

Описание на водородния атом в рамките на модела на Бор и квантовомеханично описание

Описание на водородния атом в рамките на модела на Бор

Теорията на Бор може да се приложи за най-простия атом – атома на водорода, който съдържа един протон и един електрон. Масата на протона е много по-голяма от масата на електрона, поради което можем да приемем, че електронът се движи около неподвижния протон, намиращ се в центъра на атома. За разлика от масите електричните заряди на протона и електрона са еднакви по големина, но противоположни по знак. Силата на взаимодействие между електрона и протона се определя от закона на Кулон. Тя представлява центростремителна сила, под действие на която електронът се движи със скорост v_n по съответната орбита с номер n , с радиус r_n :

$$(1) \frac{mv_n^2}{r_n} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_n^2}.$$

Съгласно третия постулат на Бор радиусът r_n на орбитата трябва да удовлетворява условието

$$(2) mv_n r_n = n\hbar.$$

От (1) и (2) можем да получим за радиуса на n -тата орбита:

$$(3) r_n = \frac{4\pi\hbar^2\epsilon_0}{me^2} n^2$$

Ако заместим в (3) константите с техните стойности и положим $n=1$, ще определим радиуса на първата възможна орбита $r_1=0,53 \cdot 10^{-10}$ m. Получената стойност е в добро съответствие с това, което се определя от кинетичната теория на газовете.

Енергията на водородния атом се състои от потенциалната енергия на взаимодействие между ядрото (протона) и електрона и кинетичната енергия на движение на електрона със скорост v_n по съответната орбита с радиус r_n . Потенциалната енергия U_n може да се пресметне, като се използва връзката между работа и потенциална енергия, кинетичната T_n – като използваме (1) за да намерим скоростта v_n , а тяхната сума ще ни даде пълната енергия E_n на електрона, движещ се по орбитата с номер n :

$$(4) U_n = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_n}$$

$$T_n = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r_n}$$

$$(5) E_n = T_n + U_n = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r_n}$$

и ако заместим (3) в (5) ще получим:

$$(6) E_n = -\frac{me^4}{8h^2\epsilon_0^2} \frac{1}{n^2}.$$

Тъй като протонът е неподвижен (няма кинетична енергия), пълната енергия на атома също се дава от (6). Виждаме, че тя е отрицателна и с увеличаване радиуса на орбитата, на която се намира електронът, енергията нараства. При $n \rightarrow \infty$ $E_n=0$, т.е. това е максималната енергия на водородния атом.

От формула (6) се вижда също, че енергията на атома зависи само от едно цяло число n ($E_n \sim \frac{1}{n^2}$), наречено главно квантово число. Различните стойности на n определят енергетичните нива на електрона в атома. Енергетичното ниво при $n=1$ се нарича основно енергетично състояние (нормално състояние). Енергетичните нива при $n>1$ се наричат възбудени енергетични състояния на атома. Във възбудените състояния атомът не съществува дълго. Обикновено той излъчва квант енергия, съгласно втория постулат на Бор, и преминава в по-ниско енергетично състояние, а по-късно, изпускайки още един или няколко кванта, се връща в основното състояние. Основното състояние е най-устойчивото, тъй като се характеризира с най-малката стойност на пълната енергия.

С помощта на теорията на Бор може да се обясни произходът на линейните спектри на излъчване и поглъщане на атомите; за атома на водорода тази теория позволява да се установят определени съотношения между честотите (дължините на вълните) на отделни линии в спектъра, които са били открити по-рано по емпиричен път (сериите на Балмер, Лайман и Пашен).

Съгласно втория постулат на Бор за две енергетични нива с номера n и k се получава

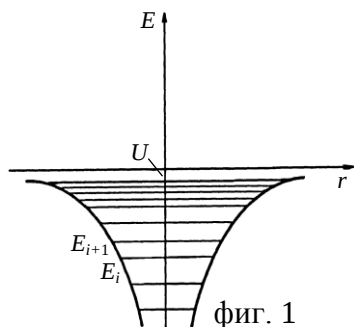
$$(7) f_k = \frac{me^4}{8h^3\epsilon_0^2} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right); \quad \frac{1}{\lambda_k} = \frac{f_k}{c} = \frac{me^4}{8h^3\epsilon_0^2 c} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right) = R \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right),$$

където $me^4/8h^3\epsilon_0^2 c = R$. Формула (7) има същия вид като получената емпирично зависимост на Ридберг. Замествайки стойностите на постоянните величини, за R се получава $R = 1,09 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$, което съвпада добре със стойността, получена от опитните данни за константата на Ридберг. Ако в горната формула положим $n = 2$, а $k = 3, 4, 5 \dots$ получаваме съответна група линии, които се излъчват от атома при преход на електрона от третата, четвъртата и т.н. орбита на втората, т.е. серията на Балмер.

