

运用定态法研究电子在原子核势场中的配置与运动关系

邸文学

(中国人民解放军第206医院, 吉林 通化 134001)

摘要: 研究量子理论中微观粒子系统对库仑电场势能的影响, 将作用于核与电子间的电磁场进行核心化和定态化处理, 并将原子的电磁作用分解, 分别研究壳层电场和磁场对电子的作用. 通过分析各种原子的壳层球半径、电子轨道偏角和电子的运动速度, 可知电子运动的“轨道”截面小于且偏离原子“赤道”平面, 并按原子的极相进行配置和运动. 计算主族元素中44种原子的基态能级表明, 所得结果与第一电离电势符合较好.

关键词: 基态能级; 电子轨道偏角; 极相式球截面

中图分类号: O411 文献标志码: A 文章编号: 1671-5489(2011)04-0756-04

Relationship between Disposition and Motion of Electrons in Atomic Nucleus Potential Energy by Means of State-Fixed Method

DI Wen-xue

(The People's Liberation Army No. 206 Hospital, Tonghua 134001, Jilin Province, China)

Abstract: The author studied the influence of the micro particle system on the potential energy of Coulomb electric field under the quantum theory. The electromagnetic field between atomic nucleus and electrons was submitted to nucleation and steady-state. Atomic electromagnetic field was resolved into the shell layer electric field and magnetic field, and their interaction relationships to electrons were studied respectively. Analyzing the radius of shell layers, electronic orbits deviation angle and the velocity of electrons of various atoms shows that “orbit” cross section of electrons is obviously smaller and deviates from its atomic “equatorial” plane, indicating the disposition and motion of the polar phase of atoms. The ground state levels of atoms of 44 main group element were calculated, and the results are in accordance with the first ionization potentials.

Key words: ground state level; electronic orbits deviation angle; polar phase style of the spherical section

1 电子圆周运动的轨道半径与动能及其修正

原子的壳层电磁场为电子运动提供了动能, 使电子能以恒定的角速度做匀速圆周运动. 由于电子所受电场力与磁场力的合力($F_e - F_b = m\omega^2 r$)略小于电场力 F_e , 因此在电子质量 m 和角速度 ω 不变的条件下, 轨道半径 r 将减小, 电子绕核运动产生的磁矩 P_m 与壳层磁场发生作用形成抗磁效应^[1], 同壳层间电子和异壳层间电子的相互排斥作用, 导致电子运动轨道平面偏离并小于原子的赤道平面, 电子

收稿日期: 2010-09-26.

作者简介: 邸文学(1962—), 男, 汉族, 硕士, 副研究员, 从事原子物理理论与应用的研究, E-mail: LuckyWenxue@sina.com.

基金项目: 军队科研基金(批准号: 2009ZH10026-102).

动能降低. 当电子运动轨道半径确定时, 在壳层球半径 R_n 和电子轨道球截面半径 r_0 间产生的电子轨道偏角 $\theta(0^\circ < \theta < 90^\circ)$ 为

$$r_0 = R_n \cos \theta, \tag{1}$$

电子动能 W_{zn} 为

$$W_{zn} = \frac{1}{2} \cdot \frac{Z \cdot q^2}{4\pi\epsilon_0 n \tau_z} \left(1 - \frac{v_{zn}}{c}\right) \cos^2 \theta, \tag{2}$$

其中: Z 为核电荷数; q 为电量; v_{zn} 为电子运动速度; θ 为电子轨道偏角; n 为壳层数; τ_z 为壳层厚度.

原子各壳层中的电子在壳层能量最大值球面上的某个截面内以 r_0 为轨道半径做匀速圆周运动, 该运动形式为极相式圆周运动^[2-3], 如图 1 所示. 若将正方形的每个角称为一个原子极相, 则每个极相位点到核的距离 r_0 均小于电子所在壳层的球半径 R_n (电子与核的实际距离), 并且原子极相的正方形大小与 $n\tau_z$ 成正比.

