

Глава 14. Спектры водородоподобных систем

Спектральная линия излучается или поглощается в результате перехода между двумя дискретными уровнями энергии. Формулы, выведенные в предыдущей главе, позволяют получить представление о спектрах атома водорода и водородоподобных ионов.

14.1. Спектральные серии атома водорода

Спектральной серией называется совокупность переходов с общим нижним уровнем. Например, серию Лаймана атома водорода и водородоподобных ионов составляют переходы на первый уровень: $n \rightarrow 1$, где главное квантовое число верхнего уровня, или его номер n принимает значения 2, 3, 4, 5 и т.д., а серию Бальмера — переходы $n \rightarrow 2$ для $n > 2$. В табл. 14.1.1 приведены названия первых нескольких серий атома водорода.

Таблица 14.1.1 Спектральные серии атома водорода

Серия	Название серии
$n \rightarrow 1$	Лаймана (Ly)
$n \rightarrow 2$	Бальмера (H)
$n \rightarrow 3$	Пашена (P)
$n \rightarrow 4$	Брекета (B)
$n \rightarrow 5$	Пфунда (Pf)
$n \rightarrow 6$	Хэмфри
$n \rightarrow 7$	Хансена–Стронга

Серия Лаймана атома водорода целиком попадает в область вакуумного ультрафиолета. В оптическом диапазоне находится серия Бальмера, а в ближней инфракрасной области — серия Пашена. Первые несколько переходов любой серии нумеруются буквами греческого алфавита по схеме табл. 14.1.2:

Таблица 14.1.2 Обозначения первых линий спектральной серии

Δn	1	2	3	4	5	6	7	8
Индекс	α	β	γ	δ	ϵ	ζ	η	θ

В результате спонтанного перехода с верхнего уровня i на нижний j атом излучает квант, энергия E_{ij} которого равна разности

$$(1.1) \quad E_{ij} = E_i - E_j.$$

При радиационном переходе с j на i поглощается квант с такой же энергией. В планетарной модели атома водорода энергия уровней вычисляется по формуле (13.5.2), причём заряд ядра равен единице:

$$(1.2) \quad E_{ij} = R_y \cdot \left(\frac{1}{j^2} - \frac{1}{i^2} \right).$$

Разделив эту формулу на hc , получим волновое число перехода:

$$(1.3) \quad k_{ij} = R_H \left(\frac{1}{j^2} - \frac{1}{i^2} \right).$$

Длина волны в вакууме равна обратной величине волнового числа:

$$(1.4) \quad \lambda_{ij} = \frac{1}{k_{ij}}.$$

По мере увеличения номера верхнего уровня i длина волны перехода монотонно уменьшается. При этом линии неограниченно сближаются. Существует нижний предел длины волны серии, соответствующий границе ионизации. Он обычно обозначается индексом «С» рядом с символом серии. На рис.14.1.1 схематически изображены

