

Лекция 3.

Модели атомов. От Дж. Томсона до Н. Бора.

Атом Томсона.

Проследим теперь за развитием представлений о строении атома в начале XX века. Исторически первой физической моделью атома явилась модель Томсона, предложенная им в 1903 году. В соответствии с этой моделью простейший атом (атом водорода) представлял собой равномерно заряженный по объему шар, внутри которого находился электрон. Поскольку атом в целом нейтрален, плотность положительного заряда ρ_0 связана с размером шара R соотношением.

$$e = \frac{4}{3} \pi R^3 \rho_0. \quad (3.1)$$

Здесь e - заряд электрона. Очевидно, центральная точка шара определяет положение равновесия, при смещении электрона из этой точки появится возвращающая сила, стремящаяся вернуть его обратно. Действительно движение электрона происходит под действием силы, действующей на него в электрическом поле равномерно заряженного шара. Напряженность поля на расстоянии \vec{r} от центра шара легко найти из теоремы Гаусса:

$$E \cdot 4\pi r^2 = 4\pi \cdot \frac{4}{3} \pi r^3 \rho_0, \quad (3.2)$$

откуда имеем

$$\vec{E} = \frac{e}{R^3} \vec{r}. \quad (3.3)$$

Тогда уравнение движения электрона запишем в виде

$$m\ddot{\vec{r}} = -\frac{e^2}{R^3} \vec{r}, \quad (3.4)$$

или

$$\ddot{\vec{r}} + \Omega_0^2 \vec{r} = 0, \quad (3.5)$$

где $\Omega_0 = \sqrt{e^2/mR^3}$ - круговая частота колебаний. Решение уравнения (3.5) есть гармонические колебания с частотой Ω_0 . Например, если в начальный момент времени электрон смещен из центра (его координата \vec{r}_0) и имеет нулевую начальную скорость, решение уравнения (3.5) имеет вид

$$\vec{r}(t) = \vec{r}_0 \cos \Omega_0 t. \quad (3.6)$$

Именно такое представление об атоме, как о гармоническом осцилляторе и было заложено в электронную теорию Лоренца. Оценим теперь частоту электронных колебаний.

Полагая атомный радиус $R = 10^{-10}$ А (понимание, что атомы имеют размеры такого порядка, сложилось еще в XIX веке), получим $\Omega_0 \sim 10^{16}$ с⁻¹. Это значение частоты попадает в ультрафиолетовый диапазон частот и в качестве первого приближения удовлетворительно соответствует наблюдаемым атомным частотам.

Рассмотренная модель не учитывает потери энергии на излучение, возникающие при ускоренном движении электрона. Потери энергии на излучение приводят к появлению дополнительной силы – силы радиационного трения, которую надо включить в уравнение (3.4) или (3.5). Выражение для этой силы может быть записано в виде:

$$\vec{f}_r = \frac{2e^2}{3c^3} \ddot{\vec{r}}. \quad (3.7)$$

Сила оказывается пропорциональна третьей производной от радиус-вектора.¹ Предположим, что сила радиационного трения мала по сравнению с возвращающей силой, действующей на электрон². Тогда решение (3.6) будет приближенно верным и можно заменить третью производную, входящую в (3.7), на первую: $\ddot{\vec{r}} \approx -\Omega_0^2 \vec{r}$. В результате сила радиационного трения оказывается пропорциональна скорости движения и похожа на обычную силу вязкого трения:

$$\vec{f}_r \approx -\frac{2e^2 \Omega_0^2}{3c^3} \dot{\vec{r}}. \quad (3.8)$$

С учетом (3.8) запишем уравнения движения электрона

$$\ddot{\vec{r}} + \gamma \dot{\vec{r}} + \Omega_0^2 \vec{r} = 0. \quad (3.9)$$

Здесь $\gamma = 2e^2 \Omega_0^2 / 3mc^3$ - классическая постоянная затухания. При значении $\Omega_0 = 10^{16} \text{ с}^{-1}$ получаем $\gamma \approx 6 \cdot 10^8 \text{ с}^{-1}$. Как видно, $\gamma \ll \Omega_0$, колебания будут затухать слабо, и наше представление силы радиационного трения в виде (3.8) оправдано.

Решение уравнения (3.9) для тех же начальных условий запишем в виде

$$\vec{r}(t) = \vec{r}_0 \left(\cos \Omega t + \frac{\gamma}{2\Omega} \sin \Omega t \right) \exp(-\gamma t/2), \quad (3.10)$$

где $\Omega = \sqrt{\Omega_0^2 - \gamma^2/4}$. Заметим, что учет затухания приводит одновременно к сдвигу частоты осциллятора, но этот эффект крайне мал. Относительное изменение частоты равно $\Delta\Omega = |\Omega - \Omega_0|/\Omega_0 \approx \gamma^2/8\Omega_0^2 \ll 1$. Поэтому перепишем (3.10) в виде

$$\vec{r}(t) \approx \vec{r}_0 \exp(-\gamma t/2) \cos \Omega_0 t. \quad (3.11)$$

Вычисляя энергию осциллятора как функцию времени, найдем

$$E(t) = \frac{m\dot{\vec{r}}^2}{2} + \frac{m\Omega_0^2 \vec{r}^2}{2} = E_0 \exp(-\gamma t). \quad (3.12)$$

Здесь E_0 - начальное значение энергии. Как видно, время $\tau = 1/\gamma$ представляет собой время затухания энергии осциллятора, т.е. время жизни атома в возбужденном состоянии. Эта величина составляет $\tau \sim 10^{-9} \text{ с}$, что неплохо согласуется с экспериментальными данными.

Таким образом, в рамках модели Томсона атомный электрон, будучи выведен из положения равновесия, совершает почти гармонические колебания, постепенно отдавая энергию на излучение, и возвращается в исходное положение равновесия. При этом за время излучения электрон успеет совершить порядка $10^6 - 10^7$ колебаний. Это означает, что степень монохроматичности излучения весьма высока.

