

Современная теория атома.

Дробные значения главного квантового числа

О.Г. Верин

Исходя из факта Бозе-эйнштейновской конденсации электронов в атоме, установленного в 2014 году на основе экспериментальных данных, были сформулированы базовые положения современной теории атома [1].

Наиболее значимые и легко проверяемые результаты последних исследований свойств атома рассмотрены в работе [2].

В данной статье более подробно обсуждается одно из ключевых следствий теории – дробные значения главного квантового числа водородоподобных атомов и ионов в виде простых дробей $n \approx N_1/N_2$.

Особое внимание уделено доказательству неслучайного характера совпадений фактических величин n и соответствующих простых дробей.

Суть накопившихся за последние десятилетия противоречий в теории атома хорошо известна и может быть наглядно проиллюстрирована на примере водородоподобных атомов и ионов.

Описание так называемых «водородоподобных уровней энергии» остается фактически неизменным многие десятилетия. Например, этот вопрос рассмотрен достаточно подробно в §68 знаменитого курса квантовой механики Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшица [3].

В полном соответствии с теорией главные квантовые числа основного и возбужденных состояний атома водорода являются целыми числами.

Однако, в отличие от водорода, водородоподобные атомы и ионы, как следует из хорошо известных экспериментальных данных, характеризуются так называемыми «эффективными главными квантовыми числами», которые не являются целыми числами ни в основном, ни в большинстве возбужденных состояний.

Введением нового термина с добавлением слова «эффективное» была «спасена» теория атома. Но трудности теории при этом никуда не исчезли.

С одной стороны, приходится предполагать, что внешний электрон при своем движении свободно проникает сквозь все внутренние электронные оболочки до самого ядра (как и в случае водорода).

А с другой стороны, пришлось сопоставлять этим «эффективным значениям главного квантового числа» некоторые «истинные» целые числа. Правда, доказать их «истинность» не представляется никакой возможности из-за сложности предполагаемого движения внешнего электрона сквозь плотно упакованные внутренние оболочки атомов.

Эта тупиковая ситуация разрешилась только в результате полного отказа от устаревшей теории атома, что стало возможным на основе более внимательного анализа известных экспериментальных данных.

Одно из принципиальных открытий, следующих из экспериментальных характеристик атомов, состоит в том, что «эффективные главные квантовые числа», не являющиеся целыми числами, выражаются простыми дробями вида N_1/N_2 , где N_1, N_2 – небольшие целые числа.

Рассмотрим подробнее сущность этой закономерности.

Значения главного квантового числа определяются непосредственно из формулы для энергии состояний атома водорода [3]

$$E = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}. \quad (1)$$

Фактические значения n «водородоподобных состояний» атомов, исходя из (1), выражаются через потенциалы ионизации:

$$n = \left(\frac{13,6}{\varphi_i} \right)^{1/2}. \quad (2)$$

Здесь φ_i - потенциал ионизации рассматриваемого атома,

13,6 эВ – потенциал ионизации атома водорода.

В более общем случае водородоподобного иона с зарядом атомного остатка ze формула (2) приобретает вид:

$$n = \left(\frac{13,6z^2}{\varphi_i} \right)^{1/2}. \quad (3)$$

Расчеты по формулам (2), (3) с использованием экспериментальных значений φ_i показали, что фактические значения n оказываются очень близкими к некоторым простым дробям:

$$n = \frac{N_1}{N_2}, \quad (4)$$

где N_1, N_2 – небольшие целые числа.

Теоретически такой результат означает, что внешний электрон отнюдь не проникает внутрь многоэлектронного атомного остова до самого ядра, а наоборот образует кольцевую внешнюю оболочку. При этом электрон, имея волновые свойства, может «резонировать» как на основной длине волны (при целых n), так и на гармонических составляющих (при дробных n).

Дробное значение главного квантового числа (4) означает, что это состояние электрона соответствует резонансу на гармонике под номером N_2 при количестве N_1 полных периодов этой гармонике на кольцевой оболочке.