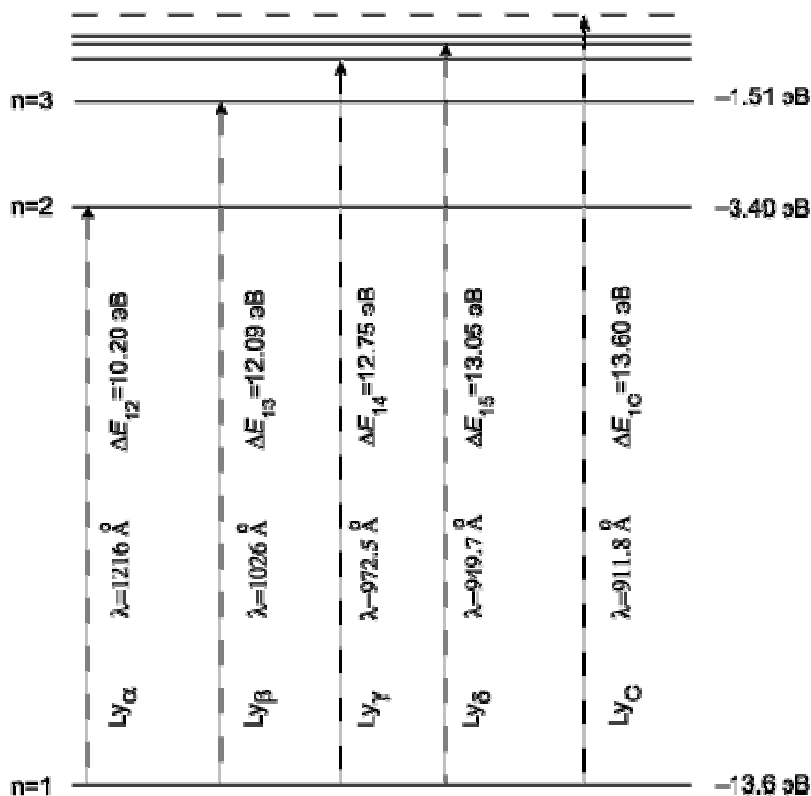


Рис.14.1.1. Переходы серии Лаймана атома водорода.

переходы, а на рис.14.1.2 — спектральные линии лаймановской серии атома водорода.

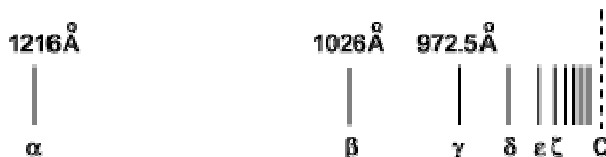


Рис.14.1.2. Лаймановская серия атома водорода.

Хорошо видно сгущение уровней и линий вблизи границы ионизации.

По формулам (1.3) и (1.4) с постоянной Ридберга (13.6.4) мы можем вычислить длины волн для любой серии атома водорода. В таблице 14.1.3 собраны сведения о первых

Таблица 14.1.3. Лаймановская серия атома водорода

n	Переход	E_{12} , эВ	E_{12} , Rv	Длина волны, Å
-----	---------	---------------	---------------	----------------

				λ_{exp}	λ_{theor}
2	Ly_{α}	10.20	0.75	1215.67	1215.68
3	Ly_{β}	12.09	0.89	1025.72	1025.73
4	Ly_{γ}	12.75	0.94	972.537	972.548
5	Ly_{δ}	13.05	0.96	949.743	949.754
∞	Ly_{ϵ}	13.60	1.00	_____	911.763

линиях серии Лаймана. В первом столбце приведён номер числа верхнего уровня n , во втором — обозначение перехода. В третьем и четвертом содержится энергия перехода, соответственно, в электронвольтах и в ридбергах. В пятом помещены измеренные длины волны переходов, в шестом — их теоретические значения, вычисленные по планетарной модели. Излучение с $\lambda < 2000\text{\AA}$ сильно поглощается в земной атмосфере, поэтому длины волн серии Лаймана приведены для вакуума.

Хорошее согласие теории с экспериментом говорит о разумности положений, лежащих в основе теории Бора. Расхождение в сотых долях ангстрема обусловлено релятивистскими эффектами, о которых упоминалось в предыдущем разделе. Их мы рассмотрим ниже.

Формула (1.4) даёт длину волны в вакууме λ_{vac} . Для оптического диапазона ($\lambda > 2000\text{\AA}$) в спектроскопических таблицах приводятся длины волн λ_{atm} , измеренные в условиях атмосферного воздуха. Переход к λ_{vac} выполняется умножением на показатель преломления N :

$$(1.5) \quad \lambda_{\text{vac}} = N \cdot \lambda_{\text{atm}}.$$

Для показателя преломления воздуха при нормальной влажности справедлива следующая эмпирическая формула:

$$(1.6) \quad N - 1 = 28.71 \cdot 10^{-5} \left(1 + 5.67 \cdot 10^{-3} \lambda_{\text{atm}}^2 \right).$$

Здесь атмосферная длина волны выражена в микронах. В правую часть (1.6) можно подставить также λ_{vac} : незначительная ошибка в длине волны мало сказывается на величине $N - 1$.

