



УДК 532.08; 539.216.1

© 2019 г. **И.Е. Еремин**, д-р техн. наук,

В.В. Еремина, канд. физ.-мат. наук

(Амурский государственный университет, Благовещенск)

КИБЕРНЕТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ВОДОРОДА И ГЕЛИЯ. II

Рассматриваются фундаментальные математические модели упругой электронной поляризации и атомного строения названных веществ. Предлагается альтернативная трактовка их электронной конфигурации. Во второй части работы представлены результаты детерминированного моделирования пространственного расположения электронных уровней водорода.

Ключевые слова: линейчатый спектр; энергетические уровни; вычислительный эксперимент.

DOI: 10.22250/isu.2019.60.57-65

Введение

Как уже отмечалось в предыдущей части настоящей работы [1], первая попытка выстроить квантовую теорию строения атома водорода была принята Бором. При этом он предложил использовать два базовых постулата, связывающих в единое целое эмпирические закономерности линейчатых спектров водорода, выявленных Бальмером, планетарную модель атома, предложенную Резерфордом, а также квантовый характер излучения и поглощения света, открытый Планком и теоретически обоснованный Эйнштейном.

С одной стороны, постулаты, выдвинутые Бором, позволили рассчитать спектр атома водорода и водородоподобных систем, а также теоретически вычислить частотную постоянную Ридберга, что является их несомненным достоинством. С другой стороны, ключевым недостатком квантовой теории Бора оказались туманные объяснения физической сущности тех или иных

энергетических переходов. Еще Резерфорд писал Бору: «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» [2].

Несмотря на все недостатки, боровская модель электронных уровней атома водорода до сих пор представляет собой одно из фундаментальных положений современной квантовой физики атомов и молекул (рис. 1).

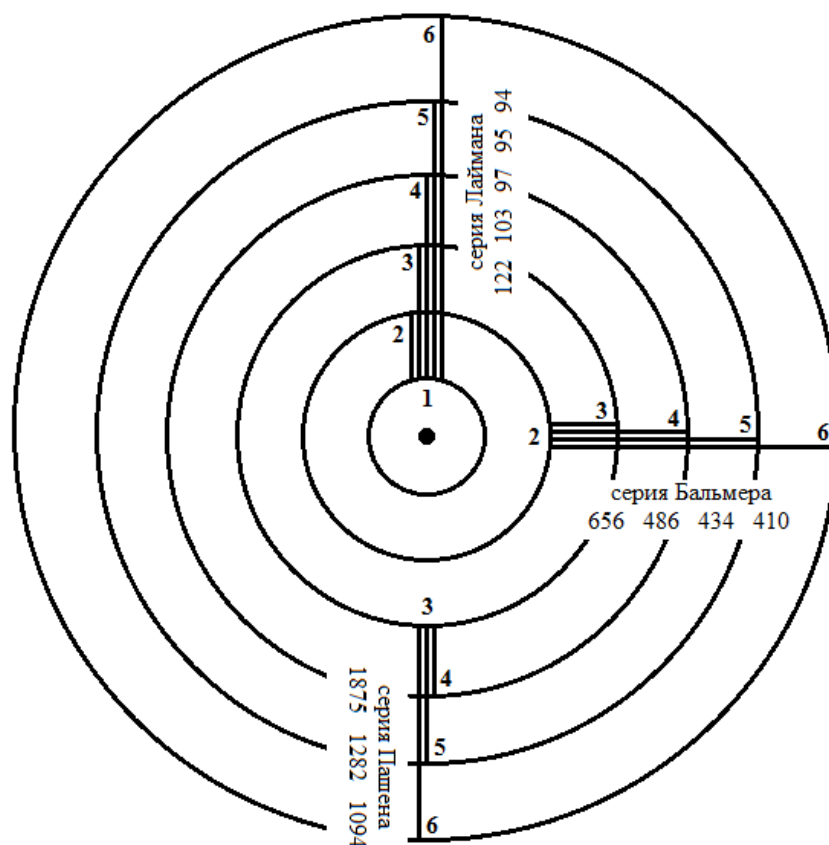


Рис. 1. Схема общепринятой трактовки энергетических уровней, спектральных линий и квантовых прыжков электронов водорода.

