

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛООВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ АТОМА ГЕЛИЯ

Островский Николай Владимирович

Вятский государственный университет, г. Киров

Onv1@yandex.ru

На основе гипотезы о том, что тепловое излучение можно рассматривать как периодическое изменение напряжённости магнитного поля, связанное с вращением плоскостей орбит спаренных электронов, и оригинальной электронной модели атома гелия проведены расчёты пространственной и временной динамики процесса. Показано, что в рамках данной модели излучение должно иметь импульсный характер и удовлетворять уравнению $E=h\nu$.

Возникновение электромагнитного излучения (ЭМИ) связано с элементарными процессами, протекающими в атомах и молекулах. Процессы генерации и распространения ЭМИ хорошо изучены и описаны на макроуровне, однако механизм возникновения излучения на микроуровне не вполне понятен и, по сути, остаётся на данный момент одной из загадок природы. Это в значительной мере связано с тем, что используемая в квантовой механике модель Шрёдингера является статичной. В ней отсутствует движущийся электрон, который является источником возникновения магнитного поля.

Альтернативная планетарная теория Резерфорда-Бора, в которой электрон движется по круговой орбите [1], долгие годы рассматривалась как научный артефакт по вполне объективным причинам. Модель Бора оказалась неприменима к многоэлектронным системам. Эту проблему удалось решить путём модификации уравнения электростатического взаимодействия и оригинальной концепции взаимодействия спаренных электронов.

Тепловую энергию атомов обычно связывают с кинетической энергией их поступательного или колебательного движения или вращения. Оригинальная модель атома гелия, которая будет рассмотрена ниже, позволяет выделить ещё один вид движения – вращение плоскостей орбит электронов. Это вращение должно сопровождаться изменением напряжённости магнитного поля в окружающем пространстве и может рассматриваться как причина возникновения теплового ЭМИ.

Электронная структура атома гелия и его магнитное поле

В предыдущих работах [3, 4] была предложено модифицированное уравнение электростатического взаимодействия, которое позволило получить относительно удовлетворительные результаты при расчётах параметров структуры и энергии молекулы водорода и трёхэлектронных систем, таких как атом лития, ионы Be^{+1} и B^{+2} . В использованных моделях спаренные электроны рассматривались как квазичастица с удвоенной массой и зарядом. Полученные при этом расхождения с экспериментом, очевидно, связаны с игнорированием внутренней структуры спаренных электронов.

Современная квантовая механика, по сути, не содержит объяснения образования спаренных электронов, а представления о спине, как о моменте вращения электрона-частицы не согласуется с представлением об электроне-волне.

Если отталкиваться от Боровской модели атома с круговыми орбитами электронов, то появляется возможность объяснить магнитные свойства атомов и молекул через магнитные свойства создаваемых движущимися электронами токов [5].

В результате появилась следующая модель атома гелия [6] (см. рис. 1). В ней электроны движутся в противоположных направлениях по круговым орбитам, плоскости которых сдвинуты относительно ядра. Расчёты показали, что система имеет полную энергию электронов, совпадающую с экспериментальным значением при радиусе орбит $0,587 a_0$ ($a_0 = 5,2917 \cdot 10^{-9}$ см – радиус орбиты электрона в атоме водорода) и расстоянии между плоскостями орбит $0,00125 a_0$. При этом электрон рассматривается как стоячая волна с линейной плотностью заряда, описываемой функцией:

$$\sigma = e[0,905(1 + \cos \alpha)/2\pi + 0,095 \sin(\alpha/2)/4]. \quad (1)$$

Функции, описывающие отдельные электроны, имеют между собой сдвиг по фазе на величину π . Стационарность волны возникает при условии, когда частота колебаний плотности заряда ν_σ равна частоте движения электрона по круговой орбите $\nu_e = u/2\pi r$. Орбитальная скорость движения электрона u , в свою очередь, определяется из величины момента количества движения электрона K [1]:

$$mur_n = nh/2\pi, \quad (2)$$

где: m – масса электрона, u – скорость его движения по орбите, r – радиус орбиты, n – целое число, равное номеру орбиты (в основном состоянии $n = 1$), h – постоянная Планка.