Сведения о бальмеровской серии ($j = 2$) содержатся в табл.14.1.4. Экспериментальные значения длины волны перехода в пятом столбце даны для

Таблица 14.1.4 Бальмеровская серия водорода

n	Линия	Энергия перехода		Длина волны, \AA		
		эВ	Ry	Измерена в атмосфере	Теоретическая для вакуума	Теоретическая для атмосферы
3	H_{α}	1.89	0.14	6562.80	6564.70	6562.78
4	H_{β}	2.55	0.18	4861.32	4862.74	4861.27
5	H_{γ}	2.86	0.21	4340.60	4341.73	4340.40
6	H_{δ}	3.02	0.22	4101.73	4102.94	4101.66
∞	H_{ϵ}	3.40	0.25	_____	3647	3646

нормальных атмосферных условий. Теоретические длины волн, исправленные преломления по формулам (1.5) и (1.6), приведены в последнем столбце. Спектральные линии бальмеровской серии можно схематически изображены на

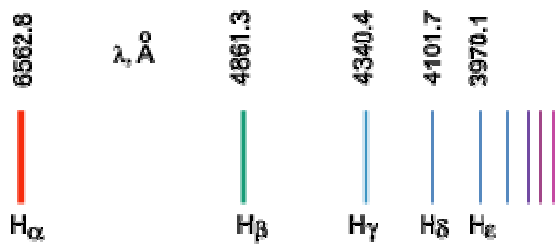


Рис. 14.1.3. Бальмеровская серия атома водорода.

рис.14.1.3. Положение линии отмечено цветной линией; сверху — длина волны в ангстремах, снизу — принятое обозначение перехода. Головная линия H_α находится в красном диапазоне спектра; обычно она оказывается самой сильной линией серии. Остальные переходы монотонно ослабевают по мере увеличения главного квантового числа верхнего номера. Линия H_β расположена в сине-зелёном участке спектра, а остальные — в синей и фиолетовой областях.

Природа бальмеровского скачка

Бальмеровским скачком называется депрессия излучения в спектрах звёзд на длинах волн короче 3700\AA . На рис.14.1.4 изображены регистрограммы спектров двух звёзд. Красная граница

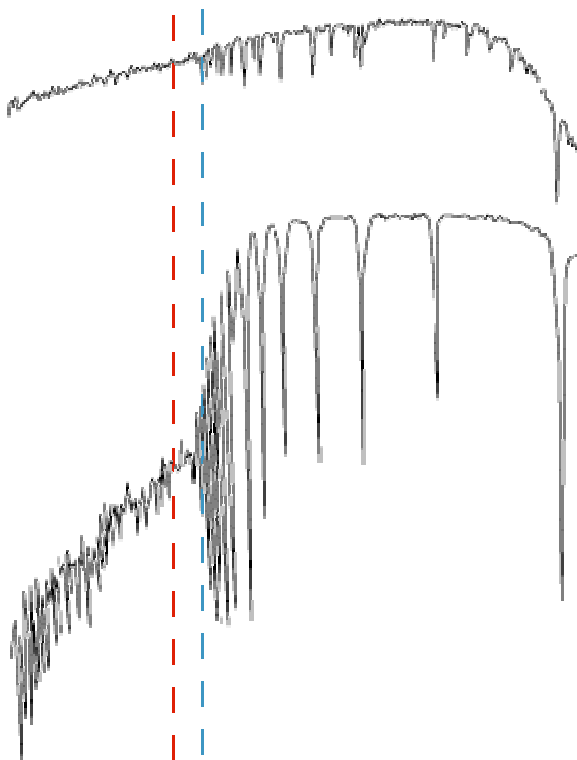


Рис.14.1.4. Бальмеровский скачок в спектре звезды.

фотоэффекта, обусловленного ионизацией атома водорода со второго уровня, помечена красной пунктирной линией ($\lambda=3646\text{\AA}$), а собственно бальмеровский скачок — синей ($\lambda=3700\text{\AA}$). На нижнем спектре отчётливо видна депрессия вблизи синей линии. Для сравнения сверху помещён спектр звезды, не имеющий никаких особенностей в промежутке $3600 < \lambda < 3700\text{\AA}$.

