

БАКАЛАВРИАТ И МАГИСТРАТУРА

РОЛЬ ФОТОНОВ В ФИЗИЧЕСКИХ И ХИМИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЯХ

Б. Л. Александров, М. Б. Родченко, А. Б. Александров



www.e.lanbook.com



**ЭБС
ЛАНЬ**

**Б. Л. АЛЕКСАНДРОВ,
М. Б. РОДЧЕНКО,
А. Б. АЛЕКСАНДРОВ**

РОЛЬ ФОТОНОВ В ФИЗИЧЕСКИХ И ХИМИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЯХ

Учебное пособие

Издание второе, исправленное

Под редакцией профессора Б. Л. Александрова



САНКТ-ПЕТЕРБУРГ
МОСКВА
КРАСНОДАР
2020

УДК 53
ББК 22.3я73

А 46 Александров Б. Л. Роль фотонов в физических и химических явлениях : учебное пособие / Б. Л. Александров, М. Б. Родченко, А. Б. Александров ; под ред. Б. Л. Александрова. — 2-е изд., испр. — Санкт-Петербург : Лань, 2020. — 404 с. : ил. — (Учебники для вузов. Специальная литература). — Текст : непосредственный.

ISBN 978-5-8114-4045-0

Данная книга показывает роль фотонов в физических и химических явлениях и процессах на пути познания окружающего мира. Предложена новая модель фотона и концепция вращения фотонов вокруг всех заряженных элементарных частиц атома. Приводится новая физическая трактовка результатов решения уравнения Шредингера для электрона в атоме водорода. С помощью фотонной теории рассмотрено строение атома и химическая связь, дается обоснование электропроводности и сверхпроводимости и роли фотонов в этих явлениях, описаны теплофизические процессы, физическая сущность понятия температуры вещества и фазовых переходов. Доказательная база представлена многочисленными расчетами. Фотонная системность и целостность изложения материала служит научным обоснованием приведенных физических и химических понятий и явлений.

Книга предназначена для студентов, обучающихся по программе бакалавриата и магистратуры направлений подготовки и специальностей, входящих в УГСН: «Биологические науки», «Фотоника, приборостроение, оптические и биотехнические системы и технологии», «Физико-технические науки и технологии», «Технологии материалов», «Нанотехнологии и наноматериалы» и других инженерных и биологических специальностей университетов. Книга также может быть полезна студентам и преподавателям нехимических специальностей, сотрудникам НИИ.

УДК 53
ББК 22.3я73

Рецензенты:

О. В. ГРИГОРАШ — доктор технических наук, профессор, зав. кафедрой электротехники, теплотехники и возобновляемых источников энергии Кубанского государственного аграрного университета им. И. Т. Трубилина, заслуженный изобретатель РФ;

В. Д. СТРЕЛКОВ — доктор химических наук, профессор кафедры органической химии и технологий Кубанского государственного университета.

Обложка
П. И. ПОЛЯКОВА

© Издательство «Лань», 2020
© Коллектив авторов, 2020
© Издательство «Лань»,
художественное оформление, 2020

ПРЕДИСЛОВИЕ К ПЕРЕИЗДАНИЮ

Данная книга была издана впервые в 2002 г. в г. Краснодаре по инициативе и на средства авторов ограниченным тиражом. Тогда техническая библиотека Российской академии наук (РАН) закупила у авторов 20 экземпляров книг, что позволило заинтересованным учёным РАН ознакомиться с её содержанием.

Основная идея, на которой базируется рассмотрение всех вопросов в представленной работе, – наличие вокруг заряженных частиц вещества электромагнитного поля в виде определенного спектра фотонов. Концепцию о строении фотона и фотонной теории строения атома поддержали и применили в разработке специальных научных задач соавторы данной книги, мои дети – к.х.н. М. Б. Родченко и к.т.н. А. Б. Александров.

Книга содержит семь глав, в которых рассматриваются следующие вопросы: «Сущность концепции, объединяющей различные физические явления», «Модель фотона», «Роль фотонов в строении атома», включая и строение ядра атома, «Роль фотонов в формировании химических связей и строения молекул», «Теплофизические характеристики и процессы», в которых важнейшая роль отводится фотонам как носителям тепловой энергии, «Теплоемкость и фазовые переходы», а также «Роль фотонов в электропроводности и сверхпроводимости вещества».

В классических университетах преподавание отдельных частей курса «Физика» (механика, молекулярная физика, термодинамика, электромагнетизм, строение атома и ядерная физика, квантовая механика и хромодинамика) проводится разными кафедрами, в результате чего теряется единая природа их взаимосвязи. Автор, многие годы преподавая курс «Общая физика» для студентов технических специальностей, восполняет этот пробел, считая, что понятия теплоты, температуры, фотонной энергии с её распределением в каждом атоме являются краеугольным камнем практически всех явлений природы.

В работе «Роль фотонов в физических и химических явлениях» изложен самостоятельный, авторский взгляд на ряд фундаментальных классических представлений, связанных со строением атома, особенностями образования химических связей, природы фазовых переходов и явления сверхпроводимости, физического смысла понятия температуры вещества и других. Впервые в данной работе рассмотрена роль фотонов в строении атома и образовании химических связей, при этом выдвигаются теоретические обоснования природы ряда фундаментальных физических явлений, таких как сверхпроводимость, показаны пути получения высокотемпературных сверхпроводников. Предложено уравнение, описывающее проводимость вещества с учетом влияния различных факторов с переходом в сверхпроводящее состояние. Данная работа расширяет и развивает существующие представления о строении атома и его ядра. В работе критически рассмотрены основы квантовой механики, базирующейся на решении волнового уравнения Шредингера для электрона в атоме водорода. Предложена самостоятельная физическая трактовка результатов решения волнового уравнения Шредингера. Дан критерий формирования химической связи атомов на основе синхронизма вращения валентных электронов взаимодей-

ствующих атомов и фотонных волновых пакетов вокруг этих электронов. Созданием надежной модели строения атомов и молекул, отражающей природу сил между ними, решается одна из важнейших задач химии. Положения и выводы работы обосновываются многочисленными расчетами. Материал является полезным не только в теоретическом, но и в практическом отношении, так как предлагается альтернативный взгляд на ряд фундаментальных классических представлений о строении материи, на природу фазовых переходов и физическое толкование понятия температуры вещества.

За время, прошедшее после публикации первого издания, авторами опубликованы ряд научных работ, развивающих идею о роли фотонов в строении вещества (получен патент № 2273058 от 27.03.2006 на «Способ количественной оценки радиусов атомов во всем их энергетическом состоянии по данным спектрального анализа»; опубликован стендовый доклад «Фотонная теория строения атома и химической связи» на Менделеевском съезде, г. Москва; материалы докладывались на Международной конференции «Слабые и сверхслабые поля в биологии и медицине», г. Санкт-Петербург и др.). Впервые вопросы «Фотонная теория строения атома» и «Фотонная теория химической связи» были включены в учебную литературу: учебное пособие «Лабораторные и практические работы по общей и неорганической химии» для студентов высших учебных заведений по сельскохозяйственным специальностям, издательства Кубанского государственного аграрного университета, 2004 г. (авторы: Э. А. Александрова, О. А. Демиденко, Р. М. Гергаулова) и учебник Э. А. Александровой «Неорганическая химия», издательство «Лань», г. Санкт-Петербург, 2019 г.

Казалось бы, в век бурного развития науки практически за 40-летний период до момента издания работы в 2002 г. и после должна была бы устареть эта идея, тем более в ней за основу принята классическая модель атома. Однако этого не случилось. Физический и химический научный мир, увлеченный и замороженный идеей квантовой механики, до сих пор упорно отвергает классическую модель атома, и лишь отдельные ученые пытаются воспеть «Ренессанс классическому атому». Как утверждает весьма авторитетный физик Ричард Фейнман в своем 7-томном курсе «Физики»: «Тот, кто считает, что он понимает квантовую механику, он её не понимает», а с учетом остальных физиков и химиков, кто признается в том, что он не понимает, что именно дает определение функции ψ при решении уравнения Шредингера, то выходит, что никто её не понимает. А если так, то, следовательно, есть фундаментальные причины этому, которые необходимо вскрыть. Использование результатов решения уравнения Шредингера для обоснования объемных фигур, описываемых единственным электроном в атоме водорода, и тем более распространение их на электроны всех элементов таблицы Менделеева, тормозит развитие химической науки о строении атомов и молекул. В связи с этим быстрее включение рассмотренных в книге разделов о роли фотонов в физических и химических явлениях в учебники физики и химии всех учебных заведений от школ до университетов

позволит молодому поколению критично воспринимать механизмы различных природных явлений и обоснованно развивать новые технологии.

Пользуясь случаем, выражаем глубокую признательность за оказанную неоценимую помощь в процессе подготовки 1-го издания книги нашим коллегам, преподавателям: д.х.н., профессору КГУ З. А. Темердашеву, д.т.н., профессору КГАУ И. Г. Стрижкову. Мы благодарны д.х.н., профессору КГТУ Н. К. Стрижову, д.т.н., профессору КГАУ В. В. Тропину, к.ф.-м.н., доценту КГУ М. М. Векшину, к.х.н., профессору КГАУ Н. Г. Гайдуковой за рецензирование рукописи работы и ценные замечания, которые были учтены в окончательной редакции первого издания.

Выражаем сердечную благодарность заведующему кафедрой электротехники, теплотехники и возобновляемых источников энергии Кубанского государственного аграрного университета имени И. Т. Трубилина, д.т.н., профессору, заслуженному изобретателю РФ О. В. Григорашу и д.х.н., профессору кафедры органической химии и технологий Кубанского государственного университета В. Д. Стрелкову за большой труд по рецензированию данной работы при её переиздании.

От авторов Б. Л. Александров

Посвящаю светлой памяти моих родителей: отца – Александрова Леонида Дмитриевича – погибшего в бою с фашистскими захватчиками в 1942 г. под г. Харьковом, и матери – Лебедевой Татьяны Максимовны, воспитавшей меня и похороненной в г. Грозном.

ПРЕДИСЛОВИЕ

Будучи по профессии геофизиком и занимаясь более 30 лет различными аспектами решения геологических и технологических задач при бурении скважин на основе комплексной интерпретации геофизической и технологической информации, свободное время я посвящал вопросам теоретической физики, размышляя над механизмами и сущностью многих физических явлений и процессов, строя свои физические и математические модели. Иногда мне удавалось поставить физические эксперименты, используя аппаратные возможности геофизической отрасли, в которой я работал. Но судьба распорядилась так, что, став доктором геолого-минералогических наук по геофизической специальности, сначала по совместительству я оказался профессором на кафедре физики Грозненского нефтяного института, а потом Кубанского государственного аграрного университета, а с 1996 г. полностью перешел на полную ставку профессора кафедры физики КГАУ. Таким образом, мое увлечение слилось в единое русло с моей профессией как преподавателя физики в вузе. И я оказался одним из немногих счастливых людей, кому в жизни удастся совместить свое увлечение и профессию.

Около сорока лет я активно размышлял и работал над проблемой единства явлений природы, и представленный на суд научной общественности труд «Роль фотонов в физических и химических явлениях» является плодом многолетней работы.

Я долгие годы практически ничего не публиковал из наработанного материала в этой области [1, 2, 3], так как стремился создать единое целое, которое бы несло серьезные доказательства за развиваемую в данной работе концепцию. За это время существенно изменилась наша жизнь и условия бытия. Я обнаружил, что не один размышлял над проблемой – правильно ли выбран нашими «кумирами» путь в теоретической физике. И хотя некоторые исследователи (С. Д. Брусин и Л. Д. Брусин, Р. К. Саакян, Н. В. Чумаченко [5], Г. И. Шипов [6], и, вероятно, есть другие) вплотную подошли к тем мыслям, которые представлены в этой работе, я счастлив сознанием того, что эти долгие годы размышлений и анализа шли, как мне представляется, по правильному пути в науке.

Я оказался еще более счастливым человеком, когда, восприняв сущность разрабатываемой концепции о строении фотона и атома, в совместную работу над монографией активно включились мои дети – Родченко Мила Борисовна, кандидат химических наук, и Александров Алексей Борисович, кандидат

технических наук. Каждый из них с учетом своей специальности и научных интересов помог адаптировать концепцию характера взаимоотношения фотонов с веществом, вопросы теории строения атома и фотона к разработке важных самостоятельных научных задач.

Завершение данного труда стало возможным лишь благодаря ректору Кубанского государственного аграрного университета, академику И. Т. Трубилину и творческой обстановке этого замечательного вуза, где мне была представлена работа профессора на кафедре физики, а А. Б. Александрову возможность получения двух высших образований и учебы в аспирантуре.

Мы признательны и благодарны проректору Кубанского государственного университета, доктору химических наук, профессору З. А. Темердашеву за организацию ознакомления с монографией специалистов КГУ, доктору химических наук, профессору Кубанского государственного технологического университета Н. К. Стрижову и кандидату физико-математических наук, доценту Кубанского государственного университета М. М. Векшину за большой труд по рецензированию данной монографии и ценные замечания, которые мы учли в окончательной редакции.

Б. Л. Александров

ВВЕДЕНИЕ

Современная физическая наука достигла значительных успехов во всестороннем познании природы. Особенно большие успехи были получены на рубеже XIX и XX вв. и в первой четверти XX в., когда были открыты частицы, составляющие основу атома, обосновано его строение, открыты явления естественной и искусственной радиоактивности, сверхпроводимости, а в последнее десятилетие – высокотемпературной сверхпроводимости и многие другие.

Можно констатировать, что для большинства физических явлений разработаны теории и физические модели, которые на первый взгляд не вызывают сомнения. Однако если проанализировать широкий круг физических явлений и выдвигаемые механизмы их объяснения, то появляются сомнения – действительно ли природа настолько многолика, что для обоснования практически каждого явления нужен свой механизм, своя отправная точка. Не являются ли многие теоретические или физические модели искусственными, далекими от истины. Ведь основная задача физики состоит в объяснении всех физических явлений на основе небольшого числа простых фундаментальных законов. В связи с этим нельзя не согласиться с мнением многих авторов о имеющем место глубоком кризисе в теоретической физике. Как отмечает Г. И. Сухоруков [5, стр. 208-209], фундаментальные проблемы естествознания невозможно решить, не подвергнув предварительно критическому анализу современные физические теории. Он отмечает, что «теория относительности и квантовая теория созданы на базе ошибочных постулатов и гипотез. Постулат теории относительности, согласно которому относительная скорость двух движущихся навстречу друг другу тел не может превысить скорость света, является абсурдным, и с этим нельзя не согласиться. И далее, «при приближении скорости тела к скорости света объем тела стремится к нулю, масса тела стремится к бесконечности, а течение времени приостанавливается». Таким образом, тело с бесконечно большой массой превращается в ничто. В квантовой теории отождествляются взаимоисключающие понятия «частица» и «волна». Уравнение Шредингера, выведенное на основе такого противоестественного допущения, позволяет вычислить уровни энергий электронов в атомах, но исключает возможность представить реальное строение атома». Г. И. Сухоруков [28] окончательно делает вывод, что все проблемы можно решить методами классической физики.

В статье «Ревизия квантовой физики» [5, стр. 139] Т. Д. Митсопулос (Греция) считает, что главной причиной неверного истолкования квантовой физики является отсутствие четкости в определениях таких терминов, как «квант», «элементарные частицы» и понимания связи между ними. По его мнению, особенно испортило философию этого раздела физики допущение, согласно которому молекулы рассматриваются как фундаментальные линейные осцилляторы, а не как вращающиеся элементарные частицы. В результате указывается на необходимость радикальной ревизии квантовой физики, которая привела бы к ее объединению с классической физикой.

В связи с этим, как отмечает Р. К. Саакян [5, стр. 183-184], в настоящее время ждут своего решения вопросы строения стабильных элементарных частиц и ядер атомов, вопросы определения количественной и качественной стороны поглощения и испускания фотонов стабильными элементарными частицами и ядрами атомов, и целый ряд других вопросов субатомной физики.

В. А. Ацюковский [5, стр. 11] утверждает, что причиной «кризиса физической теории является порочность ее методологии, в основе которой лежит феноменология, превалирование математики над физикой, постулирование исходных положений». По его мнению, «выходом из создавшегося положения является возврат к динамической методологии, предполагающей наличие у каждого явления внутреннего механизма. В свою очередь это требует возврата к концепции эфира, являющегося строительным материалом «элементарных частиц» вещества, а следовательно, всех материальных образований. Эфир оказался газоподобной средой, подчиняющейся всем законам обычной газовой механики».

В последние годы к идее возврата эфира или физического вакуума на сцену теоретической физики и придания ему основополагающих свойств материи обратились многие исследователи – С. Д. Брусин и Л. Д. Брусин, С. Г. Бураго, А. А. Вичутинский, Ф. Ф. Гарбацевич, В. А. Лебедев, А. М. Мишин, К. А. Никоненко, П. Д. Прусов, В. И. Секерин, В. Х. Хотеев, Н. В. Чумаченко, Г. И. Шипов и др. [5, 6].

Мы полностью разделяем высказанные выше оценки в адрес теории относительности и квантовой теории, особенно в той части, которая касается превалирования математики над физикой, предела относительности скорости движения, неопределенности познания микромира, забвения теории эфира и др.

Как известно, важнейшим звеном в познании окружающего нас мира является основная частица мироздания – атом. От глубины понимания его строения и связей составляющих его частиц зависит правильность понимания физической сущности многих явлений природы.

Окружающий нас мир характеризуется многообразием различных свойств – механических, электромагнитных, оптических, химических и т. д., но есть некоторые из них, влияние которых на абсолютное большинство других является превалирующим и неоспоримым. Если все свойства материи окружающего мира расписать по значимости, то, пожалуй, на главное «королевское кресло» должна претендовать физическая характеристика среды – температура. Трудно найти какое-либо свойство окружающей неживой и живой природы, на которое не влияла бы температура, и которое не было бы связано с процессами теплообмена, выделения или поглощения тепла. Достаточно привести перечень тепловых характеристик системы, как теплота, энергия, температура кипения, теплота плавления, испарения, фазового перехода, полиморфного превращения, химической реакции, горения, внутренняя энергия системы, температура плазмы ядра, тепловое излучение и другие.

Очень многие параметры окружающей среды, всех веществ и практически все процессы в природе существенно зависят от температуры. Но можно ли це-

ленаправленно развивать науку вообще и в частности о тепле, не разобравшись глубоко в том, что это такое? Ведь до настоящего времени нет достаточно ясного объяснения физической сущности понятия температуры, приемлемого для всех агрегатных состояний вещества. С понятием температура тесно связаны явления поглощения и излучения квантов энергии – фотонов. Однако до настоящего времени глубоко не разработан вопрос о сущности взаимодействия квантов энергии с электронами атомов и нуклонами ядер вещества. Как-то подразумевается, но четко не оговаривается механизм поглощения и испускания квантов энергии. Не объясняется, почему происходит перекристаллизация вещества в твердом состоянии при изменении температуры и многое другое.

Понятие физической сущности температуры тесно связано с особенностью строения атома. Поэтому, не поняв особенности строения атома, мы не можем дать правильную трактовку физической сущности температуры, а вместе с этим и многих других физических явлений.

В своей популярной книге о диффузии атомов в кристаллах В. С. Бокштейн [4], отдавая должное жизнестойкости законов термодинамики, которые остались незабываемыми в бурях «физических революций» и которые не поколебали ни квантовая механика, ни теория относительности, привлек в союзники Альберта Эйнштейна. Эйнштейн писал: «Теория оказывается тем более впечатляющей, чем проще ее предпосылки, чем значительнее разнообразие охватываемых ею явлений и чем шире область ее применения. Именно поэтому классическая термодинамика производит на меня очень глубокое впечатление. Это единственная общая физическая теория, и я убежден, что в рамках применимости своих основных положений она никогда не будет опровергнута». Подобное можно было бы сказать и о любой другой теории, обладающей такими же устойчивыми, не подверженными конъюнктуре научных веяний, законами. Обычно в науке принято считать, что истинной является та теория, на основе которой можно объяснить множество порой трудно увязывающихся между собой явлений.

В данной работе предлагается концепция характера взаимоотношения фотонов с элементарными частицами вещества, модель фотона, усовершенствованная модель атома, дается обоснование физического смысла решения уравнения Шредингера для электрона в атоме водорода, природы химической связи, электропроводности и сверхпроводимости, физической сущности понятия температуры вещества в любом агрегатном состоянии, а также фазовых переходов и других физических явлений, на первый взгляд, совершенно не связанных между собой. Авторы уверены, что перечень физических явлений, которые могут быть рассмотрены с единых позиций на основе развиваемой теории, может быть существенно расширен.

Литература к введению и предисловию

1. *Александров, Б. Л.* Температура вещества / Б. Л. Александров, А. Б. Александров, М. Б. Родченко // Труды КГАУ. – Вып. 381 (409) «Приме-

нение электротехнических устройств в АПК». – Краснодар : Типография КГАУ, 2000. – 267 с.

2. *Александров, Б. Л.* Факторы, определяющие электропроводность вещества / Б. Л. Александров, А. Б. Александров // Энергосберегающие технологии и процессы в АПК : материалы науч. конф. факультетов механизации и электрификации. – Краснодар : Типография КГАУ, 2000. – 82 с.

3. *Александров, Б. Л.* Структура атома и единство явлений природы // Энергосберегающие технологии и процессы в АПК : тезисы докл. науч. конф. по итогам 1998г. – Краснодар : Типография КГАУ, 1999 – 83 с.

4. *Бокиштейн, Б. С.* Атомы блуждают по кристаллу. – Вып. 28. – М. : Наука, 1984. – 206 с.

5. Фундаментальные проблемы естествознания: Междунар. науч. конгресс, 22-27 июня 1998 г. – Санкт-Петербург, Россия.

6. *Шипов, Г. И.* Теория физического вакуума. – М. : МНТЦ ВЕНТ, 1992. – Ч. 1. Препринт № 30 – 63 с.; Ч. 2. Препринт № 31. – 66 с.; Ч. 3. Препринт № 32. – 72 с.

Глава 1. СУЩНОСТЬ КОНЦЕПЦИИ, ОБЪЕДИНЯЮЩЕЙ РАЗЛИЧНЫЕ ФИЗИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ

*«Возможно, мне открылось нечто существенное
в строении атома. Кусочек реальности»*

Н. Бор

Физика относится к числу естественных наук, т. е. наук, изучающих природу. Природа бесконечно разнообразна. Однако это разнообразие представляет единство, которое заключается в ее материальности. Материя является первоосновой, т. е. единственным источником и причиной всех процессов, протекающих в природе: абсолютно все состоит из материи и порождено ею.

Но что является первоосновой всей материи? Вероятно то, что является первоосновой всей материи, является и связующим звеном во всей природе, т. е. во всех или в абсолютном большинстве физических явлений и процессов, протекающих в природе.

Сущность предлагаемой концепции заключается в том, чтобы с единых позиций рассмотреть многие физические явления и понятия, такие как: строение атома, температура, теплота, энергия, теплоемкость, излучение, электропроводность и сверхпроводимость, природа фазовых переходов в твердом состоянии вещества и др.

Что же является главным стержнем всей проблемы, объединяющим многие разрозненные явления? По нашему мнению, главным действующим лицом этой проблемы и в целом в природе является фотон. Он является носителем поля и энергии. Но, проявляя волновые свойства, он обладает и массой, т. е. он одновременно является веществом. Точнее сказать, он является основой основ вещества, так как из него образуются основные элементарные частицы, составляющие основу вещества.

Фотон высокой энергии может распасться на две заряженные частицы: электрон и позитрон, в то же время позитрон и электрон могут аннигилировать на два или три гамма-кванта (фотона).

В природе происходит непрерывный процесс превращения энергии поля (фотонного поля, фотонного газа) в вещество и вещества в энергию поля, но при определенных уровнях концентрации вещества – поля, когда количество переходит в качество.

Одновременно, и что наиболее важно для нас, в природе непрерывно происходит процесс взаимодействия фотонов с веществом в виде поглощения фотонов и их испускания.

Но как происходит поглощение и испускание фотонов веществом?

Принято считать, что фотоны видимого спектра частот от инфракрасного до ультрафиолетового испускаются внешними электронами атомов, внутренние электроны испускают фотоны рентгеновского спектра, а при ядерных реакциях нуклонами ядер испускаются фотоны на уровне гамма-квантов. В такой же последовательности происходит и поглощение фотонов разной энергии, при этом поглотившие фотон внешний или внутренний электрон переходит на новую орбиту и обладает более высоким уровнем энергии. Однако не оговаривается ме-

ханизм поглощения или испускания фотонов электронами и нуклонами ядер. Можно только догадываться, что электрон, или нуклон ядра в полном смысле этого слова, как бы поглощают фотон, т. е. фотон сливается в единую массу с электроном или нуклоном и как-то в них рассосредоточивается, повышая их энергию.

Проанализировав совокупность разрозненных пока явлений, мы пришли к выводу, что они – эти разрозненные явления – могут быть объединены единым стержнем в том случае, если представить себе, что вокруг нас, в окружающем пространстве находится фотонный газ, фотонное электромагнитное поле, фотонная энергия, или, как теперь принято говорить, физический вакуум, а отдельный фотон не захватывается электроном или нуклоном, как определенной массой материи. Фотон, попадая в электродинамическое поле электрона или нуклона ядра, начинает вращаться, летать вокруг него по определенной отведенной ему орбите. Совокупность или серия фотонов определенного набора частот образуют орбиталь фотонов вокруг электрона или нуклона. Количество орбиталей фотонов вокруг конкретного электрона (нуклона) и их наклон относительно друг друга и оси вращения электрона (нуклона) определяются структурой электрона и ядра атома. Каждый электрон или другая элементарная частица, независимо от того, находятся они в свободном состоянии или составляют часть атома, имеют вокруг себя вращающиеся фотоны. Эти фотоны, являющиеся основой электромагнитного поля, создают вокруг каждой частицы ее электромагнитное вращающееся поле или, по сегодняшним представлениям, – торсионное поле. Поэтому каждая элементарная частица, находясь в свободном состоянии, или входящая в состав внешней или внутренней части атома, взаимодействует с другими элементарными частицами через электромагнитные поля фотонов вокруг этих частиц. Предложенная концепция позволяет объединить многие «разрозненные» явления и с единых позиций проанализировать их природу.

