

УДК 517.958

© 2014 г. **И.Е. Еремин**, д-р техн. наук,  
**В.В. Еремина**, канд. физ.-мат. наук  
(Амурский государственный университет, Благовещенск)

## НЕПРЕРЫВНО-ДЕТЕРМИНИРОВАННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННО-ОПТИЧЕСКИХ СПЕКТРОВ ВЕЩЕСТВА. I\*

Исследуется возможность корректного математического описания электронных свойств диэлектрических сред, синтезируемого на основе классических уравнений традиционной теории поляризации. В первой части работы рассмотрены фундаментальные соотношения, связывающие спектральные серии водорода с радиусами его сферических электронных орбит.

**Ключевые слова:** стационарное состояние атома, возбужденные электронные уровни, линейный гармонический осциллятор.

### Введение

В настоящее время считается, что наиболее эффективным методом математического описания электронных свойств вещества является расчет общей спектральной картины его энергетических уровней, осуществляемый с помощью современной квантовой теории. При этом в качестве типовой математической схемы, наиболее подходящей для моделирования изучаемых процессов, применяются вероятностные автоматы, обычно используемые для изучения функциональных свойств дискретно-стохастических моделей.

Отметим, что вероятностный автомат определяется как дискретный потактовый преобразователь информации с памятью, функционирование которого в каждом такте зависит только от его внутреннего состояния и может быть описано статистически [1]. Принимая во внимание математическую сущность базовых положений квантовой теории, – таких как принцип неопределенности, правило отбора и т.п., можно констатировать, что для современного моделирования энергетических характеристик квантовых систем используется именно указанная математическая схема, однако не называемая физиками своим прямым наименованием, общепринятым в математике. Данное обстоятельство не влияет на конечную результативность квантовых расчетов, однако требует упоминания.

---

\* Работа выполнена по государственному заданию Министерства образования и науки РФ высшим учебным заведениям в рамках проекта 145.2014 «Кибернетическое моделирование внутренней микроструктуры вещества».

К основным недостаткам существующих методик практических расчетов электронных свойств вещества, реализуемых в рамках квантовой теории, можно с достаточной степенью уверенности отнести следующие ключевые моменты. Во-первых, чрезвычайную громоздкость непосредственно производимых вычислений, связанную с необходимостью учета внутренних состояний каждого отдельного элемента сложной физической системы. Во-вторых, дискретность линейчатых спектров энергетических уровней электронных орбиталей, обусловленную сущностью дискретно-стохастического подхода.

Первое из названных обстоятельств является хорошо известным, второе же представляется более злободневным, поскольку в качестве экспериментальных данных, используемых для выяснения электронной конфигурации атомов или ионов, обычно выступают их спектральные линии, отображающие максимумы полос поглощения электромагнитного поля света частицами конкретного вещества в рентгеновском диапазоне частот электромагнитного спектра [2]. В свою очередь активное развитие колебательной спектроскопии привело к возможности привлечения для решения рассматриваемых задач электронно-оптических спектров материалов, представляющих собой плавные кривые, которые могут быть легко сопоставлены с результатами теоретических расчетов.

Учитывая сложившуюся ситуацию, особую актуальность приобретает проблема критического пересмотра и современного развития фундаментальных положений классической электронной теории, которая обладает несомненными преимуществами, обусловленными в первую очередь применением в качестве основной математической схемы обыкновенных дифференциальных уравнений, т.е. непрерывно-детерминированных моделей изучаемых систем. Следует отметить, что непосредственный вычислительный потенциал названного подхода позволяет одновременно устранить оба недостатка традиционных квантовых расчетов, а также существенно упростить решение задачи структурного синтеза математических выражений искомым характеристикам [3]. При этом непрерывно-детерминированное моделирование электронно-оптических спектров вещества никоим образом не подразумевает отказа от фундаментальной дискретной трактовки электронного строения атома, которая в рассматриваемом случае может использоваться для определения динамических параметров классических уравнений электронной поляризации конкретных материалов.

