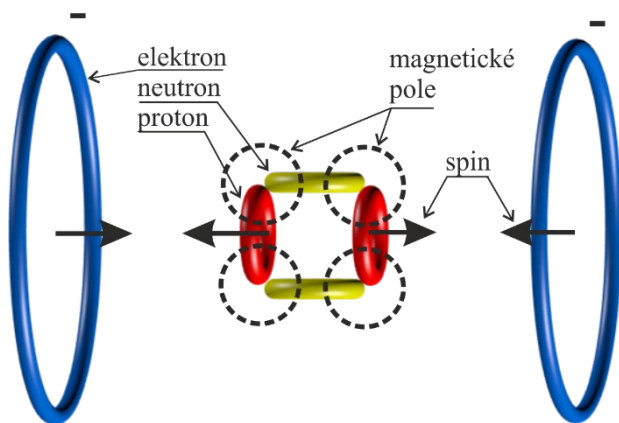


MODEL ATOMU HELIA PODLE RT

Pavel Werner

pwerner@volny.cz



Obr. 1. Navržený model a struktura uspořádání atomu He [1].

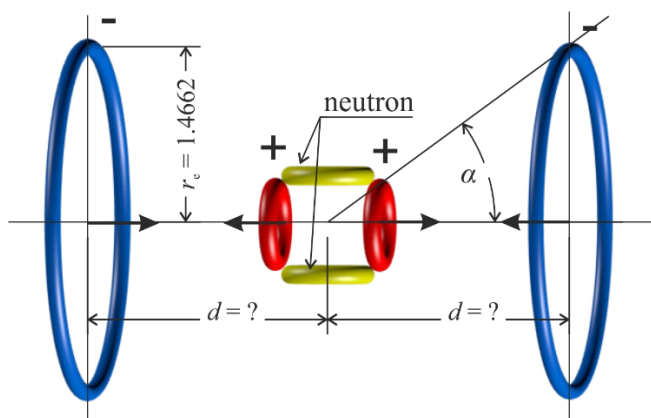
Při vyhodnocení a vyčíslení vzdálenosti pro dynamickou rovnováhu modelu atomu He pro elektrony modelované v atomu He, obr. 1, se vychází z parametrů – rozměrů modelovaných toroidů představující elektrony, které jsou určených z hodnoty termu

$$T_{He,I} = 50.4577 \cdot 10^{-9} m , \quad (1)$$

a ionizační energie

$$W_{iHe,I} = 24.587 eV , \quad (2)$$

uvedených v databázi atomových spekter NIST [2]. Můžeme předpokládat, že oba elektrony v modelu na základní energetické hladině mají shodnou topologii i energii, a jejich vzdálenosti od jádra modelu atomu helia jsou shodné, obr. 2.



Obr. 2. Navržený model, uspořádání prvků a hodnoty pro sestavení a provedení analýzy atomu He [1].

K výpočtu poloměru r_e základních rozměrů prvků v modelu elektronu atomu helia použijeme vztah, který je odvozený ze spektra atomu helia [1], [2]

$$r_e = \frac{T_{He,I} \cdot \alpha}{8\pi \cdot n} = \frac{50.4577 \cdot 10^{-9}}{8\pi \cdot 137} = 1.4662 \cdot 10^{-11} \text{ m} . \quad (3)$$

Dobu t_{e-f} , kterou foton potřebuje na předání své energie W_{ph-e} elektronu, je delší o hodnotu konstanty α než ten, za který urazí vzdálenost své vlnové délky λ_{ph} rychlostí světla

$$t_{e-ph} = \frac{T_{He,I}}{c \cdot \alpha} = \frac{50.4577 \cdot 10^{-9} \cdot 137}{3 \cdot 10^8} = 2.304235 \cdot 10^{-14} \text{ s} . \quad (4)$$

Elektrický proud tvořený elektronem i_e , který je možné interpretovat rotací elektrického náboje q_e po obvodu elektronu za jednu otáčku vyjádříme

$$i_e = \frac{dq_e}{dt_e} = \frac{1.602 \cdot 10^{-19}}{2.304235 \cdot 10^{-14}} = 6.9524 \cdot 10^{-6} \text{ A} . \quad (5)$$

