



Výfučení: Bohrův model atomu

V historii se představa člověka o tom, jak vypadá hmota a posléze atom, měnila. Proto se v tomto Výfučení seznámíme s jedním z historických modelů, který významně změnil pohled na celý mikrosvět.

Předchůdce

Bohrův model se opírá o Rutherfordův model atomu a snaží se vyřešit problémy, kvůli kterým nemohl být pravdivý.

Rutherfordův model se také nazývá planetárním, protože připomíná sluneční soustavu. Ve středu se nachází malé, hmotné, kladně nabitě jádro. Okolo něj obíhají záporně nabitě elektrony ve velkých vzdálenostech vzhledem k rozměrům jádra. Hmotnosti elektronů a jádra jsou však velmi malé, proto je gravitační síla mezi nimi zanedbatelná. Na rozdíl od sluneční soustavy jsou tedy elektrony drženy elektrostatickou silou, pro jejíž velikost platí

$$F_e = \frac{Q_1 Q_2}{4\pi\epsilon_0 r^2},$$

kde Q_1 a Q_2 jsou náboje jádra a obíhajícího elektronu, r je vzdálenost mezi nimi a ϵ_0 konstanta nazývaná *permitivita vakua*. Tato přitažlivá síla pak v planetárním modelu vyrovnává odstředivou sílu

$$F_o = \frac{mv^2}{r},$$

a elektrony tedy mohou obíhat po stabilní orbitě, aniž by spadly do jádra nebo odletěly pryč. Problém tohoto modelu spočívá v tom, že při zrychleném pohybu elektronu (při pohybu po kružnici se částice pohybuje s dostředivým zrychlením) vzniká elektromagnetické záření. Tohoto jevu se využívá například v rentgenkách. Vzniklé záření však způsobuje ztrátu energie elektronu, který by tedy postupně zpomalil a spadl do jádra. Teoretický čas tohoto pádu je nesmírně malý – mnohem menší než jedna vteřina, ale my v našem okolí vidíme, že elektrony do jádra nepadají. To je důvod, proč byl potřeba nový model.

I když tento model neodpovídá úplně skutečnosti, není zbytečný. Lze z něj například odvodit, že atomy jsou podobné malým magnetům. Elektron obíhající kolem jádra totiž můžeme chápat jako proudovou smyčku (v důsledku záporného náboje elektronu proud teče v opačném směru, než obíhá elektron). Tento proud poté podle Ampérova pravidla pravé ruky bude vytvářet magnetické pole. Takto bude tvořit magnetické pole každý elektron v atomu.

Bohrův model

Bohrův model funguje na podobném principu jako Rutherfordův, ale s tím, že zavádí dodatečné podmínky, kterými se pokouší vyřešit zmíněné problémy Rutherfordova modelu. Začneme však tím, co zůstává: kladně nabitě jádro, ve kterém je téměř všechna hmotnost, a záporně nabitě lehčí elektrony. I v tomto modelu obíhají elektrony kolem jádra, ale tentokrát se mohou vyskytovat jen v určitých vzdálenostech od jádra.

V těchto „vybraných“ vzdálenostech pak elektrony, na rozdíl od ostatních vzdáleností, elektromagnetické záření nevyzařují. Na každé z těchto vzdáleností má tedy elektron určitou energii, proto se často mluví o energetických hladinách. Jediný okamžik, kdy budou elektrony v Bohrově modelu vyzařovat, bude při přechodu z vyšší na nižší energetickou hladinu. V takovém případě vyzáří právě množství energie odpovídající rozdílu energií jednotlivých hladin. Toto množství neboli *kvantum* elektromagnetické energie je vyzářeno dohromady v jednom *balíku* a nazývá se *foton*. Pro obrácený přechod musíme elektronu energii dodat. Elektron tedy musí naopak pohltit foton s velmi podobnou energií, jako je rozdíl energetických hladin. Na těchto základech vznikl Bohrův model.

Kvanta

Zmínili jsme některé nové předpoklady, ze kterých Bohrův model vychází. Tyto předpoklady nebyly zvoleny náhodně, ale vychází přímo z experimentálních dat. Bylo totiž změřeno, že atomy mohou absorbovat a vyzářit pouze světlo konkrétních vlnových délek. (Vlnová délka světla zároveň určuje i jeho energii.) Niels Bohr si uvědomil, že se těmto požadavkům dá vyhovět, pokud povolíme elektronům nacházet se jen v konkrétních vzdálenostech s konkrétní energií.