Теория Бора оказалась крупным шагом в развитии атомной физики и квантовой механики. Однако, основываясь, с одной стороны, на законах классической физики, а с другой, – на квантовых постулатах, она не смогла объяснить ни интенсивность полос поглощения, ни физические условия осуществления тех или иных квантовых переходов.

Альтернативная трактовка энергетических уровней водорода

Как известно [3 – 5], непрерывно-детерминированная модель вынужденной электронной поляризации, возникающей под действием электромагнитного поля внешнего светового потока, вполне адекватно описывается

классическим уравнением затухающих колебаний линейного гармонического осциллятора:

$$\frac{d^2 \mu(t)}{dt^2} + 2\beta \frac{d\mu(t)}{dt} + \omega_0^2 \mu(t) = \frac{ze^2}{m_e} E(t), \quad (1)$$

где $\mu(t)$ – функция наведенного дипольного момента; β и ω_0 – коэффициент затухания и частота собственных колебаний; z – число электронов, образующих электронное облако; e и m_e – заряд и масса электрона; $E(t)$ – напряженность электрического поля, эффективно действующего внутри поляризованного образца.

В свою очередь путем кибернетического преобразования обыкновенного дифференциального уравнения (1) (см., напр., [6 – 8]) можно получить частотную передаточную функцию $W(j\omega)$ электронных колебаний частицы, эквивалентную комплексному выражению ее электронной поляризуемости $\alpha(j\omega)$:

$$W_k(j\omega) = \frac{\mu_k(j\omega)}{E(j\omega)} = \frac{z_k e^2}{m_e} \frac{1}{\omega_{0k}^2 - \omega^2 + j2\beta_k \omega} = \alpha_k(j\omega),$$

$$k = \overline{1, K};$$

$$\alpha_k(j\omega) = \alpha_{\text{Re}k}(\omega) - j\alpha_{\text{Im}k}(\omega); \quad (2)$$

$$\alpha_{\text{Re}k}(\omega) = \frac{z_k e^2}{m_e} \frac{\omega_{0k}^2 - \omega^2}{(\omega_{0k}^2 - \omega^2)^2 - (2\beta_k \omega)^2},$$

$$\alpha_{\text{Im}k}(\omega) = \frac{z_k e^2}{m_e} \frac{2\beta_k \omega}{(\omega_{0k}^2 - \omega^2)^2 - (2\beta_k \omega)^2},$$

где K – общее число разновидностей электронных орбиталей.

Численные значения динамических параметров ω_{0k} и β_k 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 [3, 4]:

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

$$2\beta = \frac{1}{\tau} = \frac{\mu_0 \omega_0^2 (ze)^2}{6\pi c (zm_e)} = \frac{\mu_0 \omega_0^2 ze^2}{6\pi c m_e}, \quad (4)$$

где a – коэффициент квазиупругой силы, обусловленной кулоновским взаимодействием электронов с атомным ядром; Z – номер атомного ядра в периодической системе химических элементов; r – расстояние между атомным ядром и электроном; ϵ_0 – диэлектрическая постоянная; τ – время релаксации

электронных колебаний; c – скорость света в вакууме; μ_0 – магнитная постоянная.

Кроме того, можно достаточно уверенно констатировать, что последнее уравнение из общей совокупности выражений (2), описывающее частотный спектр электронных диэлектрических потерь, т.е. поглощение частицей внешнего электромагнитного излучения, является физическим аналогом рассматриваемых линейчатых спектров. При этом хорошо известно [5, 9], что типичное условие существования экстремума названной функции, определяемое резонансной круговой частотой ω_r полосы электронного поглощения частицы, имеет вид:

$$\omega_r = 2\pi f_r = \sqrt{\omega_0^2 - 2\beta^2}. \quad (5)$$

Необходимо отметить, что, следуя традиционным формулам (3) и (4), численное значение собственной частоты ω_0 колебаний электронного облака должно быть примерно в миллиард раз больше величины β их затуханий. Таким образом, в рассматриваемом случае можно достаточно уверенно использовать соотношение, учитывающее уравнение линейчатого спектра сложного атома [1]:

$$\omega_0 \cong 2\pi f_r = 2\pi ZR \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right), \quad (6)$$

где R – частотная постоянная Ридберга; n – натуральные числа, определяющие номер отдельной спектральной серии линейчатого спектра; m – натуральные числа, характеризующие линии n -й серии.

