

ДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ МОЛЕКУЛЫ ВОДОРОДА.

II. ОРТОГОНАЛЬНАЯ МОДЕЛЬ МОЛЕКУЛЫ ВОДОРОДА

Островский Н.В.

Вятский государственный университет, г.Киров

Onv1@yandex.ru

За основу данной модели взята структура, предложенная Нильсом Бором и включающая движение электронов вокруг оси, проходящей через ядра. Наряду с этим модель включает модифицированное уравнение электростатического взаимодействия, экспериментальное уравнение для вычисления поправки к полной энергии спаренных электронов, специальную функцию для нахождения квантованного радиуса орбиты электрона. Энергия диссоциации молекулы водорода, вычисленная в рамках данной модели, отличается от экспериментально определённого значения на 4 % отн.

Введение

В предыдущей работе [1] была представлена плоскостная модель молекулярного иона водорода. Модель включала движение электрона вокруг ядра 1 и движением ядра 2 вокруг атома водорода (рис. 1). При этом было получена высокая сходимость с литературными данными по энергии ионизации электрона.

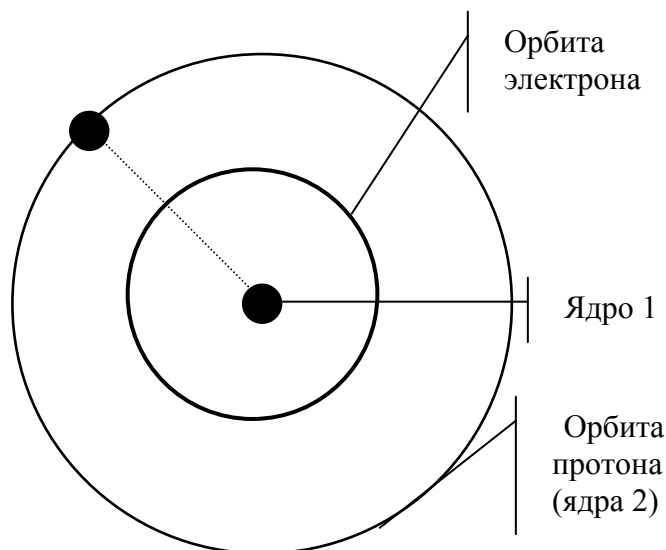


Рисунок 1. Динамическая схема молекулярного иона водорода [1].

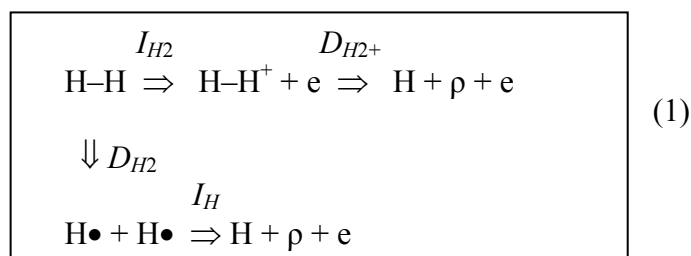
Но, как оказалось, использованная компьютерная программа содержала ряд орфографических ошибок¹. Их исправление показало, что после того, как угол поворота электрона относительно ядра 2 достигнет 280 град. его радиус начинает расти и при угле около 320 град. расстояние между электроном и ядрами становится одинаковым, что создаёт серьёзную проблему в выборе дальнейшей траектории движения электрона. Поэтому вопрос о геометрии иона и молекулы водорода требует более внимательного рассмотрения (см. ниже).

При вычислении энергии электрона в предыдущей работе [1] была использована величина внутренней энергии электрона. Данный параметр был введен для описания процесса перехо-

¹ Обычно подобные ошибки приводят к сбоям в работе программ или к несуразным результатам. Но в данном случае каким-то невероятным образом шесть орфографических ошибок дали очень привлекательный результат. Это в очередной раз демонстрирует сколь осторожно нужно относиться к результатам математических вычислений.

да электрона с низшей стационарной орбиты в атоме водорода на высшую [2, 3]. В этом случае электрон совершает вынужденное движение, связанное с увеличением радиуса орбиты под действием импульса электромагнитного излучения. Накопленная энергия расходуется на увеличение его момента количества движения. В случае движения электрона в неоднородном электрическом поле радиус электрона, тем не менее, каждый раз должен принимать равновесное значение. Таким образом, величину внутренней энергии следует принять нулевой.

В предыдущей работе со ссылкой на учебник [4, с. 488] в качестве экспериментальных данных для молекулярного иона водорода было принято межъядерное расстояние – $2,0a_0$ (a_0 – радиус орбиты электрона в основном состоянии атома водорода = $0,529 \text{ \AA}$) и энергия ионизации – $2,79 \text{ эВ}$. Аналогичные данные без ссылки на первоисточник приводятся в [5, с. 147]. Но во всеобъемлющем издании [6, с. 270] приводится только энергия диссоциации² ($2,6508 \text{ эВ}$). А в [7, с. 30] указано, что данная величина вычислена исходя из энергии диссоциации молекулы водорода, энергии ионизации молекулы водорода и энергии ионизации атома водорода, а не получена экспериментальным путём. Действительно, энергия диссоциации молекулярного иона водорода может быть легко найдена с использованием цикла Борна-Габер³:



$$\begin{aligned}
 D_{H_2^+} &= D_{H_2} + I_H - I_{H_2} = \\
 &= 4,4781 + 13,595 - 15,4258 = 2,647 \text{ эВ} = 61,047 \text{ ккал/моль} = \\
 &= 255,42 \text{ кДж/моль} = 0,097 E_{P,1}^4
 \end{aligned} \quad (2)$$

Нужно отметить, что данное равенство справедливо в том случае, когда межъядерное расстояние в ионе водорода равно межъядерному расстоянию в молекуле водорода. В противном случае мы должны были бы учесть энергию перехода молекулярного иона водорода из возбуждённого состояния в основное (если оно существует). Как бы там ни было, но вычисленной энергии диссоциации иона водорода $2,647 \text{ эВ}$ должно отвечать межъядерное расстояние, существующее в молекуле водорода, равное $0,742 \text{ \AA}$ ($1,402 a_0$) [8, с. 254].

