



大学物理现代技术实验——氢氘光谱

于洪飞 PB23020640[†]

[†] 中国科学技术大学 物理学院, 合肥 230026

摘要 本实验基于玻尔模型和巴尔末公式, 通过测量氢氘原子巴尔末系的谱线, 利用光栅光谱仪获得其对应波长, 并进行谱线校准、线性拟合等处理, 从而精确计算氢氘的里德堡常数。进一步, 根据同位素位移与核质量的关系, 推导并计算了氢氘核质量比以及质子电子质量比。实验中采用汞灯进行光谱仪波长校正, 使用拟合函数对氢氘谱线进行校正处理, 最终获得较高精度的氢氘谱线及其相关常数, 验证了同位素位移的物理机制, 并体现了光谱精密测量在原子物理研究中的基础作用。

关键词 氢氘光谱; 原子光谱; 同位素位移; 光栅光谱仪; 里德堡常数

College Physics Experiment III – Hydrogen-Deuterium Spectrum

YU HongFei[†]

[†]School of Physical Sciences, University of Science and Technology of China, Hefei 230026

Abstract

This experiment is based on the Bohr model and the Balmer formula. By measuring the Balmer series spectral lines of hydrogen and deuterium atoms using a diffraction grating spectrometer, and performing wavelength calibration and linear fitting, the Rydberg constants of hydrogen and deuterium were accurately determined. Furthermore, based on the relationship between isotope shifts and nuclear masses, the mass ratio of hydrogen and deuterium nuclei, as well as the proton-to-electron mass ratio, were derived and calculated. A mercury lamp was used for wavelength calibration of the spectrometer, and a fitted correction function was applied to the hydrogen-deuterium spectral lines. The experiment ultimately yielded high-precision spectral data and corresponding physical constants, verified the physical mechanism of isotope shift, and demonstrated the fundamental role of precision spectroscopy in atomic physics research.

Keywords Hydrogen-Deuterium Spectrum; Atomic Spectrum; Isotope Shift; Diffraction Grating Spectrometer; Rydberg Constant

引言

人类对原子光谱的认知可以追溯到 19 世纪。早在 19 世纪初期, 夫琅和费 (Joseph von Fraunhofer) 就在渥拉斯顿 (William Hyde Wollaston) 的基础上^[1] (Wollaston, 1802) 系统的观察和记录了太阳光谱中的暗线 (Fraunhofer, 1814), 奠定了吸收光谱的基石; 到了 19 世纪中叶, 基尔霍夫 (Gustav Robert Kirchhoff) 和本生 (Robert Wilhelm Bunsen) 发现了不同元素加热时发出的不同的分立谱线^[2] (Kirchhoff, 1862), 成为分析光谱学的里程碑。直到 19 世纪末期, 人们从最简单原子——氢原子的研究中逐渐找到谱线的规律, 1885 年巴尔末 (Johann Jakob Balmer) 给出了氢原子光谱的经验公式^[3], 揭示了原子谱线的规律性, 随后, 里德堡 (Johannes Rydberg) 对巴尔末公式推广, 引入了里德堡常数, 对氢原子及类氢原子的光谱给出了良好的解释^[4]。

原子光谱打开了人类对精细结构与超精细结构

的大门, 20 世纪初, 随着原子理论的逐渐成熟, 人们对原子光谱的形成做出了精确的理论解释^[5], 提出了越来越精确的理论模型。从玻尔 (Niels Bohr) 的轨道模型到索末菲 (Arnold Sommerfeld) 的修正, 再到量子力学的建立, 人们对原子光谱的认知已经趋于成熟。

利用原子光谱反应的精细结构, 我们可以区分同一元素不同的同位素。不同的同位素具有相同的质子数, 但中子数却不相同, 反应在谱线上就是同一级谱线会发生位移, 同位素谱线位移和同位素核质量密切相关, 且原子序数越小, 不同的同位素的核质量相差的比值越大, 位移现象越明显。因此我们可以通过测量原子谱线的位移来确定氢及其同位素氘相对的性质。^[6]

1 理论模型与实验设计^[6-7]

1.1 理论模型

1.1.1 氢原子光谱

氢原子中电子跃迁可以产生许多光谱, 其中非常典型的四条谱线分别是:

表 1-1: 氢原子巴尔末系的四条谱线.

谱线	颜色	波长 (Å)
H _α	红	6562.10
H _β	深绿	4860.74
H _γ	青	4340.10
H _δ	紫	4101.20

巴尔末提出了巴尔末公式对其进行了拟合:

$$\lambda = B \frac{n^2}{n^2 - 4}, \quad n = 3, 4, \dots \quad (1)$$

其中系数 $B = 3645.6 \text{ Å}$. 令波数 $\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda}$ 得到:

$$\tilde{\nu} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 3, 4, \dots \quad (2)$$

其中 $R = \frac{4}{B}$ 称为里德堡常数.

