# ЧАСТОТНЫЙ АНАЛИЗ ОПТИЧЕСКИХ СПЕКТРОВ АТОМОВ И САМИХ АТОМОВ

А.С. Чуев (chuev@mail.ru)

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва

УДК 535.538.33

*Аннотация*: Диаграммы Гротриана, используемые в оптической спектроскопии, имеют инверсное изображение электронных энергетических уровней. В спектроскопии такое допустимо, однако инверсное изображение энергетических уровней извращает или, как минимум, затемняет создание верного физического представления о строении атомов. С позиций частотного метода спектральные линии излучения и поглощения представляют собой биения частот электронов, располагаемых на разных пузыревидных оболочках. При этом частотные соотношения электронов целочисленные, а частотные соотношения оболочек, на которых располагаются электроны, квадратичные. В рассматриваемой модели электронные оболочки представляются пузыревидными, а ядро атома представляется в виде каплеобразного образования, из которого и возникает электронная оболочка. Процесс излучения и поглощения фотонов видится происходящим не внутри одного атома, а в системе соседних атомов. Частотный метод дает хорошую сходимость теоретических и экспериментальных данных для простейших водородоподобных и некоторых других типов многоэлектронных атомов.

*Ключевые слова*: Оптические спектры, структура спектров, строение атома, частотный анализ.

*Keywords*: Optical spectra, the structure of the spectra, the structure of the atom, the frequency analysis

*Истина всегда оказывается проще,*
*чем можно было бы предположить.*
Р. Фейнман

## ВВЕДЕНИЕ

Данная публикация является переработкой публикации автора 2013 года [1] с внесением существенных изменений и добавлений материала.

Очевидно, что структура строения атомов или их систем находит прямое и непосредственное отражение в структуре оптических спектров атомов, индивидуальных для каждого сорта атома или иона. С этим положением согласны практически все ученые, но имеются разные трактовки и представления о механизме образования излучательных и поглощательных спектров, а также взаимосвязи друг с другом указанных двух структур. Структуры оп-

тических спектров веществ на сегодня хорошо известны и наблюдаемы. Правда, даже для самого простого атома – водорода, спектральная структура представляется довольно сложным образованием и это вызывает большие сомнения в её истинности.

Хорошо известно, что любая спектральная линия представима в виде разности двух частотных термов. Это указывает на происхождение электромагнитных волн, избирательно излучаемых и поглощаемых атомами, как биений более высокочастотных колебаний, присущих атомам. На этом основании большинство ученых склонны считать оптические частотные спектры отражением колебательных процессов, происходящих внутри отдельного атома, хотя в работе [2] Керн Йохан предложил другое толкование спектра изучения – как излучения системой атомов или молекул. Попробуем, насколько это возможно, прояснить данный вопрос с позиций частотного анализа спектральных линий. Исследование будем вести с использованием диаграмм Гротриана [3], обеспечивающих наглядность представления изучаемой области.

## 1 АНАЛИЗ СТРУКТУРЫ СПЕКТРАЛЬНЫХ ЛИНИЙ АТОМА ВОДОРОДА

Анализ начнем с рассмотрения энергетики строения атома. Классическая электронно-ядерная модель атома исходит из того, что электроны входят в состав атома, причем высокоэнергетические электроны расположены «в глубине» атома. На рис.1 приведена энергетическая диаграмма спектра наиболее простого атома - водорода.

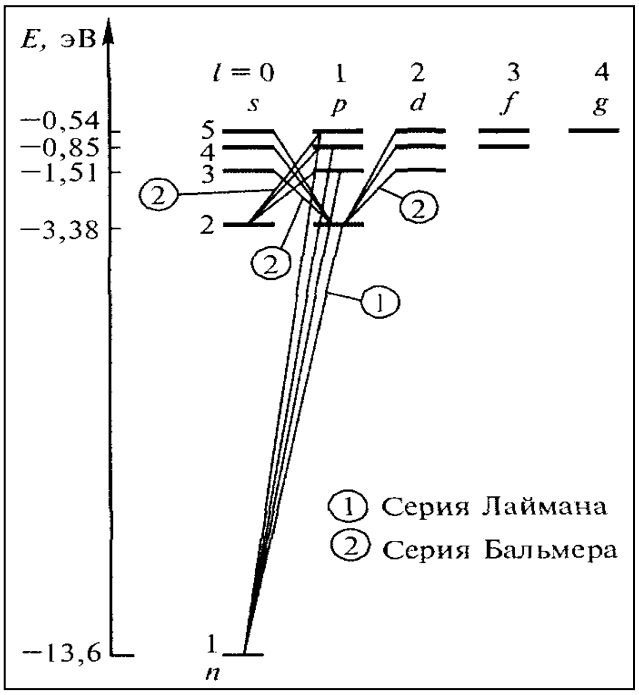


Рис.1. Диаграмма образования спектральных линий для атома водорода

В отличие от изображения рис. 1 диаграммы Гротриана (рис. 2), применяемые в оптической спектроскопии, имеют инверсное изображение электронных энергетических уровней.

Величина энергии ионизации считается положительной и приписывается предельному уровню, к которому стремятся все верхние энергетические уровни. Такое изображение в спектроскопии, думается, вполне возможно и допустимо. Однако этот прием в изображении энергетических уровней не соответствует частотным представлениям, согласно которым частоты оптического спектра представляют собой биения более высокочастотных колебаний, принадлежащим электронам или иным структурам атома. Тем самым затрудняется создание более или менее верных физических представлений о строении атомов.

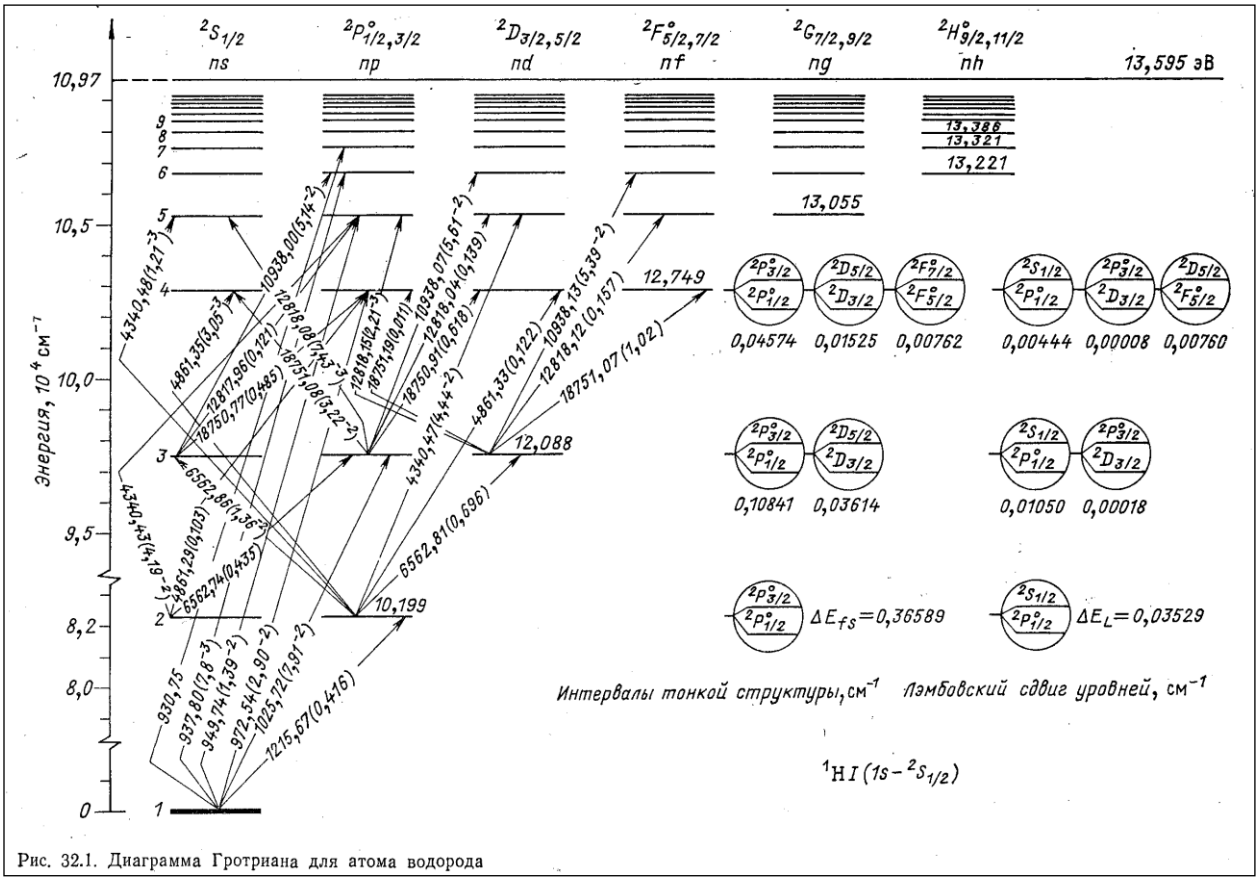


Рис. 2. Традиционное в спектроскопии представление диаграммы образования спектральных линий на примере атома водорода

Выше сказанное важно по следующим соображениям. Принято считать, что энергетические уровни рис. 1 соответствуют энергии *одного и того же* электрона атома, оказывающегося в данных энергетических состояниях до (или после) излучения или поглощения фотона. С точки зрения частотных представлений б*о*льшие значения энергии соответствуют и б*о*льшим частотам. Поэтому обозначения энергетических уровней на привычных диаграммах Гротриана явно не соответствуют физике наблюдаемых процессов.

Частотные спектральные линии, отражающие процессы излучения и поглощения атомом электромагнитных волн, объясняются известным в природе явлением биения волн. Мысль о частотных биениях, приводящих к излучению атомами электромагнитных волн, высказывалась и ранее [4, стр. 486], но применительно к структуре оптических спектров ато-

мов и анализу строения самих атомов эта мысль должного развития не получила. Частотный подход к анализу строения атомов использует в своих работах О.Г. Верин [5, 6], но широкого признания его работы пока не получили.

Нормальное (не инверсное) изображение энергетических уровней для электрона атома водорода с соответствующими этим уровням дебройлевскими частотами приведено на рис. 3. Здесь первому энергетическому уровню с энергией, равной энергии ионизации (13,595 эВ) соответствует частота колебаний $\omega_1 = \frac{E_1}{\hbar} = 2{,}065 \cdot 10^{16}$ с$^{-1}$. Это значение частоты для ионизированного атома водорода максимальное, если его разделить на $2\pi$, то получится частотная постоянная Ридберга $R_\omega$, справочное значение для которой составляет $3{,}289841960 \cdot 10^{15}$ Гц. В наших расчётах значение частоты $R_\omega = 2\pi\omega_R = 3{,}2865 \cdot 10^{15}$ Гц. Здесь и далее частоты, соответствующие энергетическим уровням $n$ будем обозначать так: $\omega_n$.

