Kapitola 2

Bohrova teorie atomu vodíku

Obsah:

Literatura:

[1] BEISER A. „Úvod do moderní fyziky“
[2] HORÁK Z., KRUPKA F. „Fyzika“
[3] HAJKO V. a kol. „Fyzika v experimentoch“

Jedním z velmi vážných problémů, který trápil fyziky koncem minulého století, byla otázka stavby atomů a jejich čárových spekter. Tehdy byl již znám elektron a rovněž se vědělo, že se neutrální atomy skládají z kladně nabité hmoty (od Rutherfordových pokusů nazývané jádrem) a záporně nabitých elektronů tak, že se jednotlivé typy nábojů navzájem kompenzují. Existovalo několik modelů atomu, z nichž však i nejvýznamnější - Thomsonův a Rutherfordův - protiřečily mnohým experimentálním faktům. Záhadou byla především čárová spektra atomů a molekul, o kterých bylo známo, že mají původ v pohybu kladné a záporně nabité hmoty uvnitř jednotlivých atomů a molekul.

Přestože se tento problém podařilo uspokojivě vyřešit až v rámci Schrödingerovy kvantové mechaniky, již v roce 1913 vznikla velmi „ztřeštěná“ teorie mladého dánského fyzika Nielse Bohra, kterou se snažil vysvětlit kvantitativní závislosti v nejjednodušším, již tehdy dobře prozkoumaném, čárovém spektru - spektru zářícího atomu vodíku. Bohrova představa měla daleko do logicky konzistentní teorie. Podobně jako Planck zavádí i Bohr jakýsi umělý předpoklad o kvantování energie (tentokrát v problému pohybu hmotného bodu v poli centrální síly), který ve spojení s klasickými představami dává předpovědi v mnoha směrech shodné s experimentem. Bylo však mnoho věcí, které Bohrova teorie nebyla schopna vysvětlit. Již fakt, že uměla popsat pouze atom vodíku a žádný jiný, hovoří sám za sebe. Když však němečtí fyzikové Franck a Hertz roku 1914 realizovali známý pokus, v němž prokázali kvantování energie i v případě složitějších atomů (rtuti), získala Bohrova teorie světovou proslulost. My však na ni musíme pohlížet ve světle následujícího vývoje jako na velmi mlhavé tušení základních rysů kvantového světa. Velmi příznačný je zde Newtonův příměr o oblázcích nacházených na pobřeží oceánu. Z jednoho či několika mála kamínků, které nalezname na pláži, jen s obtížemi můžeme říci více o celém pobřeží a ještě méně o moři toto pobřeží omývající. Bohr (a nakonec i Planck) jeden takový kamínek zvedli a prozkoumali. Svým kolegům tak otevřeli cestu za novým, vzrušujícím poznáním.

2.1 Klasické modely atomu vodíku

[1] str.115-135
[2] str. 893-900

Vývojem klasických představ o stavbě atomů a speciálně i atomu vodíku se budete podrobně zabývat v kursu atomové fyziky. Pro osvěžení základních poznatků odkazuji čtenáře na uvedenou literaturu. Některá zajímavá fakta pak naleznete i v úlohách k této kapitole.

2.2 Spektrum atomu vodíku

Pořádně si promyslete základní fakta uvedená v

[1] str. 135-139

2.3 Bohrův model atomu vodíku

[1] str. 139-147, 150-155
[2] str. 902-905

Bohrovy postuláty

Problémy s elektromagnetickou nestabilitou Rutherfordova modelu atomu jakož i snaha reprodukovat kvantitativní závislosti ve spektru nejjednoduššího atomu - atomu vodíku, v jehož obalu se pohybuje jediný elektron, vedly Bohra k formulaci tří známých postulátů, z nichž vybudoval semikvantovou teorii tohoto atomu:

1. Elektrony v atomu vodíku se pohybují kolem jádra po kružnicích, pro něž platí

$$m_e v r = n\hbar \,, \qquad (2\text{-}1)$$

kde m_e je hmotnost elektronu, v jeho oběžná rychlost a r poloměr kruhové dráhy. Kvantové číslo n nabývá hodnot 1, 2, ...

2. Pohybují-li se elektrony po těchto drahách, které budeme nazývat orbity, nevyzařují ani neabsorbují elektromagnetickou energii.

