

Ефимов Иван Владимирович
Республика Беларусь, г Гомель
iv-efimov@mail.ru

РАСЧЕТ СПЕКТРОВ И СИСТЕМА ЕДИНИЦ ДЛЯ СПЕКТРОСКОПИИ

Аннотация *Даны пояснения к методике расчета спектров, на основании чего предложена к рассмотрению система единиц, которая может найти применение при расчетах в спектроскопии и квантовой механике.*

Начало методике расчета спектра атомов водорода положил Бальмер, представив формулу для расчета длин тех четырех линий, которые были известны экспериментаторам. Последовательность значений в формуле получила названия «серия Бальмера». Дальнейшее исследование шло также по сериям. Первая серия – Лайман. Серия Бальмера оказалась второй. Последующие серии исследовали Пашен, Брэкетт, Пфунд и Хэмфри. Обобщенные универсальные формулы для расчета длин волн и (как предполагалось) частот в спектре предложил Ридберг. Сформировалось мнение: атомы водорода излучают сериями. Но последовательность числовых значений в каждой из серий не попадала под описания ни одного известного физического процесса. Анри Пуанкаре писал по этому поводу: «На первый взгляд, изучение спектров приводит нас к мысли о гармониках, с которыми мы уже встречались в акустике. Однако имеется существенное различие: не только волновые числа не кратны одной и той же величине, но мы не находим здесь также никакой аналогии с корнями тех трансцендентных уравнений, к которым так часто приводят задачи математической физики, такие, как, например, задача о колебаниях тела определенной формы или задача о колебаниях Герца в резонаторе или, наконец, задача Фурье об охлаждении твердого тела. Эти законы проще, но они имеют совершенно иную природу... В этом не отдавали себе отчета, и я думаю, что здесь и кроется одна из важнейших тайн природы».

Предпримем попытку приоткрыть завесу над этой тайной.

Для начала принимаем к рассмотрению формулу

$$E_f = (1/n^2 - 1/(n + l)^2) \quad (1)$$

где: **n** и **l** – целые числа начиная от единицы и до бесконечности.

Последовательно принимая значения **l** начиная от единицы, получаем ряд телескопических серий. При значении **l** = 1 телескопическая сумма последовательности будет равна единице: $E_{n1} = 1$

Последовательность значений E_f в этой серии: 0,75; 0,1379; 0,0486; 0,0225; 0,0122; 0,074; 0,048.....

Телескопические суммы последующих серий принимают значения: 1,25; 1,1,36111; 1,4236; 1,4636, 1,4914; 1,5118; 1,5274; 1,5398..., что позволяет вести речь о резонансе.

При $l = \infty$ формула (1) принимает вид $E = 1/n^2$

Для расчета суммы такой последовательности Эйлер предложил формулу $E = \pi^2/6$. Принимаем: $E_{\lim} = 1,643266667$.

Покажем, как ряд полученных значений можно применить для описания превращения энергии при явлениях резонанса и затухающих колебаний.

Рассмотрим на примере вертикального пружинного маятника.

Пружина растянута, принимаем потенциальную энергию системы $E_{п1,1}$ равной безразмерной единице. За первый переход при движении вверх затрата энергии $E_{f1,1}$ составит 0,75. Потенциальная энергия $E_{п2,1} = 0,25$.

Второй переход – движение вниз. Затрата энергии $E_{f2,1}$ составит 0,1389

Далее значения потенциальной энергии можно определять методом последовательного вычитания, или (для серии $l=1$) по формуле $E_f = 1/n^2$

Энергетические переходы для последующих серий – по аналогии. Результаты расчетов сводим в таблицу 1.

