

Michał Niepielski*, Krzysztof Gruchała*, Wojciech Taraszka*,
Dariusz Żmuda*, Jacek Migdałek*

PROPOZYCJA ZESTAWU PROGRAMÓW KOMPUTEROWYCH WSPOMAGAJĄCYCH NAUCZANIE FIZYKI ATOMOWEJ W SZKOLE WYŻSZEJ

Współczesna fizyka, a szczególnie fizyka atomowa, operuje zaawansowanymi i wyszukаныmi metodami matematycznymi, a przeprowadzenie obliczeń wymaganych dla ilustracji niektórych zjawisk jest bardzo skomplikowane i pracochłonne. Z tego też powodu nauczanie mechaniki kwantowej i fizyki atomowej w szkołach wyższych i uniwersytetach nie jest łatwym zadaniem. Dla ułatwienia tego procesu wykorzystuje się możliwości komputera, w szczególności grafiki komputerowej. Zależności, związki pomiędzy różnymi wielkościami mechaniki kwantowej można często przedstawić w postaci wykresów, diagramów i zestawień. Pozwalają one uchwycić istotę problemu bez wnikania w skomplikowane obliczenia matematyczne, które wykonuje komputer, przedstawiając wyniki w najbardziej dogodnej postaci. Zestaw takich programów jest opracowywany w Wyższej Szkole Pedagogicznej w Krakowie i wykorzystywany jako uzupełnienie wykładów i ćwiczeń z przedmiotu "Wstęp do fizyki atomowej i molekularnej" na kierunku fizyka. Opracowano już 4 programy napisane w języku Basic na komputery Amstrad CPC 464 lub CPC 6128, ilustrujące niektóre zjawiska z zakresu fizyki atomowej - takie jak: efekty

* Instytut Fizyki i Informatyki, WSP w Krakowie

relatywistyczne w układach wodoropodobnych [9], struktura energetyczna układów helopodobnych [8], efekt Zeemana w słabym i silnym polu magnetycznym [3] oraz efekt Starka w słabym i silnym polu elektrycznym [2]*.

Mikrokomputery Amstrad CPC 464, CPC 664 i CPC 6128 powstały w brytyjskiej firmie AMSTRAD w pierwszej połowie lat osiemdziesiątych. Skrót CPC oznacza 'Colour Personal Computer'; pierwsza cyfra numeru, który po nim następuje, określa rodzaj zastosowanej zewnętrznej pamięci (4 - magnetofon, 6 - stacja dyskietek 3"); następne cyfry określają wielkość pamięci operacyjnej (64 i 128 kB). Jak z tego wynika model 6128 ze stacją dyskietek i 128 kB pamięci operacyjnej posiada największe możliwości. Wyposażony jest w interpreter rozszerzonej wersji języka Basic oraz dołączony na dyskietce system operacyjny CP/M. W Europie sprzedawany jest przez firmę SCHNEIDER, stąd często bywa określany jako "Schneider 6128".

Komputer ten składa się z następujących elementów:

- klawiatury, jednostki centralnej i stacji dyskietek 3" umieszczonych we wspólnej obudowie,

- monitora monochromatycznego GT 65 lub kolorowego CTM 664 z wbudowanym zasilaczem +5 i +12V.

Może współpracować z dowolną drukarką, która posiada wejście równoległe Centronics.

Wszystkie modele Amstrada posiadają dobre możliwości graficzne. Użytkownik może wybrać jeden z trzech trybów pracy ekranu:

- tryb 2 o największej rozdzielczości (ekran podzielony jest na 640x200 niezależnych punktów, co daje 80 znaków w 25 wierszach,

* Wszelkich informacji dotyczących możliwości wykorzystania opisanych programów udzielają autorzy (Instytut Fizyki i Informatyki WSP w Krakowie, ul. Podchorążych 2, tel. 37-47-77, wew. 263 lub 540).

dostępne jest tu jednoczesne użycie tylko 2 kolorów z 27 pozycyjnej palety)

- tryb 1 o średniej rozdzielczości (320x200 punktów, czyli 40 znaków w 25 wierszach, 4 kolory jednocześnie)

- tryb 0 o najmniejszej rozdzielczości (160x200 punktów, 20 znaków w 25 wierszach, 16 kolorów jednocześnie) [1]

Ponieważ ten typ komputera nie jest szczególnie rozpowszechniony, zamierzeniem autorów tego zestawu programów jest opracowanie w przyszłości wersji przeznaczonych na komputery klasy IBM-PC. Będzie to jednolity pakiet składający się z pięciu modułów, z których każdy dotyczy innego zagadnienia z zakresu fizyki atomowej i mechaniki kwantowej, stanowiący pod względem merytorycznym odpowiednik obecnie opracowanych programów. W niniejszym artykule omówimy możliwości i zastosowanie czterech programów.

