

# 钠原子光谱测量及量子缺计算

陈玉

【摘要】使用光栅光谱仪观察、测量钠原子光谱，利用里德伯表计算量子缺。

【关键字】钠原子光谱，量子缺

## 一、钠原子光谱的线系

对于氢原子光谱，人们早就发现它们的光谱线的波数可以用两项值之差表示：

$$\tilde{\nu} = \frac{R}{n_2^2} - \frac{R}{n_1^2} \dots \dots (1)$$

式中 R 为里德伯常数。

碱金属原子只有一个价电子，价电子在核和内层电子组成的原子实的中心力场中运动和氢原子有类似。但是，由于原子实的存在，价电子处在不同量子态时，或者按轨道模型描述，处于不同的轨道时，它和原子实的相互作用是不同的。这主要是，价电子处于不同轨道时，它们的轨道在原子实中贯穿的程度不同，所受到的作用不同；其次，价电子处于不同轨道时，引起原子实极化的程度也不同。这两者都要影响原子的能量。即使价电子所处轨道的主量子数 n 相同而轨道量子数 l 不同，原子的能量也是不同的。因此，原子的能量与价电子所

处轨道的量子数 n 和 l 都有关。轨道贯穿和原子实的极化都使原子的能量减少，量子数 l 减少，轨道进入原子实的部分越多，原子实的极化也越显著，因而原子的能量减少得越多。与主量子数 n 相同的氢原子相比，碱金属原子的能量要小，而且不同的轨道量子数 l 对应着不同的能量。l 数值越小，能量越小；l 越大，越接近相应的氢原子的能级。

若不考虑电子自旋和轨道运动的相互作用引起的能级分裂，可以把光谱项表示为

$$T_{nl} = \frac{(Z_o^*)^2 R}{n^2} \dots \dots (2)$$

式中 n, l 分别是主量子数和轨道量子数， $Z_o^*$  是原子实的平均有效电荷数， $Z_o^* > 1$ 。因此还可以把上式改写为

$$T_{nl} = \frac{R}{\left(\frac{n^*}{Z_o^*}\right)^2} = \frac{R}{(n^*)^2} = \frac{R}{(n - \Delta_l)^2} \dots \dots (3)$$

$\Delta_1$ 是一个与  $n$  和  $l$  都有关的正的修正数，成为量子缺。理论计算和实验观测都表明，当  $n$  不是很大时，量子缺的大小主要决定于  $l$ ，而随  $n$  的变化不大。

电子由上能级（量子数为  $n, l$ ）跃迁到下能级（ $n', l'$ ）发射的光谱线的波数由下式决定：

$$\tilde{\nu} = \frac{R}{(n' - \Delta_{l'})^2} - \frac{R}{(n - \Delta_l)^2} \dots \dots (4)$$

如果令  $n', l'$  固定，而  $n$  依次改变（ $l$  的选择定则为  $\Delta l = \pm 1$ ），则得到一系列的  $\tilde{\nu}$  值，它们构成一个光谱线系，光谱中常用  $n'l' \sim nl$  这种符号表示线系。 $l=0, 1, 2, 3$  分别用 S, P, D, F 表示。钠原子光谱有四个线系：

主线系（P 线系）： $3S \sim nP$ ， $n=3, 4, 5, \dots$

漫线系（D 线系）： $3P \sim nD$ ， $n=3, 4, 5, \dots$

锐线系（S 线系）： $3P \sim nS$ ， $n=4, 5, 6, \dots$

基线系（F 线系）： $3D \sim nF$ ， $n=4, 5, 6, \dots$

在各个线系中，式(4)中的  $n', l'$  固定不变，称为固定项，以  $A_{n', l'}$  表示之； $n, l$  项成为变动项。因此，式(4)可写作

$$\tilde{\nu} = A_{n', l'} - \frac{R}{(n - \Delta_l)^2} \dots \dots (5)$$

其中， $A_{n', l'}$  为常量， $n=n', n'+1, n'+2, \dots$ 。

## 二、钠原子光谱的双重结构

电子具有自旋，自旋量子数  $s=1/2$ 。由于电子自旋和轨道运动的相互作用，使原子具有附加能量。这附加能量除了与量子数  $n, l$  有关外，还与原子的总角动量的量子数  $j$  有关，因此同一光谱项有分裂为不同能级。

