

**ПРИНЦИП ТОЖДЕСТВЕННОСТИ
ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ
И ЕГО ПРОЯВЛЕНИЕ
В СПЕКТРЕ ГЕЛИЯ**

2011

Разработано в НИИ Ядерной Физики
Московского Государственного Университета
им. М.В. Ломоносова

ОГЛАВЛЕНИЕ

<u>Введение.....</u>	<u>3</u>
<u>Обменное вырождение в двухэлектронной системе.....</u>	<u>3</u>
<u>Изучение спектра He.....</u>	<u>6</u>
<u>Аппаратная (прибор) и компьютерная части.....</u>	<u>8</u>
<u>Методика эксперимента</u>	<u>10</u>
<u>Порядок работы.....</u>	<u>10</u>
<u>Обработка записанного спектра:.....</u>	<u>11</u>
<u>Определение обменного расщепления.....</u>	<u>14</u>
<u>Задание.....</u>	<u>15</u>
<u>Приложение. Метод наименьших квадратов.....</u>	<u>16</u>
<u>Литература.....</u>	<u>20</u>

Введение

Изучение постулатов квантовой механики представляется важным этапом в учебном процессе, поскольку каждый постулат ставит перед студентом, как и ученым, вечный вопрос: «почему?». Почему постулируемое уравнение Шредингера есть единственно правильное уравнение, описывающее определенную область явлений микромира? Особенно интересны с нашей точки зрения постулаты, которые не имеют никаких аналогов в классической механике. Одним из таких постулатов является принцип тождественности (или неразличимости) элементарных частиц. Мы остановимся на этом принципе, который приводит к чисто квантово-механическому явлению - обменному вырождению и снятию его за счет возмущения, энергия которого обычно называется обменным взаимодействием и может быть достаточно просто определена экспериментально и сравнена с теоретическим расчетом. Мы не будем останавливаться подробно на теоретическом обзоре, поскольку принцип тождественности и его следствия рассматриваются в любом курсе квантовой механики [1,2,3].

Обменное вырождение в двухэлектронной системе

Принцип тождественности проявляется лишь в том случае, когда число одинаковых элементарных частиц $N \geq 2$. Мы рассмотрим простейшую систему, содержащую два электрона – атом гелия.

Уравнение Шредингера для такого атома имеет вид:

$$\hat{H}\Psi(1,2) = E\Psi(1,2) \quad (1)$$

где оператор

$$\hat{H} = \hat{T}_1 + U_1 + \hat{T}_2 + U_2 + U_{12}$$

- представляет собой гамильтониан атомной системы, в котором:

$$\hat{T}_1 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1 \text{ и } \hat{T}_2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2$$

- операторы кинетической энергии первого и второго электронов,

$$U_1 = -\frac{2e^2}{r_1} \text{ и } U_2 = -\frac{2e^2}{r_2}$$

- потенциальные энергии первого и второго электронов в поле ядра (r_1 и r_2 – расстояния электронов от ядра), а

$$U_{12} = \frac{e^2}{r_{12}}$$

- потенциальная энергия отталкивания двух электронов (r_{12} – расстояние между электронами).

Наличие именно этой величины, как известно, не дает возможности найти такую систему координат, в которой переменные можно было бы разделить. Наиболее простым и наглядным приближенным методом решения такого уравнения является теория возмущений, используемая в случае, когда малой величиной U_{12} в уравнении (1) в нулевом приближении можно пренебречь. Удалив этот член, мы получим уравнение Шредингера в нулевом приближении, которое можно записать в виде:

$$\hat{H}_0 \Psi_1(1,2) = E_0 \Psi_1(1,2) \quad (2)$$

где $\hat{H}_0 = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$; $E_0 = E_n^0 + E_m^0$; $\Psi_1(1,2) = \psi_n(1)\psi_m(2)$.

Уравнение (2) распадается на систему из двух идентичных уравнений, описывающих одноэлектронную задачу в кулоновском поле:

$$\begin{cases} \hat{H}_1 \psi_n(1) = E_n^0 \psi_n(1) \\ \hat{H}_2 \psi_m(2) = E_m^0 \psi_m(2) \end{cases} \quad (3)$$

решения которой $\psi_n(1)$ и $\psi_m(2)$ хорошо известны (это волновые функции электрона в кулоновском поле, например, в атоме водорода).

Уже на данном этапе видно, что решения уравнения (2) имеют обменное вырождение. Действительно, кроме функции $\Psi_1(1,2)$ решением уравнения (2) является и функция $\Psi_2(2,1)$, а также любая их линейная комбинация:

$$\Psi = C_1 \Psi_1(1,2) + C_2 \Psi_2(2,1) \quad (4)$$

Можно показать, что правильными решениями нулевого приближения как раз являются две такие линейные комбинации:

$$\Psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_n(1)\psi_m(2) + \psi_n(2)\psi_m(1) \} \quad (5)$$

$$\Psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_n(1)\psi_m(2) - \psi_n(2)\psi_m(1) \} \quad (6)$$

обладающие свойствами обменной симметрии:

Ψ_S не меняет свой знак при обмене электронами и называется симметричной.

Ψ_A меняет знак при обмене и называется антисимметричной.