Заметим, что обобщение модели на случай многоэлектронных атомов возможно. Совокупность электронов располагается внутри шара. Соответствующие равновесные конфигурации могут быть рассчитаны в рамках классической механики. При этом эти

¹ Это крайне серьезная проблема, имеющая далеко идущие последствия. Для такого закона силы обычной постановки задачи в классической механике (заданы начальные значения координаты и скорости) оказывается недостаточно. Уравнения движения оказываются уравнениями третьего порядка по времени, и, значит, необходимо задать и начальное значение ускорения.

² Это утверждение, конечно, должно быть потом проверено.

электроны могут быть разделены на группы, обуславливающие периодичность свойств химических элементов.

Опыты Резерфорда. Планетарная модель атома.

Серьезный удар по модели атома Томсона нанесли результаты опытов по рассеянию α - частиц (по современным представлениям – ядер атома гелия) на тонких металлических (золотых) фольгах. Эти опыты были проведены Э.Резерфордом³ с сотрудниками. Суть этих опытов заключается в следующем. При прохождении через фольгу α - частицы испытывают рассеяние и отклоняются от своего первоначального движения. Оказалось, что большая часть α - частиц проходит через фольгу, отклоняясь на небольшие углы, однако некоторое количество (примерно одна из десяти тысяч) α - частиц рассеивается на углы порядка 90° и даже иногда вплоть до 180° . Объяснить такие результаты в модели рассеяния на атоме Томсона даже с учетом многократного накопления отклонений на малые углы оказывается принципиально невозможным⁴. Единственным способом объяснить полученные данные является предположение о наличии внутри атома области компактного расположения всего положительного заряда, т.е. предположение о существовании атомного ядра.

Рассмотрим теперь процесс рассеяния на атоме Томсона и определим максимально возможный угол отклонения, на который может отклониться α - частица. Мы ограничимся рассмотрением рассеяния на положительно заряженном остове атома, исключив из рассмотрения электроны. Их учет, очевидно, может лишь уменьшить величину угла рассеяния. Схема процесса рассеяния приведена на рис.3.1. Атомный остов имеет заряд Z и характеризуется размером R . Характерное значение энергии α - частицы $E_\alpha = 5 \text{ МэВ}$ ⁵. Частица, рассеивающаяся на ядре, характеризуется значением прицельного параметра b . Мы ожидаем, что максимально возможный угол отклонения будет малым, поэтому траекторию движения α - частицы можно считать почти прямолинейной. Направим ось OX вдоль вектора начальной скорости α - частицы и попытаемся определить

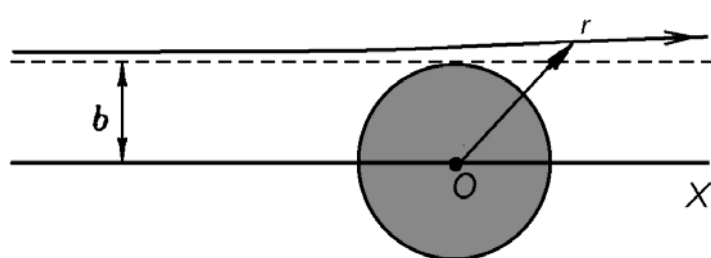


Рис.3.1. Рассеяние α - частицы на атоме Томсона.

теперь импульс, который она приобретает в направлении, перпендикулярном своему движению:

$$p_{\perp} = \int_{-\infty}^{\infty} F_{\perp}(t) dt = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2Ze^2 b dt}{(x^2(t) + b^2)^{3/2}}. \quad (3.13)$$

Здесь F_{\perp} - сила, действующая на α - частицу в направлении, перпендикулярном движению, множитель «2» - заряд α - частицы. Вводя скорость движения частицы вдоль траектории v_{α} , и переходя от интегрирования по времени к интегрированию вдоль траектории α - частицы, получим

$$p_{\perp} = 2Ze^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{b \cdot dx/v_{\alpha}}{(x^2 + b^2)^{3/2}} = \frac{2Ze^2}{bv_{\alpha}} \cdot 2 \int_0^{\infty} \frac{d\xi}{(1 + \xi^2)^{3/2}} = \frac{2Ze^2}{bv_{\alpha}/2}. \quad (3.14)$$

³ E.Rutherford (1871-1937) – английский физик, Нобелевская премия по химии (1908).

⁴ Несколько позже при изучении рассеяния α - частиц в газах было убедительно показано, что отклонение на большой угол происходит в результате одного единственного столкновения.

⁵ Энергии подавляющего большинства частиц от α - радиоактивных источников лежат в диапазоне 4-6 МэВ.

Мы учли также, что значение интеграла в последнем выражении равно единице. Угол отклонения определим как отношение импульса p_{\perp} к начальному импульсу частицы:

$$\theta \approx \frac{p_{\perp}}{m_{\alpha} v_{\alpha}} = \frac{2Ze^2/b}{E_{\alpha}}. \quad (3.15)$$

Здесь $E_{\alpha} = m_{\alpha} v_{\alpha}^2/2$ - кинетическая энергия α - частицы.

Мы получили интересный результат – угол рассеяния равен отношению потенциальной энергии взаимодействия α - частицы и атомного остова при их максимальном сближении (в нашем приближении прямолинейной траектории это прицельный параметр) к кинетической энергии α - частицы. Полученное выражение справедливо для значений $b \geq R$. Очевидно также, что случай $b = R$ будет соответствовать максимальному углу отклонения. Проводя численную оценку именно для этого случая и полагая, что $Z = 79$ (золото), а $R = 10^{-8}$ см, получим $\theta_{\max} \approx 4 \cdot 10^{-4}$. Это всего две сотых градуса. Получить большое значение угла рассеяния «мешает» слишком большой размер атомного остова. Это единственный свободный параметр в нашей задаче. Поэтому, если мы хотим понять результаты опытов Резерфорда, мы должны резко, почти на четыре порядка, уменьшить размер области локализации положительного заряда. То есть мы вынуждены предположить, что внутри атома существует ядро размером $R_0 \approx 10^{-12}$ см, несущее весь положительный заряд. Поскольку размер атома составляет величину порядка ангстрема, следует предположить, что этот размер определяется атомными электронами, которые движутся в кулоновском поле ядра. Так мы приходим к планетарной модели атома, предложенной Э.Резерфордом в 1911 году. В случае простейшего атома (атома водорода) электрон движется вокруг ядра по эллиптической (в частном случае – по круговой) траектории.

