

# Квантовый дефект и простые дроби

О.Г. Верин

*Простые дроби вида  $N_1/N_2$ , где  $N_1$  и  $N_2$  - небольшие целые числа, нередко используются при квантово-механическом описании объектов микромира (например, это дробные заряды кварков и некоторые квантовые характеристики, такие как спин частиц).*

*Относительно недавно был открыт дробный квантовый эффект Холла, и простые дроби значительно расширили свое присутствие в физике микромира. Теория дробного квантового эффекта Холла оказалась весьма нетривиальной, так что Нобелевская премия по физике в 1998 году была присуждена и за само открытие в 1982г. (Даниэль Цуи и Хорст Штёрмер), и за создание теории эффекта в 1983г. (Роберт Лафлин).*

*И вот теперь еще одно сенсационное открытие: простые дроби были «обнаружены» при анализе экспериментальных характеристик «водородоподобных» атомов и ионов (с единственным электроном на внешней оболочке). Оказалось, что эффективные главные квантовые числа внешнего электрона, то есть, с учетом квантового дефекта (поправки Ридберга), могут быть выражены простыми дробями.*

## Quantum defect and common fractions

O.G. Verin

*The common fractions  $N_1/N_2$ , where  $N_1$  and  $N_2$  – the small integers, quite often are used at the quantum-mechanical description of microcosm objects (for example, fractional charges of quarks and some quantum characteristics, such as particles spin).*

*Recently the fractional quantum Hall effect was discovered, and common fractions have considerably expanded their presence in microcosm physics.*

*The theory of the fractional quantum Hall effect has appeared nontrivial, so the Nobel Prize on physics in 1998 was awarded not only for discovery of the*

*effect in 1982 (Daniel Tsui and Horst Störmer) but also for the theory creation in 1983 (Robert Laughlin).*

*And now one more sensational discovery: common fractions were «detected» at the analysis of experimental characteristics of «hydrogen-like» atoms and ions (with only one electron on an outer shell). It has appeared, that the effective main quantum number of outer shell electron, that is, subject to quantum defect (Rydberg correction), can be expressed in common fractions.*

Значения главного квантового числа  $n$  состояний атома водорода определяются непосредственно из формулы для энергии электрона [1]

$$E = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}. \quad (1)$$

Однако «похожие» на водород атомы с одним внешним электроном имеют очень сложные спектры. В частности, в [1] (§68) относительно состояний, напоминающих водородные, сказано следующее:

«У других атомов существуют состояния, по своим свойствам напоминающие водородные. Речь идет о сильно возбужденных состояниях, в которых один из электронов обладает большим главным квантовым числом и потому находится в основном на больших расстояниях от ядра. Движение такого электрона можно рассматривать, в некотором приближении, как движение в кулоновом поле «атомного остатка» с эффективным зарядом равным единице. Получающиеся, таким образом, значения уровней энергии оказываются, однако, слишком неточными, и в них надо внести поправку, учитывающую отклонение поля на малых расстояниях от чисто кулонового».

«... мы можем заключить, что для уровней энергии получится выражение, отличающееся от водородного заменой радиального, или, что то же, главного квантового числа  $n$  на  $(n+\Delta_i)$ , где  $\Delta_i$  - некоторая постоянная (так называемая поправка Ридберга):

$$E = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{(n + \Delta_i)^2}. \quad (2)$$

Поправка Ридберга не зависит (по самому своему определению) от  $n$ , но является, конечно, функцией азимутального квантового числа  $l$  возбужденного электрона (которое мы приписываем к  $\Delta$  в виде индекса), а также от моментов  $L$  и  $S$  атома в целом. При заданных  $L$  и  $S$   $\Delta_i$  быстро

убывает с увеличением  $l$ . Чем больше  $l$ , тем меньше времени электрон проводит вблизи ядра, а потому уровни энергии должны все больше приближаться к водородным».

Поправка Ридберга (квантовый дефект) определяется эмпирически, а теоретический расчет наталкивается на большие трудности.

Однако в последние несколько лет анализ накопленных за многие десятилетия экспериментальных данных показал [2], что эффективные главные квантовые числа внешнего электрона  $n^* = (n + \Delta_i)$ , то есть, с учетом квантового дефекта, оказываются близкими к величинам некоторых простых дробей  $n^* \approx N_1/N_2$ , где  $N_1$  и  $N_2$  - небольшие целые числа.