(5) и (6) - два решения при одном собственном значении энергии E_0 .

Теперь перейдем к первому приближению теории возмущений, в котором вырождение будет снято. Для этого к гамильтониану нулевого приближения нужно добавить отброшенный член:

$$U_{12} = \frac{e^2}{r_{12}},$$

используя решения (5) и (6) нулевого приближения:

$$(\hat{H}_0 + U_{12})\Psi_{S,A} = E\Psi_{S,A} \quad (7)$$

с полной энергией, равной:

$$E = E_0 + K \pm A. \quad (8)$$

Здесь

$$K = \int |\psi_n(1)|^2 \frac{e^2}{r_{12}} |\psi_m(2)|^2 d\tau_1 d\tau_2, \quad (9)$$

так называемый кулоновский интеграл, представляет собой энергию кулоновского отталкивания электронных облаков ($|\psi_n(1)|^2$ представляет собой электронную плотность первого электрона, а $|\psi_m(2)|^2$ - второго). Третий член в (8) A – называется обменным интегралом и представляет собой принципиально новый тип интеграла, характерного для квантовой механики многих одинаковых элементарных частиц:

$$A = \int \psi_n^*(1)\psi_m(2) \frac{e^2}{r_{12}} \psi_m(1)\psi_n^*(2) d\tau_1 d\tau_2 \quad (10)$$

$d\tau_1 d\tau_2$ - элементы объема первого и второго электронов.

Разумеется, как K , так и A представляют собой энергию.

Как видно из (10), каждый электрон оказывается одновременно в двух разных (n -ом и m -ом) состояниях (термин «обмен» произошел из решения по теории возмущений задач, зависящих от времени, где показывается, что электроны с определенной частотой обмениваются местами, переходя из n -ого состояния в m -ое и обратно).

Обменный интеграл представляет собой типичную квантово-механическую реализацию принципа тождественности элементарных частиц. Обменный интеграл стремится к нулю по мере уменьшения перекрытия электронных облаков в n -ом и m -ом состояниях. В данной задаче оба интеграла K и A являются положительными величинами, что приводит к тому, что энергия симметричного состояния:

$$E = E_0 + K + A \quad (11)$$

больше, чем энергия антисимметричного:

$$E = E_0 + K - A \quad (12)$$

Напомним, что спектр гелия состоит из системы синглетных и системы триплетных уровней (парагелий и ортогелий соответственно).

Нетрудно показать, что симметричным состояниям соответствуют синглетные термы, а антисимметричным – триплетные термы в спектре гелия (см. [1]).

Таким образом, энергетический уровень любого состояния сдвигается вверх из-за кулоновской поправки и раздвигается на $2A$ из-за обмена.

Исключение составляет основное состояние ($1s^2$), которое не вырождено и учитывает только поправку на кулоновское отталкивание электронов. Таким образом, обменное взаимодействие приводит к расщеплению, равному $2A$.

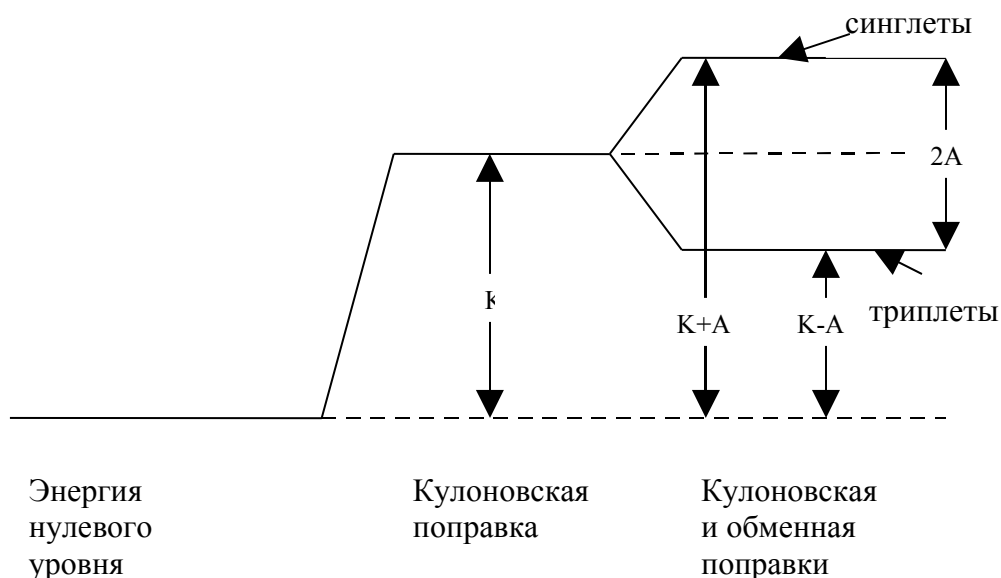


Рис. 1. Корреляционная диаграмма обменного расщепления.

На рисунке триплетные уровни из-за малого расщепления изображены одной линией.

Заканчивая краткое описание принципа тождественности и его следствия – обменных интегралов, подчеркнем, что последние возникают не из-за новых типов взаимодействий – они как были электростатическими, так и остаются ими, а из-за свойств волновой функции тождественных частиц, которая из-за учета симметрии относительно обмена распадается на два решения.

