

ЧАСТОТНЫЙ АНАЛИЗ ОПТИЧЕСКИХ СПЕКТРОВ АТОМОВ

А.С. Чуев (chuev@mail.ru)

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва

Аннотация

Диаграммы Гротриана, используемые в оптической спектроскопии, имеют инверсное изображение электронных энергетических уровней. В спектроскопии такое допустимо, однако инверсное изображение энергетических уровней извращает или, как минимум, затемняет создание верного физического представления о строении атомов.

С позиций частотного метода, спектральные линии излучения и поглощения представляют собой биения более высокочастотных колебаний (частотных термов) с квадратичным соотношением частот. Считается, что частотные термы принадлежат электронам в различных энергетических состояниях. Механизм сопряжения указанных двух видов частот пока неизвестен.

В рассматриваемой модели атома электронные оболочки представляются пузырьвидными, а электроны видятся как колебания этой оболочки или каплеобразные образования на ней с вихреобразным движением субстрата оболочки. Частотный метод дает хорошую сходимость теоретических и экспериментальных данных для простейших водородоподобных и некоторых других типов многоэлектронных атомов.

Оптические спектры, структура спектров, строение атома, частотный анализ.

Optical spectra, the structure of the spectra, the structure of the atom, the frequency analysis

*Истина всегда оказывается проще,
чем можно было бы предположить.*

Р. Фейнман

ВВЕДЕНИЕ

Структура строения атомов находит прямое и непосредственное отражение в структуре оптических спектров атомов, индивидуальных каждому сорту атома или иона. С этим положением согласны практически все ученые, но имеются разные трактовки и представления о механизме образования этих спектров и взаимосвязи друг с другом указанных двух структур. Если структура оптических спектров наблюдаема и очевидна, то о структуре строения атомов можно только догадываться. Нет точных знаний и о физической сущности электромагнитных волн, создающих оптический спектр колебаний.

Хорошо известно, что любая спектральная линия представима в виде разности двух частотных термов [1, стр.251]. Это указывает на происхождение электромагнитных волн, избирательно излучаемых и поглощаемых атомами, как биений более высокочастотных колебаний, присущих атомам. На этом основании большинство ученых склонны считать оптические частотные спектры отражением колебательных процессов, происходящих внутри атома, но о самих этих процессах имеются весьма смутные представления. Попробуем, насколько это возможно, прояснить данный вопрос с позиций частотного анализа спектральных линий. Исследование будем вести с использованием диаграмм Гротриана [2], обеспечивающих наглядность представления изучаемой области.

АНАЛИЗ СТРУКТУРЫ СПЕКТРАЛЬНЫХ ЛИНИЙ АТОМА ВОДОРОДА

Анализ начнем с рассмотрения энергетики строения атома. Классическая электронно-ядерная модель атома исходит из того, что электроны входят в состав атома, причем высокоэнергетические электроны расположены «в глубине» атома и это определенным образом подтверждается на практике. На рис.1 приведена энергетическая диаграмма формирования спектра атома водорода.

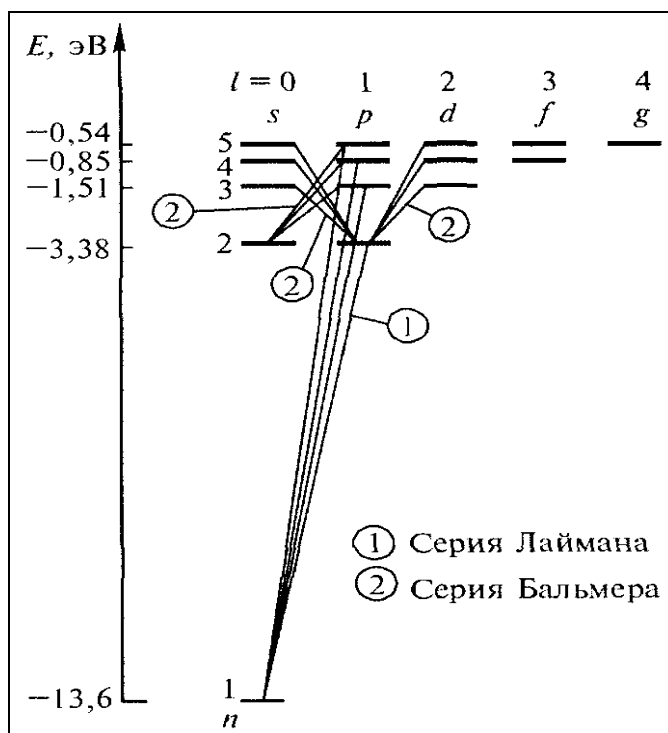


Рис.1. Диаграмма образования спектральных линий в атоме водорода.

В отличие от изображения рис.1 диаграммы Гротриана (рис. 2), применяемые в оптической спектроскопии, имеют инверсное изображение электронных энергетических уровней. Величина энергии ионизации считается положительной и приписывается предельному уровню, к которому стремятся все верхние энергетические уровни. Такое изображение в спектроскопии, думается, вполне возможно и допустимо. Однако этот прием в изображении энерге-

тических уровней не соответствует частотным представлениям, согласно которым частоты оптического спектра представляют собой биения более высокочастотных колебаний, принадлежащим электронам или, возможно, иным структурам атома. Тем самым затрудняется создание более или менее верных физических представлений о строении атомов.

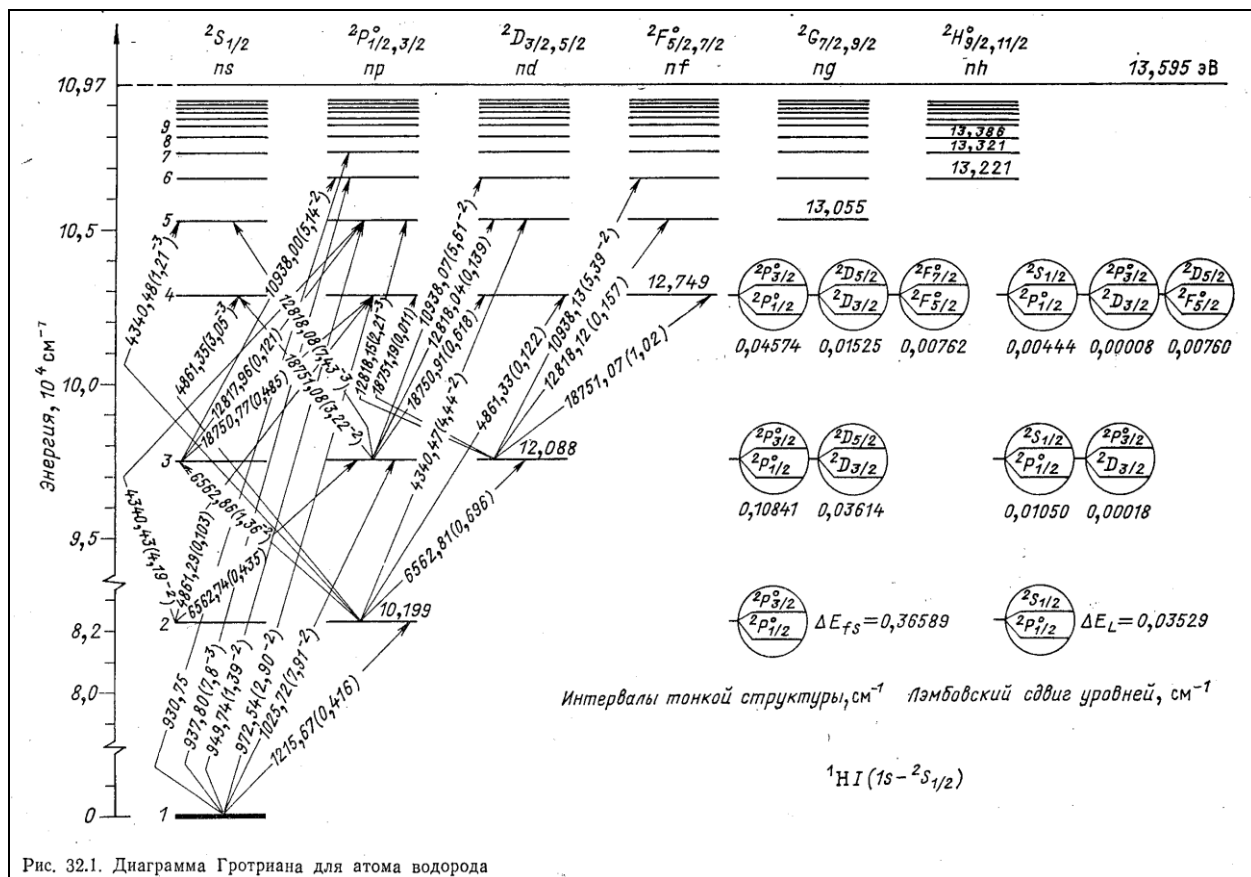


Рис. 2. Традиционное в спектроскопии представление диаграммы образования спектральных линий на примере атома водорода.