Рассмотрим подробнее эту экспериментальную закономерность, используя характеристики атомов и ионов с единственным внешним электроном в невозбужденном состоянии. В этом случае внешний электрон находится наиболее близко к атомному остатку и его влияние на движение электрона особенно велико.

Фактические (эффективные) значения  $n^*$  «водородоподобных» атомов, исходя из (2), выражаются через потенциалы ионизации:

$$n^* = \left( \frac{13,6}{\varphi_i} \right)^{1/2}. \quad (3)$$

Здесь  $\varphi_i$  - потенциал ионизации рассматриваемого атома,  
13,6 эВ – потенциал ионизации атома водорода.

В более общем случае «водородоподобного» иона с зарядом атомного остатка  $ze$  формула (3) приобретает вид:

$$n^* = \left( \frac{13,6z^2}{\varphi_i} \right)^{1/2}. \quad (4)$$

Результаты расчетов  $n^*$  по формуле (3) с использованием известных экспериментальных значений  $\varphi_i$  [3] сведены в таблице 1. Там же показаны наиболее близкие к этим числам простые дроби:

$$n = \frac{N_1}{N_2}, \quad (5)$$

где  $N_1, N_2$  – небольшие целые числа, полученные путем подбора.

Представленные в таблице 1 данные характеризуют невозбужденное состояние единственного внешнего электрона атомов.

Таблица 1

Атом	Li	Na	K	Cs	Rb	Ag	Pt	Nb	Fr
$\varphi_i, \text{эВ}$	5,39	5,138	4,339	3,893	4,176	7,574	8,96	6,88	3,98
$n^*$	1,588	1,627	1,770	1,869	1,805	1,340	1,232	1,406	1,849
$n^* \approx N_1/N_2$	19/12 (1,583)	13/8 (1,625)	23/13 (1,769)	15/8 (1,875)	9/5 (1,80)	4/3 (1,333)	16/13 (1,231)	7/5 (1,40)	24/13 (1,846)

Для подбора конкретных значений числителя и знаменателя простых дробей (5) удобно воспользоваться вспомогательной таблицей 2.

В таблице введено ограничение на  $N_2$  до 13 включительно.

Под каждым значением знаменателя  $N_2$  (от 2 до 13) в столбцах находятся все значения дробей  $N_1/N_2$  в пределах от 1 до 2, используемые для определения простой дроби, ближайшей к каждому конкретному экспериментальному значению главного квантового числа.

В качестве примера в таблице 2 красным цветом выделены значения простых дробей, которые оказались наиболее близкими к величинам эффективных главных квантовых чисел  $n^*$ , представленных в табл. 1.

Таблица 2

### Значения простых дробей $n=N_1/N_2$ в пределах $1 \leq n \leq 2$ , при $N_2 \leq 13$ .

2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
1,5	1,333333	1,25	1,2	1,166667	1,142857	1,125	1,111111	1,1	1,090909	1,083333	1,076923
2	1,666667	1,5	1,4	1,333333	1,285714	1,25	1,222222	1,2	1,181818	1,166667	1,153846
	2	1,75	1,6	1,5	1,428571	1,375	1,333333	1,3	1,272727	1,25	1,230769
		2	1,8	1,666667	1,571429	1,5	1,444444	1,4	1,363636	1,333333	1,307692
			2	1,833333	1,714286	1,625	1,555556	1,5	1,454545	1,416667	1,384615
				2	1,857143	1,75	1,666667	1,6	1,545455	1,5	1,461538
					2	1,875	1,777778	1,7	1,636364	1,583333	1,538462
						2	1,888889	1,8	1,727273	1,666667	1,615385
							2	1,9	1,818182	1,75	1,692308
								2	1,909091	1,833333	1,769231
									2	1,916667	1,846154
										2	1,923077
											2

Аналогичные характеристики «водородоподобных» ионов с зарядом атомного остова, равным двум и трем зарядам электрона ( $z=2$ ,  $z=3$ ), вычисленные по формуле (4), представлены в таблицах 3 и 4.

Несмотря на то, что некоторые значения  $n^*$  в таблицах 3 и 4 превышают 2, вспомогательная таблица 2 также может быть использована, так как при увеличении числителя  $N_1$ , очевидно, происходит периодическое увеличение величины дроби  $N_1/N_2$  на единицу, а соответствующие цифры после запятой повторяются.