EFEKTY RELATYWISTYCZNE W UKŁADACH WODOROPODOBNYCH

Program pozwala na wychwycenie podstawowych różnic pomiędzy teorią nierelatywistyczną opartą na równaniu Schrödingera, a teorią relatywistyczną wynikającą z równania Diraca [7,9]. Można w nim wyróżnić cztery zasadnicze części:

- I. Obliczanie wartości energii dla pierwszych dziesięciu poziomów energetycznych struktury prostej, tj. nierelatywistycznej, dla wybranej liczby porządkowej Z z przedziału 1-14 oraz rysowanie diagramów energii struktury prostej. Ekran jest tu podzielony na dwie części; w każdej z nich można uzyskać niezależnie wartości energii poziomów energetycznych lub diagram tych poziomów. Daje to możliwość jednoczesnego oglądania na ekranie wartości energii dla dwóch różnych pierwiastków, dwóch diagramów w tej samej skali lub diagramu i wartości energii.

II. Obliczanie wartości poprawek do energii wynikających z równania Diraca, a właściwie jego quasirelatywistycznego przybliżenia [9]: poprawki Sommerfelda, Darwina, S-L oraz ich sumy, czyli całkowitej poprawki relatywistycznej dla danego poziomu struktury prostej. Program graficznie przedstawia rozszczepienie wybranego poziomu struktury prostej (rys.1). Ponieważ szczególnie dla większych n nie jest ono dobrze widoczne z powodu ograniczonej rozdzielczości ekranu, istnieje możliwość obejrzenia osobno samych tylko poziomów Diraca w rozszerzonej skali.

III. Rysowanie części radialnej funkcji falowej będącej rozwiązaniem równania Schrödingera i równania Diraca dla $n = 1, 2, 3$ (ograniczenie to wynika ze znacznej komplikacji funkcji falowej dla wyższych n) oraz Z z przedziału 1-100. W przypadku dwuskładowej radialnej funkcji Diraca brana jest pod uwagę tylko duża składowa, bo tylko ona może być porównywana z radialną funkcją Schrödingera (rys.2). W tej części programu można też porównać małą i dużą składową funkcji radialnej Diraca dla stanu $n=2$ oraz $l=0$. Do wyboru użytkownika pozostaje Z , można więc zobaczyć, jak zachowuje się mała składowa w zależności od liczby porządkowej.

IV. Rysowanie wykresu zależności wartości średniej $\langle r \rangle$ od Z dla wybranego stanu, w przypadku relatywistycznym i nierelatywistycznym. Można tu zaobserwować kontrakcję relatywistycznej wartości $\langle r \rangle$ w porównaniu z nierelatywistyczną [7]. Ponadto w wydzielonej części ekranu można porównać liczbowe wartości $\langle r \rangle$ wyliczone z równania Schrödingera i równania Diraca dla wybranego Z z przedziału 1-100.

Program posiada strukturę liniową, to znaczy poszczególne jego części są realizowane kolejno z możliwością wielokrotnego powtórzenia każdej części, ale bez możliwości przeskoku do części

poprzedniej. Taki układ uzasadniony jest logicznym porządkiem, jaki tworzą jego części ustawione w tej właśnie a nie innej kolejności.

Program zapisany jest na kasecie magnetofonowej oraz na dyskietce 3", może więc być wykorzystany przy użyciu Amstrada CPC 464, CPC 664 lub CPC 6128. Dla zachowania czytelności wykresów wskazane jest użycie kolorowego monitora.

STRUKTURA ENERGETYCZNA UKŁADÓW HELOPODOBNYCH

Program ten pozwala zapoznać się ze strukturą energetyczną układów o dwóch elektronach oraz z wpływem oddziaływań wymiennych na tę strukturę.