Выше сказанное важно по следующим соображениям. Принято считать, что энергетические уровни рис.1 соответствуют энергии одного и того же электрона, оказывающегося в данных энергетических состояниях до (или после) излучения или поглощения фотона. С точки зрения частотных представлений, большие значения энергии соответствуют и большим частотам. Поэтому обозначения энергетических уровней на диаграммах Гротриана явно не соответствуют физике наблюдаемых процессов.

Частотные спектральные линии, отражающие процессы излучения и поглощения атомом электромагнитных волн, объясняются известным в природе явлением биения волн. Мысль о частотных биениях, приводящих к излучению атомами электромагнитных волн, высказывалась и ранее [3, стр. 486], но применительно к структуре оптических спектров атомов и анализу строения самих атомов эта мысль должного развития не получила. Частотный подход к анализу строения атомов использует в своих работах О.Г. Верин [4, 5], но широкого признания его работы тоже не получили.

Нормальное (не инверсное) изображение энергетических уровней для электрона атома водорода с соответствующими этим уровням дебройлевскими частотами приведено на рис. 3. Здесь первому энергетическому уровню с энергией, равной энергии ионизации (13,595 эВ) должна соответствовать частота колебаний $\omega_1 = \frac{E_1}{\hbar} = 2,065 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}$. Это значение частоты для атома водорода максимальное, если разделить его на 2π , то получится частотная постоянная Ридберга, справочное значение которой равно $3,289841960364 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}$.

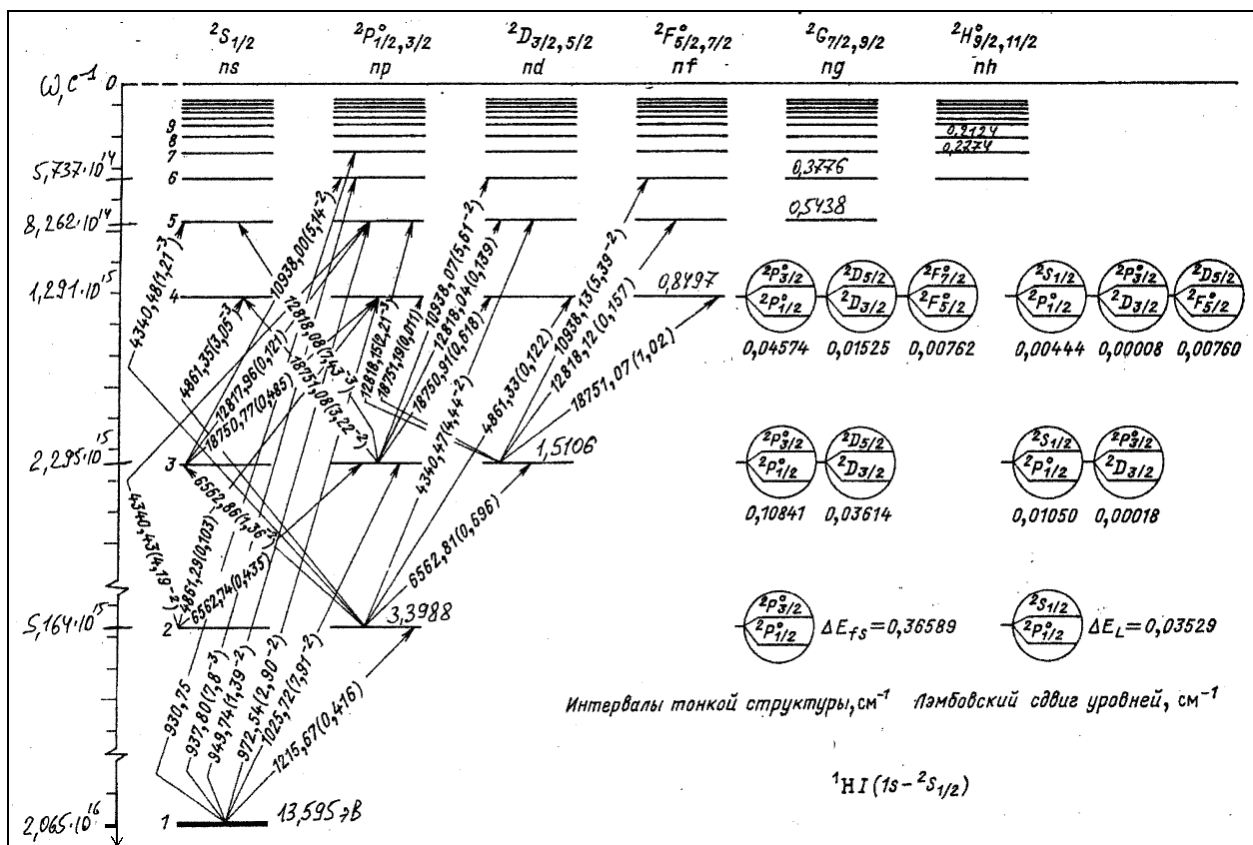


Рис. 3. Диаграмма для атома водорода в частотном представлении с показом действительных значений энергетических уровней.

Второе возможное заблуждение в описании оптических спектров связано с привычным приписыванием излучений и поглощений фотонов конкретным атомам, а не их системам, что рассмотрено в работе [6]. Вполне возможно, что различные энергетические состояния электронов - это их состояния в различных атомах и молекулах химического вещества. Приписывание излучений и поглощений отдельным атомам основывалось на давней механистической планетарной модели атома, по которой электроны обращаются вокруг ядра. Действительности это не соответствует, и что собой представляют электроны, мы до сих пор не очень хорошо понимаем.

Предложенная в свое время автором пузырьревидная модель атома [7] исходит из того, что внутриатомные электроны - это стоячие механические волны атомарной оболочки (воз-

можно, нескольких оболочек, расположенных одна внутри другой) со сгущениями-разрежениями субстрата оболочки в узлах и пучностях. Возможен второй вариант представления электронов – в виде вихревых образований из субстрата той же оболочки. На сегодня второй вариант автору видится более предпочтительным. Природа устроена фрактально, поэтому пузыревидную модель атома можно видеть в реальности, наблюдая модельное поведение жидкостных пузыревидных образований в невесомости [8]. Невесомость используется здесь для исключения гравитационных возмущений.

О строении и резонансных свойствах атомов, в частности, о строении и свойствах электронной оболочки (или оболочек) можно многое узнать, изучая спектры поглощения и излучения атомами электромагнитных волн. Данный метод изучения атомов является главным, хотя и не единственным. Дополнительные сведения можно почерпнуть из анализа валентных, тепловых и других свойств атомов. Хорошим подспорьем для этого является сайт [9] с динамической таблицей Менделеева.

Рассмотрим наиболее простой атом водорода, имеющий электронную оболочку, состоящую из единственного электрона, способного находиться в разных энергетических состояниях. Спектр фотонных частот излучения и поглощения атомом водорода определяется известным выражением:

$$\omega_{nk} = R \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right). \quad (1)$$

Здесь R - частотная постоянная Ридберга, n и k целые числа, причем первое число обязательно меньше второго.

Очевидно, что частоты оптического излучения ω_{nk} в соотношении (1) определяются как разности (биения) более высокочастотных колебаний, происходящих внутри атома. Судя по всему, эти колебания принадлежат электронной оболочке, а не электрону, хоть он и один в атоме водорода.

Квадратичный закон, по которому частоты колебаний электронной оболочки связаны с частотой излучаемых и поглощаемых фотонов, не поддается простому логическому объяснению. Такого не наблюдается в явлениях биения механических и электромагнитных волн, поэтому данное обстоятельство создает серьезную проблему в понимании и физическом представлении формульной связи по выражению (1). Попробуем найти математическое и физическое объяснения этой связи.

