

Теория на Бор за водородният атом

Експериментите на Ръдърфорд през 1911 г. показват, че всеки атом притежава положително заредено ядро с радиус $10^{-14} \div 10^{-15}$ m, където е съсредоточена почти цялата маса на атома. Около ядрото по орбити с радиуси от порядъка на 10^{-10} m се движат атомните електрони със скорост $v \approx 10^6$ m/s. Този модел на атома се нарича **планетарен**.

Според класическите представи при такава скорост на електрона неговото ускорение е $a = v^2/r \approx 10^{22}$ m/s² и той би трябвало да излъчва електромагнитни вълни с непрекъснат спектър. Вследствие на това електронът ще губи енергия и ще „падне“ върху ядрото. Но орбитите на електроните са устойчиви, атомните спектри на излъчване и поглъщане са линейни, а не непрекъснати, което е доказателство, че класическите представи са неприложими за обяснение на движението на електроните в атома.

1. Спектър на атома на водорода

Според класическата физика енергията, импулсът и моментът на импулса на електрона в атома могат да заемат всевъзможни стойности. От гледна точка на това допускане не е било възможно да се обяснят особеностите на спектъра на водородния атом.

Изследванията показват, че **спектърът на излъчване на атомите на водорода** е линеен и честотата на излъчените вълни се представя с израза

$$\nu = R \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right), \quad (1)$$

където

$$R = \frac{\mu e^4}{8 \varepsilon_0^2 h^3} = 3,29 \cdot 10^{15} \text{ Hz} \quad (2)$$

е **константата на Ридберг**, n_1 и $n_2 = n_1 + 1, n_1 + 2, n_1 + 3 \dots$ са цели числа, а μ е **приведената маса** на електрона и ядрото на атома на водорода или протона

$$\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} = \frac{m_e}{1,0005}. \quad (3)$$

С увеличаване на n_2 спектралните линии се сближават и при много големи стойности се сливат в непрекъснат спектър с **гранична честота** ($\nu_{\text{гр}}$) за всяка серия.

Излъчените електромагнитни вълни са групирани по честоти в различни серии, наречени:

- серия на Лайман ($n_1 = 1$) – ултравиолетово излъчване;
- серия на Балмер ($n_1 = 2$) – видима светлина;
- серия на Пашен ($n_1 = 3$) – инфрачервено излъчване;
- серия на Брякет ($n_1 = 4$) – инфрачервено излъчване;
- серия на Пфунд ($n_1 = 5$) – инфрачервено излъчване.

Формулата за честотата на вълните от видимия спектър на светлината, която Балмер открива през 1885 г., е

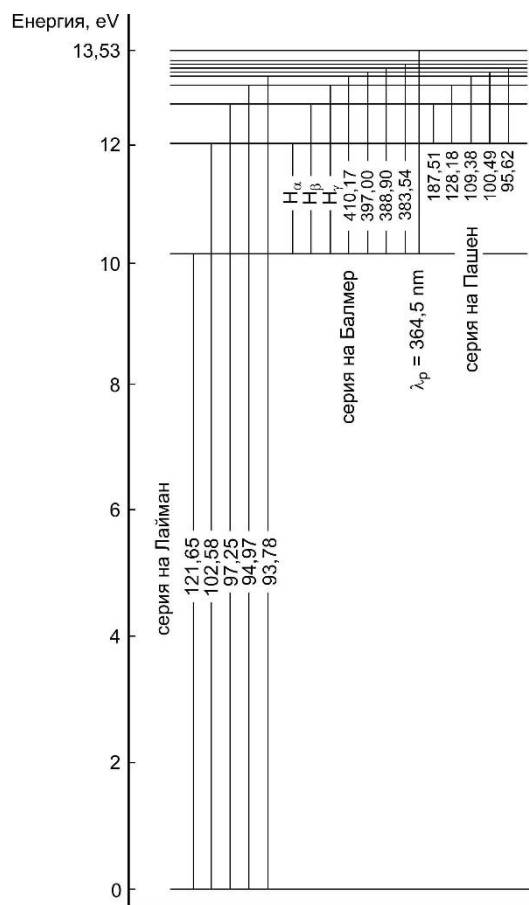
$$\nu = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n_2^2} \right), \quad (4)$$

