

ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
Σ.Ε.Μ.Φ.Ε.

Λεπτή Υφή του ατόμου Na

Θωμόπουλος Σπύρος
spyros.thomop@gmail.com/ ge19042@mail.ntua.gr

Ημερομηνία Παράδοσης 09/05/2022

Σκοπός

Ο στόχος της εν λόγω εργαστηριακής άσκησης είναι ο υπολογισμός της ενέργειας διαχωρισμού των γραμμών του ατόμου του Νατρίου καθώς και η ποιοτική παρατήρησή τους.

Θεωρητικά Στοιχεία

Η μελέτη των ατόμων ξεκινά από το Υδρογόνο. Αυτό, είναι το μόνο ακριβώς επιλύσιμο άτομο αν συμπεριλάβουμε την έλξη Coulomb πυρήνα-ηλεκτρονίου. Αν πάμε έστω και στο Ήλιο το πρόβλημα αυτό καθίσταται μη επιλύσιμο αναλυτικά και για τον υπολογισμό των ενεργειών θα πρέπει να κάνουμε χρήση είτε υπολογιστικών μεθόδων είτε προσεγγίσεων. Αν τώρα εξετάσουμε το σύστημα πυρήνας-ηλεκτρόνιο στο άτομο του Υδρογόνου λίγο προσεκτικότερα θα δούμε ότι υπάρχουν και άλλες αλληλεπιδράσεις, των οποίων αποτέλεσμα είναι ο διαχωρισμός των αρχικών ενεργειακών σταθμών. Τέτοιου είδους αλληλεπιδράσεις είναι η σύζευξη σπιν-τροχιακής στροφορμής του ηλεκτρονίου, η αλληλεπίδραση των σπιν πυρήνα-ηλεκτρονίου, η αλληλεπίδραση spin πυρήνα-τροχιακής στροφορμής ηλεκτρονίου, η επίδραση της σχετικότητας.

Τώρα αν περάσουμε σε ένα πολυηλεκτρονιακό άτομο, πέρα από τις απώσεις Coulomb μεταξύ των ηλεκτρονίων που καθιστούν το αρχικό πρόβλημα μη επιλύσιμο, υπάρχει η σύζευξη των spin των ηλεκτρονίων, των τροχιακών στροφορμών τους. Κάθε μία αλληλεπίδραση συνεισφέρει σε διαφορετικό βαθμό στον διαχωρισμό των "αρχικά" εκφυλισμένων ενεργειακών σταθμών. Οι κυριάρχες είναι η έλξη Coulomb πυρήνα-ηλεκτρονίων (προφανώς), η άπωση μεταξύ των ηλεκτρονίων και η σύζευξη σπιν-τροχιάς για τα ηλεκτρόνια.

Σύζευξη σπιν-τροχιάς (L-S)

Για το μονοηλεκτρονιακό άτομο του Υδρογόνου, η εν λόγω σύζευξη περιλαμβάνεται στους υπολογισμούς ξεκινώντας σε ένα σύστημα αναφοράς ακίνητο προς το ηλεκτρόνιο. Σ' αυτό, ο πυρήνας κινείται και προκαλεί στην περιοχή γύρω του μαγνητικό πεδίο ίσο με $\vec{B} = -(\vec{v} \times \vec{E})/c$. Όμως το ηλεκτρικό πεδίο μπορεί να γραφεί ως $\vec{E} = \frac{\partial V(r)}{\partial r} \vec{r}/(er)$ και επειδή $\vec{l} = -m\vec{v} \times \vec{r}$ προκύπτει ότι στο σύστημα ηρεμίας του ηλεκτρονίου το μαγνητικό πεδίο είναι:

$$\vec{B} = -\frac{1}{mecr} \frac{dV(r)}{dr} \vec{l} \quad (1)$$

Επειδή το σύστημα ηρεμίας του ηλεκτρονίου δεν είναι αδρανειακό, αλλά επιταχύνεται καθώς αυτό περιστρέφεται γύρω από τον πυρήνα και τότε εμφανίζεται το φαινόμενο "Thomas Precession" το οποίο επιβάλλει έναν παράγοντα 1/2 στο μαγνητικό πεδίο κατά την μετάβαση στο σύστημα αναφοράς του πυρήνα.

Η διόρθωση στην Hamiltonian από την αλληλεπίδραση του μαγνητικού πεδίου του πυρήνα με το σπιν του ηλεκτρονίου είναι

$$H_{SOC} = -\frac{1}{2} \mu_B \vec{\sigma} \cdot \vec{B} = \underbrace{\frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{\partial V(r)}{\partial r}}_{\xi(r)} \vec{s} \cdot \vec{l} \quad (2)$$

Η διαφορά στις ενέργειες που επιφέρει αυτή η σύζευξη είναι της μορφής

$$\Delta E_{SOC} = \frac{mc^2(Za)^4}{4} \frac{j(j+1) - l(l+1) - 3/4}{n^3 l(l+1/2)(l+1)}$$

όπου $a \sim 1/137$ η σταθερά λεπτής υφής.