Непосредственное объединение выражений (3) и (6) дает объективную возможность сформировать оригинальное уравнение всего возможного набора радиусов $r_{n,m}$ сферических электронных орбит сложного атома:

$$\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_{n,m}^3 m_e} = (2\pi ZR)^2 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)^2 \Rightarrow r_{n,m} = r_0 \sqrt[3]{\frac{4}{Z(1/n^2 - 1/m^2)^2}}, \quad (7)$$

где h – постоянная Планка; r_0 – величина первого боровского радиуса.

Подставив в уравнение (7) значения n и m , соответствующие спектральным сериям Лаймана ($n = 1$; $m = 2, 3, 4, 5, 6$), Бальмера ($n = 2$; $m = 3, 4, 5, 6$) и Пашена ($n = 3$; $m = 4, 5, 6$), получим альтернативную трактовку энергетических уровней электронных орбиталей водорода (рис. 2).

Физическое толкование полученной модели энергетических уровней спектральных линий водорода может быть сформулировано следующим образом. Во-первых, основные уровни электронов водорода имеют место для их стационарных круговых орбит, отвечающих конкретным значениям соответ-

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

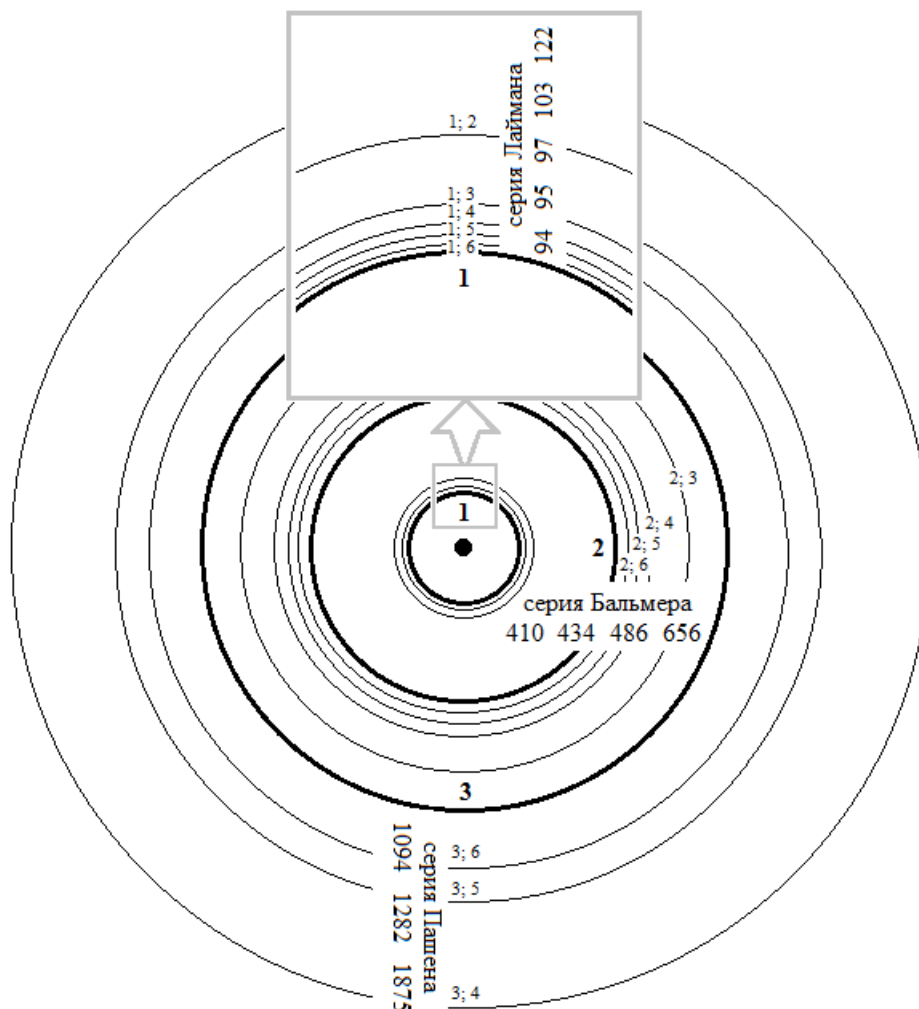


Рис. 2. Схема систематизированной трактовки электронной конфигурации водорода (первая тройка спектральных серий).

Очевидно, что традиционная и альтернативно предлагаемая трактовки электронных уровней водорода кардинально отличаются друг от друга, а приоритет любой из них, учитывая технический уровень современной электронной микроскопии, не может быть доказан чисто физическим путем.

Гипотетическое моделирование электронных конфигураций

Как уже отмечалось в работе [1], совокупность уравнений электронных поляризуемостей частиц вещества вида (2), кибернетическая модель его комплексной диэлектрической проницаемости и формул оптических показателей

