

Klassisk ustabilitet i hydrogenatomet og bohrmodellen

PETER PANUM KJELDSEN, Rosborg Gymnasium & HF

Atomets ustabilitet i klassiske fysik

Fra Maxwells ligninger kan man beregne, at en accelereret ladning udsender elektromagnetisk stråling med effekten

$$P_{\text{stråling}} = \frac{e^2}{6 \cdot \pi \cdot \epsilon_0 \cdot c^3} \cdot a^2$$

hvor a er accelerationen – Larmors formel.

Med et effekttab til strålingsudsendelse er det ikke overraskende, at atomet er ustabilt og kolliderer, da elektronens cirkelbevægelse omkring protonen fordrer accelereret bevægelse. For hydrogenatomet kan levetiden klassisk estimeres til ca. 10^{-11} s, hvilket naturligvis er i direkte modstrid med virkeligheden, hvor atomet er stabilt.

På den baggrund er det klart, at klassisk fysik er utilstrækkelig til at forklare atomet, og at Bohrs radikale postulat om såkaldte stationære tilstande fjerner problemet formelt. Omvendt er det jo samtidig et næsten provokerende postulat, idet Newtons og Maxwells teorier på dette tidspunkt repræsenterede det ypperste, fysikken havde frembragt til dato.

Dette element af naturvidenskabens metode, hvor veletableret teori må vige for nye ideer og eksperimentelle resultater, er et smukt eksempel på videnskabens fremadskridende udvikling og antidogmatisk natur.

Samtidig illustrerer det, hvor forvirrende og til tider modsætningsfuld naturvidenskaben kan være, for der skulle gå omtrent 10 år før det atomare (ikke-)kollaps fik en forklaring ved det såkaldte ubestemthedsprincip. Et princip, der i dag ca. 100 år senere fortsat deler alverdens fysikere, når det kommer til en fortolkning af princippet.

Atomets levetid – klassisk

I modellen antages elektronen at cirkulere omkring protonen i cirkelbaner, hvor coulombkraften leverer den nødvendige centripetalkraft. Centripetalaccelerationen i afstanden r er derfor givet ved

$$a_\theta = \frac{F_{\text{Coulomb}}}{m_0} = k_C \cdot \frac{e^2}{r^2 \cdot m_0}$$

Samtidig med denne cirkelbevægelse, falder elektronen ”langsomt” radiale mod kernen som følge af strålingsudsendelsen. Man skal altså forestille sig en ekstremt hurtigt kredsende elektron i en cirkulære bane, der langsomt i sammenligning med omløbstiden gradvist kommer tættere og tættere på kernen, eller alternativt, at elektronen kredser et stort antal gange rundt om kernen i næsten samme afstand. Med disse antagelser gælder, at: $a \cong a_\theta$. Adiabatisk tilnærmelse.

Indsættes derfor udtrykket for centripetalaccelerationen i Larmors formel fås

$$\begin{aligned} P_{\text{stråling}} &= \frac{e^2}{6 \cdot c \cdot \pi \cdot \epsilon_0 \cdot c^3} \cdot a^2 \\ &\cong \frac{e^2}{6 \cdot c \cdot \pi \cdot \epsilon_0 \cdot c^3} \cdot \left(\frac{k_C \cdot e^2}{m_0 \cdot r^2} \right)^2 \\ &= \frac{e^6}{6 \cdot 16 \cdot \pi^3 \cdot \epsilon_0^3 \cdot c^3 \cdot m_0^2} \cdot \frac{1}{r^4} \end{aligned}$$

For cirkelbevægelse i Coulombfeltet gælder, at

$$E_{\text{mek}} = -k_C \cdot \frac{e^2}{2 \cdot r}$$

og heraf fås, at ændringen af den mekaniske energi per tid er

$$\frac{d}{dt} E_{\text{mek}} = \frac{d}{dt} \left(-k_C \cdot \frac{e^2}{2 \cdot r} \right) = k_C \cdot \frac{e^2}{2 \cdot r^2} \cdot \frac{dr}{dt}$$

Bemærk, at $\frac{d}{dt} E_{\text{mek}} < 0$, da r aftager, dvs. $\frac{dr}{dt} < 0$.