Заметное расхождение красной и синей линий на рис.14.1.4 не позволяет считать фотоэффект непосредственной причиной рассматриваемого явления. Здесь важную роль играет наложение линий бальмеровской серии при больших значениях n . Вычислим разность длин волн

$\Delta\lambda$ двух соседних переходов: $i \rightarrow 2$ и $(i+1) \rightarrow 2$. Дважды воспользуемся формулами (1.3), (1.4) при $j = 2$, заменив индекс i на n :

$$R_H \cdot \Delta\lambda = R_H \cdot (\lambda_n - \lambda_{n+1}) = 16 \frac{2n+1}{[(n+1)^2 - 4](n^2 - 1)}.$$

Для $n \gg 1$ можно пренебречь единицей по сравнению с n , а также четвёркой по сравнению с $(n+1)^2$:

$$(1.7) \quad R_H \cdot \Delta\lambda \approx 32n^{-3}.$$

Мы получили количественное выражение для упомянутого выше неограниченного сближения верхних членов любой серии водорода. Последняя формула при $n > 10$ имеет точность не хуже 5%.

Абсорбционные линии имеют определённую ширину, зависящую от физических условий в атмосфере звезды. В качестве грубого приближения её можно принять равной 1\AA . Будем считать две линии неразличимыми, если ширина каждой из них равна расстоянию между линиями. Тогда из (1.7) получается, что слияние линий должно происходить при $n \approx 15$. Примерно такая картина наблюдается в спектрах реальных звёзд. Итак, бальмеровский скачок определяется слиянием высоких членов бальмеровской серии.

Бальмеровская серия дейтерия

Ядро тяжёлого изотопа водорода — дейтерия — состоит из протона и нейтрона, и приблизительно вдвое тяжелее ядра атома водорода — протона. Постоянная Ридберга у дейтерия R_D (13.6.5) больше, чем у водорода R_H , поэтому линии дейтерия смещены в синюю сторону спектра относительно линий водорода. Длины волн бальмеровской серии водорода и дейтерия, выраженные в ангстремах, приведены в табл. 14.1.5.

Таблица 14.1.5. Длины волн бальмеровской серии водорода и дейтерия.

переход	водород	дейтерий
α	6562.78	6561.06
β	4861.27	4859.99
γ	4340.40	4339.28
δ	4101.66	4100.62

Атомный вес трития приблизительно равен трём. Его линии также подчиняются закону планетарной модели атома. Они смещены примерно на 0.6\AA в синюю сторону относительно линий дейтерия.

14.2. Переходы между высоковозбуждёнными состояниями

Переходы между соседними уровнями атома водорода с номерами $n > 60$ попадают в сантиметровый и более длинноволновый диапазоны спектра, поэтому их называют «радиолниями». Частоты переходов между уровнями с номерами i и j получаются из (1.3), если обе части формулы разделить на постоянную Планка h :

$$(2.1) \quad \nu_{ij} = R_\infty (\Gamma_H) \frac{1}{1 + m_e/m_p} \left(\frac{1}{j^2} - \frac{1}{i^2} \right)$$

Постоянная Ридберга, выраженная в герцах, равна

$$R_{\infty}(\text{Гц}) = 3.2898419499 \cdot 10^{15} \text{ Гц}.$$

Формулой, аналогичной (2.1), для состояний с $n \gg 1$ можно пользоваться не только в случае водорода, но и для любого атома. Согласно материалу предыдущей главы, мы можем написать

$$(2.2) \quad \nu_{ij} = R(\text{Гц}) \left(\frac{1}{j^2} - \frac{1}{i^2} \right)$$

где $R(\text{Гц})$ выражается через $R_{\infty}(\text{Гц})$ по формуле (13.8.1), как и R через R_{∞} .

В настоящее время радиолинии стали мощным инструментом изучения межзвёздного газа. Они получаются в результате рекомбинации, то есть образования атома водорода при столкновении протона и электрона с одновременным излучением избыточной энергии в виде кванта света. Отсюда следует их другое название — рекомбинационные радиолинии. Их излучают диффузные и планетарные туманности, области нейтрального водорода вокруг областей ионизованного водорода и остатки сверхновых. Излучение радиолиний от космических объектов обнаружено в диапазоне длин волн от 1 мм до 21 м.

