

Лекція 12

Тема. Модель атома Є. Резерфорда.

1. Модель атома Є. Резерфорда.
2. Постулати Бора.
3. Квантові числа.
4. Принцип Паулі.
5. Будова багатоелектронних атомів. Періодична система елементів Д.І. Менделєєва (самостійно).

1. Модель атома Є. Резерфорда.

Уявлення про дискретну будову речовини зародилися ще в глибокій давнині. Відповідно Демокріту (V ст. до н. е.) всі тіла складаються із атомів і міжатомних пустот. Різноманітність тіл визначається різноманітністю форм і розмірів атомів. Однак ці уявлення були лише геніальною догадкою і вони ще довго не отримували широкого поширення.

Першу спробу побудувати теорію атома в межах класичної фізики зробив Дж. Дж. Томсон. У 1903 р. він запропонував модель атома, згідно якої атом є рівномірно заповнена позитивною електрикою сфера, всередині якої містяться електрони (рис. 33.1). Однак ця модель не спиралася на будь-які експериментальні дані і носила штучний характер.

У 1904 р. японський фізик Х. Нагаока (1865 – 1950) порівняв атом із планетою Сатурн. Стійкість такої системи забезпечується на думку Нагаоки тим, що центральне важке тіло притягає більш легкі частинки із яких складається кільце, яке оточує тіло. Нагаока писав: **“...[атом], очевидно можна собі наближено уявити, якщо замінити це кільце від’ємно зарядженими електронами, а притягуючий центр – позитивно зарядженою частинкою.”** Ця модель найбільш подібна до сучасної моделі атома, однак її незаслужено забувають.

Для того, щоб в'ясувати характер розподілу позитивних і негативних зарядів в атомі, необхідне було безпосереднє дослідне "зондування" внутрішніх областей атома. Таке "зондування" здійснив на протязі 1909 – 1911 рр. Е. Резерфорд із співробітниками за допомогою α - частинок, спостерігаючи їх при проходженні через тонкі шари речовини (золотої фольги). У своїх дослідях Резерфорд використав дуже швидкі α - частинки ($E_\alpha = 7,68$ MeV; $q_\alpha = 2e^+$; $v_\alpha = 10$ м/с), які випромінює радіоактивний препарат RaG. Кожна така α - частинка при попаданні на люмінесцентний екран спричиняла спалах (сцинтиляцію).

Схема досліду Резерфорда наведена на рис. 33.2. Сцинтиляції спостерігались за допомогою мікроскопа, який повертався за допомогою пристрою разом з детектором навколо золотої фольги. Вся установка поміщалася у вакуумі.

Переважна більшість α - частинок, проходячи через металічну фольгу (товщина якої буде $l = 6 \cdot 10^{-7}$ м), не відхилялись тобто зазнавали дуже незначних відхилень, але окремі частинки

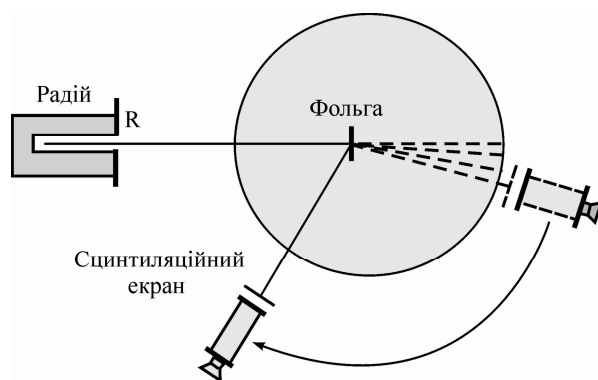


Рис. 33.2

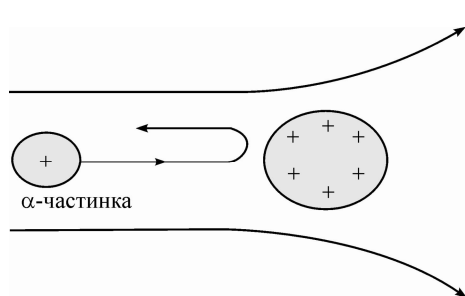


Рис. 33.3

зазнавали дуже великих відхилень. В середньому одна частинка з 8000 зазнавала відхилення на кут близький до 180° , тобто поверталася назад (рис. 33.3).