Основная цель проводимого исследования заключается в выявлении математической согласованности базовых предпосылок классической и квантовой теорий взаимодействия вещества с электромагнитным полем света, а также попытке создания единой совокупности вычислительных средств, позволяющих однозначно и эффективно рассчитывать непрерывные частотные характеристики его реальных оптических свойств. Первая часть работы посвящена рассмотрению фундаментальных соотношений, связывающих спектральные серии водорода с радиусами его электронных орбит, определяемыми на основе классического уравнения вынужденных колебаний электронного осциллятора. Кроме того, полученные результаты позволяют вскрыть объективные причины достоинств и недостатков квантовой теории строения атома Бора.

## Спектральные серии водорода. Формула Бальмера – Ридберга

Еще в XIX в. было экспериментально обнаружено, что активное полевое воздействие на тот или иной материал приводит к образованию соответствующего набора спектральных линий, генерируемых электронными оболочками образующих его частиц. При этом общее число полос поглощения конкретных химических элементов, а также их частотные характеристики представляют собой уникальные сочетания данных, которые определяют принципиальную возможность однозначной идентификации соответствующих атомов. Необходимо отметить, что именно попытки синтеза теоретической связи рассматриваемого физического явления с гипотетическими моделями строения атома и легли в основу фундаментальных предпосылок современной квантовой физики.

Пристальное внимание ведущих ученых того исторического периода привлекали узкие спектральные линии сильно разреженного водорода, физически наблюдаемые в красной, зеленой, голубой и фиолетовой области видимого спектра. Численные значения длин волн электромагнитного поля света, отвечающие рассматриваемому линейчатому спектру, были весьма точно измерены в 1868 г. шведским физиком Андерсом Ангстремом и составили соответственно 656.21, 486.07, 434.01 и 410.12 нм. В июне 1884 г. швейцарскому математику Иоганну Бальмеру удалось получить эмпирическую формулу, описывающую длину волны каждой из видимых спектральных линий [4]:

$$\lambda = \frac{bm^2}{m^2 - n^2}, \quad (1)$$

где  $n$  и  $m$  – целые числа ( $n = 2; m = 3, 4, 5$  и  $6$ );  $b$  – константа Бальмера, составляющая 364.56 нм.

В свою очередь, в 1890 г. шведский физик Йоханес Ридберг вывел обобщенную формулу Бальмера – Ридберга, предназначенную для расчета частоты поглощения  $f_r$  каждой из возможных спектральных линий водорода, в которую вошла универсальная константа  $R$ , названная постоянной Ридберга [4, 5]:

$$f_r = \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) R, \quad (2)$$

где  $R$  – частотная постоянная Ридберга, равная  $3,289842 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$ ;  $n$  – натуральные числа, определяющие номер отдельной серии;  $m$  – натуральные числа, начинающиеся со значения  $n + 1$  и характеризующие спектральные линии  $n$ -й серии.

Кроме того, на рубеже XIX и XX столетий Бальмер спрогнозировал возможность существования и других спектральных серий водорода, имеющих место для значений  $n$ , равных 1, 3, 4, 5 и 6. При этом все предсказанные им линейчатые спектры с течением времени нашли физическое подтверждение.

Ультрафиолетовая серия Лаймана ( $n = 1; m = 2, 3, 4, 5$  и  $6$ ) открыта в 1906 г. американским физиком Теодором Лайманом. Соответствующие ей значения длин волн составляют – 121.6, 102.5, 97.2, 94.9 и 93.7 нм.

Инфракрасная серия Пашена ( $n = 3; m = 4, 5$  и  $6$ ) – 1875.1, 1281.8 и 1093.8 нм – открыта в 1908 г. австрийским физиком Фридрихом Пашеном.

Средняя инфракрасная серия Брэккета ( $n = 4; m = 5, 6, 7$  и т.д.) – 4052.5,

2625.9, 2166.1, ..., 1458.0 нм – открыта в 1922 г. американским физиком Фредериком Брэкетом.

Дальняя инфракрасная серия Пфунда ( $n = 5$ ;  $m = 6, 7, 8$  и т.д.) – 7476.0, 4664.0, 3749.0, ..., 2279.0 нм – открыта в 1924 г. американским физиком Августом Пфундом.

Сверхдальняя инфракрасная серия Хэмпфри ( $n = 6$ ;  $m = 7, 8, 9$  и т.д.) – 12365.0, 7498.0, 5905.0, ..., 3281.0 нм – открыта в 1953 г. американским физиком Кертисом Хэмпфри.