Что касается энергии ионизации, то в этом случае необходимо ответить на следующий вопрос: чему равно расстояние между «голыми» протонами в конечном состоянии? Если принять, что оно равно расстоянию в исходном молекулярном ионе ($2a_0$), то после ионизации между протонами возникнет отталкивание с энергией $e^2/2a_0 = 0,5 E_{P,1}$. Следовательно, полная энергия системы должна быть равна: $E_{H_2^+} = E_{P,p} - I_{H_2^+} = 0,5 - 0,103 = 0,397 E_{P,1}$. Если принять, что в конечном состоянии расстояние между протонами равно бесконечности (т.е. ионизация сопровождается удалением протонов друг от друга), то энергия отталкивания будет равна нулю, а полная энергия молекулярного иона водорода должна быть равна $-0,103 E_{P,1}$. Вероятнее всего в цитатах с упоминанием об энергии ионизации молекулярного иона водорода мы имеем неверное использование данного термина.

² Ионизация молекулярного иона водорода сопровождается образованием свободного электрона и двух протонов: $H_2^+ \Rightarrow p + p + e$; диссоциация – протона и атома водорода: $H_2^+ \Rightarrow H + p$.

³ О цикле Борна-Габер см. [5, с. 133].

⁴ $E_{P,1} = e^2/a_0 = 27,190 \text{ эВ} = 4,360 \cdot 10^{-11} \text{ эрг}$.

1. Геометрия молекулярного иона водорода

При описании движения электрона по квазикруговой орбите в соответствии с алгоритмом, приведённом в предыдущей работе [1], радиус орбиты электрона под воздействием ядра 2 начинает увеличиваться и при угле поворота относительно оси, соединяющей ядра, составляющем около 320° , расстояние между ним и каждым из ядер становится одинаковым. При этом возникает вопрос: какой может быть дальнейшая траектория движения электрона? Гипотетически возможны различные варианты.

Во-первых, электрон может перейти на орбиту, описываемую окружностью вокруг второго ядра. Подобная модель используется в классических квантомеханических расчётах [5, с. 140-148; 9, с. 23-27], основанных на методологии Шрёдингера [10]. Но в методологии Шрёдингера электрон рассматривается как стоячая волна, не имеющая траектории движения.

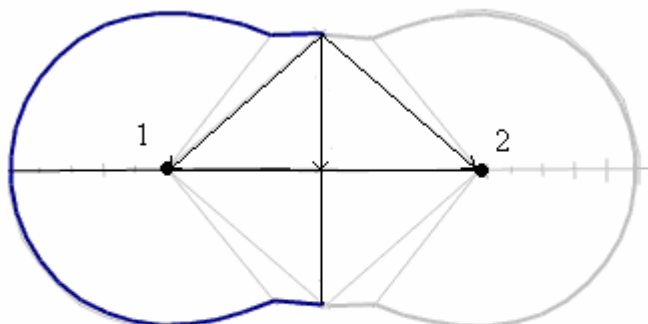
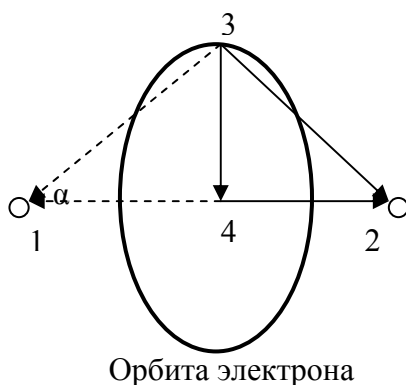


Рисунок 2. Возможная траектория движения электрона в рамках плоскостной модели молекулярного иона водорода.

Реализации подобной траектории препятствует тот факт, что при этом должна измениться величина момента количества движения электрона. Сила, способная вызвать данный эффект, отсутствует.

Во-вторых, электрон может быть «втянут» силами, действующими со стороны обоих ядер, в пространство между ядрами (см. рис. 2). Пройдя путь между ядрами по прямой, в дальнейшем, за счёт противоположного по направлению к движению электрона кругового движения ядра 2 (см. рис. 1) электрон может вновь перейти на круговую орбиту. Но реализации подобного сценария должно препятствовать следующее обстоятельство. Действие сил (электростатического притяжения и центробежной) на электрон, движущийся по круговой орбите, уравновешено. Появление третьей силы со стороны второго ядра должно привести к «падению» электрона на это ядро. Другим обстоятельством является то, что наличие второго ядра в плоскости орбиты электрона должно препятствовать нормальному процессу расширения электронной орбиты при переходе электрона из основного состояния в возбуждённое.



Орбита электрона

Рисунок 3. Ортогональная модель молекулы водорода: 1 и 2 – ядра, 3 – локализация электрона, 4 – центр орбиты электрона, α – угол между r_{31} и r_{12} .