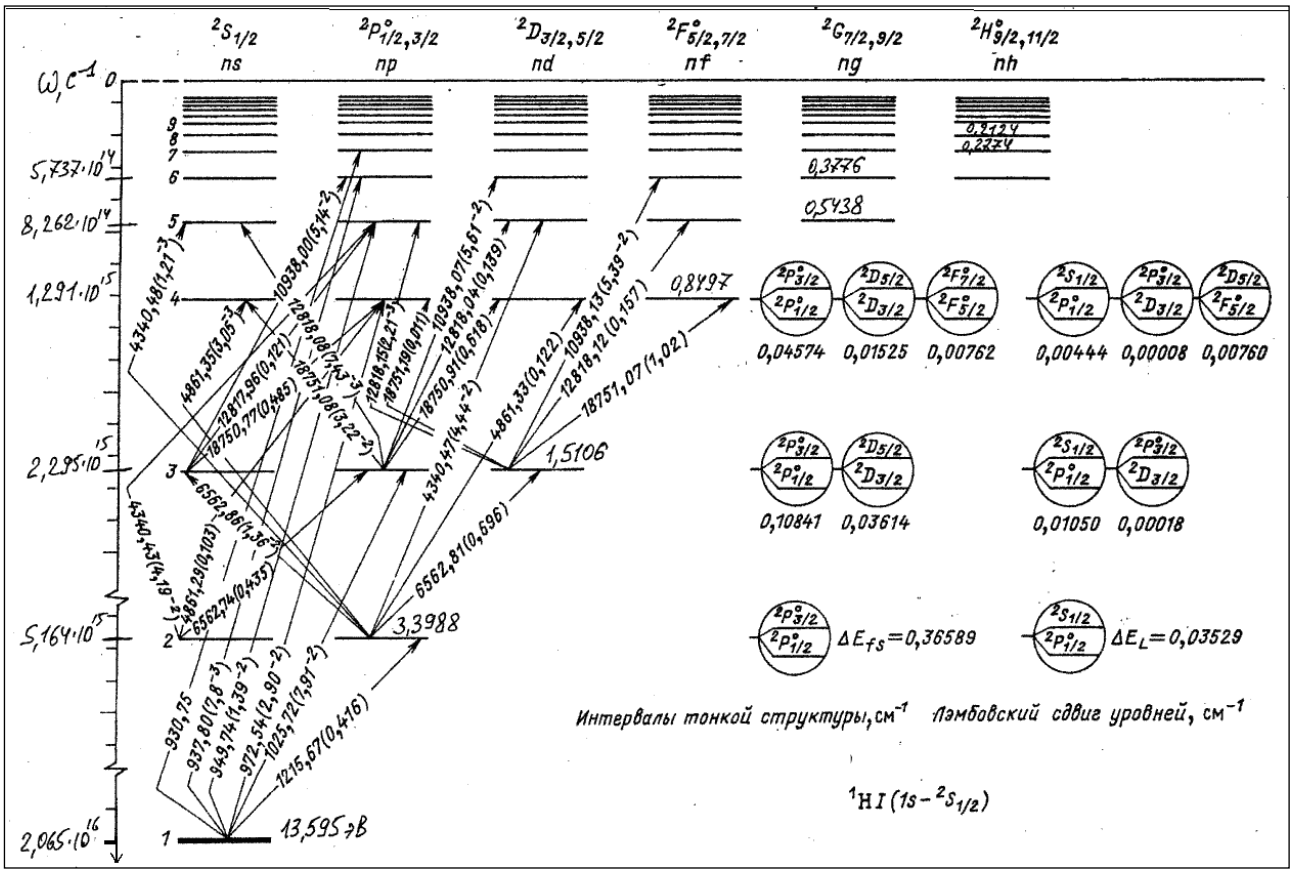


Рис. 3. Диаграмма для атома водорода в частотном представлении с показом действительных значений энергетических уровней.

По характеру расположения энергетических уровней рис. 3 нетрудно заметить определенную геометрическую закономерность в их размещении и в их числовых данных. Энергии и частоты приводимых уровней отличаются на квадрат номера уровня. Стрелочные обозначения межуровневых переходов на рис. 2 и рис. 3 содержат числовые данные (в ангстремах) по длине волны фотона соответствующего энергетического (частотного) перехода.

Длина волны и разность частотных уровней *n* и *k* связаны соотношением $\Delta\omega_{n,k} = 2\pi c/\lambda_i$. Таким образом, в излучении и поглощении фотонов мы, очевидно, имеем дело с биением частот, принадлежащих электронным оболочкам двух разных состояний одного атома (это общепринято) или разных атомов [2].

В табл. 1 приведены расчетные данные применительно к изменённой нами диаграмме Гротриана рис. 3. Для справки в таблице приведены значения разности энергий, чего нет на рис. 2 и рис. 3. Эти разности оказываются точно совпадающими с разностью энергетических уровней, если их определять и по диаграмме рис. 2. Совпадение расчетных данных табл. 1 с данными диаграммы Гротриана по рис. 2 и нашей диаграммой по рис.3 - идеальное.

Таблица 1.

Таблица Excel по расчету спектральных линий атома водорода при инверсном (энергетическом) и частотном представлении диаграммы Гротриана.

E8 =E7*E1/H1

| | A | B | C | D | E | F | G | H | I | J | K | L |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | | | 1,884E+09 | | 1,60E-19 | | | 1,05E-34 | 1,99E-25 | | | |
| 2 | | **Атом** | | | | | | | | | | |
| 3 | | **водорода** | 13,595 | | | | | | | | | |
| 4 | 1 | $1^2S - n^2P$ | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | N | lim |
| 5 | | E*справ, эВ | 0 | 10,199 | 12,088 | 12,749 | 13,055 | 13,221 | 13,321 | 13,386 | | 13,595 |
| 6 | | E*расч, эВ | 0 | 10,196 | 12,084 | 12,745 | 13,051 | 13,217 | 13,318 | 13,383 | X6=C3-C3/$N^2$ | 13,595 |
| 7 | | Едейств, эВ | 13,595 | 3,3988 | 1,5106 | 0,8497 | 0,5438 | 0,3776 | 0,2774 | 0,2124 | C3/$N^2$ | |
| 8 | | ω, $c^{-1}$ | 2,065E+16 | 5,164E+15 | 2,295E+15 | 1,291E+15 | 8,262E+14 | 5,737E+14 | 4,215E+14 | 3,227E+14 | ω=X7*E1/H1 | |
| 9 | | δE, эВ | | 10,196 | 12,084 | 12,745 | 13,051 | 13,217 | 13,318 | 13,383 | δE=C7-X7 | 13,595 |
| 10 | | ω излуч, $c^{-1}$ | | 1,549E+16 | 1,836E+16 | 1,936E+16 | 1,983E+16 | 2,008E+16 | 2,023E+16 | 2,033E+16 | Δω=C8-X8 | |
| 11 | | λ изл, A° | | 1215,978 | 1025,982 | 972,783 | 949,983 | 938,040 | 930,983 | 926,460 | $1^2S - n^2P$ | Лаймана |
| 12 | | | | $H_\alpha$ | | | | | | | | |
| 13 | | | | | | | | | | | | |
| 14 | 2 | $2^2P - n^2D$ | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | | |
| 15 | | E*справ, эВ | 0 | 10,199 | 12,088 | 12,749 | 13,055 | 13,221 | 13,321 | 13,386 | | 13,595 |
| 16 | | E*расч, эВ | 0 | 10,196 | 12,084 | 12,745 | 13,051 | 13,217 | 13,318 | 13,383 | X16=C3-C3/$N^2$ | 13,595 |
| 17 | | Едейств, эВ | 13,595 | 3,3988 | 1,5106 | 0,8497 | 0,5438 | 0,3776 | 0,2774 | 0,2124 | C3/$N^2$ | |
| 18 | | ω, $c^{-1}$ | 2,065E+16 | 5,164E+15 | 2,295E+15 | 1,291E+15 | 8,262E+14 | 5,737E+14 | 4,215E+14 | 3,227E+14 | ω=X17*E1/H1 | |
| 19 | | δE, эВ | | | 1,888 | 2,549 | 2,855 | 3,021 | 3,121 | 3,186 | δE=D17-X17 | |
| 20 | | ω излуч, $c^{-1}$ | | | 2,869E+15 | 3,873E+15 | 4,337E+15 | 4,590E+15 | 4,742E+15 | 4,841E+15 | Δω=D18-X18 | |
| 21 | | λ изл, A° | | | 6566,283 | 4863,913 | 4342,780 | 4103,927 | 3972,196 | 3891,131 | $2^2P - n^2D$ | Бальмера |
| 22 | | | | | $H_\beta$ | | | | | | | |
| 23 | | | | | | | | | | | | |
| 24 | 3 | $3^2D - n^2F$ | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | | |
| 25 | | E*справ, эВ | 0 | 10,199 | 12,088 | 12,749 | 13,055 | 13,221 | 13,321 | 13,386 | | 13,595 |
| 26 | | E*расч, эВ | 0 | 10,196 | 12,084 | 12,745 | 13,051 | 13,217 | 13,318 | 13,383 | X26=C3-C3/$N^2$ | 13,595 |
| 27 | | Едейств, эВ | 13,595 | 3,3988 | 1,5106 | 0,8497 | 0,5438 | 0,3776 | 0,2774 | 0,2124 | C3/$N^2$ | |
| 28 | | ω, $c^{-1}$ | 2,065E+16 | 5,164E+15 | 2,295E+15 | 1,291E+15 | 8,262E+14 | 5,737E+14 | 4,215E+14 | 3,227E+14 | ω=X27*E1/H1 | |
| 29 | | δE, эВ | | | | 0,661 | 2,855 | 3,021 | 3,121 | 3,186 | δE=E27-X27 | |
| 30 | | ω излуч, $c^{-1}$ | | | | 1,004E+15 | 1,469E+15 | 1,721E+15 | 1,873E+15 | 1,972E+15 | Δω=E28-C28 | |
| 31 | | λ излуч, A° | | | | 18760,809 | 12824,771 | 10943,805 | 10054,621 | 9550,957 | $3^2D - n^2F$ | Пашена |
| 32 | | | | | | $H_\gamma$ | | | | | | |

Строки 7 и 8 табл. 1 (далее детально рассматриваем только серию Лаймана) соответствуют обозначениям энергий и частот диаграммы по рис. 3. Эти строки представляют собой закономерно убывающий ряд значений. Строки 9, 10 и 11 табл. 1 показывают разницу энергий, частот, соответствующих уровней и длину волны излучения. Эти разницы и их соотно-

шения приведены в табл. 2. Убывание числовых значений в этих рядах происходит в соответствии с квадратичным законом.

В других излучательных сериях (Бальмера и Пашена) разности энергий (или соответствующие разности частот, приведенные в табл.3) берутся для определения длины волны излучения ($\lambda_{n\text{-}k}$) от опорных значений этих серий. В табл. 1 они выделены красным цветом (3,3988 эВ и 1,5106 эВ). Формулы, определяющие: частоты, их разности и длину волны излучения $\lambda_{n\text{-}k}$ для первых шести переходов в серии Лаймана приведены в табл. 2.

Таблица 2.