Изучение спектра He

Теперь нам предстоит выяснить, как указанные выше поправки отразятся на спектре гелия.

Приведем энергетическую схему спектра гелия (с интересующими нас переходами):

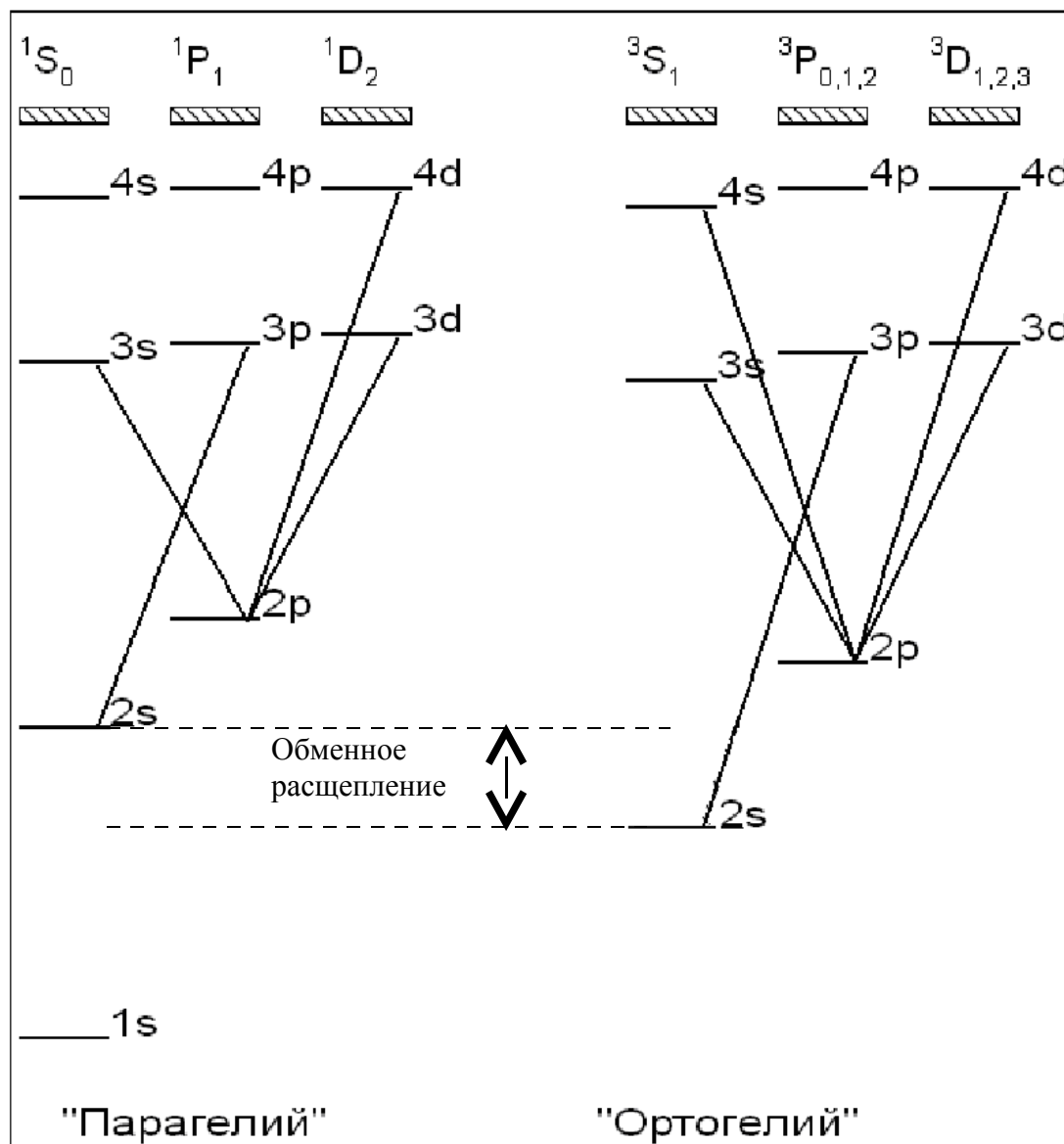


Рис.2. Схема уровней энергии и переходов в спектре He.
Каждый триплетный терм представлен одной чертой.

Как видно из схемы, 2s уровни синглета и триплета расположены друг относительно друга в соответствии с расщеплением 2s терма в результате обменного взаимодействия. Аналогичная картина наблюдается для 2p термов, однако расщепление для них значительно меньше, чем для 2s. Уменьшение расщепления с ростом n и l должно соответствовать значению обменного интеграла (10). С этой целью выпишем конечное значение обменного интеграла для 2s и для 2p состояний, вычисленные в первом приближении теории возмущений [4].

$$A_1(2s) = 0.595 Z \text{ эВ.} \quad \text{Для гелия } (Z = 2) \quad (13)$$

$$A_1(2p) = 0.464 Z \text{ эВ}$$

Первое приближение теории возмущений не претендует на количественное совпадение результатов вычисления с экспериментальными данными, отличаясь от них, примерно в три раза, однако качественная картина полностью подтверждается. Существует ряд факторов, учет которых улучшил бы количественные результаты теории, так, например, простой учет экранировки ядра $1(s)$ электроном уже существенно бы изменил количественные показатели теории, чем мы и воспользуемся. Конечно это силовой прием, но серьезные изменения можно получить либо во втором приближении теории возмущений, либо, вариационным методом еще более точным. Здесь мы введем экранировочный коэффициент «1» и будем пользоваться формулами:

$$A(2s)=0.595 (Z-1) \text{ эВ} \quad (14)$$

$$A(2p)=0.464 (Z-1) \text{ эВ} \quad (15)$$

Целесообразность использования теории возмущений состоит в том, что она наглядно демонстрирует следствие принципа неразличимости тождественных частиц, образуя новый энергетический член – обменный интеграл.

