовое число изменяется на единицу (смотри рисунок 1):

$$\Delta n = \pm 1. \quad (13)$$

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

Моделирование волновых функций в среде wxMaxima

Порядок выполнения работы

1. Записать общий вид волновых функций одномерного квантового осциллятора.
2. Вычислить нормировочный множитель для полиномов Эрмита-Чебышева и для волновой функции в « x » представлении.
3. Выписать явный вид волновых функций для трех первых значений главного квантового числа и построить графики этих функций с использованием программы wxMaxima.
4. Выполнить расчет вероятности найти частицу в области $x, x + dx$ для *классического* осциллятора.
5. Построить графики плотности вероятности для квантового и классического осцилляторов для значений квантового числа от 0 до 5.
6. Найти средние значения координаты и импульса частицы квантового осциллятора.
7. Найти вероятность обнаружения частицы квантового осциллятора, находящегося в основном состоянии, вне пределов классической области.

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ:

1. Какие свойства квантовой частицы являются общими для прямоугольной потенциальной ямы и для параболической, а какие различными?
2. Каково принципиальное отличие минимальной энергии квантового осциллятора от минимальной энергии классического осциллятора?
3. Чем существенно отличаются плотности вероятности квантового и классического осциллятора?

СПИСОК РЕКОМЕНДУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики. – М.: Высшая школа, 1961.
2. Бом Д. Квантовая теория. – М.: Физматгиз, 1961.
3. Борн М., Вольф Э. Основы оптики. – М.: Наука, 1973.
4. Боум А. Квантовая механика. – М.: Мир, 1990.
5. Давыдов А.С. Квантовая механика. – М.: Физматгиз, 1968.
6. Дирак П.А.М. Принципы квантовой механики. – М.: Наука, 1980.
7. Ландау Л.Д. Лифшиц Е.М. Квантовая механика. – М.: Наука, 1978.
8. Матвеев А.Н. Атомная физика. – М.: Высшая школа, 1989.
9. Мессиа А. Квантовая механика. Т.1,2.-М.: Наука, 1978.
10. Савельев Н.В. Основы теоретической физики. Т.2. Квантовая механика. – М.: Наука, 1977.
11. Сивухин Д.В. Общий курс физики. Т.5. Атомная физика. – М.: Наука, 1986.
12. Фок В.А. Начала квантовой механики. – М.: Наука, 1976.
13. Шпольский Э.В. Атомная физика. Т.1,2.-М.: Наука, 1974.
14. Гармонический осциллятор в квантовой механике: лабораторная работа компьютерного моделирования /сост. А.П. Мелехов, Ряз. гос. ун-т им. С.А. Есенина. – Рязань, 2008. – 16 с.

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 4.

РАСЩЕПЛЕНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ ЛИНИЙ ЭЛЕКТРОНОВ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ И ПОДТВЕРЖДЕНИЕ РАЗНИЦЫ НАСЕЛЕННОСТЕЙ ПОДУРОВНЕЙ ПОСРЕДСТВОМ ЭПР

Цель работы: демонстрация электронного парамагнитного резонанса в дифенилпикрилгидразиле (ДФПГ).

Приборы и принадлежности: базовый блок, пара магнитных катушек, пульт управления, вилка электропитания, сравнительный образец, ДФПГ образец, ЭПР датчик, сборочные кольца, сборочный цилиндр, аналоговый осциллограф (20-150 МГц).

КРАТКАЯ ТЕОРИЯ

В магнитном поле происходит расщепление вырожденных уровней энергии атомов на невырожденные подуровни вследствие того, что магнитные моменты атомов могут ориентироваться по отношению к магнитному полю разными способами. Это приводит, во-первых, к магнитному расщеплению спектральных линий, соответствующих переходам между различными уровнями энергии и, во-вторых, к появлению вынужденных излучательных переходов между подуровнями данного уровня энергии.

Явление расщепления спектральных линий и уровней энергии в магнитном поле называют *явлением Зеемана*.

Вынужденные переходы между зеемановскими подуровнями данного уровня энергии называют магнитным резонансом. Эти переходы происходят под действием электромагнитного излучения боровской частоты $\nu = (E_n - E_m) / h$, т.е. при наличии резонанса. Частоты данных переходов лежат в радиочастотной области спектра и изучаются радиоспектроскопическими методами.

Впервые магнитный резонанс наблюдали в 1938 г. Раби и его сотрудники в молекулярных пучках. Сначала были обнаружены резонансные переходы, обусловленные ядерными магнитными моментами протона и дейтрона, а затем (в 1940г.) резонансные переходы, обусловленные электронными магнитными моментами атомов.