Таблица энергетических переходов

Таблица 1

n, номер перехода	Энергия	l, номер линии									
		1	2	3	4	5	6				lim
1	$E_{п}$	1,000	1,250	1,361	1,424	1,464	1,491				1,643
	E_f	0,750	0,889	0,938	0,960	0,972	0,980				1,000
2	$E_{п}$	0,250	0,361	0,424	0,464	0,491	0,512				0,643
	E_f	0,139	0,188	0,210	0,222	0,230	0,234				0,250
3	$E_{п}$	0,111	0,174	0,214	0,241	0,262	0,277				0,393
	E_f	0,049	0,071	0,083	0,091	0,095	0,099				0,111
4	$E_{п}$	0,063	0,103	0,130	0,151	0,166	0,179				0,282
	E_f	0,023	0,035	0,042	0,047	0,050	0,053				0,063
5	$E_{п}$	0,040	0,068	0,088	0,104	0,116	0,126				0,220
	E_f	0,012	0,020	0,024	0,028	0,030	0,032				0,040

Внешний вид таблицы позволяет сделать предположение, что она отображает оптимальный процесс резонанса и затухающих колебаний.

Если система с энергией $E_{\lim} = 1,643266667$ получит дополнительное энергетическое воздействие, то произойдет разрушение

Введя в формулу (1) дополнительный множитель, имеющий размерность энергии, а именно – 13,598эв, мы получаем:

$$E = 13,598 (1/n^2 - 1/(n + l)^2) \text{ эв} \quad (2)$$

Перед нами модифицированный вариант формулы, предложенной Н.Бором для расчета энергии фотонов в спектре атомов водорода.

По аналогии с Таблицей 1, результаты расчетов сводим в Таблицу 2

Энергетические переходы в спектре атомов водорода

Таблица2

n, номер перехода	Энергия	l, номер линии									
		1	2	3	4	5	6				lim
1	Еп, эв	13,598	16,997	18,508	19,357	19,901	20,279				22,342
	Еf, эв	10,199	12,087	12,748	13,054	13,220	13,321				13,598
2	Еп, эв	3,399	4,910	5,759	6,303	6,681	6,958				8,744
	Еf, эв	1,888	2,549	2,855	3,021	3,122	3,187				3,399
3	Еп, эв	1,511	2,360	2,904	3,282	3,559	3,772				5,345
	Еf, эв	0,661	0,967	1,133	1,233	1,298	1,343				1,511
4	Еп, эв	0,850	1,394	1,771	2,049	2,261	2,429				3,834
	Еf, эв	0,306	0,472	0,572	0,637	0,682	0,714				0,850
5	Еп, эв	0,544	0,922	1,199	1,411	1,579	1,715				2,985
	Еf, эв	0,166	0,266	0,331	0,376	0,408	0,431				0,544

В таблице наглядно отображены энергетические переходы в атомах водорода вследствие процесса резонанса и затухающих колебаний. На основании этого можно утверждать, что атомы способны упруго взаимодействовать с поглощаемыми порциями энергии, а затем последовательно и непрерывно излучать порции энергии (фотоны) в процессе затухающих колебаний.

Формула (2) применима только для атомов водорода, но можно предложить систему формул и методику, которая позволит рассчитывать спектры и других химических элементов.

Для обоснования методики следует сделать некоторые пояснения. Вместо общепринятого термина «порядковый номер серии» потребуется применить термин «порядковый номер перехода» **n**. Термин «порядковый номер линии» **l** остается прежним. Фотон, испущенный в процессе первого перехода, назовем «альфа-фотон», а его энергию и протяженность в пространстве, соответственно – «энергия альфа-фотона» E_{α} и «длина альфа-фотона» L_{α} . Как видно из таблицы, для водорода реальной энергией ионизации является значение 22,378эв, но пока под термином «энергия ионизации химических элементов» будем принимать те значения, которые имеются в справочниках.