Mechanické veličiny popisující elektrony v atomech (jako energie, rychlost atd.) již nemohou nabývat libovolných číselných hodnot, ale jen určitých, které se navíc často liší o nějaké celočíselné násobky. Říkáme, že veličiny nabývají pouze *diskrétních* hodnot neboli, že jsou *kvantované*.

Mezi některé další veličiny, které se kvantují, patří například tzv. *moment hybnosti*. To je veličina vyjadřující jakousi míru točivosti a oběhu elektronu a pro pohyb po kružnici ji můžeme spočítat jako součin vzdálenosti elektronu od jádra a jeho hybnosti

$$L = rp.$$

Pro moment hybnosti elektronu existuje charakteristický, elegantní vztah, jenž říká, že jeho velikost může nabývat pouze celočíselných násobků jedné fyzikální konstanty, jak uvidíme později. Ovšem i přesto, že s ním přišel sám Bohr, není úplně pravděpodobné, že by si jej on sám odvodil pouze teoreticky. Jednalo se spíše o intuitivní odhad doplněný empirickými zkušenostmi z pozorovaných dat. Nicméně my si dnes tento vztah odvodit můžeme díky objevům, které přišly pár let po představení Bohrova modelu.

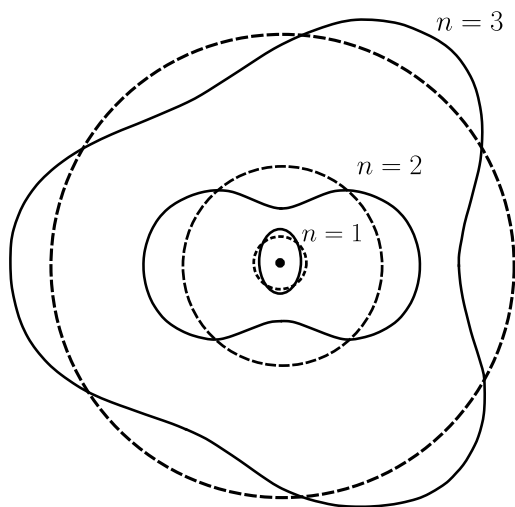
V roce 1924 francouzský fyzik Louis de Broglie napsal disertační práci, ve které vyslovil myšlenku, že se částice mohou šířit prostorem i jako vlny. Podobně jako mořské vlny šíří energii po hladině, mohou i elementární částice nést energii prostorem v podobě vlny. De Broglie se pak ve své práci zaměřil zejména na to, jakou vlnovou délku (vzdálenost mezi dvěma vrcholy vlny) by měly částice za tohoto předpokladu. Dopracoval se k výsledku, že pro vlnovou délku částice platí tento elegantní předpis

$$\lambda = \frac{h}{p},$$

kde p je hybnost částice a $h \doteq 6,626 \cdot 10^{-34}$ J·s je takzvaná *Planckova konstanta*, jedna ze základních konstant fyziky. Tento předpoklad je velmi mocný nástroj k popisování celého kvantového světa a skutečně se ukazuje, že platí. My si díky němu přesně popíšeme Bohrův model atomu.

Stabilní dráhy

Vyjdeme-li z Bohrovy myšlenky, že elektrony se pohybují po kružnici a zároveň vyhovíme de Broglieho hypotéze, zjistíme, že elektron bude tvořit vlnu obtočenou kolem jádra.



Obr. 1: Schéma jádra a prvních tří kružnicových drah elektronu (čárkovaně). Plnou čarou jsou zvýrazněny elektronové vlny.

Aby taková vlna šířící se kolem jádra mohla vůbec existovat a nerušila se sama se sebou, musí její konec navázat na začátek a uzavřít tak celou smyčku kolem jádra. Ve vzdálenostech, kde toto možné není, se elektron vyskytovat nemůže, jelikož vlna nebude plynulá. Matematicky tuto podmínku můžeme vyjádřit tímto způsobem

$$2\pi r = n\lambda,$$

kde r značí vzdálenost elektronu od jádra a n je nějaké přirozené číslo. Tato rovnice říká, že délka kružnicové trajektorie musí být rovna celočíselnému násobku vlnové délky. Jedině tak na sebe může vlna po jednom oběhu navázat. Pokud dosadíme za vlnovou délku de Broglieho vztah, můžeme rovnici dostat do zajímavé podoby.

$$rp = n \frac{h}{2\pi}.$$

Levá strana očividně odpovídá dříve zmíněnému momentu hybnosti elektronu. Tuto rovnici obvykle zapisujeme ve kratším tvaru

$$L = n\hbar,$$

kde \hbar je tzv. *redukováná Planckova konstanta* a je rovna $h/(2\pi)$. Dostali jsme nyní Bohrovu identitu, která nám říká, že moment hybnosti elektronu v atomu je roven celočíselnému násobku redukováné Planckovy konstanty. Moment hybnosti může nabývat jenom určitých hodnot! To je výsledek, který se přiči klasické fyzice, nicméně je to přesně to, co Bohrův model potřeboval.

