

Od spektra atomu vodíku k jeho struktuře

Úvod aneb začínáme zkoumat spektrum

1.) Říkáme, že spektra, která atomy vyzařují, jsou tzv. čárová. Prohlédněte si spektra různých prvků. Jak byste jednoduše popsali, co to znamená „čárové spektrum“?

Ani vodík není výjimkou, jeho spektrum je také čárové. V následujících úkolech budeme pracovat s reálně naměřenými daty, která jsou převzata z databáze National Institute of Standards and Technology. Na semináři jsou potřebné údaje k dispozici v tištěné podobě a v několika elektronických formátech v souborech s názvem `spektrum_vodik_data`.

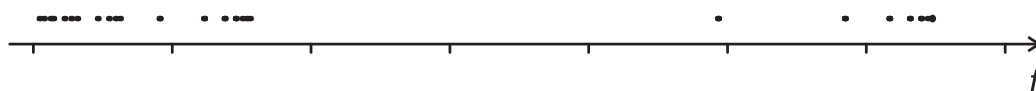
Poznámka: Protože se zatím snažíme najít první popis spektra vodíku, uvažujme přesnost našeho měření na 4 až 5 platných číslic. Tabulka obsahuje i čáry s velmi blízkými či „stejnými“ vlnovými délkami, což je dáno efekty, které zatím nebudeme uvažovat. Pro naše účely si takové čáry sloučíme do jedné – vezměte průměrnou frekvenci a jejich intenzity sečtete. Dále pracujte s takto upraveným spektrem.

2.) Prozkoumejte naměřená spektra atomu vodíku. Ve viditelné oblasti se nachází několik čar různých barev, ale vodík vyzařuje i záření, které naše oko zaznamenat neumí. Spočítejte počet viditelných čar a počet čar, které mají příliš malou/velkou vlnovou délku. Jak říkáme záření s větší/menší vlnovou délkou odpovídá viditelné části spektra?

3.) Vaším úkolem je na základě předchozí poznámky vytvořit tabulku pozorovaných čar ve spektru vodíku a přepočítat vlnovou délku na frekvenci. Tabulku vytvářejte v programu MS Excel nebo v nějakém podobném.

Pozn.: $c = 299\,792\,458\text{ m/s}$

4.) Vytvořte obrázek (jakýsi graf), ve kterém budou zaneseny frekvence čar spektra vodíku v nějaké škále (zvolte si vhodné jednotky pro kreslení, abyste se v následujících výpočtech nemuseli potýkat s čísly příliš malými či příliš velkými), viz následující obrázek:



5.) Zkuste najít a popsat ve vytvořeném grafu nějaký vzor, pravidelnost, něco se opakuje a mohlo by sloužit k rozdělení čar na několik skupin. Popište vlastnosti jedné skupiny.

Nápověda: Svůj průzkum začněte od nejvyšších frekvencí a případně ignorujte několik čar s nejmenšími frekvencemi. Do svých úvah můžete zahrnout i relativní intenzity čar, které hledaný vzor ještě zvýrazňují (vytvořte si vhodný graf, který by zahrnoval jak frekvenci, tak intenzitu čáry).

Řešení předchozího úkolu: Pokud vynecháme několik čar s nejmenší frekvencí, tak ostatní čáry můžeme rozdělit na tři skupiny. Ve všech třech skupinách platí:

- 1) nejintenzivnější čáry mají nejmenší frekvenci
- 2) se stoupající frekvencí intenzita čar klesá
- 3) s rostoucí frekvencí se zmenšuje rozdíl sousedních čar ve skupině = čáry se „zahušťují“.

Těmto skupinám čar se říká série a jsou pojmenovány po fyzicích, kteří je zkoumali. Skupině čar s největšími frekvencemi se říká Lymanova, následující Balmerova a třetí skupině Paschenova. Čáry s nejmenšími frekvencemi patří do dalších sérií, ale intenzita čar v této oblasti je již příliš malá na to, abychom je naměřili.

6.) Rozdělte si jasně celé spektrum na jednotlivé série. Také si ujasněte, kde se nachází viditelné čáry.

Řešení předchozího úkolu: Lymanova série obsahuje 7 čar s největší frekvencí, Balmerova také sedm a navíc obsahuje všechny viditelné čáry. Z Paschenovy série je pozorováno (v naší tabulce uvedeno) pět čar.