Энергию фотонов первого перехода предлагается рассчитывать по эмпирической формуле

$$E_{f1} = E_{\alpha} + E_{п2}(1 - 4/(1+l)^2) \quad (3)$$

Потенциальную энергию к началу каждого перехода будем определять методом последовательных вычитаний. В таком случае $E_{п2} = (E_i - E_{\alpha})$

Формула для расчета энергии фотонов второго перехода:

$$E_{f2} = E_{п2}(1 - 2^2/(2+l)^2) \text{ эв} \quad (9)$$

Энергия фотонов третьего перехода:

$$E_{f3} = E_{п3}(1 - 3^2/(3+l)^2) \text{ эв} \quad (10)$$

Формулы для последующих переходов - по аналогии

Для примера приведем расчет спектра атомов гелия.

Принимаем: $E_i = 24,587 \text{ эВ}$; $E_\alpha = 21,2175 \text{ эВ}$

К началу второго перехода потенциальная энергия $E_{п2}$:

$$E_{п2} = 24,587 - 21,2175 = 3,3695 \text{ эВ}$$

Энергия фотонов первого перехода

$$E_{f1} = 21,2175 + 3,3695(1 - 4/(1+1)^2) \text{ эВ}$$

Энергия фотонов второго перехода:

$$E_{f2} = 3,3695(1 - 2^2/(2+1)^2) \text{ эВ}$$

К началу третьего перехода потенциальная энергия $E_{п3} = 1,498 \text{ эВ}$

Третий переход:

$$E_{f3} = 1,498(1 - 3^2/(3+1)^2) \text{ эВ}$$

Представленных формул достаточно, чтобы сформировать Таблицу 3

Энергетические переходы в спектре атомов гелия **Таблица 3**

n, номер перехода	Энергия	l, номер линии							
		1	2	3	4	5	6		lim
1	Еп, эВ	24,587	27,957	29,454	30,296	30,836	31,210		33,280
	Еf, эВ	21,2175	23,089	23,745	24,048	24,213	24,312		24,587
2	Еп, эВ	3,370	4,867	5,709	6,249	6,623	6,898		8,693
	Еf, эВ	1,872	2,527	2,830	2,995	3,094	3,159		3,370
3	Еп, эВ	1,498	2,340	2,879	3,253	3,529	3,739		5,324
	Еf, эВ	0,655	0,958	1,123	1,222	1,287	1,331		1,498
4	Еп, эВ	0,842	1,381	1,756	2,031	2,242	2,408		3,826
	Еf, эВ	0,303	0,468	0,567	0,632	0,676	0,708		0,842
5	Еп, эВ	0,539	0,914	1,189	1,399	1,566	1,700		2,984
	Еf, эВ	0,165	0,264	0,329	0,373	0,404	0,428		0,539

Спектры атомов последующих элементов следует рассчитывать по методике, аналогичной той, что и для атомов гелия.

На следующем этапе ознакомимся с предложением по внедрению системы единиц для спектроскопии и квантовой механики. Обозначим аббревиатурой ССКМ.

Если за единицу энергии принять величину «энергии ионизации» атомов водорода, то есть $1E = 13,598 \text{ эВ}$, то таблица спектров атомов водорода принимает точно такой вид, как это отображено в Таблице 1

В системе единиц ССКМ исходные данные для расчета спектра атомов гелия принимают вид:

$$E_i = 24,587 : 13,598 = 1,808$$

$$E_\alpha = 21,2175 : 13,598 = 1,560$$

Таблица энергетических переходов в спектре атомов гелия будет выглядеть следующим образом:

Энергетические переходы в спектре атомов гелия **Таблица 4**

n, номер перехода	Энергия	l, порядковый номер линии									
		1	2	3	4	5	6				lim
1	Еп	1,808	2,056	2,166	2,228	2,268	2,295				2,447
	Еf	1,560	1,698	1,746	1,768	1,780	1,788				1,808
2	Еп	0,248	0,358	0,420	0,460	0,487	0,508				0,6390
	Еf	0,138	0,186	0,208	0,220	0,228	0,233				0,2480
3	Еп	0,110	0,172	0,212	0,239	0,260	0,275				0,3910
	Еf	0,048	0,071	0,083	0,090	0,095	0,098				0,1102
4	Еп	0,062	0,102	0,129	0,149	0,165	0,177				0,2808
	Еf	0,022	0,034	0,042	0,047	0,050	0,052				0,0620
5	Еп	0,040	0,067	0,087	0,103	0,115	0,125				0,2188
	Еf	0,012	0,019	0,024	0,027	0,030	0,031				0,0397

Аналогичным образом в системе ССКМ можно представить таблицы спектров и других элементов. Приведем дополнительно несколько таблиц, а именно для: атомов лития; ионов лития Li^+ ; атомов кислорода.