Таким образом, возможным остаётся лишь третий вариант, в котором электрон вращается вокруг оси, проходящей через ядра, так что плоскость орбиты электрона ортогональна данной оси (см. рис. 3). Эта модель была предложена ещё Н. Бором [11], но затем забыта. Равнодействующая сил электростатического притяжения от обоих ядер будет направлена перпендикулярно оси, проведённой между ядрами. Её вращение будет образовывать центр, относительно которого к электрону будет приложена центробежная сила. При этом данному центру мы вправе приписать некий эффективный заряд, величину которого можно вычислить исходя из величины равнодействующей электростатического притяжения.

2. Закон электростатического взаимодействия

В предыдущей работе [1] было высказано сомнение относительно применимости закона электростатического взаимодействия Кулона к системам, состоящим из многих зарядов. Собственно, это сомнение позаимствовано из книги [4, с. 268]. В известных экспериментах Кулона с крутильными весами была изучена система двух тел [12, с. 295-296]. Строго говоря, эксперименты Кулона были полуколичественными. Собственно, основанная на законе Кулона одноэлектронная модель атома водорода Нильса Бора, является первым строгим его доказательством, но также для системы из двух зарядов.

Обобщённое уравнение электростатического взаимодействия

Учёные МГУ [4, с. 268] проводят аналогию между небесной и волновой механикой, указывая, что в небесной механике чисто теоретический подход не позволяет получить точное описание движения небесных тел. Причина этого в том, что уравнение Ньютона не позволяет решить задачу трёх тел. Уравнение Кулона:

$$F_E = q_1 q_2 / r_{12}^2. \quad (3)$$

аналогично уравнению Ньютона и также непригодно для этих целей.

Ранее автором было показано [13], что задача N тел небесной механики решается с использованием уравнения, названного обобщённым уравнением гравитационного взаимодействия:

$$\vec{F}_{G,12} = G m_1 r_{12} \sum_{i=2}^N m_i \vec{r}_{1i} / r_{1i}^4, \quad (4)$$

где: $F_{G,12}$ – сила притяжения выбранного тела 1 к телу 2, для которого отношение m_i / r_{1i}^3 максимально;

G – универсальная гравитационная постоянная;

r_{1i} – расстояние от тела 1 до тела i .

Данное уравнение было апробировано для системы Луна-Земля-Солнце (см. также [14]), внешних спутников Юпитера (см., например, [15]), приливных гравитационных эффектов [16] и для совокупности явлений [17].

Мы можем по аналогии с уравнением (4) составить уравнение для электростатического взаимодействия (5) (обобщённое уравнение электростатического взаимодействия – ОУЭВ). В данном случае для выбранного заряда 1 (см. рис. 3) определяющим является взаимодействие с зарядом 2, которому отвечает максимальное значение величины $|q_i / r_{1i}^3|$:

$$\vec{F}_{E,12} = q_1 r_{12} \sum_{i=2}^N q_i \vec{r}_{1i} / r_{1i}^4. \quad (5)$$

В случае двух зарядов уравнение (5) преобразуется в уравнение Кулона (3).

3. Молекула водорода

Нильс Бор, рассматривая систему, состоящую из двух ядер одинакового заряда (Ne) и одного кольца, содержащего n электронов, вращающихся вокруг прямой, соединяющей ядра, вывел уравнение, определяющего равновесие системы [11]:

$$b = a \left[\left(\frac{4n}{N} \right)^{2/3} - 1 \right]^{-1/2} \quad (6)$$

где: $2a$ – диаметр кольца, а $2b$ – расстояние между ядрами.

К сожалению, Бор не приводит вывод данного уравнения. Поэтому мы не будем цитировать дальнейшие рассуждения Бора, а приведём сразу полученные им результаты для молекулы водорода: $a = 0,95a_0$, $b = 0,548a_0$, $E_{H2} = 1,1E_{P,1}$. Таким образом, полученная Бором энергия диссоциации молекулы водорода оказывается равна $0,1E_{P,1}$ по сравнению с экспериментальным значением $0,165E_{P,1}$.

Энергия «спаренных» электронов

Детальному описанию молекулы водорода препятствует тот факт, что до сих пор не понятна природа взаимодействия электронов, занимающих одну орбиту («спаренных» электронов).

В рамках волновой механики при использовании вариационного метода Рунда для двух-электронных частиц (H^+ , He , Li^+ , Be^{+2}) было получено уравнение, связывающее энергию ионизации (в единицах энергии ионизации атома водорода $= E_{P,1}/2$) и заряд ядра Z [18, 235]:

$$I_{DE} = Z^2 - 1,25Z + 0,195. \quad (7a)$$

Данное уравнение даёт абсолютную ошибку в вычислении энергии ионизации, составляющую $-0,11$ от энергии ионизации атома водорода.

По сути тот же вариационный метод позволил получить сходимость с экспериментальными данными до четвёртой значащей цифры за счёт увеличения членов итерационного ряда [18, 243]:

$$I'_{DE} = Z^2 - 1,25Z + 0,315311 - 0,01707/Z + 0,00068/Z^2 + 0,00164/Z^3 + 0,00489/Z^4. \quad (7b)$$

Не менее точным при вычислении энергии ионизации двухэлектронных частиц (H^+ , He , Li^+ , Be^{+2}) оказалось и более простое уравнение, полученное путём обработки экспериментальных данных методом наименьших квадратов ($R^2 = 1,00000$, энергия в эргах) [19]:

$$I''_{DE} = -2,17953 \cdot 10^{-11} Z^2 + 2,71978 \cdot 10^{-11} Z - 6,60977 \cdot 10^{-12} \quad (7c)$$

При этом разница между экспериментальным значением энергии ионизации и вычисленным по уравнению Бора равна:

$$\Delta E_I = 1,440 \cdot 10^{-19} / r_Z - 6,620 \cdot 10^{-12}. \quad (7d)$$

Поэтому в дальнейшем мы будем рассматривать спаренные электроны как квазичастицу с зарядом $2e$ и массой $2m_e$.