Program w obecnej jego wersji jest dostępny dla użytkowników mikrokomputera Amstrad CPC 6128. Ze względu na swoją rozbudowaną strukturę nie może on być niestety wykorzystywany przy pomocy komputera pozbawionego stacji dysków, jakim jest Amstrad CPC 464.

Program składa się z czterech części zapisanych na dyskietce w czterech osobnych zbiorach.

Pierwsza z nich (zbiór STRUK.BAS zajmujący 2 kB pamięci) zawiera obok efektownej czołówki definicje polskich liter oraz innych znaków graficznych używanych następnie w licznych komentarzach pojawiających się w dalszych częściach programu.

Druga część (zbiór MENU.BAS - 1 kB pamięci) jest czymś w rodzaju klamry spinającej części trzecią i czwartą. Jedynie podczas wykonywania tej części możliwe jest zaniechanie dalszego wykonywania programu. Wyczerpanie wszystkich opcji i możliwości którejkolwiek z dalszych części kończy się powrotem do MENU.

Trzecia część programu (zbiór PODSTAW.BAS - 14 kB pamięci) poświęcona jest strukturze energetycznej stanów podstawowych $1s^2$ układów o różnej liczbie atomowej Z . Obliczanie parametrów struktur energetycznych atomów o więcej niż jednym elektronie (w tym także helopodobnych) nie jest możliwe w sposób dokładny - koniecznością staje się więc użycie metod przybliżonych. W tej części programu porównywane są ze sobą wyniki obliczeń uzyskane różnymi metodami: od rachunku zaburzeń (z dokładnością do pierwszego rzędu), poprzez najprostsze wersje metody wariacyjnej (w bazie Gaussa i Slatera - por [6]), do metody niepełnego rozdzielania zmiennych Pekerisa [5]. Wszystkie te wartości odniesione są do wyników pomiarów doświadczalnych odczytanych z tablic [4] w przypadku energii jonizacji albo do wyników otrzymanych relatywistyczną metodą pola samouzgodnionego Diraca-Focka w przypadku energii całkowitej lub całki kulombowskiej. Ta część programu obok prezentacji struktury energetycznej stanów podstawowych układów helopodobnych daje możliwość porównania dokładności kilku różnych, najczęściej stosowanych, przybliżonych metod rachunkowych.

W części czwartej, opisującej stany wzbudzone o konfiguracjach $1s n l$ dla $n > 1$ (zbiór WZBUDZ.BAS - 30 kB pamięci), program ogranicza się do przedstawienia jedynie wielkości obliczonych w rachunku zaburzeń z dokładnością do I rzędu. Wyniki pozostałych metod są dla stanów wzbudzonych trudno dostępne, gdyż obliczenia prowadzone przy ich pomocy narażają poważne problemy rachunkowe (zwłaszcza metoda niepełnego rozdzielania zmiennych).

W tej części program pozwala przesledzić konstrukcję termów singletowych i trypletowych dla wybranej konfiguracji i układu (określonych przez liczby n , l oraz Z) w formalizmie rachunku zaburzeń ($E = E_0 + K \pm W$, gdzie E_0 oznacza energię w zerowym przybliżeniu, K - całkę kulombowską, a W - całkę wymienną - por. [8]).

We wszystkich tych przypadkach, dla których w tablicach znajdują się dane doświadczalne, wyniki obliczeń teoretycznych porównywane są z wynikami pomiarów eksperymentalnych (rys.3). W tej części program pozwala zaobserwować również zależność energii całkowitej, energii jonizacji, całki kulombowskiej (K) lub wymiennej (W) od dowolnego spośród trzech parametrów: n , l lub Z . Wybór obserwowanej wielkości, zmiennej oraz określenie konfiguracji czy liczby atomowej Z , tam gdzie jest to konieczne, należy do użytkownika programu. Zależności te przedstawiane są w postaci diagramów słupkowych. Przykład takiego diagramu obrazuje rys.4.

EFEKT ZEEMANA STRUKTURY SUBTELNEJ I NADSUBTELNEJ W SŁABYCH I SILNYCH POLACH MAGNETYCZNYCH

Program dostarcza schematów poziomów energetycznych powstających na skutek zeemanowskiego rozszczepienia poziomów struktury subtelnej i nadsubtelnej w obecności słabych i silnych zewnętrznych stałych i jednorodnych pól magnetycznych [3].