不同原子核对应的里德堡常数并不相同, 我们可以通过原子物理中的半经典近似得到 R 精确的理论值. 赖曼 (Theodore Lyman IV) 提出, 将巴尔末公式中的 2 替换成任意整数, $n > m$ 时, 巴尔末公式可以很好的满足其他谱线的波长, 在玻尔模型中, 这体现为电子在不同能级的跃迁:

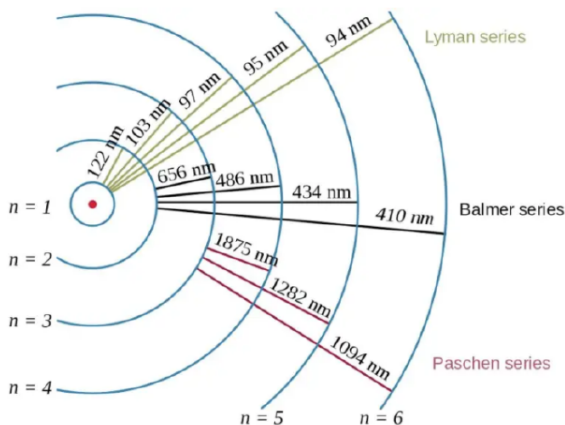


图 1: 电子能级跃迁示意图.

在玻尔模型中我们可以计算氢原子的里德堡常数以及核质量对里德堡常数的影响, 并且并不会由于半经典模型而造成误差^[8].

设电子在能级 n 时的能量为 E_n , 考虑电子跃迁释放的光子能量:

$$\begin{aligned} h\nu &= E_m - E_n \\ &= hc\tilde{\nu} = hcR \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) = E_m - E_n. \end{aligned}$$

得出电子在能级 n 的能量

$$E_n = -\frac{hcR}{n^2}. \quad (3)$$

为了考虑原子核质量的影响, 我们假设原子核质量为 M , 电子质量 m_e , 并在两体参考系中考虑电子的能量, 此时我们用约化质量 $\mu = \frac{m_e M}{m_e + M}$ 代替电子质量 m_e . 在经典模型中, 电子受库仑力围绕原子核近似做圆周运动:

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} = \mu \frac{v^2}{r}. \quad (4)$$

其中 r 为电子半径, ϵ_0 为真空介电常数, e 为电子电荷, v 为电子速度. 电子能量写为动能 T 与势能 V 的和:

$$E = T + V = \frac{1}{2} \mu v^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{2r}. \quad (5)$$

通过公式 (5) 与公式 (3) 联立可以得到电子轨道半径与里德堡常数的关系为:

$$r_n = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{2hcR} n^2 = \frac{\alpha}{4\pi R} n^2. \quad (6)$$

其中 $\alpha \equiv \frac{e^2}{2hc}$ 为精细结构常数.

现在考虑玻尔理论中的角动量量子化:

$$L = \mu v r = n\hbar.$$

与向心力公式 (4) 联立得到:

$$\frac{\mu e^2 r}{4\pi\epsilon_0} = n^2 \hbar^2 \implies r = \frac{\hbar}{\mu \alpha c} n^2. \quad (7)$$

最后与公式 (6) 联立, 得到里德堡常数的表示:

$$R = \frac{\alpha^2 \mu c}{4\pi \hbar}. \quad (8)$$

1.1.2 同位素位移

当 $M \rightarrow \infty$, $\mu \rightarrow m_e$ 时, 里德堡常数退化为一个确切的常数¹, 我们记为 R_∞ :

$$R_\infty = \frac{\alpha^2 m_e c}{4\pi \hbar}. \quad (9)$$

由约化质量的定义可以得出氢原子里德堡常数 R_H 和其同位素氘的里德堡常数 R_D 可以分别写为:

$$R_H = \frac{R_\infty}{1 + \frac{m_e}{M_H}}, \quad (10)$$

$$R_D = \frac{R_\infty}{1 + \frac{m_e}{M_D}}. \quad (11)$$

其中 M_H, M_D 分别为氢核和氘核的质量.

因此我们求出氢氘核质量比为:

$$\frac{M_D}{M_H} = \frac{\frac{R_D}{R_H}}{1 - \left(\frac{R_D}{R_H} - 1\right) \frac{M_H}{m_e}}. \quad (12)$$

同理我们还可以大致计算谱线位移:

$$\Delta\lambda \equiv \lambda_H - \lambda_D = \frac{\left(\frac{1}{R_H}\right)}{\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right)} \approx \frac{m_e}{2M_H} \lambda_H. \quad (13)$$

从而导出质子和电子的质量比:

$$\frac{M}{m_e} = \frac{\lambda}{2\Delta\lambda}. \quad (14)$$

1.2 实验内容

1.2.1 氢氘核的里德堡常数

第一步, 我们可以利用光谱仪测量氢氘灯谱线, 以此得到氢氘灯的光谱 $H_\alpha, H_\beta, H_\gamma, H_\delta$, 对应能级 $n = 3, 4, 5, 6$ 向能级 $n = 2$ 的跃迁. 通过巴尔末公式 (1.1.1):

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right). \quad (15)$$

对 $\frac{1}{\lambda} - \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$ 进行线性拟合, 进而求出 R .

1.2.2 氢氘核质量比

利用公式 (12), 带入前一步得到的氢氘核的里德堡常数, 带入质子-电子质量比 (作为已知量) 进行计算, 其中质子-电子质量比我们取^[9]:

$$\frac{M}{m_e} = 1836.1527.$$

1.2.3 质子电子质量比

我们最后可以利用公式 (14) 来粗略计算质子-电子质量比, 并与前一问的理论值做比较. 考虑到在公式 (14) 中我们做了以下近似:

$$\lambda_\infty \approx \lambda_H, \quad M_D \approx 2M_H.$$

其中 λ_H 是 $R = R_\infty$ 对应的谱线波长. 因此我们得到的结果与理论值会有较大误差.