Неудовлетворительность модели Резерфорда была очевидна с самого начала. Электрон, двигаясь по круговой (или эллиптической) орбите должен излучать электромагнитные волны, терять энергию и, в конечном счете, упасть на ядро. Атом оказывается нестабильным, живущим конечное время⁶. Однако экспериментальные факты надежно утверждают, что свободные атомы, не будучи подвергнуты какому-либо воздействию, абсолютно стабильны. Модель Резерфорда в этом смысле оказывается значительно хуже модели Томсона, в которой стабильность атома получается сама собой.

Для того чтобы окончательно внести ясность в ситуацию, надо, конечно, оценить время жизни атома относительно падения электрона на ядро. Эту задачу можно решить аналогично уже рассмотренной нами задачи о затухании колебательного движения электрона в атоме Томсона. Однако еще проще это сделать, исходя из энергетических соображений. Используем для этого выражение для скорости потери энергии на излучение

$$\frac{dE}{dt} = -\frac{2e^2}{3c^3} |\ddot{\vec{r}}|^2. \quad (3.16)$$

Считая для простоты орбиту круговой, имеем $\ddot{r} = v^2/r$, где v и r - скорость движения электрона по круговой орбите и ее радиус. Воспользовавшись уравнением движения

$$mv^2/r = e^2/r^2, \quad (3.17)$$

эти величины легко выразить через полную энергию электрона. Действительно, из (3.17) имеем

$$E = -mv^2/2 = -e^2/2r, \quad (3.18)$$

⁶ В отличие от модели Резерфорда в модели Томсона затухание колебаний приводит к возвращению атома в основное (невозбужденное) состояние.

т.е. полная энергия частицы равна кинетической энергии с обратным знаком, или половине потенциальной энергии взаимодействия с ядром. С учетом (3.18) перепишем уравнение (3.16) в виде

$$\frac{dE}{dt} = -\beta E^4, \quad (3.19)$$

где $\beta = \frac{32}{3} \frac{1}{m^2 c^3 e^2}$. Интегрируя (3.19), найдем

$$\int_{E_0}^{-\infty} \frac{dE}{E^4} = -\beta \tau. \quad (3.20)$$

Здесь τ - время падения электрона на ядро (полная энергия электрона при этом стремится к $-\infty$), E_0 - начальная энергия электрона. Из (3.20) получаем:

$$\tau = \frac{1}{3\beta|E_0|^3} = \frac{1}{32} \left(\frac{mc^2}{|E_0|} \right)^3 \cdot \frac{r_e}{c}, \quad (3.21)$$

где $r_e = e^2/mc^2$ - классический радиус электрона. Как видно, время жизни атома сильно зависит от величины энергии начального состояния. Сильно возбужденные состояния (для них значение E_0 лишь немного меньше нуля) могут жить достаточно долго. Однако, для энергии $E_0 \approx -10$ эВ, что характерно для большинства невозбужденных атомов, из (21) находим $\tau \sim 10^{-10}$ с. Собственно, эта оценка и не позволяет всерьез относиться к планетарной модели атома: электрон упадет на ядро слишком быстро.

Атом Бора.

Решающий шаг на пути развития квантовых представлений о строении атома был сделан Н.Бором⁷ в 1913 году. Оставаясь в рамках планетарной модели, Бор предположил, что среди бесконечного множества орбит, удовлетворяющих классическим уравнениям движения, разрешены только те, для которых выполнено условие квантования момента количества движения: проекция момента на ось, перпендикулярную плоскости орбиты, кратна постоянной Планка:

$$L_z = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.22)$$

При этом, находясь на этих разрешенных орбитах электрон, не излучает вопреки законам классической механики. Излучение энергии происходит при переходе с орбиты на орбиту, причем энергия испускаемого кванта $\hbar\omega$ есть разница энергий начального конечного атомных состояний.

Сделанные выше утверждения известны как постулаты Бора. Прежде чем использовать их для расчета атомных состояний, обсудим вопрос, из каких предположений можно прийти к постулату квантования момента количества движения. При обсуждении этой проблемы мы воспользуемся сформулированным Бором принципом соответствия, согласно которому результаты, полученные в рамках квантового подхода, в предельных случаях (большие квантовые числа, малая величина энергии излучаемого кванта по сравнению с энергией системы и т.п.) должны переходить в результаты классического рассмотрения. В дальнейшем для простоты ограничимся только случаем круговых орбит.

Итак, запишем уравнения движения для электрона, обращающегося по круговой орбите вокруг ядра с зарядом Z :

⁷ N.Bohr (1885-1962) – датский физик, Нобелевская премия (1922).

$$m \frac{v^2}{r} = \frac{Ze^2}{r^2}. \quad (3.23)$$

Мы также знаем, что при движении в центрально-симметричном поле сохраняется момент количества движения. Для его z - проекции (ось z направим перпендикулярно плоскости орбиты) имеем:

$$L_z = mvr = \text{const}. \quad (3.24)$$

Определим полную энергию электрона на орбите

$$E = \frac{mv^2}{2} - \frac{Ze^2}{r} = -\frac{mv^2}{2}. \quad (3.25)$$

Выразим теперь энергию электрона через орбитальный момент количества движения. Из (3.23) и (3.24) находим

$$L_z = Ze^2/v. \quad (3.26)$$

Подставляя (3.26) в (3.25), получим

$$E = -\frac{mZ^2e^4}{2L_z^2}. \quad (3.27)$$

Тогда при переходе с орбиты на орбиту изменение энергии и изменение момента количества движения связаны соотношениями⁸:

$$\Delta E = \frac{mZ^2e^4}{L_z^3} \Delta L_z. \quad (3.28)$$

Это изменение энергии связано с излучением кванта $\hbar\omega$. В случае высоких орбит, когда движение электрона должно быть почти классическим (принцип соответствия!), частота этого кванта должна быть равна круговой частоте обращения электрона по орбите $\omega = v/r$, т.е.

