

НОВАЯ ТЕОРИЯ СТРОЕНИЯ АТОМОВ.

Г.И. Сухоруков, Э.Г. Сухоруков, Р. Г. Сухоруков
Братск, Россия.

Бор и Зоммерфельд строго обосновали резерфордовскую планетарную модель атома [1,2]. Однако вследствие трудностей, возникших при объяснении тонкой структуры спектра атома водорода и строения сложных атомов, их теория была отвергнута. В настоящее время строение атомов описывается сложным трехмерным дифференциальным уравнением Шредингера [3-5]. Даже для атома водорода решение этого уравнения не удается выразить через элементарные функции [6]. Для атомов, имеющих два и более электронов, уравнение Шредингера не может быть решено даже численным образом [7]. Чтобы рассчитать спектральные термы одного сложного атома, требуется работа электронно-вычислительных машин в течении сотен часов [8] или нескольких лет [9].

Наша теория является логическим продолжением теории Бора-Зоммерфельда. При ее создании использовался обширный экспериментальный материал, связанный с определением значений ионизационных потенциалов и энергий термов оптических и рентгеновских лучей. В справочной литературе значения ионизационных потенциалов и энергий термов приводятся с очень высокой точностью, достигающей восьми - десяти значащих цифр. Эти данные надежны, так как получены в результате обобщения экспериментального материала, которым располагает все человечество. Результаты теоретических исследований, выполненных с использованием методик, разработанных на основе нашей теории, хорошо согласуются с вышеназванными экспериментальными данными.

Скорость распространения взаимодействия равна скорости света. Конечность этой скорости обусловлена наличием мировой среды (эфира). Законы Ньютона и Кулона точно выполняются только для тел, неподвижных относительно этой среды. Для движущихся тел эффективность взаимодействия зависит от скорости их движения относительно мировой среды. Формулы эффекта движения аналогичны формулам эффекта Доплера в оптике и акустике. Для случая, когда оба взаимодействующих тела движутся, формула имеет вид [10, 11]

$$X' = X \sqrt{\frac{C^2 + V'^2 + 2CV' \cos \alpha'_1}{C^2 + U'^2 - 2CU' \cos \beta'_1}},$$

где X – величина, зависящая от скорости движения, C – скорость света, V и U – скорости движения взаимодействующих тел, α_1 и β_1 - углы между направлениями движений источника и приемника волн и линией соединяющей точку, в которой волна излучилась, с точкой, в которой она встретилась с приемником. Буквами со штрихами и без штрихов обозначены величины, полученные соответственно с учетом и без учета эффекта движения. В атоме движением ядра можно пренебречь и тогда для величин, характеризующих движение электрода по круговой орбите можно записать

$$a' = \frac{a\sqrt{c^2 + V'^2}}{c} = \frac{ac}{\sqrt{c^2 - V'^2}}, \quad (1)$$

$$b' = \frac{bc}{\sqrt{c^2 + V'^2}} = \frac{b\sqrt{c^2 - V'^2}}{c}, \quad (2)$$

где a и b – величины, значения которых соответственно увеличиваются или уменьшаются вследствие эффекта движения.

Интеграл энергии системы электрон – ядро имеет вид [12]

$$\frac{mV'^2}{2} - \frac{\mu' m}{r' \beta} = \frac{\mu' m}{l' \beta},$$

где m – масса электрона, V' – скорость электрона, $\beta = 1 + m/M$, M – масса ядра, r' – радиус-вектор, $\mu' = (z'e^2c^2 \cdot 10^{-7})/m$, z' – зарядовое число, e – элементарный заряд, l – длина большой оси орбиты. Определив с помощью интеграла энергии орбитальную скорость и ее радиальную и тангенциальную составляющие, можно вывести уравнение, описывающее движение электрона по финитной незамкнутой кривой [12]:

$$\varphi' = \frac{nc^2}{nc^2 - kV_a V_n} \arccos \frac{2r_n r_a - lr}{r(r_a - r_n)},$$

где φ' – угол поворота радиуса-вектора r ; n – число характеризующее степень вытянутости орбиты; k – номер стационарного состояния; V_a, V_n – скорости электрона в апоцентре и перигентре; r_a, r_n – апоцентральный и перигентральный радиусы.