Однако прежде чем рассмотреть природу этих явлений на основе предложенной концепции необходимо по возможности наиболее глубоко разобраться в строении и свойствах основы основ вещества – фотонов.

Глава 2. МОДЕЛЬ ФОТОНА

Представление о фотоне возникло в ходе развития квантовой теории. В 1900 г. немецкий физик Макс Планк вывел формулу для спектра теплового излучения абсолютно черного тела, исходя из предположения, что излучение электромагнитных волн происходит определенными порциями – «квантами», энергия которых может принимать лишь дискретный ряд значений, кратных неделимой элементарной порции h .

$$\varepsilon = h \cdot \nu, \quad (2.1)$$

где ν – частота электромагнитной волны; h – постоянная Планка ($h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ Дж·с). Макс Планк назвал постоянную h квантом наименьшего действия.

Развивая идею Планка, А. Эйнштейн выдвинул гипотезу световых квантов, согласно которой электромагнитное излучение само состоит из таких квантов, и на ее основе объяснил ряд закономерностей фотоэффекта, люминесценции, фотохимических реакций. Таким образом, А. Эйнштейн высказал идею, что свет не только испускается, но распространяется и поглощается в виде квантов электромагнитной энергии.

В опытах американского физика А. Комптона по рассеянию рентгеновских лучей было установлено, что кванты излучения подчиняются тем же кинематическим законам, что и частица вещества, в частности, квант излучения с частотой ω обладает также и импульсом

$$p = \frac{h \cdot \omega}{2\pi} = \frac{h \cdot \nu}{c} = \frac{h}{\lambda}. \quad (2.2)$$

Здесь c – скорость света, λ – длина волны.

Окончательно в 1929 г. американским физико-химиком Г.Н. Льюисом был введен термин «фотон», что по-гречески означает «свет». Этим частицам приписали как волновые, так и корпускулярные свойства.

Фотон (γ) относится к стабильным элементарным частицам, какими также являются протон (p), электрон (e^-), позитрон (e^+), мюонное и электронное нейтрино (ν_μ, ν_e) [6, 10]. Протон (p) и электрон (e^-) имеют элементарный электрический заряд разного знака: $Z_p = +1$, $Z_e = -1$. Мюонное и электронное нейтрино (ν_μ, ν_e) так же, как и фотон, электрически нейтральны.

Все стабильные элементарные частицы имеют спин. Спин – это собственный момент количества вращения элементарных частиц, не связанный с перемещением частицы как целого.

Спин измеряется в единицах постоянной Планка \hbar и равен $J \cdot \hbar$, где J – характерное для каждого сорта частиц целое (в том числе нулевое) или полуцелое положительное число, называемое спиновым квантовым числом. Обычно его называют просто спином и говорят о целом или полуцелом спине частицы. Например, спин электрона, протона, нейтрона, нейтрино, так же как и их античастиц, равен $\frac{1}{2}$. Спин π и k - мезонов равен 0, а спин фотона равен 1.

Проекция спина на любое фиксированное направление z в пространстве может принимать значения $-J, (-J + 1), \dots, J$. Таким образом, частица со спином J может находиться в $(2J + 1)$ спиновых состояниях. При $J = \frac{1}{2}$ – в двух состояниях, при $J = 0$ – в одном состоянии, а при $J = 1$ – в трех состояниях. Наличие двух или более спиновых состояний у частицы эквивалентно наличию у нее дополнительной внутренней степени свободы. Таким образом π - и k -мезоны при $J = 0$ могут находиться только в одном спиновом состоянии, электрон, протон, нейтрон и нейтрино, имеющие $J = \frac{1}{2}$, могут находиться в двух спиновых состояниях, а фотон при $J = 1$ может находиться в трех спиновых состояниях, обладая дополнительной внутренней степенью свободы. Это очень важный момент, характеризующий отличие внутренней структуры фотона от других элементарных частиц. Однако принято считать, что масса покоя фотона $m_{ф.о} = 0$, так как он никогда не находится в покое и его скорость равна скорости света. Поскольку масса покоя фотона $m_{ф.о} = 0$, фотон может находиться только в двух спиновых состояниях с проекциями спина на направление движения (спиральностью) ± 1 . Принято считать, что этому свойству в классической электродинамике соответствует поперечность электромагнитной волны.

Со спином частицы, обладающей ненулевой массой покоя, связан спиновой магнитный момент

$$\mu = g \cdot J \cdot \hbar, \quad (2.3)$$

коэффициент « g » называется магнитомеханическим (или гиромагнитным) отношением.

Каков физический смысл параметра $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, где h – постоянная Планка с черточкой. Величину h М. Планк назвал квантом наименьшего действия, что соответствует моменту количества вращательного движения частицы при ее полном обороте. Тогда параметр $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ должен соответствовать количеству вращательного движения частицы при ее повороте на угол в один радиан, и это в 6,28 раз меньше h . В связи с этим именно величину \hbar , а не h , следует называть квантом наименьшего действия.

Так как фотон характеризуется нулевой массой покоя, то он не должен обладать спиновым магнитным моментом. Принято считать, что скорость света является предельной скоростью передачи любых взаимодействий и сигналов из одной точки пространства в другую. Как отмечается в статье В.Г. Козлова и С. И. Червякова [5], «существование предельной скорости и нулевой массы покоя материальных систем вызывает необходимость глубокого изменения обычных пространственно-временных представлений». По их мнению, с которым автор полностью согласен, «понятие «масса покоя» является гипотетическим» и лишено физического смысла, так как абсолютного покоя в природе не существует. В то же самое время понятие «масса», или «гравитационная масса», является одним из фундаментальных понятий, характеризующих материю. Масса

фотона с частотой колебаний $\nu = 1 \frac{1}{c}$ по расчетам В. Г. Козлова и С. И. Червякова [5] составляет $2,34656 \cdot 10^{-48}$ г, или $2,576 \cdot 10^{-21}$ массы электрона. Полученное значение хорошо согласуется с оценками массы фотона Э. А. Тагирова [8], по данным которого

$$m_{\text{ф}} \leq 4 \cdot 10^{-21} m_e.$$

Это дает основание считать, что фотон может находиться не в двух, а в трех спиновых состояниях с проекциями спина на направление движения.

Кроме электромагнитного взаимодействия фотон участвует в гравитационном взаимодействии. Таким образом, основными процессами с участием фотона являются [6,8]:

1. Излучение. Фотон может возникать при переходах атомов, молекул, ядер и т. д. из одного состояния в другое, а также при ускорениях и столкновениях заряженных микрочастиц и, наконец, в процессе распада микрочастицы (например, при распаде нейтрального π -мезона).

2. Поглощение – процесс, обратный предыдущему, важным частным случаем является фотоэффект – поглощение фотона с вырыванием электрона из атома, протона из ядра и т. д.

3. Рассеяние – столкновение фотона с некоторой частицей или системой частиц, в результате которого вместо данного фотона возникает фотон с другим направлением движения, и, возможно, с другой частотой. Рассеяние фотона свободным электроном и представляет собой эффект Комптона.

4. Образование или аннигиляция электронно-позитронных пар. При столкновении фотона достаточно большой энергии с ядром или другой системой могут возникнуть электрон и позитрон. Например, в электростатическом поле атомного ядра фотон с энергией больше 1 МэВ (фотоны с энергией более 100 кэВ обычно называются γ -квантами) может превратиться в электрон и позитрон (процесс рождения пары), а при столкновении электрона и позитрона может произойти их аннигиляция в два (или три) γ -кванта (аннигиляция пары). Таким образом, фотон является веществом, но одновременно он носитель электромагнитного поля, обладает электрическими и магнитными свойствами. В природе происходит непрерывный процесс превращения энергии поля в вещество и вещества в энергию поля, но при определенных уровнях концентрации вещества – поля, когда количество переходит в качество.

Как видим, в энциклопедической [6, 8] и справочной [10] литературе описываются свойства фотона, но ничего не говорится о его внутренней структуре, подтверждаемой этими свойствами.

В. И. Секерин в своем докладе [11, стр. 188-189] приходит к выводу, что, несмотря на существование обширных экспериментальных данных о свете, отсутствует какая-либо его модель и неизвестны даже порядки величин существующих характеристик элементарной составной части света – фотона. По его мнению, отсутствие модели света обусловлено тем, что свету предписано противоречащее здравому смыслу свойство – постоянство скорости света, которое не позволяет построить обладающую хотя бы приблизительной наглядностью мо-

дель света, тогда как в процессе познания природы метод создания моделей изучаемых объектов плодотворно применяется во многих областях научно-практической деятельности. На основании экспериментальных данных им показано, что скорость света векторно складывается со скоростью источника, если источник и приемник движутся друг относительно друга, т. е. движение света подчиняется законам классической механики. В рамках корпускулярных представлений о свете им дано объяснение продольному и поперечному эффектам Ремера (Доплера), абберации света, так называемому «росту массы от скорости» и другие. Все это дало основание В. И. Секерину [11. стр. 188-189] утверждать, что свет является веществом, а не волнами – распространением возмущения в какой-то среде, именуемой в разных источниках эфиром, электромагнитным полем или физическим вакуумом, и приступить к построению корпускулярной модели света.

Попытки решить эту проблему рассмотрены также в работах Ф. М. Канарева [4] и В. Г. Козлова, С. И. Четвякова [5]. Схема модели фотона (кванта) по Ф. М. Канареву имеет довольно сложное строение. Фотон состоит из шести петель с токами, которые, касаясь друг друга, соединены по круговому контуру и удерживаются в едином образовании замкнутыми друг с другом магнитными полями. Поэтому весь квант представляет собой единое образование – частицу в форме сложного вращающегося кольца, размер которого немного больше двух длин волн фотона (рис. 2.1).

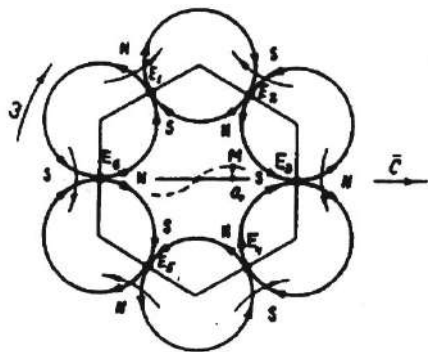
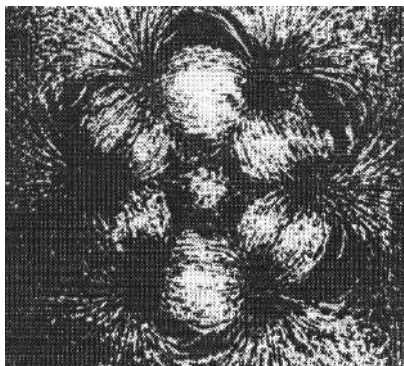


Рис. 2.1. Схема модели кванта в статическом состоянии по Ф. М. Канареву [4] (шесть замкнутых вихревых контуров с токами и соответствующие им магнитные поля)

Фотон обладает корпускулярными и волновыми свойствами. Большой заслугой Ф. М. Канарева является то, что он обратил внимание на размерность постоянной Планка h , $[\text{Дж} \cdot \text{с}] = \left[\frac{\text{кг} \cdot \text{м}^2}{\text{с}} \right]$, как размерность момента количества

движения L , а не просто кванта наименьшего действия. Исходя из размерности момента количества движения, по мнению Ф. М. Канарева [4], фотон должен характеризоваться вращением, но волновой процесс фотона в виде вращения описывает не сама частица, а ее центр массы, который не совпадает с геометри-

ческим центром. Это же, по его мнению, является главной причиной отсутствия у кванта энергии состояния покоя.

Центр масс частицы совершает импульсное вращение в интервале целой де-бройлевской волны, поэтому импульс частицы и момент ее импульса связывается с процессом движения ее центра масс в интервале этой волны.

Ф. М. Канарев [4] заключает: «...если учесть, что частица «размыта» в интервале длины волны и в этом же интервале у нее проявляется импульс $p = m \cdot c$ и момент импульса $h = m \cdot \lambda^2 \cdot \nu$, то сочетание этих условий возможно лишь при такой структуре частицы, в которой длина волны должна быть равна радиусу вращения частицы, т. е. $\lambda = r$, и тогда $h = m \cdot r^2 \cdot \nu$, и становится ясным содержание ее размерности момента импульса. Из этого следует, что смещение центра массы фотона от его геометрического центра равно длине волны. Эта размерность требует, чтобы в интервале каждой длины волны у кванта энергии проявлялся и акт вращения, и акт прямолинейного перемещения. Причиной же рождения импульсов энергии являются, по-видимому, сложные, неизвестные нам, электромагнитные процессы, которые протекают в этот момент в самой структуре частицы». В связи с этим, по Ф. М. Канареву квант надо рассматривать как «скачущий игольчатый диск», который вращается, движется прямолинейно и скачет, и все это совершает одновременно. К тому же он имеет сложную структуру. Ф. М. Канарев пишет: «странная особенность при движении фотона, когда импульс рождается в каждой длине его волны ($p = \frac{h}{\lambda}$). Какую же структуру

должен иметь фотон, чтобы при перемещении на длину волны у него рождался импульс? Нельзя ли найти ему механический аналог?». И сам отвечает, что можно: «Аналогом может быть колесо телеги, у которого сняли обод и остались одни спицы. Движение такого колеса будет скачкообразным, импульсным. Время от момента касания одной спицей дороги до момента касания ее следующей спицей можно принять за период одного скачка или период одного колебания. Когда колесо, опираясь на одну спицу, переходит к касанию дороги другой спицей, то в этот момент и происходит импульсное движение, в этот момент и рождается импульс». Столь нетривиальный образ мышления и желание показать, что импульс фотона не просто связан с длиной волны, а рождается при каждой длине волны, и привел Ф. М. Канарева к столь странной аналогии структуры фотона с колесом телеги без обода. Осталось только добавить, что при каждом перескоке колеса телеги с одной спицы на другую импульс движения такой телеги рождается за счет силы тяги лошади, а на вопрос – что является «лошадью» при движении фотона, модель Ф. М. Канарева все равно не отвечает. Поэтому им рисуется такая волна движения фотона, радиус кривизны r которой примерно равен длине волны [3]. Можно ли математически описать такое движение, у которого радиус кривизны был бы примерно равен длине волны? Вероятно, если и возможно, то лишь приблизительно, что является существенным недостатком модели, предположенной Ф. М. Канаревым. И это сомнение в достоверности своей модели автор [3] подтверждает следующим выводом: «...Таким образом, наша гипотетическая модель фотона должна

иметь такую структуру, при которой ее центр масс, двигаясь по волнообразной траектории, одновременно совершал бы поворот относительно центра, обозначенного на рис. 2.1 буквой P_0 (т. е. соответствующего условию, что $r \approx \lambda$). Только в этом случае в гипотетической модели фотона будет реализовываться момент импульса и колебание будет происходить в рамках аксиомы единства пространства – материи – времени».

Как видно, без телеги невозможно обойтись даже при обосновании структуры фотона.

В работе В. Г. Козлова, С. И. Червякова [5] предлагается модель фотона, удовлетворяющая, по мнению этих авторов, сформулированным требованиям для возникновения токов смещения и не противоречащая его характеристикам как элементарной частицы. Отмечается, что частицу со спином $J = 1/2$ можно рассматривать как «вращающийся волчок», это спинор. Частице со спином $J = 1$ соответствует вектор.

Спин фотона $J_\phi = 1$. Это, по мнению авторов [5], позволяет представить фотон как два спинора ($J = \frac{1}{2}$) с параллельными спинами. Каждый спинор является нейтральной античастицей с «тяжелым» ядром и «легкими» сателлитами. Обе частицы имеют одинаковые гравитационные массы и электрические заряды «тяжелых» ядер. Такая система имеет между античастицами эквипотенциальную плоскость, где напряженности гравитационного (H_G) и электрического (H_E) полей равны нулю ($H_G = H_E = 0$). Ядра античастиц заряжены разноименно, как и сателлиты, и, вращаясь в разные стороны, создают одинаково направленный спиновый момент. Система в целом является электрически нейтральной (но не магнитонейтральной) и удерживается за счет равенства сил притяжения (гравитационное и электрическое) силам электромагнитного отталкивания. Считается [5], что при прохождении сателлитов античастиц через эквипотенциальную плоскость с $H_G = H_E = 0$ они легко могут быть «оттянуты» в любом направлении под действием гравитационных ($\vec{F}_G = m_o \cdot \vec{H}_G$), инерционных ($\vec{F}_a = m_o \cdot \vec{a}$) и электрических ($\vec{F}_E = g \cdot \vec{H}_E$) сил. Статические гравитационные и электрические поля (внешние), как и движение системы с постоянной скоростью, должны приводить систему к поляризации. Статические магнитные поля – к ориентации и механическому перемещению.

Динамические гравитационные, электромагнитные поля, как и ускорение системы, возбуждают в ней электромагнитные колебания. Построенная модель фотона как материальной структуры вакуума, по мнению В. Г. Козлова, С. И. Червякова [5], находится в строгом соответствии с такими физическими явлениями, как поляризация вакуума в электрическом поле и испускание пары античастиц из одной «точки» вещества в сильных магнитных полях [9].

Для оценки параметров такого фотона В. Г. Козловым и С. И. Червяковым рассматривается гравитационное взаимодействие фотона и коллапсирующей звезды. Когда коллапсирующая звезда достигает гравитационного радиуса сферы Шварцшильда [2]

$$r_G = 2G \cdot \frac{m_K}{c^2} \quad (2.4)$$

(где m_K – масса коллапсирующей звезды; G – гравитационная постоянная, равная $6,6720 \cdot 10^{-8} \text{ см}^3 \cdot \text{г}^{-1} \cdot \text{с}^{-2}$), то она превращается в «черную дыру», с поверхности которой электромагнитные (ЭМ) сигналы не могут выйти наружу. Гравитационное взаимодействие между массами коллапсирующей звезды и фотона, находящегося на ее поверхности, определяется силой F_G

$$F_G = G \cdot \frac{m_K \cdot m_\Phi}{r_G^2} = G \cdot \frac{m_K \cdot m_\Phi}{2G \cdot m_K} \cdot c^2 \frac{1}{r_G} = \frac{m_\Phi \cdot c^2}{2} \cdot \frac{1}{r_G}. \quad (2.5)$$

Потенциальная энергия их гравитационного взаимодействия равна

$$W_n = F_G \cdot r_G = \frac{1}{2} m_\Phi \cdot c^2 = \frac{1}{2} \cdot 2 \overset{\circ}{\hbar} c^{-2} \cdot c^2 = \overset{\circ}{\hbar}. \quad (2.6)$$

Здесь $\overset{\circ}{\hbar} = \frac{\hbar}{1c}$ – энергия фотона, приведенная к одному периоду ЭМ колебаний.

Из (2.6) следует, что коллапсирующая звезда превращается в «черную дыру», когда потенциальная энергия ее гравитационного взаимодействия с фотоном оказывается равной кинетической энергии фотона в вакууме, что и обуславливает невозможность выхода ЭМ энергии за пределы «черной дыры». В этой модели фотона равенство гравитационных и ЭМ взаимодействий античастиц фотона, по мнению авторов [5], позволяет рассматривать его также как элементарную «черную дыру» вакуума, для которой гравитационный радиус сферы Шварцшильда (r_{G_Φ}) составляет порядка

$$r_{G_\Phi} = 2G \frac{m_\Phi}{c^2} = 4G \cdot \overset{\circ}{\hbar} \cdot c^{-4} = G \overset{\circ}{\hbar} \cdot \epsilon_0^2 \cdot \mu_0^2 = 3,4839781 \cdot 10^{-78} \text{ м}. \quad (2.7)$$

Корпускулярная же плотность фотона (ρ_Φ)

$$\rho_\Phi = \frac{m_\Phi}{V_\Phi} = \frac{m_\Phi}{\frac{4}{3} \pi r_{G_\Phi}^3} = 7,4603883 \cdot 10^{-3} \cdot G^{-3} \cdot \overset{\circ}{\hbar}^{-2} \cdot c^{10} = 1,324694 \cdot 10^{181} \text{ кг/м}^3 \quad (2.8)$$

оказывается настолько огромной, что позволяет считать фотон всепроникающей элементарной частицей, а вакуум – всепроникающей элементарной средой электромагнитного взаимодействия материи.

Как видно, рассмотренные две модели фотона, каждая из которых представляет большой интерес и является существенным вкладом в познание микроструктуры материи, значительно различаются между собой. При этом модель структуры фотона Ф. М. Канарева [3,4] не позволяет представить наглядно процесс образования электронно-позитронной пары из фотона высокой энергии (γ -кванта), а также обосновать явление дисперсии электромагнитных волн и ряд других физических явлений. В модели В. Г. Козлова и С. И. Червякова [5] акцентируются особенности фотона как элементарной частицы и не уделено

должного внимания описанию ее волновых свойств, так как утверждение о размерах фотона в пределах сферы Шварцшильда с $r_{\text{ф}} = 3,48 \cdot 10^{-78}$ м ставит под сомнение проявление волновых свойств фотона. Авторами [5] показан возможный механизм сил взаимодействия между двумя разнозаряженными массами «тяжелых» ядер фотона, но их соотношения численно не доказываются.

А. А. Вичутинский в своем докладе «Новая концепция мирового эфира» [11, стр. 39-40] приводит основные параметры эфира: абсолютную массу атома эфира $m_A = 7,3726 \cdot 10^{-51}$ кг, или $1,66 \cdot 10^{-27}$ атомных единиц, и его концентрацию $2,0 \cdot 10^{22}$ моль/м³. По его мнению, атом эфира состоит из двух субквантов, аннигиляция которых инициируется элементарным вектор-импульсом, эквивалентным элементарному кванту действия \hbar , лежащему в основе образования и перемещения фотона. Л. А. Вичутинский [11] считает, что предложенная им модель объясняет всю совокупность противоречивых свойств света, однако он не представляет подробно своих доказательств.

Говоря о возможной структуре фотона, на основе новой интерпретации уравнений Максвелла, М. Гасир [11, стр.45] пришел к следующему заключению:

1. Опережающие потенциалы описывают реальные электромагнитные ЕН-поля.

2. Имеет место автоконцентрационный эффект ЕН-полей, порождающий ЕН-корпускулы-фотоны.

3. Имеется возможность разработать фундаментальные теории преобразования фотонов в массивные частицы.

4. Размер R каждой элементарной частицы обратно пропорционален массе:

$$R \approx \frac{1}{m}.$$

Эти выводы, по его мнению, позволяют перейти от построения прагматических теорий атомов и их ядер к фундаментальным теориям.

Ф. Ф. Горбачевич в статье «Физический вакуум (эфир) – пространственная структура из противоположных по знаку частиц» [11, стр. 50-51] отмечает, что при распространении электромагнитных (световых) и упругих сдвиговых волн наблюдается много одинаковых и близких явлений, показывающих наличие подобных структур, как в твердом теле, так и в вакууме. Вместе с тем вакуум обладает особыми свойствами: способностью проникать во все материальные тела, обладая при этом качествами сверхтекучей жидкости; поддерживать распространение колебаний без их затухания, по крайней мере, на расстояниях, сравнимых с астрономическими; проявлять силы инерции при переходе электрического поля в магнитное и наоборот, и др. Поэтому Ф. Ф. Горбачевич утверждает, что всем перечисленным и другим известным свойствам концепции Максвелла в наибольшей степени отвечает следующая модель физического вакуума. Вакуум (эфир) состоит из частиц двух противоположных по знаку, видов. Противоположные по знаку частицы притягиваются друг к другу с большой силой, образуя однородную структуру, в которой в невозмущенном состоянии каждая из частиц соседствует с противоположной по знаку частицей. К сожалению, очень интересная модель, в чем-то аналогичная модели фотона

В. Г. Козлова и С. И. Червякова [5], не подкреплена расчетами сил взаимодействия между двумя противоположными по знаку видами частиц фотона.

В настоящее время для понимания природы корпускулярно-волнового дуализма электромагнитного излучения обычно указывают, что волновые свойства электромагнитного излучения проявляются в диапазоне длинноволнового излучения, а при переходе в область высокочастотного излучения (коротких длин волн), особенно спектра рентгеновских и гамма-излучений, проявляются корпускулярные свойства. Таким образом, преобладание волновых или корпускулярных свойств электромагнитного излучения связывается с их длиной волны или частотой излучения. Но это не дает достаточно ясного ответа на вопрос природы корпускулярно-волнового дуализма. Как отмечает Кл. Э. Суорц [7], «...несмотря на многочисленные попытки, никому еще не удалось дать наглядную интерпретацию двойственной корпускулярно-волновой природы фотонов».

Несомненно, что электромагнитное излучение во всем диапазоне частот одновременно характеризуется как свойствами волны, так и свойствами материальной частицы. Однако проявление этих противоположных и, казалось бы, взаимоисключающих свойств фотонов определяется условиями постановки опыта. Причем, как нам представляется, основную роль играет соотношение между амплитудой колебания электромагнитной волны или амплитудой колебания фотона около положения равновесия при полете фотона вдоль некоторой траектории его движения и промежутком между атомами и молекулами вещества, на который «волна – фотон» падает и может проникнуть или отразиться. При обосновании модели фотона необходимо помнить, что фотоны, представляющие фотонное электромагнитное поле, находятся в постоянном движении со скоростью света. Движение каждого фотона – это электромагнитная волна, которая характеризуется величинами напряженностей электрической и магнитной составляющих, причем они сдвинуты по фазе на $\pi/2$. Кроме того, нейтральный по заряду фотон может распадаться на противоположно заряженные частицы (электрон и позитрон) и из противоположно заряженных частиц может родиться нейтральный фотон.

Какова же возможная структура фотона, наиболее удовлетворяющая его противоречивым свойствам корпускулярно-волнового дуализма?

С учетом всех вышеуказанных качеств, модель фотона любой энергии, на наш взгляд, можно представить состоящей из двух разноименно заряженных частей-полумасс, которые вместе составляют общую массу фотона гантелеобразной формы, движущихся как единая частица прямолинейно со скоростью света, одновременно совершающих вращательное движение в определенной плоскости, и колебания, разлетаясь на некоторое расстояние друг от друга и снова слетаясь (рис. 2.2). Две разноименно заряженные полумассы фотона одновременно и постоянно находятся под воздействием гравитационной, электрической и магнитной сил, изменение соотношения которых при удалении и сближении двух разноименно заряженных полумасс фотона сохраняет их в состоянии поступательно-вращательного и колебательного движений, представляющего сущность волнового процесса.