1.3 实验设计

1. 首先利用汞灯进行光谱误差的校正, 我们已经知道汞灯几条明显的谱线的长度, 可选用任意一条谱线对光谱仪相对标准进行标定;
2. 测量汞灯各条特征谱线的波长, 记录数据, 拟合测量数据与标准数据, 得到光谱仪的校正函数;
3. 测量氢氘灯的光谱, 调整夹缝长度与负高压来突出数据, 直到在 $H_\alpha, H_\beta, H_\gamma, H_\delta$ 的范围内测到明显的双峰, 记录数据, 其中强度较大的峰为氢谱线, 强度较低的为氘谱线 (实际上可以计算, 波长相对较大的峰为氢谱线, 波长相对较低的峰为氘谱线);
4. 利用校正函数对氢氘谱线记录的数据进行校正, 绘制 $\frac{1}{\lambda} - \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$ 线性拟合图, 计算斜率得到里德堡常数 R ;
5. 计算实验内容中的氢氘核质量比、质子电子质量比;
6. 分析数据误差来源, 做出解释.

¹ 此处认为电子质量为常数.

2 实验仪器



图 2: 实验装置正视图.

2.1 光栅光谱仪

本试验采用光栅光谱仪进行谱线数据的测量，光栅光谱仪是通过光栅等分光器将光线按照不同波长分离的仪器，其具体原理如下图：

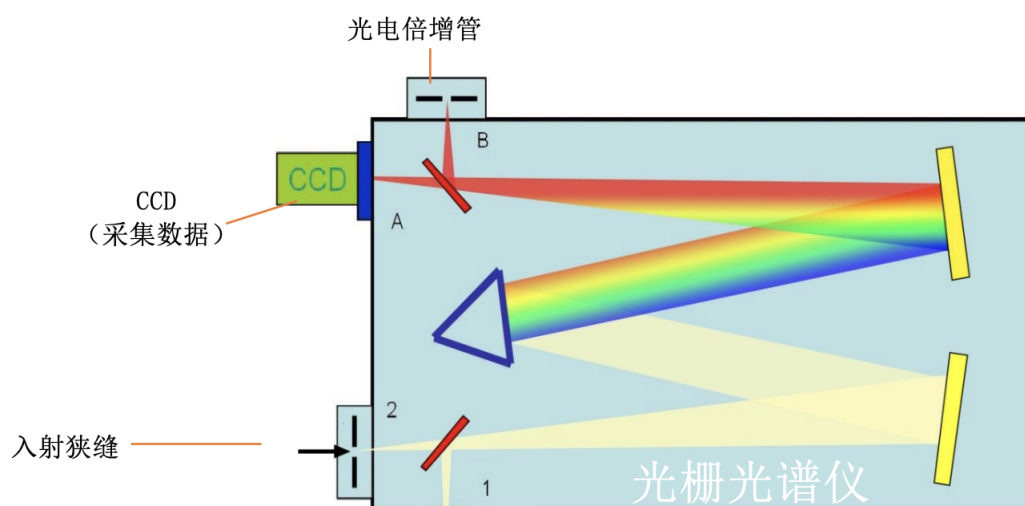


图 3: 光栅光谱仪原理.

1. 光线从入射狭缝入射；
2. 经过反射镜、闪耀光栅（或其他分光器件）将不同波长的光分离，闪耀光栅会使最大衍射能量集中在所需级次（波长）上^[10]；

3. 光电倍增管放大微弱信号，CCD 收集相关信号；
4. 信号被电脑接受，被特定程序处理绘制出光谱图²。

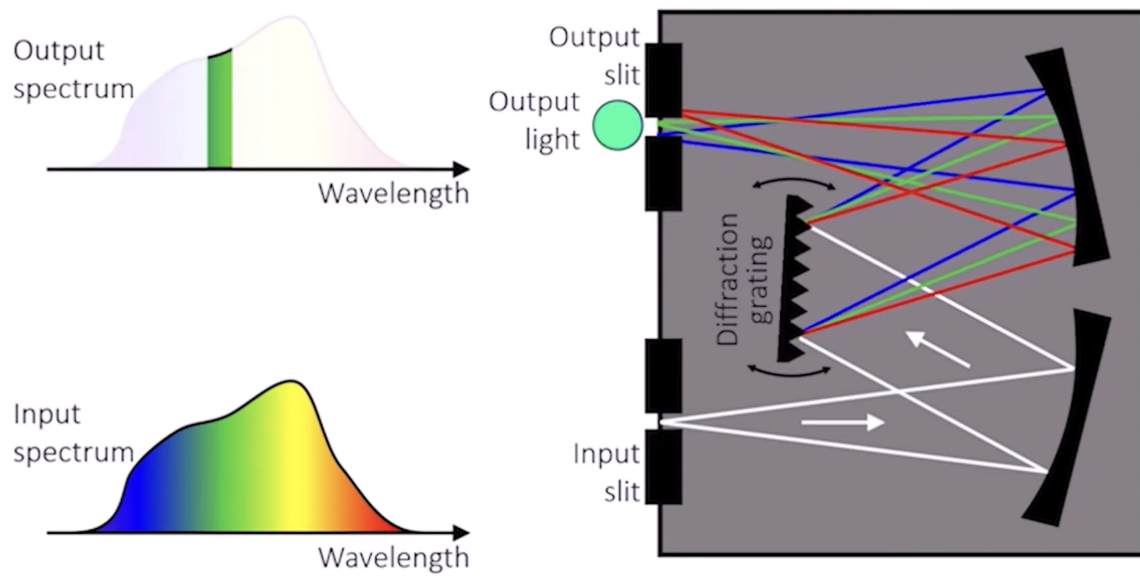


图 4: 光栅光谱仪分光效果.