където $n_2 \geq 3$ за светлината с различни цветове. Схемата на спектралните линии от сериите на Лайман, Балмер и Пашен е показана на фиг. 1. Със символите H_α , H_β , H_γ са означени характерните линии от серията на Балмер. Късовълновата граница на серията, съответстваща на граничната честота $\nu_{\text{гр}}$ при $n_1 = 2$, на която съответства дължина на вълната $\lambda_{\text{гр}} = c/\nu_{\text{гр}} = 364,5 \text{ nm}$. Честотата на всички вълни от спектъра на излъчване на атомите на водорода се изразява като разлика на два **спектрални терма** от вида

$$T(n) = R/n^2 \quad (5)$$

$$\nu = \frac{R}{n_1^2} - \frac{R}{n_2^2} = T(n_1) - T(n_2). \quad (6)$$

Това правило е изведено през 1908 г. и е известно, като **комбинационен принцип на Риц**. Съвкупността от всички възможни дискретни стойности на честотите на квантовите преходи, определени чрез този израз, определя линейния спектър на излъчване на атома на водорода. Комбинационният принцип на Риц е валиден за всеки атом, т.е. съставяйки различни комбинации от термове може да се определят всички възможни честоти на спектралните линии на излъчване на атомите на веществото.



Фиг. 1

2. Постулати на Бор

От уравнението за честотата на излъчената от възбудения водороден атом електромагнитна вълна се получава

$$h\nu = Rh\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right) = \frac{Rh}{n_1^2} - \frac{Rh}{n_2^2} = E_2 - E_1, \quad (7)$$

откъдето следва, че енергията на всяко стационарно състояние на електрона в атома се представя с израза

$$E_n = \frac{Eh}{n^2} = \frac{13,6}{n^2} \text{ eV}. \quad (8)$$

От формулата следва, че енергетичните състояния на атома на водорода са дискретни, а пълната енергия на електрона е отрицателна, тъй като потенциалната енергия на взаимодействие на електрона с положително зареденото ядро на атома е отрицателна.

Енергетичното състояние на електрона в атома на водорода с $n = 1$ и енергия $E_n = -13,6 \text{ eV}$ се нарича **основно**, а останалите са **възбудени**. Ако $n \rightarrow \infty$, $E_n \rightarrow 0$ и атомът е йонизиран. **Енергията на йонизация** на водородния атом е равна по абсолютна стойност на енергията на свързване на електрона в атома.

Енергията на йонизация на атома на водорода $E_{\text{йон}}$ е свързана с т.нар. **йонизационен потенциал на атома φ**

$$E_{\text{йон}} = e\varphi, \quad (9)$$

откъдето следва

$$\varphi = \frac{E_{\text{йон}}}{e} = \frac{Eh}{en^2} = 13,6 \text{ V}. \quad (10)$$

Разстоянието от ядрото, спрямо което, съгласно теорията на Бор, електронът в атома на водорода пребивава безкрайно дълго време без да излъчва енергия, се нарича **първа Борова орбита**. Радиусът на първата Борова орбита е

$$a_0 = r_1 = \frac{h^2 \varepsilon_0}{\pi m_e e^2} = 0,0529 \text{ nm}. \quad (11)$$

Радиусът на останалите възможни орбити се изчислява с формулата $r_n = n^2 a$ (фиг. 2).

През 1911 г. **Нилс Бор формулира три основни постулата**, с които обединява планетарния модел на атома на Ръдърфорд, закономерностите в спектрите на атомите и квантовия характер на излъчване и поглъщане на светлината:

– Съществуват стационарни състояния на атома, в които той не излъчва енергия. На тях съответстват орбити при движение по които електроните не излъчват електромагнитни вълни.