является общим решением задачи структурного синтеза непрерывно-детерминированной модели как линейчатых, так и непрерывных электронных спектров. А именно: частотные зависимости показателей оптического преломления $n(\omega)$ и оптического поглощения $\chi(\omega)$ светового потока конкретным материалом описываются известными соотношениями:

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{\sqrt{\varepsilon_{\text{Re}}^2(\omega) + \varepsilon_{\text{Im}}^2(\omega)} + \varepsilon_{\text{Re}}(\omega)}{2}}; \quad (8)$$

$$\chi(\omega) = \sqrt{\frac{\sqrt{\varepsilon_{\text{Re}}^2(\omega) + \varepsilon_{\text{Im}}^2(\omega)} - \varepsilon_{\text{Re}}(\omega)}{2}}. \quad (9)$$

При этом наиболее эффективным выражением комплексной диэлектрической проницаемости $\varepsilon(j\omega)$ физических веществ, находящихся в различных агрегатных состояниях, оказывается ее кибернетическая модель [10-12]:

$$\begin{aligned} \varepsilon(j\omega) &= 1 + \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K \alpha_i(j\omega) N_i = \varepsilon_{\text{Re}}(\omega) + j\varepsilon_{\text{Im}}(\omega); \\ \varepsilon_{\text{Re}}(\omega) &= 1 + \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K \alpha_{\text{Re}i}(\omega) N_i; \\ \varepsilon_{\text{Im}}(\omega) &= \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K \alpha_{\text{Im}i}(\omega) N_i, \end{aligned} \quad (10)$$

где N_i – объемные концентрации имеющихся разновидностей электронных орбиталей частиц вещества.

В свою очередь предлагаемое уравнение радиусов $r_{n,m}$ сферических электронных орбит сложного атома (7) и модифицированная формула его линейчатого спектра (6) дают возможность достаточно обоснованной визуализации электронных конфигураций (рис. 3, 4), однозначно связанных с особенностями частотных характеристик соответствующих оптических спектров.