Еще раз заметим, что приведенные сериальные формулы общего вида (2) изначально были подобраны эмпирически и долгое время не имели приемлемого теоретического обоснования, хотя и подтверждались экспериментально с очень высокой степенью точности. При этом поразительная повторяемость в них целых чисел и объективная универсальность постоянной Ридберга весьма доказательно свидетельствуют о глубоком физическом смысле выявленных с помощью данных формул закономерностей электронно-атомной структуры вещества, описание которой в рамках традиционного (индуктивного) подхода классической физики полагается принципиально невозможным [5].

### Базовые постулаты квантовой теории. Уравнения Бора

Первая попытка выстроить качественно новую (квантовую) теорию строения атома была предпринята в 1913 г. датским физиком Нильсом Бором. В основу своей теории Бор заложил два базовых постулата, связывающие в единое целое следующий ряд фундаментальных предпосылок, накопившихся к тому времени [4, 5]. Во-первых, – это эмпирические закономерности линейчатых спектров водорода, выявленные Бальмером. Во-вторых, – ядерная (планетарная) модель атома, предложенная в 1911 г. английским физиком Эрнестом Резерфордом. В-третьих, – квантовый характер излучения и поглощения света, открытый в 1900 г. немецким физиком Максом Планком и теоретически обоснованный в 1905 г. немецким физиком Альбертом Эйнштейном.

Первый постулат Бора констатирует, что в атоме всегда существуют состояния, в которых он не излучает энергии. При этом им соответствуют стационарные электронные орбиты, двигаясь по которым, электрон должен иметь дискретные значения момента импульса, удовлетворяющие условию:

$$m_e v_n r_n = n \hbar, \quad (3)$$

где  $m_e$  – масса электрона, равная  $9.109543 \cdot 10^{-31}$  кг;  $v_n$  – его линейная скорость кругового движения по  $n$ -й орбите;  $r_n$  – радиус электронной орбиты;  $\hbar$  – постоянная Дирака, равная  $1.054572 \cdot 10^{-34}$  Дж·с ( $2\pi\hbar = h$ ,  $h$  – квантовая постоянная Планка, составляющая  $6.625 \cdot 10^{-34}$  Дж·с).

Второй постулат Бора устанавливает, что при переходе электрона с одной стационарной орбиты на другую излучается или поглощается фотон с энергией, равной разности энергий, подходящих стационарных состояний атома:

$$hf_r = E_n - E_m, \quad (4)$$

где  $E_n$  и  $E_m$  – энергии, соответственно, первоначальной и конечной орбит.

В рамках данной трактовки, если  $E_n > E_m$ , то имеет место излучение атомом светового фотона, т.е. переход его электрона из состояния с высокой энергией (движение по орбите, удаленной от атомного ядра) в состояние с низкой энергией (движение по ближней орбите). В случае же  $E_n < E_m$  наблюдается обратная ситуация, связанная с атомным поглощением светового фотона.

Необходимо отметить, что положения, постулированные Бором, обусловили возможность математического выражения двух фундаментальных физических констант – первого боровского радиуса и постоянной Ридберга. При этом для их вывода использовалась классическая планетарная модель атома Резерфорда, согласно которой вокруг относительно тяжелого атомного ядра, обладающего положительным зарядом  $Ze$  (где  $Z$  – порядковый номер атома,  $e$  – элементарный заряд, равный  $1.602189 \cdot 10^{-19}$  Кл), по замкнутым орбитам движутся отрицательно заряженные электроны, образующие его электронную оболочку.

Согласно вышеупомянутой теоретической модели, сила кулоновского взаимодействия заряженных частиц сообщает каждому электрону атома определенное центростремительное ускорение, а второй закон Ньютона, примененный для описания закона динамики отдельного электрона, движущегося по круговой траектории вокруг неподвижного атомного ядра, имеет вид [5]:

$$\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_n^2} = \frac{m_e v_n^2}{r_n}, \quad (5)$$

где  $\epsilon_0$  – диэлектрическая проницаемость вакуума, равная  $8.854188 \cdot 10^{-12}$  Ф/м.