– В стационарно състояние моментът на импулса на електрона се квантува (приема дискретни стойности) и удовлетворява условието

$$L = mvr = n\hbar, \quad (12)$$

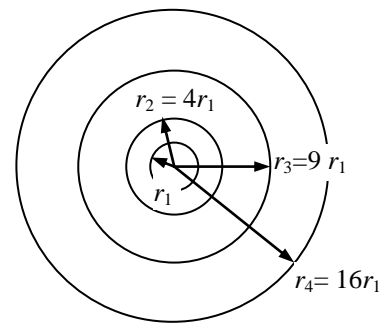
където m и v са съответно масата и скоростта на електрона, r е радиусът на стационарната орбита, а n е цяло положително число ($n = 1, 2, 3, \dots$).

– При преход между две стационарни състояния електронът излъчва или поглъща фотон с точно определена енергия

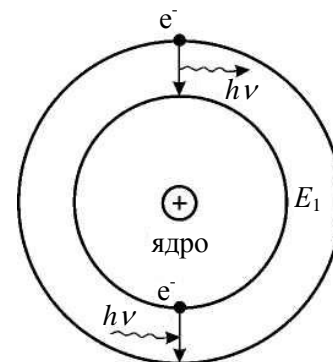
$$E_\gamma = h\nu = E_2 - E_1, \quad (13)$$

където E_1 и E_2 са енергиите, съответстващи на състоянията между които се извършва прехода, а ν е честотата на фотона. Ако $E_2 > E_1$ преходът съответства на излъчване, ако $E_2 < E_1$ той съответства на поглъщане на електромагнитна енергия. При преход на електрона от състояние с по-висока в състояние с по-ниска енергия той преминава от по-отдалечена от ядрото орбита на по-близо разположена до него орбита и излъчва енергия, а при поглъщане на енергия той се отдалечава от ядрото на атома (фиг. 3).

На фиг. 4 е представен **енергетичният спектър** на електрона в атома на водорода. В областта на положителните стойности на енергията спектърът на електрона е непрекъснат (свободен електрон), а в областта на отрицателните стойности енергетичният спектър на свързания електрон е дискретен, поради което в свързано състояние електронът може да се намира на едно от тези



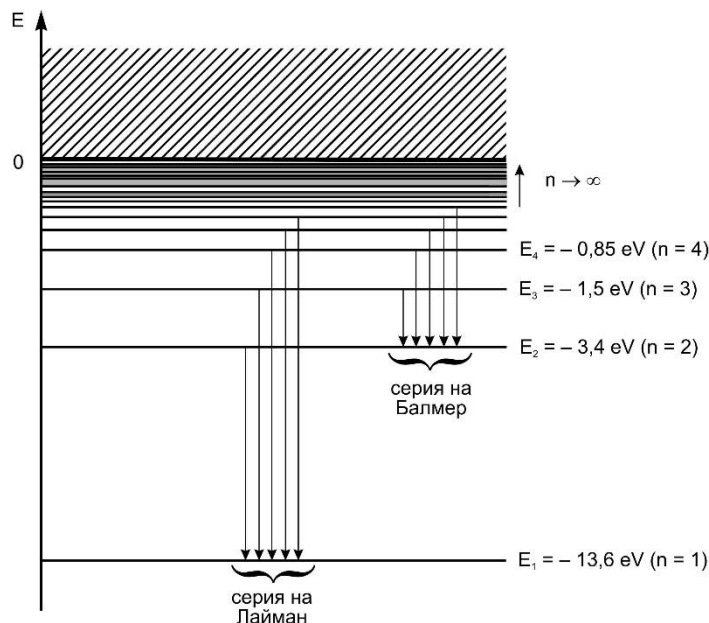
Фиг. 2



Фиг. 3

фиксиращи енергетични нива. Електронните преходи между отделните енергетични нива се отбелязват с вектор, който свързва състоянията, между които се извършва преходът.

Възбуждането на атомите се извършва по различни начини: чрез удари помежду им при хаотичното им топлинно движение, при пропускане на електричен ток в газовете и преминаване на сноп заредени частици във веществото, при поглъщане на електромагнитно лъчение и др.



Фиг. 4

3. Принцип на съответствието

Формулите за честотата на спектралните линии на водородни атом на пръв поглед противоречат на класическата физика, според която честотата на излъчената електромагнитна енергия трябва да съвпада с честотата на обикаляне на електрона около ядрото. Бор обаче бил убеден, че резултатите от прилагането на неговите постулати в приближение към явленията от макроскопичния свят ще дадат същите резултати, както и класическата физика. Така той формулира **принципа на съответствието**, който гласи, че при нарастване на квантовото число n резултатите на квантовата физика се доближават до тези на класическата физика.