Celočíselný koeficient n je v kvantové mechanice tak důležitý, že si vysloužil vlastní název: *hlavní kvantové číslo*. Dáme-li vypočtený kvantový moment hybnosti do rovnosti s klasickým, můžeme zjistit mnohé.

Energie

Podívejme se na to, jaké energie by tedy elektron mohl mít. Předpokládejme, že „vybraná dráha“ bude mít poloměr r . Elektrony se v tomto modelu pohybují po kružnicích se středem uprostřed jádra, proto se musí pohybovat rovnoměrným pohybem. Pro rovnoměrný pohyb po kružnici platí, že na elektron musí působit výše popsané dostředivé zrychlení, aby se udržel na kruhové trajektorii. Protože gravitační síla mezi elektronem a jádrem je zanedbatelně malá, lze uvažovat, že dostředivé zrychlení způsobí elektrická síla sama. Musí tedy platit rovnice $F_e/m = a_d$, kde po dosazení získáváme

$$\frac{e \cdot Ze}{4\pi\epsilon_0 r m} = v^2.$$

V rovnici byl zapsán náboj jádra jako počet protonů v jádře Z vynásobený elementárním nábojem. Jelikož již známe rychlost, lze jednoduše spočítat i kinetickou energii

$$E_k = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{Z e^2}{8\pi\epsilon_0 r}.$$

Ke kinetické energii je potřeba ještě přičíst potenciální energii. Pro potenciální energii nabitě částice Q_1 v radiálním elektrickém poli částice Q_2 platí

$$E = \frac{Q_1 Q_2}{4\pi\epsilon_0 r}.$$

V našem případě, tedy pro elektron, dostaneme

$$E_p = \frac{-Z e^2}{4\pi\epsilon_0 r}.$$

Po sečtení těchto dvou energií získáváme výslednou energii elektronu ve vzdálenosti r od středu atomu

$$E(r) = \frac{-Z e^2}{8\pi\epsilon_0 r}.$$

Za povšimnutí stojí, že výsledek je záporný a ve velmi velkých vzdálenostech v porovnání s rozměry atomů prakticky nulový ($1/x$ je pro velmi velké x rovno prakticky nule). To jsme přesně očekávali. Elektrony budou v atomech držet, jelikož se vždy snaží mít co nejmenší energii, která bude co nejbližší jádru, kde bude energie nejzápornější (a tedy nejmenší).

Můžeme si uvědomit, že nyní máme dvě podmínky pro rychlost elektronu na dané hladině. Jednu vyplývající ze vztahu pro moment hybnosti a také podmínku, ke které jsme dospěli při odvozování vztahu pro energii. Srovnáním těchto podmínek můžeme dospět ke vztahu pro vzdálenosti, v nichž elektron může obíhat. Využijme nejprve vztah pro moment hybnosti

$$L = mvr = n\hbar,$$

$$v = \frac{n\hbar}{mr}.$$

A nyní můžeme dosadit do uvedeného vztahu pro v^2 , čímž dostaneme podmínku pro poloměry, ve kterých mohou elektrony obíhat

$$\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 rm} = \frac{n^2 \hbar^2}{m^2 r^2},$$

$$r = \frac{4\pi\epsilon_0 \cdot n^2 \hbar^2}{mZe^2}.$$

Tuto vzdálenost pak ještě můžeme dosadit zpět do vzorce pro energii elektronu v určité vzdálenosti od jádra

$$E(n) = \frac{-mZ^2 e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 n^2 \hbar^2} = \frac{-mZ^2 e^4}{8\epsilon_0^2 n^2 \hbar^2}.$$

Takto spočítaná energie se nám bude dále hodit. Pro zjednodušení zavedme *Rydbergovu konstantu* $R_\infty = me^4/(8\epsilon_0^2 \hbar^2 \cdot hc)$. Vzorec pro energii tedy bude

$$E(n) = hcR_\infty \cdot \frac{-Z^2}{n^2}.$$

Spektra jsou úžasná!