Danymi wejściowymi programu są trzy liczby kwantowe: L , S i I . Oznacza to, że użytkownik wybiera term opisywany liczbami L i S oraz spin jądra I . Liczba L odpowiada wypadkowemu krętowi orbitalnemu powłoki, S natomiast wypadkowemu spinowi. Użytkownik ma możliwość wybrania następujących liczb L , S , I : $L=0,1, \dots, 10$; $S, I=0, 0.5, 1, 1.5, 2$. Ze względu na zbyt skomplikowane rachunki nie jest możliwe sprawdzenie przez komputer, czy zewnętrzne pole magnetyczne może być dla danego termu i układu atomowego uważane za silne czy słabe. Dlatego użytkownik nie wprowadza wartości tego pola jako danej wejściowej, ale w stosownym momencie decyduje arbitralnie czy pole zewnętrzne ma być uważane za silne czy słabe.

Dalsze uproszczenie treści programu spowodowane jest faktem, że nie jest możliwe jednoczesne przedstawienie na ekranie monitora wyraźnego rysunku rozszczepienia struktury subtelnej i nadsubtelnej, przy użyciu dopasowanej do wielkości ekranu bezwzględnej skali energii. Wynika to ze zbyt dużej różnicy w rzędach wielkości dla rozszczepień różnego rodzaju, również dla rozszczepień zeemanowskich. Z tego powodu poziomy struktury subtelnej rysowane są w innej skali energii niż poziomy struktury nadsubtelnej. W ramach poszczególnych multipletów i hipermultipletów lub rozszczepień zeemanowskich odległości między poziomami są jednak zgodne z regułami odległościowymi wynikającymi z odpowiednich związków teoretycznych [3,7]. Program nie daje więc odpowiedzi na pytanie, jak duże w skali energii są poszczególne rozszczepienia, pokazuje natomiast, które z poziomów ulegają rozszczepieniu i ile jest składowych, na które poszczególne poziomy rozszczepiają się. Zdej sprawę z reguł rządzących wzajemnymi odległościami między poziomami, dając obraz rozszczepień w odpowiednio dobranej skali oraz pokazuje, jakich liczb kwantowych używa się do opisu nowych poziomów energetycznych.

Działanie programu jako całości sprowadza się do realizacji trzydziestu dwóch przypadków szczegółowych odpowiadających 32 typom diagramów możliwych do uzyskania na ekranie monitora. Po wybraniu przez użytkownika danych wejściowych oraz zdecydowaniu, czego ma dotyczyć diagram, który chcemy obejrzeć, następuje zaklasyfikowanie go do jednego z przypadków. I tak na przykład diagram z rys.5 odpowiada przypadkowi: struktura subtelna i nadsubtelna bez pola, $S \neq 0$, $L \neq 0$, $I \neq 0$ i $S \neq L$. Natomiast diagram z rys.6 - efekt Zeemana struktury nadsubtelnej w silnym polu, $J \neq 0$, $I \neq 0$, czynnik Landego [3] $g \neq 0$.

Program podzielony jest na 3 zasadnicze bloki, którym można nadać następujące uproszczone nazwy: struktura termu bez pola,

efekt Zeemana struktury subtelnej, efekt Zeemana struktury nadsubtelnej. Układ programu nie jest liniowy. Po wyborze danych wejściowych (L,S,I) można przejść do realizacji dowolnego bloku. Dozwolone są też dowolne przejścia pomiędzy blokami z jednym wyjątkiem: nie można bezpośrednio przejść od diagramu efektu Zeemana struktury subtelnej lub nadsubtelnej do rysowania diagramu struktury termu bez pola, ponieważ blok pierwszy stanowi dodatek do zasadniczego programu i ma za zadanie tylko przypominać strukturę termu bez pola.

Program zapisany jest zarówno na kasecie magnetofonowej, jak i na dyskietce, co pozwala uruchamiać go na wszystkich opisanych na początku artykułu modelach Amstrada. Nie jest tu konieczne korzystanie z kolorowego monitora, gdyż wszystkie diagramy są rysowane w drugim trybie graficznym, który daje dobrą, ale monochromatyczną grafikę.

EFEKT STARKA - SYMULACJA KOMPUTEROWA

Program jest dostępny dla użytkowników komputera Amstrad CPC 6128. Ponieważ korzysta on w kilku miejscach z możliwości współpracy z dyskietką oraz z niektórymi rozszerzeniami języka BASIC, niemożliwe jest uruchomienie go na starszych modelach komputerów tej firmy pozbawionych stacji dysków ani też na CPC 664.