Частотную постоянную Ридберга, входящую в выражение (1) принято представлять в следующем виде [1, стр.259]

$$R = \frac{m_e e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^3} \approx 2,065 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}. \quad (2)$$

Однако по данному выражению понять физический смысл постоянной Ридберга практически невозможно. Физический смысл постоянной Ридберга становится более ясным, если последнее выражение представить в частотном виде – как соотношение внутренней энергии электрона и постоянной Планка при участии постоянной тонкой структуры α

$$R = \frac{m_e e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^3} = \frac{m_e}{32\pi^2 \hbar^3} \left(\frac{e^2}{\epsilon_0} \right) = \frac{m_e}{32\pi^2 \hbar^3} (4\pi c a \hbar)^2 = \frac{m_e c^2}{\hbar} \frac{\alpha^2}{2}. \quad (3)$$

Данное выражение можно преобразовать далее, используя в конечном выражении комptonовскую длину волны λ_K или соответствующую ей частоту Комптона ω_K

$$R = \frac{m_e c^2}{2\hbar} \alpha^2 = \frac{\pi m_e c^2}{h} \alpha^2 = \frac{2\pi c}{2\lambda_K} \alpha^2 = \frac{\omega_K}{2} \alpha^2. \quad (4)$$

Согласно этим формулам постоянная Ридберга выражает частоту, которая, судя по всему, принадлежит не электрону (частота колебаний электрона это, по нашему мнению, комptonовская частота), а электронной оболочке. Введем обозначение частоты (вернее, частот) электронной оболочки большой буквой Ω . Применительно к первому энергетическому уровню электронной оболочки атома водорода назовем эту частоту ридберговской $\Omega_1 = \Omega_R$.

$$\Omega_R = R = \omega_K \frac{\alpha^2}{2} = 2,067068665 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}. \quad (5)$$

По данному соотношению максимально возможная частота колебаний электронной оболочки атома водорода в основном невозбужденном состоянии примерно в 37558 раз меньше комptonовской частоты электрона, оцениваемой значением $7,763439614 \cdot 10^{20} \text{ с}^{-1}$.

В предлагаемой пузырьвидной модели атома любые возбужденные состояния электронной оболочки атома (в данном случае, атома водорода) понимаются как колебания, осуществляемые с частотой, гораздо меньшей, чем ридберговская (вплоть до нулевого значения, как это ни удивительно).

Физика процесса видится так. Атомы в основном (якобы, невозбужденном) энергетическом состоянии в действительности должны быть сильно возбуждены, их электронные оболочки волнуются и дрожат, они «жаждут» поглощений фотонов. При резонансных поглощениях фотонов частота колебаний электронной оболочки уменьшается и снова начинает интенсивнее «волноваться», излучив спустя малое время поглощенный фотон. Причина такого достаточно странного поведения атомов нам неизвестна и вряд ли станет известной в ближайшее время. Заметим, что изменения в частотах колебаний оболочки происходят по квадратичному закону, что тоже не очень понятно.

В классической физике процесс излучений и поглощений фотонов атомами описывается в виде изменений радиуса обращения электрона, с соответствующим уменьшением его

орбитальной скорости и изменением орбитального момента импульса на величину постоянной Планка.

В рассматриваемой пузырьревидной модели атома орбитальный момент тоже есть, его целочисленные значения, кратные постоянной Планка, представляются как волновые возмущения оболочки. Волновые образования типа фононов обладают спином (моментом импульса), поэтому описываемые представления вполне физичны, кроме того, наличие нулевого спина становится легко объяснимым, чего не было в классической модели.

В нашей попытке разобраться с квадратичным соотношением фотонных и внутриатомных частот последние предположим дебройлевскими. Дебройлевские частоты определяются энергией микрочастиц по известному соотношению

$$\Omega_i = \frac{E_i}{\hbar} . \quad (6)$$

В соответствии с данным соотношением на диаграмме рис. 3 приведены значения энергий и соответствующих им дебройлевских частот. Фотонные частоты, показанные на рис. 3 стрелками в виде переходов с энергетического уровня на другой, со всей очевидностью, являются биениями дебройлевских частот, соответствующих данным уровням энергии.

Для объяснения формулы (1) будем исходить из того (примем допущение), что частоты атомных колебаний, образующих фотонную частоту по выражению (1), не совпадают с частотой излучаемого или поглощаемого фотона, что вполне естественно. Однако длины волн для этих частот одинаковы.

Дебройлевская длина волны λ_Ω в отличие от фотонной длины волны $\lambda_f = 2\pi c/\omega$ определяется формулой

$$\lambda_\Omega = \frac{h}{p} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_e E}} . \quad (7)$$

Данная формула показывает квадратичную зависимость между энергией и длиной волны дебройлевских волн. В то время как для фотонных волн зависимость длины волны от энергии обратно пропорциональная.

Поскольку частоты фотонных и дебройлевских волн прямо пропорциональны их энергии, то на основании закона сохранения энергии можем записать

$$\omega_f = \frac{2\pi c}{\lambda_f} = \frac{c\sqrt{2m_e E_f}}{\hbar} = \frac{c\sqrt{2m_e \hbar \Omega}}{\hbar} = c\sqrt{\frac{2m_e}{\hbar}} \Omega , \quad (8)$$

Тогда получаем для двух типов частот следующее соотношение

$$\omega_f^2 = \frac{2m_e c^2}{\hbar} \Omega. \quad (9)$$

Таким образом, мы получили нелинейное квадратичное соотношение двух видов частот дебройлевских и фотонных. Согласно последнему выражению для разности частот можем записать

$$\omega_n^2 - \omega_k^2 = \frac{2m_e c^2}{\hbar} (\Omega_n - \Omega_k) \quad (10)$$

При целочисленных кратных соотношениях дебройлевских частот, то есть при их резонансных соотношениях, соотношения фотонных частот этой кратности не будут соответствовать, поэтому и действует соотношение (1), согласно которому целочисленно кратны или должны квадраты фотонных частот.

Используя формулы (3) и (4) и известное выражение для постоянной Ридберга и комптоновской частоты, соотношение (10) можно представить в ином виде

$$\omega_n^2 - \omega_k^2 = \frac{4R}{\alpha^2} (\Omega_n - \Omega_k). \quad (11)$$

$$\omega_n^2 - \omega_k^2 = \omega_K \alpha^2 (\Omega_n - \Omega_k). \quad (12)$$

В соответствии с соотношениями (9) – (12) целочисленные изменения дебройлевских частот приводят к квадратичным изменениям значений фотонных частот. Тогда становится более или менее понятными квадратичные изменения фотонных частот, которые соответствуют следующему соотношению

$$\omega_f = \frac{m_e c^2}{\hbar} \frac{\alpha^2}{2} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right). \quad (13)$$

Тем самым мы получаем выражение похожее по своей структуре на (1).

Таким образом, происхождение квадратичной зависимости в соотношении двух видов частот: внешних фотонных ω_f и внутриатомных (ненаблюдаемых нами) дебройлевских частот с предполагаемыми значениями $\Omega_i = \Omega_R / n$ и $\Omega_j = \Omega_R / k$, становится более или менее понятным.

В обозначении дебройлевских частот максимальное значение Ω_R , взаимосвязанное с комптоновской частотой ω_K , очевидно, соответствует постоянной Ридберга в выражении (1). Это значение приводилось выше, оно определяется выражениями (2) - (5).

Поскольку Комpton-эффект присущ атомам самых разных веществ, которые имеют самые разные электронные оболочки, а электроны везде одинаковы, то логично сделать вы-

вод о принадлежности комптоновской частоты ω_K электронам, что подтверждает практика, а частот Ω_i - электронным оболочкам.

Прежде чем перейти к дальнейшему анализу и изучению спектральных линий более сложных атомов попробуем ответить с позиций частотного анализа на вполне естественный вопрос: если, как мы предполагаем, атомные электроны представляют собой колебания электронной оболочки, а электромагнитные волны возникают как частотные биения этих колебаний, то как объясняется несоответствие биений обычному резонансному соотношению (1:1, в общем случае, 1: n) частот колебаний электронной оболочки. При этом определенная упорядоченность оптических частот колебаний вполне очевидна.

Отталкиваясь от модели математического маятника можно предположить, что рассматриваемые электронные колебания, это поперечные (относительно электростатического поля атома) колебания или, скорее всего, местные вихреобразные вращения электронной оболочки. Сравнительно более высокочастотные внутриатомные колебания – это продольные (толщинные) колебания той же электронной оболочки.

