Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

С. Варламов, Энергия ионизации водородоподобных ионов,
Квант, 2021, номер 8, 31

DOI: <https://doi.org/10.4213/kvant20210806>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 54.80.73.141

26 апреля 2023 г., 10:24:29

Энергия ионизации водородоподобных ИОНОВ

С.ВАРЛАМОВ

В предлагаемой вниманию читателей статье рассматривается явление ионизации водородоподобных ионов различных атомов. При сравнении энергий ионизации разных ионов учитываются поправки, которые приводят к уточнению формул для вычисления соответствующих энергий.

В 11 классе в школе изучается атомная физика и, в частности, разбирается теория Бора, которая хорошо описывает свойства простейшего из атомов – атома водорода. В учебниках по физике приводятся формулы для уровней энергии атома водорода при различных значениях главного квантового числа n . Из этих формул можно получить энергию ионизации атома водорода, т.е. вычислить энергию, которую необходимо сообщить атому водорода, находящемуся в основном энергетическом состоянии, чтобы ядро и электрон перестали быть связанными друг с другом и могли разлететься на большое расстояние друг от друга.

В предположении, что ядро не движется, т.е. что масса ядра во много раз больше массы электрона, эта энергия вычисляется по формуле

$$E_0 = \frac{m_e e^4}{8h^2 \epsilon_0^2}.$$

Если учесть, что у ядра имеется масса $M_{\text{я}}$ и что движение ядра и электрона в атоме происходит вокруг общего центра масс, то энергия ионизации уменьшается и коэффициентом уменьшения является величина $M_{\text{я}}/(M_{\text{я}} + m_e)$. С учетом того, что ядро имеет заряд Q , равный заряду протона, умноженному на номер атома в таблице Менделеева: $Q = eN$, появляется множитель, увеличивающий энергию ионизации водородоподобного иона, равный N^2 .

Однако, это еще не все. Согласно релятивистской теории (специальной теории относительности) движущаяся частица имеет и энергию и импульс, которые определенным образом связаны друг с другом. Собственная энергия электрона в общей теории относительности равна массе электрона, умноженной на квадрат скорости света, и эта энергия, выраженная в МэВ, равна $E_c = 0,511$ МэВ. Иными словами, собственная энергия соответствует энергии частицы в той системе отсчета, в которой ее импульс равен нулю. Связь между полной энергией

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - (v/c)^2}},$$

собственной энергией

$$E_c = mc^2$$

и импульсом частицы

$$p = \frac{mv}{\sqrt{1 - (v/c)^2}}$$

устанавливается релятивистским соотношением

$$E^2 = (pc)^2 + E_c^2.$$

При этом величина

$$E_{\text{к}} = E - E_c$$

называется кинетической энергией. Учет того, что наш мир не классический, а релятивистский, приводит к появлению дополнительного множителя, увеличивающего энергию ионизации и примерно равного

$$\frac{1}{\sqrt{1 - (E_{\text{к}}/E_c)}}.$$

При движении электрона в центральном кулоновском поле ядра выполняется интегральное соотношение между потенциальной энергией электрического взаимодействия ядра и электрона и кинетической энергией движения электрона

$$E_{\text{к}} = -\frac{E_{\text{п}}}{2} = E_{\text{ион}}.$$

Можно сказать, что энергия ионизации водородоподобного иона численно равна кинетической энергии электрона в то время, когда он двигался возле ядра, находясь в самом низком энергетическом состоянии (в основном состоянии).

В физических справочниках можно найти потенциалы ионизации атомов и ионов вплоть до полной ионизации атома для различных элементов таблицы Менделеева. Нас будут интересовать значения энергий ионизации, когда от ядра удаляется самый последний электрон. Учитывая описанные ранее поправки, приходим к выводу, что если экспериментальное значение энергии ионизации водородоподобного иона умножить на коэффициент

$$\frac{M_{\text{я}} + m_e}{N^2 M_{\text{я}}} \sqrt{1 - (E_{\text{ион}}/E_c)},$$

то должна получиться одинаковая для всех водородоподобных атомов величина. Обозначим эту величину A , ее размерность есть эВ.