Для определения конкретных значений числителя и знаменателя в формуле (4) удобно воспользоваться вспомогательной таблицей 1.

Таблица 1

Дробные главные квантовые числа (до 13-й гармоники включительно)												
$n=N1/N2$ в пределах $1 \leq n \leq 3$, где $N1$ - количество периодов на орбитали, $N2$ - номер гармоники.												
	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
1,5	1,333333	1,25	1,2	1,166667	1,142857	1,125	1,111111	1,1	1,090909	1,083333	1,076923	
2	1,666667	1,5	1,4	1,333333	1,285714	1,25	1,222222	1,2	1,181818	1,166667	1,153846	
2,5	2	1,75	1,6	1,5	1,428571	1,375	1,333333	1,3	1,272727	1,25	1,230769	
3	2,333333	2	1,8	1,666667	1,571429	1,5	1,444444	1,4	1,363636	1,333333	1,307692	
	2,666667	2,25	2	1,833333	1,714286	1,625	1,555556	1,5	1,454545	1,416667	1,384615	
		2,5	2,2	2	1,857143	1,75	1,666667	1,6	1,545455	1,5	1,461538	
		2,75	2,4	2,166667	2	1,875	1,777778	1,7	1,636364	1,583333	1,538462	
			2,6	2,333333	2,142857	2	1,888889	1,8	1,727273	1,666667	1,615385	
				2,5	2,285714	2,125	2	1,9	1,818182	1,75	1,692308	
				2,666667	2,428571	2,25	2,111111	2	1,909091	1,833333	1,769231	
					2,571429	2,375	2,222222	2,1	2	1,916667	1,846154	
						2,5	2,333333	2,2	2,090909	2	1,923077	
						2,625	2,444444	2,3	2,181818	2,083333	2	
							2,555556	2,4	2,272727	2,166667	2,076923	
								2,5	2,363636	2,25	2,153846	
								2,6	2,454545	2,333333	2,230769	
									2,545455	2,416667	2,307692	
										2,5	2,384615	
										2,583333	2,461538	
											2,538462	

Здесь введено ограничение на N_2 (до 13 гармоники включительно).

Под каждым номером гармоники в столбцах находятся все значения дробей в пределах, необходимых для определения ближайшей простой дроби, которая соответствовала бы конкретному экспериментальному значению главного квантового числа (в таблице 1 n в пределах от 1 до 3).

В таблицах 2 - 4 приведены результаты для водородоподобных атомов и ионов, полученные с помощью таблицы 1.

Таблица 2

Атом	Li	Na	K	Cs	Rb	Ag	Pt	Tl
$\varphi_i, \text{эВ}$	5,39	5,138	4,339	3,893	4,176	7,574	8,96	6,106
n	1,588	1,627	1,770	1,869	1,805	1,340	1,232	1,492
$n \approx N_1/N_2$	19/12 (1,583)	13/8 (1,625)	23/13 (1,769)	15/8 (1,875)	9/5 (1,80)	4/3 (1,333)	16/13 (1,231)	3/2 (1,50)