$$\Delta E = \hbar\omega = \hbar \frac{v}{r} = \hbar \frac{mZ^2e^4}{L_z^3}. \quad (3.29)$$

Сопоставляя (3.28) и (3.29), получаем, что для высоких орбит в силу принципа соответствия должно быть выполнено

$$\Delta L_z = \hbar. \quad (3.30)$$

Пусть это верно для любых орбит! Тогда, очевидно, получаем, что орбиты, по которым движется электрон, должны удовлетворять требованию

$$L_z = n\hbar + \text{const}, \quad (3.31)$$

где n - любое целое число, не равное нулю. Случай отрицательных n соответствует вращению электрона в противоположную сторону и фактически описывает одно и то же энергетическое состояние. Естественно положить, что $\text{const} = 0$, и тогда мы получаем сформулированное выше правило квантования момента⁹.

Итак, мы имеем два уравнения – (3.22) и (3.23). Незвестных величин тоже две – это радиус электронной орбиты и скорость движения по ней. Разрешая эти уравнения относительно r и v , получаем

⁸ Мы полагаем, что $\Delta L_z \ll L_z$.

⁹ Другая возможная альтернатива выбора константы, так чтобы момент пробегал дискретный набор значений, отстоящих на величину постоянной Планка, заключается в условии $\text{const} = \hbar/2$. Мы не будем анализировать эту ситуацию, однако интересно, что уже в модели Бора проглядывают представления о целом моменте количества движения.

$$r_n = \frac{\hbar^2}{me^2} \frac{n^2}{Z} = a_0 \frac{n^2}{Z}, \quad (3.32)$$

$$v_n = \frac{e^2}{\hbar} \frac{Z}{n}. \quad (3.33)$$

Здесь $a_0 = \hbar^2/me^2 = 5.29 \cdot 10^{-9}$ см – боровский радиус, фактически это размер атома водорода в основном состоянии ($n = 1$). Соотношение (3.33) удобно переписать в виде

$$v_n/c = \frac{e^2}{\hbar c} \frac{Z}{n}. \quad (3.34)$$

Возникает еще одна комбинация фундаментальных констант, причем безразмерная, $\alpha = e^2/\hbar c = 1/137$. Эта величина носит название постоянной тонкой структуры¹⁰. Эта постоянная имеет фундаментальный физический смысл: она определяет электрический заряд в некоторых естественных безразмерных единицах. А электрический заряд есть мера интенсивности электромагнитного взаимодействия. Малость величины α означает, что в некотором смысле электромагнитное взаимодействие является слабым. Этот факт лежит в основе современной квантовой электродинамики, рассматривающей электромагнитное взаимодействие объектов в рамках теории возмущений по малому параметру α .

Отметим также, что наши расчеты показывают, что атом является нерелятивистской системой. При $Z = 1$ скорость электрона на первой боровской орбите равна $1/137$ скорости света. Однако в тяжелых водородоподобных системах ситуация меняется. Например, при $Z = 92$ (водородоподобный ион урана) имеем $v_1/c \approx 1$. Это значит, что релятивистское обобщение модели Бора представляет значительный интерес.

Воспользовавшись выражениями (3.25) и (3.33), определим разрешенные уровни энергии электрона в атоме

$$E_n = -\frac{mv_n^2}{2} = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{Z^2}{n^2}. \quad (3.35)$$

Обозначим $Ry = \frac{me^4}{2\hbar^2} = 13.606$ эВ. Фактически эта величина представляет собой потенциал ионизации атома водорода.

Определим теперь частоту излучения, испускаемого водородоподобным ионом при переходе электрона с орбиты n на орбиту m :

$$\hbar\omega_{mn} = Ry \cdot Z^2 \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n > m \quad (3.36)$$

Случай $m > n$ соответствует поглощению кванта при переходе, наоборот, с более низкой на более высокую орбиту. Формула (3.36) известна как обобщенная формула Бальмера и описывает всю совокупность частот в спектрах водородоподобных систем.

Более подробно остановимся на серийных закономерностях в спектре атома водорода ($Z = 1$). Отметим, что еще в 1885 году И.Бальмером¹¹ было показано, что наблюдаемые длины волн в видимой части спектра атома водорода (в то время было известно всего три таких линии, в настоящее время их число составляет несколько десятков) удовлетворяют соотношению

¹⁰ Происхождение этого названия связано с так называемой тонкой структурой атомных спектров, которая будет обсуждаться позже.

¹¹ J.Balmer (1825-1898) – швейцарский физик и математик.

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 3, 4, 5, \dots \quad (3.37)$$

Здесь R - постоянная Ридберга¹², ее численное значение $R = 109700 \text{ см}^{-1}$. Соотношение (3.37) определяет серию Бальмера в спектре водорода. Несколько позже (в 1906 году) Лайманом¹³ аналогичная серия (серия Лаймана) была обнаружена в ультрафиолетовой части спектра

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 2, 3, 4, \dots, \quad (3.38)$$

а в 1908 году Пашеном¹⁴ – в инфракрасной части спектра

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 4, 5, 6, \dots \quad (3.39)$$

Модель Бора находится в прекрасном согласии с этими экспериментальными данными, действительно, (3.36) можно переписать в виде