Система обозначения радиолиний аналогична оптическим переходам водорода. Линия обозначается тремя символами. Сначала записывается имя химического элемента (в данном случае — водорода), затем номер нижнего уровня i , наконец — греческая буква, с помощью которой зашифрована разность $j - i$:

Обозначение	α	β	γ	δ
Разность $j - i$	1	2	3	4.

Например, H109 α обозначает переход со 110-го на 109-й уровень водорода, а H137 β — переход между его 139-м и 137-м уровнями. Приведём частоты и длины волн трёх переходов атома водорода, часто встречающихся в астрономической литературе:

Переход	H66 α	H109 α	H137 β
$\nu(\text{МГц})$	22364	5008.9	5005.03
$\lambda(\text{см})$	1.340	5.9853	5.9900

Линии H109 α и H137 β всегда видны отдельно, несмотря на то, что они очень близки в спектре. Это является следствием двух причин. Во-первых, методами радиоастрономии длины волн измеряются очень точно: с шестью, а иногда и с семью верными знаками (в оптическом диапазоне обычно получается не более пяти верных знаков). Во-вторых, сами линии в спокойных областях межзвёздной среды значительно уже, чем линии в звёздных атмосферах. В разреженном межзвёздном газе единственным механизмом уширения линий остаётся эффект Доплера, в то время как в плотных атмосферах звёзд большую роль играет уширение давлением.

Постоянная Ридберга растёт с увеличением атомного веса химического элемента. Поэтому линия He109 α сдвинута в сторону больших частот, чем линия H109 α . По аналогичной причине ещё выше частота перехода C109 α .

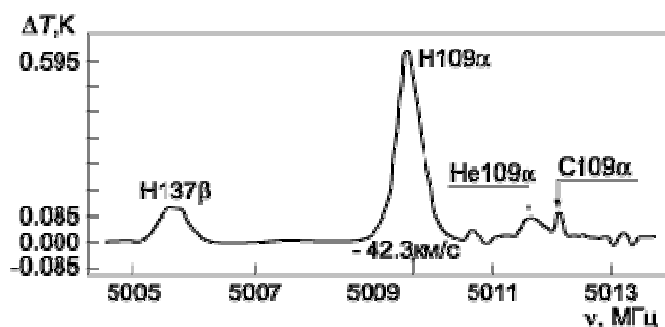


Рис.14.2.1. Радиопики водород, гелия и углерода.

Сказанное иллюстрируется рис.14.2.1, на котором приведён участок спектра типичной газовой туманности (NGC 1795). По горизонтальной оси отложена частота, измеренная в мегагерцах, по вертикальной — яркостная температура в градусах Кельвина. В поле рисунка указана доплеровская скорость туманности ($-42.3 km/s$), которая несколько меняет длины волн линий по сравнению с их лабораторными значениями.

14.3. Изoeлектронная последовательность водорода

Согласно определению, данному в четвёртом разделе седьмой главы, ионы, состоящие из ядра и одного электрона, называются водородоподобными. Другими словами, говорят, что они относятся к изoeлектронной последовательности водорода. Их структура качественно напоминает атом водорода, а положение энергетических уровней ионов, заряд ядра которых не слишком велик ($Z < 10$), может быть вычислено по простой формуле (13.5.2). Однако у многозарядных ионов ($Z > 20$) появляются количественные отличия, связанные с релятивистскими эффектами: зависимостью массы электрона от скорости и спин–орбитальным взаимодействием.

Оптические переходы иона HeII

Заряд ядра гелия равен двум, поэтому длины волн всех спектральных серий иона HeII в четыре раза меньше, чем у аналогичных переходов атома водорода: например, длина волны линии H_{α} равна 1640 \AA .

Лаймановская и бальмеровская серии HeII лежат в ультрафиолетовой части спектра; а в оптический диапазон частично попадают серии Пашена (P) и Брекета (B). Наиболее интересные переходы собраны в табл.14.3.1. Как и в случае бальмеровской серии водорода, приведены «атмосферные» длины волн.