Дробные главные квантовые числа (до 13-й гармоники включительно)												
$n=N_1/N_2$ в пределах $1 \leq n \leq 3$, где N_1 - количество периодов на орбитали, N_2 - номер гармоники.												
2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
1,5	1,333333	1,25	1,2	1,166667	1,142857	1,125	1,111111	1,1	1,090909	1,083333	1,076923	
2	1,666667	1,5	1,4	1,333333	1,285714	1,25	1,222222	1,2	1,181818	1,166667	1,153846	
2,5	2	1,75	1,6	1,5	1,428571	1,375	1,333333	1,3	1,272727	1,25	1,230769	
3	2,333333	2	1,8	1,666667	1,571429	1,5	1,444444	1,4	1,363636	1,333333	1,307692	
	2,666667	2,25	2	1,833333	1,714286	1,625	1,555556	1,5	1,454545	1,416667	1,384615	
		2,5	2,2	2	1,857143	1,75	1,666667	1,6	1,545455	1,5	1,461538	
		2,75	2,4	2,166667	2	1,875	1,777778	1,7	1,636364	1,583333	1,538462	
			2,6	2,333333	2,142857	2	1,888889	1,8	1,727273	1,666667	1,615385	
				2,5	2,285714	2,125	2	1,9	1,818182	1,75	1,692308	
				2,666667	2,428571	2,25	2,111111	2	1,909091	1,833333	1,769231	
					2,571429	2,375	2,222222	2,1	2	1,916667	1,846154	
						2,5	2,333333	2,2	2,090909	2	1,923077	
						2,625	2,444444	2,3	2,181818	2,083333	2	
							2,555556	2,4	2,272727	2,166667	2,076923	
								2,5	2,363636	2,25	2,153846	
								2,6	2,454545	2,333333	2,230769	
									2,545455	2,416667	2,307692	
										2,5	2,384615	
										2,583333	2,461538	
											2,538462	

Характеристики водородоподобных атомов представлены в таблице 2, под которой для наглядности размещена таблица 1 с отмеченными на ней значениями простых дробей, наиболее близких к соответствующим экспериментальным значениям n .

Аналогичным образом, характеристики водородоподобных ионов с зарядом атомного остова, равным двум и трем зарядам электрона ($z=2$, $z=3$), представлены в таблицах 3 и 4.

Однако возникает вполне закономерный вопрос: не слишком ли плотно на числовой оси располагаются числа, представленные в таблице 1, и не

имеем ли мы здесь дело со случайными совпадениями дробных чисел с соответствующими экспериментальными данными?

Чтобы проверить это предположение, вся совокупность чисел, представленных в таблице 1, была рассортирована в порядке возрастания. Далее, эта совокупность чисел была представлена в виде возрастающей кривой с маркерами, соответствующими этим числам, а экспериментальные значения главных квантовых чисел были изображены в виде горизонтальных линий, пересекающих эту кривую (Приложения 1 – 3).

Такое представление данных оказалось не только наглядным, но и убедительным доказательством не случайного характера этих совпадений.

С другой стороны, стало ясно, что 13 гармоник вполне достаточно для описания водородоподобных состояний атомов и ионов.

Таблица 3

Ион (z=2)	Be	Mg	Ca	Sr	Ba	Cd
$\varphi_i, \text{эВ}$	18,21	15,03	11,87	11,026	10	16,904
n^*	1,728	1,902	2,141	2,221	2,332	1,794
$n^* \approx N_1/N_2$	19/11 (1,727)	19/10 (1,9)	15/7 (2,143)	20/9 2,222	7/3 (2,333)	9/5 (1,8)

Дробные главные квантовые числа (до 13-й гармоники включительно)											
$n=N_1/N_2$ в пределах $1 \leq n \leq 3$, где N_1 - количество периодов на орбитали, N_2 - номер гармоники.											
2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
1,5	1,333333	1,25	1,2	1,166667	1,142857	1,125	1,111111	1,1	1,090909	1,083333	1,076923
2	1,666667	1,5	1,4	1,333333	1,285714	1,25	1,222222	1,2	1,181818	1,166667	1,153846
2,5	2	1,75	1,6	1,5	1,428571	1,375	1,333333	1,3	1,272727	1,25	1,230769
3	2,333333	2	1,8	1,666667	1,571429	1,5	1,444444	1,4	1,363636	1,333333	1,307692
	2,666667	2,25	2	1,833333	1,714286	1,625	1,555556	1,5	1,454545	1,416667	1,384615
		2,5	2,2	2	1,857143	1,75	1,666667	1,6	1,545455	1,5	1,461538
		2,75	2,4	2,166667	2	1,875	1,777778	1,7	1,636364	1,583333	1,538462
			2,6	2,333333	2,142857	2	1,888889	1,8	1,727273	1,666667	1,615385
				2,5	2,285714	2,125	2	1,9	1,818182	1,75	1,692308
				2,666667	2,428571	2,25	2,111111	2	1,909091	1,833333	1,769231
					2,571429	2,375	2,222222	2,1	2	1,916667	1,846154
						2,5	2,333333	2,2	2,090909	2	1,923077
						2,625	2,444444	2,3	2,181818	2,083333	2
							2,555556	2,4	2,272727	2,166667	2,076923
								2,5	2,363636	2,25	2,153846
								2,6	2,454545	2,333333	2,230769
									2,545455	2,416667	2,307692
										2,5	2,384615
										2,583333	2,461538
											2,538462