Алгоритм на основе классической электростатики

Для описания молекулы водорода с использованием закона Кулона мы должны вычислить:

- силы притяжения электрона к ядрам $F_{31}=F_{32}$ и их равнодействующую (F_{34}):

$$F_{34} = 2F_{31} \sin \alpha = 4e^2 \sin \alpha / r_{31}^2, \quad (8)$$

которая будет уравновешена центробежной силой:

$$F_{C,e} = 2m_e u_e^2 / r_{34}; \quad (9)$$

- силу отталкивания между ядрами F_{21} , на которую накладывается проекция силы притяжения ядер к электронам ($F_{13} = F_{31}$ и $F_{23} = F_{32}$):

$$F_{21,Sum} = F_{21} + 2F_{13} \cos \alpha = -e^2/r_{12}^2 + 4e^2 \cos \alpha / r_{31}^2. \quad (10)$$

Потенциальную энергию электрона мы можем найти как произведение силы электростатического притяжения на расстояние:

$$E_{e,P} = -F_{34}r_{34} \quad (11)$$

Кинетическая энергия электрона, как показано в [11], равна половине абсолютного значения его потенциальной энергии. А потенциальная энергия ядер будет равна:

$$E_{p,P} = -F_{21,Sum}r_{21}. \quad (12)$$

Так же мы должны учесть увеличение энергии спаренных электронов в соответствии с уравнением (7d). В результате полная энергия системы будет равна:

$$E_{Sum} = -F_{21,Sum}r_{21} - F_{34}r_{34}/2 + \Delta E_I. \quad (13)$$

Алгоритм на основе обобщенного уравнения электростатического взаимодействия

В случае использования обобщенного уравнения электростатического взаимодействия в каждом случае мы должны определить точку приложения силы. Прежде всего, нужно отметить, что ею не может быть децентрализованный электрон, т.к. величина элемента заряда электрона de стремится к нулю, а, стало быть, стремится к нулю и величина $|q_i/r_{i1}^3|$. Во-вторых, рассматривая притяжение электрона к ядрам, мы должны выбрать лишь одно ядро. Конечно, для симметричной системы такой выбор является произвольным, но, тем не менее, уравнение для F'_{31} будет выглядеть следующим образом:

$$F'_{31} = 2e^2r_{31} \left(1/r_{31}^3 + \cos \beta / r_{32}^3 \right). \quad (14)$$

Соответственно потенциальная энергия электрона будет равна:

$$E'_{e,P} = -F'_{31}r_{31}. \quad (15)$$

Радиус орбиты электрона, как было указано выше, равен r_{34} и центробежная сила будет уравновешена проекцией силы F'_{31} на r_{34} . Следовательно, кинетическая энергия электрона будет равна:

$$E'_{e,K} = F'_{34}r_{34}/2 = F'_{31}r_{34} \sin \alpha / 2. \quad (16)$$

Сила отталкивания между ядрами, выведенная на основе уравнения (5), будет равна:

$$F'_{21} = e^2r_{12} \left(-1/r_{12}^3 + 2 \cos \alpha / r_{32}^3 \right). \quad (17)$$

Потенциальная энергия будет также определяться произведением F'_{21} на r_{21} , а полная энергия системы будет в данном случае равна:

$$E'_{Sum} = -F'_{21}r_{21} - F'_{31}r_{31} + F'_{31}r_{34} \sin \alpha / 2 + \Delta E_I. \quad (18)$$

Квантованное значение радиуса орбиты электрона

Радиус орбиты электрона r_{34} не является произвольным, а связан с моментом количества движения электрона, величина которого определяется постулатом Бора:

$$mur = nh/2\pi, \quad (19)$$

где: n – целое число, равное номеру орбиты,

h – постоянная Планка = $6,6256 \cdot 10^{-27}$ эрг·с.

Выразив величину скорости из уравнения (19), подставив её в выражение для центробежной силы (9) и приравняв последнюю F_{34} получим:

$$F_{34} = \frac{2m_e nh^2}{4\pi^2 m_e^2 r_{34}^3}. \quad (20)$$

Разделив обе части уравнения (20) на e^2 заметим, что левая часть уравнения содержит выражение для a_0 [5, с. 31]:

$$\frac{F_{34}}{e^2} = 2 \frac{n^2 h^2}{4\pi^2 m_e e^2} \cdot \frac{1}{r_{34}^3} = 2 \frac{a_0}{r_{34}^3}. \quad (21)$$

В случае описание системы с использованием уравнения Кулона мы имеем:

$$4 \sin \alpha / r_{31}^2 = 2a_0 / r_{34}^3. \quad (22)$$

Для численного решения данного уравнения введём функцию $\varphi(r)$:

$$\varphi = a_0 - 2r_{34}^3 \sin \alpha / r_{31}^2. \quad (23)$$

Функция φ равна нулю для значения r_{34} , соответствующего моменту количества движения электрона, определяемому постулату Бора. Такое значение радиуса орбиты мы будем называть квантованным.