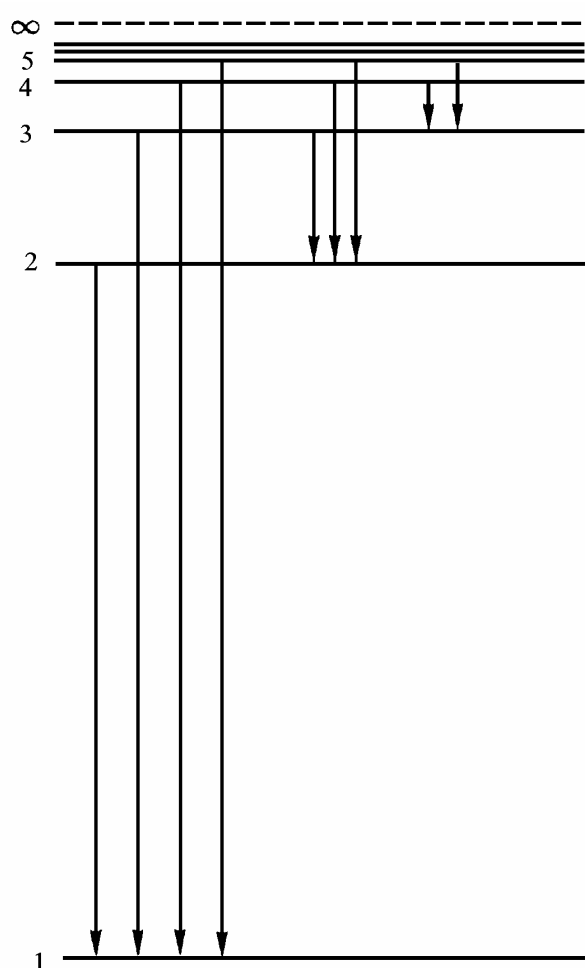


Рис.3.2. Спектр атомарного водорода.

$$\frac{1}{\lambda_{mn}} = \frac{Ry}{2\pi\hbar c} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n > m \quad (3.40)$$

причем теория предсказывает правильное значение для постоянной Ридберга $R = Ry/2\pi\hbar c = 109700 \text{ см}^{-1}$. Схема энергетических уровней атома водорода и соответствующих спектральных серий приведена на рис.3.2. Линии серии Лаймана принято обозначать буквой L серии Бальмера – буквой H , номер линии в серии обозначают буквой греческого алфавита. Например, на рис.3.2 обозначены четыре линии серии Лаймана $L_\alpha, L_\beta, L_\gamma, L_\delta$ и три линии серии Бальмера $H_\alpha, H_\beta, H_\gamma$. Первую линию любой серии принято называть головной. Например, L_α, H_α - головные линии серий Лаймана и Бальмера соответственно. Две первых линии серии Пашена также представлены на рис.3.2.

Позже в инфракрасной а затем и в радиочастотной частях спектра были обнаружены и другие серии,

описываемые обобщенной формулой Бальмера. В частности, переходы на уровень $m = 4$ со всех более высоких $n = 5, 6, 7, \dots$ составляют серию Брэкета, на уровень $m = 5$ - серию Пфунда ($n = 6, 7, 8, \dots$),

¹² J.Rydberg (1854-1919) – шведский физик и математик.

¹³ T.Layman (1874-1954) – американский физик – экспериментатор.

¹⁴ F.Paschen (1865-1947) – немецкий физик – экспериментатор.

на уровень $m = 6$ - серию Хэмфри ($n = 7, 8, 9, \dots$),

на уровень $m = 7$ - серию Хансена - Стронга ($n = 8, 9, 10, \dots$).

Все эти серии носят имена ученых, впервые идентифицировавших соответствующие спектральные линии. Отметим, что продвижение в область все больших m сильно затрудняет измерения¹⁵, в частности серия Хансена – Стронга была обнаружена только в 50-х годах XX века. В настоящее время в астрофизической плазме наблюдают переходы между уровнями атомарного водорода с квантовыми числами, превышающими значения $n, m > 100$. Такие сильно возбужденные состояния атома называют ридберговскими состояниями, их изучение представляет как прикладной, так и общезначимый интерес. Последнее связано, в частности, с тем, что в согласно принципу соответствия Бора эти состояния почти классические¹⁶. Поэтому появляется экспериментальная возможность наблюдать за переходом от квантовомеханического описания атома к классическому.

Подводя итог сказанному, отметим, что модель Бора, будучи внутренне противоречивой и наполовину классической, наполовину квантовой, оказалась в прекрасном согласии с экспериментальными данными по спектру атома водорода и водородоподобных систем. Это означает, что идея квантования момента количества движения правильно схватывает особенности квантовомеханического описания строения атома.

Отметим также, что обобщение модели Бора на случай эллиптических орбит было выполнено А.Зоммерфельдом¹⁷ и носит название модели атома Бора – Зоммерфельда. Модель Бора – Зоммерфельда, существенно раздвигая возможности описания одноэлектронных систем по сравнению с первоначальной моделью Бора, является, тем не менее, своеобразным тупиком в развитии квантовой теории. В рамках такого подхода оказывается невозможным прогресс в описании строения многоэлектронных атомов, их взаимодействия с внешними электромагнитными полями и друг с другом, в частности вопрос о возникновении химической связи и образовании молекул. Более того, само описание движения электрона по некоторым разрешенным орбитам противоречит нашим квантовым представлениям о том, что такие орбиты в принципе не могут существовать, поскольку в силу соотношения неопределенностей одновременно точные значения координаты и скорости электрона определены быть не могут.

Модель Бора и гипотеза де Бройля.

Обсудим теперь связь между постулатом квантования момента количества движения в атоме и волновыми свойствами электрона (гипотеза де Бройля). Для этого переписем квантовое условие Бора (3.22) в виде

$$L_z = mv_n r_n = \frac{2\pi\hbar}{\lambda_D} \cdot r_n = n\hbar,$$

или

$$n\lambda_D = 2\pi r_n, \quad (3.41)$$

т.е. на длине орбиты укладывается целое число волн де Бройля. Условие (3.41) имеет понятный физический смысл. Фактически стационарные орбиты Бора соответствуют стоячим электронным волнам де Бройля в атоме.

