

ЗАТ ҚҰРЫЛЫСЫНЫҢ АТОМДЫҚ ТЕОРИЯСЫ

АФ -атомның құрылысы мен оның әр түрлі күйлерін зерттейтін физ-ның бөлімі. «Атом» - грек сөзі - «бөлінбейтін» дегенді білдіреді. Оны көне гректің философы Демокрит енгізген (біздің э. дейін V ғасыр). Демокриттің логикасын қазіргі көзқараспен айтсақ, өте қарапайым болған. Оның философиялық болжауы мынадай:

айталық кез-келген материалдық затты өте өткір пышақпен екіге бөлейік, сонан соң бөліктің біреуін тағы да екіге бөлейік, т.с.с. Ерте ме кеш пе, әйтеуір біз, одан әрі бөлуге келмейтін бөлшекті аламыз. Ол материяның бөлінбейтін *атомы* болады. Демокрит бойынша атом өзгермейтін, бөлінбейтін мәңгілік бөлшек және әлемдегі өзгерістер тек қана атомдардың (атомдардың ішіндегі емес) байланыстары арасындағы өзгерістерге қатысты болған.

Сірә, қазіргі кезде атом жөніндегі бұл көзқарастың тек «атом» деген сөзі ғана сақталған болар. Енді біз, атомның өзі элементар бөлшектерден тұратынын және көне грек теориясы мен заманауи ғылыми зерттеулердің арасында ешбір ортақтық жоқ екенін білеміз.

Атом - элементтің хим. қасиетіне ие болатын, ең кіші бөлшегі. Хим. элементтің өзі - бір сортты атомдардың жиыны. Айтарлықтай мықты байланыс болғанда, атомдардың өзара әсері нәтижесінде молекулалар құрылуы мүмкін.

Әрбір атом оң зарядталған ядро мен оны айналатын e^- - дардан тұрады.

Жинақталған эл-рондар қайсібір қабықшада орналасқандай болады. Дәл айтқанда, қабықшаның нақты шекарасы жоқ, дегенмен атомның өлшемі (размері) осы электронды қабықшасының өлшемімен анықталады.

Атомда оң да, теріс те зар-ған бөлш-р болғанымен, қалыпты күйдегі атомның заряды (яғни атомның өзі де) электрлі бейтарап (нейтрал) б-ды. Себебі, атомдағы p мен e саны бірдей б-ды, әр аттас зар-лған бөлшектер бірін-бірі нейтралдайды.

Бірақ белгілі бір жағдайда, атом e^- -рын жоғалтып алуы, не қосымша e^- - дарды біріктіріп алуы мүмкін, сол кезде ол сәйкес оң не теріс ионға^{*)} айналады.

Атомның электронды қабыршағының құрылымы e^- - дардың ядромен және бір-бірімен өзара ЭМ әсерлесуімен анықталады. Заттың ұсақ бөлшектері арасындағы бұл әсерлесу гравитациялық әсерден еселеп артық болады.

Макро денелер физ-сының түсініктері мен заңдарын АФ-сына көшіру әрекеті болған \Rightarrow Бұдан кл. ф-ның көптеген түсініктерін микроәлем физикасына қолдануға болмайтыны шыққан.

**) Ион (грек. $\acute{\iota}\acute{o}\nu$ – қозғалыстағы (идущий) деген мағынаны білдіреді), деп атомдардың немесе атомдар тобының электрондарды (не басқа зарядталған бөлшектерді) қосып алған, не жоғалтқан кезде пайда болатын электрлі зарядталған бөлшекті айтады. Мұндай атомдар тобына молекулалар, радикалдар жатады. Ион түсінігі мен терминін 1834 ж. М.Фарадей енгізген.*

Анықтама кесте:

Атомның құрылысы			
Атом ядросы			Атом қабыршағы
Нуклондар			Электрондар
Бөлшектер	Протондар	Нейтрондар	
Заряды	$+1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл	0	$-1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл
Тыныштық массасы	$1836 m_e$	$1839 m_e$	$m_e = 9,1 \cdot 10^{-31}$ кг
Белгілеу	p	n	e

Белгілеу: $\frac{A}{Z}$ Хим. элемент

Мысалы, ${}_{13}^{27}\text{Al}$, ${}_{92}^{238}\text{U}$ т.б., мұндағы Z - элементтің атомдық нөмірі.

Ол мынаған тең:

- ядродағы p санына;
- қабыршақтағы e санына;
- ядроның электр зарядына, Ze . (Мысалы, ${}_{13}^{27}\text{Al}$)

$A = Z + N$ - массалық сан; ол ядродағы нуклондар (протондар мен нейтрондар) санына тең.

Протондар, нейтрондар және электрондар - атомның бас «құрылыс бөлшектері» болып табылады және **субатомдық** бөлшектер деп аталады.

Изотоптар.

Кейбір бір ғана хим. элементтің ядросындағы нейтрондар саны әртүрлі б-ды. Мұндай өзгешелік - берілген элементтің изотоптары деп аталады.

Берілген элементтің изотоптары бір-бірінен нейтрондардың санымен ғана айрықшалаынады.

Сонымен, изотоптарда:

- атомдық нөмірлері **Z бірдей** (протондар саны бірдей);
- массалық сандары **A әртүрлі** (нуклондар саны әртүрлі) болады, ($A = Z + N$)

Мысал: Уранның изотоптары

АТОМ	Протондар саны	Нейтрондар саны	Электрондар саны	Таралуы
	92	142	92	0,0057%
	92	143	92	0,72%
	92	146	92	99,27%

Атомның алғашқы үлгілеріне (модельдеріне) шолу.

1. Томсон үлгісі

e^- ашылғаннан кейін, Томсон атомның құрылысын ұсынбақ болды.

- Әуелі ол, e^- дардың массасы атомның массасының өте аз бөлігін ғана алатынына назар аударды ($\approx 10^{-4}=0,0001$ бөлігін).

Атомның массасын табу оңай: $m_a = \mu/N_A$. Мысалы,

Cu үшін $m_{Cu} = (64 \cdot 10^{-3} \text{ кг/моль}) / (6.02 \cdot 10^{23} \text{ моль}^{-1}) \approx 10 \cdot 10^{-26} \text{ кг} = 10^{-25} \text{ кг}$.