Результаты расчетов по формулам авторов с высокой точностью совпадают с экспериментальными данными. В таблице 1 приведены значения фундаментальных физических констант, полученных экспериментально и вычисленных по нижеприведенным формулам:

$$E'_n = \frac{e^2 c^2 \cdot 10^{-7}}{2r'_n \beta_n}; \quad V'_n = \sqrt{\frac{2E'_n}{m\beta_n}}; \quad \alpha'_\infty = \frac{V'_n \beta_n}{c};$$

$$R'_\infty = \frac{V'_n \beta_n}{4\pi r'_n c}; \quad h = 2\pi r'_n V'_n m\beta_n; \quad T_n = \frac{2\pi r'_n}{V'_n}.$$

Физические константы

Таблица 1

Константа	Расчет	Эксперимент
Ионизационный потенциал E'_n , эВ	13,59829218	13,5985
Скорость электрона $V'_n \cdot 10^{-6}$, м/с	2,186500601	-
Постоянная тонкой структуры $1/\alpha'_\infty$, м ⁻¹	137,0359895	137,0359895
Постоянная Ридберга $R'_\infty \cdot 10^{-7}$, м ⁻¹	1,097373153	1,097373153
Период обращения электрона $T'_n \cdot 10^{-16}$, с	1,820657574	-
Постоянная планка $h \cdot 10^{34}$, Дж·с	6,626075438	6,6260755

В качестве исходных данных взяты значения четырех констант [13]: скорость света $c = 2,99792458 \cdot 10^8$ м/с; элементарный заряд $e' = 1,60217733 \cdot 10^{-19}$ Кл; Масса электрона $m = 9,10938968 \cdot 10^{-31}$ кг; борковский радиус $r'_n = 5,29177249 \cdot 10^{-11}$ м. Для атома водорода $\beta_n = 1,000544617$.

Параметры орбит сложных атомов можно выразить через параметры боровской орбиты [12].

Если электрон движется по круговой орбите, то:

$$r' = \frac{r_n k^2}{z'}; \quad V' = \frac{V_n \beta_n z'}{k\beta}, \quad (3)$$

а если по эллиптической, то:

$$r'_n = \frac{r_n k^2 (1 - \xi)}{z'}; \quad V'_n = \frac{V_n \beta_n z' (1 + \xi)}{n \beta};$$

$$r'_a = \frac{r_n k^2 (1 + \xi)}{z'}; \quad V'_a = \frac{V_n \beta_n z' (1 - \xi)}{n \beta},$$

где z' – эффективное зарядовое число, $\xi = \sqrt{1 - \frac{n^2}{k^2}}$ – эксцентриситет.

Полная энергия системы электрон-атом:

$$E' = \frac{E_n \beta_n z'^2}{k^2 \beta}. \quad (4)$$

Период обращения электрона и ядра вокруг центра масс:

$$T' = \frac{T_n k^3 \beta}{\beta_n z'^2}. \quad (5)$$

С помощью формул (1) и (2) определены $r_n = 0,529191323 \cdot 10^{-10}$ м; $V_n = 2,186442460 \cdot 10^6$ м/с; $E_n = 21,78571660 \cdot 10^{-19}$ Дж; $e = 1,602156024 \cdot 10^{-19}$ Кл; $T_n = 1,520657574 \cdot 10^{-16}$ с. Таким образом, зная эффективное зарядовое число, можно вычислить все величины, характеризующие движение электрона по орбите в атоме.

Атомы имеют планетарное строение. При переходе электрона из одного стационарного состояния в другое происходит поглощение или излучение волн. При этом в многоэлектронных атомах изменяется полная энергия не только у того электрона, который совершил переход с одной орбиты на другую, но и у всех остальных электронов. Длины оптических и рентгеновских волн, излучаемых сложными атомами, можно вычислить по формуле [12]

$$\frac{1}{\lambda''} = \frac{R_\infty}{\beta} \left(\frac{z_1'^2}{k_1^2} + \frac{z_2'^2}{k_2^2} + \dots + \frac{z_i'^2}{k_i^2} - \frac{z_{1b}'^2}{k_{1b}^2} - \frac{z_{2b}'^2}{k_{2b}^2} - \dots - \frac{z_{ib}'^2}{k_{ib}^2} \right), \quad (6)$$

где $z_1', z_2', \dots, z_i', k_1, k_2, \dots, k_i$ – зарядовые числа и стационарные состояния электронов у невозбужденного атома; $z_{1b}', z_{2b}', \dots, z_{ib}', k_{1b}, k_{2b}, \dots, k_{ib}$ – соответствующие величины у возбужденного атома. Нумерация электронов идет в направлении от ядра к периферии атома. Постоянная Ридберга $R_\infty = 1,097314784 \cdot 10^7$ м⁻¹ имеет одну и ту же величину у всех атомов.