Pro vyjádření přitažlivé elektrické síly v ose x, $F_{el,x}$, lze aplikovat Coulombův zákon

$$F_{el,x} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{q_e^2}{R^2} \cdot \cos \alpha . \quad (6)$$

Pro vyjádření magnetické síly $F_{mg,x}$ v ose x použijeme vztah pro uzavřený prstenec, kterým prochází elektrický proud i_e a v místě prstence svírá indukce magnetického pole s normálou úhel 2α ,

$$dF_p = i_e ds \cdot B_p , \quad (7)$$

kde B_p je hustota magnetického toku protonu v místě prstence elektronu. Po úpravě dostaneme vztah

$$F_{mg} = \frac{i_e \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot \sin 2\alpha}{4\pi \cdot R^3} . \quad (8)$$

Elektrický náboj i magnetické pole protonu a elektronu na sebe působí ve vzdálenosti přepony R

$$R = \sqrt{r_e^2 + d^2} . \quad (9)$$

Po dosazení výše uvedených hodnot do vztahů pro magnetickou a elektrickou sílu můžeme určit hodnotu d vzdálenosti elektronů na základní energetické úrovni od jádra atomu. Rovnovážný dynamický stav v uspořádání modelu nastaví typické vzdálenosti toroidálních prvků modelu (dynamický ustálený stav – levitační vzdálenost protonu a elektronu). Potom u modelu atomu helia na základní energetické úrovni je rovnováha mezi elektrickou a magnetickou silou dána

$$F_{el} = F_{mg} , \quad (10)$$

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{q_e^2}{R^2} \cdot \cos \alpha = \frac{i_e \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot \sin 2\alpha}{4\pi \cdot R^3} , \quad (11)$$

po dosazení vzdálenosti R z relace (9) je potom

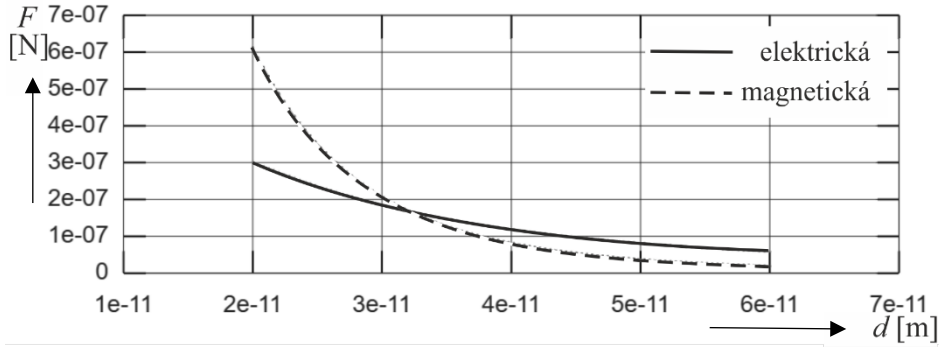
$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{q_e^2 \cdot d}{\sqrt{(r_e^2 + d^2)}^3} = \frac{i_e \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot 2 \cdot r_e \cdot d}{4\pi \cdot \sqrt{(r_e^2 + d^2)}^5} . \quad (12)$$

Z těchto vztahů se vyjádří levitační vzdálenost d_l :

$$d_l^2 = \frac{i_e \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot \epsilon_0 \cdot 2 \cdot r_e}{q_e^2} - r_e^2 , \quad (13)$$

$$d_l = \left(\frac{6.95224 \cdot 10^{-6} \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1.41 \cdot 10^{-26} \cdot 8.854 \cdot 10^{-12} \cdot 2 \cdot 1.4662 \cdot 10^{-11}}{(1.602 \cdot 10^{-19})^2} - (1.4662 \cdot 10^{-11})^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (14)$$

$$d_{l_{He,I}} = 3.215143 \cdot 10^{-11} \text{ m} . \quad (15)$$



Obr. 3. Grafická závislost složek sil (elektrické a magnetické) na základní úrovni modelu atomu helia.

Grafické zobrazení průběhu elektrické a magnetické síly v ose x v modelu atomu helia na základní energetické hladině v závislosti na vzájemné vzdálenosti, obr. 3, naznačuje v průsečíku obou sil na vzdálenost proton-elektron při dynamické rovnováze modelu.