Výše jsme zjistili, že elektrony mohou obíhat kolem jádra jen v určitých vzdálenostech. Zároveň platí, že mechanická energie elektronu závisí na vzdálenosti od jádra. Z tohoto jsme výše odvodili vztah pro energie a vidíme, že podle očekávání i energie elektronů může nabývat pouze určitých hodnot. Právě tento fakt má pravděpodobně největší vliv na moderní chemii. Díky Bohrově modelu elektron nemůže kontinuálně padat do jádra a vyzařovat energii, ale pořád mu nic nebrání ve spadnutí z jedné oběžné dráhy do nižší dráhy.

Při tomto přechodu se ale sníží energie elektronu, kam se tedy zbytek energie poděje? Ukazuje se, že vznikne právě jeden foton (balík světelné energie), jehož energie přesně odpovídá poklesu energie elektronu. Energie fotonu souvisí s jeho vlnovou délkou λ podle vztahu

$$E = \frac{hc}{\lambda}.$$

Tím, že energie má jen určité hodnoty, bude mít i vlnová délka emitovaného fotonu pro danou energii pouze jednu možnou vlnovou délku, která bude určena pouze tím, odkud a kam elektron přeskakuje.

Vyzářený foton o energii E tedy bude mít vlnovou délku

$$\lambda = \frac{hc}{E} = \frac{hc}{hcR_\infty \cdot \frac{-Z^2}{n_i^2} - hcR_\infty \cdot \frac{-Z^2}{n_j^2}} = \frac{1}{Z^2 R_\infty} \frac{n_i^2 n_j^2}{n_i^2 - n_j^2}.$$

Přičemž n_i je hlavní kvantové číslo, které má elektron před přechodem, a n_j po přechodu.

Podobně jako celý atom vyzařuje světlo, může ho atom také absorbovat, a to o úplně stejných vlnových délkách, jako vyzařuje. Na základě toho dokážou chemici pomocí ozařování zjistit, z čeho je zkoumaná látka složena. Obor, který takové metody využívá, se nazývá *spektroskopie* (na toto téma bylo sepsáno 3. Výfučtení minulého ročníku, doporučujeme si jej také přečíst).

A jak to bylo dál?

I tento model obsahuje nepřesnosti. Hlavní nepřesností je, že neuvažuje ovlivňování elektronů navzájem. Z tohoto důvodu je model vhodný hlavně pro vodík. Trochu nepřesněji, ale stále dobře, popisuje i atomy, které mají jeden valenční elektron. Dále tento model umožňuje pouze kruhové dráhy, přestože předchozí modely umožňovaly také jiné dráhy. Kvůli nutnosti předpovědět i jiné atomy, musely vzniknout další modely, které tento model silně ovlivnil.

Důležité je zmínit tzv. *Sommerfeldův* model, který udržuje stejnou myšlenku jako Bohrův, akorát připouští, že se elektron může pohybovat po elipsách (podobně jako planety kolem Slunce). I tento model se však ukázal jako neúplný, současného modelu atomového obalu se dosáhlo teprve roku 1925, kdy rakouský fyzik *Erwin Schrödinger* formuloval svou pohybovou rovnici částic. Podle ní pak navrhl model, podle něhož se elektrony mohou pohybovat všude kolem jádra, ale s různou pravděpodobností závisující na poloze. Zajímavé je, že tento model také říká, že elektron má pouze určité hladiny energie a že jsou shodné s těmi, které nám dává Bohrův model (alespoň pro atom vodíku). Tento paradox je charakteristický pro obor fyziky, a tak pomohl rozvinout Bohr společně se Schrödingerem *kvantovou mechaniku*.

Pavel Provazník

pavelp@vyfuk.mff.cuni.cz

Michal Stroff

stroffis@vyfuk.mff.cuni.cz

Korespondenční seminář Výfuk je organizován studenty a přáteli MFF UK. Je zastřešen Oddělením propagace a mediální komunikace MFF UK a podporován Katedrou didaktiky fyziky MFF UK, jejími zaměstnanci a Jednotou českých matematiků a fyziků. Realizace projektu byla podpořena Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy.

Toto dílo je šířeno pod licencí Creative Commons Attribution-Share Alike 3.0 Unported.
Pro zobrazení kopie této licence navštivte <https://creativecommons.org/licenses/by-sa/3.0/>.