В случае использования обобщенного уравнения электростатического взаимодействия $F'_{34} = F'_{31} \sin \alpha$ и

$$\varphi' = a_0 - r_{34}^3 \left(\sin \alpha / r_{31}^2 + r_{31} \sin \alpha \cos \beta / r_{32}^3 \right). \quad (24)$$

Результаты расчётов

Результаты расчётов параметров молекулы водорода, вычисленные на основе двух, приведённых выше подходов приведены в табл. 1 и на рис. 4.

Таблица 1. Результаты расчётов параметров различных состояний молекулы водорода

Параметр	Вычисления на основе ОУЭВ				Вычисления в рамках классической электростатики			
	1 ^{а)}	1 ^{б)}	1 ^{в)}	1 ^{г)}	2 ^{г)}	2 ^{в)}	2 ^{б)}	2 ^{а)}
r_{12}, a_0	1,184	1,402	1,650	1,096	1,096	1,300	1,402	1,402
r_{34}, a_0	1,025	1,129	1,243	0,950	0,950	0,918	0,954	0,954
F_{31}/F_0 ^{е)}	2,140	1,635	1,248	2,495	1,663	1,581	1,427	1,427
F_{34}/F_0	1,853	1,389	1,039	2,161	2,881	2,580	2,300	2,300
F_{21}/F_0	-0,00005	0,121	0,182	-0,002	0,829	1,235	1,181	-0,509
$E_{e,P'}, E_{P,1}$	-2,534	-2,172	-1,861	-2,737	-2,737	-2,369	-2,194	-2,194
$E_{e,K'}, E_{P,1}$	0,950	0,784	0,646	1,027	1,368	1,184	1,097	1,097
$\Delta E_i, E_{P,1}$	0,457	0,401	0,350	0,505	0,505	0,528	0,502	0,502
$E_{e,Sum'}, E_{P,1}$	-1,127	-0,988	-0,865	-1,202	-0,863	-0,656	-0,595	-0,595
$E_{p,P'}, E_{P,1}$	0,00006	-0,170	-0,301	0,002	-0,909	-1,606	-1,656	0,713
$E_{Sum'}, E_{P,1}$	-1,127	-1,158	-1,165	-1,202	-1,772	-2,262	-2,251	0,119

Примечания: ^{а)} состояние молекулы с «нулевым» взаимодействием между ядрами; ^{б)} состояние с табличным значением межъядерного расстояния; ^{в)} состояние с минимумом полной энергии; ^{г)} состояние с Боровскими значениями межъядерного расстояния и радиуса орбиты электрона; ^{д)} взаимодействие между ядрами включает только отталкивание; ^{е)} F_0 – сила притяжения электрона к ядру в атоме водорода.

Как видно из таблицы расчеты энергии молекулы водорода, выполненные на основе классической электростатики, дают значения почти вдвое превышающие экспериментальные. Причиной этого является то, что упрощённая реализация принципа «действие равно противодействию» ($F_{31} = F_{13}, F_{32} = F_{23}$) ведёт к двойному счёту при вычислении энергии взаимодействия. Но и исключение притяжения ядер к электронам также ведёт к неверному результату (см. вариант 2^{д)}).

Это противоречие снимает использование в модели обобщённого уравнения электростатического взаимодействия (5), в котором третья частица участвует во взаимодействии опосредовано. Полная энергия системы, вычисленная для экспериментально определённого межъядерного расстояния (вариант 1^б), даёт энергию диссоциации молекулы водорода $D_{H_2} = 0,158 E_{P,1}$, что отличается от экспериментального значения всего на $0,007 E_{P,1}$ (4% отн.). Это наилучший результат теоретического вычисления энергии диссоциации. Абсолютное совпадение с экспериментальным значением энергии диссоциации мы имеем для состояния с минимальным значением полной энергии молекулы (вариант 1^в). Но в этом случае межъядерное расстояние значительно превышает экспериментальное (на $0,13 \text{ \AA}$ – 18% отн.). Отсюда мы можем сделать вывод, что рассматриваемая модель всё-таки не учитывает всех видов взаимодействий, присутствующих в реальной молекуле водорода.

Следующий аспект, требующий объяснения, это то, что основное состояние молекулы не является равновесным, поскольку $F_{21} > 0$. Но сближение ядер под действием силы электростатического притяжения (переход в состояние 1^а) невозможно, поскольку при этом энергия системы увеличивается, а радиус орбиты электрона уменьшается. Таким образом, мы имеем устойчивое состояние с минимум полной энергии, которое, однако, имеет некоторое внутреннее напряжение, связанное с неуравновешенностью силы электростатического взаимодействия между ядрами и электронным кольцом.