Бұл 1 электронның массасынан 10^5 есе артық: $\frac{m_{Cu}}{m_e} = \frac{10^{-25} \text{ кг}}{9.31 \cdot 10^{-31} \text{ кг}} \approx 10^5$.

- Атом электр нейтрал (бейтарап) б-ды, демек атомның барлық массасы дерлік оң зарядқа тән б-ды. \Rightarrow Заттың меншікті заряды б-ша ассиметриясы орнатылды: **теріс заряд - жеңіл, ал оң заряд - ауыр.**

- Осыдан кейін АФ мына сұраққа жауап беру керек болған: **атомда оң заряд, сондай-ақ, эл-ронның m -сын санамағанда, барлық масса қалай үлестірілген?**

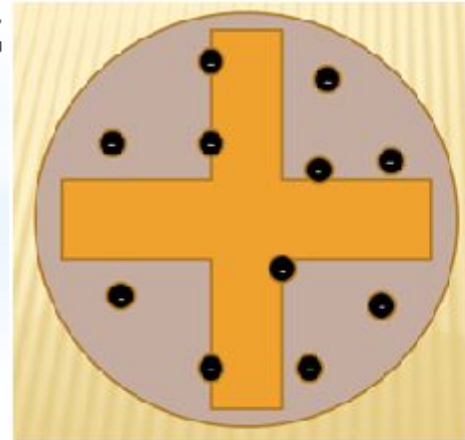
Томсон: «Атомдар d -рі бірнеше ангстрем ($1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ м}$) оң зарядталған сферадан тұрады және бұл заряд сфераның барлық көлемі бойынша біркелкі үлестірілген.

Ал «нүктедей» e^- дар осы оң зар-талған ортада қалқып жүреді» деп болжаған.

Әсерлеп айтқанда:

ішінде мейіздері бар тоқаш нанмен теңестірген;

(мейіз e^- дар рөлін ат-ған)

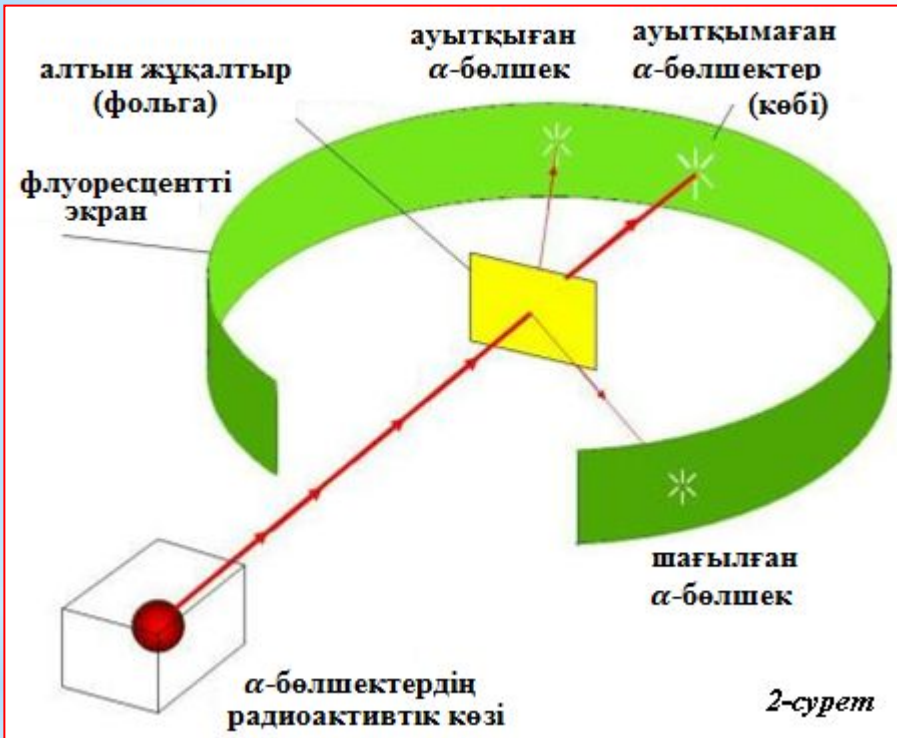


1-сурет



ДЖОЗЕФ ТОМСОН (1856-1940)

2. Резерфорд үлгісі. 1910 ж. Резерфорд тәжіибеден Т. үлгісі түсіндіре алмайтын ерекше нәтижелер алды. Ол кездерде радиоактивтілік құбылысы ашылған болатын. Р-активті заттар жоғарғы энергиялы сәулелерді ғана шығарып қоймай, сонымен қатар көптеген заттар арқылы өтіп кету қабілеттілігі бар жоғары энергиялы бөлшектерді де шығара алады. Бұл бөлшектер **α -бөлшектер** деп аталды



Резерфорд тәжірибесі: α -б-тер ағыны қалыңдығы $\approx 10^4$ атомға тең жұқа алтын фольгаға бағыт-ды. Ф. атомдарымен соқ-қаннан кейін өзінің қозғалысын жалғастырып, жарқырайтын беттігі бар Э-ға түскен. Э-ның әрбір рет жарқ еткені, оған α -б-тің тигенін білдірген. Осы арқылы α -б-тер қандай мөлшерде ж/е қаншалықты түзу сыз. жолынан ауытқ-нын анықтаған. Ф-ы барлық α -б-тер тура траек-ямен өтпегені байқалды. Олардың біразы едәуір ауытқыған, тіпті ф-дан кері серпілгендері де байқалған.

Томсон үлгісіндегі атомның ішінде шапшаң, қуатты және ауыр α -бөлшекті кері серпілтетін ешнәрсе болмаған. Бұдан Резерфорд мынадай қорытындыға келген: атом тұтас емес, «сиретілген» бос жерлері бар (олар арқылы α -б-тер кедергісіз өте алады) және α -б-тер доп сияқты ыршып кететін өте тығыз аймағы бар. Оны Резерфорд **ядро** д/а.