Таблица 3

Ион ( $z=2$ )	Be <sup>+</sup>	Mg <sup>+</sup>	Ca <sup>+</sup>	Sr <sup>+</sup>	Ba <sup>+</sup>	Cd <sup>+</sup>	Ra <sup>+</sup>	Fe <sup>+</sup>	La <sup>+</sup>
$\varphi_i$ , эВ	18,21	15,03	11,87	11,026	10	16,904	10,144	16,18	11,43
$n^*$	1,728	1,902	2,141	2,221	2,332	1,794	2,316	1,834	2,182
$n^* \approx N_1/N_2$	19/11 (1,727)	19/10 (1,9)	15/7 (2,143)	20/9 2,222	7/3 (2,333)	9/5 (1,8)	30/13 (2,308)	11/6 (1,833)	24/11 (2,182)

Таблица 4

Ион ( $z=3$ )	B <sup>++</sup>	Al <sup>++</sup>	Sc <sup>++</sup>	Y <sup>++</sup>	In <sup>++</sup>
$\varphi_i$ , эВ	37,92	28,44	24,75	20,5	28
$n^*$	1,797	2,075	2,224	2,444	2,091
$n^* \approx N_1/N_2$	9/5 (1,8)	27/13 (2,077)	20/9 (2,222)	22/9 (2,444)	23/11 (2,091)

Вместе с тем, возникает вполне закономерный вопрос: не слишком ли плотно на числовой оси располагаются числа, представленные в таблице 2, и поэтому, не имеем ли мы здесь дело со случайными совпадениями дробных чисел с соответствующими экспериментальными значениями  $n^*$ ?

Чтобы проверить это предположение, вся совокупность дробных чисел таблицы 2 была рассортирована в порядке возрастания. Далее, эта последовательность чисел была представлена в виде возрастающей кривой с маркерами, соответствующими этим числам, а экспериментальные значения главных квантовых чисел были изображены в виде горизонтальных линий, пересекающих эту кривую.

На рис. 1 показано такое наглядное представление характеристик атомов с единственным внешним электроном в невозбужденном состоянии, приведенных в табл.1.

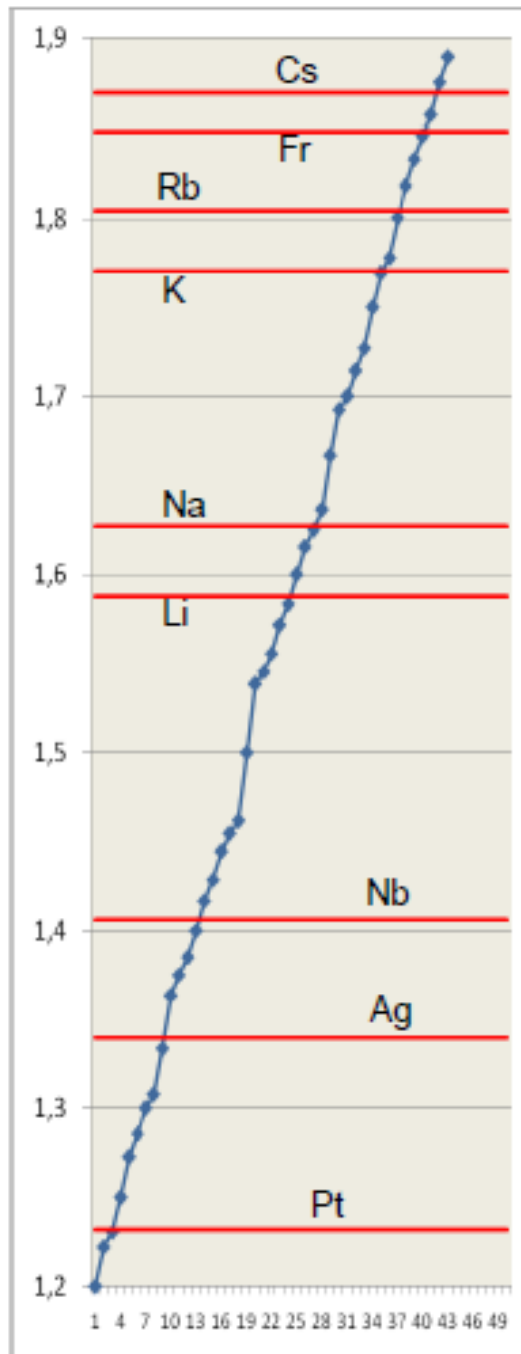


Рис. 1. Эффективные главные квантовые числа водородоподобных атомов (табл. 1) показаны в виде горизонтальных линий. Простые дроби ( $N_2 \leq 13$ ) помечены маркерами на возрастающей кривой (табл.2).