Наблюдение магнитного резонанса в молекулярных пучках является очень сложным по своей экспериментальной технике. Поэтому исследования этого явления стали широко развиваться

лишь после открытия Е. Завойским (1944 г., г. Казань) электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) – поглощения микроволнового излучения веществом за счёт переходов между зеемановскими подуровнями, связанными с электронными магнитными моментами частиц вещества (определяющими парамагнитные свойства вещества, откуда и название "парамагнитный резонанс").

В 1945 г. американские исследователи (Парселл и другие) открыли ядерный парамагнитный резонанс (ЯМР) – поглощение веществом излучения в области коротких радиоволн, обусловленное ядерными магнитными моментами.

Расщепление уровня энергии частицы с электронным магнитным моментом

Как отмечалось, частица с магнитным моментом $\vec{\mu}$ приобретает в магнитном поле дополнительную энергию $E_{\text{маг}}$. Если ось Z выбрать в направлении вектора \vec{B} , то:

$$E_{\text{маг}} = -\mu_z B. \quad (1)$$

Так как проекция магнитного момента квантуется, то и энергия $E_{\text{маг}}$ приобретает ряд дискретных значений, которые добавляются к энергии E невозмущённой частицы. Таким образом, происходит расщепление энергетического уровня E на ряд подуровней $E + E_{\text{маг}}$.

Пусть частица (атом или молекула) обладает лишь электронным магнитным моментом. Тогда её дополнительная энергия окажется равной

$$E_{\text{маг}} = g\mu_B B m_J, \quad (2)$$

причём магнитное квантовое число m_J принимает определенные значения. Следовательно, происходит расщепление уровня E на $2J + 1$ эквидистантных подуровней энергии. Пример такого расщепления приведён на рис. 1 для случая атома с квантовым числом полного момента $J = 3/2$.

Спонтанные излучательные переходы между магнитными подуровнями энергии маловероятны из-за ограничений, связанных с законом сохранения чётности. Однако могут происходить вынужденные переходы между соседними подуровнями под

действием внешнего электромагнитного поля, если частота этого поля удовлетворяет правилу частот Бора

$$\hbar\omega = g\mu_B B |\Delta m_J|$$

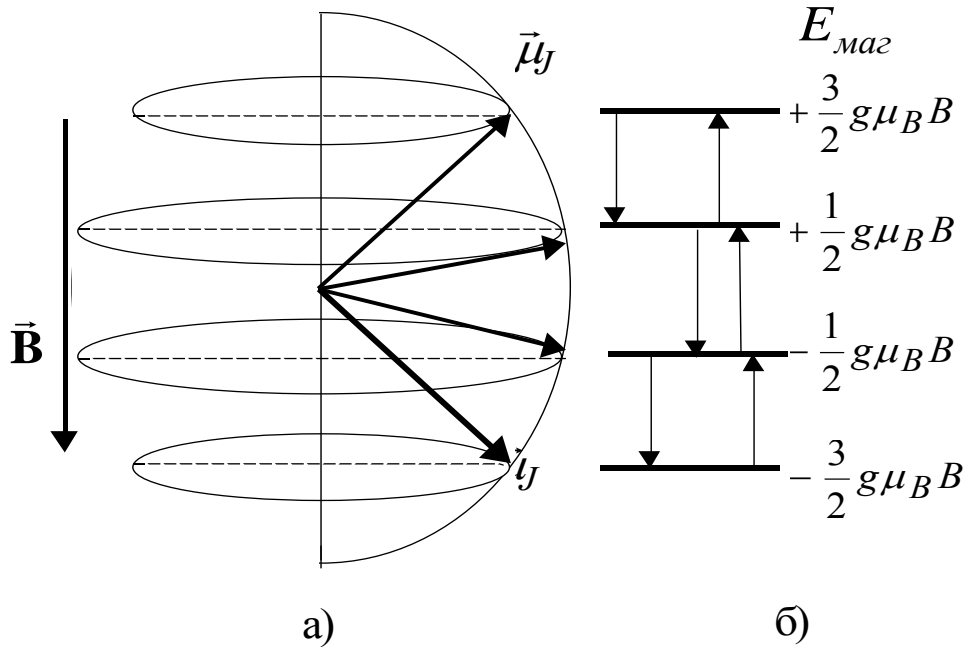


Рисунок 1

Каждому подуровню энергии соответствует определенная ориентация магнитного момента $\vec{\mu}_J$ по отношению к вектору магнитной индукции \vec{B} . При этом вектор $\vec{\mu}_J$ совершает прецессию, описывая коническую поверхность, ось которой совпадает с направлением \vec{B} . Поскольку набор углов между векторами $\vec{\mu}$ и \vec{B} составляет дискретный ряд из $2J+1$ значений, то об этом говорят как о пространственном квантовании.

