

## Bohrov model atoma

N. Bohr je leta 1913 postavil nov model atoma. Rekel je, da je atom sestavljen iz točkastega pozitivno nabitega jedra, okoli katerega krožijo elektroni po krožnicah, podobno kot planeti krožijo okoli sonca. Razlog za kroženje pa ni gravitacijska sila temveč elektrostatična. Izhajal je iz naslednjih predpostavk:

- V jedru je zbrana skoraj vsa masa in ves pozitivni naboj, elektroni pa krožijo po točno določenih krožnicah okoli jedra.
- Stabilne so le tiste krožnice, kjer je vrtilna količina mnogokratnik reducirane Planckove konstante. Na teh krožnicah elektron ne seva.
- Pri prehodu elektrona z ene stabilne krožnice na drugo le ta absorbira oziroma emitira kvant svetlobe, frekvenca katere se izračuna s pomočjo Planckove formule.

Vidimo, da model vsebuje Planckovo konstanto, tako da je nekakšen hibrid med klasični in kvantno mehaniko. Bohr je predpostavil, da veljajo zakoni klasične mehanike samo v določenih primerih, ko je vrtilna količina kvantizirana.

Poglejmo si sedaj, kaj lahko v tem modelu izračunamo. Elektron in jedro se privlačita z elektrostatično silo, ki jo lahko izračunamo po Coulombovem zakonu. Ta sila  $F_e$  je po velikosti enaka

$$F_e = \frac{Ze_0^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$$

in je usmerjena proti jedru.  $Z$  je tu vrstno število jedra in  $Ze_0$  naboj jedra.  $e_0 = 1.6021765 \times 10^{-19} \text{As}$  je osnovni naboj,  $r$  je oddaljenost elektrona od jedra in  $\epsilon_0 = 8.854187817 \times 10^{-12} \text{AsV}^{-1}\text{m}^{-1}$  dielektrična oziroma influenčna konstanta. To je edina sila, ki deluje na elektron, tako da je to tudi rezultanta, ki pa mora biti pri kroženju enaka radialni sili

$$F_e = F_r.$$

Radialna sila pri kroženju je enaka produktu mase krožečega delca (pri nas elektrona) in radialnega pospeška

$$F_r = ma_r = m \frac{v^2}{r}$$

Neznanki v naši enačbi sta obodna hitrost kroženja,  $v$ , in radij, po katerem kroži elektron. Potrebujemo še eno enačbo in sicer za vrtilno količino. Za krožeče telo je vrtilna količina kar produkt mase, radija in obodne hitrosti, po Bohrovi predpostavki pa je to enako mnogokratniku reducirane Planckove konstante ( $\hbar = 1.054571726 \times 10^{-34} \text{Js}$ ).

$$L = mrv = n\hbar$$

$n$  je tu katerokoli naravno število. Iz te enačbe izrazimo  $v$  kot

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

in to vstavimo v prvo enačbo za sile ter dobimo

$$m \frac{\left(\frac{n\hbar}{mr}\right)^2}{r} = \frac{Ze_0^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$$

Ko enačbo okrajšamo dobimo

$$\frac{n^2\hbar^2}{mr} = \frac{Ze_0^2}{4\pi\epsilon_0}$$

Dobimo radij kroženja elektrona, ki pa je odvisen od kvantnega števila  $n$

$$r_n = \frac{n^2\hbar^2 4\pi\epsilon_0}{mZe_0^2}$$

Ta radij je radij stabilnih krožnic in raste s kvadratom kvantnega števila. Razmerje radijev krožnic elektrona na posameznih stabilnih krožnicah zapišemo kot

$$r_1:r_2:r_3:\dots:r_n:\dots = 1:4:9:\dots:n^2:\dots$$

Dolžina radija pa se manjša z vrstnim številom jedra, okoli katerega kroži elektron. Če izračunamo radij prvega nivoja za vodik ( $Z = 1, n = 1$ ) dobimo

$$r_1 = 5,29 \times 10^{-11} \text{ m} = a_0$$

Temu radiju rečemo tudi prvi Bohrov radij in je hkrati tudi atomska enota razdalje, ki jo velikokrat uporabljamo v atomskem svetu kot enoto za merjenje dolžin. Če izraz za radij kroženja vstavimo v obodno hitrost dobimo

$$v_n = \frac{Ze_0^2}{n\hbar 4\pi\epsilon_0}$$

Vidimo, da obodna hitrost pada s kvantnim številom in raste z vrstnim številom jedra linearno. Sedaj nas zanimajo še energije elektrona na posamezni krožnici. Celotna energija elektrona je vsota potencialne in kinetične energije. Kinetična energija je