Проаналізувавши результати досліду, Резерфорд дійшов висновку, що таке велике відхилення α -частинок можливе лише за умови, що всередині атома є дуже сильне електричне поле, яке створюється зарядом, зв'язаним з великою масою, яка сконцентрована в невеликому об'ємі.

Виходячи із цього, Резерфорд у 1911 р. запро-

понував ядерну модель атома, відповідно якої атом являє собою систему зарядів, в центрі якої розміщене важке позитивне ядро із зарядом Ze , мізерних розмірів $\leq 10^{-15}$ м. Навколо ядра розміщені Z електронів, розподілених по всьому об'єму. Майже вся маса атома ($\approx 99,9\%$) зосереджена в ядрі.

Дальші досліди по розсіяню α - частинок металічними фольгами дозволили Резерфорду уточнити вище сформульовану модель атома:

1. В центрі атома міститься позитивно заряджене ядро, яке займає мізерну частину об'єму атома.

2. Навколо ядра по замкнутих орбітах, в об'ємі сфери радіусом $\approx 10^{-10}$ м, обертаються електрони, загальне число яких дорівнює порядковому номеру Z елемента.

Ядерна модель атома Резерфорда була значним кроком на шляху до сучасного уявлення про будову атома. Однак вона не була досконалою моделлю, і деякі принципові проблеми, про які мова піде нижче, залишалися не розв'язаними.

2. Постулати Бора.

Модель атома Резерфорда пояснювала характер розсіяння α - частинок при проходженні через металічні фольги, але виявилася в протиріччі із законами класичної електродинаміки.

1. Оскільки електрони обертаються навколо ядра з кутовим прискоренням, то згідно класичної електродинаміки вони повинні випромінювати електромагнітні хвилі і внаслідок втрати енергії електрон уже через $\tau \sim 10^{-8}$ с повинен впасти на ядро.

2. Спектр випромінювання атома в таких умовах повинен бути неперервний (суцільний), тобто атом повинен випромінювати світло найрізноманітніших довжин, що суперечить дослідним даним – **спектр атома дискретний (лінійчатий)**.

Таким чином ядерна модель атома разом з класичною електродинамікою виявилася неспроможною пояснити ні стійкість атома, а ні дискретність його спектра. Однак це була перша експериментально обґрунтована модель атома.

Як і для випромінювання абсолютно чорного тіла, класична фізика поставила діагноз – **катастрофа неминуча**. Проти “ультрафіолетової” катастрофи “ліки” знайшов М. Планк. Проти катастрофи, що назривала в фізиці атома “ліки” знайшов 28-річний датський фізик Нільс Бор.

Н. Бор, скориставшись ідеями Планка, створив квантову теорію атома, яка появилася в одному із наукових англійських журналів в 1913 р. Однак оскільки квантова теорія тільки зароджувалася, свої положення Бор сформулював у вигляді постулатів:

1. Електрон обертається не по всім можливим орбітам, а тільки по тим, на яких його енергія пропорційна $\hbar n$. Або, із всіх можливих механічних рухів електрона навколо ядра стаціонарними є лише ті, для яких момент кількості руху кратний \hbar , тобто

$$P = n\hbar, \quad (33.3)$$

де $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05 \cdot 10^{-34}$ Дж·с – стала Планка, $n = 1, 2, 3, \dots$

2. Електрон, рухаючись по одній із стаціонарних орбіт, енергії не випромінює.

3. Енергія випромінюється (або поглинається) лише при переході електрона із однієї стаціонарної орбіти на іншу у вигляді світлового кванта (фотона) з частотою

$$\nu = \frac{E_n - E_m}{h}. \quad (33.4)$$

3. Квантові числа.

Квантове число n із теорії Бора зберігається і в квантовій механіці під назвою **головне квантове число**. Воно може приймати будь-яке відмінне від нуля додатне число ($n = 1, 2, 3, \dots$) і як, було показано вище, від n залежить повна енергія стану атома.