Равновесие в данной системе обеспечивается также за счёт того, что при движении электронов в противоположных направлениях между ними существует сила магнитного отталкивания, уравнивающая нормальную составляющую силы электростатического притяжения электрона к ядру.

Движущиеся электроны представляют собой электрический ток, который создаёт магнитное поле. Сила тока, создаваемого электроном на орбите, будет равна (в системе СГСЭ) [1]:

$$i = ev_e = eu/2\pi r = enh/4\pi^2 mr^2, \quad (3)$$

где: e – заряд электрона.

Для перехода в систему СГСМ необходимо величину, найденную по уравнению (3), разделить на скорость света. В атоме гелия при радиусе орбиты $0,587 a_0$ сила электронного тока на орбите равна $9,172 \cdot 10^6$ ед. СГСЭ или $3,059 \cdot 10^{-4}$ ед. СГСМ (3 мА).

Магнитное поле dH создаваемое элементом тока idl в некоторой точке равно (в системе СГСМ) [7, с. 185]:

$$dH = \frac{1}{4\pi} \cdot \frac{idl \sin \delta}{\rho^2}, \quad (4)$$

где: ρ – расстояние от элемента тока до пробной точки, δ – угол между вектором тока (касательной в случае кругового тока) и радиус-вектором точки относительно элемента тока.

Для того, чтобы найти полную величину магнитного поля, создаваемого током, нужно провести интегрирование по всем элементам тока (по α от 0 до 2π – см. рис. 2). Величина угла δ может быть вычислена из треугольника, образованного вектором ρ , касательной к

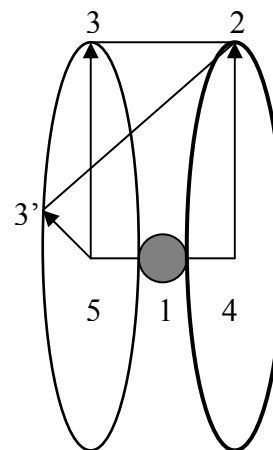


Рисунок 1. Схеме атома гелия: 1 – ядро, 2 и 3 – орбиты электронов, 4 и 5 – центры электронных орбит, 3' – элемент заряд

элементу тока (AB) и отрезком, соединяющим пробную точку P с точкой пересечения касательной и продолжения радиуса орбиты электрона B . Построение алгоритма вычисления может быть существенно упрощено, если через пробную точку в плоскости, параллельной плоскости тока, провести окружность, центр которой лежит на прямой, перпендикулярной к центру кругового тока.

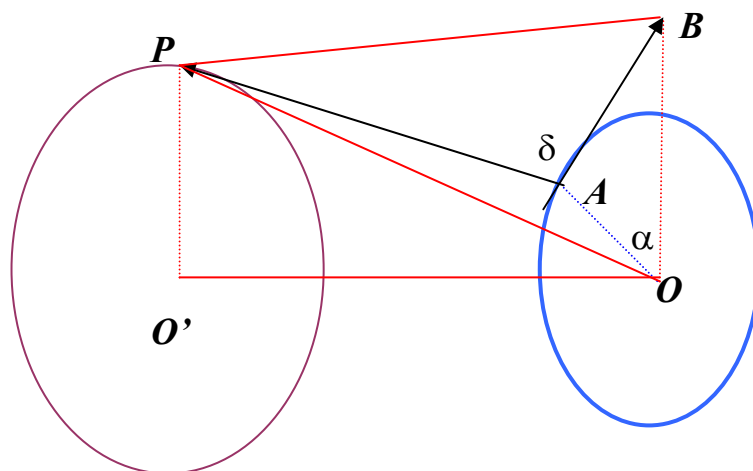


Рисунок 2. Схема к вычислению величины угла δ

Величина $dl = r d\alpha$, где $d\alpha$ - элемент дуги. Расчёты величины магнитного поля осуществлялись численным интегрированием с шагом $d\alpha = \pi/18000$ ($dl = 0,000102a_0$). В вычислениях были использованы следующие значения атомных величин [8]: $e = 4,8030 \cdot 10^{-10}$ электростатических ед.; $m = 9,1091 \cdot 10^{-28}$ г; $c = 2,9979 \cdot 10^{10}$ см/с; $h = 6,6256 \cdot 10^{-27}$ эрг·с.