Ядро атомның центрінде орныққан және мұнда атомның барлық дерлік массасы жинақталған. Сонымен қатар, серпілген α -б-тердің бет алысы арқылы ядрода атомның барлық оң электр заряды жинақталғаны айқындалған, себебі тек қана электрлік тебу күшінің әсерінен α -бөлшектер 90° -тан артық бұрышқа серпіледі. Ядроның сыртқы шекарасында электрондар орналасады, олар масаның үйірі тәрізді сиретілген «электрондық бұлт» құрып, ядроны айнала қозғалады (4,б-сурет). Электрондар орын алатын осы сиретілген аймақты α -б-тер оңай өткен. Ауытқыған және ауытқымаған α -б-тердің қатыстары арқылы атом ядросының өлшемі атомның сырқы шекарасынан (басқа атомдармен түйісетін) шамамен 10000 есе аз болатыны есептелген: атомның диаметрі 10^{-10} м, ядроныкі 10^{-15} м. Резерфордтың үлгісі α -б-термен жүргізілген тәжірибелер нәтижелерін түсіндіре алды, бірақ физиктерге бұрынғысынан да көп сұрақтар туғызды:

- Неліктен зарядталған e -ның зарядталған ядро маңында қозғалысы кезінде энергия бөлінбейді?
- Атомдар бір-біріне қалайша бекітілген?
- Эл-рондар неліктен ядроға құлап түспейді?
- Атомдардан құралған физикалық денелер қыздырылғанда қандай жолмен жарықты шығарады? Т.б.

3. Бордың үлгісі

Данияның физигі Н. Бор, Резерфорд үлгісіне ұқсас, бірақ эл-рондар белгілі бір нақты (кез келген емес), «рұқсат етілген» тұрақты орбиталарда орналасатын атомның үлгісін ұсынғаннан кейін ғана бұл сұрақтардың біразы шешімін тапты (4 в-сурет).

Бұл үлгі Күнді планеталар қалай айналса, эл-рондар ядроны солай айналатын күн жүйесінің құрылысын еске салды, сондықтан Бордың планетарлық үлгісі д/а. Затты қыздырғанда, эл-рондар энергияны жұтады және де ядродан алшақтаған тұрақты орбиталарға көшеді. Сонан кейін, өзінің бұрынғы орнына нақты өлшеп алынған «порция» түрінде энергия шығарып (жарық түрінде), оралады.

Энергияның мұндай «порциясын» жарықтың **кванты** деп атайды, және оның шамасы эл-ронның едәуір жоғары және едәуір төмен орбиталарындағы энергиялардың айырмасына дәл сәйкес келеді.

Атомдардың жарықты жеке бөлшектер түрінде шығыратыны белгілі болғаннан соң, кейіннен бұл бөлшектерді Эйнштейн **фотондар** деп атаған, яғни **фотон - жарық кванты**.

Эл-трон қозғалған әрбір осындай орбита «**энергетикалық деңгейлер**» д/а.

Атомдағы эл-тронның энергиясы тек қана секірмелі өзгереді, яғни эл-трон төменгі орбитаға секіріп өткенде, ол эн-гиясын жоғалтады, демек жарық квантын, яғни белгілі бір эн-гиясы ж/е λ -сы бар фотонды шығарады. Ал жоғарырақ орбитаға өту үшін эл-трон сәйкесінше фотонды (жарық квантын) жұту к/к (эл-трон орбиталардың арасына орналаса алмайды). Сондықтан, **эл-рондардың энергет-лық күйлері квантталған** дейді.

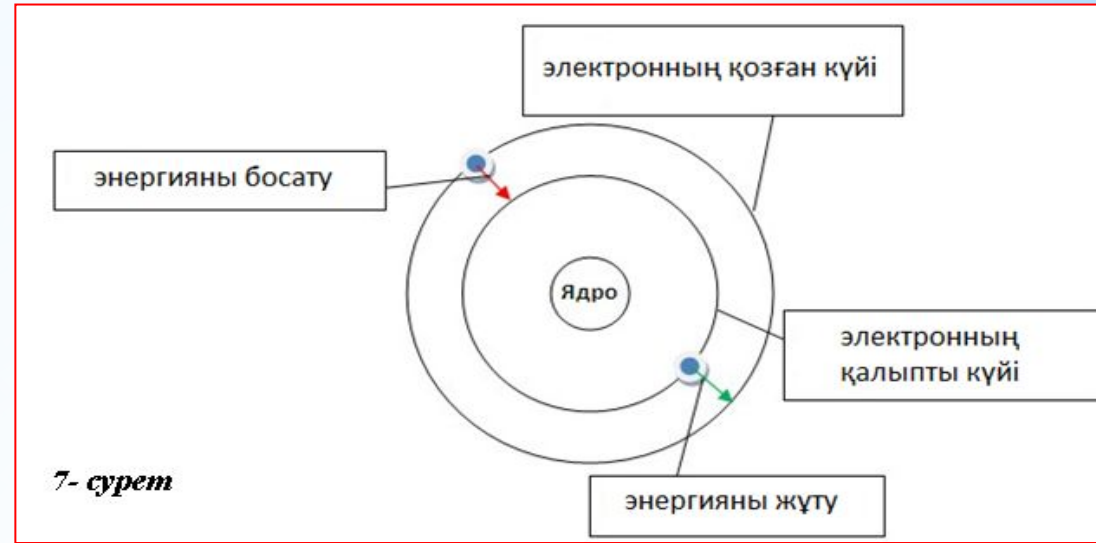


«Рұқсат етілген» өз орбиталарында тұрған эл-трондар белгілі бір қарқындылығы мен жиілігі бар ЭМ толқынды шығара алмайды, әйтпесе төмен рұқсат етілмеген орбитаға өтуші еді.

Сондықтан олар өзінің анағұрлым жоғары орбитасында ұсталынып тұрады. Алайда, эл-трон басқа «рұқсат етілген» орбитаға өте алады, мұны, кванттық мех-ның көптеген құбылыстары сияқты, көрнекті түрде елестету қиын: электрон орбитадан кәдімгідей жоғалып кетеді де, орбита арасын қимай, басқа орбитаға пайда болып (материалданып), шыға келеді. Бұл эффектіні «кванттық секіру» д/а Сонымен, Бор б-ша, электрон бір рұқсат етілген орбитадан екіншісіне дискретті (үзікті) түрде секірмелі өтеді. Әрбір секіру, міндетті түрде ЭМ сәулелену энергиясының квантын (фотонды) шығару не жұтумен бірге жүреді.

e -ның эн-ясы оның орбитасының r -на тәуелді. Ядроға ең жақын тұрған e -ның эн-сы m_{in} болады. Эн-я квантын жұтқанда, $e \rightarrow$ эн-гиясы артық орбитаға көшеді (қозған күй), және керісінше жоғары энергет-лық деңгейден төменгісіне көшкенде - e энергия квантын береді (сәуле шығарады).