Приводимым формулам, выражающим квадратичное соотношение частот разных видов, есть простой и наглядный пример из области механики: длина математического маятника (размерный аналог потенциальной ямы, определяющей длину и частоту волн де Бройля) и частота его колебаний связаны обратной квадратичной зависимостью. При периодических изменениях длины маятника частота его колебаний будет изменяться по квадратичному закону. Еще один наглядный пример – увеличение частоты колебаний конца линейки при уменьшении длины колеблющейся части (например, при протаскивании через щель).

Известна монография по описанию особого типа резонансов, называемых вихревыми и структурными [10]. Рассматриваемый нами тип резонанса в строении атома, возможно, относится к подобным конусным вихревым структурам. Электроны могут возникать и исчезать в пузырькоподобной атомной оболочке подобно циклонам и антициклонам в атмосфере планет. В этих структурах глубинные частоты (вращения в вершине конуса) вполне могут соотноситься с поверхностными частотами (частотами вращений у основания конуса) по квадратичному закону.

Еще раз отметим, что значения разности энергий, определяющих частоту и длину волны фотонов, излучаемых и поглощаемых атомом, одинаковы, как в нашем варианте диаграммы, так и в варианте ее традиционного представления. Однако в нашем варианте значения уровней энергии имеют реальный физический смысл, отражая частоты внутриатомных колебательных процессов. Поэтому анализируя величины и соотношения этих частот, можно судить о структуре самих атомов.

К сожалению, современные модификации диаграмм Гротриана [11, 12] в основном используют инверсное изображение энергетических линий, что сильно запутывает и затрудняет изучение реальной структуры строения атома.

АНАЛИЗ СТРУКТУРЫ ЧАСТОТНЫХ СПЕКТРОВ БОЛЕЕ СЛОЖНЫХ АТОМОВ

Автор настоящей статьи склоняется к мнению, что внутриатомные колебания (электроны) не постоянно присутствуют внутри атома, а возникают под действием внешних причин. Ведь колокол звонит только при ударах по нему. При таком подходе каждый атом видится как своеобразный колокол – резонатор, имеющий свой определенный спектр частот, индивидуальный для каждого химического элемента (возможно, и изотопа).

Многие (таких большинство) привыкли считать, что электроны постоянно содержатся и движутся или «вибрируют» в атоме с определенными частотами, им свойственными. Так, например, Ф.М. Канарёв в своей модели атома [13] энергию, которую мы приписываем колебаниям электронной оболочки, считает энергией электростатической связи электрона с ядром атома. Поскольку с энергетической точки зрения наша модель и модель Канарёва почти идентичны, то приведем его данные (рис. 1) по оценке энергии связи электрона в составе водорода и водородоподобных атомов. В нашей модели вместо энергии связи будут фигурировать частоты, определяемые соотношением (2). Почему автор таблицы рис.1 не привел теоретические данные для $n = 1$ не очень понятно, так как они равны значению при $n = 2$, умножаемому на четыре. При этом совпадение теоретических и экспериментальных данных идеальное.

Z	Эле- Мент	Метод опред.	Энергии связи E_b , eV			
			n=1	n=2	n=3	n=4
1	H	Экспер.	13,598	3,398	1,508	0,848
		Теор.	-	3,399	1,511	0,849
2	He	Экспер.	54,416	13,606	6,046	3,396
		Теор.	-	13,604	6,046	3,401
3	Li	Экспер.	122,451	30,611	13,601	7,651
		Теор.	-	30,613	13,607	7,653
4	Be	Экспер.	217,713	54,423	24,183	13,613
		Теор.	-	54,428	24,190	13,607
5	B	Экспер.	340,217	85,047	37,797	21,257
		Теор.	-	85,054	37,801	21,263
6	C	Экспер.	489,981	122,461	54,431	30,611
		Теор.	-	122,495	54,446	30,624
7	N	Экспер.	667,029	166,689	74,089	41,669
		Теор.	-	166,757	74,114	41,689

Рис.6. Энергия связи электрона для водорода и водородоподобных атомов.
(При $n = 1$ теоретические данные можно определить по формуле 12).

Энергия связи электрона (по-нашему, максимальная энергия поперечных колебаний электронной оболочки) любого водородоподобного атома, определяется формулой:

$$E_i = 13,598 * Z^2 \text{ эВ.} \quad (14)$$

Заметим, что для атомов химических элементов с порядковыми номерами в районе сотни величина энергии составит десятые доли от МэВ, а это уже рентгеновский диапазон волн и соответствующих им частот.

Важным достижением работы [13] можно считать эмпирическое обнаружение математической упорядоченности в расположении энергетических уровней не только для водорода и водородоподобных атомов, но и для отдельных спектральных серий атомов более сложного строения, не подчиняющихся формуле (1). Как можно понять из работ Ф.М. Канарева, структура оптического спектра атомов определяется энергией ионизации атома и величиной энергии уровня, ближайшего к ионизационному уровню. Энергия других уровней определяется дробно-целочисленным распределением соотношения этих двух энергий обратно пропорционально второй степени номеров энергетических уровней.

Применительно к нашей частотной модели это будет аналогичное дробно-целочисленное уменьшение частот на электронном и фотонном уровнях, при целочисленном соотношении частот на внутриатомном дебройлевском уровне. В большинстве спектральных линий соблюдается следующее (или близкое к нему) соотношение электронных частот двух соседних уровней, создающих биения оптического спектра:

$$\omega_{en} = \frac{n^2}{(n+1)^2} \omega_{e(n+1)}, \quad (15)$$

где: ω_{en} частота произвольного n – го уровня; $\omega_{e(n+1)}$ – частота последующего энергетического уровня. Аналогичным соотношением связаны и значения энергии соседних уровней.

При $n = 1$ (s - оболочка) частота ω_{e1} будет соответствовать энергии ионизации внешнего электрона в пересчете формулой (1) $\omega_{e1} = \omega_i$, а частота $\omega_{e(n+1)}$ будет соответствовать действительной энергии (обозначение в таблицах $E_{\text{действ.}}$) второго энергетического уровня.

Если из приводимых таблиц для атома водорода взять уменьшающийся по величине ряд энергий, соответствующих увеличивающемуся ряду номеров энергетических уровней, то можно обнаружить простую числовую закономерность в последовательности их значений, а также величин межуровневых интервалов энергии и, соответственно, интервалов частот, создающих биения. Расчеты приведены в таблице 1. Конкретные значения энергии для атома водорода приведены в нижней части таблицы 1.

Таблица 1. Формулы для расчета межуровневых энергетических и частотных интервалов

$\otimes \cdot 4 \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{9} \right) = \otimes \cdot 4 \frac{3^2 - 2^2}{3^2 \cdot 2^2} = \otimes \cdot 4 \frac{5}{36} = \otimes \cdot \frac{20}{36}$ $\otimes \cdot 4 \left(\frac{1}{9} - \frac{1}{16} \right) = \otimes \cdot 4 \frac{4^2 - 3^2}{4^2 \cdot 3^2} = \otimes \cdot 4 \frac{7}{144} = \otimes \cdot \frac{28}{144}$ $\otimes \cdot 4 \left(\frac{1}{16} - \frac{4}{25} \right) = \otimes \cdot 4 \frac{5^2 - 4^2}{5^2 \cdot 4^2} = \otimes \cdot 4 \frac{9}{400} = \otimes \cdot \frac{36}{400}$ $\otimes \cdot 4 \left(\frac{1}{25} - \frac{1}{36} \right) = \otimes \cdot 4 \frac{6^2 - 5^2}{6^2 \cdot 5^2} = \otimes \cdot 4 \frac{11}{900} = \otimes \cdot \frac{44}{900}$ $\otimes \cdot 4 \left(\frac{1}{36} - \frac{1}{49} \right) = \otimes \cdot 4 \frac{7^2 - 6^2}{7^2 \cdot 6^2} = \otimes \cdot 4 \frac{13}{1764} = \otimes \cdot \frac{52}{1764}$ <p style="text-align: center;">.....</p>					
13,598 = $E_1 = E_i$	3,3988 = $E_2 =$ = $\frac{E_1}{4}$	1,5106 = $E_3 =$ = $\frac{E_1}{9} = E_2 \cdot \frac{4}{9}$	0,8497 = $E_4 =$ = $\frac{E_1}{16} = E_3 \cdot \frac{9}{16}$	0,5438 = $E_2 =$ = $\frac{E_1}{25} = E_4 \cdot \frac{16}{25}$	0,3776 = ...
10,1964 эВ	1,8882 эВ	0,6609 эВ	0,3059 эВ	0,1662 эВ	
$\Delta E_{1-2} = E_i \cdot \frac{3}{4}$	$\Delta E_{2-3} = E_i \cdot \frac{5}{36}$	$\Delta E_{3-4} = E_i \cdot \frac{7}{144}$	$\Delta E_{4-5} = E_i \cdot \frac{9}{400}$	$\Delta E_{5-6} = E_i \cdot \frac{11}{900}$	

В верхней части таблицы приведены общие формулы, где значком \otimes обозначено значение энергии или частоты, соответствующие второму энергетическому уровню. Почему именно второму будет ясно из дальнейшего изложения. Такая форма записи позволяет уяснить общность формул, определяющих спектр и более сложных атомов.