U elektronů v modelu atomu helia na první základní energetické úrovni se vazební energie mezi jádrem a elektronem W_{n-e} rovná rozdílu mezi energií elektrického pole $W_{n-e,e}$ a magnetického pole $W_{n-e,m}$ mezi elektronem a protonem. Vazební energie nemá žádnou přímou souvislost mezi energií ionizační W_i nebo energií excitačních fotonů W_{ph} . Energie a struktura modelu excitačního fotonu způsobí změnu topologie struktury modelu elektronu, která má za následek změnu poloměru elektronu r_e , rychlosti pohybu elektrického náboje v_e a počet kmiten a tím i změnu elektrického proudu i_e . Důsledkem této změny je v modelu zvětšení magnetické odpudivé síly F_m a vzdálení se toroidu – modelu elektronu od jádra atomu do nové dynamické rovnovážné polohy (rovnováha mezi elektrickou a magnetickou silou)

$$W_i = W_{n-e,e} - W_{n-e,m} . \quad (16)$$

Vazební energii elektrického pole vypočítáme podle vztahu

$$W_{n-e,el} = \frac{2 \cdot q_e^2 \cdot |R|}{4\pi\epsilon_0 \cdot |R|^2}, \quad (17)$$

$$W_{n-e,el} = \frac{2 \cdot (1.602 \cdot 10^{-19})^2}{4\pi \cdot 8.859 \cdot 10^{-12} \cdot (3.21514 \cdot 10^{-11})} = 11.5808 \cdot 10^{-18} \text{ J} . \quad (18)$$

Vazební energii magnetického pole vypočítáme podle vztahu

$$W_{n-e,mag} = \frac{i_{el} \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot |R|}{4\pi \cdot |R|^3}, \quad (19)$$

$$W_{n-e,mag} = \frac{6.95224 \cdot 10^{-6} \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1.41 \cdot 10^{-26} \cdot 3.21514 \cdot 10^{-11}}{4\pi \cdot (3.21514 \cdot 10^{-11})^2} = 7.9018 \cdot 10^{-18} \text{ J} . \quad (20)$$

Výsledná vazební energie prvního elektronu modelu atomu helia podle (16) je

$$W_{n-e} = 11.5808 - 7.9018 = 3.679 \cdot 10^{-18} \text{ J} = 22.9606 \text{ eV} . \quad (21)$$

Energie W_{n-e} , výše uvedené hodnoty, charakterizující strukturu v modelu atomu helia, nelze získat z modelu atomu podle Bohra, ani snadno vyčíslit pomocí modelů atomů podle hypotéz kvantové mechaniky. V modelech pro kvantově-mechanické pojetí atomů založených na řešení Schrödingerovy rovnice jsou kvantitativní charakteristiky komplikovaně vyjádřitelné, takže není snadné najít řešení analytické některých veličin a ani řešení numericky hledaných analýz není jednoduché.

Spektrum pro první elektron ionizační energie $W_i=24.587 \text{ eV}$ [2] je pomocí rovnice Nielse Bohra vyjádřeno

$$W_f = hv = \frac{2\pi^2 e^4 m}{h^2} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) = E_i \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (22)$$

a jejich vyčíslení v Tab.1

Tabulka 1 Hodnoty vlnové délky a energie fotonů získané z databáze spekter atomu helia s oběma elektrony [2] při excitaci ze základní hladiny na hladinu n .

Hodnoty n	2	3	4	5	6	7
λ_f [10^{-9} m]	59.1412	53.7029	52.2186	51.5596	51.2070	50.9970
W_f [eV]	20.9773	23.1016	23.7583	24.0619	24.2276	24.3274