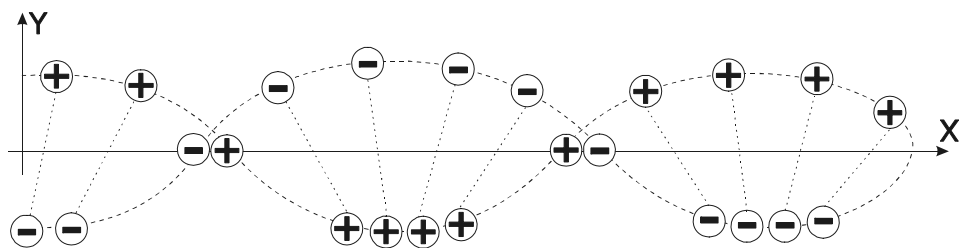


Рис. 2.2. Предлагаемая модель фотона, состоящая из двух разноименно заряженных полумасс фотона

Как видим, принятая нами модель фотона, как система, состоящая из двух разноименно заряженных полумасс, взаимодействующих друг с другом по волновому закону, в определенной степени согласуется с моделью фотона, предложенной В. Г. Козловым и С. И. Червяковым [5], а также Ф. Ф. Горбачевич [11]. За счет каких же сил и процессов формируется столь сложное движение фотона. Фотон в целом обладает спином $J_m = 1$, а каждый из зарядов его полумасс обладает собственным механическим моментом (спином) $J_m = 1/2$ и собственным магнитным моментом p_{ms} .

Для доказательства справедливости такой модели рассмотрим соотношение взаимодействующих сил между разноименно заряженными полумассами фотона в разных точках волнового процесса их движения в условиях свободного полета фотона. Если бы фотон характеризовался только поступательным и вращательным движениями, то движение его полумасс описывалось бы уравнениями вида

$$x = ct \pm A \sin \omega t = ct \pm A \sin(2\pi \nu t), \quad (2.9)$$

$$y = A \cos \omega t = A \cos(2\pi \nu t), \quad (2.10)$$

где c – скорость поступательного движения фотона (скорость света); ω , ν – круговая и циклическая частоты вращательного движения фотона.

Так как движение фотона характеризуется еще и колебательным процессом его полумасс, то процесс движения его каждой из полумасс должен описываться более сложными уравнениями. Колебания разноименно заряженных полумасс фотона эквивалентно их колебаниям на пружине около общего положения равновесия под действием упругих сил проявления гравитационных и электромагнитных полей, т. е. в направлении x

$$F_x = -kx, \quad (2.11)$$

а в направлении y

$$F_y = -ky \quad (2.12)$$

или соответственно дифференциальными уравнениями гармонических колебаний

$$\frac{d^2 x}{dt^2} + \frac{k}{m} x = 0 \quad \text{и} \quad \frac{d^2 y}{dt^2} + \frac{k}{m} y = 0, \quad (2.13)$$

где k – коэффициент упругости эквивалентной символической пружины между разноименно заряженными полумассами фотона, m – масса фотона.

Решением этих дифференциальных уравнений колебательного движения разноименно заряженных полумасс фотона являются выражения вида

$$x = A \sin \omega t, \quad (2.14)$$

$$y = A \cos \omega t, \quad (2.15)$$

если принять круговые частоты вращательного и колебательного движений разноименно заряженных полумасс фотона одинаковыми, т. е. ω . Тогда общий вид сложного поступательно-вращательно-колебательного движения фотона должен описываться следующими уравнениями:

по координате x уравнением

$$x = ct \pm A \sin \omega t \cdot \sin \omega t = ct + A \sin^2 \omega t = ct + A \sin^2(2\pi \nu t), \quad (2.16)$$

а по координате y – уравнением гармонических незатухающих колебаний вида

$$y = A \cos \omega t \cdot \cos \omega t = A \cos^2 \omega t = A \cos^2(2\pi \nu t). \quad (2.17)$$

Здесь под x подразумевается величина перемещения за время t , под y – расстояние между двумя разнополярными зарядами полумасс фотона, а A – амплитуда или максимальное значение этой величины.

Знак (+) относится к полумассе фотона, вращающейся в данный момент в направлении поступательного движения фотона, а знак (–) – к полумассе фотона, вращающейся в данный момент в направлении, обратном поступательному движению фотона независимо от знака заряда полумассы фотона.

Движение центра фотона описывается простым уравнением поступательного движения материальной точки (корпускулы) вида

$$x = ct. \quad (2.18)$$

Вращение фотона может происходить в направлении поступательного движения или в обратном направлении. Если поступательное движение происходит слева направо, а вращение фотона по часовой стрелке, то верхняя полумасса фотона, независимо от заряда, всегда имеет суммарную скорость больше, а нижняя полумасса фотона – меньше, чем скорость поступательного движения фотона в целом (с). Для верхней полумассы

$$\begin{aligned} V_{\text{в}} &= \sqrt{\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 + \left(\frac{dy}{dt}\right)^2} = \\ &= \sqrt{(c + 2\omega A \cos \omega t \cdot \sin \omega t)^2 + (-2\omega A \cos \omega t \cdot \sin \omega t)^2} = \\ &= \sqrt{(c + \omega A \sin 2\omega t)^2 + (-\omega A \sin 2\omega t)^2} = \\ &= \sqrt{c^2 + 2\omega \cdot A \cdot c \cdot \sin 2\omega t + 2\omega^2 A^2 \sin^2 2\omega t}, \end{aligned} \quad (2.19)$$

а для нижней полумассы:

$$\begin{aligned} V_{\text{н}} &= \sqrt{\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 + \left(\frac{dy}{dt}\right)^2} = \\ &= \sqrt{(c - 2\omega A \cos \omega t \cdot \sin \omega t)^2 + (-2\omega A \cos \omega t \cdot \sin \omega t)^2} = \\ &= \sqrt{(c - \omega A \sin 2\omega t)^2 + (-\omega A \sin 2\omega t)^2} = \\ &= \sqrt{c^2 - 2\omega \cdot A \cdot c \cdot \sin 2\omega t + 2\omega^2 A^2 \sin^2 2\omega t}. \end{aligned} \quad (2.20)$$

В моменты ортогонального расположения фотона относительно направления поступательного движения, когда полумассы разлетаются на величину $y = A$, $V_y = \frac{dy}{dt} = 0$, наблюдается максимальная разница в скоростях верхней и нижней полумасс, причем

$$V_B = c + \omega \cdot A \cdot \sin 2\omega t, \quad (2.21)$$

$$V_H = c - \omega \cdot A \cdot \sin 2\omega t, \quad (2.22)$$

$$V_B - V_H = 2\omega A \sin 2\omega t. \quad (2.23)$$

При горизонтальном расположении полумасс фотона $A = 0$ и $V_x = \frac{dx}{dt} = c$, поэтому наблюдается максимальное объединение полумасс фотона в одну точку (рис. 2.2).

При наклонном расположении полумасс фотона скорости верхней и нижней полумасс определяются по формулам:

$$V_B = \sqrt{(c + \omega A \sin 2\omega t)^2 + (-\omega A \sin 2\omega t)^2}, \quad (2.24)$$

$$V_H = \sqrt{(c - \omega A \sin 2\omega t)^2 + (-\omega A \sin 2\omega t)^2}, \quad (2.25)$$

однако в условиях недокрученной гантели (рис. 2.3а) векторы скоростей \vec{V}_B и \vec{V}_H создают разжимающие усилия, а в условиях перекрученной гантели (рис. 2.3б) векторы скоростей \vec{V}_B и \vec{V}_H создают сжимающие усилия на полумассы фотона. Под действием этих знакопеременных усилий продолжается колебательный процесс полумасс фотона около его центра масс.

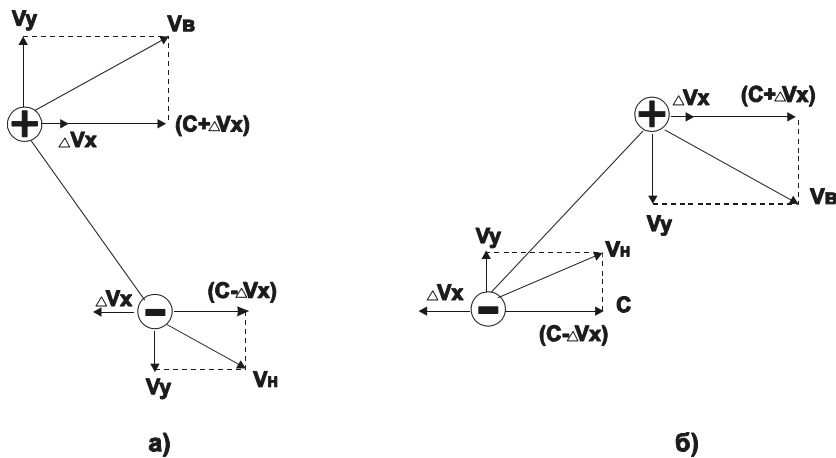


Рис. 2.3. Характер взаимоотношения векторов скоростей движения верхней и нижней полумасс фотона в условиях недокрученной гантели (а) и перекрученной гантели (б)

Любой движущийся электрический заряд создает вокруг себя магнитное поле, индукция которого B прямо пропорциональна скорости его движения V и

обратно пропорциональна квадрату расстояния до точки определения параметра В. Из этого следует, что для принятой модели движения верхний заряд всегда будет создавать величину магнитной индукции поля больше, чем нижний, т. е. $B_v > B_n$, причем в каждом полуцикле вращения будет меняться направление магнитного поля. Этот факт является благоприятным для постоянного изменения скорости магнитного потока $\frac{d\Phi_m}{dt}$, которая определяет появление в пространстве самого фотона индукционного электрического тока.

Можно ли определить амплитуду колебания разноименно заряженных полумасс фотона и как она зависит от частоты их колебания?

Для решения этой задачи рассмотрим фотон некоторой частоты ν . Примем описанную выше модель фотона, при которой он в целом движется прямолинейно, но при каждом полуцикле колебания его отрицательно и положительно заряженные полумассы разлетаются на максимальное расстояние, а затем, вращаясь, снова слетаются до состояния, близкого к касанию, что и представляет сущность колебательного процесса.

Если линейная скорость любого фотона в вакууме всегда равна скорости света ($c = 2,998 \cdot 10^8$ м/с), то изменение частоты колебания фотона, т. е. частоты разлета положительно и отрицательно заряженных его полумасс, должно определяться скоростью V_y их перемещения в направлении, перпендикулярном основному направлению движения фотона. Вероятно, чем выше V_y , тем за меньший промежуток времени две полумассы фотона, разлетевшись, снова приблизятся, т. е. тем меньше длина волны этого процесса и тем выше частота. Таким образом, связь, определяющая частоту колебания фотона со скоростью V_y перемещения его полумасс в направлении, перпендикулярном основному направлению движения, вероятно должна удовлетворять некоторым граничным условиям. В первом приближении за такие граничные условия можно принять следующие:

$$\begin{aligned} \text{при } V_y \rightarrow c, \quad \nu &\rightarrow \infty; \\ \text{при } V_y \rightarrow 0, \quad \nu &\rightarrow 1. \end{aligned}$$

Этим условиям удовлетворяет уравнение вида

$$\nu = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{V_y^2}{c^2}}}. \quad (2.26)$$

Принимая условие, что колебательный процесс движения разноименно заряженных полумасс фотона описывается простым гармоническим уравнением (2.12), найдем выражение для скорости движения разноименно заряженных полумасс фотона в направлении, перпендикулярном основному направлению его движения.

$$V_y = \frac{dy}{dt} = -4\pi\nu \cdot A \sin(4\pi\nu t) = 4\pi \cdot \nu A \cdot \cos\left(4\pi\nu t + \frac{\pi}{2}\right). \quad (2.27)$$

Следовательно, амплитуда скорости колебательного процесса

$$V_{y_{\max}} = 4\pi vA,$$

где A – амплитуда отклонения разноименно заряженных полумасс фотона от положения равновесия.

Таким образом, преобразование уравнения (2.26) после подстановки в него $V_{y_{\max}} = 4\pi vA$ позволяет получить

$$v = \frac{c}{\sqrt{c^2 - (4\pi vA)^2}}, \quad (2.28)$$

Решение этого уравнения относительно параметра A приводит к выражению

$$A = \sqrt{\frac{c^2(v^2 - 1)}{16v^4\pi^2}} \cong \frac{c}{4\pi v} = \frac{\lambda}{4\pi}, \quad (2.29)$$

где λ – длина электромагнитной волны фотона.

Таким образом, амплитуда колебания A есть величина обратная волновому числу $k = \frac{2\pi}{\lambda}$, т. е. $A = 2 \cdot \frac{1}{k}$.

Следовательно, амплитуда электромагнитной волны фотона A связана простым соотношением с его длиной волны и она в 4π раз меньше длины волны.

Выражение (2.29) можно представить как

$$\begin{aligned} \lambda &= 4\pi \cdot A = 2 \cdot 2\pi A \\ \text{или } \lambda &= 2\pi \cdot (2A). \end{aligned} \quad (2.30)$$

Оно напоминает выражение для длины окружности

$$S = 2\pi \cdot r, \quad (2.31)$$

причем $r = 2A$.

Исходя из этой аналогии, можно сделать вывод, что состояние фотона характеризуется вращательным движением, радиус которого r равен удвоенной амплитуде колебательного процесса, а описываемая разноименно заряженными полумассами окружность длиной S в развернутом виде в результате поступательного движения есть не что иное, как длина волны λ .

Таким образом, фотон представляет из себя аналог гантели, т. е. две разноименно заряженные полумассы, объединенные между собой гравитационными, электрическими и магнитными силами. Эта гантель все время меняется в размере, так как происходит колебание полумасс фотона по линии, соединяющей их центры. Одновременно происходит вращение гантели в одной плоскости, что и отражает поляризационные свойства фотона.

При одновременном вращении гантели фотона, колебании его разноименно заряженных полумасс около их оси, происходит поступательное движение фотона, когда он свободен, или движение его вокруг заряженной частицы, когда он «захватывается» ею. Таким образом, фотон одновременно находится в трех движениях – поступательном, вращательном и колебательном.

Кроме того, по механизму происходящих процессов фотон подобен электрическому колебательному контуру, в котором по гармоническому закону колеблются параметры электрического и магнитного полей, причем эти поля смещены по фазе на $\frac{\pi}{2}$. В моменты максимального разлета полумасс отмечается четкое разделение электрических зарядов и фотон характеризуется электрическим полем, а в момент максимального сближения разноименно заряженных полумасс – магнитным полем, причем сдвиг по фазе между электрическим и магнитным полями равен $\frac{\pi}{2}$.

Если справедлива принятая модель фотона, по которой две разноименно заряженные его полумассы разлетаются на максимальное расстояние, равное $y_{\max} = 2A = \frac{\lambda}{2\pi}$, а затем слетаются до состояния $y \Rightarrow 0$, то в соответствии с гармоническим законом колебательного процесса амплитуда колебания каждой из полумасс фотона должна поочередно принимать положительное и отрицательное значения. В принятой нами модели это возможно лишь в том случае, если представить себе, что при колебательном процессе разноименно заряженных полумасс фотона они беспрерывно меняются местами за счет вращательного движения фотона в целом, т. е. если в первый полупериод сверху находилась отрицательная полумасса, а внизу – положительная, то в следующий полупериод колебания сверху должна находиться положительная, а внизу – отрицательная полумасса фотона. Следовательно, в момент максимального сближения полумасс фотона его длинная ось совпадает с направлением полета и далее происходит разлет полумасс с изменением положения зарядов в пространстве (рис. 2.4).

В целом вид колебательного процесса фотона аналогичен процессу сложения двух встречных волн с одинаковыми амплитудами и частотами, в результате которого образуется стоячая волна (рис. 2.4) с амплитудой

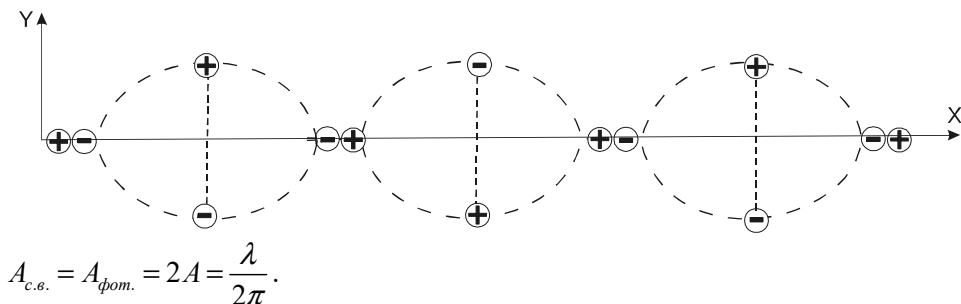


Рис. 2.4. Результат вращательно-колебательно-поступательного движения фотона в предельных случаях разлета и сближения его разноименно заряженных полумасс

Рассмотрим, чему же равна амплитуда колебания каждой из полумасс фотона для квантов разной частоты в соответствии с формулой (2.29).

Для диапазона инфракрасного излучения:

$$\nu = 1 \cdot 10^{12} \div 3,75 \cdot 10^{14} \text{ Гц}; \quad \lambda = 3 \cdot 10^{-4} \div 8 \cdot 10^{-7} \text{ м}; \quad A = 2,39 \cdot 10^{-5} \div 6,37 \cdot 10^{-8} \text{ м}.$$

Для диапазона видимого излучения:

$$\nu = 3,75 \cdot 10^{14} \div 7,5 \cdot 10^{14} \text{ Гц}; \quad \lambda = 8 \cdot 10^{-7} \div 4 \cdot 10^{-7} \text{ м}; \quad A = 6,37 \cdot 10^{-8} \div 3,18 \cdot 10^{-8} \text{ м}.$$

Для ультрафиолетового излучения:

$$\nu = 7,5 \cdot 10^{14} \div 7,5 \cdot 10^{16} \text{ Гц}; \quad \lambda = 4 \cdot 10^{-7} \div 4 \cdot 10^{-9} \text{ м}; \quad A = 3,18 \cdot 10^{-8} \div 3,18 \cdot 10^{-10} \text{ м}.$$

Для рентгеновского излучения:

$$\nu = 7,5 \cdot 10^{16} \div 6 \cdot 10^{19} \text{ Гц}; \quad \lambda = 4 \cdot 10^{-9} \div 5 \cdot 10^{-12} \text{ м}; \quad A = 3,18 \cdot 10^{-10} \div 3,98 \cdot 10^{-13} \text{ м}.$$

Для гамма – излучения:

$$\nu = 6 \cdot 10^{19} \div 3 \cdot 10^{23} \text{ Гц}; \quad \lambda = 5 \cdot 10^{-12} \div 1 \cdot 10^{-15} \text{ м}; \quad A = 3,98 \cdot 10^{-13} \div 7,96 \cdot 10^{-17} \text{ м}.$$

Для сравнения приведем известные из литературы данные:

$$\text{радиус электрона} \quad r_e = 2,8 \cdot 10^{-15} \text{ м};$$

$$\text{радиус ядра} \quad r_{\text{я}} = 1,0 \cdot 10^{-14} \text{ м};$$

$$\text{радиус вращения электрона на низшей орбите водорода или первый борковский радиус} \quad r = a_0 = 0,5 \cdot 10^{-10} \text{ м};$$

$$\text{размер атома} \sim 10^{-8} \text{ м}.$$

Как видим, приведенные цифры и параметры амплитуды колебания A разноименно заряженных полумасс фотона (электромагнитной волны) имеют близкие порядки, что, безусловно, несет определенный физический смысл, о котором будет идти речь ниже. Теперь же с учетом полученных цифр величин амплитуд можно провести расчет соотношения сил в разные моменты полета фотона.

В любой точке траектории движения каждой из полумасс фотона на них взаимно действуют силы гравитационного и электрического притяжения друг к другу и их магнитного отталкивания или притяжения. При этом сила гравитационного притяжения равна

$$F_{\text{гп}} = G \frac{m_1 m_2}{r^2} = G \frac{m^2}{4r^2}, \quad (2.32)$$

где G – гравитационная постоянная ($G = 6,6720 \cdot 10^{-8} \text{ см}^3 \cdot \text{г}^{-1} \cdot \text{с}^2$); m_1, m_2 – разноименно заряженные полумассы фотона, причем $m_1 = m_2 = \frac{m}{2}$, где m – масса фотона в целом; r – расстояние между полумассами в каждый момент времени ($r = y$).

Сила электрического притяжения

$$F_{\text{эп}} = \frac{q_1 \cdot q_2}{4\pi\epsilon_0 \epsilon r^2} = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 \epsilon r^2}, \quad (2.33)$$

здесь q_1, q_2 – положительный и отрицательный заряды полумасс фотона, равные по величине ($q_1 = q_2 = q$); ϵ_0, ϵ – диэлектрическая абсолютная и относительная проницаемость вакуума.

Разноименно заряженные полумассы фотона вращаясь, движутся все время поступательно в одной плоскости, одновременно колеблются, удаляясь и приближаясь друг к другу по гармоническому закону. Любой движущийся в вакууме или среде заряд создает вокруг себя магнитное поле, магнитная индукция которого определяется по формуле

$$B = \frac{\mu_0 \mu \cdot qV}{4\pi \cdot r^2}, \quad (2.34)$$

где V – скорость движения заряда; r – расстояние от заряда до точки, в которой определяется параметр B ; μ_0, μ – магнитная проницаемость вакуума и относительная магнитная проницаемость среды.

Следовательно, каждая из движущихся полумасс фотона, заряженная противоположно, будет создавать вокруг себя магнитное поле, и поэтому между этими заряженными полумассами фотона будет действовать сила магнитного взаимодействия.

Так как заряды полумасс противоположного знака и одновременно движутся по окружностям в одном направлении, то с учетом их поступательного движения в моменты их негоризонтального положения, относительная скорость движения одной полумассы фотона будет больше, а другой меньше в каждый полупериод, причем в следующий полупериод это соотношение будет меняться наоборот. В результате направления их магнитных орбитальных моментов противоположны и, следовательно, они будут отталкиваться друг от друга с силой, определяемой по формуле Лоренца

$$F_l = q \cdot V \cdot B = \frac{qV_s \cdot \mu_0 \mu \cdot qV_n}{4\pi \cdot r^2} = \frac{q^2 V_s \cdot V_n \cdot \mu_0 \mu}{4\pi r^2}. \quad (2.35)$$

Соотношение сил магнитного отталкивания и электрического притяжения в любом положении полумасс равно

$$\frac{F_l}{F_s} = \frac{q^2 V_s V_n \cdot \mu_0 \mu}{4\pi \cdot r^2} \cdot \frac{4\pi \epsilon_0 \epsilon \cdot r^2}{q^2} = V_s V_n \cdot \mu_0 \mu \cdot \epsilon_0 \epsilon. \quad (2.36)$$

При взаимном приближении или удалении полумасс фотона и изменении их относительной скорости движения ими в окружающем пространстве создается переменное магнитное поле с изменяющейся величиной магнитного потока Φ . В соответствии с теорией электромагнетизма Максвелла, всякое переменное магнитное поле (\vec{B}) возбуждает в окружающем пространстве электрическое поле (\vec{E}), которое и является причиной возникновения индукционного тока ($\epsilon_i = -\frac{d\Phi}{dt}$). А в соответствии с правилом Ленца, индукционный ток в контуре имеет всегда такое направление, что созданное им магнитное поле препятствует изменению магнитного потока, вызывающему этот индукционный ток. Поэтому

в разных положениях полумасс фотона относительно друг друга будет возникать дополнительная сила магнитного притяжения или отталкивания. Для магнитного взаимодействия удаляющихся и приближающихся разноименных зарядов фотона можно провести аналогию с двумя катушками, по которым текут токи.

В момент сближения или удаления разноименно заряженных полумасс магнитное поле каждой из них наводит в окружающем пространстве электрическое поле, которое создает магнитное поле, препятствующее увеличению или уменьшению магнитного потока сближающихся или удаляющихся зарядов, т. е. компенсирует изменяющиеся силы магнитного взаимодействия. В результате в момент максимального своего сближения разноименно заряженные полумассы фотона отталкиваются друг от друга, направление радиуса кривизны их полетов изменяется на 180° , и, следовательно, изменяется направление магнитного орбитального момента. Разворот магнитных орбитальных моментов влечет за собой и разворот собственных магнитных моментов разноименно заряженных полумасс фотона, а это в свою очередь создает момент количества движения фотона как целого на расстоянии длины волны (λ), что и является причиной постоянства поступательного движения фотона.

При разлете разноименно заряженных полумасс фотона ими создаются магнитные потоки, которые индуцируют наведенные электрические поля, создающие магнитные поля противоположного направления, препятствующие убыванию плотности магнитного потока и способствующие формированию магнитных сил притяжения.

Таким образом, магнитное взаимодействие зарядов осуществляется за счет нескольких факторов и результирующая сил магнитного взаимодействия меняется не только по величине, но и по направлению, в зависимости от взаимоположения зарядов и относительности их движения друг к другу.

Скорость прямолинейного полета фотона создается за счет вращающихся магнитных полей его разнозаряженных полумасс, взаимодействующих друг с другом в виде импульсов $p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$, поэтому любой фотон на длине отрезка,

равном его длине волны λ , получает один и тот же момент импульса $p\lambda = h$. Это определяет размерность постоянной Планка h , соответствующую размерности момента импульса энергии (Дж·с). Таким образом, $p = mc = \frac{h}{\lambda}$ и $c = \frac{h}{m\lambda} = \text{const}$,

так как с изменением массы фотона закономерно изменяется длина волны, чем больше масса, тем меньше длина волны, т. е. чем больше масса, тем на меньшее расстояние возможно ее перемещение со скоростью c при одинаковой величине момента импульса, равного h . Вероятно, на интервале одной длины волны скорость поступательного прямолинейного движения несколько меняется, но в среднем она составляет величину c .

Проведем количественный расчет сил гравитационного и электромагнитного взаимодействия между разноименно заряженными полумассами фотона в наиболее характерных точках их траектории полета (рис. 2.5).

Например, гамма-фотон с энергией 1,02 МэВ, которая достаточна для разделения его на электрон и позитрон, т. е. $q = e$.