Program pozwala zaobserwować, co dzieje się z poziomami energetycznymi atomów umieszczonych w zewnętrznym stałym i jednorodnym polu elektrycznym. Rozszczepienie poziomów energetycznych w obecności zewnętrznego pola elektrycznego nazywa się efektem Starka. Jeżeli stan kwantowy atomu opisywany jest funkcją falową o określonej parzystości, to poprawka do energii wynikająca z uwzględnienia

oddziaływania elektronów atomu z polem elektrycznym w I rzędzie rachunku zaburzeń znika i dopiero II rząd rachunku zaburzeń daje poprawki różne od zera. Takie rozszczepienie zwykło się nazywać kwadratowym efektem Starka.

Funkcje falowe opisujące stany wzbudzone jonów wodoropodobnych w wyniku przypadkowej degeneracji kulombowskiej nie posiadają określonej parzystości. W ich przypadku I poprawka do energii jest różna od zera i ma miejsce tzw. liniowy efekt Starka. Wielkość rozszczepienia starkowskiego zależy od tego, czy pole elektryczne jest mocne, czy słabe (w przypadku bardzo silnych pól traktowanie oddziaływania elektronów atomu z polem trudno już uważać za małe zaburzenie) - fakt ten znalazł również swoje odbicie w niniejszym programie.

Program jest podzielony na trzy części (zapisywane jednak w tym samym zbiorze na dyskietce):

Pierwsza część jest poświęcona demonstracji przykładowych rozszczepień starkowskich w niektórych prostych przypadkach. Zawiera ona również wprowadzenie niektórych wielkości charakterystycznych dla liniowego i kwadratowego efektu Starka.

Druga część pozwala zilustrować na ekranie monitora rozszczepienie poziomów energetycznych wzbudzonych jonów wodoropodobnych w silnym polu elektrycznym (dla liniowego efektu Starka w układach wodoropodobnych nawet umiarkowanie silne pola spełniają warunek silnego pola - nie ma więc sensu rozpatrywać liniowego efektu Starka w słabym polu elektrycznym). Użytkownik może wybrać główną liczbę kwantową n z przedziału 1-100. Liczba atomowa Z jest na stałe przyjęta jako równa 3. Użytkownik może także prześledzić zmiany rozszczepienia starkowskiego zachodzące w miarę zwiększania natężenia pola w zakresie od 0 do 600 kV/cm (ze skokiem co 50 kV/cm).

W trzeciej części użytkownik może zobaczyć na ekranie rozszczepienie poziomów energetycznych różnych termów określonych liczbami kwantowymi L oraz S spowodowane kwadratowym efektem Starka. Wybór L i S oraz decyzja o natężeniu pola (słabe czy silne) należy do użytkownika.

Program pozwala także uzyskać powiększenie skali rysunku dla każdej z możliwych gałęzi rozszczepienia. Ciekawą własnością tego programu jest możliwość wydruku praktycznie każdego z rysunków na drukarce, czego nie można otrzymać w żadnym z pozostałych trzech programów. Przykładowe wydruki znajdują się na rys.7 i 8.