Поскольку для соседних подуровней $|\Delta m_J|=1$, условие вынужденного перехода приобретает вид

$$\omega_{\text{ЭПР}} = g \frac{\mu_B}{\hbar} B, \quad (3)$$

которое и определяет циклическую частоту электронного парамагнитного резонанса (ЭПР). При этом следует иметь в виду, что с равной вероятностью реализуются обе разновидности вынужденных переходов, соответствующие как испусканию, так и

поглощению фотона. Излучательные переходы между более далёкими уровнями не происходят: они запрещены правилом отбора по магнитному квантовому числу.

Частота ЭПР, выражающаяся в герцах, может быть легко получена из формулы (3)

$$\nu_{\text{ЭПР}} = g \frac{\mu_B}{h} B \quad (4)$$

Нетрудно убедиться, что при типичном значении магнитной индукции $B = 0,1 \text{ Тл}$ частота ЭПР имеет порядок 10^4 МГц , что соответствует длине волны $\lambda = 3 \text{ см}$. В этом диапазоне работает большинство ЭПР-спектрометров. При магнитной индукции около 1 Гс (10^{-4} Тл) частота ЭПР имеет порядок 10 МГц .

Классическая модель гироскопа применительно к ЭПР

Для более детального описания магнитного резонанса можно воспользоваться классической моделью гироскопа. В постоянном магнитном поле момент импульса частицы, обладающей магнитным моментом, совершает прецессию, аналогичную прецессии волчка под действием силы тяжести.

Эта прецессия возникает в результате появления "опрокидывающего" момента силы

$$|\vec{N}| = \mu_J B \sin \theta \quad (5)$$

и состоит в том, что вектор магнитного момента $\vec{\mu}_J$, а также связанный с ним вектор момента импульса \vec{J} описывают коническую поверхность, ось которой направлена вдоль вектора магнитной индукции \vec{B} , причём угол θ между осью и вектором \vec{J} остаётся неизменным (Рис.7.2). Угловая скорость ω_{np} этого движения и является частотой прецессии.

Частоту прецессии легко найти. За малый промежуток времени Δt вектор момента импульса \vec{J} повернётся на угол $\omega_{np} \cdot \Delta t$, а его изменение окажется равным (см. Рис.7.2) $|\Delta \vec{J}| = (J \sin \theta) \omega_{np} \cdot \Delta t$. Отсюда для скорости изменения момента импульса получаем

$$\frac{|\Delta \vec{J}|}{\Delta t} = \omega_{np} J \sin \theta$$

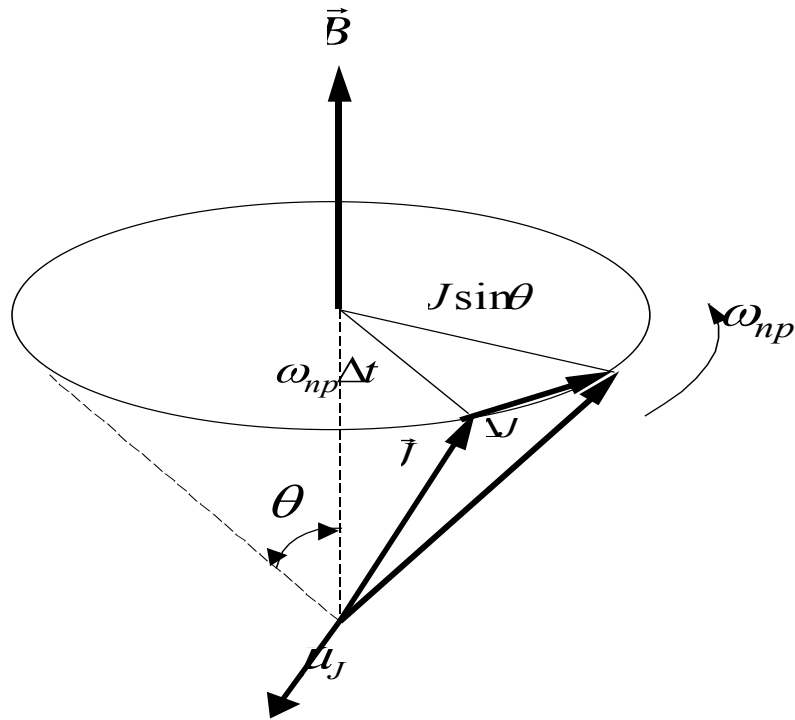


Рисунок 2

что в соответствии с законами динамики для вращательного движения должно равняться моменту силы (5). Следовательно, циклическая частота прецессии равна

$$\omega_{np} = \frac{\mu_J}{J} B = g \frac{\mu_B}{\hbar} B \quad (6)$$

Подвергнем теперь прецессирующий магнитный момент действию слабого циркулярно поляризованного переменного электромагнитного поля, магнитный вектор которого \vec{B}_v вращается в плоскости, перпендикулярной оси прецессии (Рис. 3).