Lymanova série aneb jak určit polohu čáry

V předchozím úkolu jsme zjistili, že jednotlivé frekvence můžeme seskupit do několika skupin – sérií. Teď se zaměříme na sérii čar s největšími frekvencemi (na tzv. Lymanovu sérii). **Úkoly v této části řešte pouze s čarami z této série.**

7.) Navrhněte několik možností, jak očíslovat jednotlivé čáry v Lymanově sérii. Pořadí čáry bude označováno jako n . Uveďte argumenty, proč jsou některá číslování vhodnější než jiná. Nezapomeňte na to, že používáme experimentální data získaná měřicími přístroji s danou citlivostí, takže může existovat více čar než je zatím naměřeno. Zvolte si jedno (nejvhodnější) očíslování těchto čar pro další práci.

8.) Vytvořte graf závislosti frekvence čáry v Lymanově sérii na jejím čísle = pořadí (dle vašeho číslování).

9.) Dalším cílem bude najít nějaký jednoduchý vzorec, jak z pořadového čísla čáry dopočítat její frekvenci. Zamyslete se ale nejprve nad tím, jak přesný vzorec chceme najít. Diskutujte vzhledem k přesnosti naměřených dat.

10.) Zkuste navrhnout vhodné funkce, kterými by bylo možné body v grafu proložit. Uvědomte si, kde by se mohly nacházet další čáry této série, které mají příliš malou intenzitu, a proto jsme je nenaměřili. Hledaná funkce by měla předpovídat jejich frekvence. Ve funkci také zohledněte to, že zvolené číslování nemusí být úplně optimální, tj. že např. začíná od jiného čísla než by bylo ideální.

Než budete číst dál, tak si poznamenejte navržené funkce. Nemáte-li nápad na vhodnou funkci, podívejte se na konec tohoto textu.

11.) Proložte body v grafu navrženými funkcemi.

MS Excel umožňuje automaticky prokládat data několika typy křivek. S tím si ale asi nevystačíme. Postup, jak proložit danými body libovolnou křivku pomocí doplňku programu MS Excel s názvem „Řešitel“, je popsán ve zvláštním návodu. Pokud postup neznáte, seznamte se s ním či požádejte o jeho vysvětlení.

12.) Ze zkoumaných závislostí vyberte tu nejlepší. Napište vzorec v co nej-jednodušším tvaru.

Výsledky předcházejících i dalších úkolů si můžete porovnat s řešením uvedeným v souboru `Reseni_spektrum.H.xls`.

Balmerova a Paschenova série

13.) V předcházející části jsme se zabývali pouze jednou sérií čar. Víme ale, že existují i další série. Zkuste navrhnout a diskutovat nějaké vhodné číslování jednotlivých sérií. Číslo série bude nadále označováno jako m .

14.) Proložte závislost vybranou v předchozí části i druhou (Balmerovou) a třetí (Paschenovou) sérií. Opět se pokuste zapsat vzorce nějak jednoduše.

15.) A teď přijde vyvrcholení. Porovnejte nalezené koeficienty pro jednotlivé série a zkuste nalézt závislost na číslu série. Možná bude třeba pozměnit číslování nebo některé z koeficientů nějak vhodně zaokrouhlit (zkontrolujte, jak moc tyto změny změny přesnost).

Poznámka: Pokud chcete ušetřit čas, naleznete hodnoty parametrů určené řešitelem v souboru `Reseni_spektrum.H.xls` na listu `Dalsi serie`.

Výsledky – nalezené závislosti

16.) Pro další diskuzi je třeba se sjednotit v nalezených vztazích a hodnotách koeficientů. Řešení, ze kterého vychází další text, naleznete na konci tohoto textu. Porovnejte uvedené výsledky se svými.

Šli jste stejnou nebo podobnou cestou? Nebo máte odlišné výsledky? Uvědomte si, že odlišné výsledky nejsou špatně. Naším úkolem bylo najít vztahy, které popisují spektrum atomu vodíku. Takových popisů existuje jistě mnoho. Popis uvedený v řešení se osvědčil a používá se dodnes.

Směřujeme k energetickým hladinám

Planck a Einstein postupně odhalili, že světlo je vždy vyzařováno a pohlcováno v násobcích „kvanta“ energie, kterému dali název foton. Energie fotonu je dána vztahem $E = hf$, kde $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ J s je Planckova konstanta. Jak vidíme ze spekter, tak atomy nemohou vyzářit libovolný foton, ale jen některé.

17.) Upravte vztahy z předchozího úkolu tak, aby místo frekvence udávaly energii fotonu (pro danou čáru) ve vhodných jednotkách.

