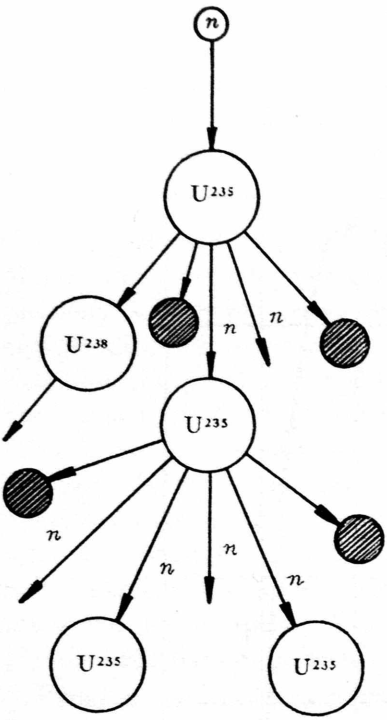


Obr. 16.10.

júci sa v prirodzenom uráne v množstve asi 99 %, pohlcuje neutróny bez toho, že by nastalo jeho štiepenie. Druhou príčinou je, že pri štiepení jadier uránu U_{92}^{235} vznikajú rýchle neutróny, ktoré ľahko unikajú do okolitého priestoru aj cez masívne hmotné prekážky. Pre tieto príčiny len časť neutrónov vznikajúcich pri štiepení určitého jadra uránu U_{92}^{235} vyvoláva štiepenie aj ďalších takýchto jadier. Keď počet neutrónov účinných je nepostačujúci, reakcia sa preruší. Na udržanie reťazovej reakcie je nevyhnutné alebo prirodzený urán podstatne obohatiť izotopom U_{92}^{235}, alebo pri jednotlivých etapách reakcie vznikajúce neutróny umele spomaliť. Pri výrobe atómovej energie pre mierové účely sa uskutočňuje spomaľovanie neutrónov v tzv. *reaktoroch*, pričom sa súčasne priebeh reakcie vhodne riadi pomocou prvkov účinne pohlcujúcich neutróny bez toho, aby dochádzalo k štiepeniu ich jadier.

17. Z FYZIKY ATÓMOVÉHO OBALU

17.1. Bohrov a Sommerfeldov model vodíkového atómu. Podľa Planckovej kvantovej domnienky energia lineárneho oscilátora s vlastnou frekvenciou ν môže sa meniť len o celistvé násobky elementárneho kvanta $h\nu$. Táto je teda vždy

$$E = nh\nu \tag{1}$$

kde n je celé, tzv. *kvantové číslo*.

Ako príklad lineárneho oscilátora majme na mysli hmotný bod s hmotnosťou m, upevnený tak, že môže konať len harmonický pohyb v priamke, ktorej smer v priestore sa s časom nemôže meniť. Direkčná sila, ktorou je tento hmotný bod viazaný na svoju rovnovážnu polohu, nech má absolútnu hodnotu k. Pri výchylke r takto upevneného hmotného bodu z jeho rovnovážnej polohy a rýchlosti v jeho celková energia E, súčet energie polohovej a pohybovej, je

$$E = \frac{1}{2}kr^2 + \frac{1}{2}mv^2$$

alebo — keď absolútnu hodnotu výchylky, ktorá má význam súradnice, označíme písmenom q a hybnosť mv písmenom p — aj

$$E = \frac{1}{2} kq^2 + \frac{1}{2m} p^2 \tag{2}$$

Spojením vzorcov (1) a (2) dostávame rovnicu

$$\frac{1}{2} kq^2 + \frac{1}{2m} p^2 = nh\nu$$

ktorú môžeme upraviť na tvar

$$\frac{q^2}{2nh\nu/k} + \frac{p^2}{2mnh\nu} = 1 \tag{3}$$

Podľa tohto výsledku harmonický pohyb hmotného bodu v priamke prebieha tak, že obraz okamžitého pohybového stavu, určený okamžitou výchylkou q a súčasnou hybnosťou p, považovanými za súradnice bodu v rovine, sa pohybuje po elipse s polosami $\sqrt{2nh\nu/k}$ a $\sqrt{2mnh\nu}$. Jej plošný obsah je