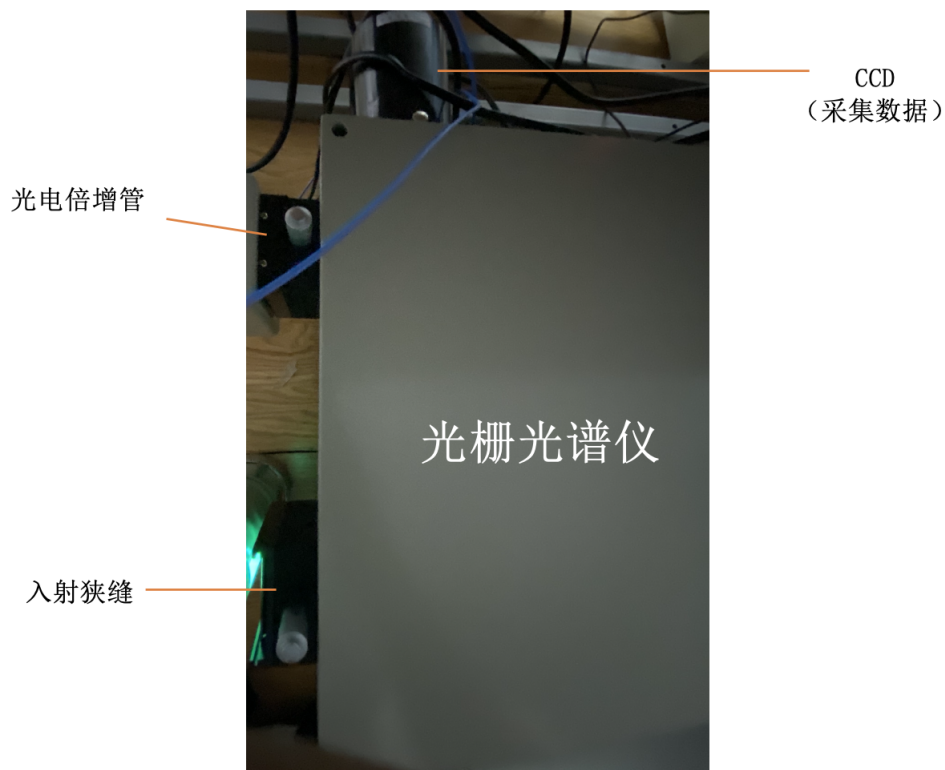


图 5: 实验用的光栅光谱仪.

² 图源: <https://nireos.com/application/how-to-measure-the-spectrum-of-the-light/>

2.2 氢氖灯

氢氖灯的光较弱，实验仪器中的氢氖灯在光源后置了一个反射镜用来聚光，实验中应寻找反射镜的焦平面，使得像点最亮，保证入射时狭缝在焦平面内，以此确保入射光强度最大。

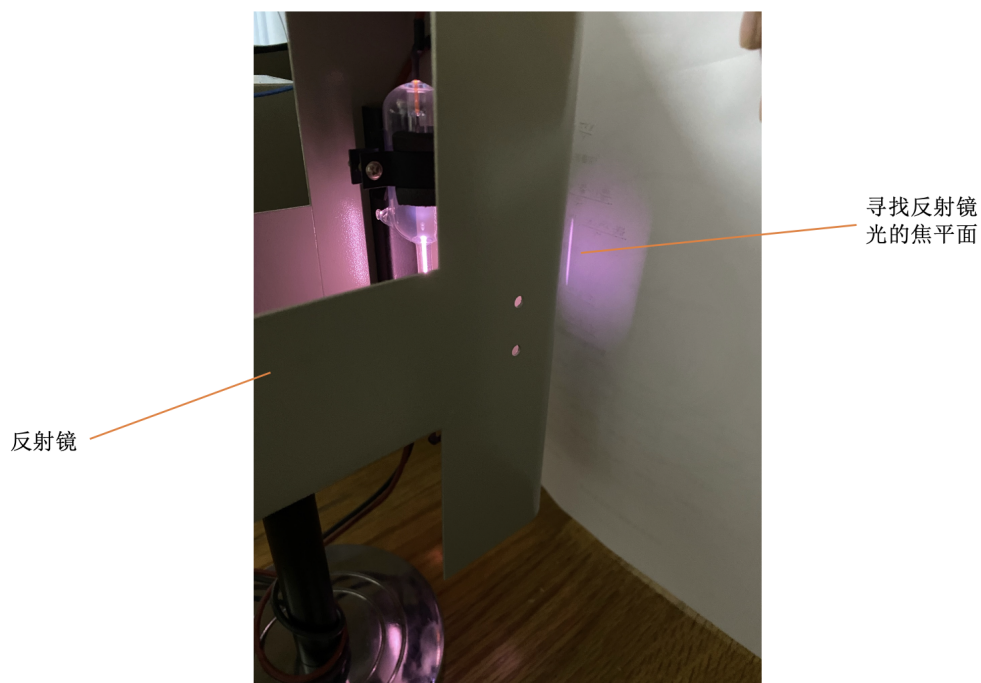


图 6: 氢氖灯及其焦平面.

3 实验数据分析

3.1 测量数据

表 1: 汞灯谱线测量数据.

汞灯谱线序号	1	2	3	4	5	6	7	8	9
波长/nm	364.96	365.45	366.30	404.64	407.81	435.81	546.25	577.16	579.44

表 2: 氢氖灯谱线测量数据.