Энергии спектральных термов атома водорода

Таблица 2

Терм возбужденного состояния	Энергия терм, см ⁻¹ ; Разность термов, см ⁻¹	
	По формуле (6)	Справочные данные
2p(² P _{1/2} ⁰)	82258,916	82258,921
	0,365	0,365
2p(² P _{3/2} ⁰)	82259,281	82259,286
3p(² P _{1/2} ⁰)	97491,617	97492,213
	0,108	0,108
3p(² P _{3/2} ⁰)	97491,725	97492,321
	0,036	0,036
3d(² D _{5/2})	97491,761	97492,357

В таблице 2 приведены значения термов атома водорода, взятые из справочника [14] и вычисленные по формуле (6). Расхождения между расчетными и справочными данными наблюдаются после пятой или шестой значащей цифры. Это объясняется тем, что последние цифры значений термов получены не экспериментально, а расчетом по ныне принятой методике. Разности же термов, характеризующих тонкую структуру спектров согласно существующей и новой теории совпадают точно.

Параметры орбит многоэлектронных атомов можно рассчитать, используя значения ионизационных потенциалов. Расчет ведется в такой последовательности. Вначале по значениям ионизационных потенциалов [15] находятся приближительные значения эффективных зарядовых чисел. Затем определяются кратности периодов обращения электронов по формулам:

$$x_{i,1} = \frac{k_i^3 \cdot z_1'^2}{k_1^3 \cdot z_i'^2}, \quad x_{i,2} = \frac{k_i^3 \cdot z_2'^2}{k_2^3 \cdot z_i'^2}, \dots, x_{i,(i-1)} = \frac{k_i^3 \cdot z_{i-1}'^2}{k_{i-1}^3 \cdot z_i'^2}.$$

Выразив с помощью этих формул зарядовые числа всех электронов через зарядовое число наружного электрона и подставив новые выражения для зарядовых чисел в формулу (6), получим уравнение с одним неизвестным

$$E = \frac{R_\infty}{\beta} \left(\frac{x_{i,1} \cdot k_1 \cdot z_i'^2}{k_i^3} + \frac{x_{i,2} \cdot k_2 \cdot z_i'^2}{k_i^3} + \dots + \frac{x_{i,(i-1)} \cdot k_{i-1} \cdot z_i'^2}{k_i^3} + \frac{z_i'^2}{k_i^2} - \frac{z_{1b}'^2}{k_{1b}^2} - \frac{z_{2b}'^2}{k_{2b}^2} - \dots - \frac{z_{(i-1)b}'^2}{k_{(i-1)b}^2} \right). \quad (7)$$

Теперь можно определить точные значения z_2', z_3', \dots, z_i' , решая последовательно задачи для ионов данного атома, имеющих соответственно 2, 3, ..., i электронов. Как показано выше, зная значение z' для электрона, можно определить все параметры его орбиты. В опубликованных работах приведены расчетные значения параметров орбит электронов у всех возможных ионов первых двенадцати элементов таблицы Менделеева. В данной статье приведен пример расчета атома гелия.

В невозбужденном атоме гелия оба электрона находятся в первом стационарном состоянии и движутся по круговым орбитам. Период обращения наружного электрона в два раза больше периода обращения внутреннего электрона. Чтобы удалить электрон из невозбужденного атома гелия, нужно затратить энергию $E = 198310,76 \text{ Сн}^{-1} = 39,3933902 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$ [14]. Для этого случая уравнение (7) примет вид:

$$E = \frac{R_\infty}{\beta} (2z_2'^2 + z_2'^2 - z_{1b}'^2).$$

Вычислив с помощью этого уравнения значения $z_2' = 1,3914422$, из соотношения $T_2/T_1 = z_1'^2/z_2'^2 = 2$ найдем $z_1' = 1,9677965$. Теперь по формулам (3), (4) и (5) можно вычислить параметры орбит обоих электронов, находящихся в первом стационарном состоянии.