Таблица 14.3.1. Длины волн пашеновской и брекетовской серий иона HeII

Переход	$4 \rightarrow 3$	$5 \rightarrow 3$	$7 \rightarrow 4$	$9 \rightarrow 4$
Обозначение	P_{α}	P_{β}	B_{γ}	B_{ϵ}
Длина волны, \AA	4686	3202	5411	4541

Постоянная Ридберга для гелия равна:

$$R_{He} = 109722.26 \text{ cm}^{-1}.$$

Отметим важную особенность иона HeII. Из 13.5.2 следует, что энергия уровня Zn водородоподобного иона с зарядом ядра Z , равна энергии уровня n атома водорода. Поэтому переходы между чётными уровнями $2n$ и $2m$ иона HeII и переходы $n \rightarrow m$ атома водорода имеют очень близкие длины волн. Отсутствие полного совпадения обусловлено, главным образом, различием значений R_H и R_{He} .

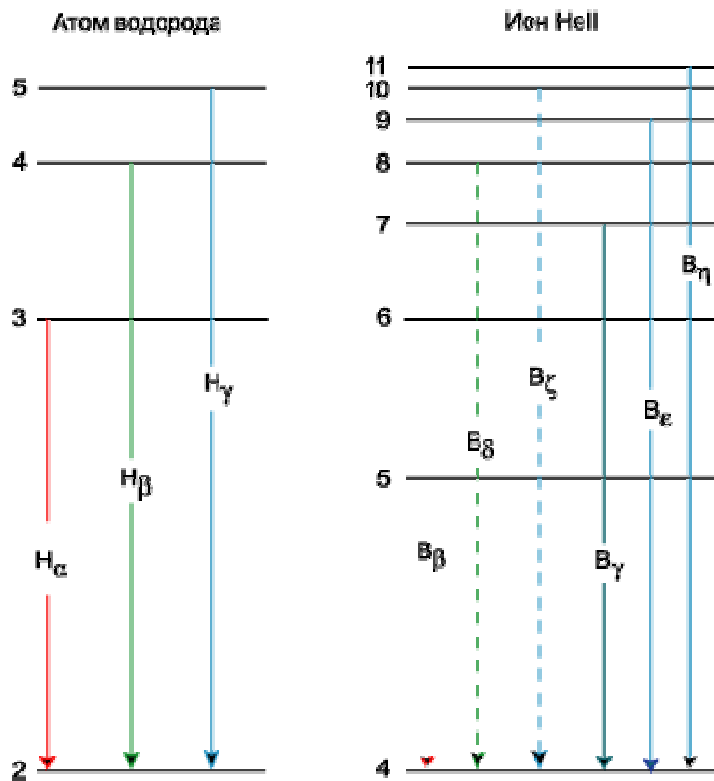


Рис.14.3.1. Переходы бальмеровской серии водорода и серия Брекета иона HeII.

На рис. 14.3.1 сопоставлены схемы переходов атома водорода (слева) и иона HeII (справа). Пунктиром обозначены переходы HeII, практически совпадающие с бальмеровскими линиями водорода. Сплошными линиями отмечены переходы B_γ , B_ϵ и B_η , для которых нет пары среди линий водорода. В верхней строке табл.14.3.2 приведены длины волн серии Брекета HeII, а в нижней — линии бальмеровской серии водорода. Линии серии Брекета называются также серией

Таблица 14.3.2. Серия Брекета иона HeII и серия Бальмера атома водорода

HeII	6560 (6→4) B_β	5411 (7→4) B_γ	4859 (8→4) B_δ	4541 (9→4) B_ϵ	4339 (10→4) B_ζ	4200 (11→4) B_η	4100 (12→4) B_θ	4026 (13→4) B_{13}
HI	6563 (3→2) H_α	—	4861 (4→2) H_β	—	4340 (5→2) H_γ	—	4102 (6→2) H_δ	—

Пикеринга, по фамилии директора Гарвардской обсерватории, впервые исследовавшего их в спектрах горячих звёзд южного неба. Отметим, что серия Пикеринга была удачно объяснена именно в рамках планетарной модели атома. Тем самым, она способствовала установлению современных взглядов на природу атома.