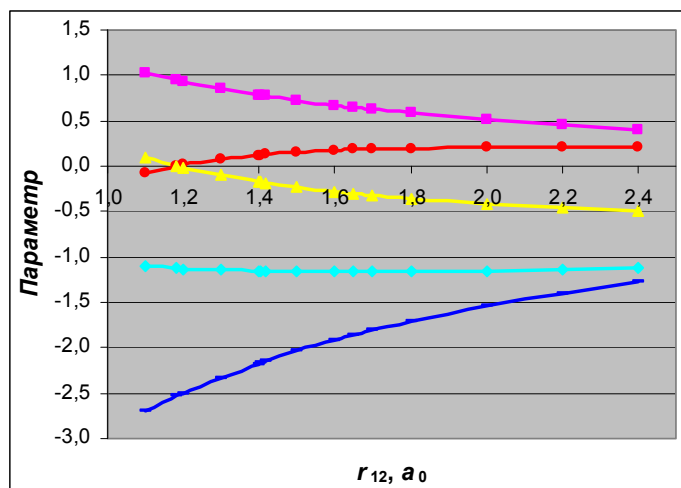


Рисунок 4. Зависимость параметров молекулы водорода от величины r_{12} : — $F_{21,Sum}/F_0$, — $E_{e,K}$, — $E_{e,P}$, — $E_{p,P}$, — E_{Sum} (расчёты на основе ОУЭВ, энергия в ед. $E_{P,1}$).

4. Молекулярный ион водорода

Теперь применим те же самые алгоритмы к молекулярному иону водорода H_2^+ , который отличается от молекулы тем, что в кольце находится только один электрон. Важно отметить, что вид функций ϕ и ϕ' при этом не изменяется, поэтому величины квантованных радиусов орбиты электрона r_{34} будут иметь те же значения для выбранных значений r_{12} , что и в молекуле водорода. Результаты расчётов представлены в табл. 2 и на рис. 5.

Расчёт на основе классической электростатики, также как и в случае молекулы водорода, даёт для квантованного значения r_{34} заниженное значение полной энергии системы (вариант 4^а). Вычисленный как разность энергий потенциал ионизации молекулы водорода оказывается равным $1,23 E_{P,1}$ (33,5 эВ), что почти в два раза превышает экспериментально найденную величину.

При использовании обобщённого уравнения электростатического взаимодействия мы напротив получили величину полной энергии системы ($-0,422 E_{P,1}$ – вариант 3^а) значительно выше искомого значения ($-0,597 E_{P,1}$) и выше энергии атома водорода. Причём она выше не

только для межъядерного расстояния соответствующего молекуле водорода, но и для всех возможных расстояний (см. рис. 5). Отсюда следует, что молекулярный ион водорода не может возникнуть как результат взаимодействия между протоном и атомом водорода. Но остаётся вопрос о том, как он возникает в процессе ионизации молекулы водорода. Рассмотрим более подробно данный процесс.

Таблица 2. Результаты расчётов параметров различных состояний молекулярного иона водорода

Параметр	Расчёты на основе ОУЭВ					Классическая электростатика		
	3 ^{а)}	3 ^{б)}	3 ^{в)}	3 ^{г)}	3 ^{д)}	4 ^{а)}	4 ^{е)}	4 ^{ж)}
r_{12}, a_0	1,402	2,199	1,402	1,602	1,602	1,402	1,402	1,353
r_{34}, a_0	1,128	1,487	0,988	1,083	1,222	0,954	1,172	1,172
F_{31}/F_0	0,817	0,378	0,907	0,712	0,655	0,714	0,536	0,546
F_{34}/F_0	0,694	0,304	0,739	0,573	0,548	1,150	0,920	0,946
F_{21}/F_0	-0,194	0,00001	-0,052	0,0001	-0,108	0,336	-0,042	-0,00004
$E_{e,P}, E_{P,1}$	-1,086	-0,699	-1,098	-0,960	-0,957	-1,097	-1,079	-1,108
$E_{e,K}, E_{P,1}$	0,392	0,226	0,365	0,310	0,335	0,549	0,539	0,554
$\Delta E_{Def}, E_{P,1}$	0	0	0,063	0,053	0	0	0	0
$E_{e,Sum}, E_{P,1}$	-0,694	-0,473	-0,670	-0,597	-0,623	-0,549	-0,539	-0,554
$E_{p,P}, E_{P,1}$	0,271	-0,00003	0,073	-0,0002	0,173	-0,471	-0,058	-0,00006
$E_{Sum}, E_{P,1}$	-0,423	-0,473	-0,597	-0,597	-0,449	-1,020	-0,597	-0,554

Примечания: ^{а)} состояние с межъядерным расстоянием, равным расстоянию в молекуле водорода, и квантованным значением r_{34} ; ^{б)} состояние с минимумом полной энергии; ^{в)} деформированное состояние, возникающее при ионизации молекулы водорода; ^{г)} деформированное состояние с «нулевым» взаимодействием между ядрами; ^{д)} результат перехода из состояния ^{г)} в состояние с квантованным значением r_{34} ; ^{е)} состояние с искомым значением полной энергии; ^{ж)} равновесное состояние молекулярного иона водорода.

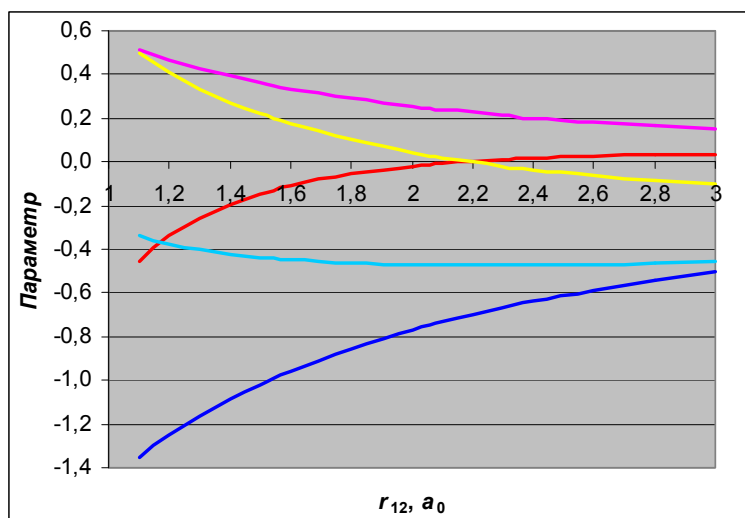


Рисунок 5. Зависимость параметров молекулярного иона водорода от величины r_{12} : — $F_{21,Sum}/F_0$, — $E_{e,K}$, — $E_{e,P}$, — $E_{p,P}$, — E_{Sum} (расчёты на основе ОУЭВ, энергия в ед. $E_{P,1}$).