¹⁵ Одна из причин этого – быстрое уменьшение вероятности перехода с увеличением длины волны спектральной линии. Причину этого мы будем обсуждать при изучении квантовой теории электромагнитных переходов.

¹⁶ Возможность перехода к классическому пределу при описании квантовой системы требует, конечно, гораздо более подробного рассмотрения.

¹⁷ A.Sommerfeld (1868-1951) – немецкий физик – теоретик.

Релятивистское обобщение модели Бора.

Выше мы уже обращали внимание на то, что в тяжелых водородоподобных системах ($Z \gg 1$) электрон становится релятивистским, т.е. нашей модели уже недостаточно. Рассмотрим теперь релятивистское обобщение модели Бора. Так же как и раньше, ограничимся случаем круговых орбит. Запишем релятивистское уравнение движения в виде

$$\frac{d}{dt} \frac{m\vec{v}}{\sqrt{1-(v/c)^2}} = -\frac{Ze^2}{r^3} \vec{r}. \quad (3.42)$$

Поскольку на круговой орбите модуль вектора скорости остается постоянным, уравнение (3.42) можно переписать в виде

$$\frac{\gamma m v^2}{r} = \frac{Ze^2}{r^2}. \quad (3.43)$$

Здесь $\gamma = 1/\sqrt{1-(v/c)^2}$ - релятивистский фактор. Фактически уравнение движения (3.43) отличается от нерелятивистского случая (3.23) появлением множителя γ .

Будем также считать, квантовое условие Бора (3.22) верно и при релятивистских скоростях. Тогда имеем:

$$L_z = \gamma m v r = n\hbar. \quad (3.44)$$

Опять имеем два уравнения (3.43) и (3.44) для определения радиусов орбит и соответствующим им скоростей движения. После несложных преобразований получаем

$$v_n/c = \alpha Z/n, \quad (3.45)$$

$$r_n = a_0 \frac{n^2}{Z} \sqrt{1-(\alpha Z/n)^2}. \quad (3.46)$$

Отметим, в частности, что выражения для скорости движения по орбите, полученные в релятивистском и нерелятивистском случаях, совпадают. Найдем теперь энергию электрона на орбите. Поскольку при движении в кулоновском поле

$$E = \gamma m c^2 - \frac{Ze^2}{r} = \gamma m c^2 (1 - v^2/c^2) = m c^2 \sqrt{1-(v/c)^2}, \quad (3.47)$$

получим

$$E_n = m c^2 \sqrt{1-(\alpha Z/n)^2}. \quad (3.48)$$

Может быть, наиболее удивительным является то, что решение задачи существует не для любых Z . Как видно из (3.46) и (3.48) для основного состояния системы ($n=1$) полученные выражения теряют смысл для сверхтяжелых ядер с зарядом больше некоторого критического Z^* :

$$Z > Z^* = 1/\alpha = 137. \quad (3.49)$$

При $Z = Z^* = 137$ полная энергия электрона (включая энергию покоя) обращается в ноль, а орбита имеет нулевой радиус. Для ядер с большим зарядом устойчивой орбиты, соответствующей случаю $n=1$, в рамках модели Бора найти нельзя. То есть модель Бора фактически предсказывает существование конца таблицы Менделеева. Интересно, что точно такой же ответ получается и в рамках релятивистской квантовой теории, базирующейся на решении волнового уравнения Дирака¹⁸. Проверить сделанные предсказания напрямую вряд ли возможно, поскольку синтезировать ядра со столь большим зна-

¹⁸ Р.А.М. Dirac (1902-1984) – английский физик – теоретик, Нобелевская премия (1933).

чением Z (необходимо еще электронную оболочку создать) в настоящее время проблематично¹⁹.

Чуть более подробно остановимся теперь на случае небольших значений Z и рассмотрим вопрос о релятивистских поправках к энергетическим уровням атома водорода и водородоподобных ионов. Отметим, прежде всего, что в выражение (3.48) включена также энергия покоя электрона, которую мы не учитывали в рамках нерелятивистской теории. Поэтому для сравнения результатов и нахождения релятивистских поправок перепишем выражение (3.48), исключив из него энергию покоя

$$\tilde{E}_n = E_n - mc^2 = -mc^2 \left(1 - \sqrt{1 - (\alpha Z/n)^2} \right). \quad (3.50)$$

Проводя в (3.50) разложение корня в ряд Тейлора, получаем

$$\tilde{E}_n \approx -\frac{1}{2} \alpha^2 mc^2 \frac{Z^2}{n^2}, \quad (3.51)$$

что, как нетрудно видеть, совпадает с выражением (3.35). Релятивистская поправка к энергии δE_p получается при учете второго члена разложения корня в (3.50):

$$\delta E_p \approx -\frac{1}{8} mc^2 (\alpha Z/n)^4 = \frac{1}{4} \frac{\alpha^2 Z^2}{n^2} \cdot \left(-Ry \frac{Z^2}{n^2} \right). \quad (3.52)$$

Например, для основного состояния атома водорода имеем

$$\delta E_p \approx \frac{1}{8} mc^2 \alpha^4 = \frac{1}{4} \alpha^2 Ry \approx 1.8 \cdot 10^{-4} \text{ эВ}. \quad (3.53)$$

Экспериментальное доказательство дискретной структуры атомных уровней.

Опыты Франка и Герца.