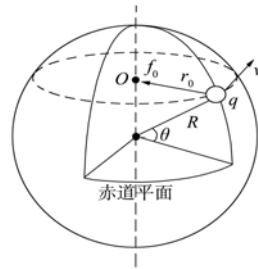


图 1 电子轨迹示意图

Fig. 1 Diagram of electron tracks

在忽略原子系统壳层磁场影响和电子间相互排斥的条件下, 电子在各种原子不同壳层中的运动速度 v_{zn} 和原子核与不同壳层中电子间的距离 R_{nz} 分别为

$$v_{zn} = k \cdot v_{H1} \frac{\sqrt{Z}}{n}, \quad R_{zn} = \tau_H \frac{\sqrt{2} n^2}{\sqrt{3} \sqrt{Z}}, \tag{3}$$

其中 k 为原子序数 Z 与壳层数 n 的比值. 当 $Z=1$ 时, $k=1$; 当 $Z \geq 3, n \geq 2$ 时, $\sqrt{3/2} \leq k \leq \sqrt{\pi/2}$, 本文取 $k = \sqrt{3/2}$, 将式(3)代入式(2)可得

$$W_{zn} = \frac{1}{2} \cdot \frac{Z \cdot q^2}{4\pi\epsilon_0 \tau_H} \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} \frac{\sqrt{Z}}{n^2} \left(1 - \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} \frac{\sqrt{Z}}{n} \cdot \frac{v_{H1}}{c}\right) \cos^2 \theta_{zn}. \tag{4}$$

2 元素周期表中各种原子的电子轨道偏角

2.1 He 原子的电子轨道偏角

He 原子的 2 个电子均在第一壳层内, 每个电子受核的引力和另一个电子的斥力. 由于电子做快速圆周运动, 因此不易确定电子在某一瞬间与其他电荷的相互作用关系. 本文采用定态简化的方法, 将电子运动轨迹在垂直方向上邻近的 2 个点 (或其圆周运动轨道球截面的圆心) 视为相对静止的点电荷, 如图 2 所示. 在不考虑壳层磁场作用的条件下, 当电子 q_2 受原子核引力和电子 q_1 对其排斥力相等时,

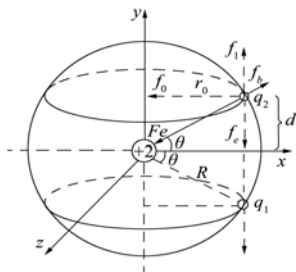


图 2 He 原子的电子间相互作用关系

Fig. 2 Interaction between electrons of He atom

可求得壳层球半径 R 与 r_0 间的夹角 $\theta = 30^\circ$. 当考虑壳层磁场作用时, 由于电子所受电场力与磁场力的作用方向相反, 因此其合力 ($F_{cb} = F_e - F_b$) 略小于电场力 F_e , 导致在核与电子直线方向上的引力变小, 电子轨道偏角 θ_{He} 增大. 由 F_{cb} 在 2 个电子垂直连线方向上的分力 f_{cb} 与 q_1 的斥力 f_{He1} 相等可得 $\theta_{He} = 30^\circ 6'$. 对比 He 的电子轨道偏角 θ 与 θ_{He} , 可知壳层电场对电子的配置与运动起主要作用, 壳层磁场对电子轨道偏角及动能变化的影响较大.

2.2 第二周期元素原子的电子轨道偏角

Li (Be) 原子的电子间相互作用关系如图 3 所示. 由图 3 可见, Li 原子的第一壳层中 2 个电子 a_1 和 a_2 配置关系与 He 原子相同, Li 原子第二壳层中的电子 q_1 受核的引力, 由上述方法可得 $\theta_{Li} = 60^\circ 54'$. 由于 Be 原子比 Li 原子多一个电子 q_2 , 且在第二壳层中 2 个极相点上的电子 q_1 和 q_2 均与原子核等距

地配置于同一轴线上,因此所受核的引力相同,电子间的排斥力也相同,由此可得 $\theta_{\text{Be}} = 56^\circ 42'$.

2.3 第三周期元素后的电子轨道偏角

图4为原子外壳层电子配置极相示意图.本文考虑当原子核电荷数为 Z ,正方体的8个角上分别配置1→8个电子时的情况,通过分析不同极相点上的电子对处于位置1电子的影响,可得如下结论:

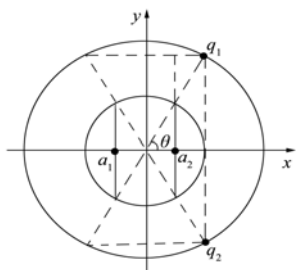


图3 Li(Be)原子的电子间相互作用关系

Fig. 3 Interaction between electrons of Li(Be) atom

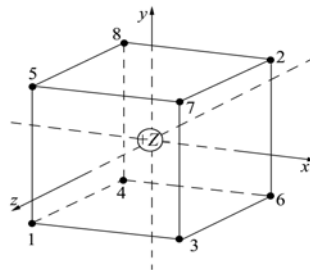


图4 原子外壳层电子配置极相示意图

Fig. 4 Diagram of disposition and polar phase of outer-shell electrons of an atom