Қыздырылған денелердің шығарған жарығын зерттей келе, - атомда қанша тұрақты орбиталар бар екенін, және - олардың күрделі ішкі құрылымын анықтауға б-ды. Сондай-ақ, Бор әртүрлі эн-калық деңгейлерде e саны бірдей б-тынын айтты : 1- дең-де - 2 e -ға дейін, 2- д-де - 8 e -ға дейін, т.с.с.



Уақыт өте, Бор гипот-сы кв. мех-ның қатаң, жүйелі тұжыр-маларына орнын берді: атап айтқанда, эл-тар бөлш-тердің екі жақтылық табиғаты туралы - корпускула-толқындық көзқарасқа.

Қазіргі кезде, біз e -дарды атом ядросын айналатын микроск. планеталар түрінде елестетпейміз. Оларды, өз орбитасында шайқалатын және Шредингер теңдеуіне бағынатын ықтималдық толқындар ретінде қарастырамыз . Заманауи физик-теоретиктер, құрылымы жағынан аса күрделі атомдар ү/н осы толқ-дардың сипат-маларын, ат-дардың қасиеттері мен беталысын түсіндіру үшін есептеулер жүргізуде. Дегенмен, кванттық механиканың негізгі бейнесін салған Н.Бор болды.

Қазіргі кезде атомның екі үлгісі (моделі) бар: **Бор үлгісі** (классикалық үлгі) және **кванттық-механикалық** үлгі. Бірінші үлгі - түсіну үшін оңай, алайда күрделі құрылымы бар атомдарды сипттауға жарамайды. Екінші үлгі кез-келген құрылымды атомды сипаттай алады, бірақ түсініп, білу үшін аса қиын, өйткені оның негізінде күрделі математикалық есептеулер жатыр.

4. Атом құрылысының кванттық-мех-лық үлгісі (моделі) (бұл үлгіні кейін, толығырақ қарастырамыз)

КММ модельдің негізін атомның кванттық теориясы құрайды. Мұнда, e -ның нақты бір нүктедегі орны жөнінде дәл емес, белгілі бір ықтимал-пен айтылады. Сондықтан, КММ-де Бор орбитасын **орбитальдармен** ауыстырған.

Орбиталь - қандай да бір « e -дық бұлт»; оның аймағында e белгілі бір ықтим-пен бар б-ды.

Атомдағы e -ның күйін кванттық сандар деп аталатын 4 сан арқылы сипаттайды:

Кванттық сан	Белгілеуі (символ)	Сипаттамасы	Мәні
Бас кванттық сан	n	Орбитальдің энергетикалық деңгейі	Оң бүтін сандар: 1, 2, 3...
Орбиталық кванттық сан	l	Орбиталь пішіні	0 ден $n-1$ ге дейінгі бүтін сандар
Магниттік кванттық сан	m	Бағдар	-1 ден +1 ге дейінгі бүтін сандар
Спиндік кванттық сан	m_s	Электронның спині	+1/2 және -1/2

Бас кванттық сан n

Сипаттайды:

- орбитальдің ядроға дейінгі орташа аралығын;
- атомдағы электронның энергетикалық күйін.

n мәні \uparrow сайын, эл-ронның энергиясы жоғары болады және эл-рондық бұлттың өлшемі (размері) артады.

Егер атомда бірдей n -дері бар бірнеше эл-рон болса, онда олар өлшемдері бірдей эл-рондық бұлттарды - эл-рондық қабықшаларды құрайды.

Орбиталық (азимуттық) кванттық сан l

Сипаттайды:

- n -ге тәуелді болатын орбитальдің пішінін.

Орбиталық l саны 0 ден $n-1$ ге дейінгі аралықта бүтін санды мәндер қабылдай алады, мысалы, $n = 2$ кезінде $l = 0$ және $l = 1$ мәндерді қабылдайды.

Сонымен, l мәні орбитальдің пішінін, ал n – оның өлшемін анықтайды.

Бірдей n -дері бар, бірақ әртүрлі l -дері бар орбитальдар энергетикалық деңгейшелер (подуровни) деп аталады және латын әріптерімен белгіленеді:

	Энергетикалық деңгейшелер
0	s
1	p
2	d
3	f
4	g

Электронның атомдағы күйін бас және орбиталық кванттық сандар үшін мына түрде жазады: $2s$; $3p$; $3d$...

Сутегі атомы. Сутегі атомының сызықтық спектрлері

Спектр түсінігі.

Қалыпты жағдайда атом сәуле шығармайды, эл-рондар өз орбиталарымен қозғалып жүреді. Атом қозған кезде, яғни электрондар бір орбитадан екіншісіне көшкенде жарық шығарылады. Ол **спектр** түрінде білінеді.

Спектр (лат. spectrum - «көріну») - физикада физ. шаманың (әдетте E, ν, m) мәндерінің үлестірілуі. Мұндай үлестірілудің графиктік көрінісі спектрлік диаграмма д/а.

Негізінен спектр ретінде ЭМ спектрді санайды - ЭМ сәулеленудің жиіліктерінің спектрі.

Спектр деген сөзді алғаш рет енгізген Ньютон: күн сәулесі призмадан өткенде пайда болған көп түсті жолақшаны түсіндіру үшін.

Физикалық шаманың үлестірілуінің сипатына байланысты спектрлер былай бөлінеді:

- **дискретті (сызықтық)** - сиретілген газ атомдары мен қарапайым молекулаларда,
- **жолақша** - күрделі молекулаларда,
- **үздіксіз (тұтас)** - қыздырылған қатты денелер мен сұйықтарда байқалады.

Сутек атомы спектріндегі заңдылықтар. Бальмер-Ридберг формуласы.

Алғашында ең қарапайым H_2 атомының спектрі зерттелді. Бор теориясы ашылған сәтте, сутек атомы эксп-ментпен жақсы зерттелген болатын.

Бұл атомда жалғыз ғана e бар, ал ядросы оң зарядталған бөлшек $-p$ болды, оның заряды модулі бойынша e зарядына тең (Ze), массасы e мас-сынан 1836 есе $>$.