Теперь обсудим экспериментальные методы определения обменного расщепления. Изучая схему уровней на рис.2, ясно, что для определения, на пример, расщепления $2s$ достаточно измерить переходы с $2s$ уровней на высоко возбужденный уровень, где обменное расщепление пренебрежимо мало и взять разность между переходами. К сожалению, это невозможно, потому что эти переходы лежат в ультрафиолетовой области и мало интенсивны. Из схемы уровней видно, что с определенной точностью можно измерить $2s$ и $2p$ расщепления.

Приведем их:

$2s - 3p$	триплет	
$2s - 3p$	синглет	
$2p - 3s$	триплет	
$2p - 3s$	синглет	
$2p - 3d$	триплет	(16)
$2p - 3d$	синглет	
$2p - 4s$	триплет	
$2p - 4s$	синглет	
$2p - 4d$	триплет	
$2p - 4d$	синглет	

Из анализа этой таблицы видно, что наиболее точные результаты для $2p$ расщепления следует ожидать для двух последних переходов. Наша задача - исследовать все переходы и сравнить величины расщеплений в рамках возможностей данного монохроматора

Аппаратная (прибор) и компьютерная части

Установка состоит из модернизированного монохроматора МУМ 01 (1), источника света – лампы ДРГС–12 (2), блока питания лампы, входной щели со сменными щелями (3), окуляра для визуального наблюдения спектра(4).