Расчётные данные энергетических и частотных интервалов в атоме водорода

| | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| $E_1 =$ 13,598 эВ $\omega_1 = 2{,}066\cdot10^{16}$ | $E_2 = \frac{E_1}{4} =$ 3,3988 эВ $\omega_2 = 5{,}164\cdot10^{15}$ | $E_3 = \frac{E_1}{9} = E_2\cdot\frac{4}{9} =$ 1,5106 эВ $\omega_3 = 2{,}295\cdot10^{15}$ | $E_4 = \frac{E_1}{16} = E_3\cdot\frac{9}{16} =$ 0,8497 эВ $\omega_4 = 1{,}291\cdot10^{15}$ | $E_5 = \frac{E_1}{25} = E_4\cdot\frac{16}{25} =$ 0,5438 эВ $\omega_5 = 8{,}262\cdot10^{14}$ | $E_6 = \frac{E_1}{36} = E_4\cdot\frac{25}{36} =$ 0,3777 эВ $\omega_6 = 5{,}738\cdot10^{14}$ |
| $\omega_1 - \omega_2 = \frac{3}{4}\omega_1 = 1{,}5495\cdot10^{16}$ с$^{-1}$ $\lambda_{2\text{-}1} = 1{,}2156\cdot10^{-7}$ м | | | | $\Delta E_{n-1} = E_1 - E_n;\quad \Delta\omega = \frac{\Delta E}{h/2\pi}$ | |
| $\omega_1 - \omega_3 = \frac{8}{9}\omega_1 = 1{,}8364\cdot10^{16}$ с$^{-1}$ $\lambda_{3\text{-}1} = 1{,}026\cdot10^{-7}$ м | | | | $\Delta\omega_{1-n} = \omega_1 - \omega_n = \frac{\Delta E_{1-n}}{h/2\pi}$ | |
| $\omega_1 - \omega_4 = \frac{15}{16}\omega_1 = 1{,}9368\cdot10^{16}$ с$^{-1}$ $\lambda_{4\text{-}1} = 9{,}7255\cdot10^{-8}$ м | | | | $\lambda_{n-1} = \frac{2\pi c}{\Delta\omega_{1-n}}$ | |
| $\omega_1 - \omega_5 = \frac{24}{25}\omega_1 = 1{,}9833\cdot10^{16}$ с$^{-1}$ $\lambda_{5\text{-}1} = 9{,}4977\cdot10^{-8}$ м | | | | | |
| $\omega_1 - \omega_6 = \frac{35}{36}\omega_1 = 2{,}0085\cdot10^{16}$ с$^{-1}$ $\lambda_{6\text{-}1} = 9{,}3784\cdot10^{-8}$ м | | | | | |
| …… | | | | | |
| $E_1$ | $E_2$ | $E_3$ | $E_4$ | $E_5$ | $E_6$ |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| $\Delta E_{1-2} = E_1\cdot\frac{3}{4}$ | $\Delta E_{2-3} = E_1\cdot\frac{5}{36}$ | $\Delta E_{3-4} = E_1\cdot\frac{7}{144}$ | $\Delta E_{4-5} = E_1\cdot\frac{9}{400}$ | $\Delta E_{5-6} = E_1\cdot\frac{11}{900}$ |
| $\Delta E_{n\text{-}k}$: 10,1964 эВ | 1,8882 эВ | 0,6609 эВ | 0,3059 эВ | 0,1662 эВ |
| $\Delta\omega_{n\text{-}k}$: $1{,}549\cdot10^{16}$ с$^{-1}$ | $2{,}869\cdot10^{15}$ с$^{-1}$ | $1{,}004\cdot10^{15}$ с$^{-1}$ | $4{,}648\cdot10^{14}$ с$^{-1}$ | $2{,}254\cdot10^{14}$ с$^{-1}$ |
| $\lambda_{n\text{-}k}$: $1{,}2156\cdot10^{-7}$ м | $6{,}5655\cdot10^{-7}$ м | $1{,}876\cdot10^{-6}$ м | $4{,}053\cdot10^{-6}$ м | $8{,}356\cdot10^{-6}$ м |

В нижней части табл. 2 приведены расчетные данные по разности энергий, разности частот и длине волны излучения между нижними энергетическими уровнями, принадлежащими разным колонкам (лесенкам) энергий по рис. 2 и рис. 3. Сравнивая эти данные с показателями длин волн на рисках можно отметить их очень хорошее совпадение.

Чтобы произвести вычисления, аналогичные выполненным нами для серии Лаймана (помещены в верхней части табл. 2), но применительно к сериям Бальмера, Пашена и для других серий, надо брать в расчетах вместо $E_1$ нижнюю энергию соответствующей колонки. На рис. 2 и рис. 3 для серии Бальмера это будет нижний уровень колонки *np*, для серии Пашена - нижний уровень колонки *nd* и так далее.

По расчетам табл. 1 можно заметить, что соотношение частот, принадлежащих двум соседним энергетическим уровням атома водорода (в любой отдельной колонке рис. 3), определяют формулы:

$$\omega_n = \frac{(n^2-1)}{n^2}\omega_{(n-1)} \text{ и } \omega_n = \frac{n^2}{(n+1)^2}\omega_{(n+1)}.$$

В этих формулах: $\omega_n$ - частота произвольного $n$ – го уровня; $\omega_{(n-1)}$ и $\omega_{(n+1)}$ - частоты предыдущего и последующего энергетических уровней. Аналогичными соотношениями связаны значения энергий и частот всех соседних уровней. Числовые значения приведены в табл. 2. Структурные формулы для расчёта частот соседних уровней с ориентацией на второй энергетический уровень, как базовый, приведены в табл. 3.

Таблица 3.

Формулы для расчета межуровневых энергетических интервалов в атоме водорода

$$\otimes\cdot 4\left(\frac{1}{4}-\frac{1}{9}\right)=\otimes\cdot 4\frac{3^2-2^2}{3^2\cdot 2^2}=\otimes\cdot 4\frac{5}{36}=\otimes\cdot\frac{20}{36}$$

$$\otimes\cdot 4\left(\frac{1}{9}-\frac{1}{16}\right)=\otimes\cdot 4\frac{4^2-3^2}{4^2\cdot 3^2}=\otimes\cdot 4\frac{7}{144}=\otimes\cdot\frac{28}{144}$$

$$\otimes\cdot 4\left(\frac{1}{16}-\frac{4}{25}\right)=\otimes\cdot 4\frac{5^2-4^2}{5^2\cdot 4^2}=\otimes\cdot 4\frac{9}{400}=\otimes\cdot\frac{36}{400}$$

$$\otimes\cdot 4\left(\frac{1}{25}-\frac{1}{36}\right)=\otimes\cdot 4\frac{6^2-5^2}{6^2\cdot 5^2}=\otimes\cdot 4\frac{11}{900}=\otimes\cdot\frac{44}{900}$$

$$\otimes\cdot 4\left(\frac{1}{36}-\frac{1}{49}\right)=\otimes\cdot 4\frac{7^2-6^2}{7^2\cdot 6^2}=\otimes\cdot 4\frac{13}{1764}=\otimes\cdot\frac{52}{1764}$$

……

В общих структурных формулах табл. 3 значком $\otimes$ обозначено значение энергии или частоты, соответствующие второму энергетическому уровню. Почему именно второму уровню будет ясно из дальнейшего изложения. Такая форма записи позволяет уяснить общность формул, определяющих спектр и более сложных атомов.

Формулы табл. 3 показывают, что зная энергию ионизации или частотные (энергетические) интервалы между двумя соседними (и даже не соседними) энергетическими уровнями можно легко определить подобные значения для иных уровней и интервалов между ними. Примечательно, что приводимые формулы с опорой на второй энергетический уровень оказываются пригодными для расчета отдельных серий оптических спектров и других атомов с более сложными диаграммами.

Трудности в адекватном описании оптических спектров атомов связаны, по мнению автора, не только с извращенным представлением энергетических уровней, но и с привычным приписыванием излучений и поглощений фотонов конкретным атомам и их электронам, а не системам атомов, что, видимо, впервые было предложено в работе [2]. Различные энергетические состояния, показанные на рис. 1 – рис. 3, это, скорее всего, энергетические состояния и частоты колебаний внешних электронных оболочек различных атомов. Приписывание излучений и поглощений только одному атому – это, возможно, ошибка, основанная на известной электромеханической планетарной модели атома, по которой электроны обращаются вокруг ядра. Действительности это явно не соответствует, а что собой представляют электроны, мы до сих пор ещё не очень хорошо понимаем.

Предложенная в свое время автором пузыревидная модель атома [1, 7] исходила из того, что внутриатомные электроны - это стоячие механические волны атомарной оболочки (возможно, нескольких оболочек, расположенных рядом или внутри друг друга). Биения этих волн порождают механизм излучения и поглощения фотонов. Скорее всего, это так. Но при этом не нашлось адекватного объяснение правилу квадратичного уменьшения или увеличения энергий и частот этих оболочек. В боровской и пузыревидной моделях атома это, возможно, связано с аналогичным законом увеличения площади электронной оболочки в зависимости от её радиуса. Для атома водорода обычно считается, что электронная оболочка и есть сам электрон. На самом деле, с частотных позиций, это явно не совсем так.

Природа устроена фрактально и пузыревидную модель атома можно наблюдать в реальности. Это поведение жидкостных пузыревидных образований в невесомости [8]. Невесомость используется здесь для исключения гравитационных возмущений.

О строении и резонансных свойствах атомов, в частности, о строении и свойствах электронной оболочки (точнее, оболочек) можно многое узнать, изучая спектры поглощения и излучения атомами электромагнитных волн. Данный метод изучения атомов является главным, хотя и не единственным. Дополнительные сведения можно почерпнуть из анализа валентных, тепловых и других свойств атомов. Хорошим подспорьем для этого является сайт [9] с динамической таблицей Менделеева.

Во многих научных разработках встречается ещё один вариант представления электронов - не в виде оболочки, а в виде кольцевых или вихревых образований из субстрата той же оболочки. Этот вариант модели, по мнению автора, более близок к реальности, особенно для атомов с несколькими валентными электронами на внешней оболочке.

Для выяснения поставленных и неясных для нас вопросов, начнём теоретически рассматривать наиболее простой атом водорода. Известно, что этот атом имеет электронную оболочку, содержащую единственный электрон, способный находиться в разных энергетических состояниях. Спектр фотонных частот излучения и поглощения атомом (или атомами) водорода определяется известным выражением:

$$\omega_{\mathrm{i}} = R_{\omega}\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2}\right). \qquad (1)$$

Здесь $R_{\omega}$ - частотная постоянная Ридберга, $n$ и $k$ целые числа, причем первое число обязательно меньше второго и оно начинается с единицы.

Частоты оптического излучения $\omega_{\mathrm{i}}$ в соотношении (1) можно представить не только как разность частот (биение) колебаний, происходящих между разными электронными оболочками (или электронами) одного атома, но и в виде биения частот, принадлежащих оболочкам или электронам разных атомов. Ведь в атоме водорода электрон всего лишь один или его там вообще нет, если мы имеем дело с ионом.

Особенностью соотношения (1) является то, что частоты излучаемых (или поглощаемых) фотонов связаны с биением частот колебаний электронных оболочек по квадратичному закону, а это не поддается простому логическому объяснению. Такого не наблюдается в явлениях биения механических и электромагнитных волн, поэтому данное обстоятельство создает серьезную проблему в понимании и физическом представлении формульной связи по выражению (1). Попробуем найти математическое и физическое объяснения этой связи.

Частотную постоянную Ридберга, входящую в выражение (1), принято представлять в следующем виде [10, стр.259]

$$R_{\omega} = \frac{m_{\mathrm{e}} e^4}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^3} \approx 2{,}067 \cdot 10^{16}\ \mathrm{c}^{-1}. \qquad (2)$$

Однако понять физический смысл постоянной Ридберга по данному выражению практически невозможно. Физический смысл постоянной Ридберга становится более ясным, если последнее выражение представить по иному – как соотношение внутренней энергии электрона и постоянной Планка, при участии числового коэффициента с участием постоянной тонкой структуры в степени 2 - $\alpha^2/2$

$$R_\omega = \frac{m_e e^4}{32\pi^2\varepsilon_0^2\hbar^3} = \frac{m_e}{32\pi^2\hbar^3}\left(\frac{e^2}{\varepsilon_0}\right)^2 = \frac{m_e}{32\pi^2\hbar^3}(4\pi c\alpha\hbar)^2 = \frac{m_e c^2}{\hbar}\frac{\alpha^2}{2}. \qquad (3)$$

Данное выражение можно преобразовать и далее, используя в конечном выражении комптоновскую длину волны электрона $\lambda_C = \frac{h}{m_e c} = \frac{2\pi\hbar}{m_e c}$ и соответствующую ей частоту Комптона $\omega_C = \frac{2\pi c}{\lambda_C} = \frac{m_e c^2}{\hbar}$. Числовое значение частоты $\omega_C$ = 7,763440706·$10^{20}$ $с^{-1}$. Эта величина в 2π больше значения, указываемого в работе [11].