Используя соотношение Резерфорда вида (5), Бор, во-первых, объединив его со своим выражением вида (3), вывел уравнение теоретических радиусов стационарных электронных орбит водородоподобной системы

$$r_n = r_0 \frac{n^2}{Z}, \quad r_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2}, \quad (6)$$

где  $r_0$  – величина первого боровского радиуса, описывающая размер электронной орбиты атома водорода и составляющая  $0.529177 \cdot 10^{-10}$  м. Во-вторых, принимая во внимание, что полная энергия  $E_n$  электрона, вращающегося вокруг ядра водородоподобной системы по  $n$ -й орбите, складывается из его кинетической энергии, а также потенциальной энергии кулоновского взаимодействия, Бор сформировал достаточно очевидное выражение:

$$E_n = \frac{m_e v_n^2}{2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_n}. \quad (7)$$

В свою очередь объединение уравнения (7) с формулой (6), учитывая соотношение (5), дает следующий результат:

$$E_n = -\left(\frac{Z^2}{n^2}\right) \frac{1}{2} \frac{m_e e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2}. \quad (8)$$

Кроме того, следуя второму постулату Бора (4), при переходе атома водорода (т.е. для частного случая  $Z = 1$ ) из некоторого возбужденного состояния  $m$  в основное состояние с меньшей энергией  $n$  испускается световой квант:

$$hf_r = E_m - E_n = -\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right) \frac{1}{2} \frac{m_e e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2},$$

следовательно, частота соответствующего атомного излучения составляет:

$$f_r = \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right) \frac{1}{2} \frac{m_e e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 h}. \quad (9)$$

Таким образом, сопоставив обобщенную формулу Бальмера – Ридберга (2) со своим уравнением (9), Бор получил теоретическое выражение, эквивалентное эмпирическому значению частотной постоянной Ридберга [4, 5]:

$$R = \frac{1}{4\pi} \frac{m_e e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^3} = \frac{m_e e^4}{8h^3 \epsilon_0^2}. \quad (10)$$

Необходимо отметить, что непосредственная подстановка в формулу (9) различных номеров электронных орбит, – например  $n = 1$  и  $m = 2, 3, 4, \dots$ , приводит к генерации массива численных значений, эквивалентных частотам полос поглощения спектральной серии Лаймана. При этом в рамках традиционной квантовой механики полагается, что полученные величины характеризуют соответствующие переходы электронов водорода из возбужденных уровней с номерами  $m$  на его основной атомный уровень с номером  $n$ .

В свою очередь, аналогичное количественное объяснение спектра атома водорода, предложенное Бором, имеет место и при рассмотрении всех его остальных спектральных серий, первая тройка которых отображена на рис. 1.

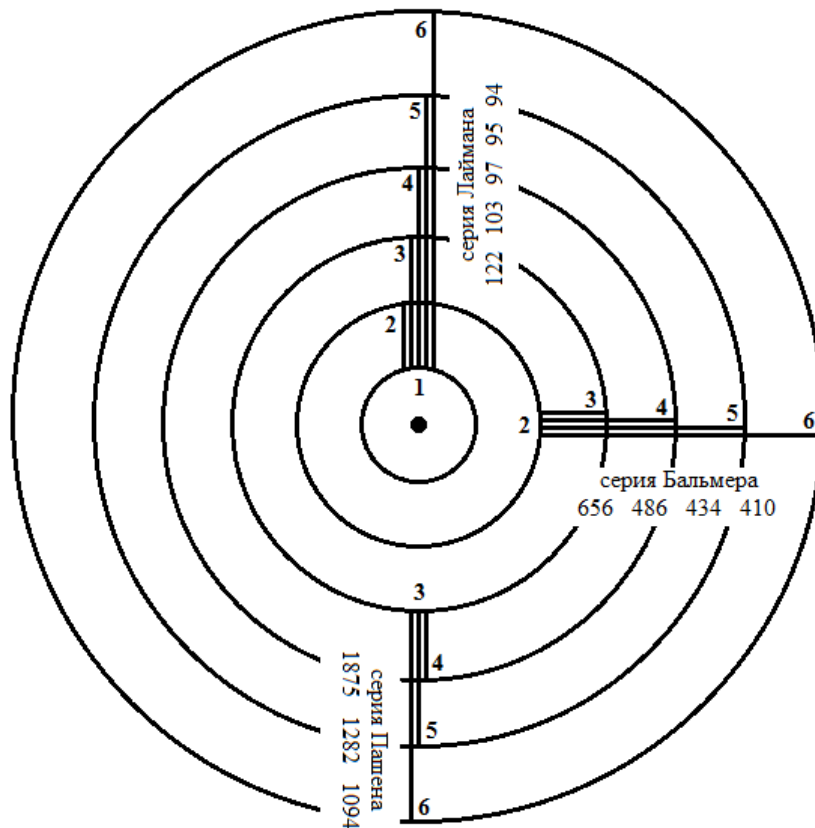


Рис. 1. Схема традиционной трактовки энергетических уровней, спектральных линий и квантовых прыжков электронов водорода [4].