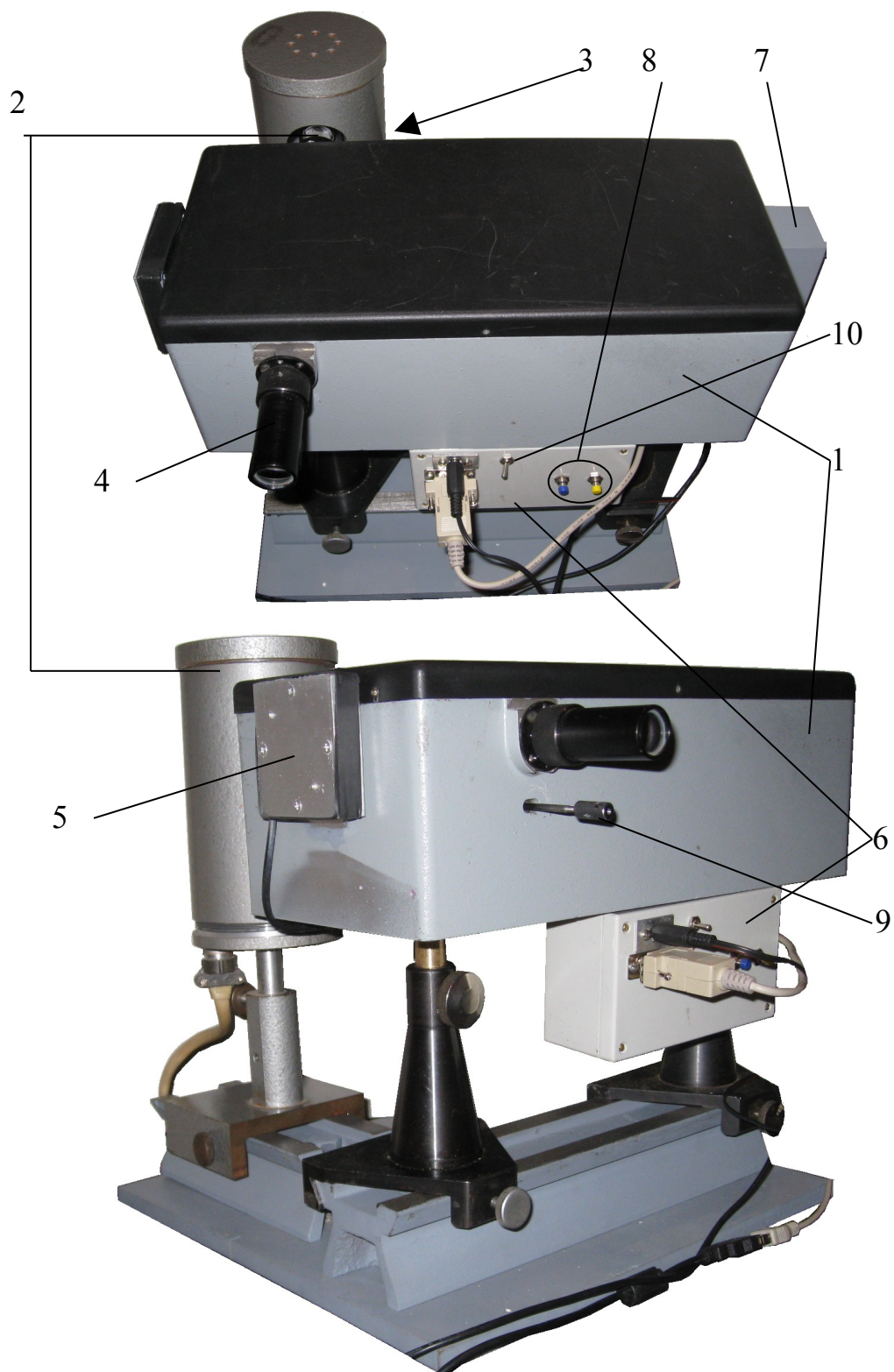


Рис 3

Модернизация монохроматора осуществлена с целью сопряжения его с компьютером и состоит из приемной матрицы (5), электронного блока сопряжения (6) с тумблером включения (10), шагового двигателя (7), кнопок для ручного управления поворотом решетки (8), штока для переключения

окуляр/матрица (9) и компьютера, на экране которого производится запись и обработка спектров.

Главным элементом программы записи спектра является окно черного цвета, в котором будет отображаться процесс записи спектра. В верхней части экрана расположена панель инструментов, под ней, над окном записи спектра, - цветная полоса, в точности представляющая спектр элемента, который можно наблюдать глазом в окуляре. Внизу экрана находится информационная строка, в которой выводится контекстная подсказка о том, что нужно делать в данный момент.



Обозначение информационной строки.

Методика эксперимента

Прежде всего опишем функции кнопок в панели инструментов.

	Кнопка « Старт ». Начало записи спектра. Вам будет предложено указать, с какой длины волны начинать запись. Рекомендуемое значение – 3700 ангстрем.
	Кнопка « Стоп ». Остановка записи спектра. Если кнопка «Стоп» не нажата, набор спектра будет продолжаться до значения примерно 7500 ангстрем.
	Кнопка « Калибровочная линия ». Служит для занесения в таблицу положений и длин волн калибровочных линий ртути.
	Кнопка « Калибровка ». Служит для расчета и ввода в программу калибровочных коэффициентов.
	Кнопка « Элемент ». Служит для включения отображения на экране информации о принадлежности линии к спектру определенного элемента (гелия или ртути)
	Кнопка « Увеличить ». Служит для увеличения выделенной части спектра. Для выделения части спектра нажмите на спектре левую кнопку мыши и, не отпуская ее, «протащите» по нужной области.
	Кнопка « Весь спектр ». Служит для восстановления исходного масштаба спектра.
	Кнопка « Экспериментальная линия ». Служит для занесения в таблицу экспериментальных линий длин волн линий гелия.
	Кнопка « Печать ».
	Кнопка « Справка ». Открывает файл справки с подробным описанием всех действий в текущем разделе программы.
	Информационная строка в нижней части экрана содержит краткую подсказку о необходимых в данный момент действиях.

Порядок работы.

Включите спектральную установку в таком порядке:

1. Включите блок питания лампы и дать ему прогреться 1-2 мин .
2. Включите анод и убедитесь в том, что лампа загорелась. Если это не произойдет, загорится контрольная индикаторная лампочка., тогда следует отключить прибор в обратном порядке и включить его снова.
3. Включите управляющий блок прибора тумблером (10). Подождите, пока двигатель установит решетку в нулевое положение.
4. Проверьте положение штока (9). Для проведения эксперимента он должен быть выдвинут. Кнопки управления поворотом решетка при проведении эксперимента на компьютере не используются.

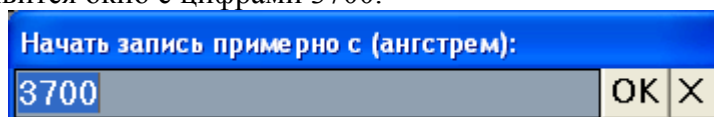
Откройте программу «Спектр гелия».

В панели инструментов в левой его части находится кнопка «Старт».



Кнопка «Старт»

Нажмите на нее, появится окно с цифрами 3700.



Это означает, что запись спектра после нажатия ОК начнется с 3700 и автоматически закончится в районе 7500 ангстрем (если Вы не нажмете ранее кнопку «Стоп»). Если Вы решили вновь записать спектр, то следует еще раз нажать на кнопку «Старт» и в окне установки начального значения длины волны указать, с какой длины волны начинать запись спектра (рекомендуемое значение – 3700 или 3800).



Кнопка «Стоп»

Работа делится на две части: подготовительную – калибровка прибора и основную – запись спектра гелия.

В лампе ДРГС –12, содержатся гелий и пары ртути. Спектр должен содержать линии обоих элементов. Обычно линии ртути служат для калибровки спектра, то есть, для перевода номеров каналов, в которых записан спектр, в единицы длин волн – ангстремы или нанометры. Это, конечно, удачный случай, когда источник излучения содержит одновременно калибровочный и исследуемый спектры.

Запись спектра длится около 20-30 мин.