Для атомов лития принимаем к расчетам:
 $E_i = 5,39 \text{ эВ} = 0,3964$; $E_\alpha = 1,8483 \text{ эВ} = 0,1359$

Энергетические переходы в спектре атомов лития **Таблица 5**

n, номер перехода	Энергия	l, порядковый номер линии									
		1	2	3	4	5	6				lim
1	Еп	0,3964	0,657	0,773	0,838	0,879	0,908				1,069
	Еf	0,1359	0,281	0,331	0,355	0,367	0,375				0,396
2	Еп	0,2605	0,376	0,441	0,483	0,512	0,533				0,673
	Еf	0,1447	0,195	0,219	0,232	0,239	0,244				0,261
3	Еп	0,1158	0,181	0,223	0,252	0,273	0,289				0,412
	Еf	0,0507	0,074	0,087	0,095	0,099	0,103				0,116
4	Еп	0,0651	0,107	0,136	0,157	0,173	0,186				0,296
	Еf	0,0234	0,036	0,044	0,049	0,052	0,055				0,065
5	Еп	0,0417	0,071	0,092	0,108	0,121	0,131				0,231
	Еf	0,0127	0,020	0,025	0,029	0,031	0,033				0,042

Для ионов Li^+ принимаем: $E_i = 75,63 \text{ эв} = 5.5618$;

Энергетические переходы в спектре ионов Li^+

Таблица 6

n, номер перехода	Энергия	l, номер линии									
		1	2	3	4	5	6				lim
1	$E_{\text{п}}$	5,562	6,548	6,987	7,234	7,391	7,501				8,107
	$E_{\text{ф}}$	4,575	5,123	5,315	5,404	5,452	5,481				5,562
2	$E_{\text{п}}$	0,987	1,425	1,672	1,830	1,939	2,020				2,545
	$E_{\text{ф}}$	0,548	0,740	0,829	0,877	0,906	0,925				0,987
3	$E_{\text{п}}$	0,438	0,685	0,843	0,953	1,033	1,095				1,559
	$E_{\text{ф}}$	0,192	0,281	0,329	0,358	0,377	0,390				0,438
4	$E_{\text{п}}$	0,247	0,405	0,514	0,595	0,656	0,705				1,120
	$E_{\text{ф}}$	0,089	0,137	0,166	0,185	0,198	0,207				0,247
5	$E_{\text{п}}$	0,158	0,267	0,348	0,410	0,458	0,498				0,873
	$E_{\text{ф}}$	0,048	0,077	0,096	0,109	0,118	0,125				0,158

Для атомов кислорода: $E_i = 13,618 \text{ эв} = 1,0015$; $E_{\alpha} = 10,1824 \text{ эв} = 0,749$

Энергетические переходы в спектре атомов кислорода

Таблица 7

n, номер перехода	Энергия	l, порядковый номер линии									
		1	2	3	4	5	6				lim
1	$E_{\text{п}}$	1,0015	1,254	1,366	1,429	1,470	1,498				1,6515
	$E_{\text{ф}}$	0,749	0,889	0,938	0,961	0,973	0,981				1,0015
2	$E_{\text{п}}$	0,253	0,365	0,428	0,468	0,496	0,517				0,650
	$E_{\text{ф}}$	0,140	0,189	0,212	0,224	0,232	0,237				0,253
3	$E_{\text{п}}$	0,112	0,175	0,216	0,244	0,264	0,280				0,397
	$E_{\text{ф}}$	0,049	0,072	0,084	0,092	0,096	0,100				0,112
4	$E_{\text{п}}$	0,063	0,104	0,132	0,152	0,168	0,180				0,285
	$E_{\text{ф}}$	0,023	0,035	0,043	0,047	0,051	0,053				0,063
5	$E_{\text{п}}$	0,040	0,068	0,089	0,105	0,117	0,127				0,222
	$E_{\text{ф}}$	0,012	0,020	0,025	0,028	0,030	0,032				0,040

