

ДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ МОЛЕКУЛЫ ВОДОРОДА. II. ОРТОГОНАЛЬНАЯ МОДЕЛЬ МОЛЕКУЛЫ ВОДОРОДА

Островский Н.В.

Вятский государственный университет, г. Киров

Островский Н.В.
Вятский государственный
университет

За основу данной модели взята структура молекулы, предложенная ещё Н. Бором: два электрона находятся на одной орбите, вращаясь вокруг воображаемой оси, соединяющей два протона. Результаты, полученные Н. Бором, имели значительные расхождения с экспериментальными данными. Особенности данной модели являются:

Электростатическое взаимодействие описывается с помощью модифицированного уравнения, которое в обобщённом виде выглядит как [1]:

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

1 – выбранный произвольный заряд, 2 – заряд, для которого отношение $|q_i / r_{1i}^3|$ максимально, q_i – величина i -того заряда, r_{1i} – расстояние между 1-ым и i -ым зарядами.

Пара электронов рассматривается как квазичастица, с зарядом $2e$ и массой $2m_e$.

Энергия спаренных электронов вычисляется с использованием поправки, согласно уравнению (эрг) [2]:

$$\Delta E_I = 1,440 \cdot 10^{-19} / r_Z - 6,620 \cdot 10^{-12}, \text{ где:} \quad (2)$$

r_Z – величина Боровского радиуса орбиты электрона для эффективного заряда Z .

1. Для нахождения величины r_Z используется уравнение:

$$\varphi = a_0 - r_Z^3 (\sin \alpha / r_{31}^2 + r_{31} \sin \alpha \cos \beta / r_{32}^3) = 0, \text{ где:} \quad (3)$$

a_0 – величина Боровского радиуса орбиты электрона в атоме водорода, r_{31} и r_{32} – расстояния от электрона до ядер 1 и 2, α – угол между r_{31} и r_{12} , β – угол между r_{31} и r_{32} .

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 [2]:

$$\Delta E_{Def,ab} = \frac{e^2}{2} [(r_a - r_b) / r_a r_b], \quad (4)$$

где: r_a – квантованная величина радиуса орбиты, r_b – радиус деформированной орбиты.

Литература

1. *Островский Н.В.* Об энергии импульса электромагнитного излучения (электронный переход в атоме водорода). // Труды VII Международного симпозиума по электромагнитной совместимости и электромагнитной экологии. – СПб: изд-во С-Петербургского государственного электротехнического университета «ЛЭТИ», 2007, с. 218-221.
2. *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.