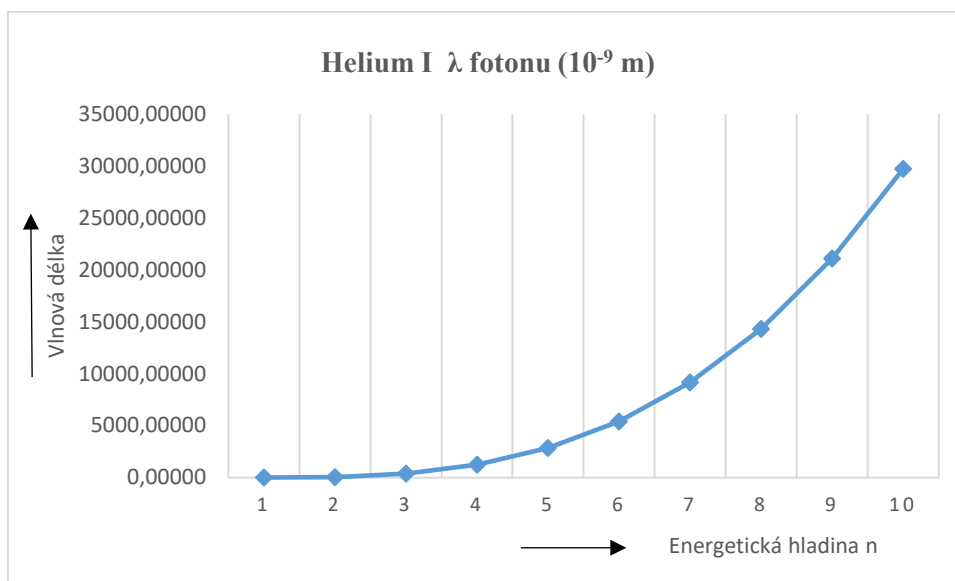
V následující tabulce tab.2 jsou uvedeny vlnové délky fotonů atomu helia v základním stavu podle Databáze spekter [2] a vypočítaných poloměrů elektronů r_e při excitaci elektronů z hladiny n na $n+1$ podle (23)

$$r_{en} = \frac{\lambda_n \cdot \alpha}{2\pi \cdot n^2} . \quad (23)$$

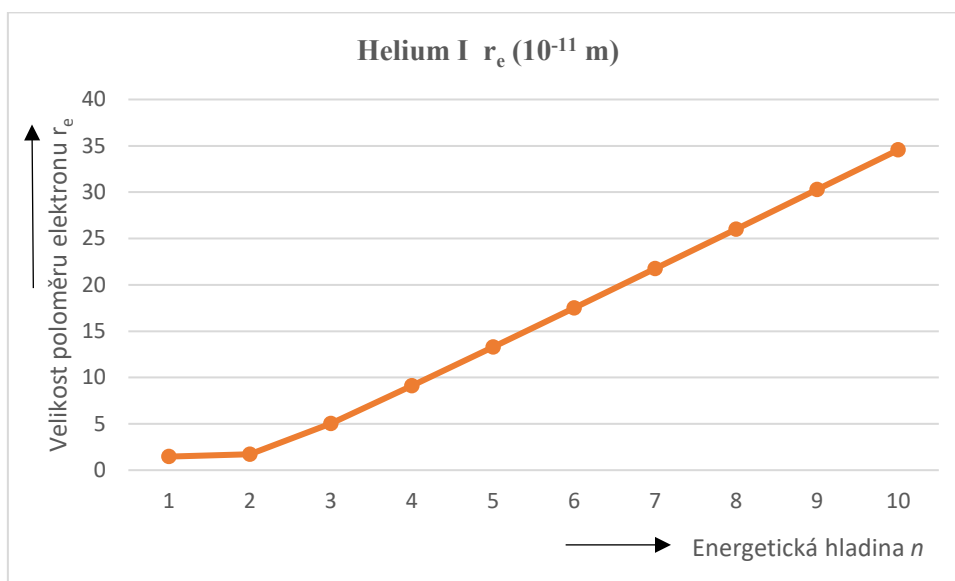
Tabulka 4.2 vlnových délek fotonů atomu helia podle Databáze spekter [2] a vypočítaných poloměrů elektronů podle (23).