3. Při přechodu elektronu z orbity s vyšším kvantovým číslem (n) na orbitu s nižším kvantovým číslem (m) vyzáří atom kvantum elektromagnetického záření - foton, při opačném procesu foton absorbuje. Kruhová frekvence tohoto fotonu je dána vztahem

$$\hbar\omega = |E_n - E_m| . \qquad (2\text{-}2)$$

Implicitně se pak dále předpokládá, že kromě těchto omezení můžeme použít ke studiu vodíkového atomu klasickou mechaniku.[1]

[1]Na první pohled je patrný vnitřní rozpor soustavy Bohrových postulátů. Na jedné straně se zdaleka nezříkáme použití klasické fyziky, na druhé straně ji doplňujeme o předpoklady, které jsou s ní v zřejmém rozporu. Velmi dobře je patrné rovněž výrazné zjednodušení situace, kdy předpokládáme, že elektrony obíhají kolem vodíkového jádra (ve vázaném stavu) po kružnicích. Vždyť i v klasické mechanice se odvozuje, že obecný tvar „vázané“ trajektorie částice v coulombickém poli je elipsa. Základního souhlasu Bohrovy teo-

Energetické spektrum atomu vodíku

První Bohrův postulát (2-1) znamená, že velikost impulsmomentu elektronu obíhajícího kolem jádra je jistým způsobem kvantována. Tato veličina, v klasické fyzice spojitá, může tedy v rámci Bohrovy teorie nabývat pouze diskrétních hodnot - přirozených násobků „škrtnuté“ Planckovy konstanty. Sloučíme-li tento fakt s rovností odstředivé a dostředivé (coulombické) síly

$$\frac{m_e v^2}{r} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r^2} \,, \tag{2-3}$$

kde na pravé straně rovnosti je zapsán Coulombův zákon udávající sílu mezi dvěma bodovými náboji, získáme přípustné hodnoty poloměrů Bohrových orbit i rychlostí elektronů na nich

$$r_n = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} n^2 \,, \tag{2-4}$$

$$v_n = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar}\frac{1}{n} \,. \tag{2-5}$$

Veličina $a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$ se nazývá **Bohrův poloměr atomu vodíku** a udává zhruba velikost vodíkového atomu za běžných podmínek.

Energie elektronu v poli vodíkového jádra je dána vzorcem

$$E = \frac{1}{2} m_e v^2 - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r} \,. \tag{2-6}$$

Po aplikaci kvantových výrazů (2-4,5) získáme přípustné hodnoty energie atomu vodíku [2], tzv. **energetické spektrum**

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^2}\frac{1}{n^2} \,. \tag{2-7}$$

Všimněte si, že všechny přípustné energie jsou záporné. To odráží fakt, že soustava jádro - elektron je vázaná. V opačném případě by nemělo smyslu hovořit o atomu. Energie E_1 odpovídá tzv. **základnímu stavu** (hovoříme též o základní energetické hladině) atomu vodíku, ostatní energie pak **stavům excitovaným** (vzbuzeným). Rozdíl mezi základní hladinou a nekonečně excitovanou hladinou se nazývá **disociační energie**, neboť minimálně

---

rie s experimentálními poznatky o spektru atomu vodíku se toto zjednodušení však příliš nedotkne. Teprve přesnější měření odhalí efekty, s nimiž si Bohrova teorie díky podobným zanedbáním nebude vědět rady.

[2] Zde ovšem zanedbáváme kinetickou energii jádra v těžišťové soustavě atomu. Jak uvidíme později, toto zanedbání nevnáší do teorie příliš velké chyby.

tato energie je potřebná k odtržení elektronu od atomu v základním stavu, tedy k disociaci tohoto atomu.

Spektrum atomu vodíku [3]

Podle posledního Bohrova postulátu vyzařuje atom vodíku elektromagnetickou energii ve formě kvanta (fotonu) pouze při přechodu elektronu z vyšší energetické hladiny na nižší. Frekvence vyzářeného fotonu je pak dána vztahem (2-2). Tak při přechodu z n-té hladiny na m-tou (n>m) vyzáří atom foton o úhlové frekvenci ω_{nm}

$$\omega_{nm} = \frac{m_e e^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^3}\left(\frac{1}{m^2}-\frac{1}{n^2}\right). \tag{2-8}$$

Na tomto vztahu pak můžeme snadno vybudovat popis emisního spektra atomu vodíku. A podobně i popis absorpčního spektra (které je negativem spektra emisního).