Орбиты электронов в атоме гелия

Таблица 3

Стац. состояние второго электрона, К	Тип орбиты и ее номер	Зарядовое число		$x_{2,1} = \frac{T_2}{T_1}$
		z_1'	z_2'	
1	круговая	1,9677965	1,3914422	2
	1-я круговая	1,9971808	1,2043454	22

2	2-я круговая	1,9991896	1,0882210	27
	3-я круговая	2,0001251	1,0328602	30
	4-я круговая	2,0001274	1,0328613	30
	5-я круговая	1,9996570	0,9998285	32
3	1-я круговая	1,9996874	1,1204559	86
	2-я круговая	1,9999251	1,0551392	97
	3-я круговая	1,9998483	1,0289134	102
	4-я круговая	1,9998489	1,0289138	102
	5-я круговая	1,9997306	1,0092539	106
	6-я круговая	1,9997382	1,0092577	106
	7-я круговая	2,0000089	1,0000045	108

В таблице 3 приведены вычисленные аналогичным образом зарядовые числа электронов в атоме гелия для случаев, когда наружный электрон находится в одном из трех стационарных состояний.

Как видно из таблицы 3, наружный электрон атома гелия в первом стационарном состоянии может иметь только одну круговую орбиту, во втором – 4 круговых и одну эллиптическую, а в третьем – 5 круговых и две эллиптические. Первая орбита электрона во втором стационарном состоянии очень устойчива. Переход электрона с этой орбиты на орбиту в первом стационарном состоянии возможен только при соударении атомов [16]. Гелий обычно состоит из двух типов атомов. В одних атомах наружный электрон движется по орбите первого стационарного состояния, а в других по первой орбите второго стационарного состояния. Первые атомы являются атомами парагелия, а вторые атомами ортогелия.

Для ионов с одинаковым числом электронов, но разными зарядами ядер выполняется равенство:

$$E_{n+1} \cdot \beta_{n+1} = 2E_n \beta_n + \frac{2E_H \beta_H}{k^2} - E_{n-1} \beta_{n-1},$$

где E_n - ионизационный потенциал атома водорода, E_{n+1} , E_n и E_{n-1} - ионизационные потенциалы ионов трех рядом расположенных элементов, n – порядковый номер элемента, k – номер стационарного состояния наружных элементов в ионах. По этой формуле вычислены ионизационные потенциалы и значения k у 24 элементов [12]. Никаких принципиальных трудностей нет для вычисления ионизационных потенциалов и параметров орбит электронов у всех элементов периодической системы.

Потенциалы ионизации атомов

Таблица 4

№ электрона	Фтор		Неон		Натрий	
	Энергия ионизации E , эв		Энергия ионизации E , эв		Энергия ионизации E , эв	
	Расчет.	Данные [15]	Расчет.	Данные [15]	Расчет.	Данные [15]
1	1102,0	1101,8	1360,5	1360,2	1646,2	1646,4
2	953,43	953,5	1195,0	1195,4	1463,7	1464,7
3	185,14	185,14	239,0	239,1	299,86	299,7
4	157,06	157,11	207,05	207,2	263,83	264,2
5	114,21	114,21	157,91	157,91	208,41	208,44
6	87,141	87,23	126,15	126,4	172,36	172,38
7	62,710	62,646	97,118	97,16	138,33	138,6
8	34,971	34,98	63,456	63,5	98,916	98,88
9	17,423	17,418	40,964	41,07	71,639	71,8

10	-	-	21,565	21,559	47,287	47,29
11	-	-	-	-	5,1391	5,138

В таблице 4 приведены расчетные и справочные значения ионизационных потенциалов у атомов фтора, неона и натрия. Как видим, расчетные значения ионизационных потенциалов хорошо согласуются со справочными.

Химические и ряд физических свойств элементов обусловлены энергией связи наружных электронов с атомами. Энергия связи, а следовательно, и свойства имеют периодическую зависимость от порядкового номера элемента в таблице Менделеева. Если сравнить первые потенциалы ионизации у всех атомов [15], то можно четко выделить семь периодов, что и отражено в таблице Менделеева. Если же сравнить потенциалы ионизации у всех ионов с разными зарядами ядер, но с одинаковым количеством электронов, то также четко можно различить у известных нам элементов 12 периодов, которые приведены в таблице 5. В таблице приведен также 13-ый период для элементов, которые возможно существуют во Вселенной в условиях, отличных от условий Солнечной системы.