Частота такого гамма-кванта

$$\nu = \frac{\varepsilon}{h} = \frac{1,02 \cdot 10^6 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}}{6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}} = 2,4 \cdot 10^{20} \frac{1}{\text{с}}. \quad (2.37)$$

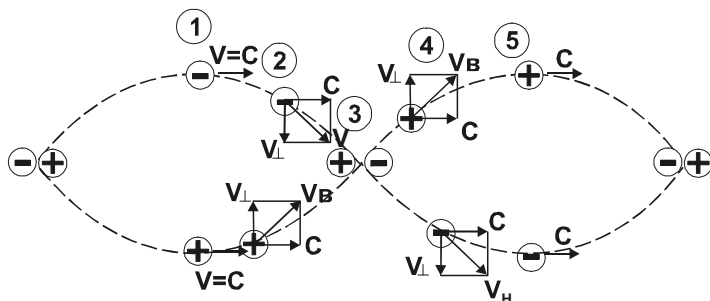


Рис. 2.5. Взаимоотношения отрицательно и положительно заряженных полумасс фотона в характерных точках траектории полета.

Фотон такой частоты характеризуется длиной волны

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{2,998 \cdot 10^8}{2,4 \cdot 10^{20}} \text{ м} = 1,25 \cdot 10^{-12} \text{ м} \quad (2.38)$$

и амплитудой колебания стоячей волны

$$A_{\phi} = \frac{\lambda}{2\pi} \cong 1 \cdot 10^{-13} \text{ м}. \quad (2.39)$$

Фотон с такими параметрами обладает массой

$$m_f = \frac{h\nu}{c^2} = \frac{6,626 \cdot 10^{-34} \cdot 2,4 \cdot 10^{20}}{(2,998 \cdot 10^8)^2} = 1,77 \cdot 10^{-30} \text{ кг}. \quad (2.40)$$

1. В положении (1) максимального разлета разноименно заряженных полумасс, когда $r = 2A = A_{\phi}$, величина гравитационного взаимодействия (притяжения) для полумасс фотона будет равна

$$F_{\text{гп}} = \frac{G \cdot m^2}{4 \cdot r^2} = \frac{G \cdot m^2}{4 \cdot (2A)^2} = \frac{6,672 \cdot 10^{-11} (1,77 \cdot 10^{-30})^2}{4 (2 \cdot 10^{-13})^2} = 1,3 \cdot 10^{-45} \text{ Н}. \quad (2.41)$$

2. Сила электрического взаимодействия (притяжения)

$$F_{\text{эл}} = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (2A)^2} = \frac{(1,6 \cdot 10^{-19})^2}{4 \cdot 3,14 \cdot 8,854 \cdot 10^{-12} \cdot (2 \cdot 10^{-13})^2} = 5,76 \cdot 10^{-3} \text{ Н}. \quad (2.42)$$

3. На движущийся электрический заряд одной из полумасс фотона со стороны другого заряда (полумассы фотона) действует сила магнитного поля – сила Лоренца

$$F_{\text{л}} = q \cdot V \cdot B \cdot \sin \alpha, \quad (2.43)$$

где q – заряд полумассы; V – скорость движения полумассы; B – индукция магнитного поля; α – угол между направлением вектора скорости и вектора магнитной индукции.

Причем каждый из зарядов полумасс фотона создает вокруг себя магнитное поле с индукцией

$$B = \frac{\mu_o \cdot q \cdot V}{4\pi \cdot r^2}. \quad (2.44)$$

Таким образом,

$$F_{\lambda} = \frac{q \cdot V \cdot \mu_o \cdot q \cdot V}{4\pi \cdot r^2} \sin \alpha = \frac{\mu_o \cdot q^2 \cdot V^2}{4\pi \cdot r^2} \sin \alpha. \quad (2.45)$$

Для положения 1 (рис. 2.5), т. е. момента параллельного полета полумасс фотона, когда $V = c$, $\alpha = 90^\circ$ и $r = 2A$.

$$F_{\lambda} = \frac{\mu_o q^2 \cdot c^2}{4\pi \cdot r^2} = \frac{\mu_o e^2 \cdot c^2}{4\pi (2A)^2} = \frac{4\pi \cdot 10^{-7} \cdot (1,6 \cdot 10^{-19}) (3 \cdot 10^8)^2}{4\pi (2,0 \cdot 10^{-13})^2} = 5,76 \cdot 10^{-3} \text{ Н}. \quad (2.46)$$

Проверка размерности подтверждает правильность расчета

$$\left[\frac{\text{В} \cdot \text{с}}{\text{А} \cdot \text{м}} \cdot \frac{\text{Кл}^2 \cdot \text{м}^2}{\text{с}^2 \cdot \text{м}^2} \right] = \left[\frac{\text{В} \cdot \text{Кл}}{\text{м}} \right] = \left[\frac{\text{В} \cdot \text{А} \cdot \text{с}}{\text{м}} \right] = \left[\frac{\text{Вт} \cdot \text{с}}{\text{м}} \right] = \left[\frac{\text{Дж}}{\text{м}} \right] = \left[\frac{\text{Н} \cdot \text{м}}{\text{м}} \right] = \text{Н}.$$

Так как разноименно заряженные полумассы фотона поступательно движутся в одном направлении, то между ними действует сила магнитного отталкивания.

Как видим в положении 1 полумасс фотона сила электрического притяжения $F_{\text{эл}}$ и сила Лоренца – магнитного отталкивания, в точности равны друг другу.

4. По аналогии с электроном, каждая из разноименно заряженных полумасс фотона обладает собственным механическим моментом вращения вокруг своей оси (спином) L_s и соответствующим ему магнитным моментом

$$p_{ms} = \frac{e}{m} \cdot \frac{\hbar}{2}. \quad (2.47)$$

Магнитное поле каждой из разноименно заряженных полумасс фотона взаимодействует с магнитным спиновым моментом p_{ms} с силой притяжения

$$F_{ms} = \frac{M}{r} = \frac{B \cdot p_{ms}}{r} = \frac{\mu_o e V}{4\pi r^2 \cdot r} \cdot \frac{e}{m_f} \cdot \frac{1}{2} \hbar = \frac{\mu_o \cdot e^2 V \hbar}{8\pi \cdot r^3 \cdot m_f}. \quad (2.48)$$

В положении (1) полумасс фотона при $r = 2A$

$$\begin{aligned} F_{ms} &= \frac{\mu_o e^2 V \hbar}{8\pi (2A)^3 m_f} = \frac{\mu_o e^2 \cdot c \cdot h}{8\pi (2A)^3 m_f \cdot 2\pi} = \\ &= \frac{4 \cdot \pi \cdot 10^{-7} (1,6 \cdot 10^{-19})^2 \cdot 3 \cdot 10^8 \cdot 6,626 \cdot 10^{-34}}{8\pi (2 \cdot 10^{-13})^3 \cdot 1,77 \cdot 10^{-30} \cdot 2\pi} = 2,859 \cdot 10^{-3} \text{ Н}. \end{aligned} \quad (2.49)$$

Таким образом, в положении (1) полумасс фотона результирующая сила их взаимодействия будет равна

$$F = F_{zp} + F_{эл} - F_{л} + F_{мс} = \\ = (1,30 \cdot 10^{-45} + 5,76 \cdot 10^{-3} - 5,76 \cdot 10^{-3} + 2,859 \cdot 10^{-3}) \text{ Н} = 2,86 \cdot 10^{-3} \text{ Н}. \quad (2.50)$$

Под действием этой результирующей силы притяжения каждая из полумасс фотона начнет двигаться навстречу друг другу с ускорением

$$a = \frac{F}{\frac{1}{2}m_f} = \frac{2F}{m_f} = \frac{2 \cdot 2,86 \cdot 10^{-3}}{1,77 \cdot 10^{-30}} = 3,23 \cdot 10^{27} \frac{\text{м}}{\text{с}^2}. \quad (2.51)$$

Наличие такой величины ускорения встречного движения полумасс фотона приведет к увеличению результирующей скорости V их движения, которая в каждый момент будет определяться как $V = \sqrt{V_{\perp}^2 + c^2}$.

Скорость сближения V_{\perp} возрастает от 0 до $V_{\perp \text{max}}$, последнее значение определяется формулой (2.27)

$$V_{V_{\text{max}}} = V_{\perp \text{max}} = 4\pi\nu A = 4\pi\nu \cdot \frac{\lambda}{4\pi} = \nu \cdot \lambda = c. \quad (2.52)$$

Таким образом, максимальное значение скорости V_{\perp} их сближения достигает скорости света. В предельном случае для положения (2), когда $V_{\perp} = c$, то $V = \sqrt{2}c = 1,41c$, а $r = A$. Это приведет к численному изменению соотношения сил и их результирующей величины. Если пренебречь $F_{гр}$, то

$$F_{рез} = F_z - F_{л} + F_{мс} = \frac{e^2 \cdot 4}{4\pi\epsilon_0 \cdot A^2} - \frac{4\mu_0 e^2 \cdot (1,41)^2 c^2}{4\pi \cdot A^2} + \frac{\mu_0 e^2 1,41 \cdot c \cdot \hbar \cdot 8}{8\pi \cdot A^3 \cdot m} = \\ = \frac{e^2 \cdot \mu_0}{\pi\epsilon_0 \cdot \mu_0 \cdot A^2} - \frac{\mu_0 e^2 \cdot 2c^2}{\pi \cdot A^2} + \frac{\mu_0 e^2 \cdot 1,41 \cdot c\hbar}{\pi A^3 \cdot m} = \frac{e^2 \mu_0 \cdot c}{A^2 \pi} \left(c - 2c + \frac{1,41 \cdot \hbar}{A \cdot m} \right) = \\ = \frac{e^2 \mu_0 c}{A^2 \cdot \pi} \left(\frac{1,41\hbar}{A \cdot m} - c \right). \quad (2.53)$$

Подставив численные значения, получим

$$F_{рез} = \frac{(1,6)^2 (10^{-19})^2 \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 3 \cdot 10^8}{\pi \cdot 4 (10^{-13})^2} \left(\frac{1,41 \cdot 6,626 \cdot 10^{-34}}{2 \cdot 10^{-13} \cdot 1,77 \cdot 10^{-30}} - 3 \cdot 10^8 \right) = \\ = 7,68 \cdot 10^{-11} (2,64 \cdot 10^9 - 3 \cdot 10^8) = 7,68 \cdot 10^{-11} \cdot 23,4 \cdot 10^8 = 179,7 \cdot 10^{-3} \cong 0,18 \text{ Н} \quad (2.54)$$

$$\left[\frac{\text{Кл}^2 \cdot \text{В} \cdot \text{с} \cdot \text{м}}{\text{А} \cdot \text{м} \cdot \text{с} \cdot \text{М}^2} \left(\frac{\text{Дж} \cdot \text{с}}{\text{м} \cdot \text{кг}} - \frac{\text{м}}{\text{с}} \right) \right] = \left[\frac{\text{Кл} \cdot \text{В} \cdot \text{с}}{\text{М}^2} \left(\frac{\text{Н} \cdot \text{м} \cdot \text{с}}{\text{м} \cdot \text{кг}} - \frac{\text{м}}{\text{с}} \right) \right] \\ = \left[\frac{\text{А} \cdot \text{с} \cdot \text{Вт} \cdot \text{с}}{\text{А} \cdot \text{М}^2} \left(\frac{\text{кг} \cdot \text{м} \cdot \text{м} \cdot \text{с}}{\text{с}^2 \cdot \text{кг} \cdot \text{м}} - \frac{\text{м}}{\text{с}} \right) \right] = \left[\frac{\text{Дж} \cdot \text{с}}{\text{М}^2} \left(\frac{\text{м}}{\text{с}} - \frac{\text{м}}{\text{с}} \right) \right] = \left[\frac{\text{Н} \cdot \text{м} \cdot \text{с}}{\text{М}^2} \cdot \frac{\text{м}}{\text{с}} \right] = \text{Н}.$$

При действии такой равнодействующей силы полумассы фотона могут получить ускорение

$$a = \frac{F_{рез}}{m_{1/2}} = \frac{0,18 \cdot 2}{1,77 \cdot 10^{-30}} \left(\frac{\text{Н}}{\text{кг}} \right) = \frac{3,6 \cdot 10^{-1}}{1,77 \cdot 10^{-30}} \left(\frac{\text{Н}}{\text{кг}} \right) =$$

$$= 2,03 \cdot 10^{29} \frac{\text{кг} \cdot \text{М}}{\text{кг} \cdot \text{с}^2} = 2,03 \cdot 10^{29} \frac{\text{М}}{\text{с}^2}.$$
(2.55)

Однако важным фактором при движении навстречу заряженных полумасс фотона является появление в окружающем их пространстве электрического поля за счет изменения магнитного потока, которое и является причиной возникновения индукционного тока. Циркуляция вектора E_v этого поля по любому контуру представляет собой ЭДС электромагнитной индукции

$$\varepsilon_i = \oint E_v d\ell = - \frac{d\Phi}{dt}.$$
(2.56)

При этом индукционный ток в контуре имеет всегда такое направление, что создаваемое им магнитное поле препятствует изменению магнитного потока, вызвавшему этот индукционный ток. В результате вторичное магнитное поле компенсирует результирующую силу притяжения между разноименно заряженными полумассами, препятствует их сближению и в положении (3) для полумасс фотона характерно $V_{\perp} = 0$, $V = c$, происходит максимальное сближение полумасс фотона и последующее их отталкивание друг от друга. Причем в положении (2) после достижения максимальной скорости движения полумасс $V_{\perp \max} = c$ и $V_{\max} = 1,41c$ начинается процесс торможения и переход полумасс фотона на орбиту с противоположным радиусом кривизны, т. е. переход с вогнутой на выпуклую и наоборот орбиту. Это приводит к изменению направления векторов магнитных моментов p_{ms} и соответственно L_{ms} , что совместно с наведенным магнитным полем изменяет направление действующей результирующей силы между полумассами с притяжения на отталкивание.

В положении (4) (рис. 2.5) за счет изменения магнитного потока удаляющихся друг от друга полумасс фотона в окружающем пространстве создается электрическое поле, порождающее индукционный ток, который приводит к появлению вторичного магнитного поля, препятствующего убыванию магнитного потока удаляющихся полумасс. Происходит замедление скорости удаления полумасс и перевод их на новую орбиту с противоположным радиусом кривизны. Это приводит к новому развороту собственных моментов полумасс фотона и как результат превышению сил притяжения над силами отталкивания. В результате полумассы фотона, достигнув положения 5 (рис. 2.5), т. е. максимального удаления друг от друга, начинают сближаться. Процесс изменения скоростей и результирующей силы взаимодействия повторяется при каждом цикле.

Если гамма-квант с частотой $\nu = 2,4 \cdot 10^{20}$ Гц может распадаться на электрон и позитрон, то, следовательно, он содержит в себе $(1,6 \cdot 10^{-19})$ Кл = e^- отрицательного и столько же положительного электрического заряда. Из этого выте-

кает вывод, что фотон единичной частоты ($\nu = 1$), обладающий энергией $\varepsilon_0 = h\nu = \overset{0}{h}$ (Дж), содержит

$$q_0 = \frac{e}{\nu} = \frac{1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Кл}}{2,4 \cdot 10^{20}} = 6,666 \cdot 10^{-40} \text{ Кл.} \quad (2.57)$$

единичного положительного и отрицательного заряда. Следовательно, физический смысл постоянной Планка h также заключается в том, что она характеризует энергию фотона единичной частоты, содержащего в себе минимальную величину положительного и отрицательного заряда по $q_0 = 6,666 \cdot 10^{-40}$ Кл.

Масса такого фотона с единичной частотой равна

$$m_0 = \frac{\varepsilon_0}{c^2} = \frac{h \cdot \nu}{c^2} = \frac{6,626 \cdot 10^{-34} \cdot 1 \cdot \text{Дж} \cdot \text{с}^2}{(2,998 \cdot 10^8)^2 \cdot \text{м}^2} = 7,37 \cdot 10^{-49} \text{ кг.} \quad (2.58)$$

Если из γ -кванта с энергией 1,02 МэВ рождаются электрон и позитрон, т. е. отрицательно и положительно заряженные частицы и они же могут аннигилировать в γ -квант, то, следовательно, в γ -кванте одновременно присутствуют одинаковые массы двух зарядов. Энергия γ -кванта $\varepsilon = h\nu$, т. е. в нем имеется по $N = \nu$ положительно и отрицательно заряженных элементарных масс с зарядами $\frac{e}{\nu}$ и энергия каждого из них $\varepsilon_i = \frac{1}{2}h$. В связи с этим логично поставить во-

прос – могут ли γ -кванты и другие фотоны образовываться путем объединения множества фотонов малых энергий, суммарная энергия которых будет равна энергии γ -кванта, или может ли фотон высокой энергии, например γ -квант, распадаться на множество фотонов меньшей энергии? Вероятно, это возможно.

Косвенным доказательством возможности такого процесса является правило Стокса в явлении люминесценции – «спектр испускаемых при люминесценции волн сдвинут в сторону более длинных волн относительно спектра, используемого для возбуждения». Если γ -квант с энергией 1,02 МэВ может распадаться на электрон и позитрон, то правомерно поставить вопрос, а может ли γ -квант с энергией несколько больше или несколько меньше чем 1,02 МэВ распадаться на электрон и позитрон? Если это возможно, то тогда заряд электрона (и позитрона) не во всех случаях строго одинаков и равен $1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл, а это лишь среднее статистическое значение. Он, вероятно, может быть и больше, и меньше, т. е. распределяться в соответствии с некоторой кривой вероятности. Это же относится и к массе электрона (позитрона).

В соответствии с предложенной моделью фотона, он должен обладать двумя видами энергии: потенциальной энергией (U), которая обусловлена колебанием его разноименно заряженных полумасс, и кинетической энергией полета (E_k) как частицы вещества в целом. Так как фотон в вакууме или в воздухе всегда летит со скоростью света, то его кинетическая энергия

$$E_k = \frac{m_f \cdot c^2}{2}. \quad (2.59)$$

Таким образом, его полная энергия

$$\varepsilon = h\nu = E_k + U. \quad (2.60)$$

Но всегда принималось, что энергия фотона $\varepsilon = h\nu = m_f c^2$, откуда и определяли его массу $m_f = \frac{h\nu}{c^2}$.

Но если вся энергия фотона $\varepsilon = m_f c^2$, а кинетическая энергия $E_k = \frac{m_f c^2}{2}$, то на долю потенциальной энергии должно приходиться

$$U = \varepsilon - E_k = m_f c^2 - \frac{m_f c^2}{2} = \frac{m_f c^2}{2}. \quad (2.61)$$

Таким образом, кинетическая и потенциальная энергия каждого фотона совершенно одинаковы. В этом есть глубокий смысл, заключающийся в переходе одного вида энергии в другой, т. е. колебания разноименно заряженных полумасс фотона приводят к его полету и наоборот, т. е. непрерывный переход одного вида энергии фотона в другой.

Для описания пространственного движения фотона вокруг заряженной частицы, когда последняя движется поступательно, можно подойти следующим образом.

Рассмотрим одномерное уравнение волны, описывающее движение одной из полумасс фотона (например, заряженной положительно). Оно имеет вид

$$y_1 = A_1 \sin(\omega t - kx) \quad (2.62)$$

и представляет смещение полумассы фотона от положения равновесия в зависимости от времени и расстояния x , пройденного волной от некоторой начальной точки. Здесь A – амплитуда колебания; $\omega = \frac{2\pi}{T}$ – круговая частота; T – период колебания, $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ – волновое число; λ – длина волны.

Волновое движение другой полумассы фотона (заряженной отрицательно), как видно, должно описываться аналогичным уравнением одномерной волны, но со сдвигом по фазе на π по отношению к волновому движению положительной полумассы фотона, т. е. должно иметь вид

$$y_2 = A_2 \sin(\omega t - kx - \pi) = A_2 \sin(\omega t + kx). \quad (2.63)$$

По существу это уравнение эквивалентно встречной отраженной от препятствия волны. В результате интерференции с падающей на препятствие волной образуется стоячая волна. Так как амплитуды колебания положительно и отрицательно заряженных полумасс фотона равны, т. е. $A_1 = A_2 = A$, то результирующее колебание этих двух полумасс фотона представляет сложение уравнений (2.62) и (2.63) и имеет вид

$$y = y_1 + y_2 = A_1 \sin(\omega t - kx) + A_2 \sin(\omega t + kx) = 2A \cos kx \sin \omega t = \varphi \sin \omega t,$$

где $\varphi = 2A \cos kx$ – независимая от времени функция, характеризующая изменение расстояния между разноименно заряженными полумассами фотона в различных точках стоячей волны с определенными значениями координаты x ; $2A$ – амплитуда стоячей волны. Колебательный процесс в виде отклонения от положения равновесия характеризуется скоростью и ускорением смещения.

$$v_x = \frac{d\varphi}{dx} = -2Ak \sin kx, \quad (2.64)$$

$$a_x = \frac{d^2\varphi}{dx^2} = -2Ak^2 \cos kx, \quad (2.65)$$

откуда

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + k^2\varphi = 0. \quad (2.66)$$

Это волновое уравнение одномерной волны.

Для пространственной волны, например при движении фотона вокруг поступательно движущегося электрона, уравнение должно содержать три вторых производных по всем координатным осям, т. е.

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{d^2\varphi}{dy^2} + \frac{d^2\varphi}{dz^2} + k^2\varphi = 0 \quad (2.67)$$

или с помощью оператора Лапласа

$$\nabla^2\varphi + k^2\varphi = 0. \quad (2.68)$$

После подстановки параметра $k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi\nu}{c}$ последнее уравнение можно представить как

$$\nabla^2\varphi + \frac{4\pi^2}{\lambda^2}\varphi = 0, \quad (2.69)$$

или

$$\nabla^2\varphi + \frac{4\pi^2 \cdot \nu^2}{c^2}\varphi = 0. \quad (2.70)$$

Учитывая особенности корпускулярно-волнового дуализма фотонов и соотношение (2.2) $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m_f c}$, выражение $\frac{4\pi^2}{\lambda^2}$ можно преобразовать к виду

$$\frac{4\pi^2}{\lambda^2} = \frac{4\pi^2 p_f^2}{h^2} = \frac{4\pi^2 m_{fi}^2 c^2}{h^2} = \frac{8\pi^2 m_{fi}}{h^2} \varepsilon_{fi}. \quad (2.71)$$

Тогда уравнение (2.71) можно представить в виде

$$\nabla^2\varphi + \frac{8\pi^2 m_{fi}}{h^2} \varepsilon_{fi} \varphi = 0. \quad (2.72)$$

Здесь m_{fi} – масса фотона соответствующей частоты; ε_{fi} – кинетическая энергия фотона этой же частоты.

Как видно, последнее уравнение является полной аналогией стационарного волнового уравнения Шредингера [1] для любой заряженной частицы вида

$$\nabla^2 \psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2} E_k \psi = 0, \quad (2.73)$$

к анализу которого мы вернемся позже, где $E_k = \frac{mv^2}{2}$ – кинетическая энергия частицы массой m , летящей со скоростью v . Таким образом, волновое стационарное уравнение фотона в виде стоячей волны можно выразить уравнениями (2.69), (2.70) и (2.72). На рис. 2.6 представлена развернутая во времени картина движения разноименно заряженных полумасс фотона вокруг поступательно движущейся заряженной частицы, например, электрона.

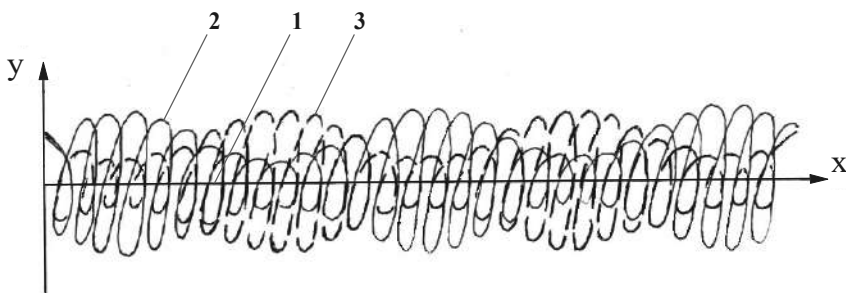


Рис. 2.6. Развернутая во времени картина движения разноименно заряженных полумасс фотона вокруг поступательно движущейся заряженной частицы (1 – траектория поступательно движущейся заряженной частицы в направлении оси X ; 2 – траектория положительно заряженной полумассы фотона; 3 – траектория отрицательно заряженной полумассы фотона)

Как видно из рис. 2.6, в один полупериод стоячей волны максимальным удалением от электрона характеризуется отрицательно заряженная полумасса фотона, а в следующем полупериоде – положительно заряженная полумасса фотона и т. д. То есть в один полупериод электрическое поле внутри фотона направлено изнутри наружу (от положительно заряженной полумассы фотона к отрицательно заряженной его полумассе), а в следующем полупериоде наоборот – снаружи вовнутрь.

Выводы по главе 2

1. Предложена модель фотона в виде двух разноименно заряженных полумасс, которые одновременно находятся в состоянии поступательного, колебательного и вращательного движений, способствующих формированию фотонной стоячей волны.

Две разноименно заряженные полумассы фотона одновременно и постоянно находятся под воздействием гравитационной, электрической и магнитных сил, изменение соотношения которых при удалении и сближении разноименно заряженных полумасс фотона сохраняет их в состоянии поступательно-вращательного и колебательного движений, представляющего сущность волнового процесса.

2. Дано обоснование выражения, описывающего амплитуду колебательного процесса при свободном полете фотона в виде $A = \frac{\lambda}{4\pi}$.

3. Выполнены расчеты взаимодействия разноименно заряженных полумасс фотона в разных положениях их полета за счет соотношения гравитационных, электрических, магнитных сил и сил токов электромагнитной индукции, формирующих их сложные поступательно-вращательно-колебательные движения.

4. Показано, что фотон обладает кинетической и потенциальной энергией, которые численно равны, а последовательный переход одного вида энергии в другой способствует непрерывному полету фотона.

5. Проведены расчеты массы и зарядов фотона единичной частоты. Отмечается, что постоянная Планка характеризует энергию фотона единичной частоты с массой $7,37 \cdot 10^{-49}$ кг, содержащего в себе минимальную величину положительного и отрицательного зарядов ($6,666 \cdot 10^{-40}$ Кл).