Осыдан бұрын, XIX ғасырдың басында көзге көрінетін аймақта сутегі атомының спектрі алынған, оның түрі дискретті, сызықты (сызықтық спектрі) болды.

Бұл спектрдегі сызықтарды біріктіріп, әрқайсысы **серия** д/а-тын бірнеше топқа бөлген. Сериядағы сызықтардың жиынтығы белгілі заңдылыққа бағынады.

И. Бальмер сутек атомының көрінетін аймақтағы спектр сызықтарының λ -сын мына ϕ -ламан анықтауды ұсынды:

$$\lambda = \lambda_0 \frac{n^2}{n^2 - 4} \quad (1)$$

Мұнда $\lambda_0 = 364,613 \cdot 10^{-13}$ м - қайсібір тұрақты сан, ал n - сериядағы әртүрлі сызықтар үшін 3-тен басталатын бүтін сандар тізбегін қабылдайды: $n = 3, 4, \dots, 11$.

Швед ғалымы И.Ридберг бұл формуланың басқаша жазылуын ұсынды:

$$\frac{1}{\lambda} = R' \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 3, 4, \dots, 11 \quad (2) \text{ - Б.-Рид. } \phi\text{-ласы. } \left(\frac{1}{\lambda} = k \text{ — толқындық сан, } m^{-1} \right)$$

R' – Ридберг тұрақтысы д/а. Сан мәні $R' = 10973731 \approx 1,1 \cdot 10^7$ м⁻¹.

$\nu = \frac{c}{\lambda}$ болғандықтан, (2) формуланы былай да жазуға болады:

$$\nu = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 3, 4, \dots, 11 \quad (3)$$

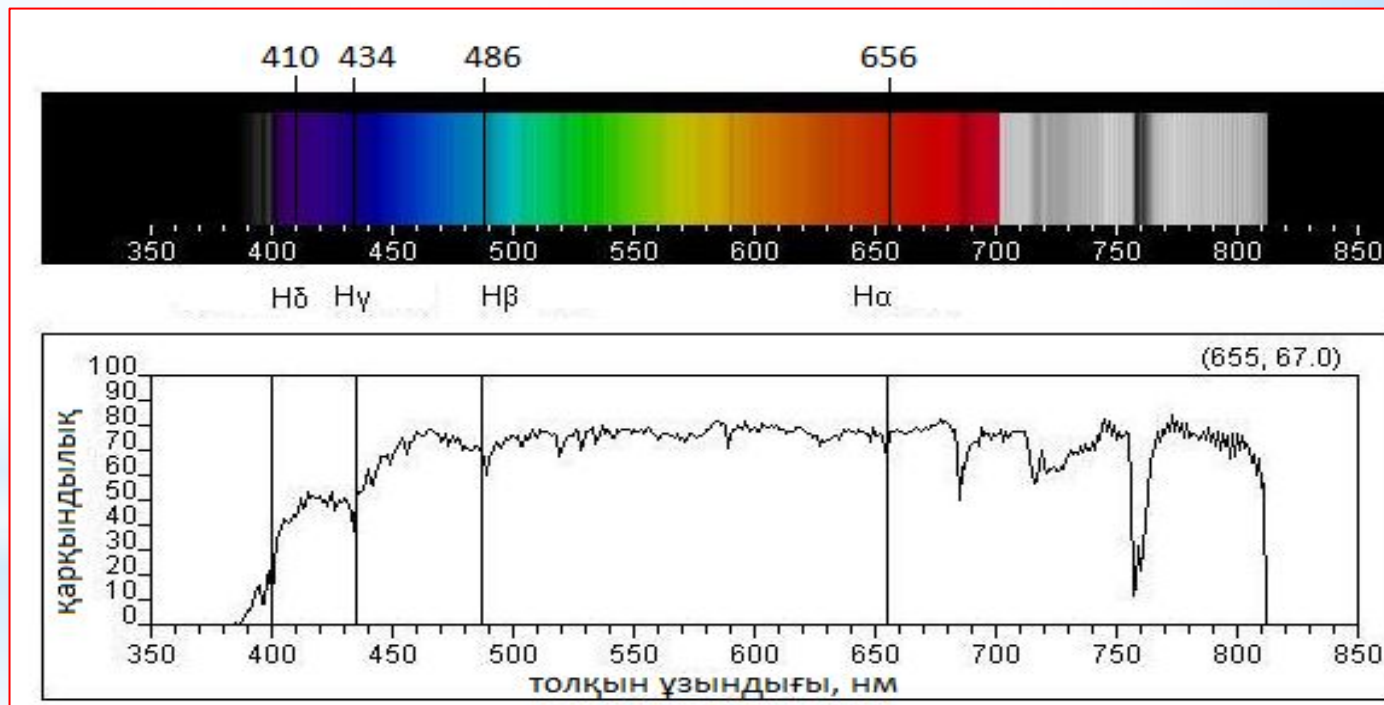
мұнда $R = R' \cdot c = 3.29 \cdot 10^{15}$ с⁻¹(Гц) - ол да Ридберг тұрақтысы.

Б-Р. ф-ласы алғаш рет спек-лік заңд-дағы тұрақты сандардың ерекше рөлін көрс-ті. Қазір сутектің өте көп спектрлік сыз-тары белгілі, және олардың λ -тары Б-Р. ф-ласымен жоғарғы дәлдікпен анық-лады.

Бұл ф-ладан n -нің әртүрлі мәндерімен айрықша-тын сп.рлік сызықтар - сызықтардың тобын не сериясын құрайтыны көрінеді. Олар Бальмер сериясы д/а. $n \uparrow$ сайын (ұзын толқыннан қысқасына көшу барысында) сп. сыз-тар бір-біріне жақындай түседі. ($\nu = R(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2})$)

Б-мер с-ясы спектрдің көрінетін айма-да орналасқан, сонд-тан 1-болып анық-лған.

Сур: Б-мер с-ясының сыз-тарының фотосуреті келтірілген: Жоғарыда-спекроскопта көрінетін «кәдімгі» спектр, төменде-қарқындылықтың λ -ға тәуелділігі .