$$I = \oint p \, \mathrm{d}q = \pi ab = 2\pi nh\nu \sqrt{\frac{m}{k}}$$

alebo, keďže kruhová frekvencia bodu konajúceho harmonický pohyb je $\omega = \sqrt{\dfrac{k}{m}}$, takže príslušná obyčajná frekvencia je $\nu = \dfrac{\omega}{2\pi} = \dfrac{1}{2\pi}\sqrt{\dfrac{k}{m}}$, aj

$$I = \oint p \, \mathrm{d}q = nh \tag{4}$$

Podľa tohto výsledku Planckova kvantová domnienka v prípade mechanického lineárneho oscilátora vedie k záveru, že pri jeho pohybe tzv. *fázový integrál* $\oint p \, \mathrm{d}q$, vzťahujúci sa na jeden kmit, rovná sa celistvému násobku Planckovej kvantovej konštanty h.

Niels Bohr r. 1913 a po ňom A. Sommerfeld r. 1915, aby odstránili, aspoň formálne, niektoré nedostatky Rutherfordových predstáv o štruktúre atómu, vyhlasili výsledok (4), ktorý len v prípade lineárneho oscilátora je s Planckovou kvantovou domnienkou ($E = nh\nu$) ekvivalentný, za všeobecne platný, t. j. platný aj v prípadoch, že q je ľubovoľná polohu bodu alebo stav systému určujúca, tzv. *zovšeobecnená súradnica* a p je *zovšeobecnená hybnosť*, definovaná vzorcom $p_i = \dfrac{\partial K}{\partial q_i}$, kde K je pohybová energia a q_i zovšeobecnená rýchlosť.

Vo svojej teórii najjednoduchšieho atómu, atómu vodíka, Bohr predpokladal, že jediný elektrón tohto atómu krúži okolo jadra vodíkového atómu (*protónu*) po kruhovej dráhe. Sommerfeld, aby dostal výsledky, ktoré by boli v lepšej zhode s pozorovaním aj v podrobnostiach, pripustil však pre elektróny aj dráhy eliptické.

Bohr vybudoval svoju teóriu vodíkového atómu a jemu podobných iónov (jednomocný ión hélia, dvojmocný ión lítia atď.) na týchto predpokladoch:

1. v ustálenom stave môže sa elektrón pohybovať okolo atómového jadra len po kruhových dráhach, na ktorých fázový integrál jeho hybnosti je celistvým násobkom Planckovej kvantovej konštanty,

$$\oint p \, \mathrm{d}q = nh \tag{5}$$

2. pri svojom pohybe po takej dráhe elektrón nevyžaruje energiu;

3. pri prechode elektrónu z jednej možnej dráhy na druhú, na ktorej sa elektrón vyznačuje energiou o $-\Delta E$ menšou, vyžiari atóm kvantum elektromagnetickej energie $h\nu$ (tzv. *fotón*), pričom frekvencia príslušného vlnenia je určená rovnicou

$$h\nu = -\Delta E \tag{6}$$

Odvodíme niektoré vlastnosti vodíkového atómu a jemu podobných iónov hneď podľa predstáv Sommerfeldových, pričom pre jednoduchosť budeme najprv predpokladať, že v dôsledku pomerne malej hmoty elektrónu jeho pohyb okolo jadra atómu nie je spojený s pohybom jadra.