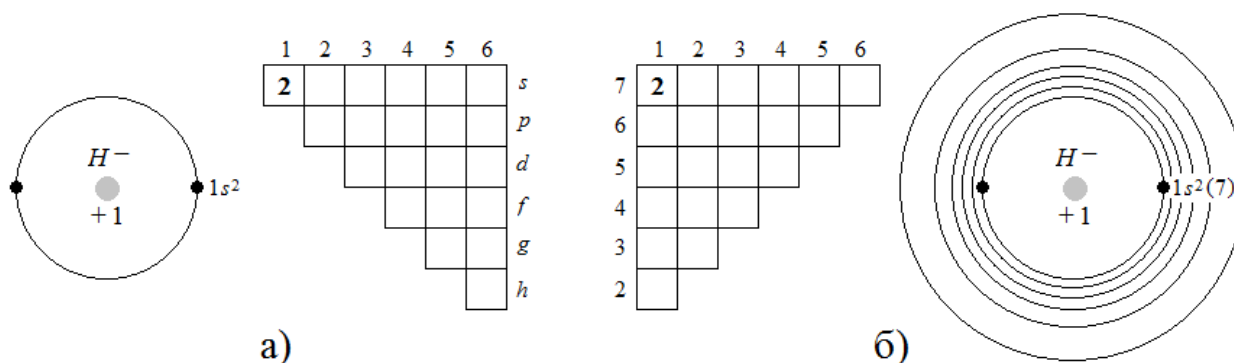


Рис. 3. Электронная конфигурация иона водорода:

а) – классическая трактовка;

б) – системная трактовка.

Комментируя представленные схемы, необходимо отметить, что в рассматриваемом случае классическая и системная трактовки электронной конфигурации исследуемых газов представляются схожим образом. Действительно, как в первом, так во втором варианте ее гипотетического описания оптические электроны атомарных частиц водорода и гелия оказываются размещенными на стационарном уровне $1s$ -орбитали.

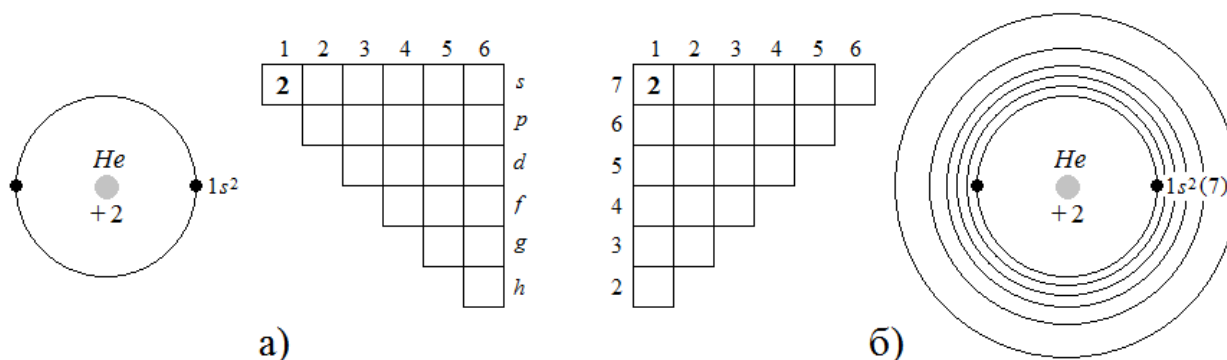


Рис. 4. Электронная конфигурация атома гелия:

- а) – классическая трактовка;
- б) – системная трактовка.

Таким образом, объединенный вычислительный потенциал уравнений (2), (4), (6 – 10) может быть квалифицирован в качестве типовой методики кибернетического моделирования электронных спектров и структуры конкретного вещества, исходными данными проведения которого являются справочные физико-химические параметры, а достоверность результатов легко проверяется путем сопоставления расчетных и контрольных характеристик [13].

Заключение

С одной стороны, преимущество предлагаемой математической модели электронной поляризации вещества, находящегося в газообразном состоянии, заключается в ее относительной простоте и наибольшей универсальности по сравнению с любым из научных подходов, имеющих место на текущий момент.

С другой стороны, показанное различие альтернативного и традиционного толкований электронных уровней атома требует объективного подтверждения своей адекватности. Следовательно, необходим ввод в рассмотрение некоторого дополнительного критерия достоверности кибернетического моделирования электронных свойств и структуры вещества, в качестве которого может выступить визуализация электронной структуры элементарных ячеек

ионных кристаллов [14 – 17] или же молекулярных ассоциатов полярной жидкости [18 – 22].