Наглядное представление данных, действительно, оказалось эффективным инструментом для доказательства не случайного характера обнаруженной экспериментальной закономерности.

С другой стороны, стало ясно, что ограничение  $N_2 \leq 13$  вполне достаточно для такого анализа.

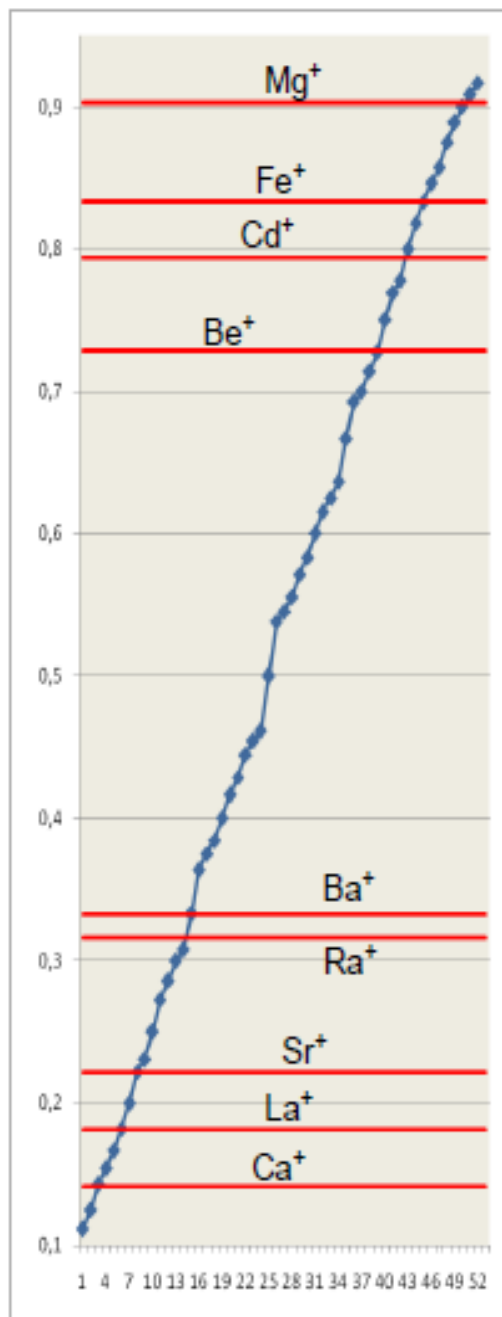


Рис. 2. Эффективные главные квантовые числа водородоподобных ионов ( $z=2$ , табл. 3) показаны в виде горизонтальных линий. Значения простых дробей ( $N_2 \leq 13$ ) помечены маркерами на возрастающей кривой. Целые части чисел отброшены.

Так как именно ограничение на знаменатель  $N_2$  определяет плотность расположения значений дробей на числовой оси, а увеличение  $N_1$  только периодически увеличивает значение дроби на единицу, то на рис. 2 и последующих рисунках изображены только дробные части чисел (целые части чисел отброшены).

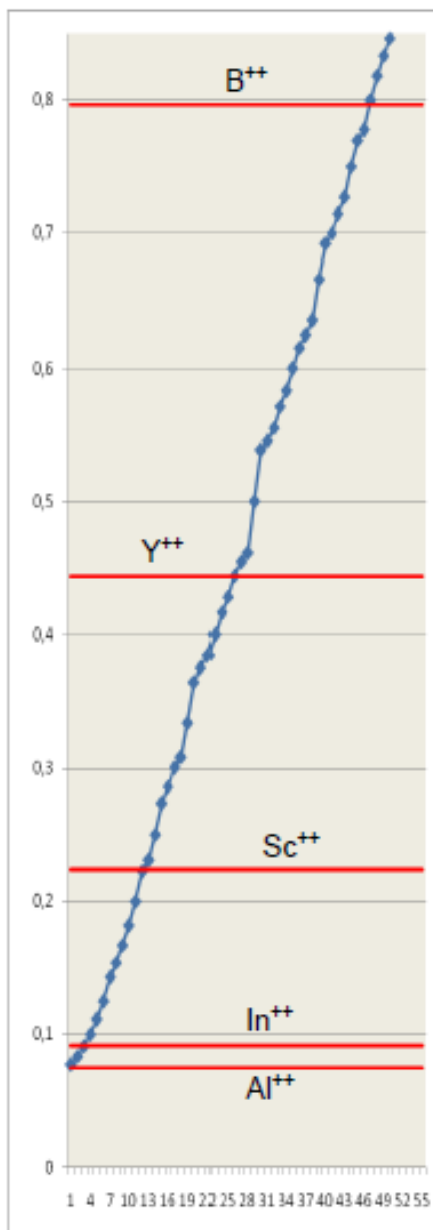


Рис. 3. Эффективные главные квантовые числа водородоподобных ионов ( $z=3$ , табл. 4) показаны в виде горизонтальных линий. Значения простых дробей ( $N_2 \leq 13$ ) помечены маркерами на возрастающей кривой.