Αν τώρα λάβουμε υπ' όψιν μας και σχετικιστικές διορθώσεις και τις προσθέσουμε στις ΔE_{SOC} έχουμε την λεπτή υφή:

$$\Delta E_{FS} = \Delta E_{SOC} + \Delta E_{rel} = -\frac{1}{2} mc^2 (Za)^4 \frac{1}{n^4} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right) \quad (3)$$

Κατ' αναλογία αν πάμε σε πολυηλεκτρονιακά άτομα, η παραπάνω ενέργεια διαχωρισμού των εκφυλισμένων ενεργειακών σταθμών γίνεται:

$$\Delta E_{SOC} = \frac{A_J}{2} (J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)) \quad (4)$$

$$\Delta E_{J+1} - \Delta E_J = \frac{A_J}{2}(J+1) \quad (5)$$

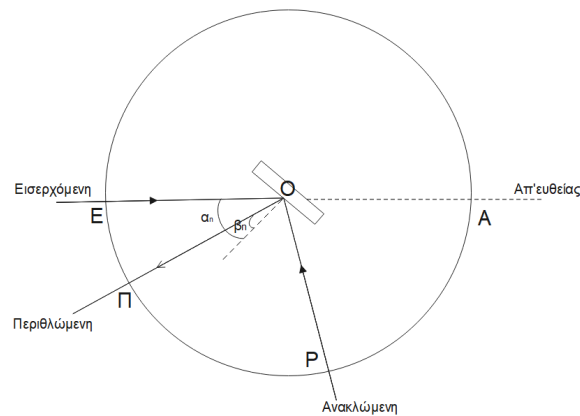
Εμείς σε αυτή την άσκηση θα ασχοληθούμε με τις διαφορές στις ενεργειακές στάθμες λόγω της σύζευξη LS για το άτομο του Νατρίου όπου η εν λόγω διαφορά είναι $\sim 10^{-3} \text{ eV}$.

$$\Delta E_{J+1} - \Delta E_J = \frac{A_J}{2}(J+1) \quad (5)$$

Εμείς σε αυτή την άσκηση θα ασχοληθούμε με τις διαφορές στις ενεργειακές στάθμες λόγω της σύζευξη LS για το άτομο του Νατρίου όπου η εν λόγω διαφορά είναι $\sim 10^{-3} \text{ eV}$.

Το οπτικό φράγμα

Σε αυτή την άσκηση θα χρησιμοποιήσουμε ένα οπτικό φράγμα ανάκλασης με πυκνότητα 1800mm^{-1} . Το φως που προέρχεται από την λυχνία Νατρίου προσπίπτει σε αυτό με γωνία α_n , ανακλάται σε μία ίση γωνία και περιθλάται σε γωνία β_n , όπως στην παρακάτω Εικόνα (1).



Εικόνα. 1

Για το οπτικό φράγμα μας ισχύει η εξίσωση

$$d(\sin\alpha_n + \sin\beta_n) = n\lambda \quad (6)$$

όπου $d = 1/N$ η σταθερά του φράγματος, n η τάξη του χροστού συμβολής και λ το μήκος κύματος της προσπίπτουσας δέσμης.

Πειραματική Διάταξη

Η πειραματική διάταξη αποτελείται από:

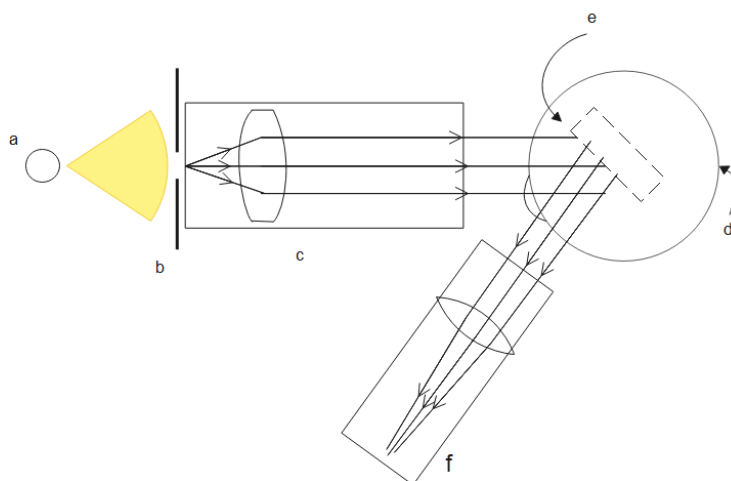
- Λυχνία ατμών Νατρίου
- Τροφοδοτικό λυχνίας
- Κατευθυντήρα για την προσπίπτουσα δέσμη
- Γωνιόμετρο με βερνιέρο
- Τηλεσκόπιο
- Οπτικό φράγμα ανάκλασης ($N = 1800mm^{-1}$)

Η διάταξη φαίνεται στην παρακάτω Εικόνα (2).