Такое переменное поле \vec{B}_v способно изменить ориентацию магнитного момента лишь в том случае, если частота поля (а, следовательно, и частота вращения вектора \vec{B}_v) совпадает с частотой прецессии ω_{np} . Это напоминает хорошо известное явление резонанса, происходящее при совпадении частоты вынуждающей силы с собственной частотой колебательной системы. В данном случае собственной частотой является частота прецессии, а вынуждающую силу создаёт магнитная компонента переменного электромагнитного поля.

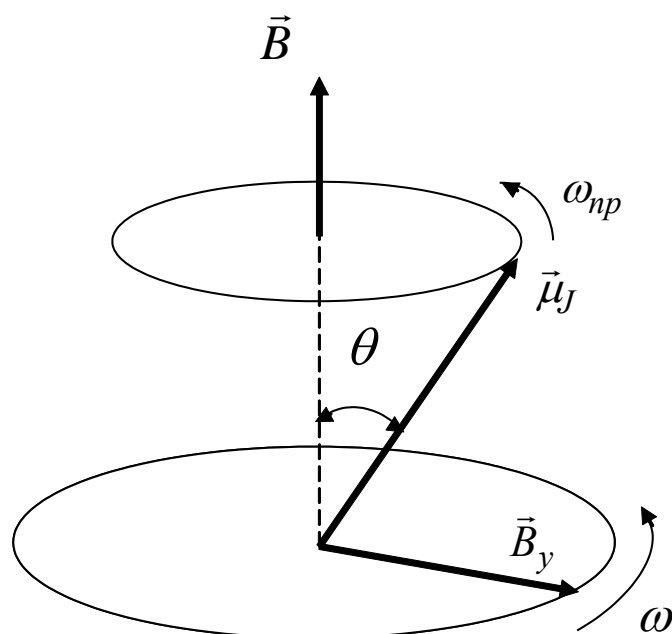


Рисунок 3

Отсюда следует, что термин. "магнитный резонанс" физически вполне оправдан, а резонансная частота определяется очевидным соотношением

$$\omega_{\text{эпр}} = \omega_{\text{пр}} = g \frac{\mu_B}{\hbar} B, \quad (7)$$

которое совпадает с выражением (3), полученным с помощью правила частот Бора.

Если же частота прецессии и частота переменного поля различны (или направления вращения противоположны даже при совпадении частот), то взаимная ориентация векторов $\vec{\mu}_J$ и \vec{B}_v будет непрерывно меняться, а результирующее воздействие поля \vec{B}_v на магнитный момент будет отсутствовать.

На практике вместо циркулярно поляризованного переменного магнитного поля применяют линейно поляризованное. Как известно, его можно представить в виде суммы двух противоположно вращающихся полей. Соответствующее резонансное воздействие на магнитные моменты осуществит та из двух составляющих, которая вращается в направлении их прецессии.

Физические принципы регистрации ЭПР

Регистрация парамагнитного резонанса (электронного или ядерного) основывается на том, что в исследуемом веществе, помещённом в постоянное магнитное поле, может происходить поглощение электромагнитного излучения, частота которого удовлетворяет соотношению (4).

Чтобы понять физическую причину поглощения излучения, следует обратиться к квантовой модели явления, в соответствии с которой при магнитном резонансе происходят вынужденные излучательные переходы между соседними магнитными подуровнями энергии.

Переход с нижнего подуровня на верхний сопровождается поглощением фотона, а переход с верхнего уровня на нижний – испусканием фотона. Поскольку магнитные подуровни являются невырожденными, то вероятности этих переходов в точности равны между собой. Очевидно, результирующее поглощение излучения будет происходить только в том случае, если заселённость верхнего подуровня меньше заселённости нижнего.

Именно такая ситуация реализуется при термодинамическом равновесии. В этом случае, согласно распределению Больцмана, отношение заселённости N_1 нижнего подуровня E_1 к заселённости N_2 верхнего подуровня E_2 оказывается равным:

$$\frac{N_1}{N_2} = \exp\left(\frac{E_2 - E_1}{kT}\right) = \exp\left(\frac{g\mu_B B}{kT}\right) \quad (7.8)$$

Здесь k – постоянная Больцмана, T – температура по шкале Кельвина. Следует отметить, что в типичных условиях наблюдения ЭПР различие в заселённостях невелико. Так, при магнитной индукции $B = 0,22 \text{ Тл}$ и при комнатной температуре $T = 300 \text{ К}$ отношение заселённостей отличается от 1 лишь на одну тысячную долю, т.е. $N_1 / N_2 = 1,001$.