6. Показано, что при движении фотона вокруг поступательно движущейся заряженной частицы, например, электрона, образуется стоячая фотонная волна, описываемая уравнением, полностью аналогичным стационарному уравнению Шредингера в квантовой механике.

Литература к главе 2

1. Голиков, Г. А. Руководство по физической химии. – М. : Высш. шк., 1988. – 383 с.
2. Зельдович, Я. Б. Теория тяготения и эволюция звезд / Я. Б. Зельдович, И. Д. Новиков. – М., 1971.
3. Канарев, Ф. М. Кризис теоретической физики. – 2-е изд., перераб. и доп. – Краснодар : Изд-во КГАУ, 1997. – 170 с.
4. Канарев, Ф. М. Новый анализ фундаментальных проблем квантовой механики. – Краснодар : Краснодар. книж. изд-во, 1990. – 176 с.
5. Козлов, В. Г. Взаимодействие открытых систем / В. Г. Козлов, С. И. Червяков // Судостроительная промышленность. Серия общетехническая. – Вып. 28. – 1990. – С. 46-60.
6. Малая Советская Энциклопедия. Т. 9. – М. : Сов. энциклопедия, 1960.
7. Суорц, Кл. Э. Необыкновенная физика обыкновенных явлений. Т. 1. – М. : Наука, 1986. – 400 с.
8. Тагиров, Э. А. Фотон // Б.С.Э. — 3-е изд. — Т. 27. – М. : Сов. энциклопедия, 1972.
9. Фано, У. Физика атомов и молекул / У. Фано, Я. Фано. – М. : Наука, 1980.
10. Физический энциклопедический словарь / гл. ред. А. М. Прохоров. – М. : Советская энциклопедия, 1984
11. Фундаментальные проблемы естествознания: Междунар. науч. конгресс, 22-27 июня 1998 г. – Санкт-Петербург, Россия.

Глава 3. РОЛЬ ФОТОНОВ В СТРОЕНИИ АТОМА

Сегодня каждому школьнику известно, что по результатам рассеяния α -частиц в веществе Э. Резерфорд предложил в 1911 г. ядерную планетарную модель атома. Согласно этой модели и последующих исследований принято, что вокруг положительно заряженного ядра, содержащего Z протонов и $(A-Z)$ нейтронов, имеющего положительный заряд Ze , размер 10^{-15} – 10^{-14} м и массу, практически равную массе атома, в области с линейными размерами порядка 10^{-10} м по замкнутым орбитам движутся электроны, образуя электронную оболочку атома (здесь Z – порядковый номер элемента в таблице Менделеева, A – атомная масса, e – элементарный заряд). Так как атомы нейтральны, то заряд ядра равен суммарному заряду электронов, т. е. вокруг ядра должно вращаться Z электронов.

Таким образом, атом имеет внутреннюю структуру – ядро и внешнюю структуру, представленную вращающимися вокруг ядра электронами. На первый взгляд картина предельно простая, однако в действительности не все так ясно. Имеются свои особенности как в строении внутренней части атома – ядра, так и в строении внешней части атома – электронных оболочек. Причем в строении обеих частей атома существенную роль играют фотоны. В связи с этим рассмотрим отдельно особенности строения внешней и внутренней части атома.

3.1. Роль фотонов в строении внешней части атома

В первом приближении предполагается, что каждый электрон движется вокруг ядра по круговой орбите радиуса r . В многоэлектронных атомах электроны на орбитах вероятно летают так согласованно друг с другом, что каждый из них в любой момент времени имеет свой открытый сфероидальный угол прямолинейного взаимодействия с ядром, а остальная часть сферы перекрыта другими электронами. При этом кулоновская сила взаимодействия между ядром и электроном сообщает электрону центростремительное ускорение. Второй закон Ньютона для электрона, движущегося по окружности под действием кулоновской силы, имеет вид

$$\frac{Z \cdot e \cdot e}{4\pi\epsilon_0 r^2} = \frac{m_e v^2}{r}, \quad (3.1)$$

где v – скорость электрона на орбите радиуса r ; ϵ_0 – электрическая постоянная, m_e – масса электрона.

Уравнение (3.1) содержит две неизвестные r и v , и его можно преобразовать к виду

$$\frac{Z \cdot e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e} = v^2 r = \text{const}. \quad (3.2)$$

Например, при радиусе орбиты $r = 10^{-10}$ м скорость электрона $v = 1,6 \cdot 10^6$ м/с. Движение электрона по такой орбите характеризуется центростремительным ускорением.

Согласно электродинамике, ускоренно движущиеся электроны должны излучать электромагнитные волны и вследствие этого непрерывно терять энер-

гию. В результате электроны будут приближаться к ядру и в конце концов должны упасть на него. Таким образом, атом Резерфорда должен быть неустойчивой системой, но это противоречит действительности, опытным данным.

Так как $v^2 r = const$, а величины r и v могут меняться непрерывно, то при переходе электрона с одной орбиты на другую, более близкую к ядру, может испускаться любая, а не вполне определенная порция энергии, т. е. спектры атомов должны быть сплошными. В действительности же опыт показывает, что атомы имеют линейчатый спектр.

Принято считать, что для преодоления возникших трудностей потребовалось создание качественно новой – квантовой теории атома.

Первая попытка построения квантовой теории атома была предпринята в 1913 г. датским физиком Нильсом Бором. Он поставил себе цель связать в единое целое эмпирические закономерности линейчатых спектров, ядерную модель атома Резерфорда и квантовый характер излучения и поглощения света. В основу своей теории Бор положил два постулата.

Первый постулат Бора или постулат стационарных состояний гласит: в атоме существуют стационарные, не изменяющиеся со временем, состояния, в которых он не излучает энергии. Стационарным состояниям атома соответствуют стационарные орбиты, по которым движутся электроны. Движение электронов по стационарным орбитам не сопровождается излучением электромагнитных волн. В стационарных состояниях атома электрон, двигаясь по круговым орбитам, должен иметь дискретные квантованные значения моментов импульса, удовлетворяющие условию.

$$L_n = m_e v r_n = n h \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (3.3)$$

Второй постулат Бора или правило частот: при переходе электрона с одной стационарной орбиты n на другую m излучается или поглощается квант с энергией

$$h\nu = E_n - E_m = \frac{m_e e^4}{8 h^2 \epsilon_o^2} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right), \quad (3.4)$$

равной разности энергий соответствующих стационарных состояний E_n и E_m атома до и после излучения или поглощения. При $E_m < E_n$ происходит излучение кванта (переход атома из состояния с большей энергией в состояние с меньшей энергией, т. е. переход электрона с более удаленной от ядра орбиты на более близлежащую). При $E_m > E_n$ – поглощение кванта и переход атома в состояние с большей энергией, т. е. переход электрона на более удаленную от ядра орбиту.

Набор возможных дискретных частот

$$\nu = \frac{E_n - E_m}{h} = \frac{m_e e^4}{8 h^3 \epsilon_o^2} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) = R \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right), \quad (3.5)$$

квантовых переходов и определяет линейчатый спектр атома,

где $R = \frac{m_e e^4}{8 h^3 \epsilon_o^2}$ – постоянная Ридберга; h – постоянная Планка; m_e – масса электрона; e – заряд электрона (протона); ϵ_o – электрическая постоянная.

Постулаты, выдвинутые Бором, позволили рассчитать спектр атома водорода и водородоподобных систем – систем, состоящих из ядра с зарядом Ze и одного электрона (например, ионов He^+ , Li^{++}), а также теоретически вычислить радиусы орбит электрона. Для этого, совместно решая уравнения (3.1) и (3.3), получили выражение для радиуса n -й стационарной орбиты электрона.

$$r_n = n^2 \frac{\hbar^2 4\pi\epsilon_0}{m_e Z e^2}, \quad (3.6)$$

где $n = 1, 2, 3, \dots$ $\hbar = \frac{h}{2\pi}$

Из выражения (3.6) следует, что радиусы орбит растут пропорционально квадратам целых чисел.

Для атома водорода ($Z = 1$) радиус первой орбиты электрона при $n = 1$, называемый первым боровским радиусом (a_0), равен

$$r_1 = a_0 = \frac{\hbar^2 4\pi\epsilon_0}{m_e \cdot e^2} = 0,528 \cdot 10^{-10} \text{ м} = 52,8 \text{ пм}. \quad (3.7)$$

Так как радиусы стационарных орбит измерить невозможно, то для проверки теории использовали величину энергии, излучаемую и поглощаемую атомами водорода. Полная энергия электрона водородоподобной системы складывается из его кинетической ($m_e v^2 / 2$) и потенциальной ($U = -Ze^2 / 4\pi\epsilon_0 r$) энергии в электростатическом поле ядра

$$E = \frac{m_e v^2}{2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{1}{2} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad (3.8)$$

если учесть, что

$$\frac{m_e v^2}{2} = \frac{1}{2} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (\text{см. (3.1)})$$

Учитывая квантованные для радиуса значения орбит в соответствии с (3.6), получили выражение для энергии электрона в зависимости от порядка его орбиты

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{Z^2 m_e \cdot e^4}{8h^2 \epsilon_0^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots), \quad (3.9)$$

где знак минус означает, что электрон находится в связанном состоянии.

Из формулы (3.9) следует, что энергетические состояния атома образуют последовательность энергетических уровней, изменяющихся в зависимости от значения n . Целое число n в выражении (3.9), определяющее энергетические уровни атома, называется главным квантовым числом. Энергетическое состояние с $n = 1$ является основным (нормальным) состоянием, а состояния с $n > 1$ являются возбужденными.

Придавая n различные целочисленные значения, для атома водорода ($Z = 1$) по формуле (3.9) можно получить возможные уровни энергии, схематически представленные на рис. 3.1. Как видно, энергия атома водорода с увеличением n возрастает (уменьшается ее отрицательное значение) и энергетические уровни

сближаются к границе, соответствующей значению $n = \infty$. Атом водорода обладает, таким образом, минимальной энергией ($E_1 = -13,61$ эВ) при $n=1$ и максимальной ($E_\infty = 0$) при $n = \infty$ (в момент удаления электрона из атома). Следовательно, значение E_∞ соответствует ионизации атома (отрыву от него электрона).

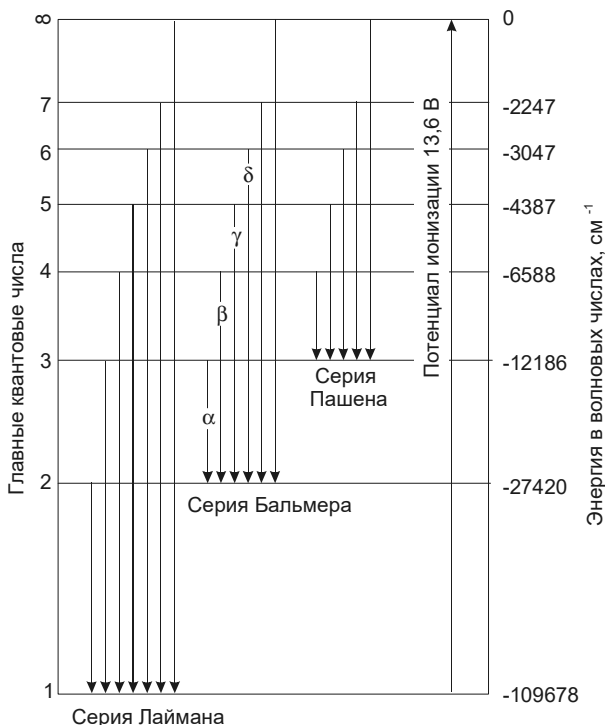


Рис. 3.1. Уровни энергии атома водорода, рассчитанные по теории Бора [5]

Безусловно, не совсем просто воспринимать вывод о том, что максимальная энергия атома $E_\infty = 0$, когда атом поглотил максимальное количество фотонов различной частоты и его электрон находится в состоянии отрыва и удаления от ядра в свободное состояние.

В классической физике принято считать, что общая энергия тела с массой m , летящего с некоторой скоростью ϑ над поверхностью Земли на высоте H , характеризуется суммой кинетической и потенциальной энергии

$$E = E_k + U_n = \frac{m\vartheta^2}{2} + mgH. \quad (3.10)$$

При $H = 0$ потенциальная энергия $U_n = 0$. Если же тело находится ниже уровня Земли ($H < 0$), то потенциальная энергия тела отрицательна, т. е.

$$U_n = -mgH. \quad (3.11)$$

Если рассматривать аналогию с электроном атома, то электрон должен был бы характеризоваться потенциальной энергией, равной нулю, в момент, когда он упадет на ядро атома и бесконечно возрастающий при удалении электрона

от ядра, однако в квантовой механике за нулевой уровень поверхности атома принята поверхность, описываемая электроном атома в момент его нулевой энергии взаимодействия с ядром. Поэтому нахождение электрона вокруг ядра классифицируется как нахождение его в «потенциальной яме».

Подставляя в формулу (3.5) $m = 1, 2, 3, 4, 5, 6$ и соответствующие им значения $n = (m + 1), \dots$, можно получить величины частот, соответствующие сериям Лаймана, Бальмера, Пашена, Брекета, Пфунда и Хэмфри. Следовательно, по теории Бора, количественно объяснившей спектр атома водорода, спектральные серии соответствуют излучению, возникающему в результате перехода атома в данное состояние из возбужденных состояний, расположенных выше данного.

Теория Бора была крупным шагом в развитии атомной физики и явилась важным этапом в создании квантовой механики. Однако эта теория обладает внутренними противоречиями, с одной стороны, применяет законы классической физики, а с другой – основывается на квантовых постулатах. Она смогла рассмотреть спектры водорода и водородоподобных систем и вычислить частоты спектральных линий, однако не смогла объяснить их интенсивности и ответить на вопрос: почему совершаются те или иные переходы и что удерживает электрон на орбите и не позволяет упасть на ядро.

Дальнейшее развитие представлений о строении атома связано с квантовой механикой и с работами Э. Шредингера, В. Гейзенберга и П. Дирака.

Считается [12], что квантовая механика позволила ответить на все поставленные вопросы. Поэтому рассмотрим решение задачи об энергетических уровнях электрона и особенностях его спектра излучения для атома водорода с позиций квантовой механики.

Квантовая или волновая механика – это раздел физики, который изучает движение и взаимодействие микрочастиц, т. е. элементарных частиц, атомов, молекул и атомных ядер. Считается, что у частиц малой массы оно происходит по законам, отличным от законов классической механики. Главный тезис квантовой механики – микрочастицы имеют волновую природу, а волны – свойства частиц. Поэтому применительно к электрону говорят, что это такое образование, которое ведет себя и как частица, и как волна, т. е. он обладает, как и другие микрочастицы, корпускулярно-волновым дуализмом, т. е. двойственностью. С одной стороны электроны, как частицы, производят давление, с другой стороны, движущийся поток электронов обнаруживает волновые явления, например, дифракцию электронов, которая широко используется при изучении строения вещества. Считается, что связь корпускулярных и волновых свойств любого материального объекта выражается уравнениями Планка

$$E = h\nu \quad (3.12)$$

и де Бройля
$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad (3.13)$$

где E и $p = mv$ – соответственно энергия и импульс (количество движения) частицы; ν и λ – частота и длина волны; h – постоянная Планка.

Квантовая механика была развита в 1926 г. независимо Гейзенбергом и Шредингером. Подход Гейзенберга называют матричной механикой, а подход Шре-

дингера – волновой механикой. Хотя эти два метода кажутся различными, но математически они эквивалентны. В литературе чаще ссылаются на Шредингера.

Австрийский ученый Эрвин Шредингер представил модель движения электрона в атоме как волновой процесс, удовлетворяющий уравнению стоячей волны, образовавшейся из двух встречных волн, одна из которых распространяется в атоме от ядра во все стороны, а другая – возвращается к ядру, так как электрон не может оторваться от ядра. Кроме того, принимая принцип корпускулярно-волнового дуализма для электрона – «частицы-волны», в уравнение состояния волны он подставил вместо длины волны ее значение из уравнения де Бройля (3.13) и получил новое волновое уравнение, связывающее энергию электрона с пространственными координатами и переменной величиной – волновой функцией ψ (или амплитудой электронной волны).

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m_e}{h^2} (E - U) \Psi = 0. \quad (3.14)$$

где m – масса электрона; h – постоянная Планка; E – общая энергия электрона; U – потенциальная энергия электрона.

Уравнение (3.14) описывает движение электрона в атоме. Из него следует, что изменение волновой функции ψ зависит от кинетической E_k или общей E и потенциальной U энергии электрона и от координат (вторые частные производные).

Волновую функцию, или амплитуду электронной волны, называют также орбиталью. Она, как и амплитуда любого волнового процесса, может иметь и положительный, и отрицательный знаки. Это послужило основанием негативного отношения к волновому уравнению Шредингера. Но величина ψ^2 всегда положительна. Впоследствии оказалось, что она имеет более определенный физический смысл. М. Борн предложил общепринятое до настоящего времени толкование уравнения Шредингера, согласно которому величина $(\Psi \bar{\Psi} dV)$ характеризует вероятность нахождения частицы в элементарном объеме dV .

Итак, представление о вероятности нахождения электрона в определенной области атома – основополагающее в квантовой механике, тогда как понятия о траектории частицы, ее координатах и скорости в определенный момент времени в этом случае уже не имеют смысла. То есть нельзя говорить об определенной орбите электрона, можно говорить лишь о вероятности пребывания электрона на том или ином расстоянии от ядра. Там, где значение ψ^2 максимально, облако особенно плотно и в этой области сосредоточен максимальный отрицательный заряд. Орбиталь – это пространство, в котором наиболее вероятно пребывание электрона.

Анализ решений уравнения (3.14) показал, что параметры, характеризующие состояние электрона в атоме, изменяются целочисленно, т. е. квантуются.

Таким образом, согласно планетарной модели строения, атом водорода представляется как ядро, вокруг которого по орбите вращается электрон. На основе квантово-механического представления ядро атома водорода окружено пульсирующим электронным облаком с неравномерной плотностью заря-

да, т. е. классическая орбита заменена представлением об электронном (зарядовом) облаке, которое называют орбиталью, и под которой понимают совокупность положений электрона в атоме, т. е. то пространство, где чаще всего бывает электрон. Учитывая, что большинство физических задач с элементарными частицами в квантовой механике решаются с использованием уравнения Шредингера, рассмотрим более детально возможности как его получения, так и использования для решения разных физических задач.

Принято считать, что уравнение Шредингера не было выведено, оно было постулировано. Однако в работе [4] показана последовательность математических операций его получения. Для этого сначала рассматривается одномерное уравнение волны вида

$$y = A \sin(\omega t - kx), \quad (3.15)$$

которое представляет зависимость колеблющейся величины y (смещения точки, напряженность электрического или магнитного поля и т. п.) от времени и расстояния x , пройденного волной от некоторой начальной точки.

Здесь A – амплитуда колебания; $\omega = \frac{2\pi}{T}$ – круговая частота; T – период колебания; $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ – волновое число; λ – длина волны.

При сложении двух двигающихся навстречу друг другу волн образуется стоячая волна. В каждой точке стоячей волны совершается колебательное движение с амплитудой, которая определяется положением точки, но не зависит от времени. Возникают узлы, где колебательный процесс отсутствует, и пучности, в которых амплитуда максимальна. Характер колебаний с течением времени не меняется. Такой процесс называется стационарным, и поэтому такой методический подход математического решения задачи обоснования вида стационарного уравнения Шредингера принят за основу. Сложение уравнений прямой и обратной волн дает

$$\begin{aligned} y &= A \sin(\omega t - kx) + A \sin(\omega t + kx) = \\ &= A[(\sin \omega t \cos kx - \cos \omega t \sin kx) + (\sin \omega t \cos kx + \cos \omega t \sin kx)] = \\ &= 2A \cos kx \sin \omega t \end{aligned} \quad (3.16)$$

Обозначая независимую от времени амплитуду колебательно процесса для точки волны с определенным значением x через $\Psi = 2A \cos kx$, получили $y = \Psi \sin \omega t$. Далее анализируется уравнение $\Psi = 2A \cos kx$ и соотношение, которому подчиняется амплитуда стоячей волны. Для этого берутся первая и вторая производные этого уравнения, т. е.

$$\frac{d\Psi}{dx} = -2Ak \sin kx \quad (3.17)$$

и

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = -2Ak^2 \cos kx, \quad (3.18)$$

отсюда
$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + k^2\Psi = 0. \quad (3.19)$$

Для пространственной волны уравнение содержит три вторых производных по всем координатным осям, т. е.

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2} + k^2\Psi = 0. \quad (3.20)$$

Обычно это уравнение записывается более кратко с помощью оператора Лапласа

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \quad (3.21)$$

Подставив выражение волнового числа $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ в уравнение (3.20) и, используя оператор (3.21), получают

$$\nabla^2\Psi + \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2\Psi = 0. \quad (3.22)$$

Далее рассматривается один электрон, не испытывающий каких-либо сил со стороны других тел и свободно движущийся со скоростью v . Используя квантовые представления, в соответствии с которыми он должен обладать волновыми свойствами и длиной волны, удовлетворяющей уравнению (3.13), после подстановки его в выражение (3.22) получают

$$\nabla^2\Psi + \frac{4\pi^2(m_e v)^2}{h^2}\Psi = 0 \quad (3.23)$$

или

$$\nabla^2\Psi + \frac{8\pi^2 m_e}{h^2} E_k \Psi = 0, \quad (3.24)$$

где $E_k = \frac{m_e v^2}{2}$ — кинетическая энергия электрона.

Заменяя кинетическую энергию в уравнении (3.24) с помощью полной E и потенциальной U энергии рассматриваемой частицы, записывают его в виде

$$\nabla^2\Psi + \frac{8\pi^2 m_e}{h^2} (E - U)\Psi = 0. \quad (3.25)$$

Уравнения (3.24) и (3.25) являются частными случаями уравнения Шредингера применительно к стационарным, т. е. не меняющимся со временем состояниям одной частицы. Используя величину $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, уравнение Шредингера записывается в виде

$$\nabla^2\Psi + \frac{2m_e}{\hbar^2} (E - U)\Psi = 0. \quad (3.26)$$

Таким образом, рассматривая физический смысл решения уравнения Шредингера, отмечают, что классические представления о частицах и волнах к микрочастицам не применимы, а использование таких характеристик, как скорость, координата, траектория движения, носят вероятностный характер. Эти особен-

ности микрочастиц отражаются с помощью входящей в уравнение Шредингера величины ψ , называемой волновой функцией, а квадрат ее модуля определяет вероятность нахождения частицы в единичном объеме пространства. Таким образом, постулируется

$$|\Psi|^2 = \omega, \quad (3.27)$$

где ω – плотность вероятности. Умножая ω на элемент объема dV , получают вероятность нахождения частицы в этом элементе, а суммируя по всему пространству, где может находиться частица, имеют

$$\int \Psi^2 dV = 1, \quad (3.28)$$

так как полагают, что рассматриваемая частица существует и где-нибудь в этом пространстве обязательно должна встретиться.

Уравнение (3.28) называется условием нормировки. Любая волновая функция, получающаяся после решения уравнения Шредингера, должна быть нормирована, т. е. удовлетворять и условию нормировки. Уравнение Шредингера является дифференциальным уравнением второго порядка, а потому допускает бесчисленное множество решений. Его общее решение содержит две произвольные постоянные, поэтому для определения значений волновой функции, имеющих физический смысл, так называемых собственных значений уравнения Шредингера, нужно подчинить их ряду условий. Собственные значения волновой функции должны быть непрерывны, однозначны, конечны, удовлетворять граничным условиям и условиям нормировки. Однако считается, что, несмотря на все эти ограничения, остается целый ряд допустимых значений волновой функции и соответствующих им возможных состояний микрочастиц с различными значениями энергии и других характеристик рассматриваемого объекта.

Для убедительности справедливости уравнения Шредингера применительно к описанию поведения микрочастицы во многих монографиях и учебниках разбирается несколько случаев.

Первая ситуация:

– электрон движется со скоростью v и может находиться лишь на прямолинейном отрезке траектории длиной a . Для выхода электрона за пределы этого участка предполагается, что ему почему-то потребуется бесконечно большая энергия, а внутри этого участка энергия электрона постоянна и равна конечной величине кинетической энергии E_k .

И далее рассуждается так. Поскольку электрон не может обладать бесконечно большой энергией и поэтому не может выйти за пределы заданного образца, говорят, что он находится в одномерном потенциальном ящике.

Здесь сразу возникают противоречия. Во-первых: ящик не может быть одномерным, тем более потенциальный, и во-вторых, в задаче оговорено, что электрон обладает только кинетической энергией, следовательно, рассматривать поведение электрона в потенциальном ящике не имеет смысла. Однако разберем решение этой задачи так, как оно дается в [3].

Уравнение Шредингера в данном случае содержит только одну координату и в соответствии с выражениями (3.26) и (3.24) имеет вид

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2m_e}{\hbar^2} E_k \psi = 0. \quad (3.29)$$

Обозначая

$$\frac{2m_e}{\hbar^2} E_k = \omega^2, \quad (3.30)$$

получают дифференциальное уравнение

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \omega^2 \psi = 0, \quad (3.31)$$

решением которого является функция

$$\psi = A \sin \omega x + B, \quad (3.32)$$

содержащая две произвольные постоянные A и B .

Воспользовались граничными условиями. Очевидно, при $x = 0$ и $x = a$ электрон выходит за границы заданного отрезка и по условию задачи существовать не может. При этом вероятность его нахождения в этих точках, а поэтому ψ^2 и сама ψ должны обращаться в нуль. Следовательно, $\psi_0 = A \sin 0 + B = 0$, поэтому $B = 0$ и $\psi_a = A \sin \omega a = 0$, что дает:

$$\omega a = n\pi, \quad (3.33)$$

где $n = 1, 2, 3, \dots$ – любое целое число. Поэтому:

$$\psi = A \sin \frac{n\pi}{a} x, \quad (3.34)$$

здесь a – длина «потенциального ящика».

Значение $n = 0$ предлагается исключить, так как ему соответствует $\psi = 0$ во всех точках данного отрезка, а следовательно, отсутствие на нем электрона.