Основное преимущество предлагаемой системы единиц – наглядность. Из представленных таблиц видно, как полученные в результате расчетов значения энергий соотносятся с величиной, принятой за единицу энергии 1Е.

Система единиц не может ограничиваться только единицей энергии, поэтому следует продолжить.

За единицу времени принимается длительность первого перехода:
 $1T = 0,3041 \times 10^{-15} \text{ с}$

За единицу длины – длина альфа-фотона: $1L = 911,75 \text{ \AA}$

Отметим, что значения $0,3041 \times 10^{-15} \text{ с}$ и $911,75 \text{ \AA}$ являются величинами, обратными значениям, которые принято называть «постоянные Ридберга». Именно в этом и заключается физический смысл этих постоянных

Скорость света принимает значение безразмерной единицы:

$$c = 1 = 3 \times 10^8 \text{ м/с}$$

Единицу массы будем определять из формулы $1m = 1E/c^2$. Поскольку энергия $13,598 \text{ эВ}$ соответствует значению $2,1864 \times 10^{-18} \text{ Дж}$, то записываем:

$$1m = 2,1864 \times 10^{-18} : (3 \times 10^8)^2 = 2,43 \times 10^{-35} \text{ кг}$$

Исходя из того, что постоянная Планка является наименьшим действием, которое только может происходить в природе, а физическое действие – это произведение энергии на время, в течение которого энергия поглощалась или выделялась, то постоянная Планка, так же, как и единица энергии и единица времени принимается равной единице: $h = 1$.

Поскольку в процессе затухающих колебаний не бывает никаких частот, то вместо общепринятой формулы $E = h\nu$ следует руководствоваться формулой $h = EfT = \text{const}$, где Ef – энергия испущенного или поглощенного фотона; T – длительность (протяженность по времени) процесса испускания или поглощения.

За единицу заряда принимается величина, по номиналу равная единице массы: $1Q = 2,43 \times 10^{-35} \text{ кг} = 2,43 \times 10^{-35} \text{ кг} \times 8,61 \times 10^{-11} \text{ Кл/кг} = 2,09 \times 10^{-45} \text{ Кл}$.

Примечание: Соотношение $1\text{кг} = 8,61 \times 10^{-11} \text{ Кл}$ обосновано в статье «Предложения по введению системы единиц СИЭ»

В заключение можно добавить, что при расчетах в системе ССКМ нет необходимости оперировать такими понятиями, как квантовые числа, квант энергии, спин электрона, частота фотонов, постоянные Ридберга. Вместо термина «уровень энергии атома» следует применять термин «потенциальная энергия». Величины реальной энергии ионизации атомов следует пересмотреть, из чего следует, что пересмотру подлежит и формула Эйнштейна для внешнего фотоэффекта. Все представления, основанные на базе теории Н.Бора, следует признать ошибочными.

Литература

1. Н. Бор. О строении атомов и молекул. Сборник «Избранные научные труды» под редакцией И.А. Тамма. М. Наука, 1970
2. Стриганов А.Р., Одинцова Г.А. Таблицы спектральных линий. М. Наука. 1977
3. В. Данин. Вероятностный мир. Издательство «Знание», М. 1981
4. И.В. Ефимов. «Квантовый иллюзион Нильса Бора». LAP, Hmbg, 978-3-659-36500-3
5. И.В. Ефимов. Предложения по введению системы единиц СИЭ <http://www.sciteclibrary.ru/rus/catalog/pages/14546.html>