Приведённая масса выше у более тяжёлого химического элемента, поэтому уровень с номером $2m$ иона гелия лежит глубже уровня m атома водорода. Следовательно, линии серии Брекета HeII сдвинуты в синюю сторону относительно соответствующих переходов серии Бальмера. Относительная величина сдвига линий $\Delta\lambda/\lambda$ определяется в данном случае отношением постоянных Ридберга:

$$\Delta\lambda/\lambda = 1 - R_H/R_{He} \approx \frac{3}{4 \cdot 1836}.$$

Абсолютное значение $\Delta\lambda$ для $\lambda = 6560\text{\AA}$ составляет примерно 3\AA , в согласии с данными табл.(14.3.2).

Линии HeII, соответствующие переходам между уровнями с чётными номерами перекрываются с линиями водорода, так как ширины линий значительно больше расстояния между ними. Обычно линии водорода значительно сильнее линий гелия, но есть одно исключение — это звёзды типа Вольфа–Райе. Температура их атмосфер превышает 30000K , а содержание гелия по числу частиц в десять раз больше, чем водорода. Поэтому ионов гелия там много, а нейтрального водорода, наоборот, мало. В результате в спектрах звёзд Вольфа–Райе все линии водорода наблюдаются только как слабые добавки к линиям HeII. Содержание водорода в звёздах этого типа оценивается путём сравнения глубин линий брекетовской серии HeII с чётными и нечётными номерами верхнего уровня: первые несколько больше из-за дополнительного вклада водорода.

В спектрах нормальных звёзд самыми сильными линиями поглощения всегда остаются линии водорода, если температура атмосферы выше 10000K . На рис.14.3.2

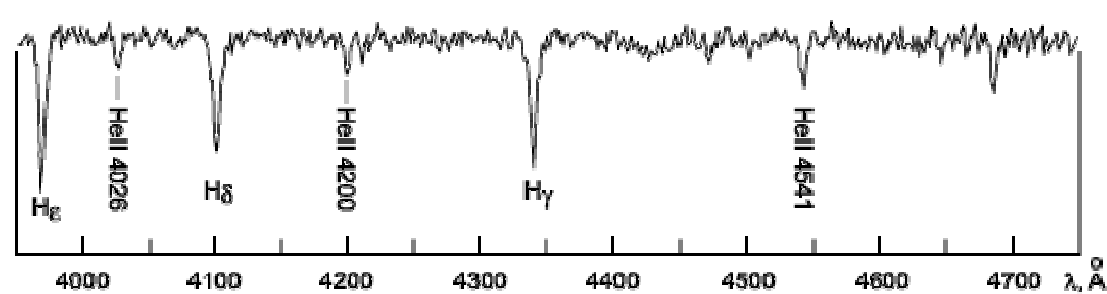


Рис.14.3.2. Серия Пикеринга иона HeII и бальмеровская серия водорода в спектре горячей звезды.

приведена регистрограмма горячей звезды спектрального класса O3. На рисунке хорошо видны линии серии Пикеринга и три бальмеровские линии.

Другой пример взаимодействия линий водорода и HeII даёт переход P_α иона HeII с длиной волны $\lambda=4686\text{\AA}$. Эта линия в спектрах звёзд может наблюдаться как эмиссионная, в то время как следующий член пашеновской серии — $\lambda 3202\text{\AA}$ — представляет собой обычную абсорбционную линию. Различие в поведении линий обусловлено тем, что населённость верхнего уровня ($n = 4$) линии $\lambda 4686$ может быть значительно увеличена путём поглощения сильной линии Ly_α водорода: длины волн переходов $2 \rightarrow 1$ атома водорода и $4 \rightarrow 2$ иона HeII очень близки. Этот процесс совершенно не влияет на излучение в линии $\lambda 3202\text{\AA}$, у которой оба уровня имеют нечётные номера (переход $5 \rightarrow 3$). Эффект взаимодействия ослабляется, если нижний уровень расположен достаточно высоко, например, $\lambda 5411$ и $\lambda 4541$. Последний используется в спектральной классификации звёзд как критерий температуры.