Πειραματική Διαδικασία - Επεξεργασία Μετρήσεων

Μήκη κύματος φασματικών γραμμών

Αφού τοποθετήσουμε το φράγμα και θέσουμε σε λειτουργία την λυχνία, παρατηρούμε το φάσμα του νατρίου ποιοτικά (κόκκινο, κίτρινο, κίτρινο-πράσινο, πράσινο) από την περιθλώμενη δέσμη. Αρχικά καταγράφουμε την ένδειξη του γωνιομέτρου για την απ' ευθείας δέσμη και την ένδειξη για την



Εικόνα. 2: α) Λάμπα Νατρίου, β) Λεπτή σχισμή, γ) Κατευθυντήρας, δ) Οπτική τράπεζα που περιστρέφεται. Στην βάση της υπάρχει ο γωνιομετρικός κύκλος, ε) Οπτικό Φράγμα, ς) τηλεσκόπιο

Σημείο Μέτρησης	$\theta(\pm 0.1^\circ)$
A	170.3
P	230.0
$\Pi_{\kappa\omicron\kappa}$	305.9
$\Pi_{\pi\rho\alpha}$	299.3
$\Pi_{\kappa\iota\tau}$	301.4

Πίνακας. 1: Α: Απ'ευθείας, Ρ: Ανακλώμενη,
 $\Pi_{\kappa\omicron\kappa}$: Περιθλώμενη Κόκκινη, $\Pi_{\pi\rho\alpha}$: Περιθλώμενη Πράσινη,
 $\Pi_{\kappa\iota\tau}$: Περιθλώμενη Κίτρινη

ανακλώμενη δέσμη της λάμπας. Έπειτα καταγράφουμε τις ενδείξεις για τις περιθλώμενες δέσμες. Τα αποτελέσματα φαίνονται στον Πίνακα (1)

Για να χρησιμοποιήσουμε την σχέση (6) και να βρούμε τα μήκη κύματος που αντιστοιχούν στην κάθε γωνία, θα πρέπει να ξέρουμε σε ποιο σημείο βρίσκεται η κάθετος στο φράγμα προκειμένου να βρούμε τις γωνίες ανάκλασης και περίθλασης. Από τον Πίνακα (1) μπορούμε αρχικά να βρούμε την ένδειξη στο σημείο Ε που θα είναι $\alpha_E = (\underbrace{350.3}_{170.3+180.0} \pm 0.1)^\circ$ και έπειτα την συνολική γωνία $E\hat{O}P$ που

σχηματίζει η εισερχόμενη με την ανακλώμενη δέσμη, να την διαιρέσουμε δια δύο και να βρούμε την γωνία πρόσπτωσης α_1 :

$$\alpha_1 = 0.5(|230.0 - 350.3| \pm 0.1)^\circ \Rightarrow \boxed{\alpha_1 = (60.2 \pm 0.1)^\circ}$$

Τώρα μπορούμε να βρούμε την θέση της καθέτου στο φράγμα:

$$n = ((\alpha_E + \alpha_1) \pm \delta n)^\circ \Rightarrow \boxed{n = (290.1 \pm 0.1)^\circ}$$

Εν τέλει είμαστε σε θέση να προσδιορίσουμε την γωνία περίθλασης για κάθε μήκος κύματος από την σχέση $\beta_{1,i} = |\Pi_i - n|$ και πλέον έχουμε όλες τις γωνίες ώστε να χρησιμοποιήσουμε την σχέση (6). Άρα προκύπτει ο παρακάτω Πίνακας (2):

Χρώμα	$\beta_{1,i}(\pm 0.1^\circ)$	$\lambda_i(nm)^1$
Πράσινο	9.2	571 ± 1
Κίτρινο	11.3	591 ± 1
Κόκκινο	15.8	633 ± 1