能级 n	3	4	5	6
波长 λ_H /nm	656.690	486.385	434.050	410.195
波长 λ_D /nm	656.530	486.225	433.940	410.075

3.2 数据校准

表 3: 汞灯谱线标准数据.

汞灯谱线序号	1	2	3	4	5	6	7	8	9
波长/nm	365.02	365.48	366.30	404.66	407.78	435.84	546.07	576.96	579.09

将汞灯谱线的标准数据与测量数据进行线性拟合，得到拟合图像及其方程：

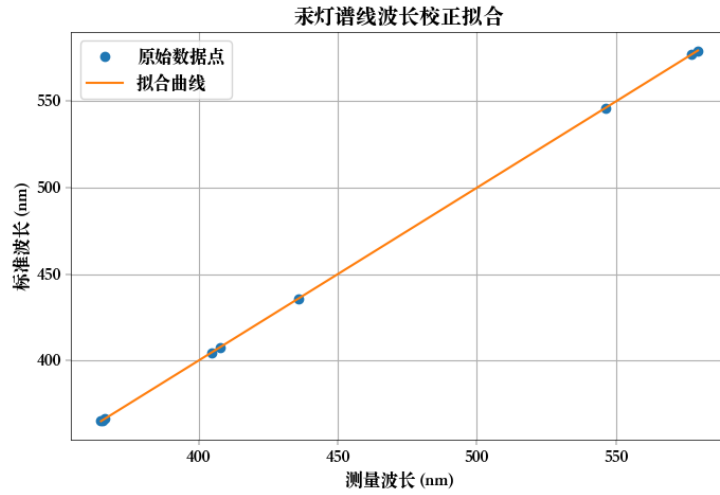


表 4: 汞灯误差线性拟合图像.

$$f(x) = 0.9986x + 0.5691. \quad (16)$$

利用得到的拟合方程 (16) 对氢氙灯谱线测量数据进行校准, 得到氢氙灯谱线校准数据:

表 5: 氢氙灯谱线校准数据.

能级 n	3	4	5	6
波长 λ_H/nm	656.328	486.264	434.003	410.182
波长 λ_D/nm	656.168	486.104	433.894	410.062

4 实验结果与误差分析

4.1 氢氙谱线里德伯常数

利用光谱仪测量氢氙灯谱线的数据, 与对应的能级跃迁, 通过巴尔末公式 (1.1.1):

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right).$$

对 $\frac{1}{\lambda} - \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$ 进行线性拟合, 进而求出 R :

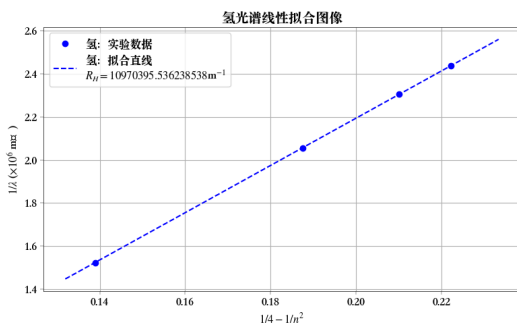


图 7: 氢光谱巴尔末公式拟合.

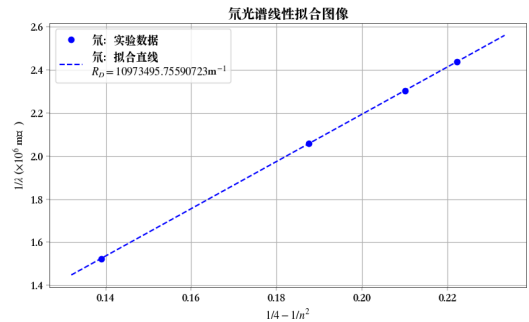


图 8: 氙光谱巴尔末公式拟合.

$$R_H = 1.0970396 \times 10^7 \text{ m}^{-1},$$

$$R_D = 1.0973496 \times 10^7 \text{ m}^{-1}.$$

相比于参考值^[7]:

$$R_{H-th} = 1.0967758 \times 10^7 \text{ m}^{-1},$$

$$R_D = 1.0972227 \times 10^7 \text{ m}^{-1}.$$

误差分别为 0.24% 和 0.01%.

4.2 氘核质量比

利用公式 (12)，带入前一步得到的氘核的里德堡常数，带入质子-电子质量比（作为已知量）进行计算，其中：

$$\frac{M}{m_e} = 1836.1527, \quad \frac{R_D}{R_H} = 1.00028260,$$

$$\frac{R_D}{R_H} - 1 = 2.8260 \times 10^{-4}.$$

得到：

$$\frac{M_D}{M_H} = \frac{\frac{R_D}{R_H}}{1 - \left(\frac{R_D}{R_H} - 1 \right) \frac{M_H}{m_e}}$$

$$= \frac{1.00028260}{1 - 2.8260 \times 10^{-4} \times 1836.1527}$$

$$= 2.0791.$$

误差约为 3.955%。

4.3 质子电子质量比

利用公式 14：

$$r = \frac{M}{m_e} = \frac{\lambda}{2\Delta\lambda}.$$

其中 r (ratio) 表示质子-电子质量比，我们可以对 $\lambda - \Delta\lambda$ 做线性拟合：

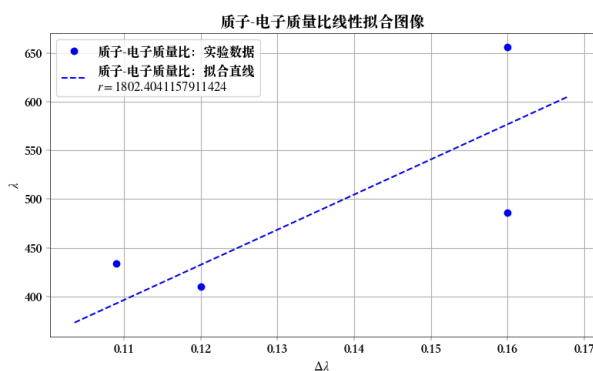


图 9: 质子-电子质量比计算拟合.