## Уравнение вынужденных колебаний электронного осциллятора

Теория Бора была крупным шагом в развитии атомной физики и создании квантовой механики. Однако, основываясь, с одной стороны, на законах классической физики, с другой, – на квантовых постулатах, она не может объяснить интенсивность полос поглощения, а также физические условия осуществления тех или иных квантовых переходов. Помимо всего прочего, весьма серьезным недостатком теории Бора является невозможность описания атомного спектра гелия – простейшего из инертных газов, располагающегося непосредственно за водородом в периодической таблице свойств химических элементов.

Наряду с вышеизложенными обстоятельствами, математическая модель вынужденной электронной поляризации, возникающей под действием слабого электромагнитного поля и физически обуславливающей изучаемые спектральные серии, вполне адекватно описывается классическим уравнением затухающих колебаний линейного гармонического осциллятора [6 – 8]:

$$\frac{d^2\mu(t)}{dt^2} + 2\beta\frac{d\mu(t)}{dt} + \omega_0^2\mu(t) = \frac{(ze)^2}{zm_e}E(t), \quad (11)$$

где  $\mu(t)$  – временная функция наведенного дипольного момента;  $\beta$  и  $\omega_0$  – коэффициент затухания и частота собственных колебаний электронного облака;  $z$  – число составляющих его электронов;  $E(t)$  – напряженность эффективного электрического поля, действующего внутри поляризованного образца.

Кроме того, путем кибернетического преобразования обыкновенного дифференциального уравнения (11) (см., например, – [9]), можно получить частотную передаточную функцию  $W(j\omega)$  электронных колебаний частицы, эквивалентную комплексному выражению ее электронной поляризуемости  $\alpha(j\omega)$ :

$$W(j\omega) = \frac{\mu(j\omega)}{E(j\omega)} = \frac{ze^2}{m_e} \cdot \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 + j2\beta\omega} = \alpha(j\omega), \quad \alpha(j\omega) = \alpha_{\text{Re}}(\omega) + j\alpha_{\text{Im}}(\omega),$$

где  $\alpha_{\text{Re}}(\omega)$  и  $\alpha_{\text{Im}}(\omega)$  – вещественная и мнимая частотные характеристики вида:

$$\alpha_{\text{Re}}(\omega) = \frac{ze^2}{m_e} \cdot \frac{\omega_0^2 - \omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 - (2\beta\omega)^2}; \quad (12)$$

$$\alpha_{\text{Im}}(\omega) = \frac{ze^2}{m_e} \cdot \frac{2\beta\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 - (2\beta\omega)^2}. \quad (13)$$

Численные значения динамических параметров  $\omega_0$  и  $\beta$  могут быть рассчитаны в рамках классической теории поляризации диэлектриков с помощью теоретических формул, в основе вывода которых лежит электростатическая теорема Гаусса, а также учет внутреннего радиационного трения [6, 7]:

$$\omega_0^2 = \frac{a}{zm_e} = \frac{(Ze)(ze)}{4\pi\epsilon_0 r^3 (zm_e)} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^3 m_e}; \quad (14)$$

$$2\beta = \frac{1}{\tau} = \frac{\mu_0 \omega_0^2 (ze)^2}{6\pi c (zm_e)} = \frac{\mu_0 \omega_0^2 ze^2}{6\pi c m_e}, \quad (15)$$

где  $a$  – линейный коэффициент упругости, определяемый кулоновским взаимо-

действием разноименных зарядов;  $r$  – радиус сферического электронного облака;  $\tau$  – время релаксации процесса;  $\mu_0$  – магнитная проницаемость вакуума, равная  $1,256637 \cdot 10^{-6}$  Гн/м;  $c$  – скорость света в вакууме, равная  $2,997925 \cdot 10^8$  м/с.

