

ВНУТРЕННЯЯ ЭНЕРГИЯ ЭЛЕКТРОНОВ

Островский Н.В.,

к.т.н., доцент, Вятский государственный университет (г. Киров)

Onv1@yandex.ru

Аннотация. В статье обоснована необходимость введения параметра «внутренняя энергия электрона» для описания неравновесных состояний. Такие состояния возникают при переходе электронов с одной квантованной орбиты на другую или при ионизации многоэлектронных атомов и молекул. Приведены уравнения для расчета величины энергии, найденные эмпирическим путем.

Ключевые слова: электронные переходы, ионизация, внутренняя энергия электрона.

INTERNAL ELECTRON ENERGY

Ostrovskiy N.V.,

Ph. D., Associate Professor

Vytko State University (City of Kirov, Russia)

Abstract. In the article the necessity of introducing a parameter “internal electron energy” to describe of no equilibrium states is justified. Such conditions occur during the transition of electrons from one quantized orbit to another or by ionization of multi-electron atoms and molecules. The equations for calculating the amount of energy were found empirically.

Key words: electronic transitions, ionization, the internal energy of the electron.

ВВЕДЕНИЕ

Волновой Шредингеровской механике параметр «внутренняя энергия электрона» не используется [1, 2]. И в этом нет необходимости, поскольку энергия электрона определяется его волновой функцией: если меняется энергия электрона, мы подбираем новый вид волновой функции и проблема решена. Другое дело классическая квантовая механика Бора, где энергия электрона определяется действующими на него силами и скоростью его движения, связанной с величиной углового момента. При определенных условиях возникают расхождения, между величиной энергии, вычисленной по модели Бора, и экспериментальной величиной. Чтобы устранить это противоречие, ведущее к нарушению закона сохранения энергии, автором предложено использовать параметр «внутренняя энергия электрона».

В статье рассмотрено два вида процессов: переходы электронов с одной квантованной орбиты на другую и ионизация многоэлектронных атомов.

1. ЭЛЕКТРОННЫЕ ПЕРЕХОДЫ

Классическая модель Бора базируется на трех основных положениях [3]:

1) На электрон, находящийся на стационарной (квази-стационарной) орбите, действуют две взаимно уравновешенные силы: электростатического притяжения и центробежная. Для одноэлектронной системы уравнение, описывающее это условие, имеет вид:

$$\frac{Ze^2}{r^2} = \frac{mu^2}{r}, \quad (1)$$

где: Ze – заряд ядра; e , m , u и r – заряд, масса, скорость и радиус орбиты электрона соответственно.

2) Угловой момент электрона определяется соотношением:

$$K = m u_n r_n = nh/2\pi, \quad (2)$$

где: n – номер орбиты электрона, h – постоянная Планка.

3) Частота излучения электронного перехода ν связана с изменением энергии электрона ΔE соотношением:

$$\Delta E = h\nu. \quad (3)$$

Энергия электрона складывается из потенциальной и кинетической. Потенциальная энергия объекта в поле центральной силы, находящегося на расстоянии r от центра силы, равна:

$$E_p = \int_0^r F(r) dr. \quad (4)$$

В случае электростатической силы, описываемой левой частью уравнения (1), величина интеграла будет равна:

$$E_p = -\frac{Ze^2}{r}. \quad (5)$$

Как известно, кинетическая энергия тела описывается уравнением:

$$E_k = \frac{mu^2}{2}. \quad (6)$$

Теперь рассмотрим переход электрона с нижней орбиты с номером a на верхнюю орбиту с номером b . При этом радиус орбиты увеличится с величины r_a до величины r_b , а скорость орбитального движения уменьшится в соответствии с законом сохранения момента количества движения [4] до величины u_{ab} :

$$u_{ab} = u_a r_a / r_b. \quad (7)$$

Но в соответствие с постулатом Бора (см. уравнение (2)) на орбите b момент количества движения электрона увеличивается пропорционально номеру орбиты (квантовый скачок), а, следовательно, увеличиваются скорость движения электрона и его кинетическая энергия. Выразим скорость движения электрона через другие его характеристики, воспользовавшись равенством (1):

$$u = \sqrt{Ze^2 / mr}. \quad (8)$$

А теперь найдем изменение кинетической энергии электрона, связанное с квантовым скачком:

$$\begin{aligned} \Delta E_{k,QI} &= \frac{m}{2} (u_b^2 - u_a^2) = \\ &= \frac{m}{2} \cdot \left(\frac{Ze^2}{mr_b} - \frac{Ze^2}{r_a} \cdot \frac{r_a^2}{r_b^2} \right) = \frac{Ze^2}{2} \left(\frac{r_b - r_a}{r_b^2} \right). \end{aligned} \quad (9)$$