Helium I			
kvantové číslo n	λ_f [10^{-9} m]	r_e [10^{-11} m]	Δr_e rozdíl [10^{-11} m]
1	12.61443	1.466180436	
2	59.14121	1.718501848	0.252321412
3	388.86480	5.021990795	3.303488946
4	1252.75200	9.100492817	4.078502022
5	2855.02292	13.27361995	4.173127133

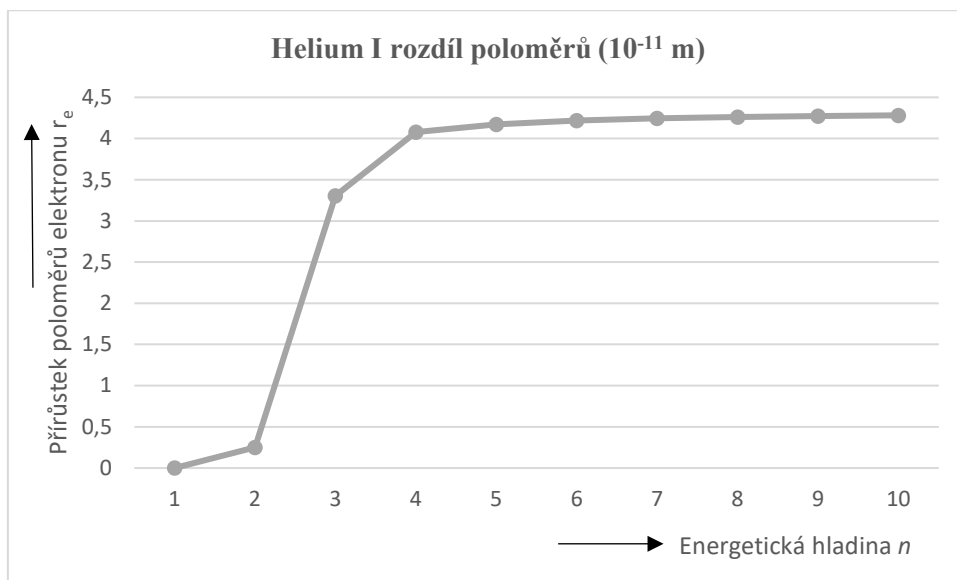
6	5417.83945	17.49215913	4.218539179
7	9164.24854	21.73804924	4.245890108
8	14316.88578	26.00089966	4.262850424
9	21098.39922	30.27500865	4.74108993
10	29731.29492	34.55680752	4.281798870



Obr. 4. Grafické zobrazení závislosti vlnových délek modelu fotonů při přechodu mezi energetickými hladinami helia.

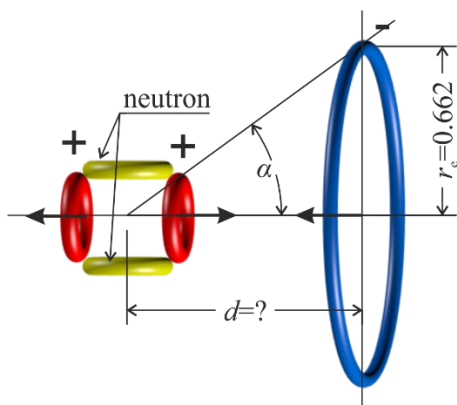


Obr. 5. Grafická závislost velikosti poloměru prvního elektronu r_e atomu helia na energetické hladině n .



Obr. 6. Závislost rozdílu přírůstku velikosti poloměru prvního elektronu r_e atomu helia v závislosti na velikosti n .

Pokud z modelu atomu helia odstraníme jeden elektron, dostaneme model atomu „vodíkového typu“, který lze hodnotit a přibližně vyjádřit energie podle relace (22).



Obr. 7. Navržený modifikovaný model pro analýzu atomu He⁺.

U vyhodnocení a vyčíslení vzdálenosti pro dynamickou rovnováhu modelu atomu He⁺ pro elektron v atomu He⁺, obr. 7, se vychází z hodnoty termu

$$T_{He,II} = 22.7989 \cdot 10^{-9} m , \quad (24)$$

a ionizační energie zbývajícího elektronu

$$W_{i He,II} = 54.416 eV , \quad (25)$$

uvedených v databázi atomových spekter NIST [2].