$H_\alpha, H_\beta, H_\gamma, H_\delta$ әріп-рімен сп-трдің көрінетін айма-дағы сызықтар белгіленген. Сыз-тардың үстінде сәйкес λ -ры жазылған, олар Б-мердің (1) ф-мен есеп-лген.

Көрнекі болу үшін, есептелген мәндерді кестеге енгізіп жазайық:

	Сызықтың белгіленуі	Сызықтың түсі (сипаты)	
3		Қызыл	656
4		Жасыл	486
5		Көгілдір	434
6		Күлгін	410

Есептелген толқын ұзындықтарының мәндері эксперименттен алынған мәндермен жақсы сәйкес келген.

Кейіннен, XX ғ. басында, сутек атомы спектрінде осы сияқты бірнеше сериялар спектрдің көрінбейтін УК және ИҚ аймақтарында байқалды.

Сонымен, сутек атомы спектрінің келесідей сериялары белгілі:

№ р/р	Серияның атауы	Бальмер – Ридберг формуласының түрі	e -ның көшуі жүретін n -деңгейдің мәні	Аралық (диапазон)	Ашылған жылы
1	<u>Лайман</u> сериясы	$\nu = R \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right)$	$n = 2, 3, 4, \dots$	<u>Спектрдің</u> УК бөлігі	1906
2	<u>Бальмер</u> сериясы	$\nu = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right)$	$n = 3, 4, 5, \dots$	Көрінетін және УК-ге жақын	1885
3	<u>Пашен</u> сериясы	$\nu = R \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right)$	$n = 4, 5, 6, \dots$	ИҚ	1908
4	<u>Брэкет</u> сериясы	$\nu = R \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right)$	$n = 5, 6, 7, \dots$	ИҚ	1922
5	<u>Пфунд</u> сериясы	$\nu = R \left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2} \right)$	$n = 6, 7, 8, \dots$	ИҚ	1924
6	<u>Хэмфри</u> сериясы	$\nu = R \left(\frac{1}{6^2} - \frac{1}{n^2} \right)$	$n = 7, 8, 9, \dots$	ИҚ	1953

Жоғ-дағы барлық ф-лалар Б-мердің 1 ғана біріккен ф-ласымен сипат-лына алады:

$$\nu = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad m = 1, 2, 3, \dots 6; \quad n = m + 1, m + 2, \dots \quad (4),$$

Бор постулаттары

1913 ж. кл. физика тұрғысынан түсіндіруге келмейтін 3 эксп-ттік нәтиже болды:

- Б-Р ф-ласымен өрнектелген сутек атомның сыз. спектріндегі эксп. заңдылықтар
- Резерфорд ұсынған атомның ядролық моделі
- Жарықтың шығарылуы мен жұтылуының кванттық сипаты (жылулық сәуле шығару, фотоэффект → СРС)

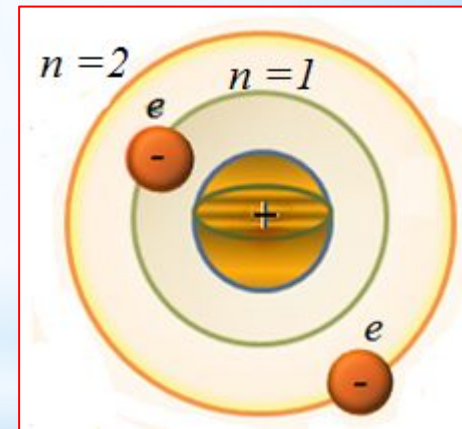
Бұл қиындықтарды шешу мақсатымен Данияның физигі Н. Бор сутек және ядросының заряды Ze болатын, айналасында бір ғана e қозғ-тын сутек тектес атомдар үшін 3 постулат тұжырымдады.

1-пост. - стац. (тұрақты) күйлер пост-ты:

Атомдар, сыртқы әсерсіз t б-ша өзгермейтін қандай да бір тұрақты (стац.) күйлерде ғана ұзақ уақыт бола алады.

Бұл ст. күйлерде, e -ның қозғ-сына қарамастан, атом жарық шығармайды.

Осы күйлерде атом, дискретті (үзікті) қатар құрайтын $E_1, E_2, \dots, E_i, \dots, E_n$ эн-ларға ие б-ды және бұл күйлер өзінің тұрақтылығымен ерекшеленеді;



ЭМ сәулеленуді жұту не шығару нәтижесінде E_i эн-ның кез келген өзгерісі 1 күйден 2-сіне толық көшу (секірмелі) кезінде ғана б-ды.

Атомдар ұзақ уақыт бола алатын күйді стационар күй деп атайды.

2-постулат - орбиталарды кванттау ережесі:

Атомның стац. күйі кезінде дөңг. орбитамен үдей қозалған e жарық шығ-майды, және импульс моментінің үзікті (дискретті квантталған) мәніне ие б-ды:

$$L_n = m\vartheta r = n\hbar, \text{ не } m\vartheta r = n \frac{h}{2\pi} \quad (5)$$

$n = 1, 2, 3, \dots$ - бас кванттық сан.

$h = 6,63 \cdot 10^{-34}$ Дж·с немесе, $\hbar = h/2\pi = 1,05 \cdot 10^{-34}$ Дж·с - Планк тұрақтысы

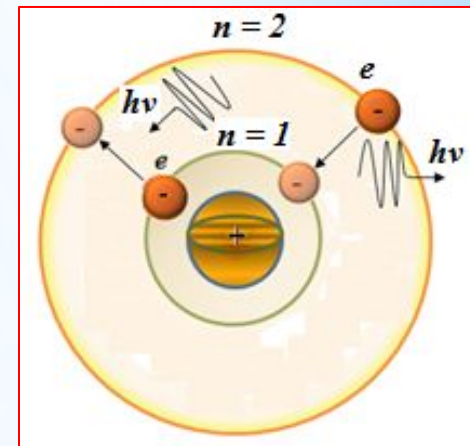
3-постулат - орбиталар ережесі:

Эл-рон 1 стац. орб-дан 2-ісіне көшкен кезде сәулелену жарық кванты түрінде не шығарылады, не жұтылады.