Периодический закон.

Таблица 5

Пе- риод	Номер элемента в периоде													
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
I	H	He												
II	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne						
III	Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar						
IV	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni				
V	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr						
VI	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd				
VII	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe						
VIII	Cs	Ba	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	To	Dy	Ho	Er
IX	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Jr	Pt				
X	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn						
XI	Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm
XII	Md	No	Lr	Ku	Ns	106	107	108	109	110				
XIII	111	112	113	114	115	113	117	118						

В таблице 6 показано, как идет заполнение электронных слоев в атомах элементов 13-го периода, но по нему можно представить, как происходит заполнение электронных слоев в атомах всех остальных элементов. Число слоев в атоме соответствует номеру периода, в котором он находится. Максимально возможное число электронов в слое равно числу элементов в периоде, в котором заполняется этот слой. В первом слое оба электрона находятся в первом стационарном состоянии. Восемь электронов второго слоя находятся во втором, электроны третьего и четвертого слоя – в третьем, а электроны всех остальных слоев – в четвертом стационарном состоянии.

Распределение электронов в атомах 13 периода.

Таблица 6

№ эле мен та	Номер слоя												
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
	k=1	k=2	k=3		k=4								
111	2	8	8	10	8	10	8	14	10	8	14	10	1
112	2	8	8	10	8	10	8	14	10	8	14	10	2
113	2	8	8	10	8	10	8	14	10	8	14	10	3
114	2	8	8	10	8	10	8	14	10	8	14	10	4
115	2	8	8	10	8	10	8	14	10	8	14	10	5
116	2	8	8	10	8	10	8	14	10	8	14	10	6
117	2	8	8	10	8	10	8	14	10	8	14	10	7
118	2	8	8	10	8	10	8	14	10	8	14	10	8

В уточненной периодической таблице элементов один период содержит два элемента, шесть периодов содержат по 8 элементов, четыре по 10 элементов, и два по 14 элементов. В некоторых периодах наблюдается одинаковая закономерность изменения свойств элементов по мере увеличения числа электронов во внешнем слое атома. Такие периоды будем называть подобными. Так подобными являются второй и третий периоды, начинающиеся с щелочных элементов; пятый, седьмой, десятый и тринадцатый, начинающиеся с элементов группы меди; четвертый, шестой, девятый и двенадцатый, содержащие по 10 элементов; восьмой и одиннадцатый, содержащие по 14 элементов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Шпольский Э.В. Атомная физика. т.1 – М.: Физмат, 1963.
2. Зоммерфельд А. Строение атомов и спектры. т. I – М.: Гостехиздат, 1956.
3. Вихман Э. Квантовая физика. т.4 – М.: Наука, 1986.
4. Борн М. Атомная физика. – М.: Мир, 1967.
5. Шпольский Э.В. Атомная физика т.2 – М.: Наука, 1984.
6. Спроул Р. Современная физика. – М.: Фмзматгиз, 1961.
7. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. – М.: Физматгиз, 1961.
8. Кравцов В.А. Массы атомов и энергии связи ядер. – М.: Атомиздат, 1974.
9. Намбу Е. Кварки. – М.: Мир, 1984.
10. Сухоруков В.И., Сухоруков Г.И. Эффект Доплера при движении источника и приемника волн в произвольном направлении // Акустический журнал. – 1986, т.32, №1. – с. 134-136.
11. Сухоруков Г.И. Теоретические модели физического эксперимента. Диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук – Братск: 1998.

12. Сухоруков Г.И., Сухоруков В.И., Сухоруков Р.Г. Реальный физический мир без парадоксов. – Иркутск: Изд-во иркут. ун-та, 1993.
13. Власов А.Д., Мурин Б.П. Единицы физических величин в науке и технике: Справочник. – М.: Энергоатомиздат, 1990.
14. Радциг А.А., Смирнов В.М. Справочник по атомной и молекулярной физике. – М.: Атомиздат, 1980.
15. Таблицы физических величин. Справочник. Под ред. И.К. Кикоина. – М.: Атомиздат, 1976.
16. Гольдин Л.П., Новиков Г.И. Введение в атомную физику. – М.: Наука, 1969.