K vyčíslení poloměru r_e základní velikosti modelu elektronu atomu He⁺ použijeme vztah odvozený ze spektra atomu helia [2]

$$r_e = \frac{T_{He,II} \cdot \alpha}{8\pi \cdot n} = \frac{22.7989 \cdot 10^{-9}}{8\pi \cdot 137} = 6.6248 \cdot 10^{-12} m . \quad (26)$$

Doba, po kterou foton potřebuje na předání své energie W_{ph} elektronu

$$t_{e-ph,II} = \frac{T_{He,II}}{c \cdot \alpha} = \frac{22.7989 \cdot 10^{-9} \cdot 137}{3 \cdot 10^8} = 1.04115 \cdot 10^{-14} s. \quad (27)$$

Elektrický proud v modelu elektronu i_e , který odpovídá rotaci elektrického náboje q_e po obvodu toroidu modelu elektronu za jednu otáčku vyčíslíme

$$i_e = \frac{dq_e}{dt_e} = \frac{1.602 \cdot 10^{-19}}{1.04115 \cdot 10^{-14}} = 1.53868 \cdot 10^{-5} A. \quad (28)$$

Rovnovážný stav a vzdálenost protonu a elektronu u modelu iontu helia He^+ na základní energetické úrovni je dána rovnováhou mezi elektrickou silou a magnetickou silou

$$2F_{el} = F_{mg}, \quad (29)$$

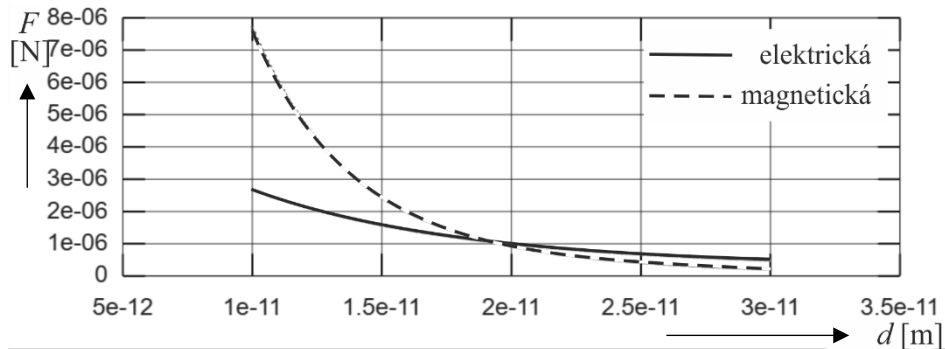
$$\frac{2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{q_e^2}{R^2} \cdot \cos \alpha = \frac{i_e \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot \sin 2\alpha}{4\pi \cdot R^3}. \quad (30)$$

Z této rovnice získáme vztah pro vzdálenost d_l

$$d_l^2 = \frac{i_e \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot \epsilon_0 \cdot r_e}{q_e^2} - r_e^2, \quad (31)$$

$$\frac{1.53868 \cdot 10^{-5} \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1.41 \cdot 10^{-26} \cdot 8.854 \cdot 10^{-12} \cdot 6.6248 \cdot 10^{-12}}{(1.602 \cdot 10^{-19})^2} - (6.6248 \cdot 10^{-12})^2, \quad (32)$$

$$d_{l_{He,I}} = 1.8583 \cdot 10^{-11} m. \quad (33)$$



Obr. 8. Grafická závislost elektrických a magnetických sil v závislosti na vzdálenosti od jádra pro základní úroveň atomu helia He^+ .

Tabulka 3 Hodnoty vlnové délky a energie fotonů získané z databáze spekter atomu helia s jedním elektronem [2] při excitaci ze základní hladiny na hladinu n .

Hodnoty n	2	3	4	5	6
λ_f [10^{-9} m]	30.3786	25.6318	24.3027	23.7331	23.4347
W_f [eV]	40.8388	48.4018	51.0488	52.2740	52.9395

Elektrické a magnetické pole v modelu protonu a elektronu na sebe působí ve vzdálenosti (33).

Vazební energii elektrického pole vypočítáme podle vztahu

$$W_{v,el} = \frac{2q_e \cdot 2q_e \cdot R}{4\pi\epsilon_0 \cdot R^2}, \quad (34)$$

$$W_{v,el} = \frac{4 \cdot (1.6 \cdot 10^{-19})^2}{4\pi \cdot 8.859 \cdot 10^{-12} \cdot (1.9729 \cdot 10^{-11})} = 46.648 \cdot 10^{-18} \text{ J} . \quad (35)$$

Vazební energii magnetického pole vypočítáme podle vztahu

$$W_{v,mag} = \frac{i_{el} \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot R}{4\pi \cdot R^3}, \quad (36)$$

$$W_{v,mag} = \frac{1.53868 \cdot 10^{-5} \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1.41 \cdot 10^{-26} \cdot 1.9729 \cdot 10^{-11}}{4\pi \cdot (1.9729 \cdot 10^{-11})^3} = 55.739 \cdot 10^{-18} \text{ J} . \quad (37)$$