Všimněte si, že vzorec (2-8) je ve skvělé shodě se empirickým pravidlem klasifikujícím spektrální série atomu vodíku

$$\frac{1}{\lambda_{nm}} = R_\lambda\left(\frac{1}{m^2}-\frac{1}{n^2}\right), \tag{2-9}$$

kde R_λ je tzv. **Rydbergova konstanta**. Tu můžeme snadno určit vyhodnocením experimentálně získaných spekter atomu vodíku a s její pomocí určit i hodnotu Planckovy konstanty. Máme tedy k dispozici další nezávislou metodu určení hodnoty této fundamentální konstanty.

Započtení konečné hmotnosti vodíkového jádra

V předchozím odstavci jsme přistupovali k atomu vodíku jako k problému elektronu obíhajícího v elektrostatickém poli kladného bodového náboje pevně umístěného v počátku souřadnicové soustavy. Tato aproximace odpovídá předpokladu nekonečné hmotnosti jádra atomu. Je do značné míry oprávněná, neboť hmotnost elektronu je zhruba 1800-krát menší než hmotnost vodíkového jádra (protonu). Tedy chyby způsobené výše uvedenou aproximací jistě nebudou velké.

Problém vodíkového atomu je však možno vyřešit snadno i v případě, kdy budeme brát v úvahu konečnou hmotnost protonu. V klasické mechanice jste si totiž ukazovali, jak se problém dvou hmotných bodů převádí na problém jednočásticový. Víte, že zůstávají v platnosti všechny vztahy odvozené pro pohyb jediného hmotného bodu. Za jeho hmotnost však musíme dosadit redukovanou hmotnost příslušné dvojčásticové soustavy.

Chceme-li tedy upřesnit vzorce předchozího odstavce, musíme v nich provést záměnu

$$m_e \to \frac{m_e M_p}{m_e + M_p} ,$$

---

[3] Zde i v dalším musíme velmi pečlivě rozlišovat pojem spektra hodnot kvantované veličiny (např. energie), které chápeme jako množinu všech „kvantově“ přípustných hodnot, a spektra elektromagnetického záření vysílaného objektem - množina monochromatických módů resp. spektrálních čar. Kde to bude zřejmé z kontextu, nebudou oba pojmy explicitně rozlišovány.

kde M_p je hmotnost protonu. Snadno však ukážete, že příslušná redukované hmotnost a hmotnost elektronu se liší jen nepatrně.

Vodíku podobné ionty

Je jasné, že postupy a vzorce uvedené v předcházejících odstavcích jsou použitelné i při popisu jiných objektů tvořených jedním elektronem obíhajícím kolem bodového jádra (tzv. **vodíku podobné ionty**). Označíme-li protonové číslo jádra Z a jeho hmotnost M, je možno z výše uvedených vztahů pro vodík získat záměnou

e^n -> Z e^n

resp.

$$m_e \to \frac{m_e M}{m_e + M}$$

příslušné vzorce pro obecný vodíku podobný iont.

Bohrův princip korespondence

Podobně jako v případě harmonického oscilátoru i nyní máme o jednom systému dvě vylučující se výpovědi. Podle klasické fyziky náboj pohybující se periodickým pohybem vyzařuje elektromagnetické záření, jehož kruhová frekvence odpovídá kruhové frekvenci tohoto pohybu a jejím přirozeným násobkům (vyšším harmonickým). V makroskopickém světě je tento fakt velmi dobře ověřený i pro kruhový oběh náboje kolem bodového centra (synchrotronové záření). Bohrova teorie však říká něco jiného. Přípustné dráhy jsou nezářivé a ostatní zakázané. Dojde-li vlivem fluktuací k přechodu elektronu z jedné dráhy na druhou, nemá frekvence vyzářeného fotonu nic společného s oběžnou frekvencí elektronu na jeho orbitě.

Promyslíme-li si pozorně oba vylučující se popisy, zjistíme, že se týkají principiálně odlišných situací. Zatímco se kvantové předpovědi podstatné části spektra atomu vodíku týkají přechodů mezi hladinami s nízkými hodnotami kvantového čísla n, výsledky klasických experimentů odpovídají velmi vysokým hodnotám n (rozměr synchrotronu = průměr studované orbity je roven řádově metrům). Z předcházející kapitoly však víme, že pouze v limitě vysokých kvantových čísel by měly předpovědi klasické a kvantové fyziky splývat (Bohrův princip korespondence). Pokusme se tedy ověřit, zda podobné tvrzení platí i v případě atomu vodíku.