Эн-сы E_n б-тын стац. күйден эн-сы E_m стац. күйге e көшкен кездегі жұтылған не шығарылған жарық квантының шамасы $h\nu$ осы стац. күйлердің энергияларының айырмасына тең:

$$h\nu = E_n - E_m, \text{ бұдан } \nu = \frac{E_n - E_m}{h} \quad (6)$$

$n > m$ - фотон шығарылады, $n < m$ - фотон жұтылады.



Бордың пост-ры клас-лық эл-динамиканың қорытындыларына қайшы келеді. Шынында да, 1-пост. б-ша, электрондары ядроны айнала қозғалуына қарамастан, атомдар сәуле шығармайды, ал 3-пост. б-ша, шығарылған жарық жиілігінің электронның периодты қозғалыс жиілігімен ешбір ортақтастығы жоқ. Алайда Бор пост-ры тәж-беде дәлелд-ген атом қасиет-рімен толық сәйкес келеді.

Франк және Герц тәжірибесі

Бордың 1- және 3- постулаттары неміс физиктері Франк және Герц тәжірибелерімен 1913 ж. расталды. (СРС)

Сутек атомы үшін Бор теориясы

Заряды Ze -ге тең атом яд-сының өрісіндегі e қозғалысын қарастырайық.

$Z = 1$ болғанда, бұл жүйе **сутегі** атомын береді.

Ал, реттік № Z -ке тең, e қабатында 1 ғана e бар атомды **сутегі тектес** атом д/а.

Мұндай атом ретінде сутегі ж/е оның ауыр изотоптарынан (дейтерий, тритий) басқа, жоғалтқан e саны атом зарядына, яғни 1-ге тең, кез келг. ионды алуға б-ды.

Мұндай ат-дардың спектрі Бор т-сымен сипат-ды

e орбитамен қозғалғанда Кулон күші центрге тартқыш күшпен теңеседі:

$$\frac{Ze \cdot e}{r^2} = m \frac{v^2}{r} \quad (7), \quad \text{бұдан } r = \frac{Ze^2}{mv^2}$$

Бор 2- пост. ($mv r = n\hbar$) : $v = \frac{n\hbar}{mr}$, осыны алдыңғы формулаға қояйық:

$$r = \frac{Ze^2 m^2 r^2}{mn^2 \hbar^2} \Rightarrow r = \frac{\hbar^2}{mZe^2} n^2. \quad r \sim n^2 \text{ болғандықтан:}$$

$$r_n = \frac{\hbar^2}{mZe^2} n^2 \quad (8) \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

(8) \Rightarrow атомда e орбиталары тек бірқатар дискретті мәндер қабылдайды.

Сутек атомының 1- Бор орбитасы үшін ($Z = 1, n = 1$):

$$r_n = \frac{\hbar^2}{me^2} = \frac{(1,05 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{с})^2}{9,1 \cdot 10^{-28} \text{ г} \cdot (4,8 \cdot 10^{-10} \text{ СГСЭ})^2} = \frac{1,1 \cdot 10^{-54}}{21 \cdot 10^{-47}} = 0,52 \cdot 10^{-8} \text{ см} = 0,52 \cdot 10^{-10} \text{ м} = 0,52 \text{ \AA}$$

Атомның толық ішкі эн-ясы e -ның кин. эн-сынан (ядро қозғалмай тұр) және e -ның ядромен әсерлесу эн-сынан (потенциялық энергиядан) тұрады:

$$E = \frac{m\vartheta^2}{2} - \frac{Ze^2}{r} \quad (9)$$

(7) формуланы ($\frac{Ze \cdot e}{r^2} = m \frac{\vartheta^2}{r}$) былай жазайық: $\frac{Ze \cdot e}{2r} = m \frac{\vartheta^2}{2}$. Онда (9) формула:

$$E = \frac{Ze \cdot e}{2r} - \frac{Ze^2}{r} = -\frac{Ze^2}{2r} \quad (10)$$

(8)- ді ($r_n = \frac{\hbar^2}{mZe^2} n^2$) еск. жазсақ, ішкі эн-ның рұқсат етілген мәндерінің

ф-сын аламыз:
$$E_n = -\frac{me^4 Z^2}{2\hbar^2 n^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (11)$$

(11) ф-мен анық-латын эн-гетикалық деңгейлердің сұлбасы (сур.).
H атомы ($Z = 1$) n күйден m -ге көшкенде шығарылатын квант:

$$\hbar\omega = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) . \text{ Бұдан шығарылған жарықтың жиілігі:}$$

$$\omega = \frac{me^4}{2\hbar^3} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (12)$$

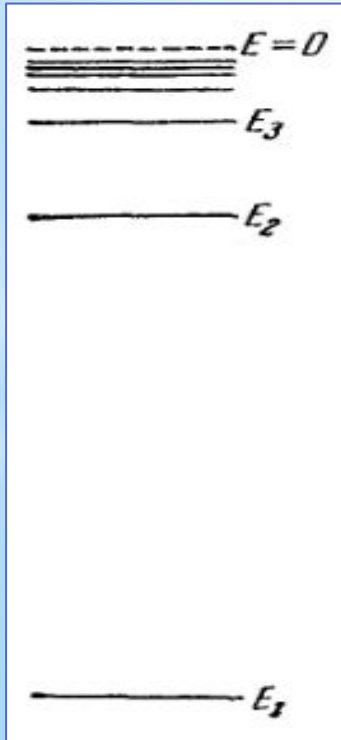
Сонымен біз Бальмердің біріккен формуласына (4) келдік.

$$\left(\nu = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \right) \quad (4) , \text{ мұнда } \omega = 2\pi\nu$$

Сонда Ридберг тұрақтысы үшін мына өрнекті жазамыз:

$$R = \frac{me^4}{2\hbar^3} \quad (13)$$

Егер (13)-ке тұрақтыларының мәндерін қойсақ, шамасы эксп-пен алынған Ридберг тұрақтысына өте жақын б-ды.



Сонымен, Бор теориясы атом теориясының дамуындағы үлкен қадам болды.

Ол классикалық физика заңдарының ішкі атомдық құбылыстарға қолданылмайтынын көрсетті. Дегенмен, қазіргі кезде Бор теориясының негізінен тарихи ғана маңызы бар, оның кемшіліктерінің бірі, бұл теория тіпті сутек атомынан кейінгі орналасқан гелий атомы үшін жарамады.

Сондықтан бұл теория атомдық құбылыстардың жүйелі теориясын құрудағы өткел кезең ғана болына білді.