В 1913 году Джеймсом Франком²⁰ и Густавом Герцем²¹ был проведен эксперимент, доказавший наличие в атоме дискретных энергетических уровней. Опыт Франка и Герца состоял в следующем. К разрядной трубке, содержащей катод (К), анод (А) и сетку (С), подавалось напряжение, как показано на рис.3.3 (ускоряющее напряжение между К и С $V_{КС}$ и слабое тормозящее напряжение между С и А $V_{СА}$). Трубка заполнялась насыщенными парами ртути. Электроны эмитировались с поверхности катода, ускорялись в пространстве между К и С, а затем попадали в тормозящее поле между С и А. В процессе движения от катода к аноду электроны испытывают упругие и неупругие соударения с атомами ртути. При упругих соударениях атом ртути остается в основном состоянии, при этом энергия электрона практически не меняется. В неупругом соударении электрон теряет энергию, атом переходит в возбужденное состояние. В эксперименте измерялся анодный ток (количество электронов, пришедших на анод) в зависимости от величины напряжения между К и С. Типичная

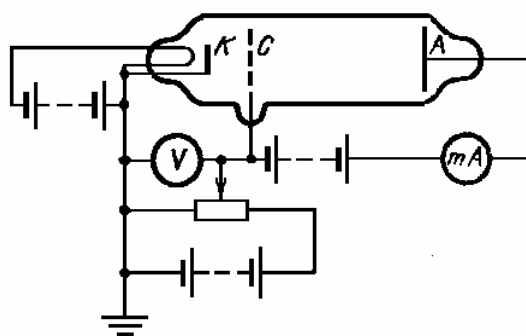


Рис.3.3. Опыты Франка и Герца (схема установки).

ссыщенными парами ртути. Электроны эмитировались с поверхности катода, ускорялись в пространстве между К и С, а затем попадали в тормозящее поле между С и А. В процессе движения от катода к аноду электроны испытывают упругие и неупругие соударения с атомами ртути. При упругих соударениях атом ртути остается в основном состоянии, при этом энергия электрона практически не меняется. В неупругом соударении электрон теряет энергию, атом переходит в возбужденное состояние. В эксперименте измерялся анодный ток (количество электронов, пришедших на анод) в зависимости от величины напряжения между К и С. Типичная

¹⁹ На самом деле при таких больших значениях Z необходимо учитывать неточность атомного ядра, что приводит к еще большему увеличению критического заряда.

²⁰ J.Franck (1882-1964) – немецкий физик, Нобелевская премия (1925).

²¹ G.Hertz (1887-1975) – немецкий физик, племянник Генриха Герца, Нобелевская премия (1925).

вольт - амперная характеристика (ВАХ), получающаяся в таких экспериментах, приведена на рис.3.4. Она характеризуется немонотонной зависимостью анодного тока от напряжения между катодом и сеткой, причем «расстояние» между максимумами (минимумами) тока составляет примерно 4.9 эВ. Физическая причина этого заключается в следующем. Если энергия электрона, набранная в промежутке между катодом и сеткой, недостаточна для того, чтобы возбудить атом, он будет испытывать только упругие столкновения и без труда преодолеет тормозящее поле между сеткой и катодом (мы полагаем, что $V_{KC} > V_{CA}$), внося свой вклад в анодный ток. Если энергия электрона лишь немного превышает величину потерь на возбуждение, электрон будет задержан тормозящим полем и вернется обратно на сетку, что приведет к уменьшению анодного тока. В случае если набираемая электроном энергия, немного превышает величину, кратную минимально необходимой для возбуждения атома, на зависимости анодного тока от ускоряющего напряжения также возникают провалы. Эти провалы обусловлены тем, что электрон с некоторой вероятностью может отдать энергию на возбуждение двух и более атомов ртути²². Таким образом, понять полученную ВАХ можно, если предположить, что минимальная порция энергии, которую электрон должен передать атому ртути при возбуждении, составляет 4.9 эВ, т.е. спектр состояний атома является действительно дискретным.

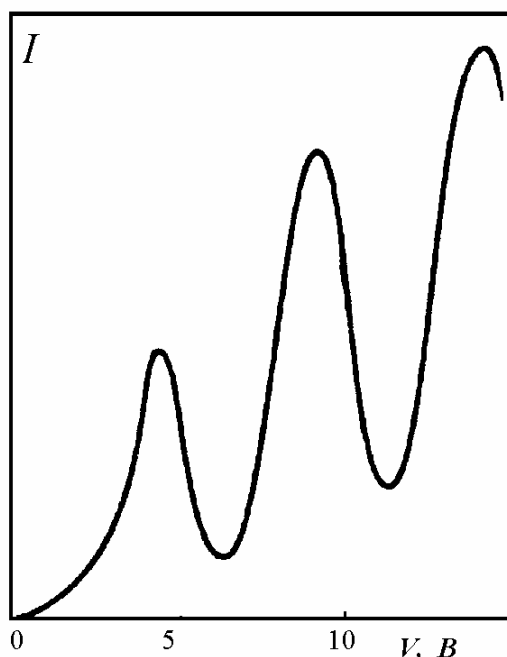


Рис.3.4. Зависимость анодного тока от ускоряющего напряжения.

Изотопический сдвиг атомных уровней.

До сих пор при рассмотрении движения атомного электрона мы предполагали, что атомное ядро является бесконечно тяжелым. Это приближение является вполне оправданным, так как даже для самого легкого атома, атома водорода, ядро которого состоит из единственного протона, выполнено условие $m/m_p \approx 1/1836 \approx 5.4 \cdot 10^{-4}$ (m_p - масса протона).

Однако более строго, мы имеем задачу двух тел, и электрон и протон обращаются вокруг общего центра масс. Учесть конечность массы атомного ядра легко: для этого всюду в теории вместо массы электрона m надо использовать приведенную массу $\mu = mM/(m + M)$, где M - масса атомного ядра. Тогда, учитывая, что $m/M \ll 1$, выражение для энергии n -го стационарного состояния в водородоподобном ионе, запишем в виде

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \frac{Z^2}{n^2} \approx -Ry \frac{Z^2}{n^2} \left(1 - \frac{m}{M}\right). \quad (3.54)$$

Поскольку масса ядер различных изотопов²³ одного и того же химического элемента является различной, мы получаем, что положение энергетических уровней у различных изотопов также отличается друг от друга. Это смещение уровней носит название изото-

²²С увеличением ускоряющего напряжения немонотонная структура зависимости постепенно размывается, что связано с возможностью возбуждения вышележащих атомных состояний.

²³Изотопами называются атомы одного и того же химического элемента, ядра которых содержат различное число нейтронов.

