

1.5. BOHRŮV MODEL ATOMU

Řešením této rovnice (integrací) dostaneme

$$r(t)^3 = C(t = 0) - 4cr_e^2 t, \quad (1.40)$$

kde $C(t = 0)$ je třetí mocnina poloměru dráhy v čase $t = 0$ s, ale to je zadaný poloměr $a_0 = 52,9$ pm. Doba života atomu v Rutherfordově modelu pak odpovídá času, pro který je $r(t) = 0$, tj.

$$r(t) = 0 \rightarrow t = \frac{a_0^3}{4cr_e^2}. \quad (1.41)$$

Pro hodnoty $c = 3 \times 10^8$ m.s⁻¹ a $r_e = 2,82 \times 10^{-15}$ m dostáváme hodnotu života atomu

$$t = 1,55 \times 10^{-11} \text{ s} \approx 16 \times 10^{-12} \text{ s} = 16 \text{ ps}. \quad (1.42)$$

Ani jeden z modelů atomu, Thomsonův a planetární model E. Rutherforda, tedy neodpovídá skutečnosti. Rutherford se v citovaném článku otázkám vnitřní struktury atomu vyhýbá slovy ([23], str. 671): *The question of the stability of the atom proposed need not be considered at this stage, for this will obviously depend upon the minute structure of the atom, and on the motion of the constituent charged parts.*²⁵ Jaká je tedy struktura atomu? Kde se v atomu nacházejí elektrony? Jak vznikají optická spektra atomů? Na tyto otázky klasická fyzika neuměla najít odpovědi. Nalezla je až fyzika kvantová.

1.5 Bohrův model atomu

Planetární model atomu vodíku vylepšil kvantovými úvahami dánský fyzik Niels Bohr (1885–1962), který byl v roce 1912 na několik měsíců stážistou v Rutherfordově laboratoři. Stejně jako Rutherford, ani Niels Bohr nevěděl, kolik elektronů má atom vodíku. Jejich počet se však dal odhadnout z poznatku, že za desítky let studia ionizovaných plynů nikdo nepozoroval jiný iont než H^+ . Bohr tedy uvažoval, že vodík má elektron právě jeden. Svůj model postuloval čtyřmi body:

²⁵Otázka stability navrhovaného atomu není uvažována, neboť evidentně závisí na přesné (zatím neznámé) struktuře atomu a pohybu jeho nabitých částí.

1. elektron krouží kolem jádra po kruhových drahách
2. přípustné jsou jen vybrané stacionární orbity – na nich elektron obíhá a nezáří
3. stacionární orbity jsou dány kvantováním momentu hybnosti

$$L = n\hbar, \quad (1.43)$$

kde \hbar je redukovaná Planckova konstanta

4. elektrony mohou přeskokovat mezi jednotlivými orbity – přeskoky jsou spojeny s vyzářením nebo s pohlcením fotonu

$$\hbar\omega = E_n - E_m, \quad (1.44)$$

kde E_n a E_m jsou energie elektronu na orbitách s indexy n a m .

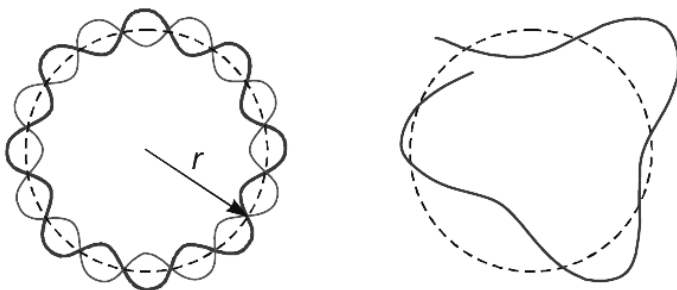
Musíme si však uvědomit, že tento model Bohr vytvořil roku 1913, kdy už byly téměř půl století známé Maxwellovy rovnice a necelých 30 let uplynulo od objevu elektromagnetických vln Heinrichem Hertzem (1886). Důsledky Maxwellových rovnic stály za neúspěchem Rutherfordova modelu atomu, neboť elektron obíhající kolem atomového jádra musí vyzařovat elektromagnetické záření a ztrácel by tak energii, až by zkolaboval v jádře. Z tohoto pohledu je formulace druhé a třetí podmínky poněkud troufalá.

Stojí za povšimnutí, že Niels Bohr nekvantuje ve třetím postulátu energii – jak to udělal zakladatel kvantové hypotézy Max Planck. Kvantování orbitálního momentu hybnosti však vede, jak si ukážeme, i na kvantování energie elektronů v atomu.