Целые части чисел отброшены.



Заметим, что графическое представление материала и использование вспомогательной табл. 2 позволило также уточнить величины некоторых простых дробей, сопоставляемых в более ранней работе [2] главным квантовым числам «водородоподобных состояний».

Для дополнительной проверки обнаруженной экспериментальной закономерности были проанализированы характеристики ряда других «водородоподобных» ионов, в том числе, с большой степенью ионизации.

Результаты этих расчетов представлены в таблицах 5,6 и рис. 4,5.

Таблица 5

Ион	Si <sup>+++</sup>	P <sup>++++</sup>	S <sup>+++++</sup>	Cl <sup>+++++</sup>	J <sup>+++++</sup>	Ar <sup>+++++</sup>
<i>z</i>	4	5	6	7	7	8
$\varphi_i, \text{эВ}$	45,13	65,01	88	114,2	104	143,4
<i>n</i> <sup>*</sup>	2,196	2,287	2,359	2,416	2,531	2,464
$n^* \approx N_1/N_2$	11/5 (2,2)	16/7 (2,286)	26/11 (2,364)	29/12 2,417	33/13 (2,538)	32/13 (2,462)

Таблица 6

Ион	Hg <sup>+</sup>	Sn <sup>+++</sup>	Pb <sup>+++</sup>	Sb <sup>++++</sup>	Bi <sup>++++</sup>	Te <sup>+++++</sup>	Po <sup>+++++</sup>	Xe <sup>+++++</sup>
<i>z</i>	2	4	4	5	5	6	6	8
$\varphi_i, \text{эВ}$	18,751	46,4	39	63,8	56	83	73	126
<i>n</i> <sup>*</sup>	1,703	2,166	2,362	2,308	2,464	2,429	2,59	2,628
$n^* \approx N_1/N_2$	17/10 (1,7)	13/6 (2,167)	26/11 (2,364)	30/13 (2,308)	32/13 (2,462)	17/7 (2,429)	31/12 (2,583)	21/8 (2,625)

Как и предыдущие данные, характеристики «водородоподобных» ионов с самыми разными степенями ионизации подтверждают близость эффективных главных квантовых чисел единственного внешнего электрона к величинам простых дробей  $N_1/N_2$  (с ограничением знаменателя относительно небольшим числом  $N_2 \leq 13$ ).

Графическое представление характеристик этих ионов на фоне последовательности простых дробей со всей очевидностью подтвердило неслучайный характер исследуемой экспериментальной закономерности.