Представить графически объёмную картину магнитного поля достаточно сложно. На рис. 3 изображена хрестоматийная картина силовых линий кругового тока. В табл. 1 представлены расчёты напряжённости магнитного поля вокруг линии орбиты индивидуального электрона в атоме гелия, а в табл. 2 – вдоль линии, перпендикулярной к центру орбиты. Как видно из табл. 2 в диапазоне расстояний от 0 до $0,02 a_0$ величина напряжённости магнитного поля практически не изменяется, а при расстояниях больших $5 a_0$ орбиту можно рассматривать как материальную точку: $H = 16886/x^{1,9989}$. Если рассчитывать напряжённость магнитного поля вдоль линии, находящейся в плоскости орбиты и проходящей через её центр (см. рис. 4), то при $x > 5a_0$ $H = 8770,9/x^{1,9983}$ (коэффициент корреляции $R^2=1,0000$).

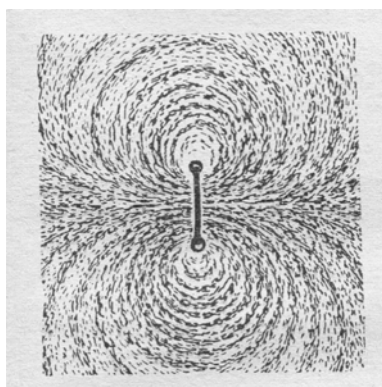


Рисунок 3. Силовые линии магнитного поля кругового тока [7, с. 187].

Таблица 1. Напряжённость магнитного поля, создаваемого электронным током в атоме гелия вдоль линий, проведённых вокруг орбиты (отсчёт угла изнутри – наружу)

α , рад.	$x = 0.00125 a_0$ H, Эрстед	$x = 0.0025 a_0$ H, Эрстед	$x = 0.587 a_0$ H, Эрстед
0,000	2,17·105	7,61·104	4,92·104
0,003	7,43·106	3,74·106	4,92·104
0,031	7,43·106	3,74·106	4,92·104
0,314	7,42·106	3,74·106	4,50·104
0,628	7,42·106	3,73·106	3,68·104
0,942	7,41·106	3,73·106	2,95·104
1,257	7,40·106	3,72·106	2,39·104
1,414	7,40·106	3,71·106	2,17·104
1,539	7,40·106	3,71·106	2,01·104
1,571	7,39·106	3,71·106	1,97·104
1,602	7,39·106	3,71·106	1,94·104
1,728	7,39·106	3,70·106	1,80·104
1,885	7,38·106	3,70·106	1,66·104
2,199	7,37·106	3,69·106	1,41·104
2,513	7,36·106	3,68·106	1,23·104
2,827	7,36·106	3,67·106	1,10·104
3,110	7,36·106	3,67·106	1,05·104
3,138	7,36·106	3,67·106	1,05·104
3,142	2,28·105	9,29·104	5,60·103

Таблица 2. Напряжённость магнитного поля, создаваемого электронным током в атоме гелия вдоль линии, перпендикулярной к плоскости орбиты, и проходящей через её центр

x, a0	H, Ersted	Аппроксимация
0,00001	49228,24	H [Эрстед]= $-148496x^2 + 1041,5x + 49228$ [x в ед. a0] R2 = 0,9998
0,0001	49228,24	
0,001	49228,24	
0,002	49228,22	
0,005	49228,07	
0,01	49221,09	
0,02	49207	
0,05	48900	
0,1	47849	
0,2	44143	
0,5	28546	H [Эрстед]= $8390/x1,322$ [x в ед. a0] R2 = 0,9418
1	12621	
2	3904,2	
5	669,5	
10	169,15	H [Эрстед]= $16886/x1,9989$ [x в ед. a0] R2 = 1,00000
20	42,393	
50	6,7847	
100	1,6962	