Происходящие в веществе под действием излучения квантовые переходы, очевидно, приводят к выравниванию заселённостей N_1 и N_2 . Однако внутренние взаимодействия в веществе стремятся восстановить термодинамическое равновесие, а следовательно, и больцмановское распределение. Освобождающаяся при этом энергия отдаётся веществу, в результате чего исследуемый образец немного нагревается. Характерное время этого процесса τ

называется временем спин-решёточной релаксации. Чем меньше время релаксации, тем быстрее устанавливается тепловое равновесие и тем большая энергия (при прочих равных условиях) отбирается образцом от источника высокочастотной мощности. Значения τ лежат в пределах от 0,1 мс для растворов парамагнитных солей до нескольких часов для очень чистых диамагнитных кристаллов.

Время спин-решёточной релаксации играет важную роль при проведении эксперимента. При обычной постановке опыта резонансное поглощение наблюдается в установке, в которой частота переменного поля ν или величина постоянного поля \vec{B} периодически меняется, совершая колебания около резонансных значений. При прохождении резонанса происходит увеличение отбора энергии от высокочастотного генератора. Очевидно, достаточно интенсивный сигнал ЭПР будет наблюдаться лишь в том случае, если время между двумя последовательными прохождениями через резонанс окажется значительно больше времени T_1 . Только при этом условии будет успевать восстанавливаться больцмановская разность заселённостей подуровней.

Если увеличить мощность высокочастотного излучения, то в конце концов наступает такое состояние, когда процессы релаксации не в состоянии перекрыть поток входящей энергии. При этом населенности N_1 и N_2 оказываются почти одинаковыми, и величина сигнала магнитного резонанса существенно уменьшается.

Если каким-либо искусственным способом создать инверсию заселённостей, когда $N_2 > N_1$, то вещество, наоборот, будет не поглощать, а усиливать электромагнитное излучение резонансной частоты. На этом принципе действуют квантовые усилители.

Электронный парамагнитный резонанс наблюдается во всех веществах, в которых имеются неспаренные (нескомпенсированные) электроны. Неспаренные электроны могут быть как связанными, так и свободными. Так, в электронных оболочках атомов и ионов электроны связаны, причём в большинстве случаев электроны образуют замкнутые оболочки. Замкнутые электронные оболочки не приводят к появлению у атома и иона парамагнетизма, так как у такой оболочки спиновый и орбитальный моменты импульса равны нулю и нет магнитного

момента. Однако незаполненные электронные оболочки имеют магнитный момент, и наличие их приводит к появлению парамагнетизма у атомов или ионов. Наиболее известными парамагнитными ионами являются ионы группы железа V^{3+} , Cr^{3+} , Mn^{3+} , Co^{2+} , Fe^{3+} , ... с незаполненной внешней электронной оболочкой и ионы редкоземельных элементов, у которых парамагнетизм обусловлен незаполненной внутренней электронной оболочкой.

ЭПР легко наблюдается на свободных радикалах – молекулах с незаполненной химической связью. В таких молекулах, по крайней мере, один электрон не спарен. Именно неспаренные электроны свободных радикалов приводят к их повышенной химической активности. Обычно радикалы образуются в ходе химических реакций, благодаря чему метод ЭПР позволяет исследовать кинетику таких реакций.

Для калибровок ЭПР-спектрометров часто используют стабильный свободный радикал дифинилпикрилгидразил (ДФПГ) с одним неспаренным электроном в молекуле. У этого электрона отсутствует орбитальный магнетизм, вследствие чего его магнитный момент практически не отличается от спинового магнитного момента свободного электрона.

Электронный парамагнитный резонанс стал одним из самых мощных методов физического исследования. Область применения ЭПР очень широка. В ионных кристаллах он позволяет определить структуру энергетических уровней магнитных центров, тонкие детали строения кристаллической решётки и параметры, характеризующие кинетику намагничивания. Для физики ядра парамагнитный резонанс ценен как метод определения ядерных моментов и как один из наиболее эффективных способов поляризации ядер.

Особенно плодотворен метод парамагнитного резонанса в химии. Он впервые позволил детектировать свободные радикалы в количествах до 10-13 моля. Успешно применяется парамагнитный резонанс в исследованиях биологических объектов.