1) 当原子8个极相上仅有1个电子(第I族)配置时,电子处于1号极相方位,其他7个极相保留空位.此时该电子受 F_e 和 F_b 的作用和其他壳层电子的排斥力作用,使其轨道偏角 θ 增大.2) 当原子正方体形的8个极相上有2个电子(第II族)配置时,将分别配置在1号和2号极相位置上,其他6个极相保留空位.此时,1号电子不仅受 F_e 和 F_b 的作用,还受原子内壳层及次外壳层电子和2号电子的排斥力作用.由于1号和2号电子的极相方位与核处于同一轴线上,且2个电子相距最远,因此相互的排斥力最小.电子间的排斥力消减了核的一部分引力,但随着原子序数 Z 的增大,核的引力增加幅度大于电子间的排斥力,从而使电子轨道偏角 θ 减小.3) 当原子正方体形的8个极相上有3~5个电子(第III→V族)配置时,由于各电子按原子极相序列配置,导致不同序号极相上电子所受的作用力数目、方向与大小存在变化,因此每个电子的轨道偏角和动能均存在差异.此时,第3→5号电子作用力方向与电子作用轴线方向的夹角均相同,由于各极相点到1号电子的距离小于到2号电子的距离,因此1和2号电子所受的排斥力不同,导致该组原子的电子动能 W_{zn} 和 $\cos \theta_{zn}$ 依次增大.4) 第VI→VIII族原子对1号电子的作用规律与第III→V族相似,即该组原子的电子动能 W_{zn} 和 $\cos \theta_{zn}$ 依次增大.

在忽略壳层磁场影响的条件下,由式(2)和式(3)可得第VIII族元素原子外壳层中电子 $\cos \theta$ 与壳层数的关系为

$$\cos \theta_{\text{VIII}} \approx 1/n, \quad n = 2, 3, 4, 5, \quad (5)$$

由式(5)可得各主族元素原子 $\cos \theta_n$ 与 $\cos \theta_{\text{VIII}}$ 的比值分别约为0.84, 0.95, 0.78, 0.86, 0.90, 0.89, 0.94.通过分析第二周期元素对电子的作用力可知,原子序数 $Z = 3 \sim 10$ (壳层数 $n = 2$)的 $\cos \theta$ 为

$$\cos \theta_{\text{Li}} = 1/n = 1/2. \quad (6)$$

$\cos \theta_{\text{Li}} : \cos \theta_{\text{Be}} \approx 1.062$, $\cos \theta_{\text{Li}} : \cos \theta_{\text{B}} \approx 0.848$, $\cos \theta_{\text{Li}} : \cos \theta_{\text{C}} \approx 0.86$, $\cos \theta_{\text{Li}} : \cos \theta_{\text{N}} \approx 0.872$, $\cos \theta_{\text{Li}} : \cos \theta_{\text{O}} \approx 0.765$, $\cos \theta_{\text{Li}} : \cos \theta_{\text{F}} \approx 0.792$, $\cos \theta_{\text{Li}} : \cos \theta_{\text{Ne}} \approx 0.81$.

3 电子动能及H原子能级与电子跃迁

以He原子为例计算电子动能.由H原子的半径 r_{H} 可推导He原子球半径 R_{He} ,再由式(4)可得处于基态下He原子的电子动能为 $W_{\text{He}1} = 24.678 \text{ eV}$,与其基态能级 24.581 eV 相符.本文通过定态法求解了44种主族元素的轨道倾角、基态能级和第一电离电势,结果列于表1.由表1可见,各主族元素原子的电子动能、电子轨道偏角和 $\cos \theta_{zn}$ 均随壳层数 n 呈周期性变化.因此通过精确的坐标、动量和轨道可对其进行描述,与利用波函数概率统计方法描述电子的运动状态^[4-6]相符.

H原子序数 $Z = 1$,壳层数 $n_{\text{H}} = 1$.由于壳层磁场的磁感应强度 B 对电子磁矩 P_m 及其抗磁效应的影响很小,因此可以忽略由电子磁矩产生的轨道偏离效应($\theta < 10'$),取 $\cos \theta_{\text{H}1} \approx 1$,由式(4)可得 $W_{\text{H}1} = 13.52 \text{ eV}$,与玻尔理论数值 13.58 eV 相符.由于H原子仅有一个电子,因此各壳层中不存在其