5. Ионизация молекулы водорода

Выше мы констатировали тот факт, что характер взаимодействия «спаренных» электронов нам не понятен. Но после того как произошло их расщепление и один из электронов начал

удаляться, увеличивая радиус своей орбиты⁵, между ними должно возникнуть нормальное электростатическое взаимодействие. Отталкивание между электронами должно привести к уменьшению радиуса орбиты внутреннего электрона по сравнению с начальным квантованным значением. После полного ухода второго электрона оставшийся электрон должен вновь занять орбиту с квантованным радиусом. Эти переходы остающегося электрона должны быть безизлучательными – в противном случае ионизация того же атома гелия должна была бы сопровождаться некоторым излучением, сведения о котором в литературе отсутствуют.

В работах [2, 3] было показано, что при переходе электрона с низшей на высшую стационарную орбиту под действием импульса электромагнитного излучения часть энергии импульса идёт на деформацию орбиты электрона (затем эта запасённая энергия расходуется на изменение момента количества движения электрона). Величина этой энергии – энергии квантового скачка – описывается уравнением:

$$\Delta E_{QJ,ab} = \frac{e^2}{2} [(r_b - r_a)/r_b^2] \quad (25)$$

где: r_a и r_b – начальное и конечное значения радиусов орбиты электрона.

Данное уравнение всё же не подходит для решения нашей задачи, поскольку деформация орбиты остающегося электрона под действием уходящего электрона должна быть безизлучательным процессом. После окончательного ухода электрона оставшийся электрон должен вернуться в исходное состояние. Это оказывается возможным в том случае, если энергия деформации орбиты электрона равна разнице между полной энергией электрона в начальном и конечном состояниях:

$$\Delta E_{Def,ab} = -e^2/2r_a - (-e^2/2r_b) = \frac{e^2}{2} [(r_a - r_b)/r_a r_b] \quad (26)$$

Теперь мы можем подобрать величину r_{34} , которая даёт нам искомое значение полной энергии в $-0,597 E_{P,1}$ (табл. 2 – вариант 3^В). Это состояние является неравновесным, т.к. обладает деформированной орбитой электрона и отталкиванием между ядрами. Под действием силы отталкивания межъядерное расстояние будет увеличиваться, а величина r_{34} будет стремиться к квантованному значению. При сохранении полной энергии система должна перейти в состояние с нулевым значением F_{21} при $r_{12} = 1,602 a_0$ (см. табл. 2 – вариант 3^Г) и рис. 6).

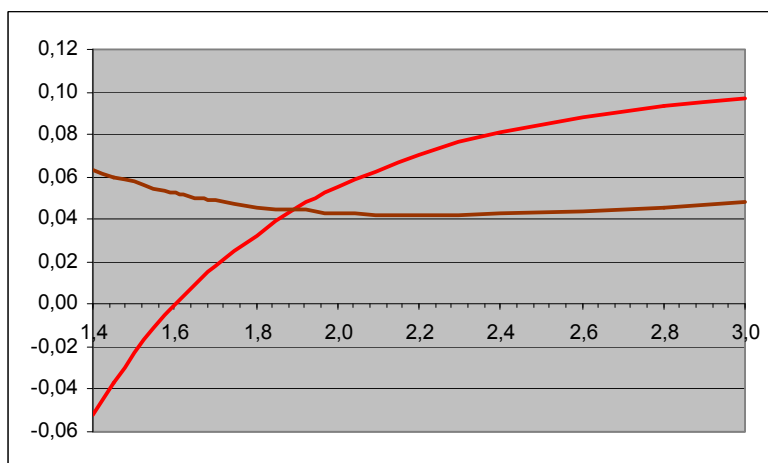


Рисунок 6. Зависимость F_{21}/F_0 (—) и $\Delta E_{Def, EP,1}$ (—) от r_{12} при сохранении полной энергии системы ($-0,597 E_{P,1}$).

Переход из данного квазиустойчивого состояния в состояние с квантованным значением r_{34} требует поглощения энергии $0,148 E_{P,1}$. Это состояние все же не будет устойчивым, так

⁵ Механизм перехода электрона с низшей на высшую орбиту описан в [2].

как между ядрами вновь возникает отталкивание. Но данные рассуждения, не подкреплённые экспериментальными данными, наверное являются излишними.

6. Заключение

Предложена модель молекулы водорода включающая:

1. вращение двух электронов по одной орбите вокруг оси, соединяющей ядра;
2. использование модифицированного уравнения электростатического взаимодействия (обобщённого уравнения электростатического взаимодействия (5));
3. квантование момента количества движения электрона в соответствии с постулатом Н. Бора;
4. использование эмпирического уравнения, связывающего энергию спаренного электрона с боровской энергией электрона и квантованным радиусом орбиты (7d).