Energien af den udsendte elektromagnetiske stråling tages fra atomets mekaniske energi, hvorfor Larmors formel kan sættes lig med minus ændringen af den mekaniske energi:

$$-k_C \cdot \frac{e^2}{2 \cdot r^2} \cdot \frac{dr}{dt} = \frac{e^6}{6 \cdot 16 \cdot \pi^3 \cdot \epsilon_0^3 \cdot c^3 \cdot m_0^2} \cdot \frac{1}{r^4}$$

Efter en del reduktioner kan differentialligningen omskrives til

$$-4 \cdot r_0^2 \cdot c = \frac{d}{dt} (r^3), \quad \text{med} \quad r_0 = \frac{1}{4 \cdot \pi \cdot \epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{m_0 \cdot c^2} \quad 1)$$

og løsningen findes:

$$r(t)^3 = a_0^3 - 4 \cdot r_0^2 \cdot c \cdot t$$

– med elektronen i grundtilstanden i afstanden én bohrradius, a_0 , til tiden $t = 0$.

Faltdiden for elektronen fra grundtilstanden ind til protonen fås nu ved at løse ligningen ²⁾

$$r(t_{\text{fald}})^3 = a_0^3 - 4 \cdot r_0^2 \cdot c \cdot t_{\text{fald}} = 0 \Leftrightarrow t_{\text{fald}} = \frac{a_0^3}{4 \cdot r_0^2 \cdot c}$$

Indsættes talværdier fås:

$$\begin{aligned} t_{\text{fald}} &= \frac{a_0^3}{4 \cdot r_0^2 \cdot c} \\ &= \frac{(0,53 \cdot 10^{-10} \text{ m})^3}{4 \cdot (2,8 \cdot 10^{-15} \text{ m})^2 \cdot 3,0 \cdot 10^8 \frac{\text{m}}{\text{s}}} \\ &= 1,6 \cdot 10^{-11} \text{ s} \end{aligned}$$

Modelovervejelser

Med udtrykket for den radiale afstand $r(t) = a_0 \cdot \left(1 - \frac{t}{t_{\text{fald}}}\right)^{1/3}$

er det nu muligt at vurdere den adiabatiske tilnærmelse. Ved differentiation med hensyn til tiden fås den radiale hastighed

$$v_r(t) = \frac{d}{dt} r(t) = -v_k \cdot \frac{1}{\left(1 - \frac{t}{t_{\text{fald}}}\right)^{2/3}}$$

$$\text{hvor } v_k = \frac{1}{3} \cdot \frac{a_0}{t_{\text{fald}}}$$

og ved endnu en differentiation den radiale acceleration

$$a_r(t) = \frac{d}{dt} v_r(t) = -a_k \cdot \frac{1}{\left(1 - \frac{t}{t_{\text{fald}}}\right)^{5/3}}$$

$$\text{hvor } a_k = \frac{2}{3} \cdot \frac{v_k}{t_{\text{fald}}} = \frac{1}{9} \cdot \frac{2 \cdot a_0}{t_{\text{fald}}^2}$$

Beregningerne anviser dels en karakteristisk radialhastighed, $v_k =$

$$\frac{1}{3} \cdot \frac{0,53 \cdot 10^{-10} \text{ m}}{1,6 \cdot 10^{-11} \text{ s}} \cong 1 \frac{\text{m}}{\text{s}} \text{ og en tilsvarende karakteristisk radial-}$$

$$\text{acceleration, } a_k = \frac{2}{3} \cdot \frac{1,1 \frac{\text{m}}{\text{s}}}{1,6 \cdot 10^{-11} \text{ s}} = 5 \cdot 10^{10} \frac{\text{m}}{\text{s}^2}.$$

Begge størrelser er helt ubetydelige i sammenligning med de tilsvarende azimuthale størrelser i grundtilstanden: $v_\theta = 2,2 \cdot 10^6 \text{ m/s}$ og $a_\theta = 9,0 \cdot 10^{22} \text{ m/s}^2$, og de opnåede resultater er derfor konsistente med den adiabatiske tilnærmelse.

Omvendt gælder der for både den radiale hastighed og acceleration, at de går mod uendelig, når tiden t nærmer sig faldtiden, t_{fald} , hvilket naturligvis er ufysisk.

Heldigvis for beregningen kan man vise, at elektronen på det tidspunkt, hvor modellen bryder sammen, allerede har tilbagelagt mere end 99 % af faldvejen, hvorfor estimatet for faldtiden fortsat holder.