最终结果为：

$$r = 1802.4041.$$

误差大约为 1.838%，尽管数据点在测量上会有误差，但统计上有着良好的结果。

5 思考与总结

思考题

1. 棱镜也是一种色散元件，是否能用棱镜光谱仪测量氘核的同位素位移呢？

不能用棱镜光谱仪测量氘核的同位素位移，光栅光谱仪分辨率满足：

$$R_1 = \frac{\lambda}{\Delta\lambda} = nN \sim 10^5.$$

但棱镜分辨率^[11]

$$R_2 \propto \frac{d\theta}{d\lambda} \sim 10^3 \ll R_1$$

对于氘核光谱位移而言，位移 $\frac{\lambda}{\Delta\lambda} \sim \frac{10^3}{10^{-1}} = 10^4$ ，棱镜光谱仪分辨率无法分辨，因此无不能用棱镜光谱仪测量氘核的同位素位移。

2. 若要测量其他元素同位素光谱，相对氢原子来说对测量光谱仪器有什么要求？为什么？

(1) 从核质量角度来讲，约化质量 $\mu = \frac{m_e M}{m_e + M}$ ，核的质量越大，同位素之间的约化质量 μ, μ' 相差越小，谱线位移越小，对光谱仪的分辨率要求越高，可以考虑高阶光栅 (echelle grating) 等更精密的分光仪器^[12]；

(2) 从原子序数角度来讲，原子序数越大，核外电子越多，能级结构越复杂，产生的谱线更容易重叠^[13]；

(3) 电子的自旋-轨道耦合可能掩盖同位素位移^[7]，需要更高精度的谱仪进行谱线拆分。

3. 在计算 R_H, R_D 时，应该以真空中的波长代入公式计算，但实验中的测量是在空气中进行的。若空气的折射率为 $n = 1.00029$ ，请推导波长修正公式，并将修正后的 R_H, R_D 值与公认值比较。

光在介质中波长与折射率满足：

$$\lambda = \frac{\lambda_0}{n}.$$



其中 λ_0 是对应频率的光在真空中的波长, 因此修正公式应为:

$$\lambda' = \lambda_0 \equiv n\lambda.$$

巴尔末公式中:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \\ \rightarrow \frac{1}{n\lambda} = R_{\text{precise}} \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) = \frac{R}{n} \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right).$$

因此修正可以写为: $R_{\text{precise}} = \frac{R}{n}$, 修正后的氢氘里德伯常数为:

$$R_{\text{H-pre}} = 1.0967216 \times 10^7 \text{ m}^{-1},$$

$$R_{\text{D-pre}} = 1.0970314 \times 10^7 \text{ m}^{-1}.$$

相比于标准值的误差分别为 0.0174% 和 0.0049%, 精度十分高.

总结

本实验从理论模型、仪器操作到数据处理, 系统地完成了对氢氘原子光谱的测量与分析, 取得了较为理想的实验结果. 通过对光谱仪进行误差校准, 我们有效提高了测量的准确性. 氢氘谱线的分辨效果良好, 拟合得到的氢、氘的里德堡常数与文献值高度一致, 相应计算出的核质量比、质子电子质量比也在合理误差范围内, 体现了实验方案的可行性与测量手段的精确性.

根据实验环境, 可以推测实验过程中的主要误差来源: 光源不稳定、谱线重叠、空气折射率未考虑引起的系统误差等. 若能进一步提升光谱仪分辨率 (如采用高阶光栅), 并在真空条件下测量, 将能有效降低系统误差, 提高最终结果的可靠性.

6 致谢

在《大学物理现代技术实验》课程“氢氘光谱”实验过程中, 我得到了岳盈老师的耐心指导与悉心帮助. 在实验设计、数据处理及报告撰写等方面, 岳老师给予了我极大的支持与鼓励, 特此致谢.

同时, 感谢中国科学技术大学提供良好的实验条件与学习平台, 使本实验得以顺利完成.

参考文献

- [1] WOLLASTON W H. Xii. a method of examining refractive and dispersive powers, by prismatic reflection[J]. Philosophical transactions of the Royal Society of London, 1802(92): 365-380.
- [2] KIRCHHOFF G. Untersuchungen über das sonnen-spectrum und die spectren der chemischen elemente: Vol. 1[M]. Dümmler, 1862.
- [3] BALMER J J. Notiz über die spectrallinien des wasserstoffs[J]. Annalen der physik, 1885, 261 (5): 80-87.
- [4] RYDBERG J R. Recherches sur la constitution des spectres d'émission des éléments chimiques [M]. Kungliga Vetenskapsakademien, 1890.
- [5] 褚圣麟. 原子物理学[M]. 高等教育出版社, 1979: 62-70.
- [6] KING W H. Isotope shifts in atomic spectra [M]. Springer Science & Business Media, 2013.
- [7] 中国科学技术大学精品教材: 近代物理学 [M/OL]. 中国科学技术大学出版社, 2008. <https://books.google.com/books?id=4aw9QwAACAAJ>.
- [8] BIRABEN F. Spectroscopy of atomic hydrogen: How is the rydberg constant determined? [J]. The European Physical Journal Special Topics, 2009, 172(1): 109-119.
- [9] GRÄFF G, KALINOWSKY H, TRAUT J. A direct determination of the proton electron mass ratio[J]. Zeitschrift für Physik A Atoms and Nuclei, 1980, 297: 35-39.
- [10] BORN M, WOLF E, BHATIA A. Principles of optics[M/OL]. Cambridge University Press,