Описание эксперимента

Явление электронного парамагнитного резонанса ЭПР (ESR) основано на поглощении энергии веществами, имеющими неспаренные электроны, которые находятся во внешнем магнитном

поле, создаваемом источником постоянного тока. Энергия поглощается от высокочастотного электромагнитного поля, создаваемого переменным током, которое направлено перпендикулярно полю от источника постоянного тока. Если частота переменного электромагнитного поля равна резонансной частоте, полное входное сопротивление возбуждающей катушки, заполненной исследуемым материалом, меняется в соответствии с резонансной характеристикой, и на экране осциллографа будет наблюдаться пик. Одним из подходящих материалов для этого опыта является дифенилпикрилгидразил (ДФПГ).

Причина резонансного поглощения заключается в «переворачивании» магнитных моментов между спиновыми состояниями свободного электрона. Резонансная частота зависит от напряженности поля, создаваемого постоянным током, а ширина резонансного сигнала связана с однородностью поля.

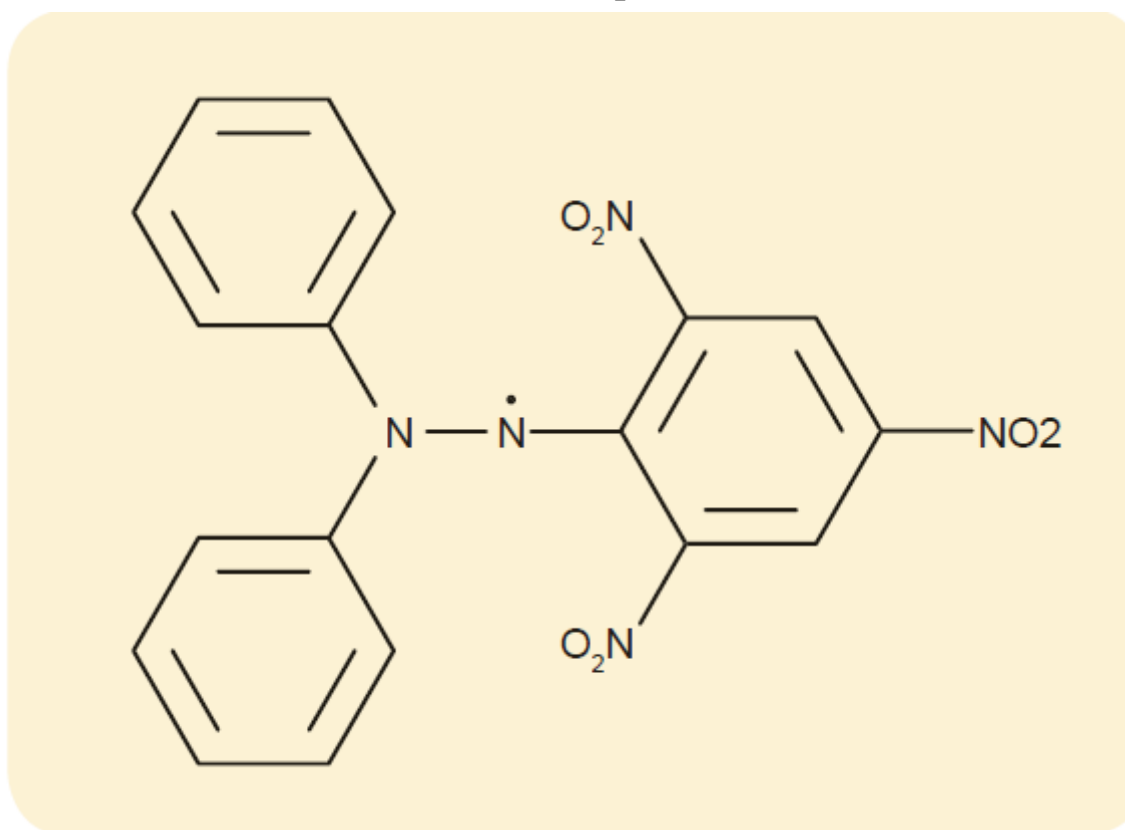


Рисунок 4 - Молекулярная структура дифенилпикрилгидразила (ДФПГ)

Магнитный момент электрона, который обладает чисто спиновым магнетизмом, принимает дискретные значения в магнитном поле В:

$$E_m = -g_J \cdot \mu_B \cdot m \cdot B, \quad m = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}. \quad (1)$$

$$\mu_B = 9,274 \cdot 10^{-24} \frac{\text{Дж}}{\text{Тл}} : \text{магнетон Бора,}$$

$$g_J = 2,0023 : (g_J\text{-фактор Ланде}).$$

Тогда интервал между двумя уровнями составляет

$$\Delta E = -g_J \cdot \mu_B \cdot \left(-\frac{1}{2}\right) \cdot B - \left(-g_J \cdot \mu_B \cdot \left(\frac{1}{2}\right) \cdot B\right) = g_J \cdot \mu_B \cdot B \quad (2)$$