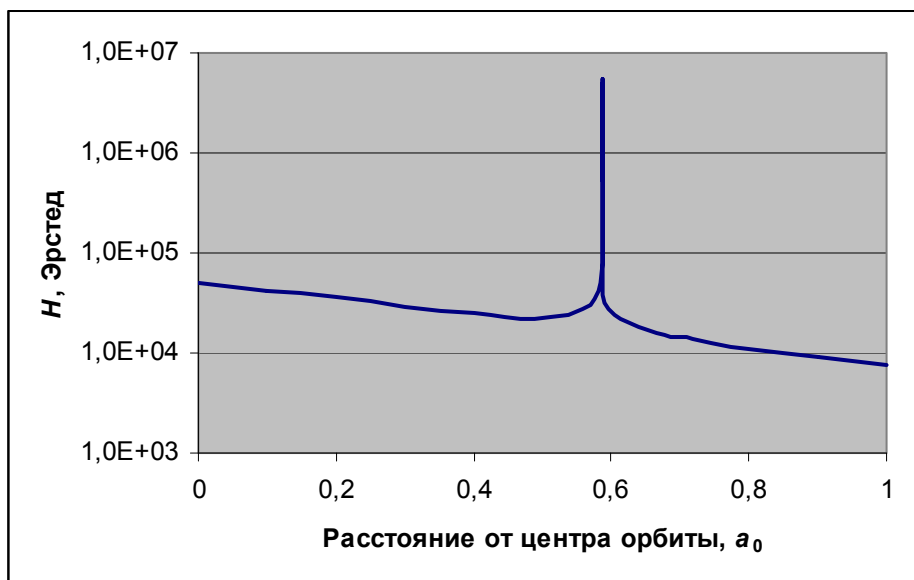


Рисунок 4. Зависимость напряжённости магнитного поля вдоль линии в плоскости орбиты, проходящей через её центр.

Направления напряжённости магнитного поля по разные стороны плоскости орбиты электрона противоположны. Поскольку электроны на орбитах движутся в противоположных направлениях, сложение магнитных полей приводит к усилению напряжённости между плоскостями орбит и ослаблению – с внешних сторон. Причём по обе стороны плоскостей магнитное поле оказывается одного знака, что обуславливает диамагнитные свойства гелия (см. рис. 5). Характер магнитного поля по линии, описывающей обе орбиты электронов и проходящей через центр, иллюстрирует рис. 6.

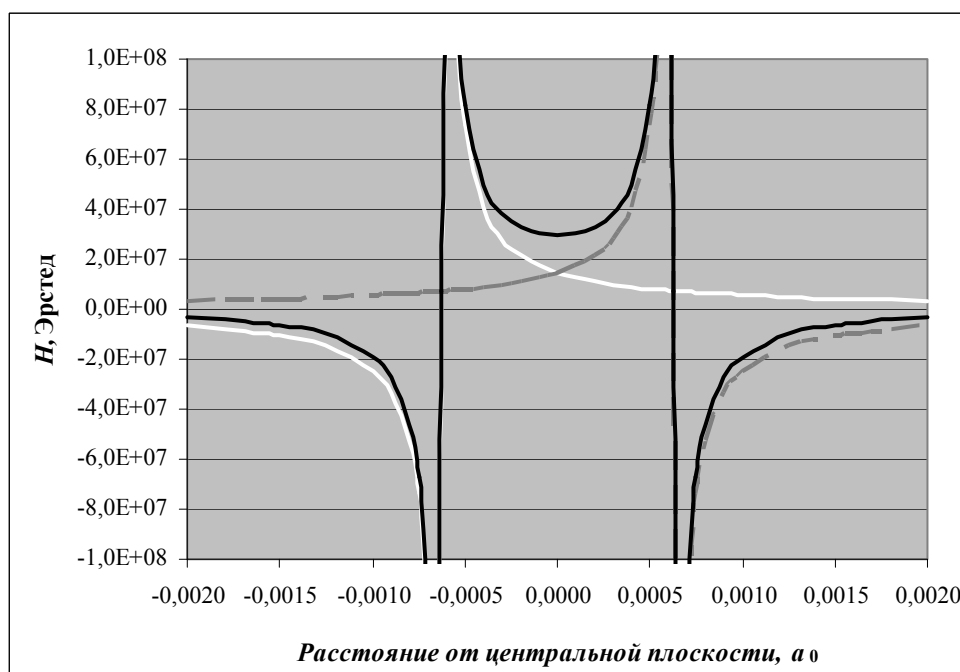


Рисунок 5. Напряжённость магнитного поля в атоме гелия вдоль линии, перпендикулярной к плоскостям орбит и проходящей через орбиты:

— и — — для индивидуальных электронов, — — суммарное поле.