Majme na mysli sústavu zloženú z atómového jadra nesúceho kladný elektrický náboj Ze, a z elektrónu, s nábojom $-e$ a hmotnosťou m. Vo vzdialenosti r od jadra účinkuje na elektrón príťažlivá sila určená zákonom Coulombovým, ktorá elektrónu udeľuje zrýchlenie $\boldsymbol{a} = \dfrac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t^2} = \ddot{\boldsymbol{r}}$, dané rovnicou

$$m\ddot{\boldsymbol{r}} = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r^3}\boldsymbol{r}$$

Podľa tejto rovnice je

$$\ddot{\boldsymbol{r}} = -\frac{1}{4\pi m\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r^3}\boldsymbol{r} \tag{7}$$

Pretože Coulombov silový zákon, ktorý pre pohyb elektrónu okolo jadra atómu poskytol rovnicu (7), svojím tvarom je totožný s gravitačným zákonom Newtonovým, je zrejmé, že Bohrov predpoklad, podľa ktorého elektrón krúži okolo jadra atómu po kruhovej dráhe, nie je dostatočne odôvodnený. V súhlase so Sommerfeldom elektrón sa skôr bude môcť pohybovať po rôznych elipsách, z ktorých prvý Bohrov predpoklad vyberá kružnice len ako zvláštne prípady dráh eliptických. Zo zhody tvaru Coulombovho zákona a Newtonovho gravitačného zákona vyplýva i to, že pohyb elektrónu okolo jadra atómu vyhovuje aj zákonom Keplerovým.

Pohyb elektrónu po eliptickej dráhe je úplne určený tvarom a rozmermi takejto elipsy, teda napríklad jej polosami a a b, a obežnou dobou T. Na určenie týchto troch hodnôt máme rovnicu (7), ktorú poskytol silový zákon Coulombov. Ďalšie dve poskytuje kvantová podmienka, vzťahujúce sa na fázové integrály.

Za účelom získania týchto ďalších dvoch rovníc rozhodneme sa pre používanie polárnych súradníc r a φ a napíšeme absolútnu hodnotu rýchlosti elektrónu pomocou veľkosti jej radiálnej a priečnej zložky,

$$v = \sqrt{\dot{r}^2 + \dot{\varphi}^2 r^2}$$

Kinetická energia elektrónu bude potom

$$K = \frac{1}{2} m(\dot{r}^2 + \dot{\varphi}^2 r^2)$$

Radiálnu a uhlovú hybnosť nájdeme utvorením parciálnych derivácií takto vyjadrenej kinetickej energie K podľa $\dot{r}$ a $\dot{\varphi}$. Vychádza:

$$p_r = \frac{\partial K}{\partial \dot{r}} = m\dot{r}, \qquad p_\varphi = \frac{\partial K}{\partial \dot{\varphi}} = m\dot{\varphi}r^2 \tag{a, b}$$

Príslušné fázové integrály sú:

$$I_r = \oint m\dot{r}\, \mathrm{d}r, \qquad I_\varphi = \oint m\dot{\varphi}r^2\, \mathrm{d}\varphi$$

Uhlovú rýchlosť $\dot{\varphi}$, ktorá vystupuje v druhom z týchto integrálov, môžeme vyjadriť pomocou konštantnej plošnej rýchlosti a okamžitej dĺžky sprievodiča z rovnice

$$\frac{1}{2}|\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{v}| = \frac{1}{2} r^2\dot{\varphi} = \frac{\pi ab}{T}$$

podľa ktorej $\dot{\varphi} = \dfrac{2\pi ab}{r^2 T}$. Pomocou tohto vzťahu dostávame pre druhý fázový integrál výsledok

$$I_\varphi = \oint m\dot{\varphi}r^2\, \mathrm{d}\varphi = \frac{2\pi abm}{T}\oint \mathrm{d}\varphi = \frac{4\pi^2 abm}{T}$$

Pre výpočet prvého fázového integrálu použijeme rovnicu eliptickej dráhy elektrónu v polárnych súradniciach (pozri čl. 2.22, diel I)

$$r = \frac{\varepsilon p}{1 + \varepsilon\cos\varphi} = \frac{b^2}{a(1 + \varepsilon\cos\varphi)}$$

kde a a b sú polosi elipsy a $\varepsilon = \sqrt{a^2 - b^2}/a$ jej číselná výstrednosť. Podľa tejto rovnice je

$$\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}\varphi} = \frac{b^2\varepsilon\sin\varphi}{a(1 + \varepsilon\cos\varphi)^2}, \qquad \frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}\varphi} = \frac{\varepsilon\sin\varphi}{1 + \varepsilon\cos\varphi}$$