Таблица 4

Ион (z=3)	B	Al	Sc	Y	In	La
$\varphi_i, \text{эВ}$	37,92	28,44	24,75	20,5	28	19,17
n^*	1,797	2,075	2,224	2,444	2,091	2,527
$n^* \approx N_1/N_2$	9/5 (1,8)	27/13 (2,077)	20/9 (2,222)	22/9 (2,444)	23/11 (2,091)	33/13 (2,538)

Дробные главные квантовые числа (до 13-й гармоники включительно)											
n=N1/N2 в пределах 1≤n≤3, где N1 - количество периодов на орбитали, N2 - номер гармоники.											
2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
1,5	1,333333	1,25	1,2	1,166667	1,142857	1,125	1,111111	1,1	1,090909	1,083333	1,076923
2	1,666667	1,5	1,4	1,333333	1,285714	1,25	1,222222	1,2	1,181818	1,166667	1,153846
2,5	2	1,75	1,6	1,5	1,428571	1,375	1,333333	1,3	1,272727	1,25	1,230769
3	2,333333	2	1,8	1,666667	1,571429	1,5	1,444444	1,4	1,363636	1,333333	1,307692
	2,666667	2,25	2	1,833333	1,714286	1,625	1,555556	1,5	1,454545	1,416667	1,384615
		2,5	2,2	2	1,857143	1,75	1,666667	1,6	1,545455	1,5	1,461538
		2,75	2,4	2,166667	2	1,875	1,777778	1,7	1,636364	1,583333	1,538462
			2,6	2,333333	2,142857	2	1,888889	1,8	1,727273	1,666667	1,615385
				2,5	2,285714	2,125	2	1,9	1,818182	1,75	1,692308
				2,666667	2,428571	2,25	2,111111	2	1,909091	1,833333	1,769231
					2,571429	2,375	2,222222	2,1	2	1,916667	1,846154
						2,5	2,333333	2,2	2,090909	2	1,923077
						2,625	2,444444	2,3	2,181818	2,083333	2
							2,555556	2,4	2,272727	2,166667	2,076923
								2,5	2,363636	2,25	2,153846
								2,6	2,454545	2,333333	2,230769
									2,545455	2,416667	2,307692
										2,5	2,384615
										2,583333	2,461538
											2,538462

Следует отметить, что возникновение резонансов на гармонических составляющих (в отличие от атома водорода) свидетельствует о сложном характере взаимодействия между внешним электроном и атомным остатком.

Несомненно, что радиус атомного остатка влияет на величину главного квантового числа внешнего электрона. Предыдущая внутренняя электронная оболочка «подпирает» внешний электрон, чем и определяется величина соответствующей n дроби.