Переход электрона с орбиты a на орбиту b связан с поглощением им определенной энергии (фотона) извне. Связанные процессы поглощения энергии и увеличения радиуса орбиты растянуты во времени, а квантовый скачок происходит мгновенно. Следовательно, электрон должен уже иметь необходимую для скачка энергию.

Учет этого эффекта оказался необходимым с позиций сохранения энергии при моделировании процесса электронного перехода в атоме водорода [5]. Если процесс передачи энергии фотона электрона описать с использованием функции мощности излучения:

$$P(t) = h\nu^2 [1 + \cos(2\pi\nu t - \pi)], \quad (10)$$

где: ν – частота излучения и t – время; интеграл от $P(t)$ за период времени $\Delta t = 1/\nu$ равен $h\nu$, то смещение электрона из положения r_1 в положение r_2 за интервал dt связано с работой против силы электростатического притяжения A_{12} :

$$r_2 = \frac{1}{1/r_1 - A_{12}/e^2}. \quad (11)$$

Величина работы A_{12} может быть найдена исходя из величины полученной электроном энергии $P(t)dt$ с учетом изменения кинетической $\Delta E_{k,12}$ и внутренней $\Delta E_{Def,12}$ энергий электрона:

$$A_{12} = P(t)dt - \Delta E_{k,12} - \Delta E_{Def,12}. \quad (12)$$

При этом оказалось [5], что изменение внутренней энергии описывается уравнением (9).

2. ИОНИЗАЦИЯ НИЖНИХ ЭЛЕКТРОНОВ

Модель Бора дает прекрасную сходимость между результатами вычислений и экспериментальными данными энергии электрона в атоме водорода. Казалось бы, что мы вправе ожидать подобных результатов и для других одноэлектронных систем. Но если мы обратимся к энергиям ионизации последнего электрона в многоэлектронных атомах, то обнаружим существенные расхождения между результатами вычислений и экспериментом (см. таб. 1).

Таблица 1

Характеристики одноэлектронных ионов

Ион	Z	$E_{l,Exp}$ [6] Хартри ^{а)}	$E_{l,Calc}$ ^{б)} Хартри	ΔE_p Хартри	r_{E_s} a_0 ^{б)}	r_Z a_0
He ⁺	2	2,0014	2,0000	0,0014	0,4998	0,5000
L ⁺²	3	4,5036	4,5000	0,0036	0,3332	0,3333
Be ⁺³	4	8,0071	8,0000	0,0071	0,2499	0,2500
B ⁺⁴	5	12,5112	12,5000	0,0112	0,1999	0,2000
C ⁺⁵	6	18,0185	18,0000	0,0185	0,1666	0,1667
N ⁺⁶	7	24,5325	24,5000	0,0325	0,1428	0,1429
O ⁺⁷	8	32,0485	32,0000	0,0485	0,1249	0,1250
F ⁺⁸	9	40,5701	40,5000	0,0701	0,1110	0,1111
Ne ⁺⁹	10	50,0985	50,0000	0,0985	0,0999	0,1000

Примечания:

а) 1 Хартри равен потенциальной энергии электрона в основном состоянии атома водорода $4,356 \cdot 10^{-11}$ эрг.

б) a_0 – радиус орбиты электрона в основном состоянии атома водорода = $5,292 \cdot 10^{-9}$ см.

Объяснить это явление логично следующим образом. Сила, действующая на электрон в многоэлектронном атоме, определяется как притяжением электрона к ядру, так и отталкиванием от других электронов. После удаления внешних электронов сила электростатического притяжения уменьшается, следовательно, радиус орбиты электрона и его энергия должны увеличиться. Но для реализации этого процесса электрон должен получить энергию извне. В противном случае он сохраняет исходный радиус и исходную энергию. Но для соблюдения закона сохранения энергии он должен приобрести дополнительную энергию. Разница между Боровской энергией электрона с неискаженной орбитой и фактической энергией равна внутренней энергии электрона.