Данные таблицы 1 показывают, что зная энергию ионизации и интервал между двумя соседними (не соседними тоже) энергетическими уровнями можно легко определить значения энергетических уровней и интервалы между ними для любых других уровней. Примечательно, что приводимые формулы оказываются пригодными для расчета отдельных серий оптических спектров других атомов с несравненно более сложными диаграммами.

Отметим, что для расчета структуры оптических спектров атомов, следующих за водородом, приходится брать частоты (и энергии) электронных уровней, по значению меньшие, чем соответствующие энергии ионизации и с некоторыми поправками. Рассмотрим это положение на конкретных примерах.

На рис. 7 приведена диаграмма Гротриана для атома гелия. Укажем основные отличия этой диаграммы от диаграммы атома водорода. Подобные отличия присущи и более сложным атомам. Основные отличия состоят в следующем.

Между первым (ионизационным) энергетическим уровнем и вторым, ближайшим к первому, имеется значительный разрыв, не позволяющий первый уровень брать базовым для расчетов энергии других уровней и межуровневых интервалов по формулам таблицы 1.

В каждом столбце энергетических уровней, которые предположительно можно отнести к отдельным электронным оболочкам, начиная со второго энергетического уровня, имеет место сдвиг. Этот сдвиг тем меньше, чем больше порядковый номер энергетического уровня. По рис. 7 видно, что пропорциональной деформации (очевидно, растяжению) в разных электронных оболочках оказываются подвержены все интервалы между соседними энергетическими уровнями. Можно заметить, что деформация интервала между первым и вторым энергетическими уровнями максимальная. Возможно, это происходит за счет смещения энергетической (частотной) линии первого уровня, который может быть разным для различных оболочек, что на диаграммах Гротриана не показывается.

Заметим, что в диаграмме спектральных линий водорода, которую следует считать идеальной, все интервалы между энергетическими уровнями (включая самый большой первый интервал) строго закономерно пропорциональны. То есть, там деформаций в столбцах энергетических уровней (в отдельных оболочках) нет, а первый уровень можно считать общим для всех столбцов (оболочек).

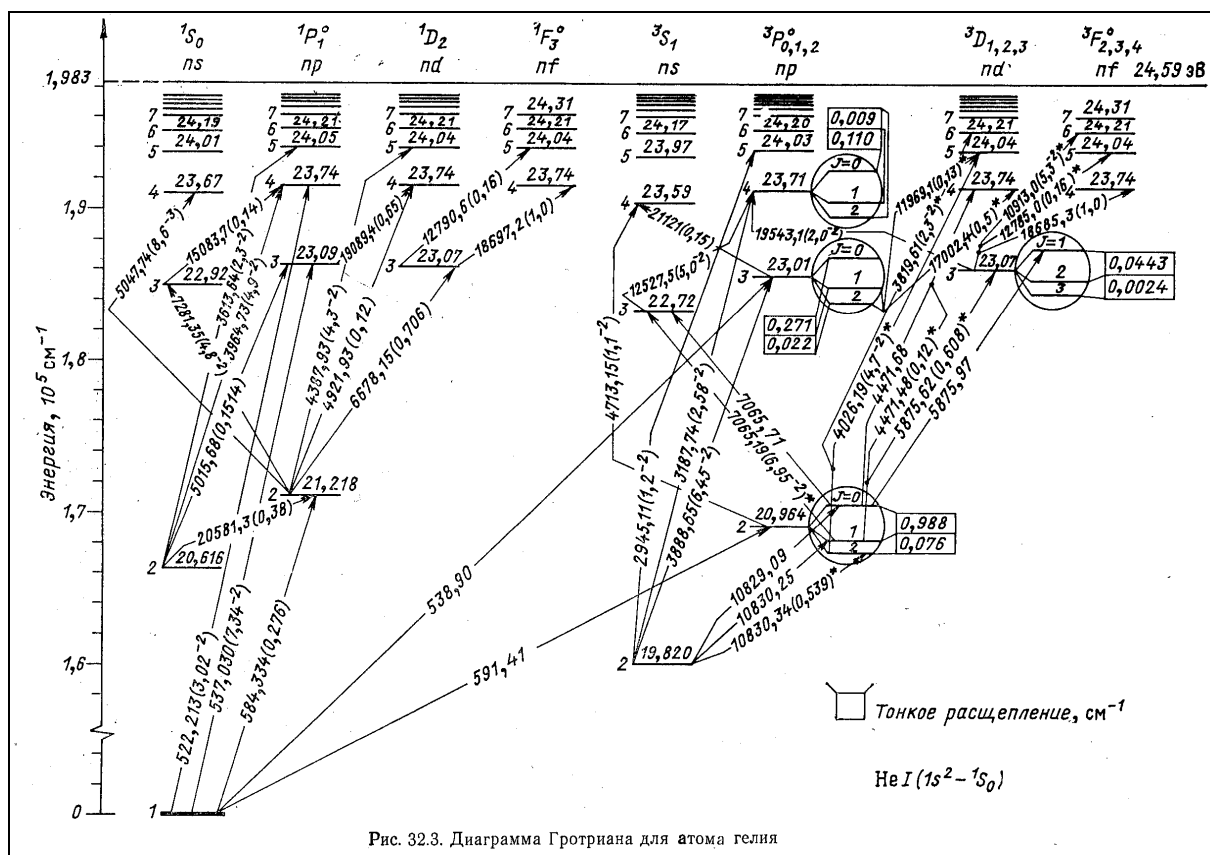


Рис.7. Диаграмма для атома гелия.

Данное обстоятельство, а также характер расположения на рис. 7 спектральных переходов позволяют выдвинуть два предположения. Первое предположение, естественно формируемое изображением рис. 7 и уже используемое нами выше, это очевидная принадлежность каждого вертикального столбца значений энергии (по Гротриану, «энергетической лестницы») одной общей для них электронной оболочке атома. Главный довод в пользу данного предположения - упорядоченность значений энергии и пропорциональность сдвигов энергетических уровней в каждом отдельном столбце энергий. В этом случае каждая электронная оболочка представляется целостным образованием, первичным относительно входящих в нее энергетических уровней (частот). Наблюдаемые сдвиги энергетических уровней строго пропорциональны внутри каждой оболочки. Наибольший сдвиг имеет место для второго энергетического уровня, а для других уровней этот сдвиг закономерно уменьшается.

По рис.7 можно заметить, что во всех, кроме одной, электронных оболочках нижние (по номеру) энергетические уровни (максимальные частоты) отсутствуют. Правда, с частотных позиций, принадлежность первого энергетического уровня именно оболочке ns^1S_0 , выглядит не столь явно и однозначно. Но этот факт оставим на совести спектроскопистов и составителей диаграммы рис. 7.

Второе предположение вытекает из первого и касается места расположения оболочек. Принимая за истину вертикально - кластерное строение энергетических уровней внешней электронной оболочки атома, мы должны признать эту оболочку многолепестковой (другой вариант, многослойной), состоящей из нескольких оболочек, или признать принадлежность каждой из оболочек разным атомам. В том и другом случаях механизм формирования оптического спектра видится как биения частот электронных колебаний, принадлежащих разным электронным оболочкам. В пределах одной оболочки такие переходы не происходят. (Если приписать принадлежность первого энергетического уровня оболочке $np^1P_1^o$, а для этого, как мы увидим далее, есть предпосылки, то последний вывод не верен).

Диаграмма для атома гелия, идентичная рис. 7, но с действительными значениями энергетических уровней и соответствующих частот, приведена на рис. 8.