Výsledná vazební energie podle RT je

$$W_v = 55.739 - 46.648 = 9.091 \cdot 10^{-18} \text{ J} = 56.737 \text{ eV} . \quad (38)$$

Celková energie atomu helia je pak dána součtem energií obou elektronů vztahem

$$W_c = W_{v,el} + W_{v,mag}, \quad (39)$$

$$W_c = 22.961 + 56.737 = 79.598 \text{ eV} . \quad (40)$$

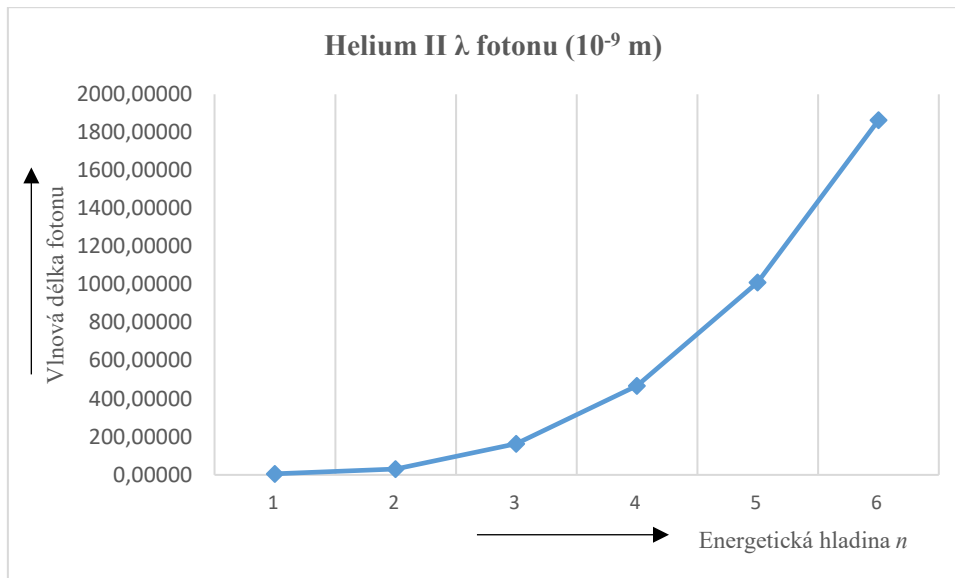
Experimentálně změřená [3.2] hodnota energie atomu helia je 79.0 eV. Vypočítaná hodnota energie atomu helia podle kvantové teorie metodou poruchového přístupu [3] [4] je 74.8 eV a metodou variačního přístupu je 77.48 eV.

V následující tabulce tab.4 jsou uvedeny vlnové délky fotonů iontu helia H⁺ podle Databáze spekter [3.2] a vypočítaných poloměrů elektronů podle (26) při excitaci elektronů z hladiny n na $n+1$

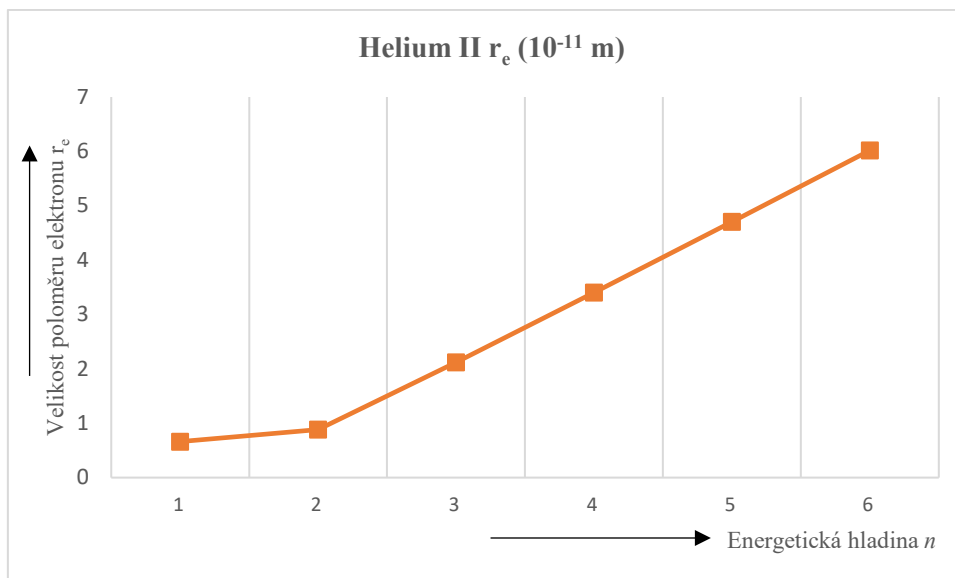
Tab.4.4 Tabulka vlnových délek fotonů atomu helia podle Databáze spekter [2] a vypočítaných poloměrů elektronů podle (26).