Связь $R_\omega$ и $\omega_C$ иллюстрирует формула (4):

$$R_\omega = \frac{m_e c^2}{\hbar}\frac{\alpha^2}{2} = \frac{\omega_C}{2}\alpha^2. \qquad (4)$$

Числовое значение для $R_\omega$, можно обозначать и как $\omega_R = 2{,}067068665 \cdot 10^{16}$ $с^{-1}$.

Согласно приводимым формулам комптоновская длина волны в $(2\pi\alpha)^{-1} \approx 22$ раза меньше радиуса Бора, а комптоновская частота *свободного* электрона в $2\alpha^{-2} \approx 37558$ раз, то есть почти в 40000 раз больше частотной постоянной Ридберга.

Судя по всему, частота Ридберга $R_\omega$ лежит на границе двух интервалов частот: первого - малого, с частотами, которые меньше этого значения, и второго большого интервала, с частотами от $R_\omega$ до комптоновской частоты $\omega_c$, присущей *свободному* электрону. Второй интервал более высоких частот, скорее всего, принадлежит в атоме водорода электрону, находящемуся на оболочке в связанном (несвободном) состоянии. Длины волн для частот этого второго диапазона, видимо, тоже следует считать дебройлевскими.

На рис. 3 и в табл. 2 все частоты первого диапазона обозначены, как фотонные (через $\omega_i$). Скорее всего эти частоты принадлежат механическим колебаниям электронной оболочки атома водорода. Их биения равны частотам излучаемых или поглощаемых фотонных волн. Числовые значения частот этих волн не превышают значения $R_\omega$, так как одна из участвующих в биении частот может иметь малую величину, вплоть до нулевого уровня.

Выражение (4) позволяет понять физический смысл постоянной тонкой структуры $\alpha$. Значение этой константы во второй степени напрямую связывает две частоты: ридберговскую в её удвоенном значении и самую высокую частоту – комптоновскую для *свободного* электрона.

Возбуждение атомов или их систем с излучением фотонов, судя по всему, происходит при тепловом нагревании или возникновении разности электрических потенциалов между соседними атомами. Эта разность потенциалов может возникать за счет внешнего электрического поля или взаимодействия электронных оболочек атомов между собой. Механизм взаи-

модействия или объединения электронных оболочек атомов между собой нам до конца ещё не понятен. Вероятно этот механизм (излучения или поглощения фотонов двумя атомами или их группой) подобен эффекту Джозефсона [12]. С представлениями автора по теме эффекта Джозефсона можно познакомиться в работе [13].

В попытке разобраться с квадратичным соотношением фотонных (излучаемых или поглощаемых) частот и частот электронной оболочки атома помогает свойство дебройлевских частот и волн. Дебройлевсие частоты, как и фотонные, определяются выражением:

$$\Delta\Omega_{\mathrm{i}} = \omega_{\mathrm{i}} = \frac{\Delta E_i}{\hbar} \ . \qquad (5)$$

Длина волн де Бройля определяется не так как у фотонных волн, а другой формулой:

$$\lambda_{\Omega} = \frac{h}{p} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_{\mathrm{e}}E}} \ . \qquad (6)$$

Эта формула как раз и содержит в себе квадратичную зависимость между энергией (по сути, частотой) и длиной дебройлевской волны. Очевидно, что $E$ в формуле (6) соответствует как энергии ненаблюдаемого нами биения внутренних частот колебаний в атоме (электронной оболочки или электрона) так и энергии излучаемых или поглощаемых фотонов. Энергия фотонов определяется известной формулой $E = \hbar\omega_{\mathrm{i}} = h\nu$ .

Если связь частоты и длины волны дебройлевских волн принять аналогичной связи для фотонных волн, хотя это и сомнительно, то мы получим следующее соотношение:

$$\Omega_{\mathrm{n}} = \frac{2\pi c}{\lambda_{\Omega}} = \frac{c\sqrt{2m_e\hbar\omega_{\mathrm{n}}}}{\hbar} = \sqrt{\frac{2m_e c^2\omega_{\mathrm{n}}}{\hbar}} = \sqrt{2\omega_{\mathrm{c}}\omega_{\mathrm{n}}} \ . \qquad (7)$$

В этой формуле частоты $\Omega_{\mathrm{n}}$ будут соответствовать частотам дебройлевских волн, принадлежащих какой-то части атома водорода, скорее всего электрону; $\hbar\omega_{\mathrm{n}}$ - соответствует энергии частотных колебаний электронной оболочки $n$ – го энергетического уровня, а $\omega_{\mathrm{n}}$ соответствует частоте колебаний этой оболочки.

Соотношение (7), кроме возможной частоты электрона $\Omega_{\mathrm{n}}$ на определённом энергетическом уровне, включает в себя ещё две частоты: комптоновскую частоту $\omega_{\mathrm{c}}$ и частоту электронной оболочки $\omega_{\mathrm{n}}$, соответствующую $n$ – ому энергетическому уровню электронной оболочки. Конечное выражение формулы (7) очень простое, однако оно ранее почему-то не приводилось, очевидно не замечалось.

Расчетные данные по соотношению частот для атома водорода приведены в табл. 4.

Таблица 4.

E9 =КОРЕНЬ(E8*D1*F1/H1)

| | A | B | C | D | E | F | G | H | I | J | K | L |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | | | 1883651567 | 9,11E-31 | 1,60E-19 | 1,79751E+17 | | 1,05E-34 | 1,99E-25 | | | |
| 2 | | Атом | $2\pi c$ | $m_e$ | $q_e$ | $2c^2$ | | $h/2\pi$ | $hc$ | | | |
| 3 | | водорода | 13,595 | | | | | | | | | |
| 4 | 1 | $1^2S - n^2P$ | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | N | lim |
| 5 | | E*справ, эВ | 0 | 10,199 | 12,088 | 12,749 | 13,055 | 13,221 | 13,321 | 13,386 | | 13,595 |
| 6 | | E*расч, эВ | 0 | 10,196 | 12,084 | 12,745 | 13,051 | 13,217 | 13,318 | 13,383 | E*спр=C3-C3/$N^2$ | 13,595 |
| 7 | | Едейств, эВ | 13,595 | 3,3988 | 1,5106 | 0,8497 | 0,5438 | 0,3776 | 0,2774 | 0,2124 | Ед=C3/$N^2$ | |
| 8 | | $\omega_n$, $c^{-1}$ | 2,065E+16 | 5,164E+15 | 2,295E+15 | 1,291E+15 | 8,262E+14 | 5,737E+14 | 4,215E+14 | 3,227E+14 | X7*E1/H1 | |
| 9 | | $\Omega_i$, $c^{-1}$ | 5,663E+18 | 2,832E+18 | 1,888E+18 | 1,416E+18 | 1,133E+18 | 9,439E+17 | 8,090E+17 | 7,079E+17 | $\omega_n = \frac{\hbar}{2m_e c^2}\Omega_n^2$ | |
| 10 | | $\Omega_1/\Omega_n$ | 1,00 | 2,00 | 3,00 | 4,00 | 5,00 | 6,00 | 7,00 | 8,00 | | |
| 11 | | $\Omega_n/\omega_n$ | $2/\alpha$ | $4/\alpha$ | $6/\alpha$ | $8/\alpha$ | $10/\alpha$ | $12/\alpha$ | $14/\alpha$ | $16/\alpha$ | | |

Расчёты в строке 9 в табл. 4 проведены по формуле

$$\Omega_n^N = \sqrt{\omega_n \frac{2m_e c^2}{\hbar}}. \qquad (8)$$

Полученные результаты превышают значение для частоты Ридберга, что указывает на принадлежность этих частот, скорее всего, электрону атома водорода, но здесь отсутствует комптоновская частота электрона и это вызывает сомнение в правильности формулы (8).

Примечательными данными в табл. 3 являются строки 10 и 11. Строка 10 показывает наличие *целочисленных соотношений* внутренних частот (резонансов) в одном или разных атомах водорода. Строка 11 показывает наличие *постоянной тонкой структуры* в соотношении указанных внутренних частот во второй степени и частот, соответствующих тем же номерам энергетических уровней атома водорода. Эта постоянная присутствовала в формуле (4), связывающей частоту Ридберга и частоту Комптона. Попробуем разобраться с этим.

Используя формулу (4) для комптоновской длины волны, из соотношения (7) можно выразить частоту $\omega_n$ с участием частотной постоянной Ридберга и второй степени $\Omega_n$

$$\omega_n = \frac{\Omega_n^2}{2\omega_C} = \frac{\alpha^2}{4R_\omega}\Omega_n^2. \qquad (9)$$

В формуле (9) есть участие постоянная тонкой структуры - $\alpha$. Возможно в этом и заключен её главный физический смысл – выражать (при участии размерностной константы – $4R_\omega$) нелинейную связь двух видов частот – электронной оболочки атома и электрона.

Формулу (9), с учётом формулы (4), можно представить в таком виде

$$\Omega_n^C = \sqrt{\omega_n \frac{m_e c^2}{\hbar}\frac{2}{\alpha^2}}. \qquad (10)$$

Тогда конечные соотношения табл. 4 изменятся. Они представлены в табл. 5.

Таблица 5.

E9 =КОРЕНЬ(E8*D1*F1/(H1*G1))

| | A | B | C | D | E | F | G | H | I | J | K | L |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | | | 1883651567 | 9,11E-31 | 1,60E-19 | 8,99E+16 | 2,66E-05 | 1,05E-34 | 1,99E-25 | | | |
| 2 | | Атом | 2πc | $m_e$ | $q_e$ | $c^2$ | $\alpha^2/2$ | $h/2\pi$ | $hc$ | | | |
| 3 | | водорода | 13,595 | | | | | | | | | |
| 4 | 1 | $1^2S - n^2P$ | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | N | lim |
| 5 | | E*справ, эВ | 0 | 10,199 | 12,088 | 12,749 | 13,055 | 13,221 | 13,321 | 13,386 | | 13,595 |
| 6 | | E*расч, эВ | 0 | 10,196 | 12,084 | 12,745 | 13,051 | 13,217 | 13,318 | 13,383 | $E^*спр=C3-C3/N^2$ | 13,595 |
| 7 | | Едейств, эВ | 13,595 | 3,3988 | 1,5106 | 0,8497 | 0,5438 | 0,3776 | 0,2774 | 0,2124 | $Ед=C3/N^2$ | |
| 8 | | $\omega_n = \Omega_n$, $c^{-1}$ | 2,065E+16 | 5,164E+15 | 2,295E+15 | 1,291E+15 | 8,262E+14 | 5,737E+14 | 4,215E+14 | 3,227E+14 | X7*E1/H1 | |
| 9 | | $\Omega^c_n$, $c^{-1}$ | 7,761E+20 | 3,880E+20 | 2,587E+20 | 1,940E+20 | 1,552E+20 | 1,293E+20 | 1,109E+20 | 9,701E+19 | $\omega_n = \frac{\hbar}{m_e c^2}\frac{\alpha^2}{2}(\Omega^c_n)^2$ | |
| 10 | | $\Omega^c_1/\Omega^c_N$ | 1,00 | 2,00 | 3,00 | 4,00 | 5,00 | 6,00 | 7,00 | 8,00 | | |

Согласно формуле (10) и данным табл. 5 частота $\Omega^C_n$ выражает дебройлевскую частоту, которая целочисленно кратно изменяется в соответствии с номерами энергетических уровней, а для первого энергетического уровня эта частота практически совпадает с ранее найденной частотой свободного электрона. То есть, на первом энергетическом уровне, равном энергии ионизации атома водорода, электрон является практически свободным. На этом основании можно сделать вывод о том, что частоты строки 9 табл. 5 соответствуют частотам электрона, находящегося в связанном состоянии на электронной оболочке атома. Частоты целочисленно кратны друг другу, что говорит об их резонансных соотношениях.