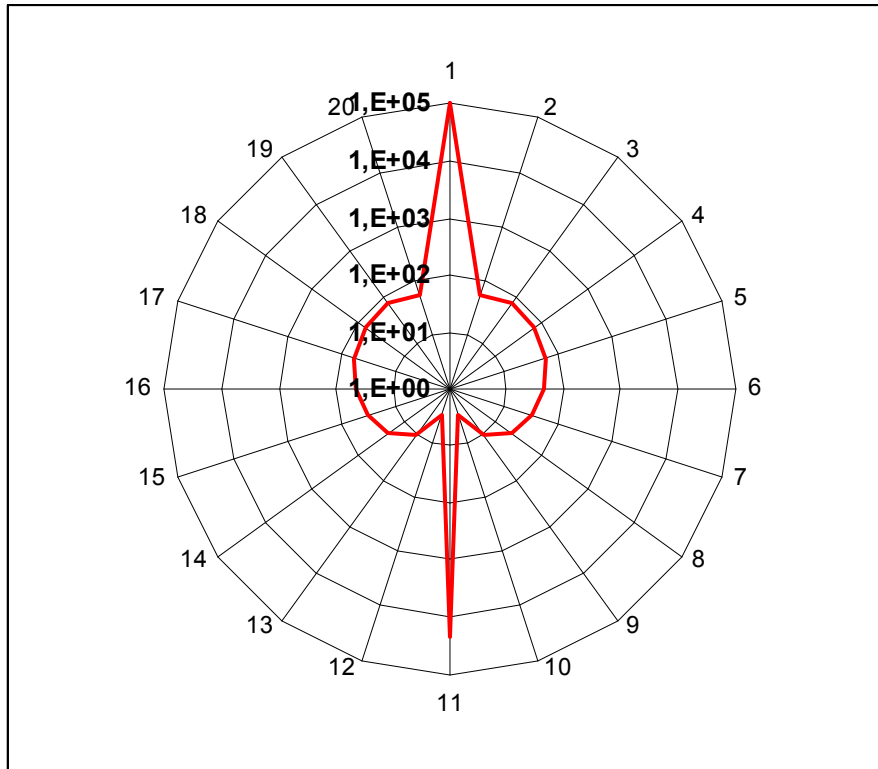


Рисунок 6. Абсолютное значение напряженности магнитного поля (Эрстед, логарифмическая шкала) вдоль линии, описывающей обе орбиты электронов гелия и проходящей через

В крайней точке (точка 11 на рис. 6) направление напряжённости магнитного поля будет перпендикулярно плоскостям орбит электронов. Зависимость напряжённости магнитного поля от расстояния ($x > 0,587 a_0$) вдоль линии проходящей через ядро между плоскостями орбит аппроксимируется уравнением:

$$H = 134833/x^{2,438} (R^2 = 0,94) \quad (5)$$

Вращение плоскостей орбит электронов

Плоскости орбит электронов способны вращаться как целое. Вращение плоскости орбиты связано с изменением момента количества движения электрона. Производимая при этом работа определяется соотношением:

$$A = \frac{\Delta K}{\Delta t} = K \frac{\Delta \varphi}{\Delta t}, \quad (6)$$

где: $\Delta \varphi$ – угол поворота.

Момент количества движения электрона равен $\hbar/2\pi$. Момент количества движения спаренных электронов будет равен \hbar/π , т.к. механическое движение электронов независимо. При повороте орбит на π радиан (180°) изменение момента количества движения будет равно \hbar , а работа с этим связанная - $\hbar/\Delta t$. Эта работа осуществляется за счёт внешней силы, источником которой может быть электромагнитное излучение. С другой стороны, закон сохранения энергии требует, что бы эквивалентное количество энергии выделилось в

окружающее атом пространство. Тогда, энергия, связанная с вращением плоскостей орбит будет определяться соотношением:

$$\Delta E = h/\Delta t = 2h\nu_o, \quad (7)$$

где: ν_o – частота вращения плоскостей орбиты. Коэффициент 2 появляется потому, что величина энергии, численно равная h , выделяется при повороте плоскостей орбит на 180° .