Кроме того, можно констатировать, что уравнение (13), описывающее частотный спектр электронных диэлектрических потерь, т.е. поглощение частицей внешнего электромагнитного излучения, является физическим аналогом рассматриваемых линейчатых спектров.

Хорошо известно [5, 8, 9], что типичное условие существования экстремума названной функции, определяемое резонансной круговой частотой  $\omega_r$  полосы электронного поглощения частицы, имеет вид:

$$\omega_r = 2\pi f_r = \sqrt{\omega_0^2 - 2\beta^2}. \quad (16)$$

При этом, следуя традиционным формулам (14) и (15), численное значение частоты  $\omega_0$  собственных колебаний электронного облака должно быть примерно в миллиард раз больше величины  $\beta$  их затуханий.

Таким образом, в нашем конкретном случае можно достаточно уверенно использовать выражение:

$$f_r = \frac{\omega_0}{2\pi}. \quad (17)$$

Отметим, что, несмотря на простоту классических уравнений (11)–(17), их общий вычислительный потенциал обуславливает принципиальную возможность детерминированного моделирования непрерывных частотных спектров электронных свойств самых разнообразных веществ [10 – 16].

### Альтернативная модель энергетических уровней водорода

Принимая во внимание общую совокупность рассмотренных научных положений, непосредственное объединение вытекающих на их основании классических уравнений (2), (10), (14) и (17) позволяет достаточно обоснованно сформировать оригинальное соотношение:

$$\left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \frac{1}{4\pi} \frac{m_e e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^3} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^3 m_e}}.$$

При этом прямое преобразование данного выражения, направленное на выделение величины радиуса  $r_{n,m}$  сферического электронного облака, определяемого конкретными значениями  $n$  и  $m$ , дает новую формулу общего вида:

$$r_{n,m} = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} \sqrt[3]{\frac{1}{Z(1/(2n^2) - 1/(2m^2))^2}}. \quad (18)$$

Таким образом, подставляя в уравнение (18) значения  $n$  и  $m$ , соответствующие спектральным сериям Лаймана ( $n = 1$ ;  $m = 2, 3, 4, 5, 6$  и т.д.), Бальмера ( $n = 2$ ;  $m = 3, 4, 5, 6$  и т.д.) и Пашена ( $n = 3$ ;  $m = 4, 5, 6$  и т.д.), можно сгенерировать теоретическую модель основных и возбужденных электронных орбит водорода ( $Z = 1$ ), представленную на рис. 2.