2019. <https://books.google.com/books?id=FsS-DwAAQBAJ>.
- [11] FOWLES G. Dover books on physics series: Introduction to modern optics[M/OL]. Dover Publications, 1989. <https://books.google.com/books?id=SL1n9TuJ5YMC>.
- [12] KELIHER P N, WOHLERS C C. High resolution atomic absorption spectrometry using an echelle grating monochromator[J]. Analytical Chemistry, 1974, 46(6): 682-687.
- [13] HERZBERG G. Atomic spectra and atomic structure[M]. Read Books, 2008.



A 实验数据记录表

物理实验教学中心

于洪飞

PB23020640

实验课堂提交数据处理模板

实验数据表格:

汞灯:

汞灯谱线序号	1	2	3	4	5
波长/nm	364.96	365.45	366.30	404.64	407.81
汞灯谱线序号	6	7	8	9	
波长/nm	435.81	546.25	577.16	579.44	

氢氘灯测量数据:

能级 n	3	4	5	6
波长 λ_H /nm	656.690	486.385	434.050	410.195
波长 λ_D /nm	656.530	486.225	433.940	410.075

计算氢氘谱线的里德伯常数:

$$\frac{1}{\lambda_H} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

$$\begin{array}{c} n \\ R_H \end{array} \begin{array}{ccccc} 3 & 4 & 5 & 6 \\ 1097100 & 109652 & 109709 & 109703 \\ (\times 10^7 m^{-1}) \end{array}$$

$$\bar{R}_H = 109676 \times 10^7 m^{-1}$$

$$\frac{1}{\lambda_D} = R_D \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

$$\begin{array}{c} n \\ R_D \end{array} \begin{array}{ccccc} 3 & 4 & 5 & 6 \\ 109667 & 109688 & 109736 & 109736 \\ (\times 10^7 m^{-1}) \end{array}$$

$$\bar{R}_D = 1.09706 \times 10^7 m^{-1}$$

氢氘核质量比:

$$\frac{M_D}{M_H} = \frac{m}{M_H} \cdot \frac{\lambda_H}{(\lambda_D - \lambda_H + \lambda_D \frac{m}{M_H})} = 2.162 \quad (n=6)$$

$$\frac{m}{M_H} = \frac{1}{1836.1527}$$

质子电子质量比:

$$\frac{M}{m} = \frac{\lambda}{2\Delta\lambda} = 1709.15 \quad (\lambda = 410.195, \Delta\lambda = 0.12 nm)$$