Из данных табл. 5 с целочисленными соотношениями частот, обозначаемых большой буквой $\Omega^C_n$, можно сделать вывод, что излучения и поглощения фотонов в атоме водорода совершаются, всё-таки, электронами, а не электронными оболочками (что можно было предполагать из табл. 4). В табл. 5 интересно соотношение частот $\Omega^C_n / \omega_n = \sqrt{2}/\alpha$. Это соотношение, скорее всего, должно входить в $\Omega^C_n$ (расположено в полукруглых скобках формулы табл. 5). Если соотношение $\sqrt{2}/\alpha$ мы переведём в выражение для частоты электрона, то по сути мы снова приходим к формуле табл. 4. Правда, целочисленные соотношения останутся за отношением частоты электрона, располагаемого на первом энергетическом уровне, к частотам электронов, располагаемых на других уровнях.

Далее рассмотрим возможную физическую сторону этого явления.

Приводимым формулам, выражающим соотношения двух разновидностей частот, есть простой и наглядный пример из области механики. Длина математического маятника (размерный аналог потенциальной ямы, определяющей длину и частоту волны де Бройля) и частота его колебаний, совершаемых главным образом поперек гравитационного поля, связаны обратной квадратичной зависимостью.

В рассматриваемой модели мы имеем электрическое поле ядра атома (аналог гравитационного поля) и поперечные колебания пузыревидной электронной оболочки. Заметим, что поперечные (а здесь, возможно, и радиальные) колебания в любом потенциальном поле не

требуют затрат энергии. Похоже, что любые биения тоже возникают и протекают без дополнительных затрат энергии. По сути, биение это интерференционное явление, поэтому дополнительных затрат энергии не требуется.

Вернёмся к формуле (10). Для первого энергетического уровня эта частота равна (или почти равна) комптоновской частоте электрона. С увеличением номера энергетического уровня частота электрона будет уменьшается, приближаясь в своём значении к частоте Ридберга, а частота самой электронной оболочки уменьшается от частоты Ридберга до нулевого значения. Отсюда можно понять, что в атоме водорода электронная оболочка и электрон, вообще-то, представляют собой единое целое. В состоянии с наибольшей энергией атома - частоты электрона и оболочки наибольшие. В состоянии с наименьшей энергией атома электронная оболочка имеет нулевую частоту, а электрон, находящийся на этой оболочке имеет частоту Ридберга.

Таким образом, проведенное исследование показывает, что целочисленный резонанс частот присущ колебаниям электронов, располагаемых на внешней электронной оболочке атома (скорее всего, атомов) водорода, а квадратичные соотношения частот соответствуют колебаниям самих электронных оболочек атомов, обеспечивающих соответствующие квадратичные соотношения частот излучаемых или поглощаемых фотонов.

Еще раз отметим, что значения разности энергий, определяющих частоту и длину волны фотонов, излучаемых и поглощаемых атомами, одинаковы - как в нашем варианте диаграммы Гротриана так и в варианте её традиционного представления. Однако в нашем варианте значения уровней энергии имеют реальный физический смысл, отражая биения частот колебательных процессов, происходящих, скорее всего не в одном, а в рядом располагаемых атомах. Анализируя атомные частоты и их соотношения можно судить о структуре самих атомов.

Наш вывод об *одновременном* наличии внутри атома водорода двух частот, принадлежащих оболочке и электрону, вроде бы, показывает возможность наличия частотных биений и внутри одного атома и тогда широко распространённые представления об излучениях и поглощениях фотонов только одним атомом получают физическое обоснование. Однако это крайне сомнительно – частоты электронной оболочки и электрона, находящегося на ней, очень сильно отличаются по величине (в $10^{16}$). Поэтому представить себе биения этих частот очень сложно.

В заключение раздела отметим, что современные модификации диаграмм Гротриана [14, 15] в основном используют инверсное изображение энергетических линий, а это сильно запутывает и затрудняет изучение реальной структуры строения атомов.

## 2 АНАЛИЗ ЧАСТОТНЫХ СПЕКТРОВ ВОДОРОДОПОДОБНЫХ И ДРУГИХ БОЛЕЕ СЛОЖНЫХ АТОМОВ

Материал предыдущего раздела показывает, что собственные частотные колебания электрона, находящегося внутри атома, изменчивы по своей величине. Эти изменения возникают при излучениях и поглощениях фотонов и происходят при одновременном изменении другой частоты, принадлежащей электронной оболочке. При таком подходе каждый атом водорода видится с пузыревидной оболочкой, на которой имеется круговое или вихревое образование со своей частотой вращении. Эти две частоты взаимосвязаны так, что их совместное действие и порождают фотонное излучение атома. При поглощениях фотонов процесс обратный.

Многие (таких большинство) привыкли считать, что электроны постоянно содержатся и движутся или «вибрируют» в атоме с определенными частотами, им свойственными. Так, например, Ф.М. Канарёв в своей модели атома [11] энергию, которую мы приписываем колебаниям электронной оболочки, принимает за энергию электростатической связи электрона с ядром атома. Поскольку с энергетической точки зрения наша модель и модель Канарёва почти идентичны, то приведем его данные (табл. 4) по оценке энергии связи электрона в составе водорода и водородоподобных атомов. Почему автор табл. 4 не привел теоретические данные для n = 1 не очень понятно, так как эти данные легко определяются (они равны значению при n = 2, помноженному на четыре). При этом совпадение теоретических и экспериментальных данных идеальное.

Таблица 4.

Энергии связи электронов с ядрами водородоподобных атомов

| Z | Эле-Мент | Метод опред. | Энергии связи $E_b$, eV | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | | | n=1 | n=2 | n=3 | n=4 |
| 1 | H | Экспер. | 13,598 | 3,398 | 1,508 | 0,848 |
| | | Теор. | - | 3,399 | 1,511 | 0,849 |
| 2 | He | Экспер. | 54,416 | 13,606 | 6,046 | 3,396 |
| | | Теор. | - | 13,604 | 6,046 | 3,401 |
| 3 | Li | Экспер. | 122,451 | 30,611 | 13,601 | 7,651 |
| | | Теор. | - | 30,613 | 13,607 | 7,653 |
| 4 | Be | Экспер. | 217,713 | 54,423 | 24,183 | 13,613 |
| | | Теор. | - | 54,428 | 24,190 | 13,607 |
| 5 | B | Экспер. | 340,217 | 85,047 | 37,797 | 21,257 |
| | | Теор. | - | 85,054 | 37,801 | 21,263 |
| 6 | C | Экспер. | 489,981 | 122,461 | 54,431 | 30,611 |
| | | Теор. | - | 122,495 | 54,446 | 30,624 |
| 7 | N | Экспер. | 667,029 | 166,689 | 74,089 | 41,669 |
| | | Теор. | - | 166,757 | 74,114 | 41,689 |

Энергия связи электрона любого водородоподобного атома определяется формулой:

$$E_i = 13{,}598 * Z^2 \text{ эВ}. \qquad (11)$$

Заметим, что для атомов химических элементов с порядковыми номерами $Z$ в районе сотни, величина энергии составляет десятые доли от МэВ, а это уже рентгеновский диапазон частот и длин волн, соответствующих этому диапазону.

Формулы табл. 3 и табл. 4 показывают, что зная энергию ионизации или частотные интервалы между двумя соседними (и даже не соседними) энергетическими уровнями атома водорода, легко определить подобные значения для иных уровней и интервалов между ними. Примечательно, что приводимые формулы оказываются пригодными для расчета отдельных серий оптических спектров и других атомов с более сложными диаграммами.

Отметим, что для расчета оптических спектров атомов, следующих за водородом, приходится брать частоты (и энергии) электронных уровней по значению меньшие, чем соответствующие энергии ионизации и с некоторыми поправками. Пример на рис. 4.

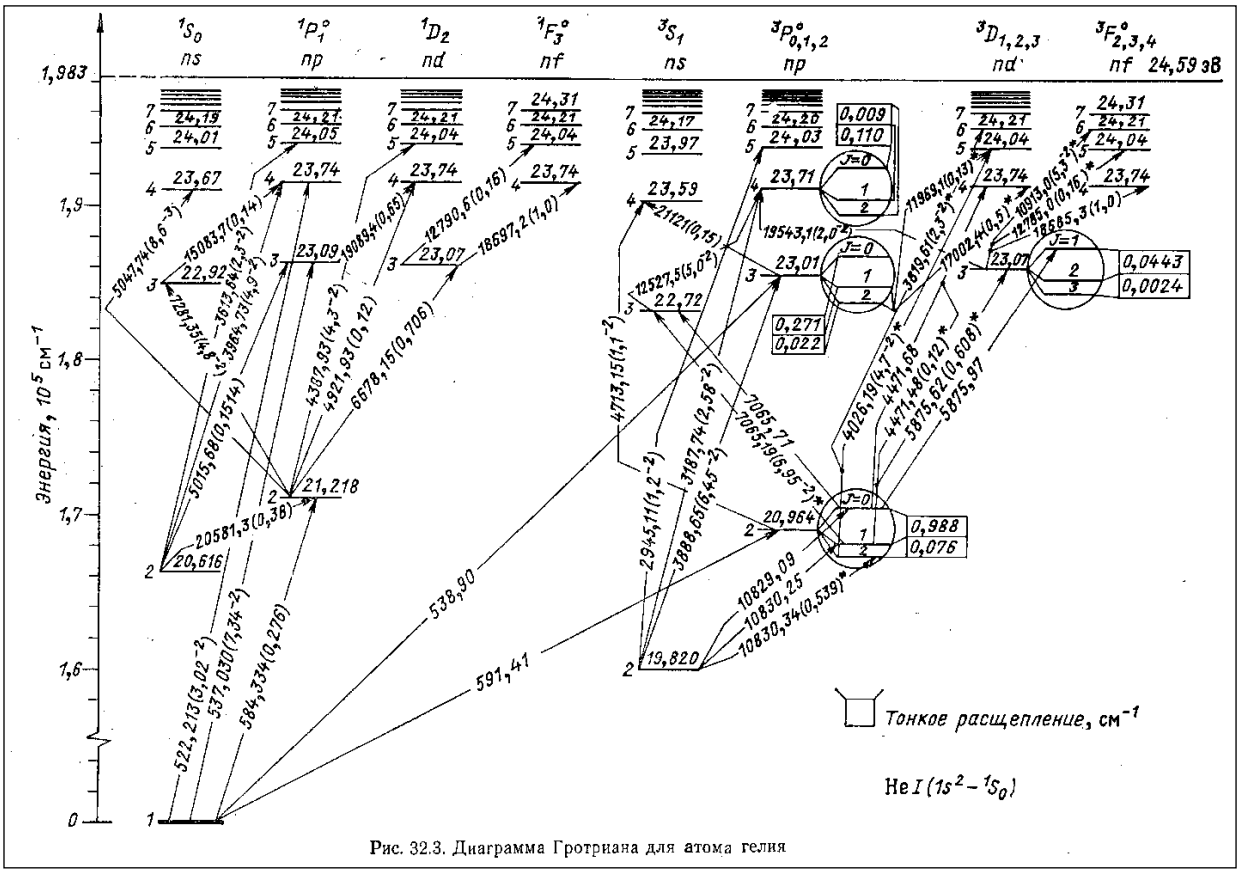


Рис. 4. Диаграмма Гротриана для атома гелия

Важным достижением работы [11] можно считать эмпирическое обнаружение упорядоченности в расположении энергетических уровней для многих атомов более сложного строения, чем атом водорода. Как следует из работ Ф.М. Канарева, структура оптического

спектра атомов определяется энергией ионизации атома и величиной энергии уровня, ближайшего к ионизационному уровню. Энергия других уровней определяется дробно-целочисленным распределением соотношения этих двух энергий обратно пропорционально второй степени номеров энергетических уровней.