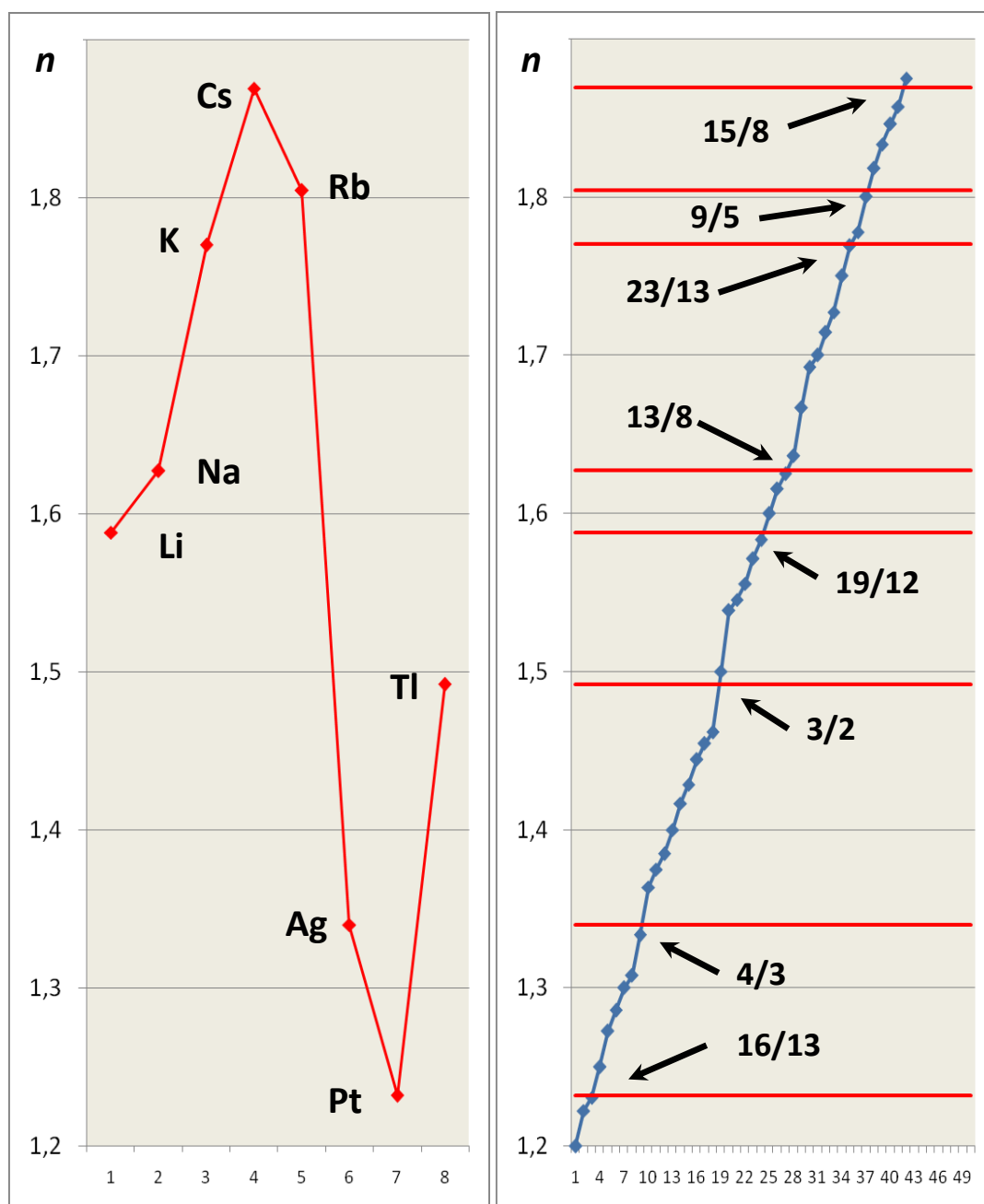
Очевидно также, что влияние атомного остатка на внешний электрон имеет и другие аспекты, требующие подробного исследования.

Заметим, что большинство возбужденных водородоподобных состояний атомов и ионов также характеризуются дробными значениями n .

Приложение 1

На графике справа показаны все числа $n = N_1/N_2$, при $N_2 \leq 13$ на отрезке (1,2 – 1,9) в виде возрастающей кривой, а горизонтальными линиями - главные квантовые числа атомов. Удовлетворительные совпадения отражены в таблице.