Для нахождения квантованного значения радиуса орбиты электрона используется специальная функция, выведенная из равенства силы электростатического притяжения электрона центробежной силе. В результате расчётов для экспериментальной величины межъядерного расстояния $0,74 \text{ \AA}$ получена величина полной энергии системы $-5,049 \cdot 10^{-11}$ эрг, что даёт энергию диссоциации молекулы водорода $6,89 \cdot 10^{-12}$ эрг, по сравнению с экспериментальной величиной $7,19 \cdot 10^{-12}$ эрг. Минимальное значение полной энергии системы ($-5,079 \cdot 10^{-11}$ эрг), отвечающее экспериментальному значению энергии диссоциации, получено для межъядерного расстояния $0,87 \text{ \AA}$.

Применение того же подхода к молекулярному иону водорода дало полную энергию системы для межъядерного расстояния $0,74 \text{ \AA}$ $-1,844 \cdot 10^{-11}$ эрг и энергию ионизации молекулы водорода $3,205 \cdot 10^{-11}$ эрг по сравнению с экспериментальной величиной $2,474 \cdot 10^{-11}$ эрг. Минимальное значение энергии системы $-2,063 \cdot 10^{-11}$ эрг получено для межъядерного расстояния $1,16 \text{ \AA}$. Экспериментальная величина энергии ионизации молекулы водорода была получена в предположении, что в результате ионизации возникает ион с деформированной орбитой электрона, а энергия деформации описывается уравнением (26).

Литература

1. *Островский Н.В.* Динамическая модель молекулы водорода. I. Модель молекулярного иона водорода. //Интернет-конференция "Информационно-вычислительные технологии в фундаментальных и прикладных физико-математических исследованиях". Дата публикации 02.07.2007.
URL: http://www.ivtn.ru/2007/physmath/enter/t_pdf/dp07_13.pdf.
2. *Островский Н.В.* Об энергии импульса электромагнитного излучения (электронный переход в атоме водорода).// Труды VII Международного симпозиума по электромагнитной совместимости и электромагнитной экологии. Санкт-Петербург, 26-29 июня 2007 г. Санкт-Петербург: издательство Санкт-Петербургского государственного электротехнического университета «ЛЭТИ», 2007, с. 218-221.
3. *Островский Н.В.* Об энергии квантового скачка при электронном переходе в атоме водорода.// Актуальные проблемы науки в России. Материалы международной научно – практической конференции. Выпуск IV. – Кузнецк, 2007, том III, с. 35-38.
4. *Соколов А.В., Лоскутов Ю.М., Тернов И.М.* Квантовая механика. – М.: Просвещение, 1965, 638 с.
5. *Дей К., Селбин Д.* Теоретическая неорганическая химия. – М.: "Химия", 1971, 416 с.
6. *Хьюбер К.-П., Герцберг Г.* Константы двухатомных молекул./ В 2-х частях. Пер. с англ. – М.: «Мир», 1984, 484 с.
7. Энергия разрыва химических связей. Потенциал ионизации и средство к электрону./ Коллектив авторов. Отв. Ред. *Кондратьев В.Н.* – М.: Наука, 1974. – 351 с.

8. *Коттрелл Т.* Прочность химических связей. Пер. с англ. – М.: Изд-во иностранной литературы, 1956, 282 с.
9. *Паулинг Л.* Природа химической связи. Пер. с англ. – М.-Л.: Главное научно-техническое издательство химической литературы, 1947, 440 с.
10. *Schrödinger E.* *Ann. Physik*, 1926, 59, 361 (цитируется по: Эрвин Шредингер. Избранные труды по квантовой механике. – М.: Наука, 1976, с. 9-20).
11. *Бор Н.* О строении атомов и молекул.//Избранные научные труды. Т. 1. – М.: Наука, 1970, с. 84-148.
12. *Дорфман Я.Г.* Всемирная история физики с древнейших времён до конца XVIII века. – М.: Наука, 1974. – 352 с.
13. *Островский Н.В.* Решение задачи трех тел на примере системы Солнце-Земля-Луна.//Сборник материалов Всероссийской научно-технической конференции «Наука – производство – технологии – экология». Киров: Вятский государственный университет, 2003, т. 4, с. 74-75.
14. *Островский Н.В.* Физическая модель движения спутника Юпитера Карме.//Интернет-конференция "Информационно-вычислительные технологии в фундаментальных и прикладных физико-математических исследованиях". Дата публикации 31 марта 2006 г.
URL: http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/t_pdf/dp06_33.pdf.
15. *Островский Н.В.* Влияние Солнца на движение спутника Земли.//Вестник Тюменского государственного университета, 2005, № 4, с. 105-112.
16. *Островский Н.В.* Влияние Луны и Солнца на напряжённость гравитационного поля у поверхности неупругой Земли.//Омский научный вестник, 2006, № 10 (48), с. 5-8.
17. *Островский Н.В.* Обобщённое уравнение гравитационного взаимодействия.//Труды Всероссийской астрономической конференции «ВАК – 2007». – Казань: Изд-во Казанского государственного ун-та, 2007, с. 22-23.
18. *Бете Г., Солпитер Э.* Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. – М.: Главное издательство физико-математической литературы, 1960.
19. *Островский Н.В.* Об энергии основных состояний и энергии ионизации двухэлектронных атомов и ионов (на основе теории строения атома Нильса Бора).// Сборник материалов Всероссийской научно-технической конференции «Наука – производство – технологии – экология». Киров: Вятский государственный университет, 2008 т. 3, с. 197-199.