Укажем основные отличия диаграммы рис. 4 от диаграммы атома водорода. Подобные отличия присущи и другим более сложным атомам. Основные отличия состоят в следующем. Между первым (ионизационным) энергетическим уровнем и вторым, ближайшим к первому, имеется значительный разрыв, не позволяющий первый уровень брать базовым для расчетов энергии других уровней и межуровневых интервалов по формулам табл. 5.

В каждом столбце энергетических уровней, которые можно считать относящимися к разным атомам, имеет место сдвиг уровней. Этот сдвиг тем меньше, чем больше порядковый номер энергетического уровня. По рис. 4 видно, что пропорциональной деформации в разных электронных оболочках оказываются подвержены все интервалы между соседними энергетическими уровнями. Можно заметить, что деформация интервала между первым и вторым энергетическими уровнями максимальная. Возможно это происходит за счет смещения энергетической (частотной) линии первого уровня, который может быть разным для различных оболочек, что на диаграммах Гротриана не показывается.

Заметим, что в диаграмме спектральных линий водорода (см. рис. 1- рис. 3), которую можно считать идеальной для атомов, сдвигов вообще нет. Все интервалы между энергетическими уровнями (включая самый большой первый интервал) строго закономерно пропорциональны. То есть, там деформации в столбцах энергетических уровней, соответствующих электронным оболочкам разных атомов или разным состояниям одного атома, отсутствуют. А первый энергетический уровень можно считать общим для всех столбцов.

Данное обстоятельство, а также характер расположения на рис. 4 спектральных переходов, позволяют выдвинуть два предположения. Первое предположение, естественно формируемое изображением рис. 4 и уже использованное нами выше, это очевидная принадлежность каждого вертикального столбца значений энергии («энергетической лестницы», по Гротриану) одной общей для них электронной оболочке атома. Главный довод в пользу данного предположения - упорядоченность значений энергии и пропорциональность сдвигов энергетических уровней в каждом отдельном столбце энергий. В этом случае каждая электронная оболочка представляется целостным образованием, первичным относительно входящих в нее энергетических уровней (частот). Наблюдаемые сдвиги энергетических уровней строго пропорциональны внутри каждой оболочки. Наибольший сдвиг уровней (по сравнению с уровнями столбца $^1S_0$) имеет место для второго энергетического уровня. Для других уровней этот сдвиг значительно меньший, но явно закономерно обусловленный.

По рис. 4 можно также заметить, что во всех, кроме одной, электронных оболочках нижние (по расположению) энергетические уровни (максимальные частоты) отсутствуют. Правда, с излагаемой нами частотной позиции, принадлежность первого энергетического уровня именно оболочке $^1S_0$ *ns* выглядит не столь явно и однозначно. Но этот факт оставим на совести спектроскопистов и составителей диаграммы, приведенной на рис. 4.

Второе предположение вытекает из первого и касается места расположения энергетических уровней (частот). Принимая за истину вертикально - кластерное строение энергетических уровней и учитывая отсутствие энергетических переходов внутри одного кластера, можно признать каждый кластер с его «лесенкой» энергетических уровней, принадлежащей только одной внешней электронной оболочке атома, а лучше только одному атому или иону. Лучше потому, что в системе атомов энергетические переходы между разными уровнями, в виде биения частот <u>*одновременно*</u> происходящих колебаний разных оболочек, с излучением или поглощением внешних фотонов, более понятны. Если же считать, что атом один, а оболочки до и после энергетического перехода у него разные, то механизм формирования оптического спектра в виде биения частот становится трудно представимым.

Энергетическая диаграмма для атома гелия с действующими для него значениями энергий и соответствующих им частот, подобная рис. 4, приведена на рис. 5.

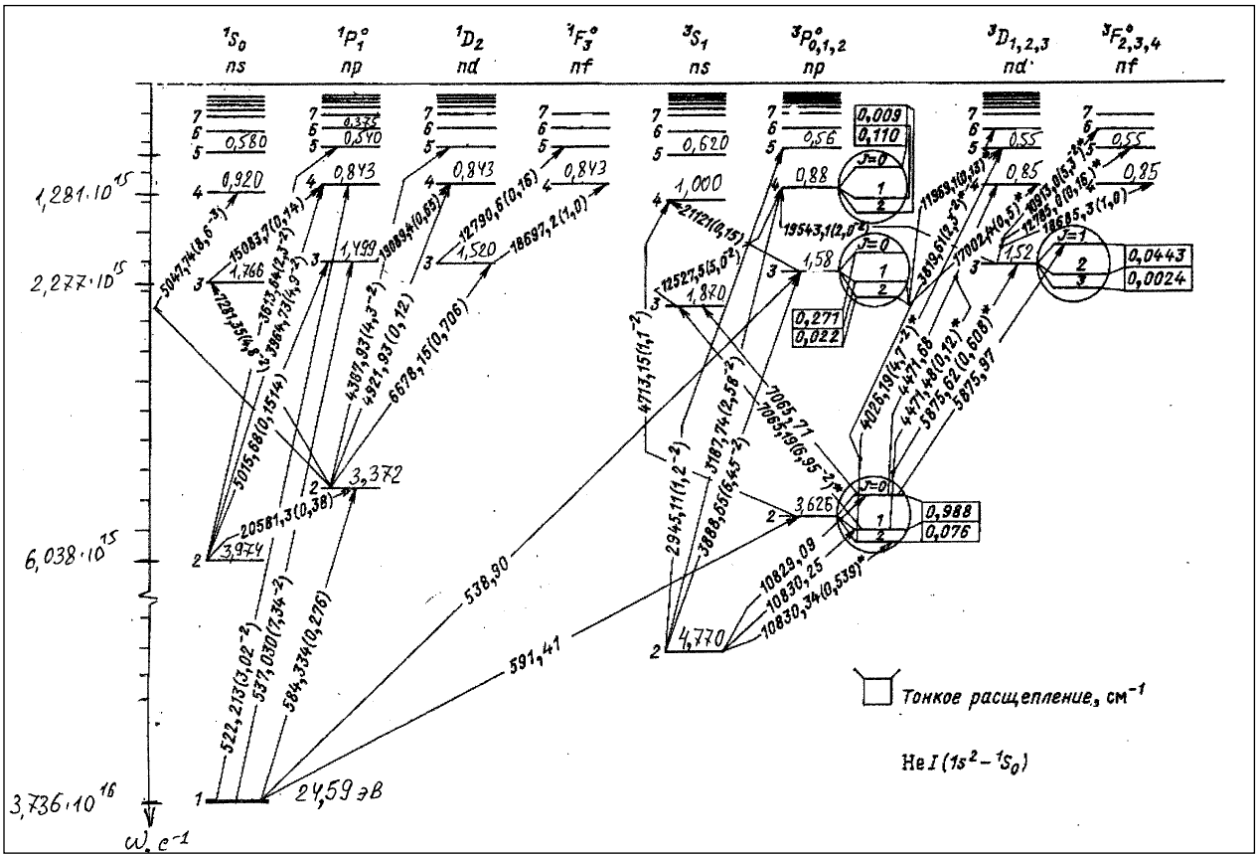


Рис. 5. Диаграмма для атома гелия в частотном представлении с показом действительных значений энергетических уровней

Здесь, как и на других частотных диаграммах Гротриана, вертикальная ось с частотами соответствует дебройлевским частотам, обозначаемым иногда в тексте буквой $\Omega_i$.

Энергетические кластеры рис. 5, в которых отсутствуют нижние энергетические уровни, можно объяснить их соответствием переходам с участием только частично возбужденных (ещё не ионизированных) атомов. Переходы же (биения частот) с участием первого энергетического уровня можно объяснить участием в них иона атома с показателем минус один электрон.

Расчетные данные для атома гелия приведены в табл. 6. Полученное совпадение расчетных и справочных данных, можно сказать, великолепное. Такая точность недостижима в квантовой механике с использованием уравнения Шрёдингера, которое не позволяет рассчитывать спектры атомов сложнее водородоподобных [7].

Таблица 6.

Таблица Excel с расчетными данными трех спектральных серий для атома гелия.

C15 =E14*9

| | A | B | C | D | E | F | G | H | I | J | K | L |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | | | 1883651567 | | 1,60E-19 | | | 1,05E-34 | | | | |
| 2 | | | | | | | | | | | | |
| 3 | | Гелий | 24,59 | | | | | | | | | |
| 4 | | | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | | совпадение |
| 5 | $np\ ^1P^o_1$ | E*справ, эВ | 0 | 21,218 | 23,09 | 23,74 | 24,05 | 24,21 | | | | |
| 6 | | Едейств, эВ | 24,59 | 3,372 | 1,500 | 0,850 | 0,540 | 0,380 | | | C3-XN | |
| 7 | | Ерасч1, эВ | 13,488 | 3,372 | 1,499 | 0,844 | 0,544 | 0,375 | 0,279 | | $X6*(N-1)^2/N^2$ | Отличное |
| 8 | | Ерасч2, эВ | | 3,372 | 1,499 | 0,843 | 0,540 | 0,375 | 0,275 | 0,211 | $X8*(N-1)^2/N^2$ | Отличное |
| 9 | $np\ ^3P^o_{0,1,2}$ | E*справ, эВ | | 20,964 | 23,01 | 23,71 | 24,03 | 24,2 | | | | |
| 10 | | Едейств, эВ | | 3,626 | 1,58 | 0,88 | 0,56 | 0,39 | | | C3-XN | |
| 11 | | Ерасч1, эВ | 14,504 | 3,626 | 1,612 | 0,889 | 0,563 | 0,389 | 0,287 | | $X10*(N-1)^2/N^2$ | Отличное |
| 12 | | Ерасч2, эВ | | 3,626 | 1,612 | 0,907 | 0,580 | 0,403 | 0,296 | 0,227 | $X12*(N-1)^2/N^2$ | Хорошее |
| 13 | $ns\ ^1S_0$ | E*справ, эВ | 0 | 20,616 | 22,92 | 23,67 | 24,01 | 24,19 | | | | |
| 14 | | Едейств, эВ | | 3,974 | 1,670 | 0,920 | 0,580 | 0,400 | | | C3-XN | |
| 15 | | Ерасч1, эВ | 15,03 | 3,758 | 1,766 | 0,939 | 0,589 | 0,403 | 0,294 | | $X14*(N-1)^2/N^2$ | Хорошее |
| 16 | | Ерасч2, эВ | | 3,758 | 1,670 | 0,939 | 0,601 | 0,417 | 0,307 | 0,235 | $X16*(N-1)^2/N^2$ | Хорошее |
| 17 | $ns\ ^3S_1$ | E*справ, эВ | 0 | 19,82 | 22,72 | 23,59 | 23,97 | 24,17 | | | | |
| 18 | | Едейств, эВ | | 4,770 | 1,870 | 1,000 | 0,620 | 0,420 | | | C3-XN | |
| 19 | | Ерасч1, эВ | 16,83 | 4,208 | 2,120 | 1,052 | 0,640 | 0,431 | 0,309 | | $X18*(N-1)^2/N^2$ | Хорошее |
| 20 | | Ерасч2, эВ | | 4,208 | 1,870 | 1,052 | 0,673 | 0,468 | 0,343 | 0,263 | $X20*(N-1)^2/N^2$ | Удовл. |
| 21 | $nd\ ^1D_2$ | E*справ, эВ | 0 | | 23,07 | 23,74 | 24,04 | 24,21 | | | | |
| 22 | $nd\ ^3D_{1,2,3}$ | Едейств, эВ | | | 1,520 | 0,850 | 0,550 | 0,380 | | | C3-XN | |
| 23 | | Ерасч1, эВ | 13,68 | | 1,520 | 0,855 | 0,544 | 0,382 | 0,279 | | $X22*(N-1)^2/N^2$ | Отличное |
| 24 | | Ерасч2, эВ | | | 1,520 | 0,855 | 0,547 | 0,380 | 0,279 | 0,214 | $X24*(N-1)^2/N^2$ | Отличное |
| 25 | $nf\ ^1F^o_3$ | E*справ, эВ | 0 | | | 23,74 | 24,04 | 24,21 | 24,31 | | | |
| 26 | $nf\ ^3F^o_{2,3,4}$ | Едейств, эВ | | | | 0,850 | 0,550 | 0,380 | 0,280 | | C3-XN | |
| 27 | | Ерасч1, эВ | 13,6 | | | 0,850 | 0,544 | 0,382 | 0,279 | | $X22*(N-1)^2/N^2$ | Отличное |
| 28 | | Ерасч2, эВ | | | | 0,850 | 0,544 | 0,378 | 0,278 | | $X24*(N-1)^2/N^2$ | Отличное |
| 29 | | | | | | | | | | | | |
| 30 | | δE, эВ | серия $1s\ ^1S_0$ - $np\ ^1P^o_1$ | 21,2180 | 23,0913 | 23,7463 | 24,0460 | 24,2150 | 24,3108 | | (C3-X7) | |
| 31 | | Δω, $c^{-1}$ | | 3,22E+16 | 3,51E+16 | 3,61E+16 | 3,65E+16 | 3,68E+16 | 3,69E+16 | | X30*E1/H1 | |
| 32 | | λ изл, A° | | 584,335 | 536,930 | 522,121 | 515,613 | 512,014 | 509,996 | | (C1/X31)*10^10 | отличное |
| 33 | | | | | | | | | | | | |
| 34 | | δE, эВ | серия $2p\ ^1P^o_1$ - $nd\ ^1D_2$ | | 1,8520 | 2,5220 | 2,8220 | 2,9920 | | | (D7-X22) | |
| 35 | | Δω, $c^{-1}$ | | | 2,81E+15 | 3,83E+15 | 4,29E+15 | 4,55E+15 | | | X34*E1/H1 | |
| 36 | | λ изл, A° | | | 6694,611 | 4916,106 | 4393,487 | 4143,857 | | | (C1/X35)*10^10 | хорошее |
| 37 | | | | | | | | | | | | |
| 38 | | δE, эВ | серия $3d\ ^1D_2$- $nf\ ^1F^o_3$ | | | 0,6700 | 0,9700 | 1,1400 | 1,2400 | | (E22-X26) | |
| 39 | | Δω, $c^{-1}$ | | | | 1,02E+15 | 1,47E+15 | 1,73E+15 | 1,88E+15 | | X38*E1/H1 | |
| 40 | | λ изл, A° | | | | 18505,103 | 12781,875 | 10875,806 | 9998,725 | | (C1/X39)*10^10 | хорошее |