пического сдвига. Таким образом, мы показали, что одной из причин²⁴ изотопического смещения уровней является конечная масса атомных ядер.

Чуть подробнее остановимся на изотопическом сдвиге в водороде. Как известно, в природе существует три изотопа атомов водорода: собственно водород, тяжелый водород (дейтерий) и сверхтяжелый водород (третий). Ядро тяжелого изотопа (дейтрона) состоит из протона и нейтрона, ядро сверхтяжелого изотопа (тритона) – из протона и двух нейтронов. Поэтому, например, выражения для потенциалов ионизации всех трех изотопов можно записать в виде:

$$I \approx Ry(1 - m/M), \quad (3.55)$$

где M - масса каждого из ядер. В первом приближении можно считать, что массы дейтрона и тритона превосходят массу протона соответственно в два и три раза. Поэтому для разницы потенциалов ионизации изотопов водорода и дейтерия имеем

$$I_D - I_H \approx Ry \left(\frac{m}{m_p} - \frac{m}{2m_p} \right) = Ry \frac{m}{2m_p} \approx 2.7 \cdot 10^{-4} Ry, \quad (3.56)$$

Аналогично, для изотопа трития получим

$$I_T - I_H \approx Ry \left(\frac{m}{m_p} - \frac{m}{3m_p} \right) = Ry \frac{2m}{3m_p} \approx 3.6 \cdot 10^{-4} Ry. \quad (3.57)$$

Аналогично можно рассчитать и изменение длин волн спектральных линий. Очевидно, соответствующая величина будет достаточно малой, поэтому для селективного воздействия электромагнитного излучения на атомы только одного из изотопов (например, для его ионизации с целью последующего разделения изотопов) требуется излучение с высокой степенью монохроматичности.

Мюонный атом водорода.

Рассмотрим еще одну интересную водородоподобную систему – так называемый мюонный атом водорода. В этой системе вокруг протона (а может быть дейтрона, или тритона) вращается не электрон, а отрицательно заряженный мюон. Эта частица по своим свойствам очень похожа на электрон, но тяжелее электрона в 207 раз: $m_\mu = 207m$.

Кроме того, частица нестабильна, время ее жизни составляет $\tau_\mu \approx 2.2$ мкс. Это очень много, почти бесконечно много по масштабам атомного времени. Используя модель Бора для описания этой системы (в пренебрежении эффектами, связанными с конечной массой ядра), получим, что радиус первой орбиты в такой системе равен

$$a_\mu = \hbar^2 / m_\mu e^2 = a_0 / 207 \approx 2.5 \cdot 10^{-11} \text{ см},$$

а потенциал ионизации

$$I_\mu = m_\mu e^4 / 2\hbar^2 = 207 Ry \approx 2.8 \text{ кэВ}.$$

Система оказывается очень компактной, и именно это обстоятельство вызывает к ней интерес. Мюонные атомы могут образовывать молекулы также как и обычные атомы. При этом расстояние между ядрами оказывается порядка размера орбит электронов, образующих химические связи²⁵. Поэтому, если характерное расстояние между атомами водорода в обычной молекуле водорода составляет величину порядка ангстрема, то в мюонной молекуле это расстояние на два порядка меньше. Это делает мюонные молекулы водорода интересными с точки зрения проблемы ядерного синтеза. Оказывается,

²⁴ Существуют и другие причины возникновения изотопического сдвига, с которыми мы познакомимся позже.

²⁵ Строение простейших молекул мы будем обсуждать более подробно в конце курса.

при расстоянии между дейтронами (или дейтроном и тритоном) достигаемом в мюонной молекуле реакция синтеза происходит с достаточно большой вероятностью, так что уже не требуется создание высокотемпературной плазмы. При этом сам мюон в реакции не участвует, выступая в роли своеобразного катализатора (отсюда название – мюонный катализ). Принципиальная возможность такого способа осуществления управляемой термоядерной реакции была продемонстрирована в экспериментах группы Л.Альвареса²⁶ в 1956 году.

Задачи.

- 3.1. Показать, что в пределе больших квантовых чисел ($n \gg 1$) частота излучения на переходе $n \rightarrow n-1$ совпадает с классической частотой обращения электрона по орбите.
- 3.2. Считая движение электрона в атоме классическим, определить время падения электрона на ядро в водородоподобном ионе с зарядом Z . Радиус начальной орбиты $r_0 = a_0 n^2 / Z$.
- 3.3. Последовательность длин волн линий в спектральной серии некоторого элемента определяется соотношением (серия Пикеринга)

$$\frac{1}{\lambda_n} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 2.5, 3, 3.5, 4, \dots$$

Определить, что это за элемент, и переходам между какими уровнями соответствует данная серия.

- 3.4. В рамках модели Бора определить радиусы орбит, уровни энергий и потенциал ионизации мюонного атома водорода ($p + \mu^-$).
- 3.5. В рамках модели Бора определить радиусы орбит, уровни энергий и потенциал ионизации атома позитрония ($e^+ + e^-$).
- 3.6. Воспользовавшись квантовым условием Бора, определить радиусы орбит и уровни энергий в центрально-симметричном силовом поле $\vec{F} = -k\vec{r}$. Орбиты считать круговыми.
- 3.7. Электрон движется по круговой орбите в центрально-симметричном потенциале $V(r) = -V_0 \exp(-\alpha^2 r^2)$, $V_0 > 0$. В рамках модели Бора найти условие, при выполнении которого в яме существует хотя бы один уровень.
- 3.8. Квантование в макроскопической системе: Искусственный спутник массы $m = 100$ кг движется по круговой орбите на высоте $H = 100$ км над поверхностью Земли. В рамках модели Бора оценить номер квантового числа, соответствующего движению по такой орбите. Определить изменение радиуса орбиты при изменении квантового числа на величину $\Delta n \cong 1$.

²⁶ L.Alvarez (1911-1988) – американский физик – экспериментатор, Нобелевская премия (1968) «За вклад в физику элементарных частиц ...»