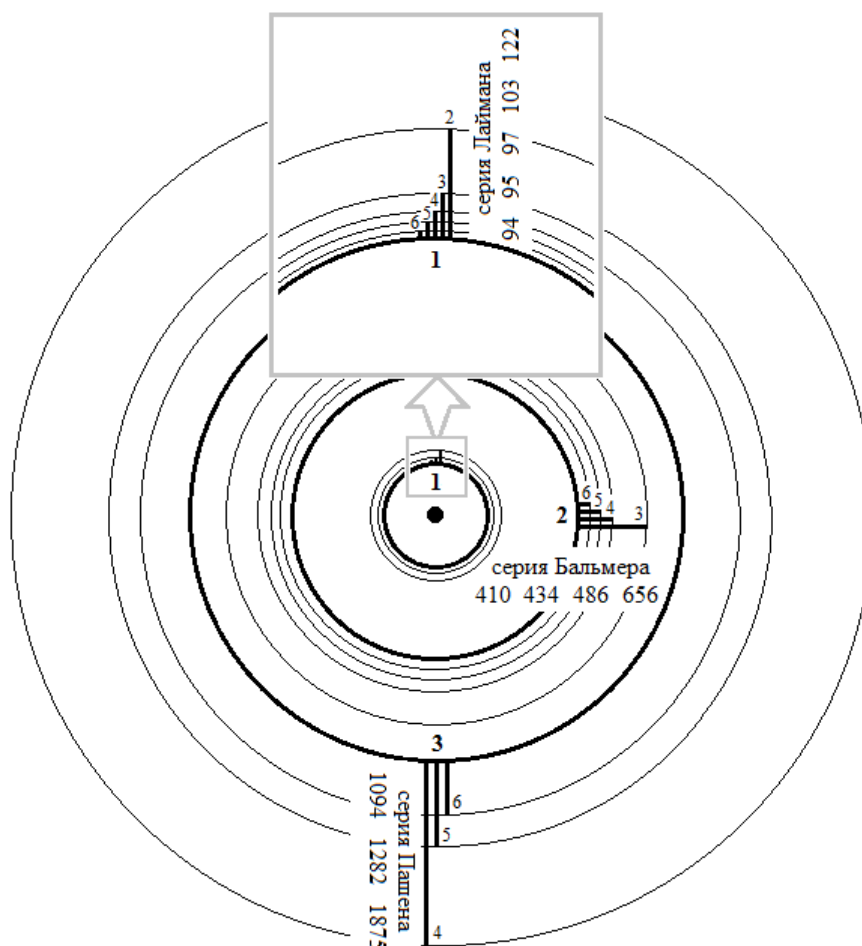


Рис. 2. Схема альтернативной трактовки энергетических уровней, спектральных линий и квантовых прыжков электронов водорода.

В свою очередь, физическая трактовка предлагаемой модели энергетических уровней, спектральных линий и квантовых прыжков электронов водорода может быть сформулирована следующим образом.

Во-первых, основные уровни электронов водорода имеют место для их стационарных круговых орбит, отвечающих конкретным значениям соответствующего главного квантового числа  $n$ . При этом численное значение второго орбитального числа  $m$  стремится к бесконечности.

Во-вторых, возбужденные электронные орбиты водорода всегда размещаются между текущим ( $n$ ) и следующим за ним ( $n + 1$ ) основными электронными уровнями. При этом меньшая величина орбитального числа  $m$  соответствует электронной орбите с большим радиусом.

Достаточно очевидно, что традиционная и альтернативная модели электронных уровней водорода (см. рис. 1 и 2), обладают рядом кардинальных отличий, правомочность которых, принимая во внимание существующий уровень технических средств современной электронной микроскопии, не может быть непосредственно проверена физическим путем. Однако те или иные преимущества и недостатки анализируемых трактовок могут быть объективно оценены с помощью мысленного и вычислительного экспериментов, направленных на проверку теоретической достоверности каждой из них.

С одной стороны, ключевым недостатком квантовой теории Бора является туманность объяснения с классической точки зрения физической сущности тех или иных энергетических переходов. При этом еще Резерфорд указывал ему в своем письме от 1913 г. [4]: «Мне кажется, у Вашей гипотезы есть еще одно очень слабое место. Я не сомневаюсь, что Вы и сами это полностью осознаете. Как электрон решает, с какой частотой он будет колебаться, переходя из одного стационарного состояния в другое? Мне кажется, Вы должны были предположить, что электрон заранее знает, где ему нужно остановиться». Действительно, руководствуясь схемой традиционной трактовки энергетических уровней, спектральных линий и квантовых прыжков (рис. 1), электрон водорода с равной долей вероятности может совершить квантовый прыжок из занимаемого им энергетического уровня, например,  $n = 3$ , как на уровень  $n = 2$ , так и на уровень  $n = 1$ .

В свою очередь предлагаемая авторами альтернативная модель энергетических уровней вида (18) непосредственно выстраивает все физически наблюдаемые спектральные линии водорода в целом и полностью упорядоченную последовательность, справедливо характеризующую изменение соответствующей им длины волны внешнего светового излучения (рис. 2).

С другой стороны, неоспоримым достоинством постулатов Бора служит практическая возможность строгого расчета спектральной серии Бальмера [4, 5], осуществляемого с помощью уравнения (9). Прямым следствием данного обстоятельства считается достаточная обоснованность расчетной формулы радиусов основных стационарных электронных орбит водородоподобной системы:

$$r_n = r_0 \frac{n^2}{Z}. \quad (19)$$

Альтернативная модель энергетических уровней, предлагаемая авторами, позволяет использовать для решения названной задачи несколько иное соотношение, непосредственно вытекающее на основе уравнения вида (18), принимая во внимание объективно необходимое условие  $m \rightarrow \infty$ :

$$r_n = r_0 \sqrt[3]{\frac{4n^4}{Z}}. \quad (20)$$

Результаты использования формул (19) и (20) для частного случая  $Z = 1$ , т.е. заряда атомного ядра водорода, приведены в таблице.

| Квантовое число, $n$ | Расчетные радиусы электронных орбит водорода, $r_n$ |                    |
|----------------------|---|--------------------|
|                      | Формула Бора (19)                                   | Новая формула (2)  |
| 1                    | $r_0$   | $\sqrt[3]{4r_0}$   |
| 2                    | $4r_0$  | $4r_0$             |
| 3                    | $9r_0$  | $3\sqrt[3]{12r_0}$ |

Сравнительный анализ расчетных радиусов электронных орбит водорода, учитывая содержание второй строки представленной таблицы, позволяет достаточно уверенно констатировать полную теоретическую равноценность рассматриваемых формул.