For den azimuthale fart gælder, at:

$$F_{\text{Coulomb}} \cong F_C \Leftrightarrow v_\theta^2 \cong \frac{k_C \cdot e^2}{m_0 \cdot r}$$

og dermed skalerer omløbstiden med den radiale afstand som:

$$T = \frac{2 \cdot \pi \cdot r}{v_\theta} \propto \frac{r}{\sqrt{r}} = \sqrt{r}$$

Det betyder, at vinkelhastigheden $\omega = 2 \cdot \pi \cdot \frac{1}{T} \propto \frac{1}{\sqrt{r}} \rightarrow \infty$, når

tiden t nærmer sig faldtiden t_{fald} med det forbehold, at modellen dog bryder sammen inden. Denne observation har stor

betydning i den klassiske forståelse af atomet, som det forklares nedenfor.

Elektromagnetisk strålingsudsendelse

Strålingsudsendelse fra en accelereret ladning i grænsen for ikke relativistiske hastigheder beregnes for det elektriske felt ved formen³⁾:

$$\vec{E} \cong k_C \cdot \frac{e}{c} \cdot \left[\frac{\vec{n} \times \left(\vec{n} \times \frac{d}{dt} \vec{\beta} \right)}{R} \right]$$

hvor \vec{n} er en enhedsvektor i retning af observatøren, $\vec{\beta} = \frac{\vec{v}}{c}$, og R er afstanden fra origo til observatøren.

Hvis koordinatsystemet vælges sådan, at protonen befinder sig i origo, og elektronen cirkulerer omkring protonen i x - y -planen i en afstand r og med positiv omløbsretning⁴⁾, kan det frembragte elektriske felt i afstanden R på eksempelvis y -aksen bestemmes til

$$\vec{E}(0, R, 0, t) = \frac{k_C \cdot e \cdot \omega^2}{c^2} \cdot \left(\frac{r}{R} \right) \begin{pmatrix} \cos(\omega \cdot t) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Det tilhørende magnetiske felt er givet ved formen $\vec{B} = \frac{1}{c} \cdot \vec{n} \times \vec{E}$ og beregnes til

$$\vec{B}(0, R, 0, t) = -\frac{k_C \cdot e \cdot \omega^2}{c^3} \cdot \left(\frac{r}{R} \right) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \cos(\omega \cdot t) \end{pmatrix}$$

Hermed ser man, at det elektromagnetiske felt overtager vinkelhastigheden ω for elektronens bevægelse omkring protonen som (strålings-)vinkelfrekvens ω .

Dermed er både periode T og frekvens f for den udsendte stråling af præcis samme størrelse som periode og omløbsfrekvens for elektronens omløb omkring protonen. Dette er et vigtigt klassiske resultat.

I modellen for det atomare kollaps medfører det nemlig, at frekvensen af den udsendte stråling vil vokse i takt med, at omløbsfrekvensen for elektronen vokser, og faktisk vokse mod uendelig!

I et klassisk atomart kollaps vil man derfor forvente et kontinuum af strålingsfrekvenser i skarp kontrast til det diskrete linjespektrum, man observerer.

For at opsummere finder man altså i den klassiske fysik, at hydrogenatomet er ustabil og kolliderer med en levetid omkring ca. 10^{-11} s og, at der i kollapset udsendes et kontinuum af strålingsfrekvenser. I virkeligheden er atomet stabilt og udsender kun et diskret linjespektrum med nogle meget veldefinerede frekvenser givet ved rydbergformlen.

Noget var derfor helt forkert, og et radikalt brud med klassisk fysik uundgåeligt. Det diskrete spektrum kunne forklares med Bohrs kvantehypoteser, men spørgsmålet om den grundlæggende forklaring bag stabilitet og stationære tilstande manglede kritisk.

Kvantemekanik – moderne fysik

At den klassiske fysik brød sammen i atomernes verden var et kæmpe chok for datidens fysikere, og denne opdagelse skulle vise sig at ændre fysikken radikalt. I årene fra 1911 og frem til slutningen af 1920'erne arbejdede fysikerne intenst på at finde en ny mekanik, den såkaldte kvantemekanik, der skulle erstatte den newtonske mekanik i atomernes verden. I dette arbejde var Niels Bohr en central person, der i sit nyoprettede Institut for Teoretisk Fysik i 1921 (senere Niels Bohr Institutet) på Blegdamsvej i København samlede alverdens bedste fysikere. Blandt disse var særligt en tysk fysiker ved navn Werner Heisenberg, der formulerede det såkaldte ubestemthedsprincip. Ubestemthedsprincippet beskriver en dyb erkendelse om naturen, som radikalt strider mod kendte klassiske begreber og almindelig sund fornuft om position og fart af et objekt.