BIBLIOGRAFIA

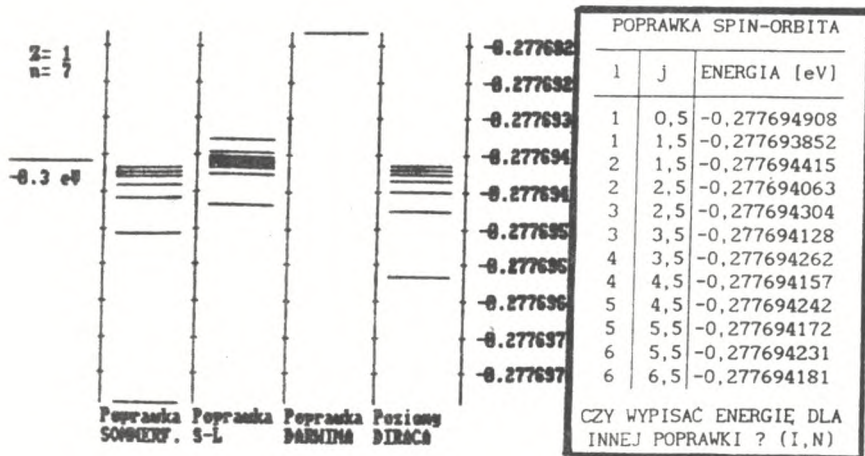
1. Krókowski A., *Amstrad CPC 6128 - podręcznik programisty*, Elektronik, Wrocław 1987.
2. Kuhn H.G., *Atomic spectra*, Academic press, Nowy Jork 1962.
3. Leś Z., *Wstęp do spektroskopii atomowej*, PWN, Warszawa 1969.
4. Moore C.E., *Atomic energy levels*, vol.I, NBS, Waszyngton 1971.
5. Pekeris C.L., *Phys.Rev.*, 112,1649 (1958).
6. Kręglewski M., Makarewicz J., Pyżalski R., Rychlewski J., *Zadania z chemii kwantowej*, PWN, Warszawa 1984.
7. Schiff L., *Mechanika kwantowa*, PWN, Warszawa 1977.
8. Sobelman I.I., *Vviedienje v teorju atomnych spiektrov*, Nauka, Moskwa 1977.
9. Woodgate G.K., *Struktura atomu*, PWN, Warszawa 1984.

Abstract

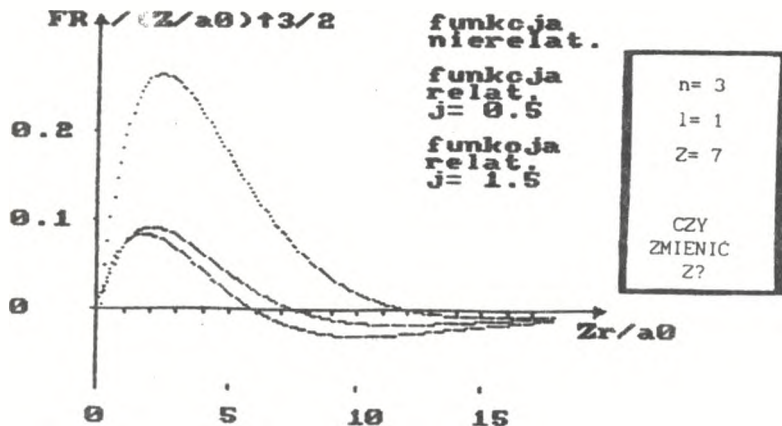
A package of four computer programs is described aimed to support lecturing of atomic physics at university level.

The programs, written in BASIC programming language for Amstrad computers, deal with some special topics of quantum and atomic physics such as relativistic effects in hydrogenic systems, energy structure of helium-like systems, Zeeman and Stark effects in strong and weak external fields.

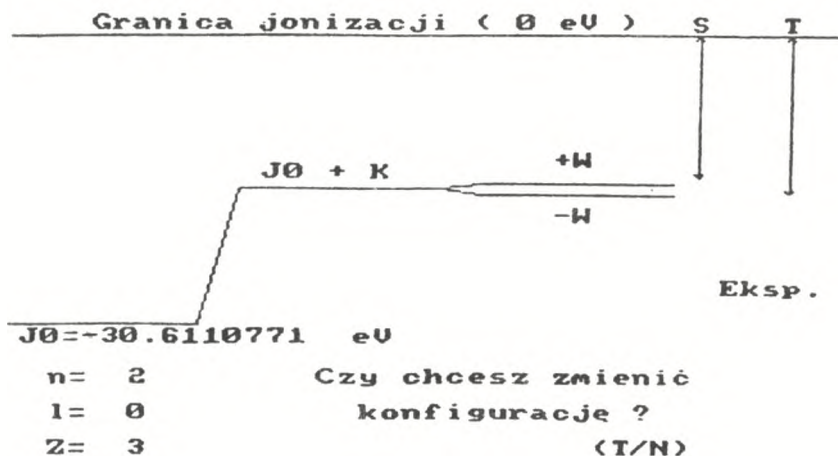
The authors hope that the programs presented here could be of some help to university teachers during their courses and tutorials in quantum theory and atomic physics.