Многокозарядные ионы

Планетарная модель, как мы убедились, является весьма эффективным инструментом исследования атома водорода и водородоподобных ионов. Однако она остаётся весьма грубым приближением к реальной структуре атомов и, в особенности, многокозарядных ионов. В табл.14.3.3 сопоставлены экспериментальные и теоретические длины волн резонансного перехода Ly_α для нескольких водородоподобных ионов, представляющих интерес в астрономии. В первой строке таблицы приведены

Таблица 14.3.3. Длины волн резонансных переходов водородоподобных ионов

Ион	HeII	CVI	OVI	FeXXVI
$\lambda_{\text{теор}}, \text{\AA}$	303.80	33.75	18.99	1.797

$\lambda_{\text{эксп.}}, \text{Å}$	303.78	33.735	18.97	1.780
------------------------------------	--------	--------	-------	-------

спектроскопические символы ионов, во второй — длины волн перехода Ly_{α} , вычисленные по формулам

$$(3.1a) \quad E_{ij} = Z^2 \cdot Ry_Z \left(\frac{1}{j^2} - \frac{1}{i^2} \right),$$

$$(3.1b) \quad \lambda_{ij} = \frac{1}{Z^2 \cdot R_Z \left(\frac{1}{j^2} - \frac{1}{i^2} \right)}.$$

при $i=2$ и $j=1$, а в третьей — их экспериментальные значения. Если, согласно табл.14.1.3, у атома водорода расхождение с экспериментом наблюдается только в шестой значащей цифре, то у HeII — в пятой, у ионов CVI и OVIII — в четвёртой, а у FeXXVI — уже в третьей. Эти различия обусловлены релятивистскими эффектами, о которых мы писали в начале главы.

Исходя из (13.7.7), вычислим разность энергий второго и первого уровней:

$$\Delta E_R = \Delta E_B \left[1 + \frac{5}{16} (\alpha Z)^2 \right].$$

Множитель перед левой скобкой равен энергии перехода в нерелятивистском приближении, он получается из (3.1a) при $j=1$ и $i=2$:

$$\Delta E_B = \frac{3}{4} Ry Z^2.$$

Величина ΔE_B соответствует теоретической длине волны из второй строки табл.(14.3.3). Теперь мы можем уточнить длину волны перехода. Для этого сопоставим относительную величину релятивистской поправки

$$\delta R = \frac{\Delta E_R - \Delta E_B}{\Delta E_B}$$

с относительной разностью

$$\delta \lambda = \frac{\lambda_{\text{теор}} - \lambda_{\text{эксп}}}{\lambda_{\text{теор}}}$$

чисел из табл.(14.1.3). Результаты расчётов собраны в табл.(14.3.4).

Таблица 14.3.4. Сопоставление релятивистской поправки с экспериментом

Ион	HeII	CVI	OVIII	FeXXVI
$\delta \lambda$	6.6(–5)	6.0(–4)	1.05(–3)	9.5(–3)
δR	6.6(–5)	6.0(–4)	1.06(–3)	1.1(–2)

Сравнение второй и третьей строк таблицы показывает, что можно получить хорошее согласие теории с экспериментом, даже оставаясь в рамках полуклассической модели круговых орбит.

Заметное расхождение между δR и $\delta \lambda$ присутствует у иона железа. Несмотря на небольшую величину, оно неустранимо в рамках применяемой модели: расчёты по формуле (13.7.5) не приводят к улучшению результата. Причина заключается в принципиальном недостатке

планетарной модели с круговыми орбитами электронов: она связывает энергию уровня только с одним квантовым числом. В действительности верхний уровень резонансного перехода расщеплён на два подуровня. Такое расщепление называется *тонкой структурой* уровня. Именно оно вносит неопределённость в длину волны перехода. Тонкая структура есть у всех водородоподобных ионов, причём величина расщепления быстро растёт по мере увеличения заряда ядра. Для объяснения тонкой структуры нам придётся отказаться от простой модели круговых орбит. Оставаясь в рамках полуклассических представлений, перейдём к модели эллиптических орбит, которую называют *моделью Бора–Зоммерфельда*.