Резонанс возникает, когда частота f подаваемого переменного электромагнитного поля отвечает следующему условию:

$$h \cdot f = \Delta E, \quad (3)$$

$$h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Дж}\cdot\text{с} : \text{постоянная Планка.}$$

Задания и порядок выполнения работы

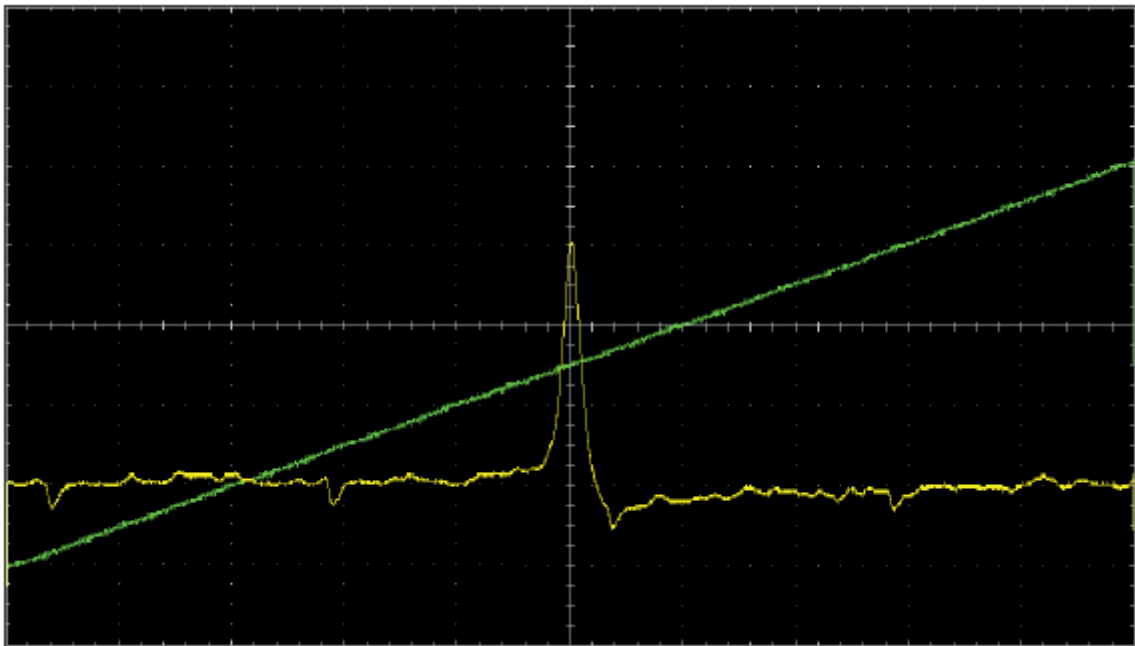


Рисунок 5 – Сигнал поглощения и изменение магнитного поля во времени при электронном парамагнитном резонансе в дифенилпикрилгидразиле (ДФПГ).

1) Наблюдение за резонансной характеристикой ДФПГ

В этом опыте электронный парамагнитный резонанс демонстрируется в дифенилпикрилгидразиле (ДФПГ) - органическом соединении, молекулы которого имеют в своем составе неспаренный электрон. Базовое магнитное поле создается внутри пары катушек Гельмгольца и изменяется от нуля до максимального значения $B_{\text{макс}} = 3,5 \text{ мТл}$ с помощью пилообразного

сигнала. В результате можно найти частоту f , при которой имеет место резонансное поглощение в определенной точке на пилообразной характеристике, т.е. при выбранном значении магнитного поля.

2) Определение зависимости резонансной частоты от магнитного поля.

Нижеследующую связь между резонансной частотой f и магнитным полем B можно получить из выражений (2) и (3).

$$f = g_J \cdot \frac{\mu_B}{h} \cdot B.$$

Поэтому результаты измерения оказываются лежащими на прямой, проходящей через начало координат, в пределах погрешности измерения.