H атының эн-гетикалық деңгейлерінің диаграммасы көрсетілген.

Әртүрлі спектрлік серияларға сәйкес көшулер көрсетілген.

Бальмер сериясының алғашқы 5 сызығы үшін λ -лар берілген.

«-» таңб. e -ның байланысқан күйде тұрғанын білдіреді.

(11)-ден ($E_n = -\frac{me^4 z^2}{2\hbar^2 n^2}$) ж/е схемадан атомның эн-гетикалық күйлері n мәніне байл-сты өзгертін эн-гетикалық деңгейлер тізбегін құратынын көреміз. n бас кв. сан атомның эн-гетикалық деңгейлерін анықтайды.

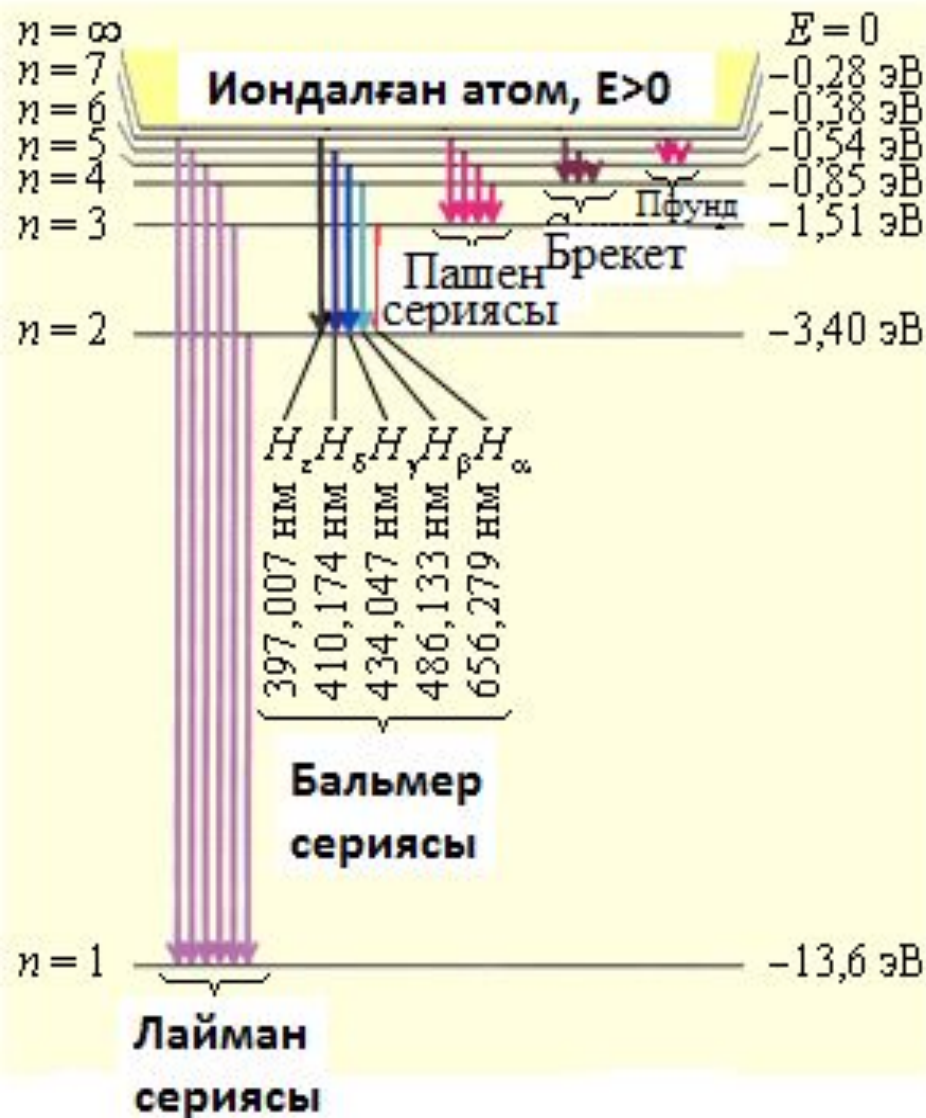
$n = 1$ - негізгі энерг-лық күй д/а.

$n > 1$ - қозған эн. күйлер д/а.

$$E_{min} = E_1 = -13,6 \text{ эВ}, \quad E_{max} = E_{\infty} = 0$$

Атомның иондалуы - e -ның атомнан үзілуі. H атының иондалу эн-гиясы 13,6 эВ.

$$E_i = E_{max} - E_{min} = 13.6 \text{ эВ}$$



Комбинациялық принцип

1908 ж. В. Ритц денелердің сәулені шығару және жұту спектрлерінің эксп-нттік деректерін біріктіріп, **комбинациялық принципті** тұжырымдады.

Атом спектріндегі барлық сызықтар **спектрлік термдер** деп аталатын шамалардың қандай да бір сандарының комбинациясы ретінде беріле алады. Термдердің барлық комбинациясы орындала бермейді. Рұқсат етілген және рұқсат етілмеген комбинацияларды айрықшалайтын **сұрыптау ережелері** (правила отбора) болады.

Атап айтқанда сутегі атомы спектрінің барлық сызықтарын қамтитын Бальмердің біріккен формуласына ($\nu = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$) қатысты әрбір серияның ν жиілігін (не λ) m және n бүтін сандардың $T(m)$ және $T(n)$ айырмасы ретінде беруге б-ды:

$$\nu = T(m) - T(n) \quad (n < m, T_n > T_m) \quad (1)$$

Бір серияның сызықтары үшін $T(m)$ мәні тұрақты, ал $T(n)$ мәні айнымалы б-ды ($T(n) = \frac{R}{n^2}$).

Бұл функцияларды **спектрлік термдер** деп атайды.

Мысалы, Бальмер с-сының 1- сызығының жиілігі $\nu = T(2) - T(3)$,

Пфунд с-сының 2- сызығының жиілігі

$$\nu = T(5) - T(7) \text{ б-ды.}$$

Сутегінікі ғана емес, басқа да газдардың және метал буларының сәулелену спектрлерін екі термнің айырмасы ретінде өрнектеуге болатынын айтты.

Алайда, басқа зат атомдары үшін термдердің өрнегі күрделірек болады.