Ранее [7] было показано, что для Боровской модели справедливо соотношение:

$$r_E = \sqrt{-\frac{n^2 a_0 e^2}{2E_S}}, \tag{13}$$

т.е. электрон с энергией E_S должен иметь радиус орбиты r_E . Используя уравнение (13) мы можем вычислить радиусы орбит ионов, соответствующие экспериментальным значениям энергии и сопоставить их с Боровскими радиусами (r_Z).

Корреляционный анализ данных таб. 1 приводит нас к уравнению:

$$\Delta E_{Def} = -Ze \frac{r_Z - r_E}{r_Z^2}. \tag{14}$$

3. ПРИРОДА ВНУТРЕННЕЙ ЭНЕРГИИ ЭЛЕКТРОНА

Чтобы понять природу внутренней энергии электрона, нужно иметь представления о его структуре. В настоящее время такие представления отсутствуют. Теория Шредингера не дает даже объяснения образования стоячей волны, представление о которой положено в основу разработанной им модели.

Возможно, для этих целей окажется полезной предложенная автором ранее модель образования стоячей волны на круговой орбите [8]. Пусть изменения

(колебания) величины заряда вдоль орбиты электрона описываются типичным волновым уравнением:

$$q = e \left\{ 1 + \cos \left[\omega_q \left(t - x/u_q \right) + \phi \right] \right\} / 2\pi, \quad (15)$$

где: $\omega_q = 2\pi\nu_q$ – круговая частота изменения величины заряда в точке x ,

u_q – скорость движения электрической составляющей электрона,

ϕ – сдвиг фазы.

Сдвиг фазы связан с движением массовой составляющей электрона:

$$\phi = \pm 2\pi ut / \lambda_q, \quad (16)$$

где: λ_q – длина волны электрона, а u – его орбитальная скорость.

Учитывая, что длина волны электрона в атоме (волны де Бройля) равна [9, с. 56] $\lambda_q = 2\pi r_n / n$, а $u_q = \lambda_q \nu_q$ мы можем преобразовать аргумент в уравнении (15):

$$\omega_q \left(t - x/u_q \right) + \phi = 2\pi u_q t / \lambda_q - 2\pi x / \lambda_q + 2\pi ut / \lambda_q. \quad (17)$$

При $u = -u_q$, аргумент будет равен:

$$-2\pi x / \lambda_q = -nx / r_n.$$

Это означает, что распределение заряда электрона на стационарной орбите не зависит от времени, т.е. мы имеем стоячую волну.

Как повлияет нарушение условий стационарности на распределение заряда и к каким последствиям это может привести, мы рассмотрим в отдельной публикации.

Список литературы

1. Бом Д. Квантовая теория. – М.: Наука, ГРФМЛ, 1965. – 727 с.
2. Schrödinger E. An undulatory theory of the mechanics of atoms and molecules. //The Physical Review. Second Series, Vol. 28, No 6, p. 1049-1070.
3. Bohr, N. On the Constitution of Atoms and Molecules//*Phil. Mag.* 1913, 26, 1-25.
4. Жирнов Н.И. Классическая механика. М.: «Просвещение», 1980. – 303 с.
5. Островский Н.В. Об энергии импульса электромагнитного излучения (электронный переход в атоме водорода).// Труды VII Международного симпозиума по электромагнитной совместимости и электромагнитной экологии. – СПб: «ЛЭТИ», 2007, с. 218-221.
6. Эмсли Дж. Элементы. Пер. с англ. – М.: Мир, 1993. – 256 с.
7. Островский Н.В. Об энергии и структуре спаренных электронов.//Современная наука: актуальные проблемы теории и практики. Серия «Естественные и технические науки», 2013, №1-2, с. 22-29.
8. Островский Н.В. Моделирование взаимодействия спаренных электронов в ионе лития.//Информационные технологии и математическое моделирование (ИТММ-2010): Материалы IX Всероссийской научно-практической конференции. – Томск: Издательство Томского университета, 2010, ч. 2, с. 106-110.
9. Соколов А.В., Лоскутов Ю.М., Тернов И.М. Квантовая механика. – М.: Просвещение, 1965. – 638 с.