## Заключение

Предлагаемая последовательность решения задач структурного и параметрического синтеза модели упругой электронной поляризации вещества, описываемая в настоящей работе, является достаточно универсальной и может быть доведена до прикладного уровня применения. Таким образом, ее практическое использование должно оказаться полезным с позиции дальнейшей эволюции теоретических основ физики конденсированного состояния, обеспечивающих развитие современных энергетических нанотехнологий [17 – 20].

## ЛИТЕРАТУРА

1. *Советов Б.Я., Яковлев С.А.* Моделирование систем. – М.: Высшая школа, 2001.
2. *Зайдель А.Н., Шрейдер Е.Я.* Спектроскопия вакуумного ультрафиолета. – М.: Наука, 1967.
3. *Еремин И.Е., Костюков Н.С.* Построение модели процесса поляризации диэлектриков с помощью обратных связей // Информатика и системы управления. – 2001. – № 1. – С.45-53.
4. *Кумар М.* Квант: Эйнштейн, Бор и великий спор о природе реальности. – М.: АСТ: СОРУС, 2013.
5. *Трофимова Т.И.* Курс физики. – М.: Высшая школа, 2000.
6. *Хиппель А.* Диэлектрики и волны. – М.: ИИЛ, 1960.
7. *Деккер А.* Физика электротехнических материалов. – М.-Л.: Госэнергоиздат, 1962.
8. *Фейман Р., Лейтон Р., Сендс М.* Феймановские лекции по физике. – М.: Мир, 1967.
9. *Еремин Е.Л.* Динамические модели и S-моделирование систем. – Благовещенск: АмГУ, 2003.
10. *Еремин И.Е., Жилиндина О.В.* Моделирование упругой электронной поляризации композиционных электрокерамик. III // Информатика и системы управления. – 2008. – № 4(18). – С. 11-20.
11. *Еремин И.Е.* Кибернетическая теория поляризации щелочно-галлоидных кристаллов. III // Информатика и системы управления. – 2009. – № 3(21). – С. 20-26.
12. *Еремин И.Е., Сычева М.П.* Альтернативный способ визуализации электронной структуры ионного кристалла // Вестник Тихоокеанского государственного университета. – 2010. – № 3(18). – С. 73-80.
13. *Еремина В.В., Уляхина Д.А.* Имитационное моделирование структуры пятимолекулярных конгломератов воды // Информатика и системы управления. – 2010. – № 4(26). – С. 43-49.
14. *Жилиндина О.В., Еремин И.Е.* Моделирование упругой электронной поляризации кордиеритовой керамики Л-24 // Стекло и керамика. – 2012. – № 7. – С. 30-32.
15. *Еремин И.Е., Жилиндина О.В., Бартошин А.С.* Моделирование упругой электронной поляризации фианита // Стекло и керамика. – 2013. – № 9. – С. 22-23.
16. *Еремин И.Е., Еремина В.В., Жилиндина О.В.* Моделирование упругой электронной поляризации высокотемпературного стекла // Стекло и керамика. – 2014. – № 2. – С. 7-9.
17. *Ратнер М., Ратнер Д.* Нанотехнология: Простое объяснение очередной гениальной идеи. – М.: ИД "Вильямс", 2004.
18. *Гусев А.И.* Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии. – М.: Физматлит, 2005.
19. *Кобаяси Н.* Введение в нанотехнологию. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2007.
20. *Торшин В.В., Пащенко Ф.Ф., Круковский Л.Е.* Альтернативная энергетика: прошлое, настоящее, будущее. – М.: Белый берег, 2009.

*E-mail:*

*Еремин Илья Евгеньевич – [marinacops@mail.ru](mailto:marinacops@mail.ru);*

*Еремина Виктория Владимировна – [banysheva@mail.ru](mailto:banysheva@mail.ru).*