При увеличаване на n радиусът на орбитата на електрона нараства, а разликата в енергиите на съседните енергетични нива клони към нула

$$\Delta E = E_n - E_{n-1} = Rh \frac{1}{(n-1)^2} - \frac{1}{n^2} \approx \frac{2Rh}{n^2}. \quad (14)$$

Крайният резултат е, че при голямо n енергията на електрона се изменя непрекъснато, а радиусите на съседните орбити са толкова близки, че те стават неотличими една от друга.

За честотата на излъчената светлина при даден преход с голямо квантово число n се получава

$$\nu = \frac{\Delta E}{h} = \frac{2R}{n^3} = \frac{2m_e e^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 n^3} = \frac{e}{4(\pi r_n)^{\frac{3}{2}} (m_e \varepsilon_0)^{\frac{1}{2}}}, \quad (15)$$

където r_n е радиусът на орбитата на електрона.

От гледна точка на класическата електродинамика при въртене по кръгова орбита електронът трябва да излъчва електромагнитни вълни с честота, равна на честотата на обикаляне около ядрото. При обикаляне на електрона около ядрото на атома на водорода центробежната сила, действаща върху него се уравнива с кулоновата сила на привличане от страна на ядрото (фиг. 5), т.е.

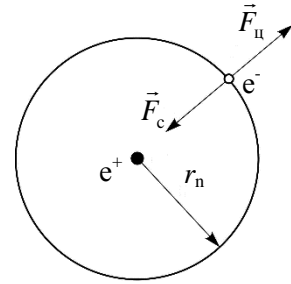
$$\vec{F}_u = -\vec{F}_c \quad (16.16)$$

или

$$m_e 4\pi^2 \nu^2 r_n = \frac{e^2}{4\pi \varepsilon_0 r_n^2}, \quad (17)$$

откъдето за честотата се получава

$$\nu = \frac{e}{4(\pi r_n)^{\frac{3}{2}} (m_e \varepsilon_0)^{\frac{1}{2}}}, \quad (18)$$



Фиг. 5

т.е. при големи квантови числа спектърът на излъчване, който следва от квантовата теория, е същият както и от гледна точка на класическата физика. В по-обща формулировка принципът на съответствието означава, че между всяка теория, която е продължение на класическата и самата класическа теория съществува закономерна връзка и в определени гранични случаи новата теория дава същите резултати, както класическата.

4. Вълни на Дьо Бройл

Френският физик Луи дьо Бройл през 1924 г. допуска, че **корпускулярно-вълновият дуализъм има универсален характер**. Съгласно неговата хипотеза всяка материална частица притежава вълнови свойства и на всяка частица с импулс p може да се съпостави вълна с дължина $\lambda_B = h/p$, наречена **вълна на Дьо Бройл**. Така той въвежда и за частиците двойствеността, която е характерна за светлината, като разпростира този възглед върху цялата материя.

Вълновите и корпускулярните свойства на частицата са свързани в уравненията

$$E = \hbar \omega, \quad (19)$$

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}, \quad (20)$$

където \vec{k} е вълновият вектор на частицата.

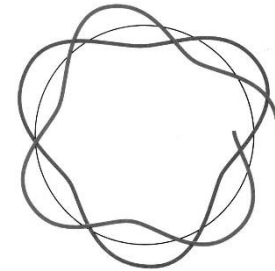
Дължината на вълната на Дьо Бройл за частица с маса m , скорост $v \ll c$ и кинетична енергия E_k е

$$\lambda_B = \frac{h}{\sqrt{2mE_k}}. \quad (21)$$

За електрони с кинетична енергия 1 keV дължината на вълната на Дьо Бройл е $0,4 \cdot 10^{-10}$ m, която е съизмерима с размерите на атомите и с разстоянията между атомите и молекулите в твърдите тела.