Ако положим $n = 1$, а $k = 2, 3, 4, \dots$ получаваме серията на Лайман, която е разположена в ултравиолетовата част на спектъра. Когато $n = 3$, а $k = 4, 5, 6, \dots$ се получава серията на Пашен, разположена в инфрачервената област. От (7) следва, че могат да съществуват и други такива серии. През 20-те години на 20 в. са открити още серии в инфрачервената област на водородния спектър от Ф. Бракет, А. Пфунд и др. По такъв начин чрез теорията на Бор не само бил обяснен смисълът на формулите на Балмер и Ридберг, но и били предсказани нови серии от спектъра на водорода, които по-късно били открити експериментално.

С помощта на теорията на Бор се обясняват добре наблюдаваните спектри на излъчване и поглъщане на атомите на водорода. Пресметнатите стойности на енергетичните нива съвпадат с опитно получените резултати. За по-сложните атоми (с по-голям брой електрони) задачата става значително по-трудна и опростяванията не водят до задоволителни резултати. При изучаване строежа на многоелектронните атоми теорията на Бор се оказва недостатъчна. Тя претърпява редица усъвършенствания (въвеждане на елиптични орбити) и допълнения (въвеждане на допълнителни квантови числа), но нейният най-съществен елемент – наличието на дискретни енергетични нива в атома – се запазва. Моделът на Бор е комбинация от класически (орбити) и квантови (фотони) представи.

Квантовомеханично описание



Според квантовите представи за микрочастиците електронът в атома се характеризира с вълнова функция, с помощта на която може да се пресметне вероятността за намирането му в дадена точка от обема на атома. Тази функция удовлетворява стационарното уравнение на Шрьодингер и определя стационарните състояния на атома, които се характеризират с четири квантови числа вместо единственото квантово число в модела на Бор.

Ще разгледаме модела на водородния атом, използвайки основните съотношения на квантовата механика. Потенциалната енергия на електрона в полето на ядрото се определя от израза (4):

$$U = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r},$$

където r е разстоянието между електрона и протона. Графично горната функция представлява потенциална яма (фиг. 1) и може да се използват изводите за движение на частица в потенциална яма. Ако електронът се намира достатъчно близо до ядрото, където широчината на ямата е малка, енергията му е квантувана. Колкото по-близо е той до ядрото, толкова по-тясна е ямата и толкова по-отдалечени са енергетичните нива едно от друго. С нарастването на енергията електронът се намира на по-големи разстояния от ядрото, където нивата на енергията се доближават и всъщност се сливат, когато той достигне края на ямата. На основата на подобни разсъждения може да се направи изводът, че енергетичните нива на електрона в атома на водорода образуват последователност, стремяща се към определена граница, след което се наблюдава непрекъснат спектър на енергията (при $n \rightarrow \infty$, $E_n \rightarrow 0$).

Уравнението на Шрьодингер за този случай има вида

$$\Delta \psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi = 0.$$

– Както и при движение на микрочастица в потенциална яма, решението на уравнението на Шрьодингер в този случай води до дискретни стойности на енергията, т.е. наличие на енергетични нива. На всяко енергетично ниво съответства главно квантово число $n = 1, 2, 3, \dots$ и т.н. Това съвпада с резултатите от теорията на Бор, но там този резултат се получава вследствие на специално въведен постулат; тук дискретните енергетични нива са следствие от самата теория и се появяват като конкретни резултати от решаването на основното уравнение на тази теория.

– Оказва се, че на всяко енергетично състояние (с изключение на основното) съответстват по

няколко стойности на вълновата функция. На всяко състояние с главно квантово число $n > 1$ съответстват n^2 стойности на вълновата функция ψ_n . Всяка една стойност на вълновата функция физически съответства на определено състояние на електрона в атома.

Физичният смисъл на различните състояния (различните вълнови функции) се изразява в това, че в атома състоянията на електрона могат да се различават не само по стойностите на енергията, зависещи от квантовото число n , но още и по големината и направлението на момента на импулса на електрона. Големината на момента на импулса в атома на водорода също е квантувана; за всяка стойност на енергията E_n тя може да приема редица дискретни стойности:

$$L = \sqrt{l(l+1)}\hbar,$$

където стойностите на l са целите числа от 0 до $(n-1)$: 0, 1, 2, ..., $(n-1)$.

Проекцията на момента на импулса върху всяко направление също се квантува. За всяка стойност на l векторът $\vec{L}$ се ориентира по такъв начин, че неговата проекция L_x да удовлетворява равенството

$$L_x = m_l \hbar,$$

където стойностите на m_l са целите числа от $+l$ до $-l$, включително и нула.