I den makroskopiske verden kan position og fart bestemmes vilkårligt nøjagtigt, hvilket betyder, at begrebet en bane giver mening. Tænk blot på en fartkontrol, der utvetydigt fortæller, at du (måske) kørte for stærkt den pågældende dag det pågældende sted.

I den klassiske beskrivelse af hydrogenatomet antages elektronen eksempelvis at følge en cirkulær bane, hvor position og fart til ethvert tidspunkt er fuldstændigt kendte. Dette, sagde Heisenberg, er principielt umuligt, da et fuldstændigt kendskab til eksempelvis position, betyder en fuldstændigt ukendt fart og omvendt.

Ingen objekter kan dermed beskrives fuldstændigt med en præcis angivelse af både position og fart på et bestemt tidspunkt, og dermed er begrebet en bane værdiløst. Både position x og fart v har begge tilknyttet en ubestemthed, der benævnes henholdsvis Δx og Δv , og ifølge Heisenberg gælder, at

$$m \cdot \Delta x \cdot \Delta v \geq \frac{h}{2\pi} = \hbar$$

hvor h er Plancks konstant givet ved $h = 6,63 \cdot 10^{-34}$ J·s. Da h er meget lille, og m typisk stor i den makroskopiske verden, er

$\Delta x \cdot \Delta v \geq \frac{h}{m} \approx 0$. Det betyder, at ubestemtheden af henholdsvis position og fart i den makroskopiske verden er så ufatteligt små, at både position og fart kan bestemmes med tilstrækkelig stor præcision til at banebegrebet alligevel opretholdes, hvilket en rigtig fartbøde jo er et godt bevis på.

I den atomare verden derimod, hvor m er lille, er ubestemtheden på position og fart til gengæld så betydelige, at banebegrebet må opgives. I ovenstående analyse af hydrogenatomet og elektronens spiralbevægelse mod protonen og det atomare kollaps, er problemet altså, at beskrivelsen bryder med Heisenbergs ubestemthedsprincip, og derfor står ingen af de beregnede resultater til troende. Alt har været forgæves ifølge Heisenberg.

For at argumentere for dette, betragter vi endnu en gang banebeskrivelsen som tidligere beskrevet. Her fandt vi, at

$$v_\theta \cong \sqrt{\frac{k_C \cdot e^2}{m_0}} \cdot \frac{1}{\sqrt{r}}$$

Hvis man sætter ubestemtheden for positionen lig med r , og tilsvarende ubestemtheden for farten lig med v_θ , finder man følgende foruroligende resultat:

$$\begin{aligned} m_0 \cdot \Delta x \cdot \Delta v &\approx m_0 \cdot r \cdot \sqrt{\frac{k_C \cdot e^2}{m_0}} \cdot \frac{1}{\sqrt{r}} \\ &= \sqrt{k_C \cdot e^2 \cdot m_0} \cdot \sqrt{r} \rightarrow 0 \text{ for } r \rightarrow 0 \end{aligned}$$

Men det er jo forbudt ifølge Heisenbergs ubestemthedsrelation. Interessant er det derfor at undersøge, hvilken radius r , der er den mindste tilladte under hensyntagen til ubestemthedsrelationen, altså:

$$m_0 \cdot \Delta x \cdot \Delta v \cong \hbar$$

Som beregningen viser, er denne afstand netop bohradius:

$$\begin{aligned} \sqrt{k_C \cdot e^2 \cdot m_0} \cdot \sqrt{r} &\cong \hbar \Leftrightarrow \\ r &\cong \frac{\hbar^2}{k_C \cdot e^2 \cdot m_0} \\ &= \frac{(1,0546 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s})^2}{8,9877 \cdot 10^9 \text{ N} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{C}^{-2} \cdot (1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C})^2 \cdot 9,11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}} \\ &= 0,53 \cdot 10^{-10} \text{ m} = a_0 \end{aligned}$$

Bohrradius og dermed grundtilstanden i hydrogenatomet definerer således den mindste tilladte afstand for elektronen, og hermed er et atomart kollaps forhindret. Et sådant kollaps ville bryde med Heisenbergs ubestemthedsprincip, og det er ikke tilladt ifølge Heisenberg.