碱金属原子只有一个价电子，由于原子实的角动量为零（暂不考虑原子核自旋的影响），因此原子的总角动量就等于价电子的角动量。对于  $s$  轨道 ( $l=0$ )，电子的轨道角动量为零，总角动量就等于电子的自旋角动量，因此  $j$  只取一个数值，即  $j=1/2$ ，从而 S 谱项只有一个能级，是单重能级，对于  $L \neq 0$  的  $p, d, f \dots$  轨道， $j$  可取  $j = l \pm 1/2$  两个数值，因此相应的谱项分裂为双重结构。由于能级分裂，用式(2)表示的光谱项应发生变化，根据量子力学计算结果，双重能级的项值可以分别表示为

$$T_{n, l, j=l+1/2} = \frac{R}{(n - \Delta_l)^2} - \frac{1}{2} \xi_{n, l} \dots \dots (6)$$

$$T_{n,l,j=l-1/2} = \frac{R}{(n - \Delta_l)^2} + \frac{l+1}{2} \xi_{n,l} \dots \dots (7)$$

式中 $\xi_{n,l}$ 是一个与 $n, l$ 有关的因子,称为单电子的分裂因子,它等于

$$\xi_{n,l} = \frac{R\alpha^2(Z_o^*)^4}{n^3l(l+1/2)(l+1)} \dots \dots (8)$$

式中 $R$ 为里德伯常数, $R = 109737.316\text{cm}^{-1}$ ;  $\alpha$ 为精细结构常数, $\alpha = \frac{2\pi e^2}{4\pi\epsilon_0 ch} = 1/137.036$ ;  $Z_o^*$ 为原子实的有效电荷。实验上根据式(3)从量子缺确定的原子实有效电荷书 $Z_o^*$ 和根据光谱双重结构确定的有效电荷数 $Z_o^*$ 不完全相同。由式(6)~(8),双重能级的间隔可以用波数差表示为

$$\tilde{\nu} = \left(1 + \frac{1}{2}\right) \xi_{n,l} = \frac{R\alpha^2(Z_o^*)^4}{n^3l(l+1)} \dots \dots (9)$$

由上式可知,双重结构的间隔随 $n$ 和 $l$ 的增大而迅速减小。

由于上述的电子自旋和轨道运动相互作用造成的能级双重分裂,碱金属原子的光谱存在着双重结构。

### 三、实验装置

#### (一) 光谱仪

钠原子光谱的基线系全部在红外区,主线系除了共振线在可见区,其

余均在紫外区,锐线系和漫线系大部分在可见区。本实验采用WGD-8A型组合式多功能光栅光谱仪,它配备有闪耀波长为250nm的闪耀光栅,工作的波长范围为200~660nm,一级光谱的理论分辨本领为0.06nm。利用这一光谱仪可以观测到共振线以及锐线和漫线系的大部分光谱线和它们的双重结构,主线系的另外两组线的双重结构也能分开。

本实验中WGD-8A型光谱仪采用单色仪工作方式,通过连续转动光栅,使光谱依序从出射狭缝射出。用光电倍增管把光信号转变为电信号,并由计算机处理和依序存储,计算机把存储的光谱信号在荧光屏上显示。利用显示结果可以测量各个谱线的波长和相对强度。

#### (二) 光源

本实验用GY-5型钠光灯作为光源。

### 四、实验步骤

- 1、使用光栅光谱仪观察钠原子光谱;
- 2、利用黄双线校准仪器的波长读书和辨认、测量钠原子光谱其他谱线的波长;
- 3、计算量子缺及绘制能级图

## 五、量子缺计算

1、根据量子数的估计值，在里德伯表中找到相应表项(波数差)

$$\text{估计值: } \Delta_s = 1.35, \Delta_p = 0.88,$$

$$\Delta_d = 0.01$$

量子数差 $\Delta n$	波数差	表中波数差	m	a
<b>主线系</b>				
34	13143.3	13143.3	23	0.12
<b>漫线系</b>				
34	5381.73	5334.45	34	0.00
45	2485.90	2469.09	45	0.00
56	1348.66	1341.23	56	0.00
<b>锐线系</b>				
45	7389.54	7317.21	23	0.66
56	3161.85	3138.66	34	0.66
67	1637.53	1627.91	45	0.66