В табл. 6 приведены данные по спектральным переходам соответствующим трем видам электронных оболочек, одна из которых с обозначением $np^1P_1^o$ характерна наиболее точным совпадением расчетных теоретических и справочных экспериментальных данных [14]. По-видимому, сдвиги энергетических уровней в этой оболочке минимальны или вообще нулевые. Последнее служит основанием считать обозначенный в табл. 6 первый энергетический уровень принадлежащим оболочке $np^1P_1^o$. Тогда первый энергетический уровень двух *s*–оболочек, вероятнее всего, имеет значение больше 24,59 эВ. Это, возможно, и служит причиной сравнительно больших сдвигов энергий (частот) этих оболочек.

В колонке «С» табл. 6 помещены гипотетические данные по энергии связи электрона первого энергетического уровня. Расчет проведен по методике работы [11]. Однако насчет необходимости и полезности этих данных у автора есть большие сомнения. Это сомнение основано на упорядоченности расположения энергетических уровней (частот) каждой оболочки и возможности считать базовым для расчетов любой уровень, кроме уровня, обозначенного в табл. 6 первым (колонка «С»).

Вычисления $E_{\text{расч1}}$ производились с учетом гипотетических данных по энергии связи для электрона первого энергетического уровня, а вычисления $E_{\text{расч2}}$ производились по формулам табл. 5 с условием принятия за опорный уровень энергии нижнего уровня. Энергии этих уровней в табл. 6 помечены красным цветом.

Как видно из табл. 6, идеальное совпадение расчетных и экспериментальных данных наблюдается не для всех электронных оболочек. *S* – оболочки характеризуются наибольшим сдвигом энергетических уровней и меньшей точностью совпадения расчетных и экспериментальных данных. Для этих оболочек расчет проводился исходя из значения данных третьего энергетического уровня, влияние сдвига которого заметно меньшее. Подобное наблюдается и в диаграммах оптических спектров других более сложных атомов. Наблюдаемые отклонения в расчетных данных по разным оптическим сериям (сдвиг энергетических линий) нуждаются в дальнейших поисках адекватного математического описания и физического объяснения.

К сожалению, формула Блохинцева [16, стр.31], определяющая частотный сдвиг энергетических уровней, позволяет рассчитать только среднюю величину сдвига для энергетических уровней, без дифференциации сдвига по отдельным электронным оболочкам, как мы их здесь представляем. Формула Блохинцева достаточно сложная, хотя логарифмическая закономерность в частотных сдвигах энергетических уровней одной и той же электронной оболочки, судя по всему, правильно отражает реальность:

$$\delta\omega_0 = k\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^3 \frac{Z^4}{n^3} R \lg\left(\frac{mc^2}{\Delta E_{cp}}\right). \qquad (12)$$

По мнению автора, частотный метод позволит найти более простые зависимости, описывающие рассматриваемые особенности оптических спектров атомов. Ориентировкой для поисков в этом направлении может служить формула, описывающая частотные термы щелочных металлов [17, стр. 264]:

$$T(n) = \frac{R}{(n+\alpha)^2 + \frac{\beta}{n^2}}. \qquad (13)$$

Здесь $n$ – целое число, $\alpha$ - поправка, представляющая правильную дробь, а $\beta$ – вторая поправка, причем $\beta << \alpha$. Поправки $\alpha$ и $\beta$ в пределах серии имеют постоянное значение. В работе [2] приводится близкая по написанию к (13), но несколько иная формула:

$$T(n) = \frac{R}{\left(n+\alpha+\frac{\beta}{n^2}\right)^2}. \qquad (14)$$

В учебнике [18, стр.102] для термов щелочных металлов приводится более простая формула:

$$T(n) = \frac{R}{(n+\alpha)^2}. \qquad (15)$$

Приводимые значения $\alpha$ для натрия, применительно к формуле (15), таковы:

$s$ = - 1,35; $p$ = - 0,87; $d$ = - 0,01; $f$ = 0,00.

Проверка этих поправок для диаграммы натрия в частотном представлении показала хорошую сходимость расчетных результатов с экспериментальными данными. Однако физический смысл этих поправок остаётся неясным.

В подтверждение целесообразности использования частотных, а не энергетических или длин-волновых параметров, в которых описывается структура электронных оболочек атомов, можно привести и то, что современные методы частотного анализа оказываются намного точнее традиционных спектральных методов [19].

## 3 ВОЗМОЖНЫЕ НОВЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ О СТРОЕНИИ АТОМОВ

Имеющиеся представления о строении атомов и молекул, а также историческое развитие этих представлений, показаны на изображениях рис. 6.

Наибольший интерес представляют кольцегранные электротоковые модели атомов и молекул, а также пузыревидные модели молекул [20, 21]. По мнению автора, приводимые модели выражают самые современные представления, хотя они в большей части, основаны на традиционных взглядах классической физики и химии.

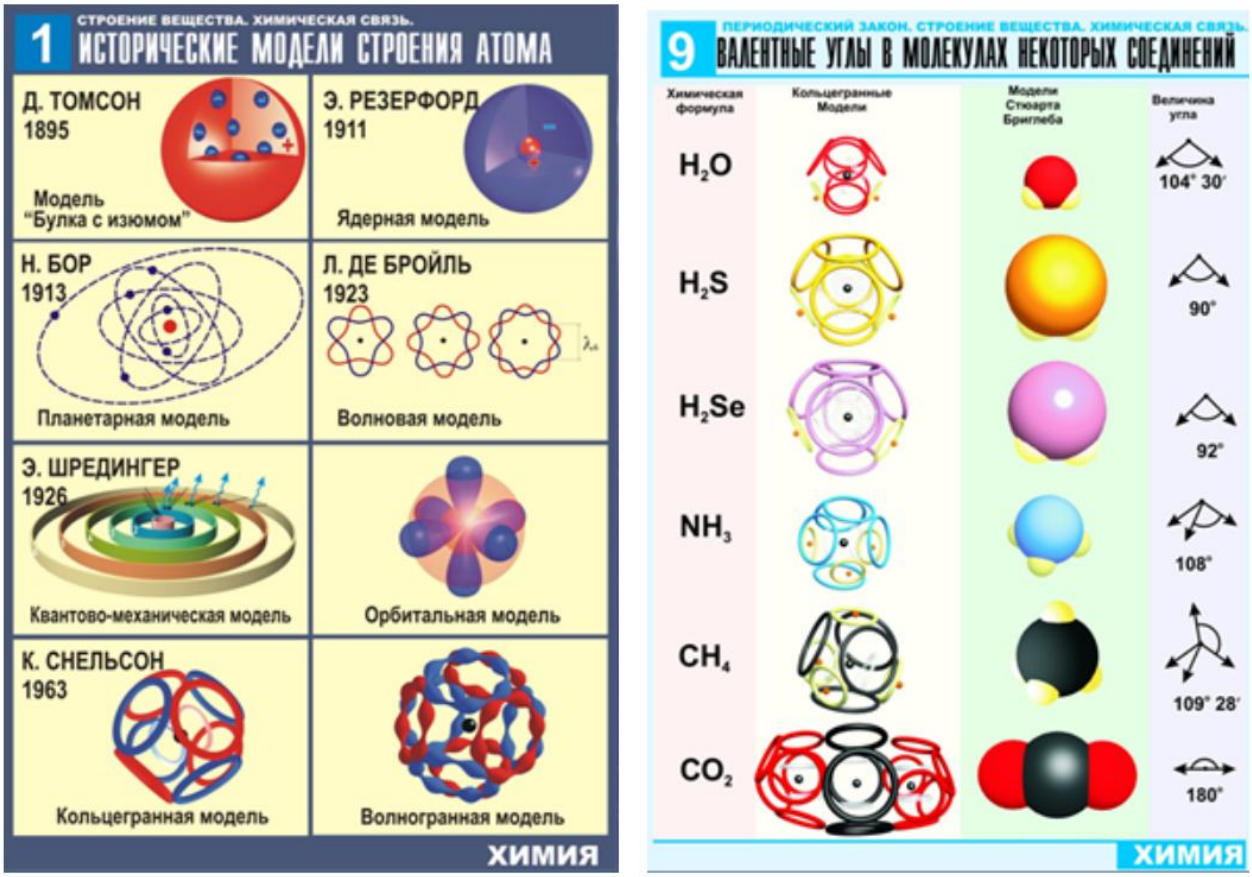


Рис. 6. Исторические модельные представления о строении атомов и молекул

Частотное представление энергетических уровней и электронных переходов, изображаемых на диаграммах Гротриана, а также кластерное оболочечное представление энергетических уровней позволяют по-новому взглянуть на структуру оптических спектров и строение самих атомов. Закономерные частотные и амплитудные соотношения в оптических спектрах атомов, а также частотная упорядоченность колебаний на внутриатомном уровне формируют новое представление об атоме как целостном частотном «оркестре» или естественной «частотной гребёнке» [2], детальное изучение которых еще впереди. Из этих представлений вытекает оболочечная или пузыревидная модель внешнего строения атома, давно используемая в химических представлениях о строении атомов и молекул. Внешние элек-

троны в этой модели представимы в виде отдельных круговых или вихревых образований на пузыревидной оболочке (рис. 7). Направление вращения этих вихревых структур может характеризовать спин электрона, а частоты вращения – энергетические уровни.