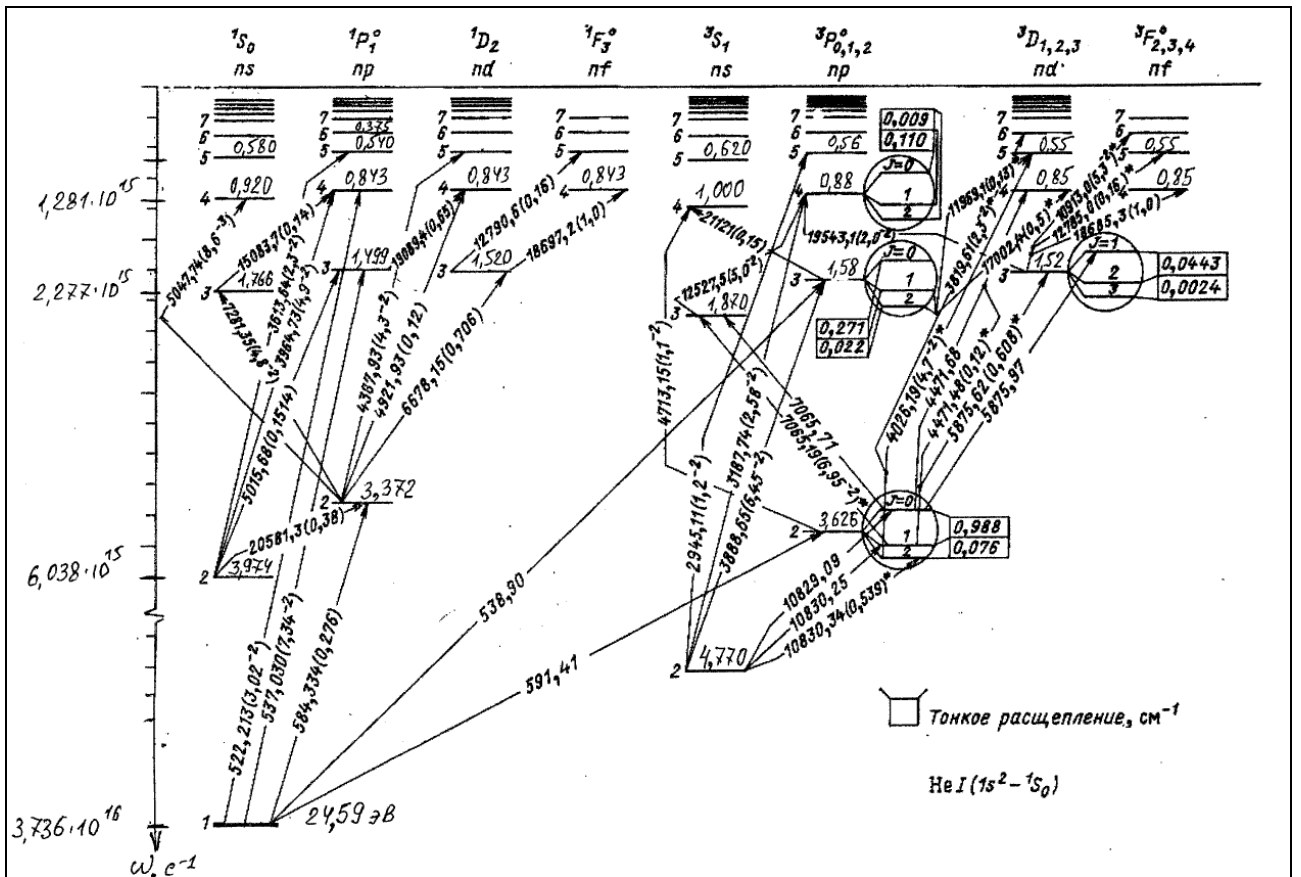


Рис. 8. Диаграмма для атома гелия в частотном представлении с показом действительных значений энергетических уровней.

Энергетические кластеры рис. 8, в которых отсутствуют нижние энергетические уровни, можно объяснить относительно слабыми внешними воздействиями на атом. А единый для всех переходов (биений частот) первый энергетический уровень можно объяснить предельно сильным внешним воздействием, при котором из атома «вылетает» свободный электрон (эффект ионизации атома).

Расчетные данные для атома гелия приведены в таблице рис. 9. Полученное совпадение расчетных и справочных данных, можно сказать, великолепное. Такая точность недостижима в квантовой механике с использованием уравнения Шредингера, которое не позволяет рассчитывать спектры атомов сложнее водородоподобных [7].

C15		fx		=E14*9									
	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	
1			1883651567		1,60E-19			1,05E-34					
2													
3		Гелий	24,59										
4			1	2	3	4	5	6	7	8		совпадение	
5	$np^1P_1^o$	Е*справ, эВ	0	21,218	23,09	23,74	24,05	24,21					
6		Едейств, эВ	24,59	3,372	1,500	0,850	0,540	0,380			C3-XN		
7		Ерасч1, эВ	13,488	3,372	1,499	0,844	0,544	0,375	0,279		$X6*(N-1)^2/N^2$	Отличное	
8		Ерасч2, эВ		3,372	1,499	0,843	0,540	0,375	0,275	0,211	$X8*(N-1)^2/N^2$	Отличное	
9	$np^3P_{0,1,3}$	Е*справ, эВ		20,964	23,01	23,71	24,03	24,2					
10		Едейств, эВ		3,626	1,58	0,88	0,56	0,39			C3-XN		
11		Ерасч1, эВ	14,504	3,626	1,612	0,889	0,563	0,389	0,287		$X10*(N-1)^2/N^2$	Отличное	
12		Ерасч2, эВ		3,626	1,612	0,907	0,580	0,403	0,296	0,227	$X12*(N-1)^2/N^2$	Хорошее	
13	ns^1S_0	Е*справ, эВ	0	20,616	22,92	23,67	24,01	24,19					
14		Едейств, эВ		3,974	1,670	0,920	0,580	0,400			C3-XN		
15		Ерасч1, эВ	15,03	3,758	1,766	0,939	0,589	0,403	0,294		$X14*(N-1)^2/N^2$	Хорошее	
16		Ерасч2, эВ		3,758	1,670	0,939	0,601	0,417	0,307	0,235	$X16*(N-1)^2/N^2$	Хорошее	
17	ns^3S_1	Е*справ, эВ	0	19,82	22,72	23,59	23,97	24,17					
18		Едейств, эВ		4,770	1,870	1,000	0,620	0,420			C3-XN		
19		Ерасч1, эВ	16,83	4,208	2,120	1,052	0,640	0,431	0,309		$X18*(N-1)^2/N^2$	Хорошее	
20		Ерасч2, эВ		4,208	1,870	1,052	0,673	0,468	0,343	0,263	$X20*(N-1)^2/N^2$	Удовл.	
21	nd^1D_2	Е*справ, эВ	0		23,07	23,74	24,04	24,21					
22	$nd^3D_{1,2,3}$	Едейств, эВ			1,520	0,850	0,550	0,380			C3-XN		
23		Ерасч1, эВ	13,68		1,520	0,855	0,544	0,382	0,279		$X22*(N-1)^2/N^2$	Отличное	
24		Ерасч2, эВ			1,520	0,855	0,547	0,380	0,279	0,214	$X24*(N-1)^2/N^2$	Отличное	
25	$nf^1F_3^o$	Е*справ, эВ	0			23,74	24,04	24,21	24,31				
26	$nf^3F_{2,3,4}^o$	Едейств, эВ				0,850	0,550	0,380	0,280		C3-XN		
27		Ерасч1, эВ	13,6			0,850	0,544	0,382	0,279		$X22*(N-1)^2/N^2$	Отличное	
28		Ерасч2, эВ				0,850	0,544	0,378	0,278		$X24*(N-1)^2/N^2$	Отличное	
29													
30	δE, эВ	серия $1s^1S_0 - np^1P_1^o$		21,2180	23,0913	23,7463	24,0460	24,2150	24,3108		(C3-X7)		
31	Δω, с ⁻¹			3,22E+16	3,51E+16	3,61E+16	3,65E+16	3,68E+16	3,69E+16		$X30*E1/H1$		
32	λ изл, А°			584,335	536,930	522,121	515,613	512,014	509,996		$(C1/X31)*10^{\wedge}10$	отличное	
33													
34	δE, эВ	серия $2p^1P_1^o - nd^1D_2$			1,8520	2,5220	2,8220	2,9920			(D7-X22)		
35	Δω, с ⁻¹				2,81E+15	3,83E+15	4,29E+15	4,55E+15			$X34*E1/H1$		
36	λ изл, А°				6694,611	4916,106	4393,487	4143,857			$(C1/X35)*10^{\wedge}10$	хорошее	
37													
38	δE, эВ	серия $3d^1D_2 - nf^1F_3^o$				0,6700	0,9700	1,1400	1,2400		(E22-X26)		
39	Δω, с ⁻¹					1,02E+15	1,47E+15	1,73E+15	1,88E+15		$X38*E1/H1$		
40	λ изл, А°					18505,103	12781,875	10875,806	9998,725		$(C1/X39)*10^{\wedge}10$	хорошее	

Рис. 9. Таблица Excel по расчету трех спектральных серий для атома гелия.