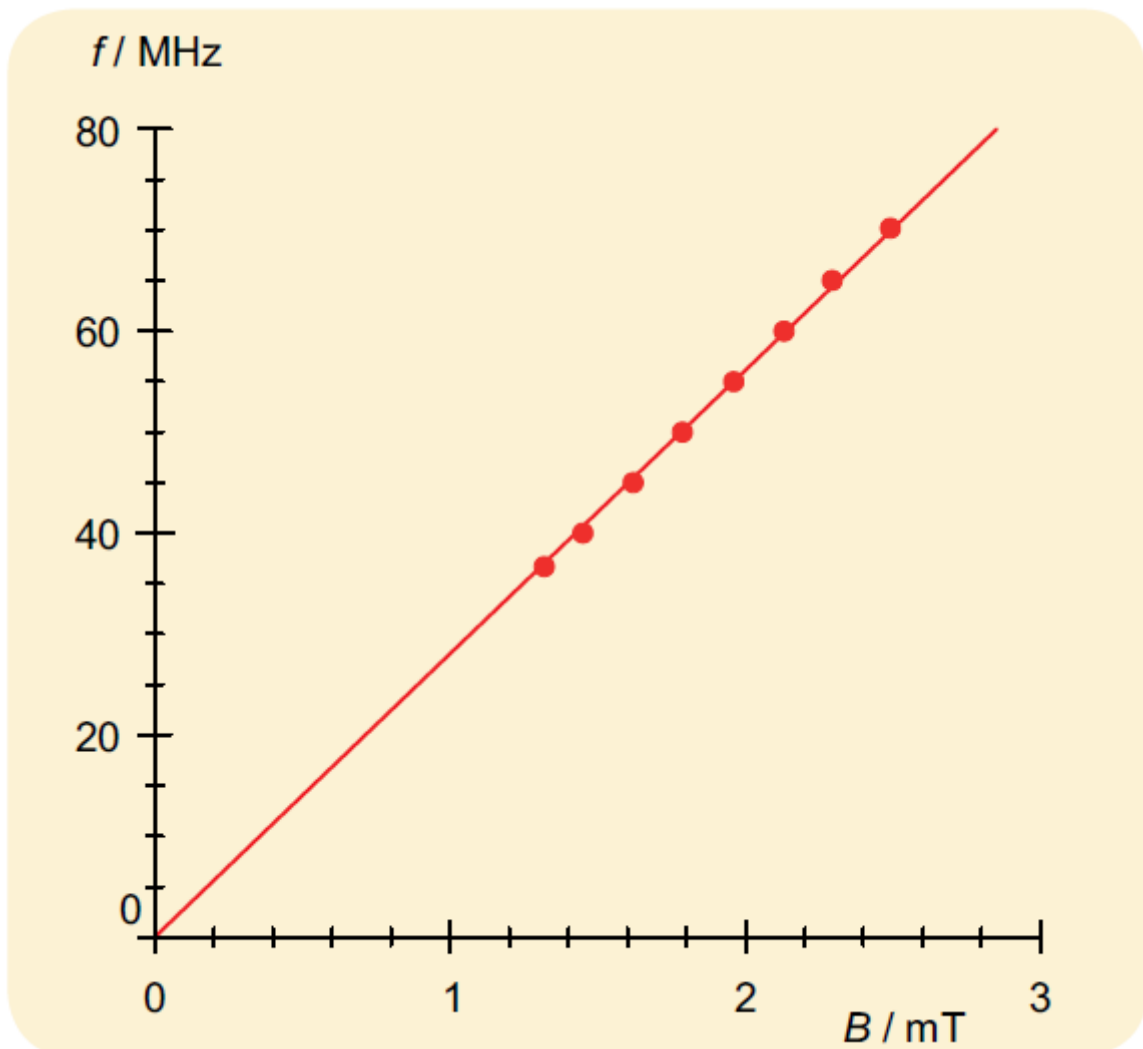


Рисунок 3 – Зависимость резонансной частоты f от магнитного поля B .

3) Определение g -фактора Ланде для свободных электронов

g_J -фактор Ланде можно определить по наклону этого графика зависимости резонансной частоты f от величины индукции магнитного поля B .

4) Повторить пункты 1) и 2) для пустого сравнительного образца.

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

1. Что такое резонанс?
2. Дайте определение: «Электронный парамагнитный резонанс – это...».
3. Можно ли назвать ЭПР электронным спиновым резонансом?
4. Сделайте вывод формулы $f = g_J \cdot \frac{\mu_B}{h} \cdot B$.
5. Можно ли рассчитать g_J -фактор Ланде по формуле $g_J = \cdot \operatorname{tg} \alpha \frac{h}{\mu_B}$, где α – угол под прямой зависимости резонансной частоты f от индукции магнитного поля B ?

ЛИТЕРАТУРА

1. Савельев И.В. Курс физики: Учеб.: В 3-х т. Т. 3: Квантовая оптика. Атомная физика. Физика твердого тела. Физика атомного ядра и элементарных частиц.— М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1989. — 304 с.
2. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. Москва, «Наука», 1978. 792 с.