O několik let později (pravděpodobně v roce 1921) ukázal francouzský fyzik Louis de Broglie, že Bohrovy podmínky lze odvodit z principu duality vlna–částice, viz de Broglieho hypotéza na straně 242. Pokud bude délka orbity, tj. dráhy, po které elektron obíhá, rovna celočíselnému násobku de Broglieho vlnové délky elektronu, tak by elektron z vlnového hlediska vytvářel *stojatou* vlnu. Ta však nepřenáší energii, a tudíž by elektron na takovýchto drahách nevyzařoval. Z dnešního pohledu se tato argumentace zdá poněkud vágní, ale v roce 1921, kdy si fyzikové teprve zvykali na objevující se kvantový svět, byla uznána za dostatečnou.

Z výše uvedené podmínky na vlnové vlastnosti elektronu obíhajícího jádro přímo vyplývá i podmínka na *kvantování* velikosti momentu hybnosti elektronu. Poloměr dráhy elektronu r_n je takový, že délka orbity

1.5. BOHRŮV MODEL ATOMU



Obrázek 1.21: V Bohrově modelu atomu vodíku jsou povoleny jen takové orbity, jejichž délka odpovídá celočíselnému násobku de Broglieovy vlnové délky elektronu.

musí být rovna celočíselnému násobku de Broglieovy vlnové délky (vztah 4.14 na straně 243),

$$2\pi r_n = n\lambda = \frac{n\hbar}{p} \rightarrow pr = n\hbar. \quad (1.45)$$

Veličina pr je rovna velikosti momentu hybnosti elektronu ($L = |\vec{L}| = |\vec{r} \times \vec{p}| = rp$, neboť pro orbitální pohyb po kružnici jsou \vec{r} a \vec{p} na sebe kolmé), dostáváme podmínku kvantování pro moment hybnosti dle bodu 3 Bohrových podmínek.

Kvantování momentu hybnosti L je jediný *vstup* kvantové mechaniky do popisu atomu vodíku. Další výpočty a odvození jsou založeny na fyzice klasické. Pojďme se podívat na Bohrovo odvození.

Velikost momentu hybnosti je v klasické fyzice dána vztahem (pro $\vec{r} \perp \vec{p}$) $L_n = m_e v_n r_n$, kde v_n a r_n označují rychlost elektronu na orbitě o poloměru r_n . Na obíhající elektron působí odstředivá síla a dostředivá coulombická síla

$$m_e \frac{v_n^2}{r_n} = \frac{Ze'^2}{r_n^2}, \quad (1.46)$$

kde pro vodík je $Z = 1$. Vztah 1.46 můžeme upravit na tvar $L_n^2 = e'^2 m_e r_n$ a dosazením za $L_n = n\hbar$ máme

$$n^2 \hbar^2 = e'^2 m_e r_n \rightarrow r_n = n^2 a_0, \quad (1.47)$$

kde $a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e'^2} \sim 0,53 \text{ \AA}$ je tzv. *Bohrův poloměr*.

Energie elektronu na dráze n je dána součtem kinetické a potenciální energie,

$$E_n = \frac{1}{2}m_e v_n^2 - \frac{e'^2}{r_n} = -\frac{e'^2}{2r_n} = -\frac{e'^4 m_e}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -Ry \frac{1}{n^2}, \quad (1.48)$$

kde jsme použili při úpravách vztahy $v_n = \frac{p_n}{m_e} = \frac{n\hbar}{m_e r_n}$. Konstanta $Ry = \frac{e'^4 m_e}{2\hbar^2} = 13,6 \text{ eV}$ se nazývá Rydbergova. Rovnici 1.48 použijeme při matematickém vyjádření čtvrtého Bohrova postulátu pro model atomu. Elektrony mohou podle Bohra přeskakovat mezi jednotlivými orbitami, pouze je-li absorbován nebo emitován foton, jehož frekvence je dána *Bohrovou kvantovací podmínkou*

$$\hbar\omega = E_n - E_m = Ry \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right). \quad (1.49)$$

Pokud uvážíme, že $\hbar\omega = h\frac{c}{\lambda}$, vyjadřuje 1.49 stejnou závislost, jaká byla odvozena v Ritz–Rydbergově kombinančním principu (rovnice 1.3 na straně 21). Hodnota empirické konstanty R v Ritz–Rydbergově principu se shoduje relativně přesně s hodnotou Rydbergovy konstanty Ry dělenou součinem hc . Toto zjištění bylo velkým úspěchem Bohrova modelu, resp. použití kvantování ve světě atomů. Pokud se však porovnaly hodnoty vlnových délek například pro Balmerovu sérii s experimentálními hodnotami, byl zde malý rozdíl (pro spektrální linii H_α vycházela z Bohrova modelu vlnová délka 656,3 nm, z experimentu skoro 656,5 nm).