В таблице рис.9 приведены данные по спектральным переходам соответствующим трем электронным оболочкам, одна из которых с обозначением $np^1P_1^o$ на рис. 7 характерна наиболее точным совпадением расчетных теоретических и справочных экспериментальных данных. По-видимому, сдвиги энергетических уровней в этой оболочке минимальны или вообще нулевые. Последнее служит основанием считать обозначенный на рис.9 первый энергетический уровень принадлежащим оболочке $np^1P_1^o$. Тогда первый энергетический уровень двух s – оболочек, вероятнее всего, имеет значение больше 24,59 эВ, что и служит причиной сравнительно больших сдвигов энергетических уровней этих оболочек.

В колонке «С» таблицы рис. 9 помещены гипотетические данные по энергии связи электрона первого энергетического уровня. Расчет проведен по методике работы [13]. Однако насчет необходимости и полезности этих данных у автора есть большие сомнения. Ввиду

упорядоченности расположения энергетических уровней (частот) каждой оболочки базовым для расчетов можно принять любой уровень, кроме уровня, обозначенного на рис. 8 первым.

Как видно из приводимых таблиц, идеальное совпадение расчетных и экспериментальных данных наблюдается не для всех электронных оболочек. S – оболочки характеризуются наибольшим сдвигом энергетических уровней и меньшей точностью совпадения расчетных и экспериментальных данных. Для этих оболочек расчет проводился исходя из значения данных третьего энергетического уровня, влияние сдвига которого заметно меньшее.

Подобное наблюдается и в диаграммах оптических спектров других более сложных атомов. Наблюдаемые отклонения в расчетных данных по разным оптическим сериям (сдвиг энергетических линий) нуждаются в поиске адекватного математического описания и физического объяснения.

К сожалению, формула Блохинцева [14, стр.31], определяющая частотный сдвиг энергетических уровней позволяет рассчитать только среднюю величину сдвига для энергетических уровней, без дифференциации сдвига по отдельным электронным оболочкам, как мы их здесь представляем. Формула Блохинцева достаточно сложная, хотя логарифмическая закономерность в частотных сдвигах энергетических уровней одной и той же электронной оболочки, судя по всему, правильно отражает реальность:

$$\delta\omega_0 = k \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right)^3 \frac{Z^4}{n^3} R \lg \left(\frac{mc^2}{\Delta E_{cp}} \right). \quad (16)$$

По мнению автора, частотный метод позволит найти более простые зависимости, описывающие рассматриваемые особенности оптических спектров атомов. Ориентировкой поисков в этом направлении может служить формула, описывающая частотные термы щелочных металлов [15, стр. 264]:

$$T(n) = \frac{R}{(n + \alpha)^2 + \frac{\beta}{n^2}}. \quad (17)$$

Здесь n – целое число, α - поправка, представляющая правильную дробь, а β – вторая поправка, причем $\beta \ll \alpha$. В пределах серии α и β имеют постоянное значение. В работе [2] приводится близкая по написанию к (17), но несколько иная формула:

$$T(n) = \frac{R}{\left(n + \alpha + \frac{\beta}{n^2} \right)^2}. \quad (18)$$

В учебнике [16, стр.102] для термов щелочных металлов приводится более простая формула:

$$T(n) = \frac{R}{(n + \alpha)^2}. \quad (19)$$

Приводимые значения α для натрия, применительно к формуле (19), таковы:

$$s = -1,35; p = -0,87; d = -0,01; f = 0,00.$$

Проверка этих поправок для диаграммы натрия в частотном представлении показала хорошую сходимость расчетных результатов с экспериментальными данными. Однако физический смысл этих поправок остается не ясным. Можно предположить, что оболочки, в которых в диаграммах Гротриана имеются нижние энергетические уровни и которые характерны увеличенными межэнергетическими интервалами, соответствуют внешним возмущениям, затрагивающим глубинные электронные оболочки или ядро атома. Подтверждение верности данного предположения можно найти на диаграммах Гротриана для атомов других элементов, которые здесь не рассматриваются.

В подтверждение целесообразности использования частотных, а не энергетических или длин-волновых параметров, в которых описывается структура электронных оболочек атомов, можно привести и то, что современные методы частотного анализа оказываются намного точнее традиционных спектральных методов [17].

ВОЗМОЖНЫЕ НОВЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ О СТРОЕНИИ АТОМОВ

Трехуровневое частотное представление энергетических уровней и электронных переходов, изображаемых на диаграммах Гротриана, а также кластерное оболочечное представление энергетических уровней позволяют по-новому взглянуть на структуру оптических спектров и строение самих атомов. Закономерные частотные и амплитудные соотношения в оптических спектрах атомов, а также частотная упорядоченность колебаний на внутриатомном уровне формируют новое представление об атоме как целостном частотном «оркестре» или естественной «частотной гребёнке» [18], детальное изучение которых еще впереди. Из этих представлений вытекает оболочечная или пузыреподобная модель внешнего строения атома, давно используемая в химических представлениях о строении атомов и молекул. Внешние электроны модельно представимы вихревыми образованиями на пузыреподобной оболочке (рис.10). Направление вращения этих вихревых структур может характеризовать спин электрона, а частоты вращения – энергетические уровни.

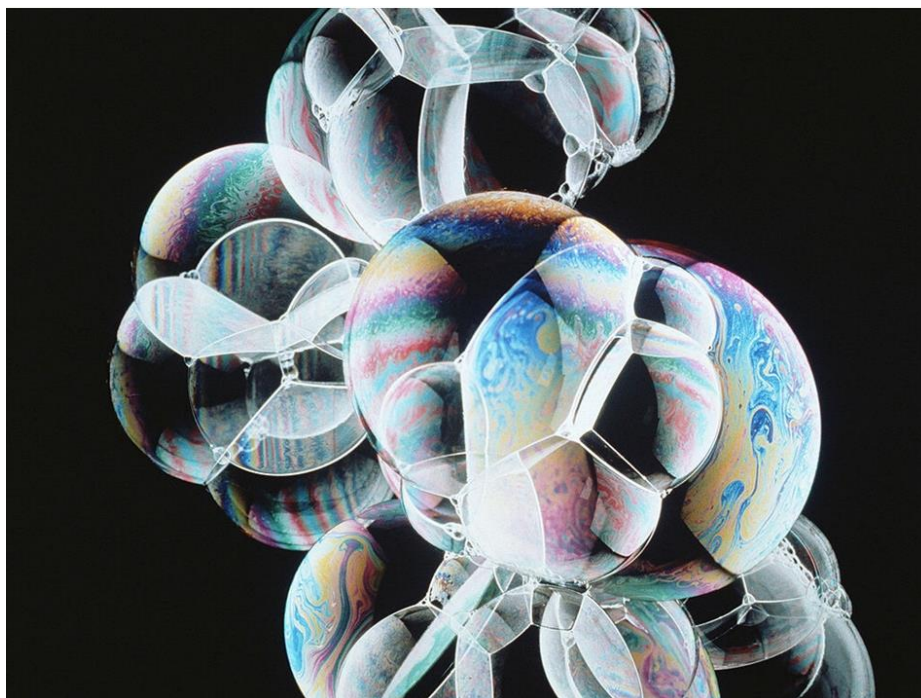


Рис. 10. Пузыри как наглядная модель строения атомов и молекул.

В такой наглядной модели получают естественное физическое объяснение ориентации и квантование механического и магнитного моментов электронной оболочки атома во внешнем магнитном поле, становится понятен принцип строения многоатомных систем (молекул).