В результате получается целый ряд собственных значений ψ – функции, удовлетворяющих уравнению Шредингера и граничным условиям. Кроме того, учитывают еще условие нормировки. С помощью уравнения (3.28) для данного случая получают:

$$\int_a^0 \psi^2 dV = A^2 \int_0^a \sin^2 \omega x dx = 1, \quad (3.35)$$

отсюда:

$$A^2 \left(\frac{1}{2} a - \frac{1}{4\omega} \sin 2\omega a \right) = \frac{1}{2} A^2 a = 1,$$

и

$$A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

Используя это значение постоянной A , окончательно получают [4]

$$\psi = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}. \quad (3.36)$$

При этом отмечают, что полученный результат не соответствует классическим представлениям. Величина ψ в пределах заданного отрезка, т. е. при $0 < x < a$, для $n \geq 2$ неоднократно обращается в нуль. Поэтому и вероятность обнаружения частицы в некоторых точках данного отрезка также равна нулю, что

с позиций классической физики считается непонятным. Но, на наш взгляд, с физической точки зрения это непонятно и с позиций квантовой механики.

Как электрон может проскочить какие-то точки пути в потенциальном ящике, совершенно не побывав в них ни на один миг времени? Поэтому получение такого вывода трудно классифицировать как достоинство квантовой механики.

Считается также [4], что очень важные и тоже не согласующие с классическими понятиями выводы возникают для энергии электрона.

С помощью уравнений (3.30) и (3.33) получают

$$\frac{2m_e}{\hbar^2} E_k = \left(\frac{n\pi}{a} \right)^2,$$

$$E_k = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m_e a^2}, \quad (3.37)$$

откуда

Из этого уравнения видно, что энергия электрона дискретна, т. е. существует ряд допустимых значений энергии, отличающихся друг от друга на определенные интервалы, кванты энергии. Промежуточные значения энергии невозможны, так как величина n должна быть обязательно целой.

В случае трехмерного движения частицы в пространстве, например электрона в атоме водорода, уравнение (3.14) Шредингера представляется в виде:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left(E - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \Psi = 0. \quad (3.38)$$

Для решения этого уравнения переходят к сферическим координатам r , θ и φ , где $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$. После преобразования получают:

$$\frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) +$$

$$+ \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \cdot \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \phi^2} + \frac{8\pi^2 \cdot m_e}{h^2} \left(E - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \Psi = 0. \quad (3.39)$$

Функцию Ψ в уравнении (3.39) можно представить в виде произведения трех функций, одна из которых зависит от r , другая – от θ , а третья – от φ .

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r)\theta(\theta)\Phi(\varphi). \quad (3.40)$$

Подстановка этого выражения в уравнение (3.39) дает три обыкновенных дифференциальных уравнения, каждое из которых может быть решено при введении эквивалентных параметрам τ , θ , φ квантовых чисел, имеющих целочисленные значения. Считается, что для атома водорода эквивалентными квантовыми числами являются:

- главное квантовое число n (эквивалент параметра r);
- азимутальное квантовое число l (эквивалент параметра θ);
- магнитное квантовое число m (эквивалент параметра φ).

Главное квантовое число n характеризует энергетический уровень или общий запас энергии электрона, а также размеры электронного облака. Оно может принимать значения целых чисел от 1 до ∞ (практически принимается от 1 до 7 соответственно номеру периода, в котором находится элемент). Энергетические

уровни (или оболочки) обозначаются цифрами в соответствии со значениями n или буквами:

Главное квантовое число $n \dots$	1	2	3	4	5	6	7
Обозначение уровня	K	L	M	N	O	P	Q

Наименьшей энергией электрон обладает при $n=1$. С увеличением n энергия электрона и размер электронного облака (орбитами) возрастают.

Электроны с одинаковой величиной n образуют в атоме электронную оболочку, соответствующую определенному значению главного квантового числа.

Собственные значения энергии для водородоподобного атома даются выражением

$$E = -\frac{m_e e^4 Z^2}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 n^2}, \quad n = 1, 2, 3 \dots \quad (3.41)$$

Энергия отрицательна, потому что электрон в водородоподобном атоме обладает меньшей энергией, чем в свободном состоянии. Обычно энергию не связанных друг с другом электрона и ядра принимают равной нулю.

В соответствии с формулой (3.41), энергия основного состояния ($n = 1$) атома водорода $E = -2,1802 \cdot 10^{-18} \text{ Дж} = -\frac{2,1802 \cdot 10^{-18} \text{ Дж}}{1,6021 \cdot 10^{-19} \text{ Дж/эВ}} = -13,61 \text{ эВ}$, а величина

радиуса атома при $n = 1$ – боровского радиуса a_0 , представляющее собой наиболее вероятное расстояние между электроном и протоном в атоме водорода

$$a_0 = \frac{\hbar^2 (4\pi\epsilon_0)}{m_e \cdot e^2} = 0,528 \cdot 10^{-10} \text{ м} = 0,528 \text{ \AA}. \quad (3.42)$$

Орбитальное или азимутальное квантовое число l характеризует энергетическое состояние электрона в подуровне и форму электронного облака. Электроны уровня группируются в подуровни.

Принято считать [12], что азимутальное квантовое число l имеет простой физический смысл. Оно представляет величину момента вращения частицы.

Как и n , величина l квантуется, т. е. изменяется только целочисленно, принимая значения на единицу меньше, чем у n , – от 0 до $(n - 1)$. Так, например, при $n = 3$, $l = 0, 1, 2$. Каждому значению l при одном и том же n соответствует определенный подуровень (подоболочка).

Подуровни обычно обозначаются буквами:

Орбитальное квантовое число ...	0	1	2	3	4	5
Обозначение подуровня ...	s	p	d	f	g	h

Число подуровней равно номеру уровня.

Например:

Главное квантовое число n	Орбитальное квантовое число l	Число подуровней	Обозначение подуровней в уровне
1	0	1	1s
2	0, 1	2	2s, 2p
3	0, 1, 2	3	3s, 3p, 3d
4	0, 1, 2, 3	4	4s, 4p, 4d, 4f

Электроны с орбитальным числом $l = 0$ называются s-электронами, с $l = 1$ – p-электронами, с $l = 2$ – d-электронами, с $l = 3$ – f-электронами и т. д. Очевидно, при любом n наименьшей энергией обладают s-электроны, затем следуют p-, d- и f-электроны.

Магнитное квантовое число m характеризует ориентацию орбитали (электронного облака) в пространстве и связано с числом l , квантуется и принимает целочисленные значения, включая ноль, от $+l$ до $-l$. Число значений $m = 2l + 1$. Это число орбиталей с данным значением l , т. е. число энергетических состояний, в которых могут находиться электроны данного подуровня. Энергетические состояния схематически обозначают квантовыми (энергетическими) ячейками в виде прямоугольников. Это есть не что иное как схематическое изображение атомной орбитали.

Определим число состояний (орбиталей), отвечающее s-, p-, d- и f-электронам:

Электроны	Орбитальное квантовое число l	Магнитное квантовое число m	Число орбиталей (ячеек) с данным l
s	0	0	1
p	1	+1, 0, -1	3
d	2	+2, +1, 0, -1, -2	5
f	3	+3, +2, +1, 0, -1, -2, -3	7

Таким образом, s-электроны имеют лишь одно состояние ($2l+1=1$), p-электроны – 3 состояния ($2l+1=3$), d-электроны – пять и f-электроны – семь состояний. На рис. 3.2 показаны формы и ориентация в пространстве 1s, 2p- и 3d-орбиталей для атома водорода. Так как s-электрону ($l = 0$) отвечает только одно значение m ($m=0$), то все расположения s-орбиталей в пространстве идентичны и имеют форму шара. Электронная плотность такой орбитали является только функцией изменения радиуса: для 1s орбитали имеется максимум электронной плотности – он находится от ядра на расстоянии 0,53 Å для 2s-орбитали – два максимума плотности: на расстоянии 0,53 Å и 2,12 Å и т. д.

p-Электронам ($l = 1$) отвечают три значения m (+1, 0, -1); их три орбитали имеют форму гантели и взаимно перпендикулярны, так как ориентированы вдоль координатных осей x , y , z по обе стороны от ядра. Осью вращения каждой из этих гантелей-орбиталей служит одна из осей координат. Такие орбитали обозначают символами ρ_x , ρ_y и ρ_z . Если ρ_x -орбиталь расположена в направлении оси x , то очевидно ρ_x -электрон с наибольшей вероятностью находится близ оси x . То же можно сказать об орбиталях ρ_y и ρ_z . Каждый уровень (оболочка), начиная с $n=2$, имеет три p-орбитали. С увеличением n электроны занимают p-орбитали, расположенные на больших расстояниях от ядра, но направление по осям x , y , z всегда сохраняется.

Для 2p-орбиталей контуры поверхностей представляют собой два несколько искаженных эллипса. Одна из этих поверхностей соответствует волновой функции с положительным знаком, а другая – волновой функции с отрицательным знаком. Считается, что знаки представляют особый интерес при обсуждении молекулярных орбиталей.

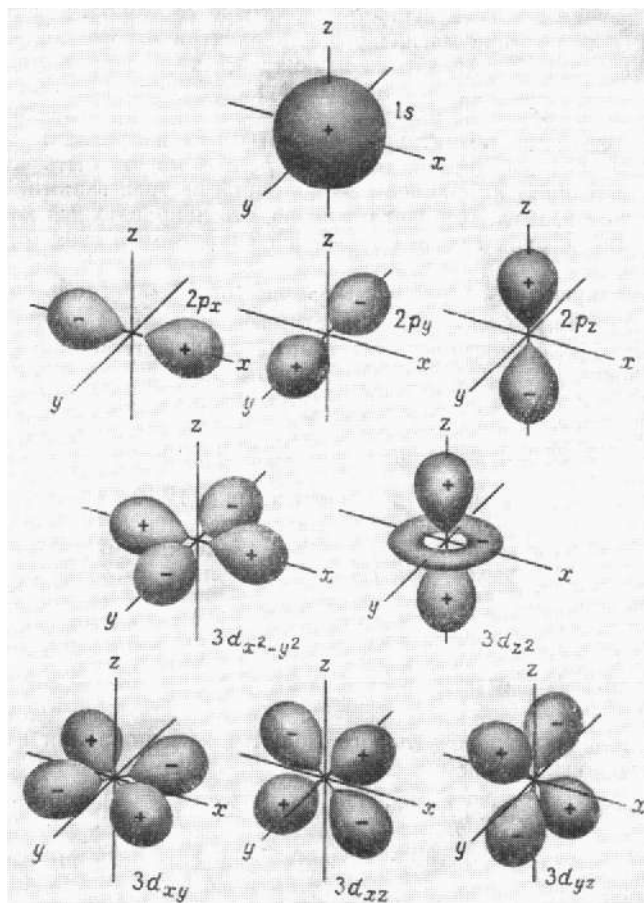


Рис. 3.2. Угловая зависимость функций $1s$, $2p$ и $3d$ при постоянном значении r . Приведенные знаки соответствуют знакам волновых функций [5]

d -Электронам ($l = 2$) отвечает пять значений m ($+2, +1, 0, -1, -2$), а значит, имеется пять различных более сложных форм ориентаций d -орбиталей в пространстве (рис. 3.2). Три орбитали, обозначаемые символами d_{xy} , d_{xz} , d_{yz} – ориентированы соответственно в плоскостях xy , xz и yz , располагаясь между двумя осями; четвертая орбиталь, обозначаемая как $d_{x^2-y^2}$, ориентирована в плоскости xy вдоль осей x и y . Все эти четыре из пяти d -орбиталей являются четырехлепестковыми фигурами и различаются положением «лепестков» в пространстве. Пятая орбиталь, обозначаемая символом d_{z^2} и имеющая форму гантелей, характеризуется двумя большими областями электронной плотности вдоль оси z и тороидальной орбиталью в плоскости xy .

Такой характер форм орбиталей дает математическое решение уравнения Шредингера, однако невозможно себе представить, чтобы один электрон, вращаясь вокруг единственного протона со сферическим симметричным электро-

статическим полем, мог совершать такой сложный характер движения, чтобы поверхность его электронной плотности имела форму d_{x^2} .

Не менее трудно себе представить, чтобы электрон мог описывать гантелеобразные кривые, пролетая через ядро атома. Математически может получиться любая форма поверхности, но дать физическое объяснение таким замысловатым поверхностям невозможно.

К сожалению, в научной литературе отсутствует информация о характере более сложных поверхностей, описывающих вероятность нахождения электрона в пространстве вокруг ядра на основании решения уравнения Шредингера для случая f , g , h – электронов, для которых характерно соответственно семь, девять, одиннадцать орбиталей, не говоря уже о еще более сложных поверхностях.

Вероятно, графически описать характер таких орбиталей уже не представляется возможным, и представить физически движение одного единственного электрона атома водорода по столь сложным поверхностям совершенно невозможно. Это дает основание вообще поставить под сомнение реальность существования таких поверхностей вероятности распределения электронной плотности в пространстве вокруг ядра, а заодно реальность существования и менее сложных поверхностей.

В связи с этим следует напомнить, что изначально волновое уравнение Шредингера встретило ряд противоречий и его пришлось оставить. Как отмечается в работе [12], прежде всего противоречива сама его запись, так как потенциальная энергия записывается как функция координат, в то время как частица «размазана» в пространстве в соответствии с квадратом амплитуды этой функции. И только после того, как М.Борн предложил общепринятое до настоящего времени толкование уравнения Шредингера, оно приобрело статистический характер, описывая лишь вероятность этого события.

Спиновое квантовое число s характеризует собственное вращение электрона вокруг своей оси. Это вращение получило название спин. Спин может принимать только два значения: $+\frac{1}{2}$ и $-\frac{1}{2}$, которые отличаются, как и остальные квантовые числа, на единицу. Знаки плюс и минус соответствуют различным направлениям вращения электрона.

Два электрона с одинаковыми значениями квантовых чисел n , l , m , но с противоположно направленными или антипараллельными спинами называются спаренными. Они изображаются противоположно направленными стрелками $\uparrow\downarrow$. Неспаренный электрон изображается одной стрелкой \uparrow .

Итак, принято считать, что сложное движение электрона в атоме полностью описывается четырьмя квантовыми числами – n , l , m и s . При переходе атома из одного состояния в другое меняются значения квантовых чисел, происходит перестройка электронного облака, и атом излучает или поглощает квант энергии – фотон.

В работе [5] представлен вид волновых функций для разных сочетаний конкретных величин n , l , m и делается вывод о полезности рассмотрения их со-

ставных частей $R(r)$ и $\theta(\theta)$, $\Phi(\varphi)$ отдельно. Радиальные функции $R(r)$ с $z=1$ представлены графически (рис. 3.3). Показано, что радиальная функция всегда содержит множитель $e^{-\frac{zr}{na_0}}$, где n – главное квантовое число.

Радиальные волновые функции имеют $n - l$ узловых точек ($R(r) = 0$). В узловой точке функция изменяет знак, а ее квадрат не меняет знака. Считается, что существование узловых точек требуется для того, чтобы 1s, 2s и другие орбитали были ортогональны, так что

$$\int \Psi_{1s} \Psi_{2s} dV = 0. \quad (3.43)$$

Рис. 3.3а показывает, что радиальная часть $R(r)$ волновых функций для s-орбиталей атома водорода обуславливает наибольшую плотность вероятности для электрона на ядре. Однако это противоречит физическому смыслу. Как может быть, что наибольшая плотность вероятности для электрона на ядре, т. е. в соответствии с этой радиальной частью $R(r)$ волновой функции для s-орбиталей электрон наиболее вероятно должен совместиться с ядром, что в действительности не происходит. Чтобы выйти из такого щепетильного состояния, в работе [5] предлагается «...проявить интерес к другому вопросу: как зависит от r вероятность нахождения электрона в области между r и $r + dr$?». Чтобы рассчитать это так называемое радиальное распределение для s-орбиталей, предлагают умножить функцию $R(r)$ на $4\pi r^2$, так как $4\pi r^2 \cdot dr$ – объем сферической оболочки с центром в начале координат. Такая радиальная функция для 1s-орбитали обладает максимумом при a_0 , как показано на рис. 3.3б, и этот наиболее вероятный размер для электрона совпадает с боровским радиусом.

Таким образом, рис. 3.3 воспроизводит только радиальную часть функций Ψ^2 , а при $l = 1, 2, \dots$ графики модифицируются угловой зависимостью.

В работе [5] также отмечается, что атом водорода обладает бесконечным числом орбиталей, однако для большинства задач, представляющих интерес в химии, требуются орбитали только с наиболее низкой энергией. С этим выводом очень трудно согласиться.

Таким образом, единственный электрон в атоме водорода или единственный электрон в водородоподобном ионе может находиться в различных энергетических состояниях и характеризоваться различным набором квантовых чисел, и, следовательно, описывать при своем движении различного вида поверхности вероятности плотности его нахождения от простой сферической (типа s) до весьма сложной, многолепестковой (типа f) или еще более сложной, восьми-, шестнадцати-, и т. д. – лепестковой поверхности. Однако весьма интересно, что при рассмотрении всех элементов таблицы Менделеева электрону атома водорода приписывается только одно (1s) энергетическое состояние с $n = 1$, $l = 0$, $m = 0$, что также вступает в глубокое противоречие.

Наинизший уровень состояния атома с $n = 1$ должен соответствовать температуре $T = 0^\circ \text{K}$, но в этом состоянии атомы практически не бывают.

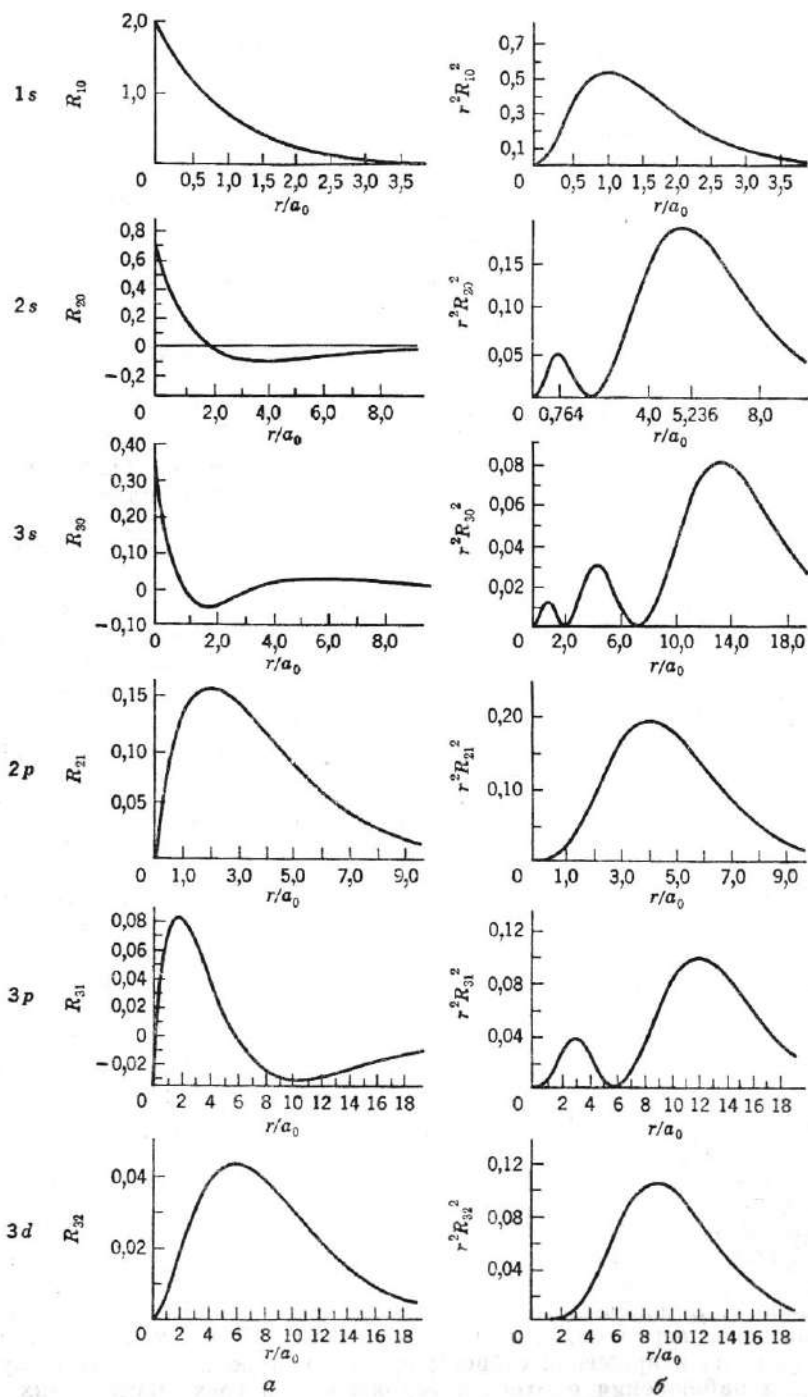


Рис. 3.3. а – электронные радиальные волновые функции $R(r)$ для атома водорода; б – плотность вероятности нахождения электрона в области между r и $r+dr$ [5]

В атомах остальных элементов таблицы Д. И. Менделеева электроны распределяются по отдельным энергетическим уровням, которые часто называют электронными слоями или оболочками. Чтобы решить, сколько электронов может находиться на уровне (оболочке), рассматривают квантовые числа, которые определяют состояние электрона в атоме. В многоэлектронных атомах для характеристики состояния электрона большое значение придают принципу, сформулированному Паули в 1925 г.: «в атоме не может быть двух электронов с одинаковыми значениями всех четырех квантовых чисел». Значит, на n уровне (оболочке) может поместиться столько электронов, сколько возможно разных сочетаний l, m, s .

Так, на первом уровне от ядра (К-оболочка) возможны следующие значения квантовых чисел:

$$\begin{array}{cccc} n=1 & l=0 & m=0 & s=+\frac{1}{2} \\ & l=0 & m=0 & s=-\frac{1}{2}. \end{array}$$

Отсюда видно, что на первом уровне может разместиться только 2 электрона. Это оба s-электрона. Третий электрон уже не будет отличаться от двух предыдущих значением хотя бы одного квантового числа, т. е. $N_1 = 2 = 2 \cdot 1^2$.

Число электронов на втором уровне от ядра (L-оболочка) составляет

$$\begin{array}{cccc} n=2 & l=0 & m=0 & s=+\frac{1}{2} \\ & l=0 & m=0 & s=-\frac{1}{2} \end{array} \left. \vphantom{\begin{array}{cccc} n=2 & l=0 & m=0 & s=+\frac{1}{2} \\ & l=0 & m=0 & s=-\frac{1}{2} \end{array}} \right\} S^2$$

$$\begin{array}{cccc} n=2 & l=1 & m=-1 & s=+\frac{1}{2} \\ & l=1 & m=-1 & s=-\frac{1}{2} \\ & l=1 & m=0 & s=+\frac{1}{2} \\ & l=1 & m=0 & s=-\frac{1}{2} \\ & l=1 & m=1 & s=+\frac{1}{2} \\ & l=1 & m=1 & s=-\frac{1}{2} \end{array} \left. \vphantom{\begin{array}{cccc} n=2 & l=1 & m=-1 & s=+\frac{1}{2} \\ & l=1 & m=-1 & s=-\frac{1}{2} \\ & l=1 & m=0 & s=+\frac{1}{2} \\ & l=1 & m=0 & s=-\frac{1}{2} \\ & l=1 & m=1 & s=+\frac{1}{2} \\ & l=1 & m=1 & s=-\frac{1}{2} \end{array}} \right\} P^6$$

Как видно, на втором уровне может разместиться 8 электронов, из них два в s-подуровне (это s-электроны) и 6 в p-подуровне (это p-электроны). $N_2 = 8 = 2 \cdot 2^2$. Рассуждая аналогично, нашли, что для третьего уровня (m-оболочка) $n = 3$, $l = 0, 1, 2$ и число различных сочетаний из l, m, s будет равно 18, для четвертого – 32, а число электронов составит соответственно: $N_3 = 18 = 2 \cdot 3^2$, $N_4 = 32 = 2 \cdot 4^2$.

Таким образом, емкость энергетического уровня в общем виде составляет $2n^2$ электронов, т. е.

$$N_n = 2n^2. \quad (3.44)$$

Согласно принципу Паули, на одной орбитали (квантовой ячейки) может находиться 2 электрона с противоположными спинами $\uparrow\downarrow$.

Тогда

на s-подуровне может быть $2(2 \cdot 0 + 1) = 2$ электрона;

на p-подуровне может быть $2(2 \cdot 1 + 1) = 6$ электронов;

на d-подуровне может быть $2(2 \cdot 2 + 1) = 10$ электронов;

на f-подуровне может быть $2(2 \cdot 3 + 1) = 14$ электронов.

Число электронов на подуровне определяется уравнением

$$N_l = 2(2l + 1). \quad (3.45)$$

На этом принципе построено последовательное заполнение электронов в атомах химических элементов Периодической системы Д.И. Менделеева, представленной в таблице 3.1 по данным [14].

Анализ таблицы дает следующие результаты. У атома водорода один электрон, который расположен на 1s-орбитали K-оболочки первой от ядра.

У атома гелия два спаренных электрона. В соответствии с принципом Паули оба они размещаются на 1s-орбитали. У гелия оболочка застроена, и этот элемент завершает первый период системы Д. И. Менделеева.

У атомов элементов второго периода заполняется L-оболочка ($n = 2$), причем сначала 2s-подуровень, а затем три орбитали 2p-подуровня. Элементы второго и третьего периодов имеют электроны орбиталей только s- и p- подуровней.

Элементы четвертого и пятого периодов имеют электроны не только s-, p-, но и d-орбиталей, а в шестом и седьмом периодах появляются и электроны f-орбиталей.

Теория строения атомов объясняет периодическое изменение свойств элементов. Возрастание положительного заряда атомных ядер от 1 до 107 приводит к периодическому повторению у атомов элементов строения внешнего энергетического уровня.