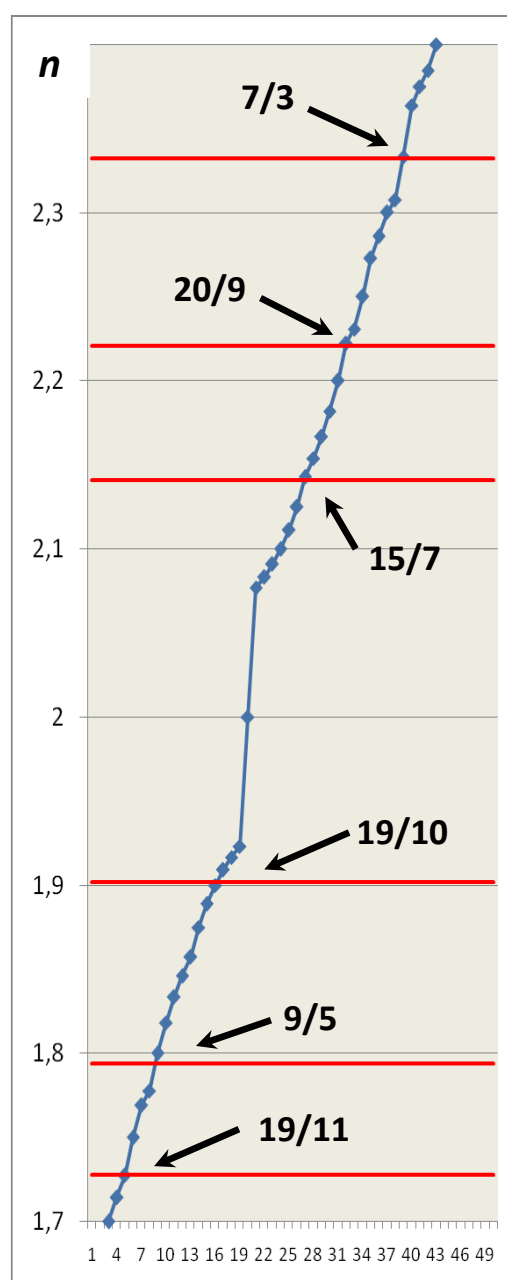
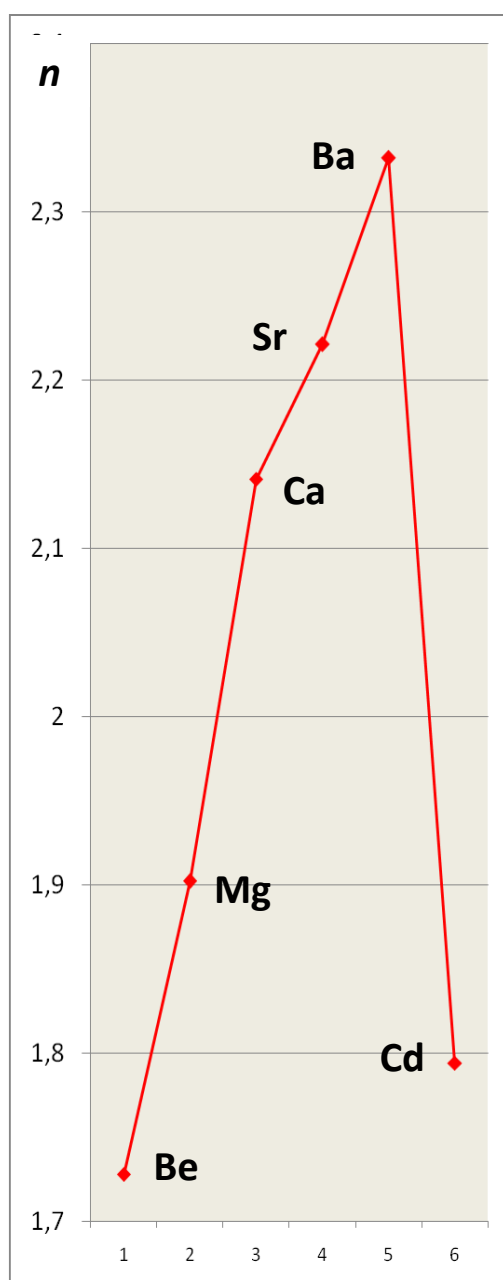
Атом	Li	Na	K	Cs	Rb	Ag	Pt	Tl
$\varphi_i, \text{эВ}$	5,39	5,138	4,339	3,893	4,176	7,574	8,96	6,106
n	1,588	1,627	1,770	1,869	1,805	1,340	1,232	1,492
$n \approx N_1/N_2$	19/12 (1,583)	13/8 (1,625)	23/13 (1,769)	15/8 (1,875)	9/5 (1,80)	4/3 (1,333)	16/13 (1,231)	3/2 (1,50)