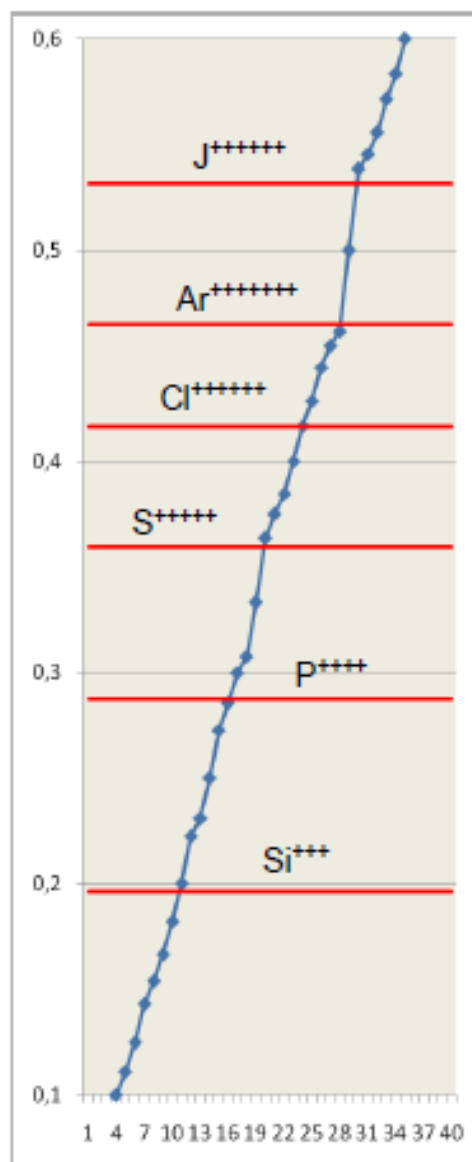


Рис.4. Эффективные главные квантовые числа водородоподобных ионов (табл. 5) с разной степенью ионизации показаны в виде горизонтальных линий. Значения простых дробей ( $N_2 \leq 13$ ) помечены маркерами на возрастающей кривой. Целые части чисел отброшены.

Следует особо подчеркнуть, что как и любая закономерность, наблюдаемая в природе, обнаруженное свойство «водородоподобных состояний» может иметь исключения (как это, например, имеет место в периодической системе элементов), также как и различную степень точности при экспериментальной проверке. Но такого рода отдельные «отклонения» не отменяют самой закономерности, а лишь являются стимулом для

дальнейших исследований, как это собственно всегда и происходило в физике на протяжении многих столетий ее развития.

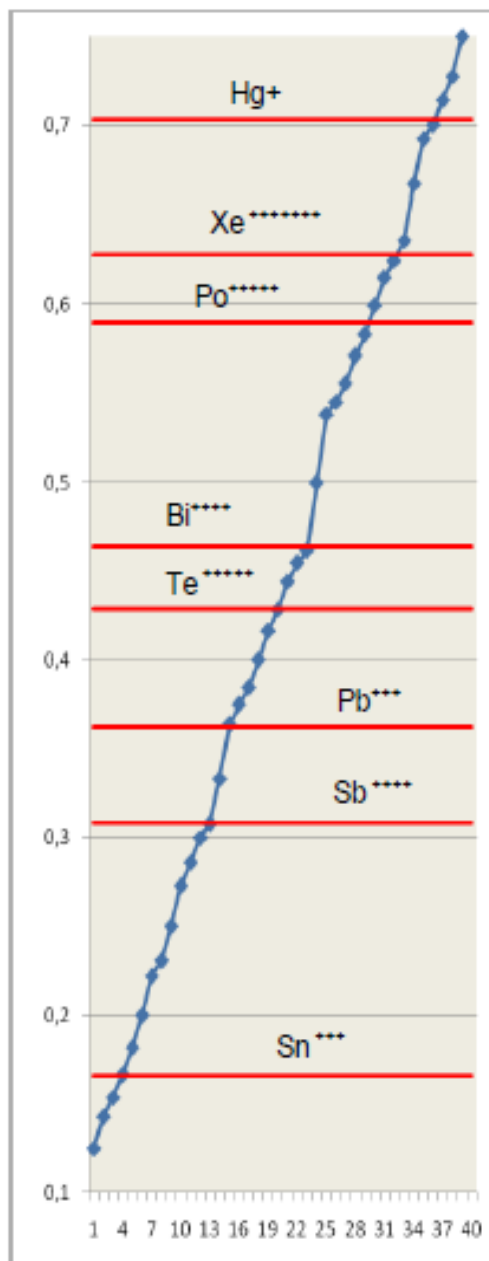


Рис.5. Эффективные главные квантовые числа водородоподобных ионов (табл. 6) с разной степенью ионизации показаны в виде горизонтальных линий. Значения простых дробей ( $N_2 \leq 13$ ) помечены маркерами на возрастающей кривой. Целые части чисел отброшены.

Обнаруженная экспериментальная закономерность вызвала множество предположений относительно ее физической природы, а также дискуссии о следствиях для развития теории атома.

Мы намеренно не приводим здесь каких-либо соображений о возможном физическом механизме описанного явления и следствиях для развития теории, а ограничиваемся только анализом экспериментальных данных с тем, чтобы не отвлекать читателя от фактической стороны вопроса.

Однако уже сам факт обнаружения ранее не известного свойства атомов и ионов, связанного с особенностями взаимодействия внешнего электрона с атомным остатком, несомненно, является одним из наиболее значимых открытий в атомной физике за последние десятилетия.

## Литература

1. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, Квантовая механика. Нерелятивистская теория. Теоретическая физика, том 3. Государственное издательство физико-математической литературы, Москва (1963), с. 283.
2. O.G. Verin, viXra: 1801.0251.
3. Справочник химика. Под ред. Б.П. Никольского, изд. «Химия», М.-Л. (1982).