Nesoulad je zapříčiněn naším východiskem. Doposud jsme předpokládali, že v atomu obíhá elektron okolo jádra – protonu. To je ale podstatné zjednodušení skutečnosti. Přestože je poměr hmotností protonu a elektronu $m_p/m_e \sim 2000$, pohyb se nekoná kolem centra protonu, ale kolem společného těžiště, tj. místo hmotnosti elektronu m_e musíme použít redukovanou hmotnost $m^* = \frac{M_J m_e}{M_J + m_e}$, kde M_J je hmotnost jádra.

Zahrnutí hmotnosti jádra pro vodík vede ke změně v rovnici 1.48

$$Ry = \frac{e'^4 m_e}{2\hbar^2} \rightarrow Ry(\text{H}) = \frac{e'^4 m^*}{2\hbar^2},$$

což pro vodík znamená změnu Rydbergovy konstanty $Ry(\text{H}) = Ry/1,0005$. Tímto krokem se podařilo vysvětlit rozdíl mezi pozorovanou a spočtenou hodnotou vlnové délky spektrální linie H_α . Uvážením pohybu kolem společného těžiště dokážeme rozlišit spektra izotopů vodíku. Hodnota R je

1.5. BOHRŮV MODEL ATOMU

Tabulka 1.2: Vlnové délky Balmerovy série vodíku (v nanometrech) spočtené se započtením pohybu kolem těžiště. Je uvedené srovnání měřených (poz) a spočtených (poc) rozdílů vlnových délek pro izotopy H a D.

	$\lambda(\text{H})$	$\lambda(\text{D})$	$\lambda(\text{T})$	$\Delta\lambda(\text{H} - \text{D})_{\text{poc}}$	$\Delta\lambda(\text{H} - \text{D})_{\text{poz}}$
α	656,4686	656,2899	656,2304	0,1787	0,179
β	486,2730	486,1407	486,0966	0,1323	0,133
γ	434,1723	434,0541	434,0148	0,1182	0,119
δ	410,2929	410,1812	410,1440	0,1117	0,112

určena i hmotností jádra, a tudíž bude její hodnota, resp. m^* , jiná pro různé izotopy vodíku. Změna poloh spektrálních linií je malá, přesto však měřitelná, jak je shrnuto v tabulce 1.2.

Bohrův model atomu pomohl americkému fyzikovi Haroldovi Claytonovi Ureyovi (1893–1981) v roce 1931 nalézt ve spektru deuterium, druhý izotop vodíku. O tři roky později byl za jeho objev poctěn Nobelovou cenou za chemii.

1.5.1 Franckův–Hertzův experiment

Bohrův model dokázal vysvětlit spektrum atomu vodíku. Jsou však jeho předpoklady, zejména představa stacionárních drah elektronů kolem jádra, obecně platné?

Kvantování energie elektronů nezávislé na prvku atomu bylo experimentálně prokázáno roku 1914. Vděčíme za ně Jamesu Franckovi a Gustavu Hertzovi, třebaže svými pokusy zkoumali jiné jevy. Někdy je zásadní objev vedlejším výsledkem naprosto jiného výzkumu.

James Franck (1882–1964) a Gustav Hertz (1887–1975), synovec Heinricha Hertze, objevitele elektromagnetického záření, se roku 1914 zabývali studiem *ionizace* plynů pomocí pomalých elektronů, tj. elektronů urychlených nízkým napětím. Jejich experiment nebyl zaměřen na potvrzení nebo vyvrácení Bohrova modelu, ale na potvrzení neelastických srážek elektronů s atomy v plynech.

Schéma experimentu je zakresleno na obrázku 1.22. V trubici byly udržovány páry rtuti o tlaku přibližně 133 Pa (1 Torr). Z katody jsou termoemisi uvolňovány elektrony, které jsou urychleny napětím U_{M-K} mezi mřížkou a katodou. V experimentu měřili závislost proudu mezi mřížkou a katodou na napětí U_{M-K} . Z této závislosti chtěli zjistit, při jakém urychlujícím napětí dochází k neelastickým srážkám.