Především kruhová frekvence oběhu elektronu na n-té orbitě je dána vztahem

$$\omega_n = \frac{m_e e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2 \hbar^3} \frac{1}{n^3} \; . \tag{2-10}$$

Podle vztahu (2-8) dále kruhová frekvence fotonu vyzářeného elektronem při přechodu z (n+k)-té hladiny na hladinu n-tou splňuje

$$\omega_{n+k,n} = \frac{m_e e^4}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^3} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n+k)^2} \right),$$

což za předpokladu přechodu mezi dvěma blízkými vysoce excitovanými hladinami (n>>k) dává

$$\omega_{n+k,n} \approx k\frac{m_e e^4}{16\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^3}\frac{1}{n^3} = k\omega_n \ . \qquad (2\text{-}11)$$

To ale znamená, že v limitě vysokých kvantových čísel je frekvence elektromagnetického záření vyzařovaného atomem vodíku rovna oběžné frekvenci elektronu nebo vyšším harmonickým. V rámci Bohrovy teorie platí však tento závěr jen v limitě velkých kvantových čísel a samotný jev je interpretován jako důsledek přechodů mezi blízkými energetickými hladinami.

Franck-Hertzův pokus

[1] str.147-149
[3] str.95-100

Velmi zdařilý výklad problému je možno nalézt v citované literatuře, na kterou čtenáře odkazujeme.

Příklady

1) Čáry Balmerovy série spektra atomu vodíku odpovídají ve vzorci (2-9) hodnotě m=2 a n=3,4,... . Jejich vlnové délky byly změřeny takto [4]

n	λ [nm]
3	656
4	486
5	434
6	410
7	397
8	389
9	384

Určete z těchto údajů hodnotu Rydbergovy a Planckovy konstanty.

2) Podle Thomsonova modelu je tvořen atom vodíku kladně nabitou koulí o poloměru zhruba 5.10^{-11} m a celkovém náboji +e, v níž se pohybuje bodový elektron (náboj -e). V případě, že elektron neopustí během svého pohybu kladně nabitou oblast, ukažte, že jeho pohyb je dán superpozicí tří kolmých lineárních harmonických kmitů. Určete frekvenci těchto kmitů a přípustné energetické hladiny podle Planckova postulátu. Určete přechodům mezi těmito hladinami odpovídající elektromagnetické spektrum Thompsonova modelu atomu vodíku a srovnejte jej s empirickou formulí..

3) Po započtení konečné hmotnosti jádra atomu vodíku vyjádřete energii n-té hladiny ve formě řady

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2 h^2}\frac{1}{n^2}\left(1+\sum_{k=1}^{+\infty} a_k\left(\frac{m_e}{M_p}\right)^k\right)$$

a určete několik prvních členů této řady.

4) Ukažte, že za zmíněného předpokladu n>>k z (2-8) plyne (2-11).

5) Volný atom vodíku vyzářil foton a přešel tak z hladiny n-té na hladinu m-tou. Určete vlnovou délku a úhlovou frekvenci tohoto fotonu v závislosti na n a m, vezmete-li v úvahu zpětný ráz atomu. (Tj. uvolněná vnitřní energie atomu se transformuje na energii fotonu a kinetickou energii zpětného pohybu atomu). Výsledek srovnejte s (2-8).

---

[4] BROŽ J. a kol. „Fyzikální a matematické tabulky“, str. 150

Nápověda: Použijte zákonů zachování hybnosti a energie.

6) Opakujte výpočet z příkladu 5 pro atom pohybující se rychlostí v. Interpretujte získaný výsledek.

7) Řešení příkladů 5 resp. 6 modifikujte tak, aby popisovala absorpci fotonu klidným resp. pohybujícím se atomem vodíku.

8) Určete poloměry přípustných drah a rychlosti elektronu na nich, jestliže se elektron pohybuje v homogenním magnetickém poli o indukci B. Pohyb elektronu je kolmý k vektoru magnetické indukce.

9) Jak je kvantována energie Země při oběhu kolem Slunce?

Propočtěte si rovněž příklady z [1] na str. 155.