At elektronen så alligevel kan befinde sig tættere end bohrradius fra protonen, er en anden historie, der som det nok er klart for læseren, kræver en kvantemekanisk beskrivelse af atomet. Denne beskrivelse er kompliceret og efterlades derfor til et senere fysikstudium på universitet. Glæd dig!

Litteratur

James D. Olsen and Kirk T. McDonald, *Classical Lifetime of a Bohr Atom*. Joseph Henry Laboratories, Princeton University, Princeton, NJ 08544. March 7, 2005; Updated May 30, 2017.

Noter

¹⁾ Kaldet den klassiske elektronradius, der dog intet har at gøre med elektronens reelle størrelse, se gabrielse.physics.harvard.edu/gabrielse/overviews/ElectronSubstructure/ElectronSubstructure.html

²⁾ Strengt taget ikke til afstanden 0 men derimod protonradius af størrelse 10^{-15} m.

³⁾ Strålingsudsendelse fra en accelereret ladning tager udgangspunkt i Liénard–Wiechert potentialerne, der indsat i maxwellligningerne giver det elektriske og det magnetiske felt, der udsendes fra ladingen som stråling.

$$^4) \vec{r}(t) = r \cdot \begin{pmatrix} \cos(\omega \cdot t) \\ \sin(\omega \cdot t) \\ 0 \end{pmatrix} = r \cdot \vec{e}_r.$$

Bohrmodellen og korrespondensprincippet

PETER PANUM KJELDSEN, Rosborg Gymnasium & HF

Introduktion

I det følgende tages udgangspunkt i Bohrs atommodel, og der udledes et udtryk for bohrradius og rydbergkonstanten ved naturkonstanter i en semi-klassisk model af hydrogenatomet. Udledningen af formelen for rydbergkonstanten hviler på Bohrs korrespondensprincip om overensstemmelse mellem den nye og gamle fysik under passende omstændigheder. Disse omstændigheder er de såkaldte *rydbergtilstande*.

I Maxwells teori er elektrisk ladning kilde til det elektromagnetiske felt. Hvis ladningen udfører en jævn cirkelbevægelse udsendes et periodisk varierende elektromagnetisk felt med en frekvens lig med omløbsfrekvensen. Det elektromagnetiske felt overtager således i klassisk teori ladningens omløbsfrekvens. I Bohrs atommodel er det derimod ikke elektronens kredsen omkring protonen, der giver anledning til lysemission, men kvantespring imellem såkaldte stationære tilstande.

For rydbergtilstande gælder, at omløbsfrekvensen for to nabo-tilstande er næsten ens. Dermed er det udsendte elektromagnetiske felt klassisk veldefineret, ligesom kvanteteorien forudsiger fotonens frekvens for overgangen imellem de to tilstande. Hermed opfylder rydbergtilstande Bohrs korrespondensprincip, og det klassiske og det kvantemekaniske resultat bør være ens ifølge Bohr.

Bohrmodellen og kvantisering af afstande

Fra bohrmodellen er energien af den n 'te tilstand givet ved

$$E_n = -h \cdot c \cdot R \cdot \frac{1}{n^2}$$

hvor R er rydbergkonstanten $R = 1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$, og n er hovedkvantetallet og samtidig banens nummer.

Energien, og dermed frekvensen, af den udsendte foton findes ifølge bohrmodellen som energiforskellen mellem de to kvantetilstande, som elektronen hopper fra og til:

$$E_{\text{foton}} = h \cdot f = E_n - E_m = h \cdot c \cdot R \cdot \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

Fra klassiske fysik fås, at den mekaniske energi af hydrogenatomet med elektronen i afstand r fra protonen er

$$E_{\text{mek}} = -k_C \cdot \frac{e^2}{2 \cdot r}$$

hvilket i kombination med energiniveauligningen giver et udtryk for radius r :

$$E_{\text{mek}} = E_n \Leftrightarrow -k_C \cdot \frac{e^2}{2 \cdot r} = -h \cdot c \cdot R \cdot \frac{1}{n^2} \cdot r = \frac{k_C \cdot e^2}{2 \cdot h \cdot c \cdot R} \cdot n^2$$