2、根据表中所找到的波数差，找寻与其最接近的实验数据。

量子数 n	波数/cm <sup>-1</sup>	波长/nm	波数差/cm <sup>-1</sup>
<b>主线系</b>			
3	16968.71	589.32	13325.14
4	30293.85	330.10	
<b>漫线系</b>			
4	17667.84	566.00	2493.45
5	20161.29	496.00	1263.45
6	21424.74	466.75	
<b>锐线系</b>			
5	16286.64	614.00	3206.54
6	19493.18	513.00	1555.02
7	21048.20	475.10	

3、再次查找里德伯表，找寻与实验数据最接近的表项。从而得到相应的 m 和 a

量子数 n	波数差 /cm <sup>-1</sup>	表中波数差 /cm <sup>-1</sup>	m	a
<b>主线系</b>				
34	13325.14	13464.67	23	0.10
<b>漫线系</b>				
45	2493.45	2439.09	45	0.00
56	1263.45	1269.91	56	0.10
<b>锐线系</b>				
56	3206.54	3232.81	34	0.62
67	1555.02	1553.59	45	0.74

4、根据所得 m 和 a 计算量子缺

主线系， $3S \sim nP$ :

$$\Delta_p = 3 - 2 - 0.10 = 0.90$$

漫线系， $3P \sim nD$ :

$$\Delta_{d1} = 4 - 4 - 0.00 = 0.00;$$

$$\Delta_{d2} = 5 - 5 - 0.10 = -0.10;$$

$$\therefore \Delta_d = -0.05$$

锐线系， $3P \sim nS$ :

$$\Delta_{s1} = 5 - 3 - 0.62 = 1.38;$$

$$\Delta_{s2} = 6 - 4 - 0.74 = 1.26;$$

$$\therefore \Delta_s = 1.32$$

$$\Delta_l = n - m - a$$

另外:

主线系第一级能级分裂为:

589.00nm 和 589.65nm

漫线系第三级能级分裂为:

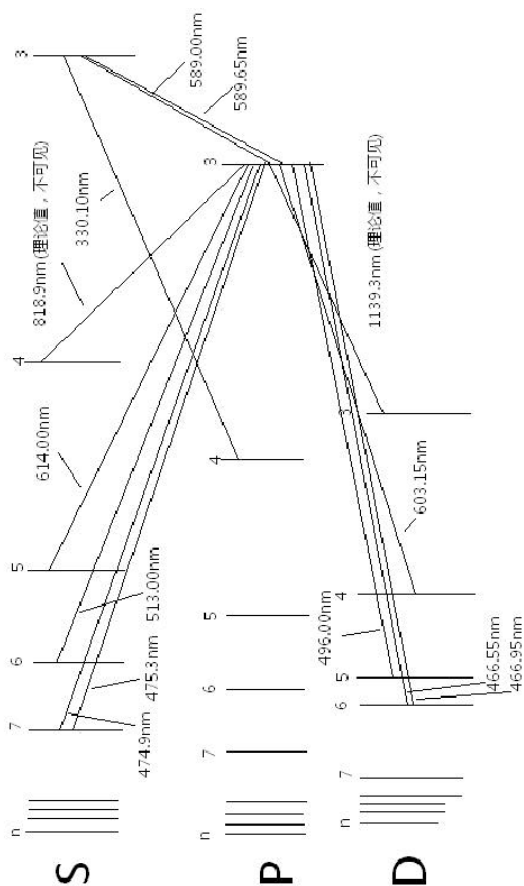
466.55nm 和 466.75nm

锐线系第三级能级分裂为:

474.90nm 和 475.30nm

钠原子能级图如下:

$$\Delta_l = n - m - a$$



#### 四、总结

本实验用光栅光谱仪测量了钠原子光谱的谱线，利用里德伯表计算了量子缺。本实验的特点在与利用我们已知的“钠黄双线”进行仪器定标和已知的“里德伯表”进行数据处理，这种利用已知来探寻未知，是科学研究中极其重要的方法之一。通过这次实验，我对原子光谱的知识有了深刻的了解，并且通过观测钠原子光谱，对于钠原子光谱结构有了直观的认识。

#### 参考文献

- 1、何元金、马兴坤，《近代物理实验》，北京：清华大学出版社
- 2、黄创高、莫其逢、黄国文、高英俊，《钠原子光谱与精细结构分析》，《广西物理》第28卷第1期
- 3、芦立娟、沈建尧，《分光计观察钠灯谱线的方法及线系归属的研究》，《大学物理实验》第17卷第2期