Проанализируем динамику данного изменения на примере пробной точки, расположенной на линии, перпендикулярной к центру орбиты (в её исходном состоянии) и удалённой от него на $100a_0$ (это приблизительно соответствует среднему расстоянию между атомами гелия при нормальных условиях). В исходной позиции напряжённость поля составляет всего - $1,6 \cdot 10^{-4}$ Эрстед. При повороте плоскостей напряжённость поля начинает медленно возрастать до нуля при угле поворота $89,964^\circ$. При угле поворота $89,99964^\circ$ напряжённость поля возрастет до 0,194, а при угле $89,99992^\circ$ - до 2,16 Эрстед. После 90° напряжённость магнитного поля уменьшается в обратном порядке (см. рис. 7). Т.е. в диапазоне $0,00036^\circ$ мы имеем резкий скачок напряжённости магнитного поля. Это связано с характером магнитного поля атома (см. рис. 5 и 6), которое сосредоточено между плоскостями орбит, находящимися на расстоянии $0,00125 a_0$.

Таким образом, излучение, связанное с вращением плоскостей орбит, имеет импульсный характер. Это позволяет применить к тепловому излучению известную формулу:

$$E = h\nu_R, \text{ где } \nu_R = 2\nu_o - \text{частота излучения.}$$

Теперь попытаемся описать геометрию процесса. Будем исходить из того, что формирование магнитного поля для определённого положения плоскостей орбит в пространстве происходит со скоростью света c . Пусть в момент времени $t_0 = 0$. орбиты заняли в пространстве некоторое положение. В точке, отстоящей от ядра атома на расстоянии x , магнитное поле сформируется через $\Delta t_x = x/c$. Поскольку плоскости орбит находятся в постоянном движении, то поле в этой точке исчезнет сразу же после своего возникновения, т.к. к этому времени источник магнитного поля уже находится в ином положении. Таким образом, мы получаем волну с радиальной симметрией, которая распространяется от кольца орбиты в бесконечность. Направление вектора напряжённости магнитного поля будет перпендикулярно радиальному лучу, поскольку оно перпендикулярно плоскости, находящейся между плоскостями орбит (см. комментарий к рис. 6). В момент времени dt плоскости орбит займут положение $\varphi_0 + d\varphi$, где $d\varphi = \omega_o dt$. За это время в направлении φ_0 фронт волны достигнет точки $x_{0,1} = cdt$ и сформирует там магнитное поле напряжённостью $H = 134833/x_{0,1}^{2,438}$ (см. уравнение (5)). В момент времени $2dt$ плоскости орбит займут положение $\varphi_0 + 2d\varphi$. За это время в направлении φ_0 фронт волны достигнет точки $x_{0,2} = 2cdt$, в направлении $\varphi_0 + d\varphi$ точки $x_{1,1} = cdt$. Таким образом, если мы рассмотрим сечение перпендикулярное оси вращения, то получим двойную спираль (см. рис. 8). Напряжённость магнитного поля в каждой точке спирали должна описываться уравнением (5).