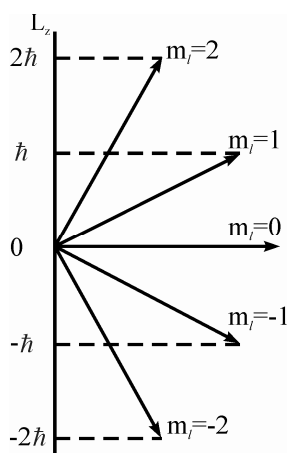


Рис. 33.13

Орбітальне (азимутальне) квантове число l визначає величину орбітального моменту імпульсу електрона. Воно може при заданому n приймати цілочислові значення від 0 до $n - 1$ ($l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$). Наприклад, в основному стані з $n = 1$ орбітальне квантове число може мати тільки одне значення $l = 0$, при $n = 2$, $l = 0, 1$, при $n = 3$, $l = 0, 1$ і 2 . Величина орбітального моменту імпульсу L_e зв'язана з азимутальним квантовим числом l співвідношенням:

$$|\vec{L}_l| = \hbar \sqrt{l(l+1)}. \quad (33.26)$$

Наприклад, при $l = 0$, $L_l = 0$; $l = 1$, $L_l = \hbar\sqrt{2}$; $l = 2$, $L_l = \hbar\sqrt{6}$; і т. д.

Магнітне квантове число m_l визначає проекцію моменту імпульсу електрона на деякий напрямок Z . При заданому l воно може приймати цілочислові значення від $-l$ до $+l$, включаючи і 0 . Так, наприклад, якщо $l = 1$, то m_l може бути рівним $-1, 0, +1$, якщо $l = 2$, $m_l = -2, -1, 0, +1, +2$, всіх $2l + 1$ значень. Оскільки момент імпульсу – вектор, то не дивно, що він квантується за величиною і за напрямком. На рис. 33.13 показано квантування напрямку моменту імпульсу електрона при $l = 2$. Як видно із рис. 33.13 при $l = 2$ можливі п'ять орієнтацій вектора \vec{L}_l . Проекція моменту імпульсу електрона \vec{L}_{lz} на заданий напрямок (вісь Z) дорівнює:

$$|\vec{L}_{lz}| = m_l \hbar. \quad (33.27)$$

Оскільки m_l набуває цілочислових значень, то сталу \hbar можна розглядати, як природну одиницю моменту імпульсу.

Пізніше (1925 р.) було доведено, що електрон володіє власним механічним моментом імпульсу \vec{L}_s , який незв'язаний з рухом електрона в просторі. Цей власний механічний момент імпульсу був названий спіном.

Величина власного моменту імпульсу електрона визначається за загальним законом квантової механіки (подібно до орбітального моменту імпульсу електрона):

$$|\vec{L}_s| = \hbar \sqrt{s(s+1)}. \quad (33.28)$$

Спінове квантове число s , яке входить в формулу (33.28), має тільки одне-єдине значення, рівне $1/2$. Тому єдино можливе значення $|\vec{L}_s|$, рівне:

$$|\vec{L}_s| = \hbar \sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1)} = \sqrt{3} \frac{\hbar}{2}.$$

Число s називається квантовим числом, але воно як правило не використовується з іншими квантовими числами, оскільки воно має тільки одне значення ($1/2$) і не вносить відмінності між станами. Власний механічний момент електрона може мати єдине значення $\vec{L}_s = \sqrt{3} \frac{\hbar}{2}$ і є також фундаментальною характеристикою електрона, як його маса або заряд.

Проекція власного механічного моменту $|\vec{L}_{sz}|$ електрона на напрямок Z квантована і визначається так:

$$|\vec{L}_{sz}| = m_s \hbar. \quad (33.29)$$

де $m_s = \pm 1/2$ і називається **магнітним спіновим квантовим числом**. Часто $m_s = 1/2$ позначають як "спін-вверх" (\uparrow), а $m_s = -1/2$ як "спін-вниз" (\downarrow).

Таблиця 33.2.

Назва	Позначення	Значення	Число можливих значень
-------	------------	----------	---------------------------

Головне	n	$1, 2, 3, \dots, \infty$	Будь-яке
Орбітальне	l	$0, 1, 2, \dots, n-1$; при заданому n	n
Магнітне	m_l	$-l, -l+1, \dots, 0, l-1, \dots, l$; при заданому l	$2l+1$
Магнітне спінове	m_s	$\pm \frac{1}{2}$	2

Перелік квантових чисел наведено в табл. 33.2. Таким чином, стан системи може бути повністю визначено квантовими числами n, l, m_l, m_s . Зауважимо, що для кожного l існує $2l + 1$ значень m_l , а для кожного s існує $2s + 1 = 2$ можливих значень m_s .