$$W_k = \frac{mv^2}{2},$$

potencialna energija elektrona v polju jedra (točkastega naboja v polju drugega točkastega naboja) pa je

$$W_p = -\frac{Ze_0^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Sedaj to seštejemo in za radij in hitrost vstavimo zgornja izraza

$$E_n = \frac{mv_n^2}{2} - \frac{Ze_0^2}{4\pi\epsilon_0 r_n} = \frac{m \left( \frac{Ze_0^2}{n\hbar 4\pi\epsilon_0} \right)^2}{2} - \frac{Ze_0^2}{4\pi\epsilon_0 \left( \frac{n^2 \hbar^2 4\pi\epsilon_0}{mZe_0^2} \right)}$$

$$E_n = \frac{mZ^2 e_0^4}{2n^2 \hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2} - \frac{mZ^2 e_0^4}{n^2 \hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2} = -\frac{mZ^2 e_0^4}{2n^2 \hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2}$$

Energije so negativne in so obratno sorazmerne s kvadratom kvantnega števila  $n$  in sorazmerne s kvadratom vrstnega števila jedra. Vrednost konstante je enaka

$$\frac{me_0^4}{2\hbar^2(4\pi\epsilon_0)^2} = 13,5998 \text{ eV}$$

Razmerje energij lahko zapišemo kot

$$E_1 : E_2 : E_3 : \dots : E_n : \dots = \frac{1}{1} : \frac{1}{4} : \frac{1}{9} : \dots : \frac{1}{n^2} : \dots$$

Sedaj ko poznamo energije, si pogledjmo še kakšne fotone elektron absorbira oziroma izseva pri prehodih med krožnicama s kvantnima številoma  $n$  in  $m$  pri vodikovem atomu ( $Z=1$ ). Energija fotona za prehod med dvema energijskima nivojema je kar razlika med energijama obeh nivojev

$$E_f = \frac{me_0^4}{2n^2 \hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2} - \frac{me_0^4}{2m^2 \hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2} = \frac{me_0^4}{2\hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

Frekvenca fotona pa je

$$\nu_{mn} = \frac{E_f}{h} = \frac{E_f}{2\pi\hbar} = \frac{me_0^4}{4\pi\hbar^3 (4\pi\epsilon_0)^2} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

Če sedaj izrazimo namesto frekvence še valovno število dobimo

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c}$$

$$\bar{\nu}_{mn} = \frac{me_0^4}{4\pi\hbar^3 c (4\pi\epsilon_0)^2} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

Če primerjamo ta izraz z izrazom za črte v spektru vodika, ugotovimo, da se teoretični izraz ujema z eksperimentom. Konstanta pred oklepajem, je enaka Rydbergovi konstanti ( $R_H = 109677,8 \text{ cm}^{-1}$ )

$$R_H = \frac{me_0^4}{4\pi\hbar^3 c (4\pi\epsilon_0)^2}$$

Do odstopanja med eksperimentalno in teoretično Rydbergovo konstanto pride zaradi našega približka. Elektron v resnici ne kroži okoli jedra, temveč jedro in elektron krožita okoli skupnega težišča. V

teoretičnem izrazu za konstanto moramo zamenjati maso elektrona z reducirano maso za jedro in elektron, ki jo izračunamo kot

$$\mu = \frac{mM}{m + M}$$

$M$  je masa jedra in  $m$  masa elektrona. Ko to naredimo, dobimo zelo dobro ujemanje teoretične napovedi spektra z dejanskim izmerjenim spektrom za vodikov atom. Za tisti čas je bil izračun velik uspeh. Pomemben je tudi, ker je bil to prvi poizkus novega opisa, čeprav je z današnjega stališča napačen.

Glavna pomanjkljivost Bohrovega modela je, da napačno napove vrtilno količino osnovnega stanja vodikovega atoma. Eksperimentalno potrjena vrednost je 0, Bohrov model pa napove, da je  $l = n\hbar$ . Prav tako model ni možno razširiti na več-elektronske sisteme in ga ni možno uporabiti za razlago njihovih spektrov. Bohrov model lahko uporabimo le za eno-elektronske sisteme kot so vodikov atom, ioni  $\text{He}^+$ ,  $\text{Be}^{2+}$ ,  $\text{B}^{3+}$  itd ter za pozitronij (sistem elektrona in pozitrona). Seveda je glavna slabost modela, ker ne upošteva kvantne narave delcev, položaja in hitrosti elektrona ne moremo poznati istočasno poljubno natančno. Bohrov model je posplošil A. Sommerfeld, tako da je uvedel eliptične tire in dva nova kvantna pogoja za gibanje.