Pomocou tohto výsledku a pomocou výrazu vyjadrujúceho uhlovú rýchlosť, $\dot{\varphi} = \frac{2\pi ab}{r^2T}$, radiálny fázový integrál možno vypočítať takto:

$$I_r = \oint m\dot{r}\,\mathrm{d}r = m \oint \frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}\varphi}\dot{\varphi}\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}\varphi}\mathrm{d}\varphi = \frac{2\pi abm}{T}\oint\left(\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}\varphi}\right)^2\mathrm{d}\varphi =$$

$$= \frac{2\pi abm}{T}\int_0^{2\pi}\frac{\varepsilon^2\sin^2\varphi}{(1+\varepsilon\cos\varphi)^2}\mathrm{d}\varphi = \frac{4\pi^2 a(a-b)\,m}{T}$$

lebo

$$\int_0^{2\pi}\frac{\varepsilon^2\sin^2\varphi}{(1+\varepsilon\cos\varphi)^2}\mathrm{d}\varphi = \frac{2\pi(a-b)}{b}$$

Podľa týchto výsledkov kvantové podmienky poskytujú pre pohyb elektrónu okolo jadra atómu rovnice:

$$n_r h = \frac{4\pi^2 a(a-b)\,m}{T} \tag{8}$$

$$n_\varphi h = \frac{4\pi^2 abm}{T} \tag{9}$$

Podľa Newtonovho gravitačného zákona zrýchlenie planéty hmoty m pri jej obiehaní okolo (nehybného) Slnka hmoty M je

$$\ddot{\boldsymbol{r}} = -\varkappa\frac{M}{r^3}\boldsymbol{r}$$

kde $\varkappa$ je gravitačná konštanta. Riešenie tejto rovnice vedie k 3. zákonu Keplerovmu (pozri čl. 2.22, diel I)

$$\frac{T^2}{a^3} = \frac{4\pi^2}{\varkappa M}$$

V rovnici (7) máme namiesto $\varkappa M$ výraz $\frac{Ze^2}{4\pi m\varepsilon_0}$. Tretí Keplerov zákon pre pohyb elektrónu okolo jadra atómu musí byť preto vyjadrený rovnicou

$$\frac{T^2}{a^3} = \frac{16\pi^3 m\varepsilon_0}{Ze^2} \tag{10}$$

Rovnice (8), (9) a (10) postačujú na vypočítanie veličín určujúcich pohyb elektrónu okolo jadra atómu.

Delením rovnice (9) rovnicou (8) plynie: $\dfrac{b}{a-b} = \dfrac{n_\varphi}{n_r}$, t. j. $\dfrac{b}{a} = \dfrac{n_\varphi}{n_r + n_\varphi} = \dfrac{k}{n}$, alebo

$$b = \frac{k}{n} a \tag{11}$$

Celé číslo $n = n_r + n_\varphi$, súčet kvantového čísla *radiálneho* a *uhlového*, volá sa *hlavné kvantové číslo*, číslo $k = n_\varphi$ je tzv. *vedľajšie kvantové číslo.*

Dosadením posledného výsledku do rovnice (9) dostávame rovnicu

$$\frac{4\pi^2 a^2 m}{T} = nh$$

ktorá spolu s rovnicou (10) dáva

$$a = \frac{n^2 h^2 \varepsilon_0}{\pi m Z e^2}, \qquad T = \frac{4 n^3 h^3 \varepsilon_0^2}{m Z^2 e^4}, \qquad b = \frac{k}{n} a \tag{12}$$

Podľa týchto vzorcov dĺžka polosi eliptickej dráhy elektrónu rastie s druhou mocninou hlavného kvantového čísla, obežná doba s jeho treťou mocninou. Vedľajšia polos eliptickej dráhy elektrónu je jednoduchým zlomkom hlavnej polosi. Pretože elektrón sa nemôže pohybovať po úsečke, lebo to znemožňuje jadro, musí byť $k = n_\varphi > 0$. S ohľadom aj na tretiu z rovníc (12) vedľajšie kvantové číslo splňuje teda podmienku $0 < k \leqq n$.