С помощта на хипотезата за корпускуларно-вълновия дуализъм на частиците на веществото Луи дьо Бройл успява да обясни квантуването на електронните орбити в атома на водорода. Той допуска, че възможните съгласно теорията на Бор електронни орбити са такива, че върху тях съществуват стоящи електронни вълни с определена дължина λ_B (фиг. 6) и е в сила съотношението

$$n\lambda_B = \frac{nh}{p} = \frac{nh}{mV} = 2\pi r, \quad (22)$$



Фиг. 6

където n е цяло число, а r е радиусът на електронната орбита. От получените уравнения следва условието за квантуване на момента на импулса на електрона.

Съвсем естествено възниква въпросът: в кои случаи вълновите свойства на частиците са съществени и могат да се регистрират и в кои случаи те са пренебрежими? От оптиката е известно, че вълновата природа на светлината се проявява, когато дължината на вълната λ е съизмерима с характерните размери на нееднородностите на средата L , в която се разпространява ($\lambda \sim L$). Ако $\lambda \ll L$ вълновите свойства на светлината не се проявяват. Същото се отнася и за механичните вълни. Аналогично вълновите свойства на частиците се проявяват, когато дебройлевската дължина на вълната им λ_B е сравнима с характерния размер на областта на движение на частицата L , т.е. $\lambda_B \sim L$, т.е. микрочастиците проявяват своите корпускуларни и вълнови свойства в зависимост от външните условия. В това се изразява същността на корпускуларно-вълновия дуализъм.

Трябва да се има предвид, че вълновите свойства са присъщи и на макроскопичните тела, но те не са наблюдаеми експериментално. Дължината на вълната на Дьо Бройл за тяло с маса $m = 10^{-6}$ g и скорост $v = 1$ cm/s е $\lambda_B = h/mv = 6,62 \cdot 10^{-23}$ m, която е не само значително по-малка от размера на частицата, но и много по-малка от радиуса на атомните ядра. Затова за описание на движението им се използват законите на класическата механика. На частица с маса 5 g, движеща се със скорост 10 m/s, се съпоставя вълна на Дьо Бройл с дължина $\lambda_B \gg 10^{-32}$ m, която е извън възможните граници за наблюдение.

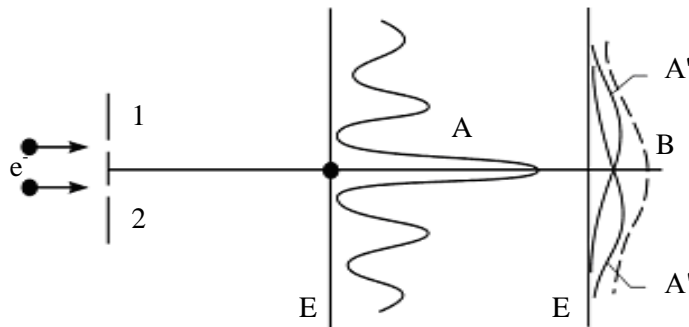
Вълните на Дьо Бройл се отразяват, пречупват, интерферират и изпитват дифракция по законите на вълновата оптика.

5. Съотношения за неопределеност

Откриването на вълновите свойства на микрочастиците показва, че в отделни експерименти те проявяват вълнови свойства, а в други проявяват свойства на частици. Това означава, че класическият подход за описание на тяхното поведение не е подходящ. Разликата между микрочастиците и вълните се състои в това, че ако използваме полупрозрачно огледало дадена вълна може да се раздели на две части и поотделно да се изследва всяка една от тях, докато електроните, неутроните и другите микрочастици не могат да бъдат разделяни на части. Освен това микрочастиците се различават от класическите макроскопични частици по това, че понятието траектория за тях е неприложимо. Това е илюстрирано с опита на Йенсен, осъществен през 1961 г. с успореден сноп моноенергетични електрони, падащи върху преграда с два процепа (фиг. 7). Върху екрана Е зад преградата възниква интерференчна картина, съставена от редуващи се минимума и максимуми (крива А) поради това, че електроните притежават вълнови свойства. Когато е отворен процеп 1, а процеп 2 е затворен се наблюдава дифракция от един процеп (крива А'), а когато процеп