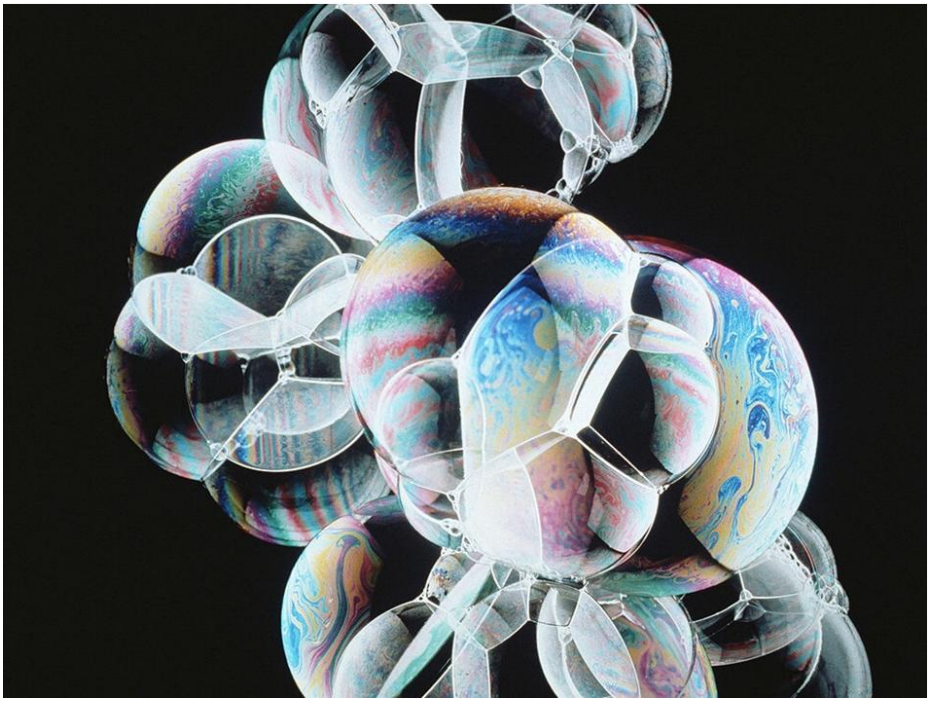

Рис. 7. Пузыри как наглядная модель строения молекул и их образующих атомов

В такой наглядной модели получают естественное физическое объяснение ориентация и квантование механического и магнитного моментов электронной оболочки атома во внешнем магнитном поле, становится понятен принцип строения многоатомных систем (молекул).

По мнению автора, в исторической перспективе неизбежен уход от модели атома, в виде сферы наполненной электронами, движущимися по своим орбитам вокруг ядра атома. Неизбежен уход и от вероятностной модели с «электронными облаками», где ядро атома обязательно мыслится в центре конструкции. В ожидаемой смене парадигм предлагаемая частотная пузыревидная модель атома, ввиду ее простоты и природной естественности, вполне может приобрести лидирующие позиции. Ядро атома в этой модели представимо в виде капли жидкости, из которой и образуется пузырь-оболочка атома.

В настоящей работе получено хорошее совпадение теоретических и экспериментальных (справочных) данных в описании структуры оптического спектра простейших атомов. Однако используемые соотношения не дают одинаковой точности совпадения данных по всем сериям оптического спектра. Поиск причин такого положения требует проведения дальнейших поисковых исследований. На успешность таких поисков позволяет надеяться наблюдаемая на диаграммах Гротриана симметрия в деформациях интервалов между энерге-

тическими уровнями одной и той же оболочки («энергетической лестницы») и закономерности межоболочечных «электронных переходов» (частотных биений).

Предлагаемая схема образования излучаемых (и поглощаемых) атомами фотонных частот имеет логическое и математическое обоснования. Наиболее соответствующие этой схеме модельные представления атома - это оболочечная плазменная [22] или пузыревидная [7] модели. Конечно, возможны и многолепестковые (или многослойные) модели по образу давно используемых в химии атомных и молекулярных орбиталей, где различают разрыхляющие и связывающие области ($\sigma$-, $\pi$- , и $\delta$- связи). Довольно близка к реальности и весьма оригинальная идея о возможном формировании оптического спектра не отдельными атомами, а их пространственно упорядоченной совокупностью («сави») [2].

В частотной модели атома, имеющего лишь одну электронную оболочку, внутренние электроны представляются как специфические круговые или местные вращательные движения (вихри) оболочки, а свободный электрон может быть представлен маленьким пузырьком или миниатюрной каплей, оторванной от электронной оболочки атома. Материал оболочки (конденсат «эфира») по величине не беспределен и, по идее, строго ограничен для каждого атома. В оболочечной модели атома с представлением внутриатомных электронов частотными колебаниями оболочки сравнительно просто получают объяснение явления, связанные с электризацией тел при трении, пьезо- и термоэлектрические явления.

Ядро атома в такой оболочечной модели трудно представимо как центрально расположенное. Скорее всего, ядро следует модельно представлять как каплю «эфирной» жидкости, из которой как пузырь «выдувается» одно- или многолепестковая оболочка атома, имеющая способность пульсировать и колебаться как по форме, так и по толщине.

Надо отметить, что наши модельные представления о едином и неделимом атоме близки соответствующим представлениям Д.И. Менделеева, опубликованным им в работе [23]. В этой работе содержатся и другие важные мировоззренческие представления, которые в перспективе могут оказаться более верными, чем современные общепризнанные.

## ВЫВОДЫ

1. Диаграммы Гротриана, используемые в спектроскопии, имеют инверсное изображение энергетических уровней, что затрудняет частотную идентификацию внутриатомных колебаний и понятие физического механизма, порождающего оптические спектры атомов.

2. Кластерное изображение энергетических уровней на диаграммах Гротриана, с особенностями фотонных переходов между ними, даёт основание воспринимать эти кластеры (с вертикальным расположением энергетических уровней) как первичные и целостные образования, присущие отдельным атомам (возможно, отдельным оболочкам атома).

3. Частотное представление спектральных энергетических уровней на диаграммах Гротриана позволило обнаружить в атомах трёхвидовую структуру частот с участием: частоты излучаемых (или поглощаемых) фотонов, дебройлевских частот, присущих колебаниям электронных оболочек атомов, и вариаций комптоновской частоты, присущей самим электронам.

4. Частоты, соответствующие колебаниям внешних электронных оболочек атомов, занимают средние по величине значения. Во взаимосвязи трёх видов частот они участвуют во второй степени, а их частотные биения с квадратичной зависимостью числовых значений, служат причиной излучения фотонов или изменяются при поглощении фотонов. Максимальная частота колебаний электронной оболочки – это частота Ридберга, а минимальная частота - нулевая.

5. Частоты электронов, представимых в виде кольцевых или вихревых образований на внешней электронной оболочке атома располагаются в интервале от частоты Ридберга, равной $2{,}067068665 \cdot 10^{16}$ $с^{-1}$ до комптоновской частоты, равной $7{,}763439614 \cdot 10^{20}$ $с^{-1}$.

6. Ряд высказанных в работе предположений о строении оптических спектров атомов и структуре самих атомов носят дискуссионный характер.

Список источников

1. Чуев А.С. Анализ структуры и частотных резонансов в оптических спектрах атомов. // Исследования в области естественных наук. 2013. № 9 [Электронный ресурс]. URL: https://science.snauka.ru/2013/09/5812, (Дубль: https://portalnp.snauka.ru/2013/09/8854).

2. Керн Йохан. Причинно-следственное токование спектра изучения газов, URL: http://www.sciteclibrary.ru/rus/catalog/pages/7383.html.

3. Раутиан С.Г., Яценко А.С. Диаграммы Гротриана. // УФН. Том 169. № 2. Электронный вариант.
http://www.ebiblioteka.lt/resursai/Uzsienio%20leidiniai/Uspechi_Fiz_Nauk/1999/02/r992f.pdf.

4. Крауфорд Ф. Волны: Уч. руководство: Пер. с англ. / Под ред. А.И. Шальникова и А.О. Вайсенберга. – 3-е изд. испр. - М.: Наука. 1984. – (Берклеевский курс физики). – 512с.

5. Верин О.Г. Физические основы строения атома,
http://www.sciteclibrary.ru/rus/catalog/pages/14155.html.

6. Верин О.Г. Гармоническое единство спектра атома,
http://www.sciteclibrary.ru/rus/catalog/pages/14412.html.

7. Чуев А.С. Модель атома с пузыреподобной электронной оболочкой. / Материалы 5-й Всероссийской конференции «Необратимые процессы в природе и технике». 26-28 января 2009 г. В 3-х частях. Часть III. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Москва. 2009. Стр. 138-141.

8. Поведение жидкости в условиях невесомости. Видео: https://www.youtube.com/watch?v=4PXkM8P3DHg.

9. Динамическая таблица Менделеева. http://www.ptable.com/.

10. Мартинсон Л.К., Смирнов Е.В. Квантовая физика: Учебное пособие. Изд-во МГТУ им Н.Э. Баумана, 2004. – 496 с.

11. Канарёв Ф.М. Начала физхимии микромира. Монография микромира. Изд. 16-е. 2012 г. – 390 с. (Изд. 15-е: https://www.micro-world.su/index.php/2010-12-22-11-45-21/139--i).

12. Эффект Джозефсона. Википедия. https://ru.wikipedia.org/

13. Чуев А.С. Нестационарный эффект Джозефсона как модель, поясняющая процесс излучения атомов // Журналы «Мир измерений» № 1 и № 2, 2019. С. 30-32 и с. 30-33.

14. Физические величины: Справочник / А.П. Бабичев, Н.А. Бабушкина, А.М. Братковский и др.; Под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Михайлова. – М., Энергоатомиздат, 1991. – 1232 с.

15. Информационная система НГУ «Электронная структура атомов», http://grotrian.nsu.ru/ru/diagramm/10425.

16. Куземский А.Л. Работы Д.И. Блохинцева и развитие квантовой физики. // Физика элементарных частиц и атомного ядра. 2008. Том 39. Вып. 1. Электронная версия: http://wwwinfo.jinr.ru/publish/Pepan/2008-v39/v-39-1/00_kuz.pdf.

17. Корсунский М.И. Оптика. Строение атома. Атомное ядро. Изд. 2-е испр. и дополн. М.: Наука. 1964. 527 с.

18. Савельев И.В. Курс общей физики. Учеб. Пособие. В 3-х т. Т. 3. Квантовая оптика. Атомная физика. Физика твердого тела. Физика атомного ядра. – 3-е изд. испр. – М.: Наука, 1987. – 320 с.

19. Хэнш Т.В. Страсть к точности. (Нобелевская лекция). УФН. Том 178. №12. Электронный вариант: http://ufn.ru/ufn06/ufn06_12/Russian/nob0612.pdf.

20. Химия Кеннета Снельсона. Электронный ресурс: https://habr.com/ru/post/374003/.

21.Яблоков В.А., Захарова О.М. Квантово-химические модели атомов и молекул. UNIVERSUM. 2017. https://7universum.com/ru/psy/archive/item/4746.

22. Киржниц Д.А., Лозовик Ю.Е.. Плазменные колебания электронной оболочки атома. УФН. Том 89, вып.1. 1966 г. Май. Стр. 39-47.

23. Менделеев Д. И. Попытка химического понимания мирового эфира. СПб., 1905 г. – 40 с., http://pulse.webservis.ru/Science/Mend/mend.html.