Pre $n = 1$ zo vzorcov (12) pre elektrón obiehajúci okolo jadra vodíkového atómu ($Z = 1$, $e = 1{,}602 \,.\, 10^{-19}$ AS, $m = 9{,}109 \,.\, 10^{-31}$ kg, pozri čl. 5.6; $h = 6{,}625 \,.\, 10^{-34}$ joule s, $\varepsilon_0 = 8{,}854 \,.\, 10^{-12}$ farad m^{-1}) vychádza:

$$a_1 = \frac{h^2 \varepsilon_0}{\pi m e^2} = 5{,}28 \,.\, 10^{-11}\ \text{m} \doteq 0{,}53 \,.\, 10^{-8}\ \text{cm}$$

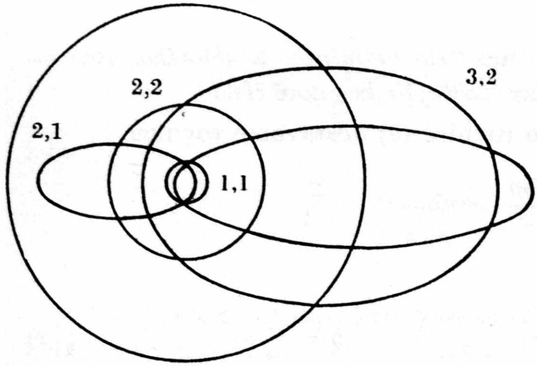
$$T_1 = \frac{4 h^3 \varepsilon_0^2}{m e^4} = 1{,}52 \,.\, 10^{-16}\ \text{s}$$

$$b_1 = a_1 = 0{,}53 \,.\, 10^{-8}\ \text{cm}$$

$$\nu_1 = \frac{1}{T_1} = 6{,}58 \,.\, 10^{15}\ \text{s}^{-1}$$

Tie isté veličiny, vzťahujúce sa na dráhy určené kvantovými číslami n a k sú: $a_n = n^2 a_1$, $T_n = n^3 T_1$, $b_{n,k} = \dfrac{k}{n} a_n = k n a_1$, $\nu_n = \nu_1 / n^3$. Ich tvary a pomerné veľkosti sú znázornené na *obr. 17.1*, na ktorom každá dráha je označená obidvoma svojimi kvantovými číslami: n a k. Napríklad dráha 3,2 je dráha určená hlavným kvantovým číslom $n = 3$ a vedľajším kvantovým číslom $k = 2$.

Podľa 3. Bohrovho predpokladu atóm vyžaruje energiu v podobe fotónu, len keď jeho elektrón prechádza z niektorej svojej možnej dráhy na inú, na ktorej sa sústava jadro—elektrón vyznačuje menšou energiou. Aby sme mohl počítať frekvencie takto vznikajúceho žiarenia, zatiaľ v prípade vodíkového atómu a jemu podobných iónov, musíme nájsť vyjadrenie energie takýchto sústav ako funkcie príslušných kvantových čísiel. Za predpokladu, ktorého sa stále držíme, že atómové jadro sa nepohybuje, táto energia rovná sa súčtu polohovej a pohybovej energie len okolo jadra krúžiaceho elektrónu, ktorá podľa 2. Bohrovho predpokladu na určitej možnej dráhe elektrónu je konštantná. Jej vyjadrenie pomerne najľahšie nájdeme, ak si elektrón predstavíme v perihéliu, t. j. v zmysle rovnice (a) pre $\varphi = 0$, keď $r = r_0 = \dfrac{b^2}{a(1+\varepsilon)}$, $\dot{\varphi}_0 = \dfrac{2\pi ab}{Tr_0^2}$ a $v_0 = \dot{\varphi}_0 r_0$.