По окончании записи ртутно-гелиевого спектра лампу следует выключить (в обратном порядке по отношению к включению), поскольку далее пойдет обработка спектра.

Обработка записанного спектра:

Калибровка монохроматора по спектральным линиям ртути.

Определение калибровочных коэффициентов.

Определение положения линий гелия.

Определение энергетических переходов.

Распечатка полученных результатов.

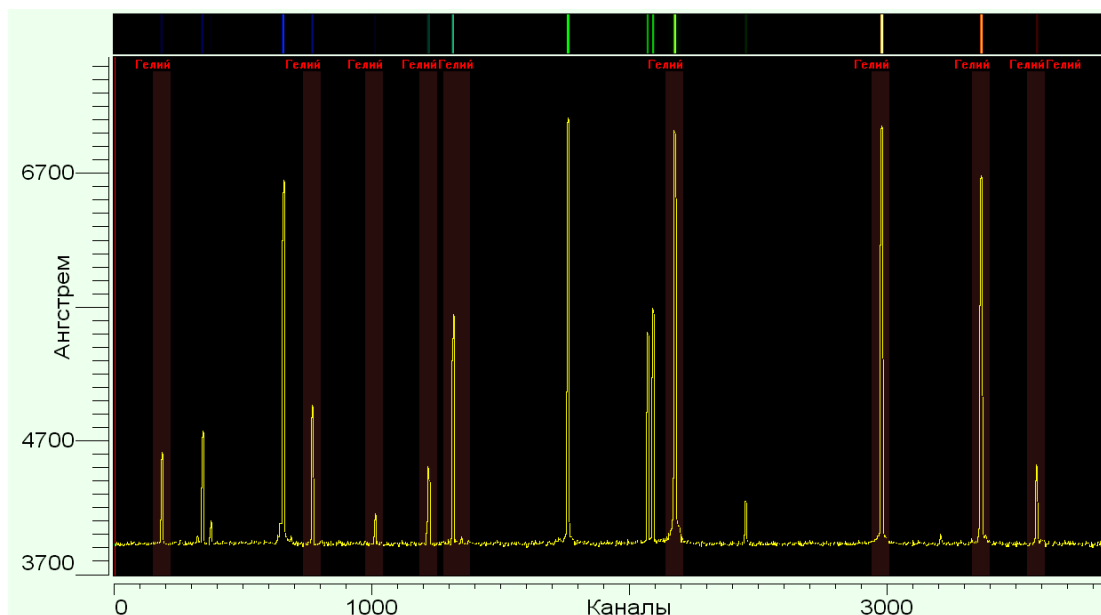


Рис.4. Экспериментальный спектр с информацией о положении линий гелия.

1. Калибровка монохроматора.

Эту часть программы важно провести максимально тщательно (так как от точности калибровки зависит точность всех экспериментальных результатов). Для выделения линий ртути из общего спектра необходимо в строке инструментов нажать на кнопку «Элемент» и выбрать в меню пункт «Ртуть», при этом каждая линия ртути обозначится находящейся над ней или рядом с ней полупрозрачной полосой, над которой указана табличная длина ее волны.



Кнопка «Элемент»

Наведите курсор на первую слева спектральную линию ртути выделите «протяжкой» мыши эту область и увеличьте ее.



Кнопка «Увеличить»

Может оказаться, что положение линии в спектре не совсем совпадает с «табличной» полосой. Ваша задача - навести курсор на центр спектральной линии, нажать кнопку «Калибровочная линия», вписать табличные значения длины волны в открывшееся окно и нажать на кнопку ОК; значение длины волны будет занесено в ТАБЛИЦУ. Перейдите в закладку ТАБЛИЦА и убедитесь в правильности ваших действий.



Кнопка «Калибровочная линия»

Вернитесь к отображению полного спектра.



Кнопка «Весь спектр»

В общем спектре имеется 6 линий ртути проделайте с ними те же операции и перейдите к следующему шагу.

Следующий шаг состоит в том, что бы по шести точкам провести оптимальным образом калибровочную прямую $y = Ax + B$ (см. в Приложении формулы (8) и (9)). Для определения постоянных A и B необходимо воспользоваться методом наименьших квадратов, изложенном в приложении. В

результате использования метода наименьших квадратов Вы получите два уравнения с коэффициентами, которые представляют некоторые суммы. Специальная программа проведет расчет этих сумм и представит их в раскрывающемся кнопкой «Калибровка» окне.



Кнопка «Калибровка»

В окне ввода калибровочных коэффициентов (Рис. 5) имеется кнопка «Справка», нажав которую, Вы получите дополнительную справочную информацию о расчете коэффициентов методом наименьших квадратов.

Из двух уравнений Вы рассчитаете необходимые коэффициенты А и В и введя их в соответствующие окна, нажать кнопку ОК.

Все расчеты необходимо проводить с точностью не менее 8 (лучше 10) значащих цифр.

Калибровка спектрометра

Калибровочная прямая описывается формулой:

$$y = A * x + B$$

Где y - длина волны, x - номер шага (канала).

А и В - калибровочные параметры

Вам необходимо рассчитать калибровочные параметры методом наименьших квадратов.

Данный метод подробно описан в руководстве и справке. [Справка](#)

Для упрощения расчетов ниже приведены используемые в методе наименьших квадратов суммы, см. формулы (...)