Приложение 2

На графике справа показаны все числа $n = N_1/N_2$, при $N_2 \leq 13$ на отрезке (1,7 – 2,4) в виде возрастающей кривой, а горизонтальными линиями - главные квантовые числа ионов ($z=2$). Близкие значения отражены в таблице.

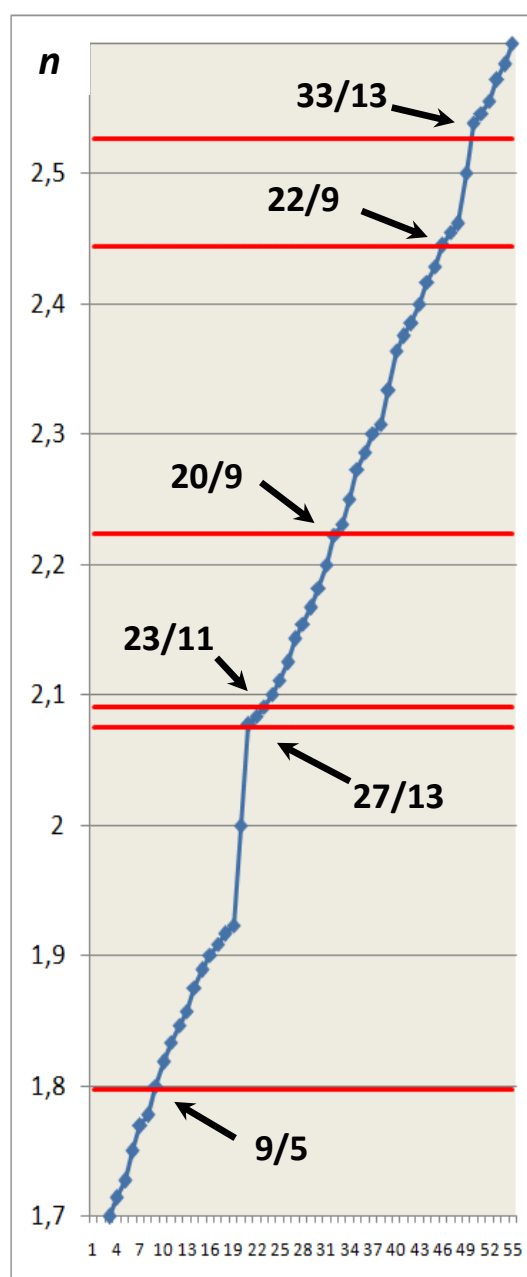
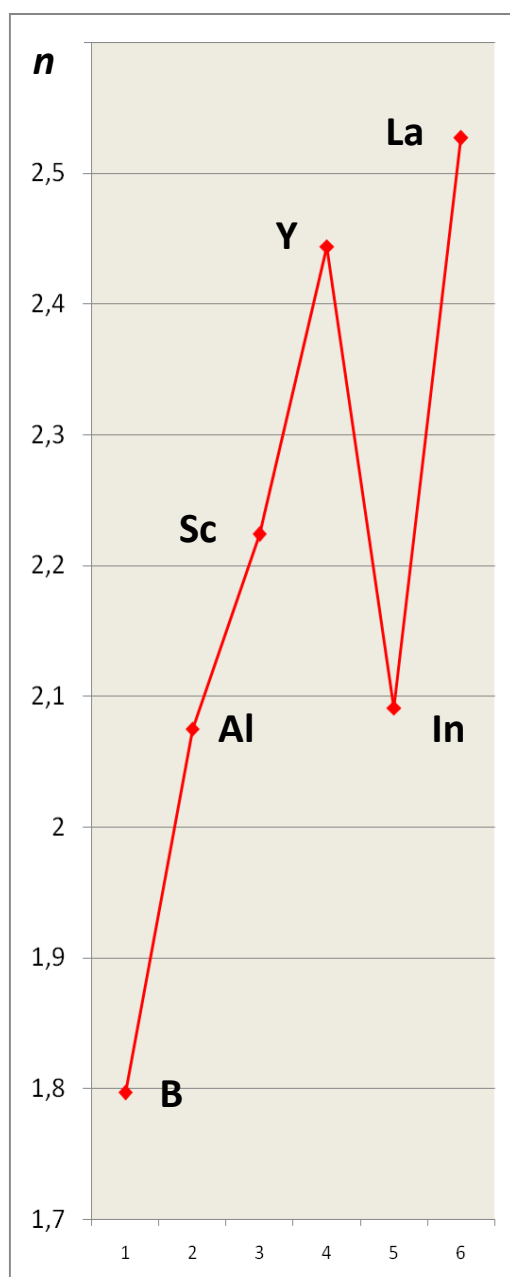
Ион ($z=2$)	Be	Mg	Ca	Sr	Ba	Cd
$\varphi_i, \text{эВ}$	18,21	15,03	11,87	11,026	10	16,904
n^*	1,728	1,902	2,141	2,221	2,332	1,794
$n^* \approx N_1/N_2$	19/11 (1,727)	19/10 (1,9)	15/7 (2,143)	20/9 (2,222)	7/3 (2,333)	9/5 (1,8)