4. Принцип Паулі.

Задання різних квантових чисел для опису станів електронів має більш істотне значення ніж просто класифікація їх станів. Закон фізики, відомий під назвою принцип Паулі або принципу заборони, стверджує, що **не може бути більше одного електрона в даному стані, якщо цей стан описується чотирма квантовими числами: n, l, m_l, m_s . Або: в одному атомі не може бути двох електронів з одним і тим же набором квантових чисел n, l, m_l, m_s .**

Щодо системи електронів в атомі, то принцип Паулі можна записати так:

$$Z_1(n, l, m_l, m_s) = 1, \quad (33.30)$$

де $Z_1(n, l, m_l, m_s)$ – число електронів, що перебувають у стані, який описується набором квантових чисел n, l, m_l, m_s . Користуючись принципом Паулі, можна знайти максимальне число електронів в атомі, що мають задані значення трьох (n, l, m_l) , двох (n, l) і одного (n) квантових чисел. Знайдемо максимальне число $Z_2(n, l, m_l)$ електронів, що перебувають у станах з однаковим набором трьох квантових чисел n, l, m_l , тобто відрізняються лише значенням магнітного спінового числа, яке може набувати лише двох значень: $1/2$ і $-1/2$. Тоді

$$Z_2(n, l, m_l) = 2. \quad (33.31)$$

Максимальне число електронів, що перебувають у станах з однаковими двома квантовими числами n, l

$$Z_3(n, l) = 2(2l + 1). \quad (33.32)$$

Тут враховано, що при заданому квантовому числі l , магнітне квантове число m_l набуває $2l + 1$ значень.

Нарешті, знайдемо, користуючись принципом Паулі, максимальне число $Z_4(n)$ електронів, що перебувають в станах, які визначаються значенням головного квантового числа n . Оскільки число l при заданому n змінюється від 0 до $n - 1$, то сумуючи $Z(n, l)$ по l від 0 до $n - 1$, отримаємо

$$Z_4(n) = \sum_{l=0}^{l=(n-1)} 2(2l + 1) = 2n^2. \quad (33.33)$$

Сукупність електронів, стан яких описується однаковими значеннями квантового числа n , утворюють електронну оболонку: у відповідності із значенням n оболонкам дано позначення, запозичені з рентгенівської спектроскопії:

Значення n	1	2	3	4	5	6	7...
Позначення оболонки	K	L	M	N	O	P	Q...

Про електрони з однаковим значенням l говорять, що вони належать до однієї підоболонки. Часто для позначення l цифри замінюють буквами:

Значення l	0	1	2	3	4...
Буквене позначення		s	p	d	f g...

Так електрони з $l = 0$ утворюють s – підоболонку і називають їх s –електронами, з $l = 1$ – p- підоболонку (p – електрони), з $l = 2$ – d- підоболонку (d – електрони) тощо. Принцип Паулі обмежує число електронів в кожній оболонці і підоболонці.

В табл. 33.3 наведено максимальні числа електронів, що перебувають у станах, які характеризуються заданими значеннями головного n і орбітального l квантових чисел.

Таблиця 33.3.

n	Оболонка	Кількість електронів у станах					Максимальне число електронів
		s ($l = 1$)	p ($l = 1$)	d ($l = 2$)	f ($l = 3$)	g ($l = 4$)	
1	K	2	-	-	-	-	2
2	L	2	6	-	-	-	8
3	M	2	6	10	-	-	18
4	N	2	6	10	14	-	32
5	Q	2	6	10	14	18	50

Оскільки енергетичні рівні майже повністю визначаються значеннями n і l , то електронна конфігурація в атомі, як правило, задається зазначенням числа n і літерним (буквеним) позначенням l , а число електронів в кожній підоболонці вказується у вигляді верхнього індексу. Наприклад, основний стан атома кисню можна записати символічно так:

$$1s^2 2s^2 2p^4.$$

Тут вказано, що два електрони перебувають в станах з $n = 1$ і $l = 0$ ($1s^2$), два електрони мають квантові числа $n = 2$ і $l = 0$ ($2s^2$) і чотири електрони займають стани з $n = 2$ і $l = 1$ ($2p^4$).