$\sum x$ $\sum y$

$\sum x^2$ $\sum xy$

ВНИМАНИЕ! Для расчета сумм Вам необходимо заполнить таблицу калибровочных линий!

Введите рассчитанные Вами калибровочные параметры:

А:

В:

Рис.5. Окно ввода калибровочных коэффициентов

При успешной калибровке Вы перейдете от закладки СПЕКТР к закладке ГРАФИК. Там Вы увидите рассчитанную калибровочную прямую пересекающую под углом весь спектр.

2. Определение длин волн He.

Нажимая на кнопку «элемент», выберите гелий. Теперь Вы видите ряд полупрозрачных полос, прикрывающих линии гелия, длину волны которых Вы должны определить (см. Рис. 4)

На графике по оси абсцисс отложены каналы, а по оси ординат ангстремы.

Если бы Вы решили определить по этому графику, но нарисованному на листе бумаги, длину волны линии, Вы бы провели вертикальную прямую через центр линии и из точки пересечения этой прямой с калибровочной наклонной прямой провели бы горизонтальную прямую до пересечения с осью ординат, на которой отложены длины волн в ангстремах.

Эта процедура на экране монитора решается почти так же. На экране видна горизонтальная красная линия, отходящая от калибровочной прямой до пересечения с осью ординат. Одновременно с движением вертикального маркера двигается горизонтальная красная прямая, исходящая из точек пересечения маркера с калибровочной прямой.

Установив маркер в центре исследуемой линии (для этого вы можете увеличить линию), Вы увидите, как красная горизонтальная прямая укажет длину волны на оси ординат и это значение отобразится в окошке «длина волны» внизу экрана. Нажмите на кнопку «**Экспериментальная линия**», и указанная длина волны будет занесена в ТАБЛИЦУ экспериментальных линий. Устанавливая маркер на центр всех линий гелия, имеющих на спектре, занесите их поочередно в ТАБЛИЦУ.



Кнопка «Увеличить»



Кнопка «**Экспериментальная линия**»



Кнопка «**Весь спектр**»

Открыв закладку УРОВНИ, вы увидите с правой стороны таблицу с длинами волн, а с левой стороны уровни энергии атома гелия. Выделяя поочередно строки с длинами волн, вы будете слева видеть соответствующие переходы, при этом в таблицу будут добавлены обозначения переходов напротив соответствующей длины волны.

Определение обменного расщепления.

Перейдем к задаче экспериментального определения обменного расщепления $2A_3(2s)$. Рассматривая схему уровней энергии на рис. 2 видно, что требуется определить расстояние между 2^1S_0 и 2^3S_1 , или 2^1P_1 и $2^3P_{0,1,2}$, или 3^1S_0 и 3^3S_1 , и т.д. Как мы уже отмечали выше мы сможем зарегистрировать из приведенного набора переходов расщепления только для $2s$ и $2p$ уровней. Очевидно, что точнее и проще измерить самое большое обменное расщепление: это $2^1S_0 - 2^3S_1$, Его мы и рассмотрим.

Спин-орбитальное расщепление в триплете мало, его мы учитывать не будем. Сама идея измерения крайне проста. Следует определить длины волн переходов между возбужденным состоянием 3^1P_1 и состоянием 2^1S_0 . Аналогично, между

$3^3P_{0,1,2}$ и 2^3S_1 , и найти разность этих длин волн λ_1 и λ_2 в энергетических единицах, то есть получить разность энергий $2A_3(2s)$ в эВ (эти расчеты проводятся вручную).

$$2A_3(2s) = hc (1/\lambda_1 - 1/\lambda_2)$$

Далее вам предстоит произвести аналогичные действия со всеми 2р обменными расщеплениями в (16), вычислить теоретические значения величин А по формулам (14) и (15) и заполнить приведенную ниже таблицу.

Таблица:

Гелий				
Состояние	Энергия, эВ	Разность, эксперимент	Разность, теория	
$1s^2$	-24.59	$A_a - A_s$	$A_{a,T} - A_{s,T}$	
$1s^2s^1S_0$ $1s^2s^3S_1$				
$1s^2p^1P_1$ $1s^2p^3P_{0,1,2}$				

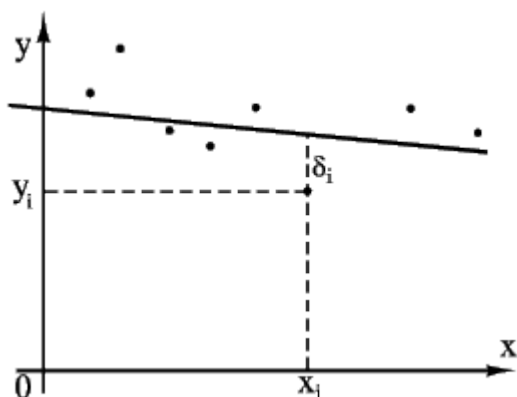
В таблице отсчет энергии ведется от ионизационной границы. Для гелия верхняя строка соответствует синглетному состоянию.

Задание.