Таблица 3.1

Распределение электронов в атомах

Период	Z	Элемент	n = 1		n = 2		n = 3			n = 4				n = 5				n = 6			
			1s		2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f	5s	5p	5d	5f	6s	6p	6d	6f
1	1	H	1																		
	2	He	2																		
2	3	Li	2		1																
	4	Be	2	2	2																
	5	B	2	2	2	1															
	6	C	2	2	2	2															
	7	N	2	2	2	3															
	8	O	2	2	2	4															
	9	F	2	2	2	5															
	10	Ne	2	2	2	6															
	11	Na	2	2	2	6	1														
3	12	Mg	2	2	2	6	2														
	13	Al	2	2	2	6	2	1													
	14	Si	2	2	2	6	2	2													
	15	P	2	2	2	6	2	3													
	16	S	2	2	2	6	2	4													
	17	Cl	2	2	2	6	2	5													
	18	Ar	2	2	2	6	2	6													

Период	Z	Элемент	n = 1		n = 2		n = 3			n = 4				n = 5				n = 6			
			1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f	5s	5p	5d	5f	6s	6p	6d	6f	
4	19	K	2	2	6	2	6		1												
	20	Ca	2	2	6	2	6		2												
	21	Sc	2	2	6	2	6	1	2												
	22	Ti	2	2	6	2	6	2	2												
	23	V	2	2	6	2	6	3	2												
	24	Cr	2	2	6	2	6	5	1												
	25	Mn	2	2	6	2	6	5	2												
	26	Fe	2	2	6	2	6	6	2												
	27	Co	2	2	6	2	6	6	2												
	28	Ni	2	2	6	2	6	6	2												
	29	Cu	2	2	6	2	6	6	6	8											
	30	Zn	2	2	6	2	6	10	1	2											
	31	Ga	2	2	6	2	6	10	2	2	1										
	32	Ge	2	2	6	2	6	10	2	2	2										
	33	As	2	2	6	2	6	10	2	2	3										
	34	Se	2	2	6	2	6	10	2	2	4										
	35	Br	2	2	6	2	6	10	2	2	5										
	36	Kr	2	2	6	2	6	10	2	2	6										

Период	Z	Элемент	n = 1		n = 2		n = 3			n = 4				n = 5				n = 6			
			1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f	5s	5p	5d	5f	6s	6p	6d	6f	
5	37	Rb	2	2	6	2	6	10	6			2	6		1						
	38	Sr	2	2	6	2	6	10	6			2	6		2						
	39	Y	2	2	6	2	6	10	6			2	6	1	2						
	40	Zr	2	2	6	2	6	10	6			2	6	2	2						
	41	Nb	2	2	6	2	6	10	6			2	6	4	1						
	42	Mo	2	2	6	2	6	10	6			2	6	5	1						
	43	Tc	2	2	6	2	6	10	6			2	6	6	1						
	44	Ru	2	2	6	2	6	10	6			2	6	7	1						
	45	Rh	2	2	6	2	6	10	6			2	6	8	1						
	46	Pd	2	2	6	2	6	10	6			2	6	10							
	47	Ag	2	2	6	2	6	10	6			2	6	10	1						
	48	Cd	2	2	6	2	6	10	6			2	6	10	2						
	49	In	2	2	6	2	6	10	6			2	6	10	2						
	50	Sn	2	2	6	2	6	10	6			2	6	10	2						
	51	Sb	2	2	6	2	6	10	6			2	6	10	2						
	52	Te	2	2	6	2	6	10	6			2	6	10	2						
	53	I	2	2	6	2	6	10	6			2	6	10	2						
	54	Xe	2	2	6	2	6	10	6			2	6	10	2						

Продолжение табл. 3.1

Период	Z	Элемент	n = 1		n = 2		n = 3		n = 4				n = 5				n = 6			
			1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f	5s	5p	5d	5f	6s	6p	6d	6f
6	55	Cs	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6			1			
	56	Ba	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6			2			
	57	La	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6			2			
	58	Ce	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6			2			
	59	Pr	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6			2			
	60	Nd	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6			2			
	61	Pm	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6			2			
	62	Sm	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6			2			
	63	Eu	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6			2			
	64	Gd	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6			2			
	65	Tb	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6			2			
	66	Dy	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6			2			
	67	Ho	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6			2			
	68	Er	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6			2			
	69	Tm	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6			2			
	70	Yb	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6			2			
	71	Lu	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6			2			
	72	Hf	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6			2			
	73	Ta	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6			2			
	74	W	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6			2			
	75	Re	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6			2			
	76	Os	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6			2			
	77	Ir	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6			2			
	78	Pt	2	2	6	2	6	10	2	6	10		2	6			2			
	9	u					0			0	4					0				

Период	Z	Элемент	$n = 1$		$n = 2$		$n = 3$			$n = 4$				$n = 5$				$n = 6$			
			1s		2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f	5s	5p	5d	5f	6s	6p	6d	6f
6	80	Hg	2		2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2			
	81	Tl	2		2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	1		
	82	Pb	2		2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	2		
	83	Bi	2		2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	3		
	84	Po	2		2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	4		
	85	At	2		2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	5		
7	6	n							0			0	4			0					
	87	Fr	2		2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	6		
	88	Ra	2		2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	6	1	
	89	Ac	2		2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	6	2	
	90	Th	2		2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10		2	6	2	
	91	Pa	2		2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	2		6	1	
	92	U	2		2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	3		6	1	
	93	Np	2		2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	4		6	1	
	94	Pu	2		2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	5		6	1	
	95	Am	2		2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	7		6	1	
	96	Cm	2		2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	7		6		
	97	Bk	2		2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	8		6	1	
	98	Cf	2		2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	9		6	1	
	99	Es	2		2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	10		6	1	
	100	Fm	2		2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	11		6	1	
	101	Md	2		2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	12		6	1	
	102	No	2		2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14		6		
	103	Lm	2		2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14		6	1	
	104	Ku	2		2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14		6	2	
	105	Ns	2		2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14		6	3	

А поскольку от числа электронов на внешнем уровне в основном зависят свойства элементов, то и они периодически повторяются. В этом физический смысл периодического закона. Номер периода соответствует числу энергетических уровней атомов, т. е. расположение элементов в Периодической системе обусловлено строением атомов. В зависимости от того, какой подуровень заполняется элементами, все элементы делят на четыре типа.

1.s-Элементы. Заполняется s-подуровень внешнего уровня (s^1 – s^2). Сюда относятся элементы IA–IIA-групп, а также H и He, т. е. первые два элемента каждого периода.

2.p-Элементы. Заполняется p-подуровень внешнего уровня (p^1 – p^6). Это элементы IIIA–VIIIA-групп, т. е. последние 6 элементов каждого периода (кроме 1-го и 7-го).

3.d-Элементы. Заполняется d-подуровень второго снаружи уровня (d^1 – d^{10}), а на наружном уровне остается 1 или 2 электрона (у Pd – нуль). К ним относятся элементы IB–VIIIB-групп, т. е. элементы вставных декад больших периодов, расположенные между s- и p- (их также называют переходными элементами).

4.f-Элементы. Заполняется f-подуровень третьего снаружи уровня (f^1 – f^{14}), а на внешнем уровне остается два электрона. Это лантаноиды и актиноиды.

Таким образом, распределение электронов в атомах с ростом порядкового номера существенно усложняется и невозможно себе представить, чтобы s-, d-поверхности внутренних электронов перекрывались сложного вида поверхностями p-, f-орбиталей, в которых движение электронов должно проходить через центр атома – ядро, т. е. пронизывать поверхности вероятности нахождения внутренних электронов.

Анализируя все вышесказанное, можно прийти к выводу, что применение уравнения Шредингера для изучения состояния электронов в атомах периодической системы Д. И. Менделеева вызывает ряд серьезных возражений, в том числе:

1. Если исходить из условия, что электрон обладает волновыми свойствами, то неясно, как эта волна-электрон раздваивается, чтобы преобразоваться в две встречные волны и образовать стоячую волну.

2. Решение уравнения Шредингера в виде функции Ψ само по себе не имеет физического смысла, и лишь использование квадрата этой функции характеризует вероятность нахождения электрона в той или иной части пространства, описываемой этой Ψ -функцией.

3. Использование радиальной составляющей $R(r)$ этой функции характеризует наибольшее значение ее и, следовательно, вероятность нахождения электрона в области ядра, что противоречит реальности, и лишь искусственный математический прием позволяет уйти от этого условия.

4. Решение уравнения Шредингера практически реализовано только для атома водорода или для одноэлектронного водородоподобного иона. При этом показано, что форма поверхности, описываемая одним единственным электроном, может иметь вид сферы (s-типа), трех двухлепестковых эллипсоидов (p-типа), четырех четырехлепестковых эллиптического типа и пятой орбитали,

имеющей форму гантели, которая характеризуется двумя большими областями электронной плотности вдоль оси и небольшой тороидальной орбиталью в плоскости xy (d-орбитали), семью поверхностями более сложной формы (f-типа) и т. д. Не имея возможности решения уравнения Шредингера для многоэлектронной системы, перенесли результаты решения для одноэлектронного атома на многоэлектронные атомы, приняв условия, что первые внутренние электроны могут находиться только в s-состоянии, последующие в p-, d-, f- и т. д., однако не показали, как же движение внешних электронов по сложным формам орбит с переходом через положения ядра атома может сосуществовать с движением электронов внутренних орбит по сферическим поверхностям.

5. Принято, что спаренными электронами являются те, у которых спиновые магнитные моменты антипараллельны, однако антипараллельные магнитные моменты имеют свойства отталкиваться, а не притягиваться. Более того, надо полагать, что спаренные электроны находятся друг против друга, т. е. без сдвига по фазе. Если же они будут находиться на орбитах противоположно друг другу, т. е. со сдвигом по фазе 180° , то с учетом близости орбит вращения электронов, никакого спинового магнитного взаимодействия между ними не будет. Но если спаренные электроны будут вращаться по параллельным орбитам и друг против друга, т. е. без сдвига по фазе, то сила электрического отталкивания между ними будет существенно больше силы магнитного спинового притяжения. В связи с этим можно считать, что решающая роль магнитного спинового взаимодействия существенно преувеличена.

Таким образом, имеются серьезные возражения в использовании уравнения Шредингера для исследования состояния электрона в атоме водорода, не говоря уже о многоэлектронных атомах.

Как видим, квантовая механика позволяет обосновать возможность существования спектров излучения-поглощения энергии электронами атомов и даже расщепления уровней и подуровней энергии под действием магнитного и электрического полей. Кроме того, известно, что излучение и поглощение этой энергии происходит в виде фотонов соответствующей частоты. Однако ни теория Бора, ни квантовая механика, развитая Шредингером, Гейзенбергом и Дираком, не оговаривают очень важного момента, даже не затрагивают его. А важность момента заключается в том, как электрон поглощает фотон, куда девается этот фотон в электроны и в атоме в целом. Можно только догадываться, что орбитальный электрон как бы поглощает фотон в полном смысле этого слова, т. е. фотон сливается в единую массу с электроном и как-то в нем расщепляется, повышая его энергию.

Если это происходит таким образом, то при поглощении фотонов и нагревании тела должна возрастать масса нагреваемого вещества. Однако, как показывает опыт, при нагревании вес тела не только не увеличивается, но даже наоборот – снижается. Этот давно известный факт является одним из важнейших моментов рассматриваемой проблемы.

Если фотон поглощается электроном, то почему он испускается им с такой высокой скоростью (скоростью света) и причем постоянной?

Другой не менее важный вопрос: почему внешние электроны поглощают и испускают фотоны от инфракрасного до ультрафиолетового спектра, а внутренние электроны атома, расположенные ближе к ядру, поглощают и испускают фотоны рентгеновского спектра, а нуклоны в ядре – фотоны наиболее высокой частоты – гамма-кванты?

Важно не только ответить на каждый из этих и других вопросов, но и найти между ними общую закономерность, связующую нить.

Некоторые исследователи считают, что современные модели квантовой механики сложны, ненаглядны и не удовлетворяют критерию логической очевидности, что приводит к их малой работоспособности. Так, например, Д. Н. Кожевников [13, стр. 94] в статье «Модель электрона в виде сверхпроводника с током» предлагает мыслить и изображать электрон в виде замкнутого контура в сверхпроводящем состоянии, в котором движется распределенный отрицательный заряд, суммарно равный элементарному. Модель Д. Н. Кожевникова основана на предложении существования всемирного эфира в виде активной среды, в которой имеют место резонансные волновые процессы – элементарные частицы. По его мнению, частицы являются, по сути, преобразователями внутренней или скрытой энергии эфира в энергию их электрического и магнитного поля. Замкнутый сверхпроводящий контур, моделирующий электрон, геометрически изображается гибким кольцом, способным к деформациям как в продольном, так и в поперечном направлениях. Диаметр и величина поперечной деформации кольца, моделирующего электрон в атоме или молекуле, определяется величиной и формой электростатического поля ядра атома или системы ядер в молекулах. Размер колец, моделирующих электроны внешней оболочки, является величиной, определяющей размер атома. Подобной модели электрона в виде сплошного кольца придерживается и Ф. М. Канарев [7].

Из формул (3.9) и (3.10) следует, что потенциальная энергия взаимодействия электрона с ядром вдвое превышает кинетическую энергию движения электрона по орбите, следовательно, необходима дополнительная внешняя по отношению к электрону энергия, сдерживающая его падение на ядро.

Если бы электрон ничего не сдерживало бы, то он очень быстро упал бы на ядро, так как электрически противоположно заряженные электрон и ядро притягиваются друг к другу с большой силой.

Можно рассчитать ускорение свободного падения электрона в поле ядра атома, например водорода.

Потенциальная энергия электрона в поле ядра атома

$$U = -m_e g_{\text{я}} H = -m_e g_{\text{я}} \cdot r, \quad (3.46)$$

где $g_{\text{я}}$ – ускорение свободного падения электрона в поле ядра атома.

Если принимать, что потенциальная энергия электрона в атоме определяется его силами электрического взаимодействия, т. е.

$$U = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad (3.47)$$

$$\text{то} \quad -m_e g_a r = -\frac{Z \cdot e^2}{4\pi\epsilon_o r} \quad (3.48)$$

$$\text{и} \quad g_a = \frac{Z \cdot e^2}{4\pi\epsilon_o r^2 m_e}. \quad (3.49)$$

Принимая радиус вращения электрона $r = 10^{-10}$ м, по формуле (3.49) можно оценить ускорение его свободного падения на ядро для атома водорода ($Z = 1$)

$$g_a = \frac{1 \cdot 1,6^2 \cdot 10^{-38}}{4 \cdot 3,14 \cdot 8,85 \cdot 10^{-12} \cdot 10^{-20} \cdot 9,11 \cdot 10^{-31}} = 2,52 \cdot 10^{22} \text{ м/с}^2.$$

Таким образом, за счет сил электрического притяжения электрона с ядром создается ускорение его свободного падения $g_a = 2,52 \cdot 10^{22} \text{ м/с}^2$, однако электрон не падает на ядро. Почему? Ответ на этот вопрос дает предлагаемая нами ядерно-электронно-фотонная модель атома на основе концепции вращения фотонов по определенным орбитам вокруг электронов атома и его ядра (рис. 3.4). Для более глубокого понимания этой модели рассмотрим строение наиболее простого атома водорода – протия.

Как принято сегодня, он содержит в ядре один протон, вокруг которого на определенной орбите в зависимости от величины энергии вращается электрон.

При этом электрон может испускать до шести серий фотонов, подчиняющихся определенным спектральным закономерностям. В таблице 3.2 приведены количественные характеристики атома водорода, соответствующие линиям его спектра поглощения при переходах электрона на различные энергетические уровни в соответствующих спектральных сериях излучения (поглощения). Расчет радиуса вращения электрона проводился по формуле (3.6), а длины волн – в соответствии с (3.4) по формуле

$$\lambda = \frac{8c \cdot h^3 \cdot \epsilon_o^2 \cdot (m^2 \cdot n^2)}{m_e \cdot e^4 \cdot (m^2 - n^2)}. \quad (3.50)$$

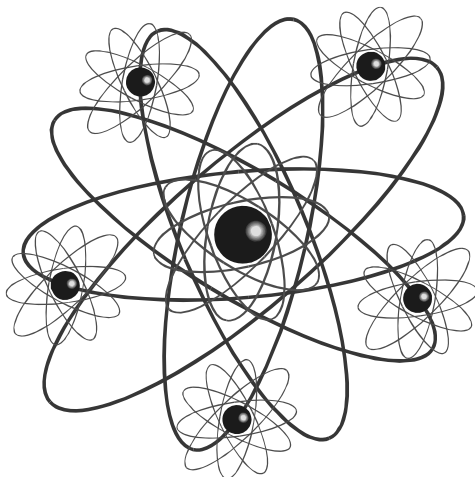


Рис. 3.4. Ядерно-электронно-фотонная модель атома

Таблица 3.2

**Характеристики атома водорода, соответствующие линиям его спектра
поглощения – излучения**

Серия Лай- мана $n = 1$	m	2	3	4	5	6	20
	λ , нм	121,568	102,573	97,274	94,975	93,781	91,176
	E_I , эВ	10,198	12,086	12,747	13,053	13,219	13,596
	r , нм	0,21256	0,47827	0,85026	1,32853	1,91308	21,25648
	$A_{своб}$, нм	9,679	8,166	7,734	7,561	7,466	7,259
	$A_{связ}$, нм	0,04011	0,10698	0,20054	0,32094	0,46803	5,34899
Серия Баль- мера $n = 2$	m	3	4	5	6	7	20
	λ , нм	656,467	486,272	434,171	410,292	397,122	366,700
	E_I , эВ	1,888	2,549	2,855	3,022	3,122	3,389
	r , нм	0,47827	0,85026	1,32853	1,91308	2,60385	21,25648
	$A_{своб}$, нм	52,266	38,716	34,567	32,666	31,617	29,036
	$A_{связ}$, нм	0,06686	0,16047	0,28082	0,42791	0,60176	5,3198
Серия Паше- на $n = 3$	m	4	5	6	7	8	20
	λ , нм	1875,620	1282,262	1094,112	1005,215	954,861	820,584
	E_I , эВ	0,661	0,967	1,133	1,233	1,298	1,511
	r , нм	0,85026	1,32853	1,91308	2,60385	3,40096	21,25648
	$A_{своб}$, нм	149,332	102,091	87,111	80,033	76,024	65,333
	$A_{связ}$, нм	0,093607	0,21394	0,36105	0,53489	0,73548	5,3490
Серия Брек- кетта $n = 4$	m	5	6	7	8	9	20
	λ , нм	4052,266	2625,868	2266,120	1945,088	1817,909	1458,816
	E_I , эВ	0,306	0,472	0,572	0,637	0,682	0,848
	r , нм	1,32853	1,91308	2,60385	3,40096	4,30434	21,25648
	$A_{своб}$, нм	322,632	209,066	180,423	154,863	144,737	116,147
	$A_{связ}$, нм	0,120352	0,262449	0,421819	0,64188	0,869212	5,34899
Серия Пфун- да $n = 5$	m	6	7	8	9	10	20
	λ , нм	7459,853	4653,774	3740,553	3296,983	3039,199	2279,399
	E_I , эВ	0,166	0,266	0,331	0,376	0,408	0,544
	r , нм	1,91308	2,60385	3,40096	4,30434	5,314	21,25648
	$A_{своб}$, нм	593,937	370,534	297,814	262,499	241,974	181,480
	$A_{связ}$, нм	0,14709	0,320939	0,52152	0,74886	1,00293	5,34899
Серия Хемф- ри $n = 6$	m	7	8	9	10	11	20
	λ , нм	12371,879	7502,481	5908,204	5128,694	4672,501	3282,336
	E_I , эВ	0,100	0,165	0,209	0,242	0,265	0,378
	r , нм	2,60385	3,40096	4,30434	5,314	6,42994	21,25648
	$A_{своб}$, нм	985,022	597,331	470,398	408,335	372,014	261,332
	$A_{связ}$, нм	0,17384	0,37443	0,60176	0,85583	1,13666	5,34899

Анализ таблицы 3.2 показывает, что длины электромагнитных волн первых трех серий (Лаймана, Бальмера и Пашена) изменяются в неперекрывающихся диапазонах, а начиная с серии Бреккетта длины волн последующих серий частично перекрываются с предыдущей.

Таким образом, вокруг единственного электрона протия на своих орбиталях вращаются фотоны, объединенные в спектральные серии с определенной закономерностью изменения длины волны и своего положения в орбитали спек-

тральной серии. Плоскости орбиталей спектральных серий фотонов вероятно расположены под определенными углами друг к другу, что проявляется в условиях фазовых переходов веществ с участием водорода в молекулах, например воды в твердом состоянии (различные модификации льда) или твердых углеводов – нормальных парафинов при изменении их температуры. Вся эта сложная электронно-фотонная система, которая в зависимости от величины температуры может содержать до шести или более фотонных орбиталей электромагнитного поля, вращается вокруг ядра. Однако ядро представлено не просто «голым» протоном, а протоном, вокруг которого также имеется свое электромагнитное поле, состоящее из одного или нескольких фотонов высокой энергии – гамма-квантов. В результате электрическое взаимодействие между орбитальным электроном и протоном ядра осуществляется через взаимодействие их электромагнитных фотонных полей. Причем электромагнитные поля электрона и протона ядра направлены так, что противодействуют сближению электрических зарядов электрона и протона.

Это и является тем сдерживающим фактором, который не позволяет упасть электрону на ядро, а находится на определенной стационарной орбите до тех пор, пока не излучится фотон с фотонной орбитали.

Таким образом, удержать электрон от падения на протон и их аннигиляции может только электромагнитное поле фотонов вокруг внешнего электрона и протона ядра. Энергия этого поля

$$E = \frac{e^2}{4\pi \cdot \epsilon_0 \cdot r_0} = \frac{1,6^2 \cdot 10^{-38}}{4 \cdot 3,14 \cdot 8,85 \cdot 10^{-12} \cdot 0,529 \cdot 10^{-10}} = 4,35 \cdot 10^{-18} \text{ Дж}. \quad (3.51)$$

Эта энергия в переводе на эВ составляет $\frac{1\text{эВ} \cdot 4,35 \cdot 10^{-18} \text{ Дж}}{1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}} = 27,2\text{эВ}$, из неё

половина приходится на долю поля протона и половина на долю поля электрона, т. е. по 13,6 эВ, что и соответствует потенциалу ионизации атома водорода.

Если произойдет излучение фотона с внешней или внутренней фотонной орбитали, то это приведет к уменьшению напряженности электромагнитного внешнего поля фотонов вокруг электрона и в результате электрического взаимодействия внешнего электрона и протона ядра произойдет их сближение, что приведет к некоторой деформации электромагнитного поля и фотонных орбиталей электрона.

Расчет амплитуды излучаемой электромагнитной волны в первом варианте нами проводился по выражению (2.24), как $A = \frac{\lambda}{4\pi}$, что соответствует свободно летящему фотону.

Анализ таблицы 3.2 показывает, что в этом случае $A = A_{\text{своб}}$ и амплитуды колебания фотонов существенно превышают радиус вращения электрона вокруг ядра. Это может свидетельствовать о том, что нахождение фотона в атоме оказывает существенное влияние на амплитуду колебания его разноименно заряженных полумасс. Что происходит с фотоном, когда он из свободно летящего состояния попадает в поле влияния электрона атома? Так как электрон в атоме

сам с большой скоростью вращается вокруг ядра, то фотон, вращаясь вокруг такого электрона, вместе с ним вращается и вокруг ядра, т. е. его движение становится сложным. Если фотон в свободном состоянии имеет скорость света, то при вращении его вместе с электроном вокруг ядра он обладает результирующей скоростью большей, чем скорость света. Энергия такого фотона в атоме резко увеличивается, а увеличение энергии фотона соответствует эквивалентному увеличению частоты его колебания и уменьшению длины волны. Последнее в соответствии с формулой (2.24) приводит к уменьшению амплитуды разлета разноименно заряженных полумасс фотона. Вероятно, в условиях вращения фотона вокруг электрона в атоме расчет амплитуды колебания фотона должен проводиться с учетом влияния этого фактора. В связи с этим можно принять, что в условиях вращения фотонов вокруг электрона в атоме их амплитуды колебания связаны с изменением радиуса вращения электрона при его переходе с одной орбиты на другую, т. е.

$$A_{связ} = \frac{\Delta r}{4} = \frac{r_m - r_n}{4} = (m^2 - n^2) \frac{\hbar^2 \pi \epsilon_o}{m_e \cdot Z \cdot e^2} = \frac{\hbar^2 \epsilon_o (m^2 - n^2)}{4\pi \cdot m_e \cdot Z \cdot e^2}. \quad (3.52)$$

Как видно из табл. 3.2 и 3.3, расчет амплитуды колебания разноименно заряженных полумасс фотонов в связанном состоянии ($A_{связ}$), т. е. в условиях вращения их вокруг электрона в атоме, дает величины существенно меньшие, чем в свободном состоянии фотонов. Из табл. 3.3 следует, что соотношение $\frac{A_{своб}}{A_{связ}}$ колеблется в очень широких пределах от 1,3571 в серии Лаймана до 5666,25 в серии Хемфри.

Таблица 3.3

**Сопоставление амплитуд колебания фотонов в свободном состоянии
и в связанном состоянии в атоме водорода**

Серия	Диапазон изменения			
	λ , нм	$A_{своб}$, нм	$A_{связ}$, нм	$\frac{A_{своб}}{A_{связ}}$
Лаймана	121,568–91,176	9,8039–7,2592	0,04011–5,3489	244,42–1,3571
Бальмера	656,467–364,704	52,266–29,037	0,06686–5,3198	781,723–5,458
Пашена	1875,620–820,584	149,333–65,333	0,093607–5,3490	1595,32–12,214
Брекетта	4052,266–1458,816	322,632–116,178	0,120352–5,34899	2680,73–21,706
Пфунда	7459,853–2279,399	593,937–181,481	0,14709–5,34899	4037,92–33,928
Хемфри	12371,879–3282,336	985,022–261,332	0,17384–5,34899	5666,25–48,856

А что же происходит при излучении фотона в свободное состояние? Масса фотона до, во время и после излучения остается постоянной. Формула А. Энштейна $E_{своб} = h\nu_{своб} = mc^2$ справедлива для свободно летящего фотона. При вращении фотона вокруг электрона, а вместе с ним вокруг ядра, энергия фотона возрастает до $E > E_{своб}$, а частота до $\nu > \nu_{своб}$ и результирующая скорость

v становится больше скорости света, т. е. $v > c$. Остается лишь постоянной масса фотона и поэтому становится справедливым выражение

$$E = h\nu = mv^2 \quad (3.53)$$

для фотона, вращающегося вокруг электрона в атоме.

Следовательно, в момент освобождения фотона от влияния электрона, вращающегося в атоме вокруг ядра, амплитуда колебания фотона резко возрастает. Вероятно, этим объясняется резкое увеличение объема газа по сравнению с жидким топливом при его сгорании и выделении тепла, т. е. за счет выделения множества свободных фотонов разной, но большей амплитуды колебания, чем при вращении фотонов вокруг электронов атома, т. е. в связанном состоянии.