По мнению автора, в исторической перспективе неизбежен уход от модели атома, в виде сферы наполненной электронами, движущимися по своим орбитам, в том числе и вероятностной модели с «электронными облаками», где ядро атома обязательно мыслится в центре конструкции. В предстоящей смене парадигм частотная пузыреподобная модель атома ввиду ее простоты и природной естественности вполне может приобрести лидирующие позиции.

В настоящей работе получено хорошее совпадение теоретических и экспериментальных (справочных) данных в описании структуры оптического спектра простейших атомов. Однако используемые соотношения не дают одинаковой точности совпадения данных по всем сериям оптического спектра. Поиск причин такого положения требует проведения дальнейших поисковых исследований. На успешность таких поисков позволяет надеяться наблюдаемая на диаграммах Гротриана симметрия в деформациях интервалов между энергетическими уровнями одной и той же оболочки («энергетической лестницы») и закономерности межоболочечных «электронных переходов» (частотных биений).

Трехуровневая схема образования излучаемых (и поглощаемых) атомами фотонных частот имеет логическое и математическое обоснования. Наиболее соответствующие этой

схеме модельные представления атома - это оболочечная плазменная [18] или пузыреподобная [7] модель, возможно, многолепестковая (или многослойная) по образу давно используемых в химии атомных и молекулярных орбиталей, где различают разрыхляющие и связывающие области (σ -, π -, и δ -связи). Известна оригинальная идея о возможном формировании оптического спектра не отдельными атомами, а их пространственно упорядоченной совокупностью («сави») [19].

В частотной оболочечной модели атома внутриатомные электроны - это специфические (возможно, простейшие механические) колебания или местные вращательные движения (вихри) оболочки, а свободный электрон может быть представлен маленьким пузырьком или миниатюрной каплей, оторванной от электронной оболочки атома. Материал оболочки (конденсат «эфира») по величине не беспределен и, по идее, строго ограничен для каждого атома. В оболочечной модели атома с представлением внутриатомных электронов частотными колебаниями оболочки сравнительно просто получают объяснение явления, связанные с электризацией тел при трении, пьезо- и термоэлектрические явления.

Ядро атома в такой оболочечной модели трудно представимо как центрально расположенное. Скорее всего, ядро следует образно представлять как каплю «эфирной» жидкости, из которой как пузырь «выдувается» многолепестковая оболочка атома, имеющая способность пульсировать и колебаться как по форме, так и по толщине.

Надо отметить, что наши модельные представления о едином и неделимом атоме близки соответствующим представлениям Д.И. Менделеева, опубликованным им в работе [20]. В этой работе содержатся и другие важные мировоззренческие представления, которые в перспективе могут оказаться более верными, чем современные общепризнанные.

В заключение можно сформулировать следующие выводы:

1. Диаграммы Гротриана, используемые в спектроскопии, имеют инверсное изображение энергетических уровней, что затрудняет частотную идентификацию внутриатомных колебаний и понятие физического механизма, порождающего оптические спектры атомов.

2. Частотное и верное представление спектральных энергетических уровней на диаграммах Гротриана позволило обнаружить в атомах трехуровневую структуру частот, создающих оптические спектры. При этом целочисленные резонансные соотношения частот обнаруживаются на дебройлевском уровне, а оптические частоты представляются как частотные биения колебаний, присущих внешней электронной оболочке и связанных с дебройлевскими частотами квадратичной зависимостью.

3. Кластерное изображение спектральных уровней на диаграммах Гротриана дает основание видеть электронные оболочки атома как первичные и целостные образования, в которых электроны разных энергетических уровней представлены как резонансные (на де-

бройлевском уровне) колебания этих оболочек. Данное предположение подкреплено расчетными соотношениями, выполненными для простейших атомов.

3. Ряд высказанных в работе предположений о строении оптических спектров и самих атомов носят дискуссионный характер. Первичная публикация на эту тему была размещена в 2013 г. на ресурсе <http://science.snauka.ru/2013/09/5812>. Данный вариант отличается наличием некоторых дополнений и исправлений.

Список источников

1. Мартинсон Л.К., Смирнов Е.В. Квантовая физика: Учебное пособие. Изд-во МГТУ им Н.Э. Баумана, 2004. – 496 с.

2. Раутиан С.Г., Яценко А.С. Диаграммы Гротриана. // УФН. Том 169. №2. Электронный вариант, режим доступа:

http://www.ebiblioteka.lt/resursai/Uzsienio%20leidiniai/Uspechi_Fiz_Nauk/1999/02/r992f.pdf,

(дата обращения – 29.08.2013 г.).

3. Крауфорд Ф. Волны: Учебное руководство: Пер. с англ. / Под ред. А.И. Шальникова и А.О. Вайсенберга. – 3-е изд. испр. - М.: Наука. 1984. – (Берклевский курс физики). – 512с.

4. Верин О.Г. Физические основы строения атома.

<http://www.sciteclibrary.ru/rus/catalog/pages/14155.html> (дата обращения - 09.05.2017 г.).

5. Верин О.Г. Гармоническое единство спектра атома.

<http://www.sciteclibrary.ru/rus/catalog/pages/14412.html> (дата обращения - 09.05.2017 г.).

6. Керн Йохан. Причинно-следственное токование спектра изучения газов.

<http://www.sciteclibrary.ru/rus/catalog/pages/7383.html>, (дата обращения - 14.07.2013 г.).

7. Чуев А.С. Модель атома с пузыреподобной электронной оболочкой. / Материалы 5-й Всероссийской конференции «Необратимые процессы в природе и технике». 26-28 января 2009 г. В 3-х частях. Часть III. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Москва. 2009. Стр. 138-141.

8. Поведение жидкости в условиях невесомости. Видео:

<https://www.youtube.com/watch?v=4PXkM8P3DHg>. (дата обращения - 09.05.2017 г.).

9. Динамическая таблица Менделеева. <http://www.ptable.com/> (дата обращения - 09.05.2017 г.)

10. Басина Г.И., Басин М.А. Синергетика. Вселенная резонансов. – СПб.: 140 с. Электронный вариант. <http://www.sciteclibrary.ru/texts/rus/stat/st4595.pdf>, (дата обращения - 29.07.2013 г.).

11. Физические величины: Справочник / А.П. Бабичев, Н.А. Бабушкина, А.М. Братковский и др.; Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Михайлова. – М., Энергоатомиздат, 1991. – 1232 с.
12. Информационная система НГУ «Электронная структура атомов». Режим доступа: <http://grotrian.nsu.ru/ru/diagramm/10425>, (дата обращения - 29.08.2013 г.).
13. Канарёв Ф.М. Начала физхимии микромира. Монография микромира. Изд. 16-е. 2012 г. – 390 с. Режим доступа: <http://www.micro-world.su/index.php/2010-12-22-11-45-21/663-2012-08-19-17-07-36>, (дата обращения - 14.07.2013 г.).
14. Куземский А.Л. Работы Д.И. Блохинцева и развитие квантовой физики. // Физика элементарных частиц и атомного ядра. 2008. Том 39. Вып. 1. Электронная версия. Режим доступа: http://wwwinfo.jinr.ru/publish/Pepan/2008-v39/v-39-1/00_kuz.pdf, (дата обращения - 15.08.2013 г.).
15. Корсунский М.И. Оптика. Строение атома. Атомное ядро. Изд. 2-е испр. и дополн. М.: Наука. 1964. 527 с.
16. Савельев И.В. Курс общей физики. Учеб. Пособие. В 3-х т. Т. 3. Квантовая оптика. Атомная физика. Физика твердого тела. Физика атомного ядра. – 3-е изд. испр. – М.: Наука, 1987. – 320 с.
17. Хэнш Т.В. Страсть к точности. (Нобелевская лекция). УФН. Том 178. №12. Электронный вариант. Режим доступа: http://ufn.ru/ufn06/ufn06_12/Russian/nob0612.pdf, (дата обращения - 29.07.2013 г.).
18. Киржниц Д.А., Лозовик Ю.Е.. Плазменные колебания электронной оболочки атома. УФН. Том 89, вып.1. 1966 г. Май. Стр. 39-47.
19. Керн Йохан. Причинно-следственное токование спектра изучения газов. Режим доступа: <http://www.sciteclibrary.ru/rus/catalog/pages/7383.html>, (дата обращения - 14.07.2013).
20. Менделеев Д. И. Попытка химического понимания мирового эфира. СПб., 1905 г. – 40 с. Режим доступа: <http://pulse.webservis.ru/Science/Mend/mend.html>, (дата обращения - 14.07.2013 г.).