他电子的排斥力，电子从第一壳层跃迁到其他壳层时仅受各壳层的能量状态限制。在忽略壳层磁场力影响的条件下，当电子跃迁到其他壳层时，电子与核的实际距离为 $R_n = n\tau_H$ ，由于 H 原子的比例系数 $k=1$ ，因此由式(3)可知， $W_{Hn} = W_{H1}/n^2$ ，又由式(6)可得 $W_{Hn} \approx W_{H1} \cos^2 \theta_{Hn}/n$ ，因此

$$\cos \theta_{Hn} \approx 1/\sqrt{n} . \tag{7}$$

由式(7)计算电子轨道偏角分别为 $\theta_{H2} \approx 45^\circ$ ， $\theta_{H3} \approx 54^\circ 45'$ ， $\theta_{H4} \approx 60^\circ \dots\dots$ 因此，H 的电子在跃迁时受核的引力和壳层电场限制，使其运动速度明显下降而无法围绕原子赤道平面做圆周运动，只能按原子的极相进行配置与运动，但在其各个极相上因电磁作用明显不均衡，导致各极相间的正方体形分布状态发生形变。由式(6),(7)计算电子的跃迁能级分别为 $W_{H2} = 3.3878 \text{ eV}$ ， $W_{H3} = 1.5075 \text{ eV}$ ， $W_{H4} = 0.8485 \text{ eV}$ 。与实验数据相符。

表1 原子的基态能级 W_{zn} 与元素的第一电离电势 U_{zn} *

Table 1 Ground state level of atoms W_{zn} and the first ionization potential U_{zn} of elements

n	参数	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII
1	$\cos \theta$	1.000 0							0.865 2
	W_{zn}	13.520							24.678
	U_{zn}	13.539							24.581
2	$\cos \theta$	0.500 0	0.531 0	0.4240	0.430 0	0.436 0	0.382 5	0.396 0	0.405 0
	W_{zn}	5.359	9.295	8.273	11.173	14.467	13.589	17.368	21.260
	U_{zn}	5.390	9.320	8.296	11.256	14.545	13.614	17.418	21.559
3	$\cos \theta$	0.280 0	0.318 2	0.260 4	0.286 2	0.299 3	0.297 6	0.314 4	0.333 3
	W_{zn}	5.234	7.697	5.811	7.841	9.506	10.350	12.645	15.481
	U_{zn}	5.138	7.644	5.984	8.149	10.484	10.357	13.010	15.755
4	$\cos \theta$	0.2101	0.238 6	0.195 3	0.214 5	0.224 5	0.223 2	0.235 8	0.250 0
	W_{zn}	3.763	5.240	6.758	8.548	9.805	10.133	11.809	13.844
	U_{zn}	4.339	6.111	6.000	7.880	9.810	9.750	11.840	13.996
5	$\cos \theta$	0.168 0	0.190 9	0.1563	0.171 8	0.179 7	0.178 6	0.1887	0.200 0
	W_{zn}	4.180	5.616	5.520	6.854	7.723	7.854	9.021	10.420
	U_{zn}	4.176	5.692	5.785	7.342	8.639	9.010	10.454	12.127
6	$\cos \theta$	0.140 1	0.159 1	0.130 2	0.143 1	0.149 7	0.148 8	0.157 3	0.166 7
	W_{zn}	3.658	4.846	5.633	6.929	7.722	7.767	8.835	10.098
	U_{zn}	3.893	5.210	6.106	7.415	7.287	8.430	9.500	10.745
7	$\cos \theta$	0.120 0	0.135 8						
	W_{zn}	3.919	5.105						
	U_{zn}	4.000	5.277						

* n 为电子轨道壳层数； θ 为电子轨道偏角； U_{zn} 为基态原子失去一个电子所需的能量。

参 考 文 献

[1] 程守洙, 江之永. 普通物理学 [M]. 北京: 科学出版社, 1982: 178.

[2] XU Yu-lan. Relation of Electromagnetic Field of Evenly Charged Spheroid to Inertial Frame of Reference [J]. Journal of Beijing Teachers College: Natural Sciences Edition, 1992, 13(1): 34-39. (徐玉兰. 均匀带电球体的电磁场与惯性参照系的关系 [J]. 北京师范学院学报: 自然科学版, 1992, 13(1): 34-39.)

[3] CHEN Wei-li, XIAO Jing-lin. Bound Polaron in a Quantum Well under an Electric Field [J]. Chinese Journal of Semiconductors, 2006, 27(5): 787-791. (陈伟丽, 肖景林. 电场中束缚极化子 [J]. 半导体学报, 2006, 27(5): 787-791.)

[4] 朱栋培, 陈宏芳, 石名俊. 原子物理与量子力学 [M]. 北京: 科学出版社, 2008.

[5] 张永德. 高等量子力学 [M]. 北京: 科学出版社, 2009.

[6] 邸文学. 自然科学新体系论 [M]. 哈尔滨: 黑龙江科学技术出版社, 1995.