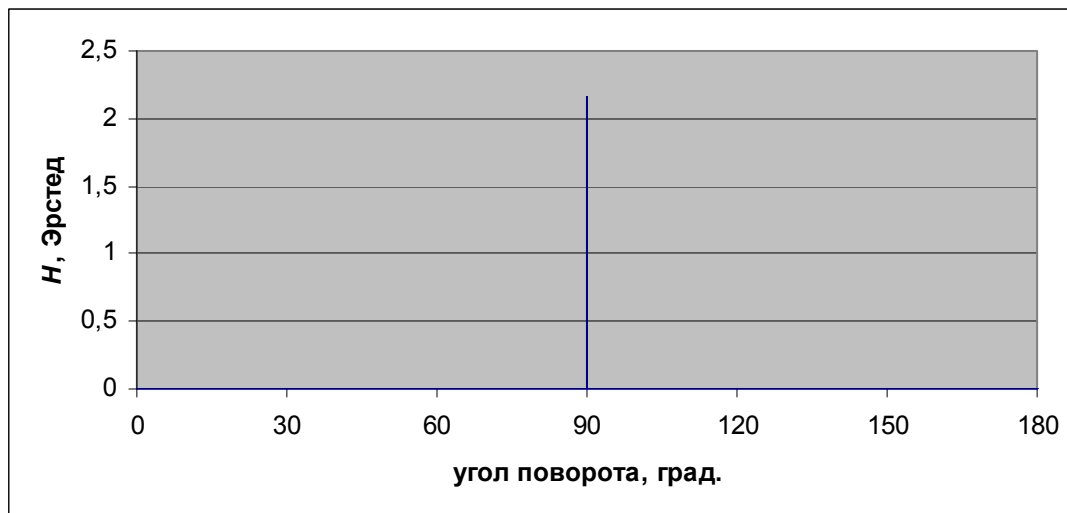


Рисунок 7. Напряжённость магнитного поля в точке, отстоящей от ядра атома на расстоянии $100 a_0$, в зависимости от угла поворота плоскостей орбит электронов (в исходном состоянии точка находится на перпендикуляре к плоскостям).

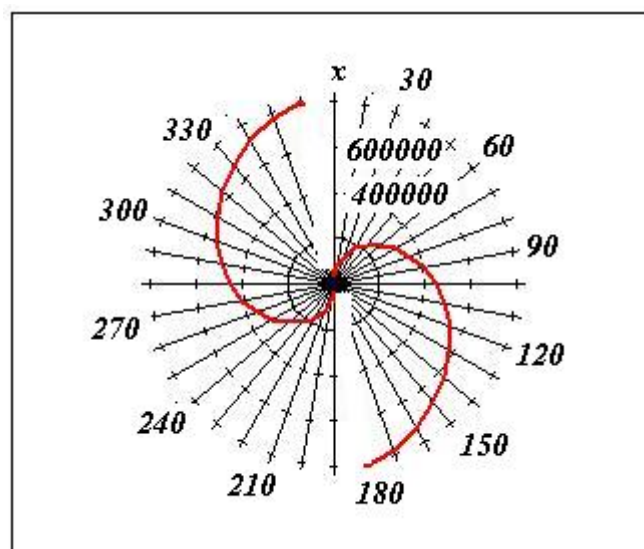


Рисунок 8. Положение «фронта» волны ЭМИ в плоскости, перпендикулярной оси вращения и проходящей через ядро, после поворота плоскостей орбит электронов на 180° ($\omega_0 = 5,28 \cdot 10^{12} \text{ c}^{-1}$; x в единица a_0).

Тепловое излучение можно описать как процесс периодического изменения напряжённости магнитного поля, вызванный вращением плоскостей орбит спаренных электронов.

Следствием геометрии магнитного поля спаренных электронов является импульсный характер изменения напряжённости поля в отдельных точках пространства. При этом частота излучения равна удвоенной частоте вращения. Каждые пол-оборота плоскостей связаны с работой, численно равной постоянной Планка h , которая определяется величиной изменения момента количества движения электронов.

Литература

1. Бор Н. // О строении атомов и молекул. // Избранные научные труды. Т. 1. – М: Наука, 1970, с. 84-148.
2. Дей К., Селбин Д. // Теоретическая неорганическая химия. – М: "Химия", 1971. 416 с.
3. Островский Н.В. // Динамическая модель молекулы водорода. II. Ортогональная модель молекулы водорода. // Интернет-конференция "Информационно-вычислительные технологии в науке". Дата публикации 25 мая 2008 г. URL: <http://www.ivtn.ru/>.
4. Островский Н.В. // Нахождение квантованного радиуса орбиты электрона. // Информационные технологии и математическое моделирование (ИТММ-2009): Материалы VIII Всероссийской научно-практической конференции. – Томск, Издательство Томского университета, 2009, ч. 2, с. 152-155.
5. Островский Н.В. // О природе спин-спинового взаимодействия. // Актуальные проблемы науки в России. Материалы международной научно – практической конференции. Выпуск VI, том III. – Кузнецк: Кузнецкий институт информационных и управленческих технологий, 2009, с. 48-53.
6. Островский Н.В. // О взаимодействии спаренных электронов. // Сборник материалов Всероссийской научно-технической конференции «Наука – производство – технологии – экология». – Киров: Вятский государственный университет, 2010, т. 2, с. 303-307.
7. Калашиников С.Г. // Электричество: учебное пособие. – М: Наука, ГРФМЛ, 1985.
8. Коттон Ф., Уилкинсон Дж. // Современная неорганическая химия. Часть 1. – М.: Мир, 1969.