Rys. 1. Rozszczepienie poziomu struktury prostej, wynikające z uwzględnienia poprawek relatywistycznych. Tabela po prawej stronie zawiera energie podpoziomów dla wybranej poprawki

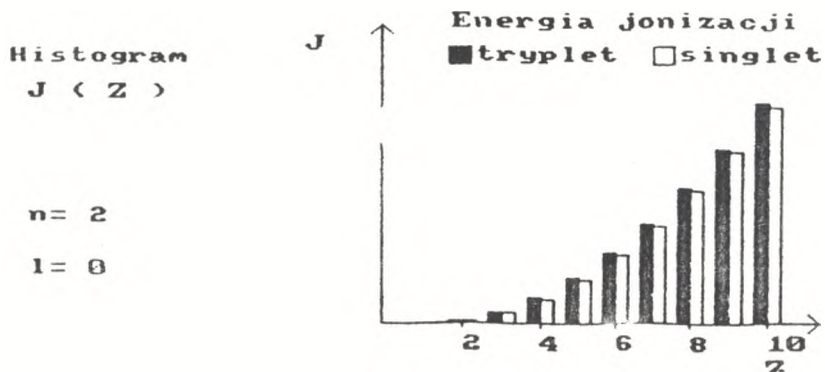


Rys. 2. Wykres radialnej części funkcji falowej. W przypadku funkcji relatywistycznych brana jest pod uwagę duża składowa

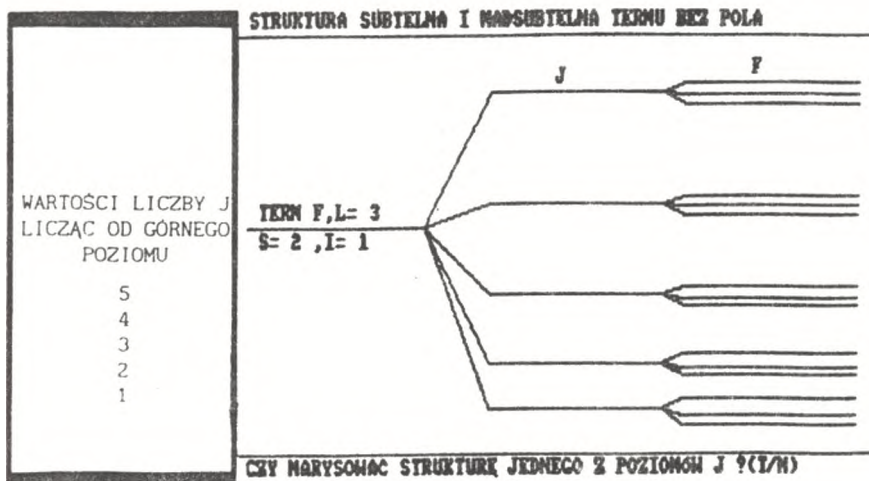


Rys. 3. Konstrukcja poziomów energetycznych konfiguracji $1s2s$ jednokrotnie zjonizowanego litu w formalizmie rachunku zaburzeń. Poziomy energetyczne odnoszone są do granicy jonizacji. J_0 oznacza energię jonizacji w zerowym przybliżeniu. Do tej wielkości dodawana jest wartość całki kulombowskiej (K) i na końcu uwzględniane jest rozszczepienie w wyniku dodania i odjęcia całki wymiennej (W).

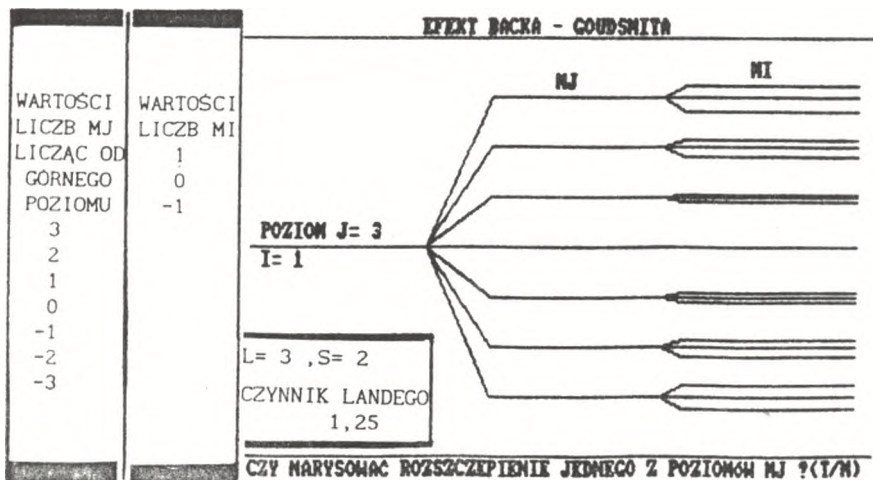
Z prawej strony pokazane są wartości eksperymentalne [4] energii jonizacji singletu $^1S(S)$ i trypletu $^3S(T)$ dla tej konfiguracji