Приложение 3

На графике справа показаны все числа $n = N_1/N_2$, при $N_2 \leq 13$ на отрезке (1,7 – 2,6) в виде возрастающей кривой, а в виде горизонтальных линий - главные квантовые числа ионов ($z=3$). Близкие значения включены в таблицу.

Ион ($z=3$)	B	Al	Sc	Y	In	La
$\varphi_i, \text{эВ}$	37,92	28,44	24,75	20,5	28	19,17
n^*	1,797	2,075	2,224	2,444	2,091	2,527
$n^* \approx N_1/N_2$	9/5 (1,8)	27/13 (2,077)	20/9 (2,222)	22/9 (2,444)	23/11 (2,091)	33/13 (2,538)



Материалы Приложений 1 – 3 убедительно свидетельствуют о неслучайном характере обнаруженной экспериментальной закономерности.

В заключение выражаю мою искреннюю благодарность читателям за их замечания, которые, в частности, подвигли меня на написание данной статьи, посвященной подробному анализу дробных значений главных квантовых чисел водородоподобных атомов и ионов.

Это позволило не только представить материалы в более наглядной форме, но и уточнить некоторые величины простых дробей, сопоставляемых главным квантовым числом «водородоподобных состояний».

Список литературы

1. Верин О.Г. Законы формирования электронных оболочек атомов.
<http://www.sciteclibrary.ru/rus/catalog/pages/14288.html>
2. Верин О.Г. Бозе-конденсация электронов в атоме. Обсуждение экспериментальных закономерностей.
<http://files.library.by/files/1510113939.pdf> (Verin O G, viXra:1801.0251).
3. Ландау Л Д, Лифшиц Е М *Квантовая механика* (М.: Наука, 1974).