Для каждого значения энергии ионизации водородоподобного иона с помощью программы Excel были проведены вычисления в соответствии с предложенной процедурой. Результаты вычислений для 38 ионов приведены в таблице:

$M_{\text{я}}/M_p$	$(M_{\text{я}} + m_e)/M_{\text{я}}$	N	$A, \text{эВ}$	$E_{\text{ион}}, \text{эВ}$	$\sqrt{1 - (E_{\text{ион}}/E_c)}$
1	1,000544618	1	13,60572	13,5985	0,999986694
2	1,000272309	1	13,60602	13,6025	0,99998669
3	1,000181539	1	13,60579	13,6035	0,999986689
4	1,000136155	2	13,60563	54,418	0,999946752
7	1,000077803	3	13,60498	122,45	0,999880179
9	1,000060513	4	13,60542	217,72	0,999786944
11	1,000049511	5	13,60534	340,23	0,999667039
12	1,000045385	6	13,6052	490	0,999520433
14	1,000038901	7	13,60491	667,05	0,999347096
16	1,000034039	8	13,60479	871,42	0,999146975
19	1,000028664	9	13,60457	1103,13	0,998920033
20	1,000027231	10	13,6043	1362,21	0,998666224
23	1,000023679	11	13,60403	1648,71	0,998385477
24	1,000022692	12	13,60383	1962,68	0,998077722
27	1,000020171	13	13,60382	2304,2	0,997742854
28	1,000019451	14	13,60332	2673,2	0,997380915
31	1,000017568	15	13,60306	3069,87	0,996991688
32	1,000017019	16	13,6027	3494,2	0,996575153
35	1,000015561	17	13,6024	3946,3	0,996131166

Значения вычисленной величины A лежат в диапазоне от $A_{\text{мин}} = 13,59454$ для водородоподобного иона с ядром криптона ($N = 36$) до $A_{\text{макс}} = 13,60602$ эВ для атома с ядром дейтерия ($N = 1$). Отличия максимального и минимального значений от средней величи-

ны $(A_{\text{макс}} + A_{\text{мин}})/2$ составляют всего

$$\frac{2(A_{\text{макс}} - A_{\text{мин}})}{A_{\text{макс}} + A_{\text{мин}}} \cdot 100\% = 0,08\%.$$

Или примерно 0,04% на изменение заряда на $18 = 36/2$ единиц. Если считать, что тенденция к уменьшению вычисленной величины с ростом заряда сохранится, то даже для изменения заряда от 18 до 92 ее уменьшение составит всего $0,04\% \cdot (92 - 18)/18 \approx 0,16\%$.

С учетом этой тенденции оценим энергию ионизации, например, водородоподобного иона ртути ($N = 80$):

$$A_{\text{рт}} = \left(\frac{A_{\text{макс}} + A_{\text{мин}}}{2} \right) \left(1 - 0,0004 \cdot \frac{80 - 18}{18} \right) \approx 13,58 \text{ эВ}.$$

Вычисления по «обратной» процедуре дают значение $E_{\text{ион рт}} \approx 95,4$ кэВ. Такая энергия, можно считать, уже сопоставима по величине с собственной энергией электрона, равной

$M_{\text{я}}/M_p$	$(M_{\text{я}} + m_e)/M_{\text{я}}$	N	$A, \text{эВ}$	$E_{\text{ион}}, \text{эВ}$	$\sqrt{1 - (E_{\text{ион}}/E_c)}$
39	1,000013965	18	13,60201	4426,2	0,995659661
40	1,000013615	19	13,60191	4934,1	0,995160403
40	1,000013615	20	13,60155	5469,9	0,994633447
45	1,000012103	21	13,60123	6033,8	0,994078554
48	1,000011346	22	13,60078	6625,8	0,993495677
49	1,000011115	23	13,60042	7246,1	0,992884568
50	1,000010892	24	13,60011	7894,8	0,992245077
53	1,000010276	25	13,59966	8571,9	0,99157715
54	1,000010086	26	13,59938	9277,7	0,990880432
59	1,000009231	27	13,59893	10012,1	0,990154962
59	1,000009231	28	13,59808	10775	0,989400775
64	1,00000851	29	13,59858	11568	0,988616222
65	1,000008379	30	13,59778	12389	0,987803311
70	1,00000778	31	13,59675	13239	0,98696098
73	1,000007461	32	13,59637	14119	0,986088162
75	1,000007262	33	13,59637	15029	0,985184775
79	1,000006894	34	13,59571	15968	0,98425173
80	1,000006808	35	13,59515	16937	0,983287947
84	1,000006484	36	13,59454	17936	0,982293335

$E_c = 511$ кэВ, и составляет от нее примерно 19%.