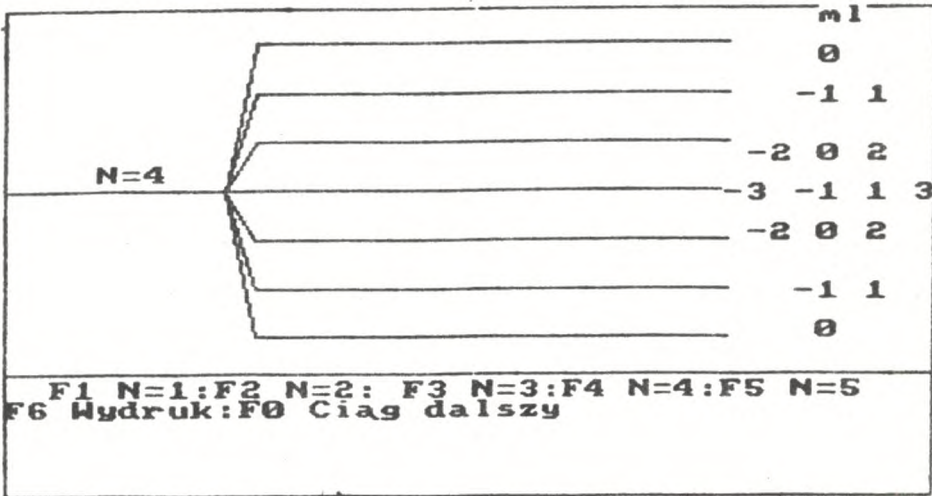
Rys. 4. Wykres zależności energii jonizacji konfiguracji $1s2s$ układów helopodobnych (stanów singletowych i trypletowych) od liczby atomowej Z



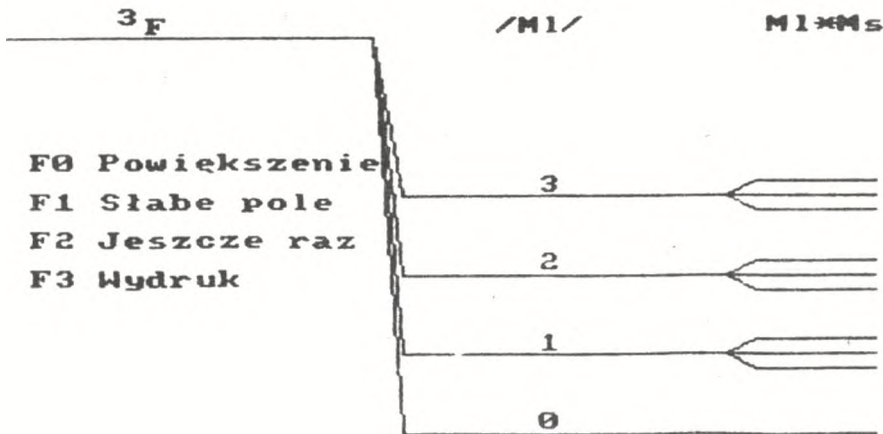
Rys. 5. Diagram poziomów energetycznych struktury subtelnej i nadsubtelnej termu bez obecności zewnętrznego pola magnetycznego. Proporcje między odległościami poziomów struktury subtelnej i nadsubtelnej nie są zachowane. W rzeczywistości odległości pomiędzy poziomami F są o wiele mniejsze



Rys. 6. Diagram poziomów zeemanowskich wybranego poziomu struktury subtelnej. Oprócz wartości liczb kwantowych podana jest wartość czynnika Landego



Rys. 7. Rozszczepienie poziomu energetycznego o głównej liczbie kwantowej $n=4$ w silnym polu elektrycznym spowodowane liniowym efektem Starka dla jonu wodoropodobnego o liczbie atomowej $Z=3$



Rys. 8. Rozszczepienie termu 4F w silnym zewnętrznym polu elektrycznym spowodowane kwadratowym efektem Starka