Elektron v atomu má nějakou energii. Tím, že vyzáří foton, se jeho energie změní (zmenší). Změna energie odpovídá vždy nějaké čáře ve spektru, nemůže být tedy libovolná. Tento fakt lze vysvětlit následujícími dvěma hypotézami:

A) *Elektron v atomu může mít libovolnou energii, ale vyzařovat může pouze povolené hodnoty energie.*

B) *Elektron v atomu vodíku může mít pouze určité konkrétní (povolené) hodnoty. Díky tomu může vyzařovat jen fotony s diskrétními povolenými energiemi.*

18.) Která z těchto hypotéz se zdá být lepší? Zkuste najít vhodné argumenty, které podpoří vaši volbu.

19.) Jste si jisti, že druhá, vámi nezvolená, hypotéza je špatně? Může nám v tomto rozhodování pomoci experiment?

20.) Předpokládejme, že bez ohledu na vaši volbu by byla správná hypotéza B. Pomocí nalezeného vztahu pro energii vyzářeného fotonu zkuste odhadnout vztah pro povolené energie elektronu. Ověřte, zda by se daly energie fotonu získat jako rozdíly povolených energií elektronu.

21.) Zůstává nějaká volnost v určení povolených energií elektronu, kterou ze spektra nelze určit? S čím souvisí?

Vše hotovo? ...nápady na další zkoumání

22.) Zkuste vymyslet a vytvořit nějakou názornou grafickou pomůcku, která by přiblížila to, že energie fotonu odpovídá přeskokům mezi povolenými energetickými hladinami.

23.) Prozkoumejte tzv. Grotrianův diagram vodíku.

24.) Zkuste se podívat na spektra dalších atomů (tedy spíše iontů), které obsahují také pouze jeden elektron. Lze zde zahlédnout podobnou strukturu? Dokážete odhadnout z těchto údajů, jak závisí energie základního stavu na protonovém čísle Z ?

25.) Orientujete-li se v problematice atomů a jejich spekter, můžete prozkoumat tabulku s naměřenými vlnovými délkami a zkusit vymyslet, co je uvedeno v dalších sloupcích?

26.) Pokud vás zajímají tvary jednotlivých „orbitalů“ – stavů elektronu v atomu vodíku tak, jak je předpovídá kvantová mechanika, můžete si zkusit řešit materiál s názvem „Orbitaly atomu vodíku“.

Použité materiály

- Databáze atomových spekter, National Institute of Standards and Technology, <<http://physics.nist.gov/PhysRefData/contents-atomic.html>>
- Koopman, L.: Learning Quantum Mechanics through Experience, in GIREP 2006, <http://www.science.uva.nl/research/amstel/dws/girep2006/index.php?PageName=learning_quantum_mechanics>

Výsledky

10.) Nápady na vhodné funkce, ve kterých n znamená číslo čáry v sérii a velkými písmeny jsou označeny hledané parametry (konstanty):

$$A + \frac{B}{n+C}, \quad A + \frac{B}{(n+C)^2}, \quad A + \frac{B}{(n+C)^3},$$
$$A + \exp B(n+C), \quad A + B \log(n+C).$$

Pokud se rozhodneme, že pro $n \rightarrow \infty$ má být funkce konečná, můžeme poslední dva návrhy vyloučit. Lze samozřejmě zkoušet i kombinace těchto návrhů. Doporučuji vyzkoušet alespoň první dvě navržené funkce.

13.) Čáry v sérii jsou očíslovány přirozenými čísly počínaje jedničkou. Jedničku dostala čára s nejmenší frekvencí v dané sérii. Série číslujeme také od jedničky postupně s klesající frekvencí. V následujících vzorcích je frekvence f uváděna v THz, $1 \text{ THz} = 10^{15} \text{ Hz}$.

Lymanova série ($m = 1$):

$$f(n, m = 1) = 3,28808 + \frac{-3,28804}{(n+1)^2} = 3,288 \left(1 - \frac{1}{(n+1)^2} \right)$$

Balmerova série ($m = 2$):

$$f(n, m = 2) = 0,82202 + \frac{-3,28803}{(n+2)^2} = 3,288 \left(0,250 - \frac{1}{(n+2)^2} \right)$$

Paschenova série ($m = 3$):

$$f(n, m = 3) = 0,36534 + \frac{-3,28766}{(n+3)^2} = 3,288 \left(0,111 - \frac{1}{(n+3)^2} \right)$$

Při tomto očíslování je velmi jednoduché si všimnout, že

$$f(n, m) = 3,288 \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{(n+m)^2} \right)$$

a vidíme, že nám v nalezeném vzorci, který je velmi přesný, zbyla jen jediná konstanta.