Πίνακας. 2: i=κoκ,πρa,κιτ

Ενεργειακή Διαφορά Κίτρινης γραμμής

Τώρα θα υπολογίσουμε την ενεργειακή διαφορά και που προκαλεί η σύζευξη LS για την κίτρινη γραμμή από τον διαχωρισμό της σε δύο επιμέρους γραμμές. Επειδή το γωνιόμετρο που διαθέτουμε δεν έχει τόσο μεγάλη ακρίβεια ώστε να μπορούμε να μετρήσουμε απ' ευθείας την διαφορά στις γωνίες περίθλασης των δύο κίτρινων γραμμών θα κάνουμε ένα τρικ. Συγκεκριμένα, εφ' όσον η διαφορά είναι ορατή μέσω του τηλεσκοπίου, παίρνουμε δύο μετρήσεις στρίβοντας το γωνιόμετρο δύο φορές την μεταξύ τους απόσταση προς τα δεξιά της μίας γραμμής και προς τα αριστερά της άλλης. Αυτή η στροφή προφανώς δεν μπορεί να είναι ακριβής και πραγματοποιείται "με το μάτι" και αυτό είναι το σημείο όπου εισέρχεται μεγάλο σφάλμα (το θεωρώ 0.2°).

Έχουμε από πριν ότι η γωνία περίθλασης του κίτρινου είναι στην θέση 301.4° ενώ από την παραπάνω διαδικασία μετρήσαμε την μία γωνία στις 301.2° , ενώ την άλλη στις 301.6° , επομένως η διαφορά είναι $\Delta\beta_{1,\kappa\lambda T} = 0.4/5 = 0.08^\circ$, άρα

$$\Delta\beta_{1,\kappa\lambda T} = (0.08 \pm 0.04)^\circ$$

Οστόσο, εμείς σε τελική ανάλυση θέλουμε να υπολογίσουμε την ενεργειακή διαφορά που επιφέρει η σύζευξη LS, η οποία δίνεται από την σχέση:

$$\Delta E = h\Delta f = hc\Delta\left(\frac{1}{\lambda}\right) = hc\left(\frac{1}{\lambda_{left}} - \frac{1}{\lambda_{right}}\right) \quad (7)$$

Άρα αν θεωρήσουμε ότι η μέτρηση για το κίτρινο $\beta_{1,\kappa\lambda T} = (11.3 \pm 0.1)^\circ$ ήταν περίπου στο μέσο των δύο γραμμών, τότε έχουμε για την αριστερή και την δεξιά αντίστοιχα ότι $\beta_{1,\kappa\lambda T, left} = (11.26 \pm 0.20)^\circ$, $\beta_{1,\kappa\lambda T, right} = (11.34 \pm 0.20)^\circ$. Από την σχέση (6) προκύπτουν τα δύο μήκη κύματος $\lambda_{left} = (590.6 \pm 2.1)nm$ και $\lambda_{right} = (591.3 \pm 2.1)nm$.

Άρα από την σχέση (7) προκύπτει διαφορά στις ενέργειες $\Delta E = 2.7 \times 10^{-3}eV$. Η απόκλιση από το θεωρητικά αναμενόμενο ($2.1 \times 10^{-3}eV$) είναι $0.6 \times 10^{-3}eV$, δηλαδή της τάξης του $\sim 30\%$.

Περί Ανώτερων Τάξεων

Αν χρησιμοποιήσουμε το ίδιο οπτικό φράγμα, τότε από την σχέση (6), για περίθλαση δεύτερης τάξης, $n = 2$ και για το κίτρινο μήκος κύματος $\lambda_{\kappa\lambda T} = (591 \pm 1)nm$ παίρνω ότι

$$\sin\alpha + \sin\beta_2 \simeq 2.13$$

το οποίο είναι άτοπο, άρα με το εν λόγω φράγμα δεν μπορούμε να παρατηρήσουμε καν περίθλαση δεύτερης και προφανώς ούτε ανώτερης τάξης για το κίτρινο μήκος κύματος.

Συμπεράσμα

Συμπερασματικά, τα αποτελέσματα είναι ικανοποιητικά, στα πλαίσια των αναμενόμενων αποκλίσεων, πέρα από τους υπολογισμούς για τον διαχωρισμό που είχε απόκλιση $\sim 30\%$ και όπου κάναμε το πειραματικό τρικ για να αυξήσουμε κατά μία έννοια την ακρίβεια του οργάνου μας

¹Το σφάλμα για κάθε μήκος κύματος προκύπτει από διάδοση $\delta\lambda_i = \sqrt{\left(\frac{\partial\lambda}{\partial\alpha}\delta\alpha\right)^2 + \left(\frac{\partial\lambda}{\partial\beta_{1,i}}\delta\beta_{1,i}\right)^2} = \sqrt{(d\cos(\alpha)\delta\alpha)^2 + (d\cos(\beta_{1,i})\delta\beta_{1,i})^2} = d\delta\alpha\sqrt{\cos(\alpha)^2 + \cos(\beta_{1,i})^2}$