Helium II			
kvantové číslo n	λ_f fotonu [10^{-9} m]	r_e [10^{-11} m]	rozdíl poloměrů
1	5.69973	0.662481403	
2	30.37858151	0.882728785	0.220247382
3	164.0391352	2.118481866	1.23575308
4	468.5568006	3.403784467	1.285302601

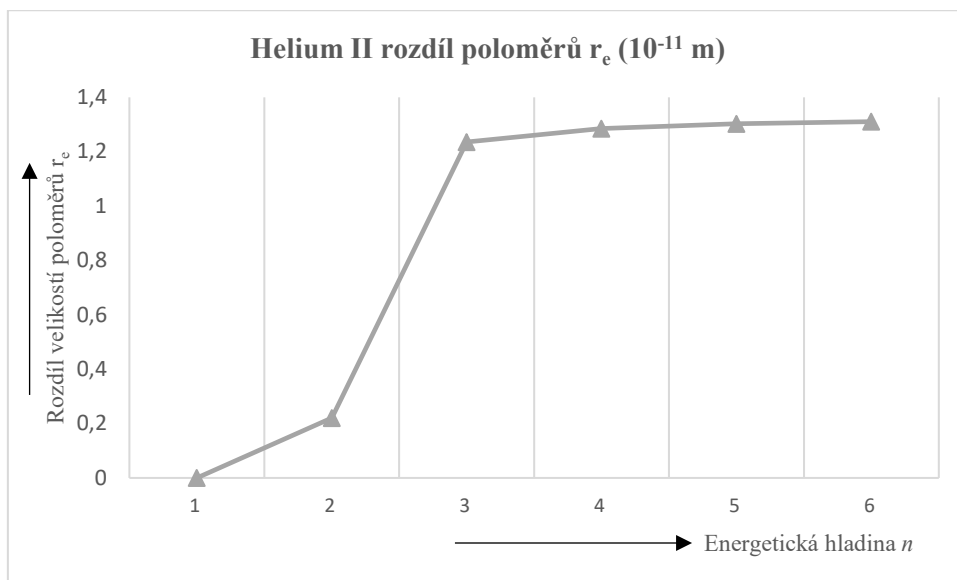
5	1 012.291327	4.706361649	1.302577182
6	1 863.623138	6.016935863	1.310574214



Obr. 9. Graf vlnových délek fotonů při přechodu mezi energetickými hladinami druhého elektronu atomu helia.



Obr. 10. Graf závislosti velikosti poloměru druhého elektronu r_e atomu helia na energetické hladině n .



Obr. 11. Rozdíl přírůstku velikosti poloměru druhého elektronu r_e atomu helia v závislosti na velikosti n .

LITERATURA

- [1] Werner, P. (2017), *Základy modelování prstencové struktury elementárních částic*. VUT ISBN 978-80-214-5620-4. <https://www.ringtheory.eu>
- [2] NIST Atomic Spectra Database Lines Form: <https://www.nist.gov/pml/atomic-spectra-database>
- [3] Gordon, M. D., & Secrest, D. O. N. (1970). *Helium-atom-hydrogen-molecule potential surface employing the LCAO-MO-SCF and CI methods*. The Journal of Chemical Physics, 52(1), 120-131. doi:10.1063/1.1672656
- [4] Rojansky, V. (1930). *On the interaction of stark effect and electron spin in alkali atoms*. Physical Review, 35(7), 782-788. doi:10.1103/PhysRev.35.782