2 е отворен, а първия процеп бъде затворен се получава разпределение на екрана, което е представено от крива А". Ако всеки от електроните в снопа преминава през точно определен процеп картината на екрана при отваряне на двата процепа едновременно би изглеждала като кривата В, която е сума от кривите А' и А", представена с пунктир. Различието между наблюдаваната интерференчна картина А от предполагаемата крива В показва, че електронът при движението си към преградата „вижда“ и двата процепа, защото само така може да бъде обяснена наблюдаваната интерференчна картина. Не е възможно да се определи през кой процеп ще премине електронът, което означава, че на него не може да му бъде приписана определена траектория на движение и за разлика от класическата физика, която приема, че състоянието на телата е напълно определено от три координати (x, y, z) и три компоненти на импулса (p_x, p_y, p_z), които могат да бъдат точно измерени във всеки момент, микрочастиците не притежават едновременно определяеми с безкрайна точност координати и импулс.

Тяхното състояние не се определя еднозначно, а за него само може да се говори с определена вероятност. Това е следствие от корпускуларно-вълновия дуализъм. Понятието дължина на вълната в дадена точка няма физичен смисъл, а тъй като импулсът се изразява чрез дължината на вълната, то микрочастица с точно определен импулс няма точно определени координати. Това е обективно свойство на микрочастиците, а не следствие от несъвършенството на измерителните прибори.



Фиг. 7

Нека разгледаме електрон, който се движи свободно и попада върху фотографска плака. Преди да попадне върху нея той се е движил свободно с точно определена скорост, а неопределеността в положението му е безкрайно голяма. При попадане върху фотоплаката той е локализиран в мястото на почерняване на плаката, което означава, че неопределеността в локализацията му е намалена до размерите на микрочастицата сребро вътре във фотоплаката. Локализацията му се ограничава до размерите на сребърните атоми – по-голяма точност не може да бъде постигната! Възниква въпросът за неопределеността на импулса на електрона? Електронът може да е спрял напълно ($v = 0, p = 0$) или да е станал орбитален електрон (за вътрешните орбити в атома $v = 0,1$ с, а за външните скоростта е по-ниска), което означава, че импулсът му е силно неопределен, т.е. при голяма точност на определяне на координатите (локализация до размерите на атома) импулсът на електрона става неопределен.

Координатите и импулсът на всяка микрочастица могат да се определят с приближение съответно ($\Delta x, \Delta y, \Delta z$) и ($\Delta p_x, \Delta p_y, \Delta p_z$) в съответствие със **съотношенията за неопределеност, наречени още релации на Хайзенберг**

$$\Delta x \cdot \Delta p_x > \hbar, \quad \Delta y \cdot \Delta p_y > \hbar, \quad \Delta z \cdot \Delta p_z > \hbar. \quad (23)$$

Колкото по-точно са определени координатите на микрочастицата, толкова по-неопределен е нейният импулс и обратно. По тези причини в квантовата механика не се говори за траектория на частиците в класическия смисъл понеже за тях тази неопределеност е съществена.

Привидното противоречие между корпускулярната и вълновата същност на материалните обекти не е давало покой на много физици. Самият Хайзенберг се е питал: „Как е възможно природата да е толкова абсурдна, както изглежда в нашите атомни експерименти?“. Съществуват експерименти, които доказват и двете същности на фотоните. Например при ефекта на Комптън светлината проявява последователно вълновите и корпускулярните си свойства - на първия етап на разсейване на лъчението от мишената то има поведение на поток фотони, а в измерителния блок същото лъчение има поведение на електромагнитна вълна, която изпитва дифракция при попадане върху кристала.

Нилс Бор въвежда **принципа на допълнителност**, който по неговите думи се изразява в това, че „Вълновата и корпускулярната природа са два аспекта на една и съща реалност. Ако извършим измерване на вълновите свойства на една частица – например електронна дифракция – тогава ще установим вълновите, а не корпускулярните свойства на електроните. Ако извършим измерване на корпускулярните свойства на електрона – тогава не можем да регистрираме неговите вълнови свойства. Двете измервания изискват различни експерименти и не можем да установим едновременно двете същности.“