Ну и для успокоения совести оценим число N , при котором выведенная формула для энергии ионизации водородоподобного иона даст значение $E_c/2$ (понятно, что вычисле-

ния по предложенной процедуре в этом случае уже будут неверными). Итак,

$$\frac{E_0 N^2}{\sqrt{1 - (E_0 N^2 / E_c)}} = \frac{E_c}{2}.$$

Численное решение этого уравнения (с помощью программы Excel) дает для числа N величину 122. Известно, что самый большой номер элемента (в таблице Менделеева), обнаруженного экспериментально, равен 118 (это оганесон, названный в честь научного руководителя Лаборатории ядерных реакций имени Г.Н.Флёрва в Объединенном институте ядерных исследований в Дубне Юрия Цолаковича Оганесяна). Следовательно, можно предположить, что найденная связь между физическими величинами, относящимися к водородоподобным ионам, справедлива для всех элементов таблицы Менделеева с номерами, меньшими 80.

На этом можно было бы и закончить рассказ, но не дает покоя тот факт, что наблюдается явная тенденция к уменьшению величины, вычисленной с помощью описанной процедуры, с ростом заряда и массы (массового числа) ядра. Каким может быть объяснение этой тенденции? Возможно, это связано с тем, что ядро, вокруг которого движется электрон, не является точечным. Заряд ядра распределен в некоторой области пространства, и для электрона, находящегося возле этого ядра, такое распределение заряда ядра приводит к уменьшению энергии связи. Действительно, функция распределения плотности вероятности обнаружения электрона в пространстве вблизи ядра для основного самого низкоэнергетического состояния этого иона имеет максимум и убывает с расстоянием x от центра распределения (закон убывания – это экспонента $e^{-x/a}$, где a – константа). И если бы ядро было точечным, то рост потенциала электрического поля, созданного ядром, при приближении к этой точке описывался бы зависимостью

$$U \sim \frac{1}{R}.$$

А если ядро имеет размер и внутри этого (предположим) шарика с радиусом R_0 заряд распределен равномерно, то при приближении к центру этого шарика (внутри шарика), потенциал описывается другой зависимостью:

$$U \sim \frac{1}{R_0} \frac{1 - (R/R_0)^2}{2} + \frac{1}{R_0} = \frac{1}{R_0} \left(\frac{3}{2} - \frac{(R/R_0)^2}{2} \right).$$

Для точечного ядра потенциал в центре (в точке) бесконечно большой, а для ядра конечного размера он имеет некое максимальное значение, не бесконечно большое. Распределение заряда ядра по пространству, которое «чувствует» электрон, создается двумя разными факторами: 1) собственно геометрическим размером ядра, 2) движением ядра в электрическом поле, созданном электроном.

В первом случае соответствующий вклад в радиус шарика-ядра пропорционален кубическому корню из массового числа ядра. Если считать, что массовое число ядра примерно вдвое больше его зарядового числа, то вклад первого фактора в размер области распределения заряда ядра пропорционален $\Delta R_1 \sim \alpha Z^{1/3}$, т.е. он растет с ростом заряда ядра (α – постоянная величина).

Во втором случае соответствующий вклад в радиус шарика-ядра определяется соотношением неопределенностей (вот такая, почти шуточная комбинация слов получилась) $\Delta p \Delta R \geq h$, где Δp – это неопределенность импульса, ΔR – неопределенность соответствующей координаты, h – постоянная Планка. Таким образом,

$$\frac{p^2}{2M_{\text{я}}} \approx \frac{p^2}{4ZM_p} = Z^2 \cdot \text{const},$$

следовательно, $\Delta R_2 \sim \beta \cdot Z^{-3/2}$, т.е. этот вклад в размер ядра убывает с ростом Z (β – постоянная величина).

В итоге получается, что нужно вычислить поправки к энергии взаимодействия, связанные с тем, что заряд ядра распределен в области с радиусом примерно равным $\alpha Z^{1/3} + \beta Z^{-3/2}$. Чтобы учесть действие этих «новых» двух факторов, надо будет к уже вычисленной величине A (которая приведена в четвертом столбце таблицы) добавить поправки, связанные с изменением энергии взаимодействия, которое обусловлено «неточечностью» ядра, поделенным на квадрат числа Z .

Проверку правильности дополнительных соображений, возможность вычисления величин α , β и изменений энергии взаимодействия предоставляем читателям, заинтересовавшимся проблемой.