1. Записать спектр излучения лампы ДРГС-12.
2. По спектру ртути произвести калибровку монохроматора.
3. Изучить спектр гелия и произвести измерения всех необходимы длин волн.
4. Определить все экспериментальные и теоретические значения обменных интегралов.
5. Распечатать спектр и таблицу.

Приложение. Метод наименьших квадратов.

Общие положения



Для упрощения изложения рассмотрим сначала случай линейной функции одного аргумента. Пусть из опыта получены точки:

$$\left. \begin{array}{l} x_1, y_1, \\ x_2, y_2, \\ \dots \\ x_n, y_n \end{array} \right\} \quad (1)$$

(см. рисунок).

Требуется найти уравнение прямой

$$y = ax + b, \quad (2)$$

наилучшим образом согласующейся с опытными точками.

Пусть мы нашли такую прямую. Обозначим через δ_i расстояние опытной точки от этой прямой (измеренное параллельно оси y).

Из уравнения (2) следует, что

$$\delta_i = y_i - ax_i - b \quad (3)$$

Чем меньше числа δ_i по абсолютной величине, тем лучше подобрана прямая (2). В качестве характеристики точности подбора прямой (2) можно принять сумму квадратов

$$S = \sum_{i=1}^n \delta_i^2 \quad (4)$$

Покажем, как можно подобрать прямую (2) так, чтобы сумма квадратов S была минимальной. Из уравнений (3) и (4) получаем

$$S = \sum_{i=1}^n (y_i - ax_i - b)^2 \quad (5)$$

Условия минимума S будут

$$\frac{\partial S}{\partial a} = -2 \sum_{i=1}^n (y_i - ax_i - b) x_i = 0 \quad (6)$$

$$\frac{\partial S}{\partial b} = -2 \sum_{i=1}^n (y_i - ax_i - b) = 0 \quad (7)$$

Уравнения (6) и (7) можно записать в таком виде:

$$\sum_{i=1}^n y_i x_i = a \sum_{i=1}^n x_i^2 + b \sum_{i=1}^n x_i \quad (8)$$

$$\sum_{i=1}^n y_i = a \sum_{i=1}^n x_i + nb \quad (9)$$

Из уравнений (8) и (9) легко найти a и b по опытным значениям x_i и y_i . Прямая (2), определяемая уравнениями (8) и (9), называется прямой, полученной по методу наименьших квадратов (этим названием подчеркивается то, что сумма квадратов S имеет минимум). Уравнения (8) и (9), из которых определяется прямая (2), называются нормальными уравнениями.

Можно указать простой и общий способ составления нормальных уравнений. Используя опытные точки (1) и уравнение (2), можно записать систему уравнений для a и b

$$\left. \begin{aligned} y_1 &= ax_1 + b, \\ y_2 &= ax_2 + b, \\ &\dots \\ y_n &= ax_n + b, \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

Умножим левую и правую части каждого из этих уравнений на коэффициент при первой неизвестной a (т.е. на x_1, x_2, \dots, x_n) и сложим полученные уравнения, в результате получится первое нормальное уравнение (8).

Умножим левую и правую части каждого из этих уравнений на коэффициент при второй неизвестной b, т.е. на 1, и сложим полученные уравнения, в результате получится второе нормальное уравнение (9).

Этот способ получения нормальных уравнений является общим: он пригоден, например, и для функции

$$y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_n x^n. \quad (11)$$

Естественно, что здесь получится система из $n+1$ нормального уравнения для определения величин

$a_0, a_1, a_2, \dots, a_n$.

Рассмотрим частный случай применения метода наименьших квадратов. Пусть из теории известно, что

$$k=y/x \quad (12)$$

есть величина постоянная и ее нужно определить по опытным данным (1).

Систему уравнений для k можно записать:

$$\left. \begin{aligned} k=y_1/x_1, \\ k=y_2/x_2, \\ \dots \\ k=y_n/x_n, \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

Для получения нормального уравнения умножим каждое из этих уравнений на коэффициент при неизвестной k , т.е. на 1, и сложим полученные уравнения

$$kn = \sum_{i=1}^n \frac{y_i}{x_i} \quad (14)$$

отсюда

$$k = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{y_i}{x_i} \quad (15)$$

Следовательно, среднее арифметическое, полученное из опытных отношений y_i/x_i , дает решение поставленной задачи по методу наименьших квадратов. Это важное свойство средней арифметической объясняет ее широкое применение в практике обработки опытных данных.

Пример 1

На опыте получены значения x и y , сведенные в таблицу

x	1	2	3	4	5	6
y	5.2	6.3	7.1	8.5	9.2	10.0

Найти прямую (2) по методу наименьших квадратов.

Решение. Находим:

$$\sum x_i=21, \quad \sum y_i=46.3, \quad \sum x_i^2=91, \quad \sum x_i y_i=179.1.$$

Записываем уравнения (8) и (9)

$$91a+21b=179.1$$

$$21a+6b=46.3$$

Отсюда находим: $a=0.98$ и $b=4.3$

Литература.

1. Попов А.М., Тихонов О.В. Лекции по атомной физике. МГУ, 2007.
2. Блохинцев Д.И. Квантовая механика. М., 1949.
3. Шпольский Э.В. Атомная физика. М., 1951.
4. Козман У. Введение в квантовую химию. М. 1961.