ЛИТЕРАТУРА

1. *Еремин И.Е.* Кибернетическое моделирование электронных характеристик водорода и гелия. I // Информатика и системы управления. – 2018. – № 3(57). – С. 18-32.
2. *Кумар М.* Квант: Эйнштейн, Бор и великий спор о природе реальности / пер. с англ. – М.: АСТ: СОРУС, 2013.
3. *Хиппель А.Р.* Диэлектрики и волны / пер. с англ. – М.: Изд-во ин. лит., 1960.
4. *Фрелих Г.* Теория диэлектриков / пер. с англ. – М.: Изд-во ин. лит., 1960.
5. *Фейман Р., Лейтон Р., Сендс М.* Феймановские лекции по физике: – Часть 2. Пространство. Время. Движение. – М.: Мир, 1967.
6. *Иванов В.А. и др.* Математические основы автоматического регулирования. – М.: Наука, 1971.
7. *Бесекецкий В.А., Попов Е.П.* Теория систем автоматического регулирования. – М.: Наука, 1975.
8. *Еремин Е.Л.* Динамические модели и S-моделирование систем. – Благовещенск: Изд-во АмГУ, 2003.
9. *Трофимова Т.И.* Курс физики. – М.: Высшая школа, 2000.
10. *Еремин И.Е., Еремина В.В., Костюков Н.С.* Моделирование электронно-атомной структуры конденсированных диэлектриков. – Благовещенск: АмГУ, 2006.
11. *Еремин И.Е., Еремина В.В., Ланина С.Ю.* Устранение катастрофы Мосотти с позиций системного подхода // Вестник Челябинского государственного педагогического университета. – 2010. – № 2. – С. 284-297.
12. *Еремин И.Е., Еремина В.В., Уляхина Д.А.* Метод расчета динамических параметров поляризационных процессов // Информатика и системы управления. – 2011. – № 3(29). – С. 60-69.
13. *Lide D.R.* Handbook of Chemistry and Physics: 9th Edition. – Boca Raton, FL: CRC Press, 2009.
14. *Еремин И.Е., Еремина В.В., Костюков Н.С., Оверчук В.А.* Элементы параметрического синтеза линейной модели процесса упругой электронной поляризации // Информатика и системы управления. – 2003. – № 1(5). – С. 26-32.
15. *Еремин И.Е., Жилиндина О.В.* Моделирование упругой электронной поляризации композиционных электрокерамик. III // Информатика и системы управления. – 2008. – № 4(18). – С. 11-20.
16. *Еремин И.Е., Жилиндина О.В.* Методика расчета экранирующих вкладов оптических электронов аниона кислорода // Вестник Тихоокеанского государственного университета. – 2009. – № 4(15). – С. 17-24.
17. *Жилиндина О.В., Еремин И.Е.* Моделирование упругой электронной поляризации кордиеритовой керамики Л-24 // Стекло и керамика. – 2012. – № 7. – С. 30-32.
18. *Еремина В.В., Костюков Н.С., Тюрина С.Ю.* Моделирование оптического спектра воды в области упругих видов поляризации // Информатика и системы управления. – 2003. – № 2(6). – С. 9-14.

19. *Еремина В.В.* Систематизация математических моделей упругих видов поляризации воды. I // Информатика и системы управления. – 2007. – № 1(13). – С. 12-21.
20. *Еремина В.В.* Систематизация математических моделей упругих видов поляризации воды. II // Информатика и системы управления. – 2007. – № 2(14). – С. 78-89.
21. *Еремина В.В., Уляхина Д.А.* Имитационное моделирование электронного строения трехмерных многомолекулярных кластеров воды // Информатика и системы управления. – 2010. – № 3(25). – С. 57-60.
22. *Еремина В.В., Уляхина Д.А.* Имитационное моделирование структуры пятимолекулярных конгломератов воды // Информатика и системы управления. – 2010. – № 4(26). – С. 43-49.

E-mail:

Еремин И.Е. – ilya.eremin.70@mail.ru;

Еремина В.В. – banysheva@mail.ru.