Obr. 17.1.

V tejto polohe elektrónu jeho polohová energia je

$$U_{n,k} = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0}$$

a energia pohybová

$$K_{n,k} = \frac{1}{2}mv_0^2 = \frac{1}{2}m\dot{\varphi}_0^2 r_0^2 = \frac{1}{2}m\frac{4\pi^2a^2b^2}{T^2r_0^2} = \frac{1}{2}\frac{Ze^2(1+\varepsilon)}{4\pi\varepsilon_0 r_0}$$

ak sme obežnú dobu T vyjadrili pomocou vzorca (10) a za $\dfrac{b^2}{r_0}$ napísali $a(1+\varepsilon)$. Súčet obidvoch foriem energie je

$$E_{n,k} = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0}\left(\frac{1+\varepsilon}{2} - 1\right) = \frac{Ze^2}{8\pi\varepsilon_0 b^2}a(1+\varepsilon)(\varepsilon - 1) =$$

$$= \frac{Ze^2}{8\pi\varepsilon_0 b^2}a(\varepsilon^2 - 1) = \frac{Ze^2}{8\pi\varepsilon_0 b^2}a\left(\frac{a^2-b^2}{a^2} - 1\right) = -\frac{Ze^2}{8\pi\varepsilon_0 a}$$

alebo, keď použijeme aj prvý zo vzorcov (12)

$$E_{n,k} = -\frac{Z^2e^4m}{8\varepsilon_0^2n^2h^2} \tag{13}$$

Podľa tohto vzorca energia vodíkového atómu a jemu podobných iónov, keď ich elektrón sa nachádza na dráhe určenej hlavným kvantovým číslom n a vedľajším kvantovým číslom k, závisí len od hlavného kvantového čísla, a nie aj od vedľajšieho. Po zavedení veličiny

$$N = \frac{e^4 m}{8\varepsilon_0^2 h^3} \doteq 3{,}29 \,.\, 10^{15}\ \mathrm{s}^{-1}$$

ktorá sa nazýva *Rydbergovým kmitočtom*, vzorec (13) môžeme napísať v zjednodušenom tvare (index k v označení energie sústavy jadro—elektrón vo vzorcoch, ktoré teraz budú nasledovať, pre práve pripomenutú príčinu nebudeme písať):

$$E_n = -\frac{Z^2 N h}{n^2} \tag{14}$$

Podľa tohto výsledku a v zmysle 3. Bohrovho predpokladu frekvencia ν elektromagnetického žiarenia, ktoré vydáva napríklad vodíkový atóm pri samovoľnom prechode svojho elektrónu z jeho n-kvantovej dráhy na m-kvantovú ($m < n$), je určená rovnicou

$$h\nu = -\Delta E = E_n - E_m = Nh\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right)$$

takže

$$\nu = N\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right) \tag{15}$$

Pretože frekvencia elektromagnetického vlnenia vyžarovaného atómami býva číselne veľmi veľká, v spektroskopickej praxi namiesto frekvencie ν sa obyčajne udáva tzv. *vlnopočet* $\varrho = \frac{1}{\lambda}$, kde λ je vlnová dĺžka vlnenia vo vákuu. Takto definovaný vlnopočet sa číselne rovná počtu vĺn pripadajúcich vo vákuu na jednotku dĺžky. Podľa vzorca (15) v prípade vodíkového atómu tento vlnopočet je

$$\varrho = \frac{1}{\lambda} = \frac{1}{cT} = \frac{\nu}{c} = \frac{N}{c}\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right) = R\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right) \tag{16}$$

Konštanta

$$R = \frac{N}{c} = \frac{e^4 m}{8\varepsilon_0^2 h^3 c} \tag{17}$$

volá sa *Rydbergov vlnopočet*. Pri používaní dnešných najpresnejších hodnôt univerzálnych konštánt, ktoré vystupujú vo vzorci (17), pre Rydbergov vlnopočet vychodí:

$$R = 109\,737{,}3\ \mathrm{cm}^{-1} \tag{18}$$