于洪飞

B 光谱仪数据记录

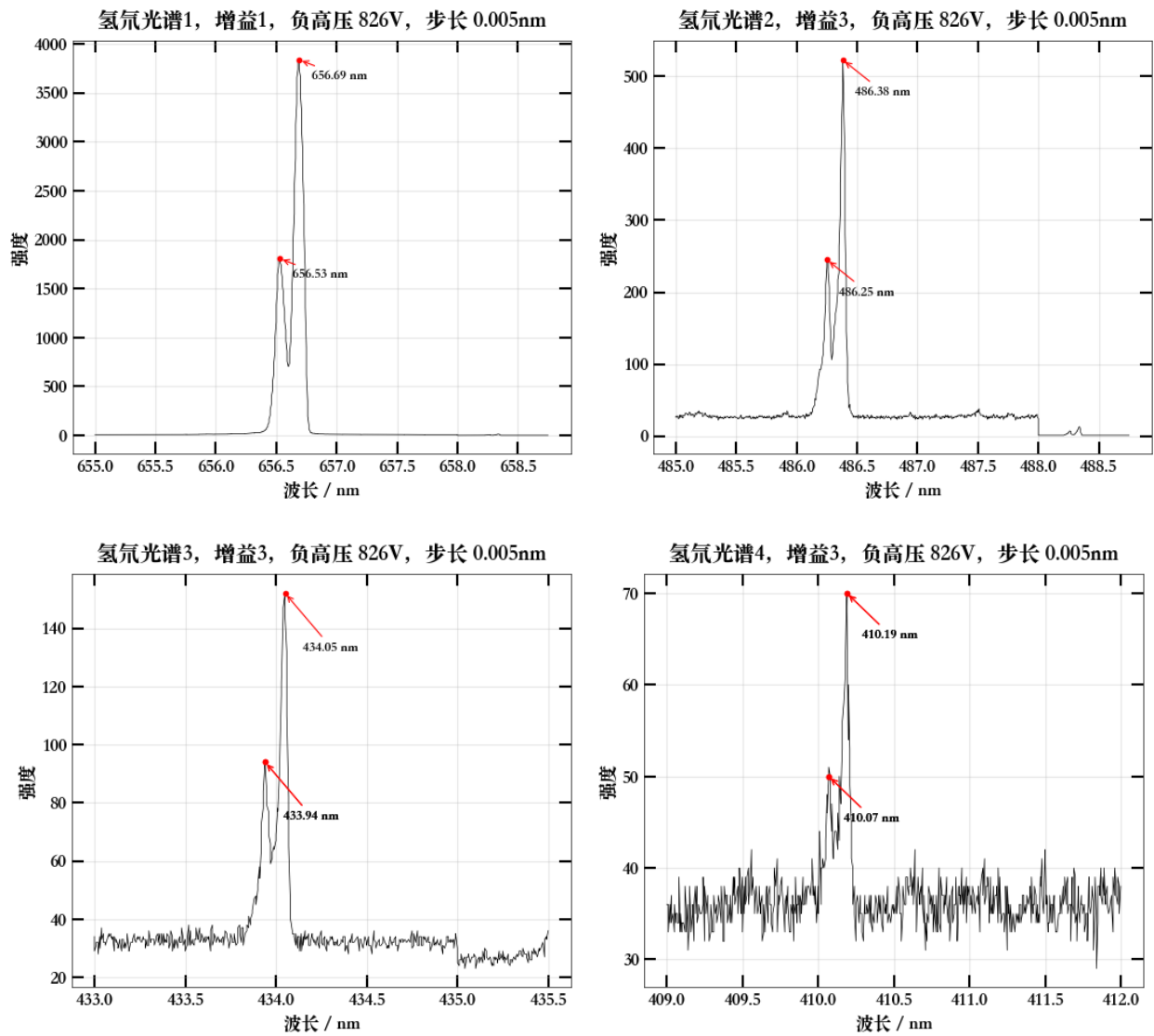


图 10: 氢氖灯光谱.

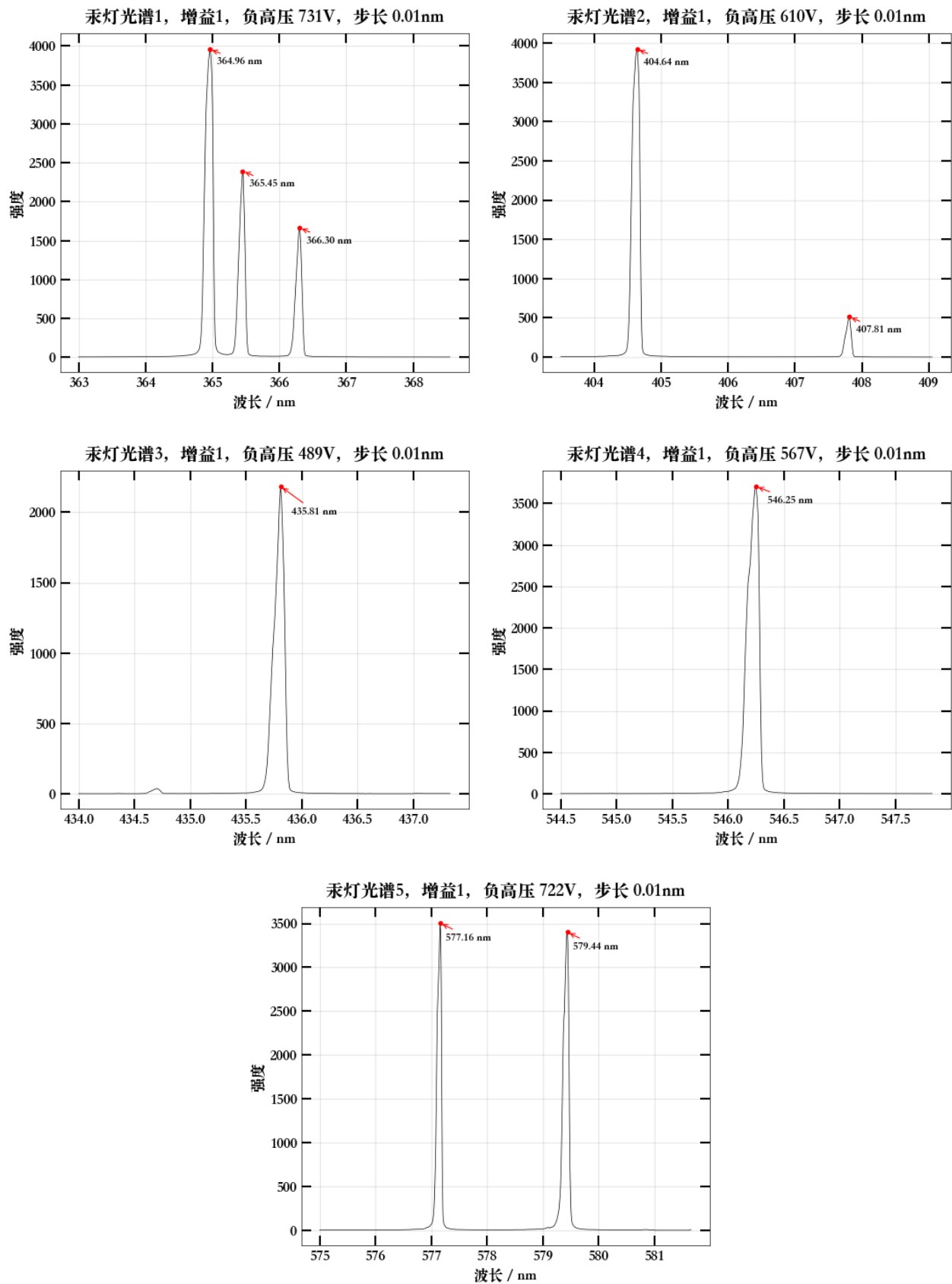


图 11: 汞灯光谱.