Таким образом, предлагаемая нами модель атома, в которой существенную роль играет фотонное электромагнитное поле вокруг электронов атома и вокруг ядра атома, позволяет снять многие нерешенные вопросы в конструкции атома и расширить наши представления о нем. А что же в таком случае позволяет определить квантовая механика на основе решения уравнения Шредингера? Как отмечено выше, в уравнении Шредингера за основу принято уравнение стоячей волны, т. е. волны, в которой все точки среды колеблются с одинаковой частотой, но с различной амплитудой. В связи с этим для понимания достоверности физического смысла решения уравнения Шредингера вернемся к предложенной модели фотона.

Как видно из рис. 2.2, предложенная нами модель фотона полностью удовлетворяет понятию стоячая волна, в которой в одних точках пространства пучности, а в других – узлы стоячей волны, которые образуются за счет сложного поступательно-вращательно-колебательного движения разноименно заряженных полумасс фотона.

Можно ли в связи с этим применить только к фотону уравнение Шредингера? Вероятно, в несколько измененном виде оно к нему применимо.

Так по аналогии с формулой (3.21) можно записать

$$\nabla^2 \Psi + \frac{4\pi^2 (m_f c)^2}{h^2} \Psi = 0, \quad (3.54)$$

$$\text{или} \quad \nabla^2 \Psi + \frac{8\pi^2 m_f}{h^2} E_{\text{кф}} \Psi = 0, \quad (3.55)$$

$$\text{или} \quad \nabla^2 \Psi + \frac{4\pi^2 \nu^2}{c^2} \Psi = 0, \quad (3.56)$$

где m_f – масса фотона $\left(m_f = \frac{h\nu}{c^2}\right)$; $E_{\text{кф}}$ – кинетическая энергия фотона; c – скорость света.

Фотон в момент слета разноименно заряженных полумасс формирует узел стоячей волны и представляет собой частицу с определенной массой m_f и импульсом $p_f = m_f \cdot c$, но именно фотон как частица может проявлять волновые свойства за счет поступательно-вращательно-колебательного движения двух разноименно заряженных полумасс, которые, разлетаясь на максимальное рас-

стояние, формируют пучности стоячей волны. Поэтому фотон обладает одновременно и свойствами волны, и свойствами частицы.

В связи с этим в стационарном уравнении Шредингера $\psi = 2A \cos kx$, $\psi = A_{cm}$ – амплитуда стоячей фотонной волны, которая зависит от параметра x и длины волны $\left(k = \frac{2\pi}{\lambda}\right)$, а A – амплитуда волнового колебательного процесса любой полумассы фотона. То есть в местах пучностей и образования гантелей разноименно заряженные полумассы фотона разлетаются до максимальной амплитуды $\psi_{\max} = 2A$, а между ними в местах узлов разноименно заряженные полумассы фотонов слетаются в «точку».

Таким образом, уравнение $\Psi = 2A \cos kx$ описывает формирование фотонной стоячей волны вокруг траектории полета электрона.

Аналогичное уравнение можно написать для каждого фотона, вращающегося на орбитали вокруг электрона, т. е.

$$\Psi_1 = 2A_1 \cos \frac{2\pi}{\lambda} x, \quad (3.57)$$

$$\Psi_2 = 2A_2 \cos \frac{2\pi}{\lambda_2} x, \quad (3.58)$$

$$\Psi_3 = 2A_3 \cos \frac{2\pi}{\lambda_3} x, \quad (3.59)$$

.....

$$\Psi_n = 2A_n \cos \frac{2\pi}{\lambda_n} x \quad (3.60)$$

и соответственно дифференциальные уравнения вида, аналогичного (3.51):

$$\nabla^2 \Psi_1 + \frac{8\pi^2 V_1^2}{c^2} \Psi_1 = 0, \quad (3.61)$$

$$\nabla^2 \Psi_2 + \frac{8\pi^2 V_2^2}{c^2} \Psi_2 = 0, \quad (3.62)$$

$$\nabla^2 \Psi_3 + \frac{8\pi^2 V_3^2}{c^2} \Psi_3 = 0, \quad (3.63)$$

.....

$$\nabla^2 \Psi_n + \frac{8\pi^2 V_n^2}{c^2} \Psi_n = 0. \quad (3.64)$$

С другой стороны, электрон, как любая элементарная частица, по нашему мнению, не может быть представлен в виде просто плотной массы, радиус которой ограничен этой массой. Если исходить из условия, что вращающиеся вокруг электрона фотоны есть необъемлемая часть электрона, которые характеризуют поверхностную часть электрона, его поверхностную электромагнитную атмосферу, то становится понятным, почему электрон обладает и корпускулярными и волновыми свойствами. Так как вокруг каждой элементарной частицы есть электромагнитное поле в виде вращающихся вокруг нее фотонов, то каждая элементарная частица одновременно проявляет и свойства частицы, и свой-

ства волны, при этом не сама частица движется по волновому закону, а волновые процессы фотонного электромагнитного поля проявляются над поверхностью этой частицы, и это электромагнитное поле является неотъемлемой особенностью поверхности каждой частицы, а следовательно, можно считать и самой частицы. В тех опытах, в которых есть условия проявления этого электромагнитного поля частицы, оно проявляется и фиксируются волновые свойства частицы, а где нет этой возможности – проявляются только корпускулярные свойства частицы.

Если исходить из условия, что размер частицы определяется размером ее электромагнитного фотонного поля, то размер элементарной частицы – величина переменная и зависит от температуры, так как объем самого фотонного поля может меняться в зависимости от температуры. В связи с этим при низких температурах электрон и другие элементарные частицы будут характеризоваться минимальным размером и слабо проявлять волновые свойства в идентичных условиях.

Если вращающиеся вокруг электрона фотоны есть неотъемлемая его часть, составляя внешнюю электромагнитную поверхность электрона и, следовательно, электрон обладает волновыми свойствами, то внешняя поверхность, которой электрон взаимодействует с другими элементарными частицами, все время изменяется по волновому закону стоячей волны. Причем длина волны этой внешней волновой поверхности не остается постоянной, а все время меняется в соответствии с температурой.

В уравнении Шредингера введена кинетическая энергия электрона $E_k = \frac{m_e v^2}{2}$

и импульс электрона $p = mv = \frac{h}{\lambda}$. Если исходить из условия, что скорость вращения электрона по орбите остается постоянной, то электрон должен характеризоваться и постоянством длиной волны при разном его энергетическом состоянии и разной температуре. Фактически при излучении фотона электрон переходит на более низший энергетический уровень и приближается к ядру. Это приводит к увеличению его центростремительной силы и к увеличению скорости вращения. В соответствии с формулой

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} \quad (3.65)$$

электрон должен характеризоваться меньшей длиной волны. Если же исходить из условия, что волновые свойства электрона определяются фотонами, вращающимися вокруг него на внешней фотонной орбитали, то становится понятным, что, излучив фотоны большой длины волны, электрон должен обладать волновыми свойствами с меньшей длиной волны, так как вокруг него остаются вращаться фотоны меньшей длины волны. Следовательно, волновые свойства электрона в каждый момент его энергетического состояния определяются характеристикой внешнего фотона на внешней фотонной орбитали вокруг электрона. Если исходить из того, что электромагнитное фотонное поле, вращающееся вокруг электрона, есть его неотъемлемая часть и составляет часть его массы, то, следовательно, в моменты излучения и поглощения фотонов электроном у него меняется масса, т. е. масса элек-

трона m_e не есть величина постоянная и ее можно разделить на две составляющие: постоянную массу плотной части электрона $m_{en} = const$ и переменную массу электрона за счет его электромагнитного фотонного поля Σm_{fi} . Таким образом, если рассматривать движение фотонов вокруг электрона, который в свою очередь вращается вокруг ядра атома, то общая картина их совместного движения является сложной. В этом случае целесообразно было бы движение постоянной массы плотной части электрона по орбите вокруг ядра описывать обычным уравнением классической механики как движение тела по определенной орбите, как, например Земли вокруг Солнца, а движение фотонов вокруг электронов – волновым уравнением стоячей волны, типа уравнения Шредингера. При этом каждый из фотонов в зависимости от своей частоты (энергии, массы) будет описывать вокруг вращающегося электрона свою поверхность в виде стоячей волны (рис. 3.5).

Внешняя поверхность этого электромагнитного поля будет описываться наиболее низкочастотным фотоном внешней фотонной орбитали при данной температуре, а другие более частотные фотоны будут описывать каждый свою внутреннюю поверхность.

Таким образом, уравнение Шредингера не описывает поверхность плотности вероятности нахождения электрона. Возможно, оно приближенно характеризует поверхность, которую описывает внешний фотон на внешней орбитали в каждый момент времени и ни о какой плотности вероятности нахождения электрона вокруг ядра речи не должно быть. Электрон все время вращается по своей круговой или почти круговой орбите, которая ближе или дальше удалена от ядра при излучении или поглощении очередного фотона.

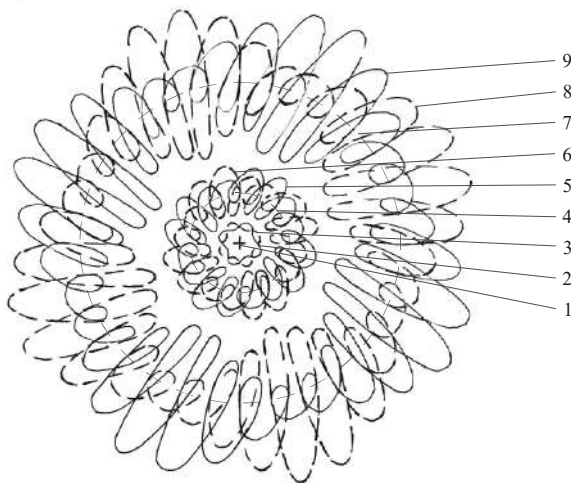


Рис. 3.5. Ядерно-электронно-фотонная модель атома со стоячей фотонной волной внутреннего и внешнего электронов. 1 – ядро атома; 2, 3 – отрицательно и положительно заряженные полумассы фотона (гамма-кванта), вращающегося вокруг ядра атома; 4, 7 – орбиты внутреннего и внешнего электронов; 5, 9 – положительно заряженные полумассы фотонов, вращающихся вокруг внутреннего и внешнего электронов; 6, 8 – отрицательно заряженные полумассы фотонов, вращающихся вокруг внутреннего и внешнего электронов

Если исходить из условия, что масса электрона состоит из его плотной части $m_{en} = const$ и переменной части за счет электромагнитного фотонного поля $\sum m_{fi}$ и что в целом электрон проявляет волновые свойства за счет своей электромагнитной фотонной атмосферы с переменной фотонной массой, то можно воспользоваться стационарным уравнением стоячей волны Шредингера, но общую массу электрона представить в виде $m_e = (m_{en} + \sum m_{fi})$, при этом $\sum m_{fi}$ рассматривать в виде энергии, т. е.

$$\frac{m_{en} v_e^2}{2} = E_k, \quad (3.66)$$

$$a \quad \frac{\sum m_{fi} \cdot c^2}{2} = \sum \mathcal{E}_{fi} = \sum h \nu_i, \quad (3.67)$$

где E_k – кинетическая энергия движения по орбите вокруг ядра плотной части массы электрона; $\sum \mathcal{E}_{fi}$ – суммарная энергия фотонного электромагнитного поля всех частот ν_i фотонов, вращающихся вокруг электрона. В этом случае воспользуемся уравнением Шредингера вида

$$\nabla^2 \Psi + \left(\frac{2\pi}{\lambda} \right)^2 \cdot \Psi = 0 \quad (3.68)$$

и соотношением де Бройля

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{(m_{en} v_e + \sum m_{fi} c)}. \quad (3.69)$$

Так как волновые свойства электрона обусловлены вращающимися вокруг него фотонами, то полный импульс можно разделить на две составляющие – импульс постоянной плотной массы электрона, движущейся со скоростью v_e вокруг ядра ($p_{en} = m_{en} \cdot v_e$), и импульс массы вращающихся вокруг электрона фотонов ($p_f = \sum m_{fi} c$). Тогда уравнение (3.68) преобразуется к виду

$$\nabla^2 \Psi + \frac{4\pi^2}{h^2} (m_{en} v_e + \sum m_{fi} c)^2 \Psi = 0 \quad (3.70)$$

$$\text{или} \quad \nabla^2 \Psi + \frac{4\pi^2}{h^2} [m_{en}^2 v_e^2 + 2m_{en} v_e \cdot \sum m_{fi} c + (\sum m_{fi} c)^2] \Psi = 0. \quad (3.71)$$

Проведем преобразование последнего уравнения:

$$\nabla^2 \Psi + \frac{8\pi^2 m_{en}}{h^2} \cdot \frac{m_{en} v_e^2}{2} \cdot \Psi + \frac{8\pi^2 m_{en} \sum m_{fi} c v_e}{h^2} \cdot \Psi + \frac{8\pi^2 \sum m_{fi} \cdot \sum m_{fi} c^2}{2h^2} \cdot \Psi = 0. \quad (3.72)$$

Подставляя выражения (3.66) и (3.67) в (3.72), получим:

$$\nabla^2 \Psi + \frac{8\pi^2 m_{en}}{h^2} E_{kn} \Psi + \frac{8\pi^2 m_{en} v}{hc} \sum \nu_{fi} \Psi + \frac{16\pi^2}{c^2} \sum \nu_{fi}^2 \Psi = 0. \quad (3.73)$$

Если принять $m_{en} = 9,1 \cdot 10^{-31}$ кг, $v_e = 5 \cdot 10^6$ м/с, то слагаемое $(8\pi^2 \cdot m_{en} \cdot E_{kn})/h^2 = const = 1,857 \cdot 10^{21}$, $(8\pi^2 \cdot m_{en} \cdot v_e)/hc = 1,8 \cdot 10^3$, а $(16\pi^2)/c^2 = 1,75 \cdot 10^{-15}$ и уравнение (3.73) преобразуется к виду

$$\nabla^2\Psi + (1,857 \cdot 10^{21} + 1,8 \cdot 10^3 \sum \nu_{fi} + 1,75 \cdot 10^{-15} \sum \nu_{fi}^2) \cdot \Psi = 0. \quad (3.74)$$

На основании решения этого уравнения можно рассчитать амплитуду стоячей фотонной волны для фотона соответствующей частоты. Так как вокруг электрона одновременно вращаются фотоны разной частоты, то уравнение (3.74) необходимо последовательно решать для всего спектра фотонов электрона данного элемента, и, таким образом, результирующее решение и вид общей поверхности, описываемой всеми летящими вокруг электрона фотонами, будет чрезвычайно сложным.

Учитывая, что амплитуда стоячей фотонной волны прямо зависит от длины волны и с увеличением длины волны пропорционально возрастает, то внешняя поверхность всей совокупности стоячих фотонных волн вокруг электрона будет описываться стоячей фотонной волной наименьшей частоты всего спектра частот при данной температуре вещества.

Решение этой задачи является интересным и важным. Однако не менее важно проанализировать и уметь конкретно рассчитать количество длин стоячих волн фотона определенной частоты, которые будут формироваться на одной длине орбиты электрона вокруг ядра. Для решения этого вопроса оценим шаг спирали фотона вокруг электрона. Для этого необходимо определить время одного полного оборота фотона вокруг электрона и какое расстояние по орбите пролетит электрон за это время. При этом необходимо учесть, что радиус вращения фотона вокруг электрона будет увеличиваться с уменьшением частоты в соответствии с условиями перехода электрона на новую орбиту.

Шаг спирали фотона:

$$\Delta l = v_e t, \quad (3.75)$$

где v_e – скорость полета электрона; t – время одного полного оборота фотона вокруг электрона. Время одного полного оборота фотона вокруг электрона можно оценить из условия:

$$t = (2\pi r_\phi)/c, \quad (3.76)$$

где r_ϕ – радиус вращения фотона вокруг электрона; c – скорость света.

Таким образом, шаг спирали фотона:

$$\Delta l = (2\pi r_\phi v_e)/c. \quad (3.77)$$

Сколько раз облетит фотон вокруг электрона за полный оборот электрона вокруг ядра

$$N = (2\pi r_e)/\Delta l = (2\pi r_e c)/(v_e 2\pi r_\phi) = (c/v_e) \cdot r_e/r_\phi, \quad (3.78)$$

здесь r_e – радиус вращения электрона вокруг ядра.

С большей долей достоверности можно принять $r_\phi = r_e = 0,5 \cdot r_{am}$, т. е.

$$N = c/v_e. \quad (3.79)$$

Общая длина пути полета фотона вокруг электрона за один оборот электрона вокруг ядра составит:

$$L = 2\pi r_\phi \cdot N = (2\pi r_e c)/v_e. \quad (3.80)$$

Длина одной стоячей волны $\lambda = c/\nu$, а число полных стоячих волн на общей длине L полета фотона вокруг электрона за один оборот электрона вокруг ядра составит

$$n_\lambda = L/\lambda = (2\pi r_e c \cdot \nu)/c \nu_e = 2\pi r_e \nu/\nu_e. \quad (3.81)$$

Для определения величин n_λ фотонной стоячей волны соответствующей частоты ν необходимо оценить скорость вращения электрона по орбите вокруг ядра. Для этого можно воспользоваться равенством силы электрического притяжения электрона к ядру и центробежной силы его движения по орбите, т. е. для атома водорода

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_e^2} = \frac{m_e \nu_e^2}{r_e}, \quad (3.82)$$

откуда

$$\nu_e = \frac{e}{2(\pi\epsilon_0 r_e m_e)^{1/2}}. \quad (3.83)$$

Тогда

$$n_\lambda = \frac{4\pi r_{am} (\pi\epsilon_0 r_{am} m_e)^{1/2} \cdot \nu}{2\sqrt{2} \cdot e} = \frac{2\pi r_{am} c (\pi\epsilon_0 r_{am} m_e)^{1/2}}{\sqrt{2} \cdot \lambda e}. \quad (3.84)$$

Расчет параметра n_λ основных волн электромагнитного излучения атомов водорода для серий Лаймана, Бальмера, Пашена, Бреккета, Пфунда и Хемфри приведен в таблице 3.4.

Таблица 3.4

Величины параметра n_λ основных волн электромагнитного излучения атомов водорода

Серия Лаймана $n = 1$	m	2	3	4	5	6	20
	λ , нм	121,586	102,573	97,274	94,975	93,781	91,17
	r_{cp} , нм	0,10628	0,23913	0,42513	0,66425	0,95654	10,628
	n_λ	1,0677	4,546	10,67	21,35	37,36	1420
Серия Бальмера $n = 2$	m	3	4	5	6	7	20
	λ , нм	656,467	486,272	434,171	410,292	397,122	366,700
	r_{cp} , нм	0,23913	0,42513	0,664265	0,95654	1,30192	10,628
	n_λ	0,663	2,13	4,67	8,54	14,00	1297,5
Серия Пашена $n = 3$	m	4	5	6	7	8	20
	λ , нм	1875,620	1282,262	1094,112	1005,215	954,861	820,504
	r_{cp} , нм	0,42513	0,664265	0,95654	1,30192	1,70048	10,628
	n_λ	0,555	1,58	3,2	5,53	8,7	158,14
Серия Бреккета $n = 4$	m	5	6	7	8	9	20
	λ , нм	4052,266	2685,868	2266,120	1945,088	1817,909	1458,816
	r_{cp} , нм	0,664265	0,95654	1,30192	1,70048	2,15217	10,628
	n_λ	0,501	1,33	2,45	4,27	6,5	88,95

Серия Пфунда $n = 5$	m	6	7	8	9	10	20
	λ , нм	7459,853	4653,774	3740,553	3296,983	3039,199	2279,39
	r_{cp} , нм	0,95654	1,30192	1,70048	2,15217	2,657	10,628
	n_λ	0,47	1,195	2,22	3,58	5,28	56,92
Серия Хемфри $n = 6$	m	7	8	9	10	11	20
	λ , нм	12371,879	7502,481	5908,204	5128,694	4672,501	3283,2
	r_{cp} , нм	1,30192	1,70048	2,15217	2,657	3,21497	10,628
	n_λ	0,4497	1,107	2,0	3,16	4,62	39,52

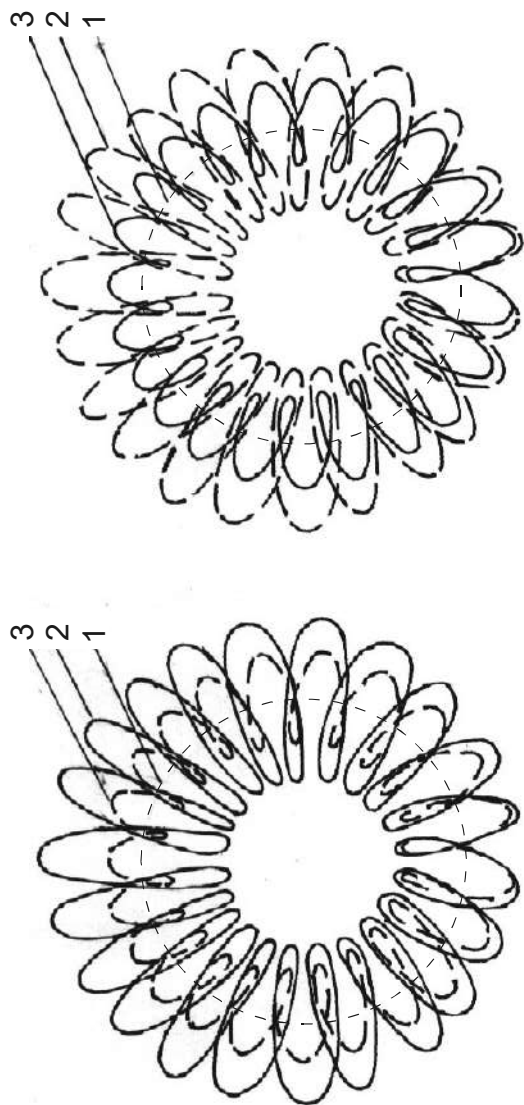
Анализ показывает, что для электромагнитных волн серии Лаймана параметр n_λ изменяется от 1,0677 до 1420 (при $m = 20$). С увеличением номера серии (n) и переходе к сериям Бальмера, Пашена и других параметр n_λ снижается, составляя для первой фотонной орбиты величины 0,669-0,4497, т. е. примерно по 0,5 длины стоячей волны укладывается на длине первой орбиты электрона.

Что же означает величина параметра n_λ , например, $n_\lambda = 0,5$ или $n_\lambda = 1$? Первое означает, что на длине орбиты электрона вокруг ядра укладывается только 0,5 длины стоячей фотонной волны, т. е. при одном (нечетном) обороте электрона вокруг ядра в пучности стоячей фотонной волны дальше от электрона будет вращаться положительная полумасса фотона, а ближе к нему отрицательная полумасса (рис. 3.6а), при другом (четном) обороте электрона вокруг ядра в пучности стоячей фотонной волны положительная полумасса фотона будет вращаться вокруг электрона, находясь ближе к нему (рис. 3.6б). Если $n_\lambda = 1$, то это означает, что с одной стороны вращения электрона вокруг ядра в пучности стоячей фотонной волны будет с внешней стороны электрона положительная полумасса фотона, а при полете электрона с другой стороны ядра в пучности стоячей фотонной волны положительная полумасса фотона будет с внутренней к ядру стороне электрона и т. д. (рис. 3.7).

В связи с этим проанализируем снова общепринятые результаты интерпретации решения уравнения Шредингера относительно вероятности нахождения электрона вокруг ядра в атоме водорода и сопоставим с предлагаемыми нами решениями на основе ядерно-электронно-фотонной структуры атома. Как следует из рис. 3.2, в состоянии $1s$ область вероятности нахождения электрона вокруг ядра представляет собой сферу с центром, совпадающим с ядром атома. Из анализа ядерно-электронно-фотонной структуры следует, что этому состоянию атома соответствует формирование на полной длине орбиты электрона вокруг ядра только половины длины фотонной стоячей волны, причем при одном обороте электрона вокруг ядра в полупериоде стоячей фотонной волны внешняя (удаленная) от электрона часть фотона будет представлена его положительно заряженной полумассой (рис. 3.6а), а в следующем обороте электрона вокруг ядра атома в полупериоде фотонной стоячей волны внешняя (удаленная) от электрона часть фотона будет представлена его отрицательно заряженной полумассой (рис. 3.6б). Общая картина поверхности, описываемой разноименно заряженными полумассами фотона будет близка с сферической, а точнее она будет характеризовать форму поверхности тороида, описываемого разноименно заряженными полумассами фотона (рис. 3.6). Характер поверхности плотности вероятности нахожде-

ния электрона в состоянии $2p_x$, в соответствии с квантово-механическим принципом решения уравнения Шредингера, отражает наличие положительной и отрицательной функций, описывающих области, вероятности нахождения электрона (рис. 3.7), причем прямая, соединяющая эти области отражает переход электрона из области, описываемой положительной функцией, в область, описываемую отрицательной функцией. Области вероятности нахождения электрона в атоме водорода, описываемые положительной и отрицательной функцией, должны представлять собой два полупериода единой стоячей волны электрона вокруг ядра и, следовательно, должны иметь общую точку или границу соприкосновения и плавно переходить одна в другую. Фактически интерпретация полуволн стоячей электронной волны дается во всех источниках, использующих решение уравнения Шредингера как две самостоятельные области (рис. 3.7а), что методически ошибочно. Более правильно следовало представлять эти области переходящими одна в другую как две части одной стоячей волны (например, как на рис. 3.7б). Однако наиболее реально вокруг круговой траектории полета электрона за счет вращения фотона образуется объемная стоячая фотонная волна, в один период которой на внешней орбите вращается положительно заряженная полумасса фотона (рис. 3.7в) – эквивалент положительной функции решения уравнения Шредингера, а в следующий полупериод фотонной стоячей волны на внешней фотонной орбите вращается отрицательно заряженная полумасса фотона – эквивалент отрицательной функции решения уравнения Шредингера. В целом такое состояние вращения фотона вокруг орбитального электрона соответствует условию, когда на длине одной орбиты электрона укладывается одна полная стоячая фотонная волна ($n_\lambda = 1$) (рис. 3.7в).

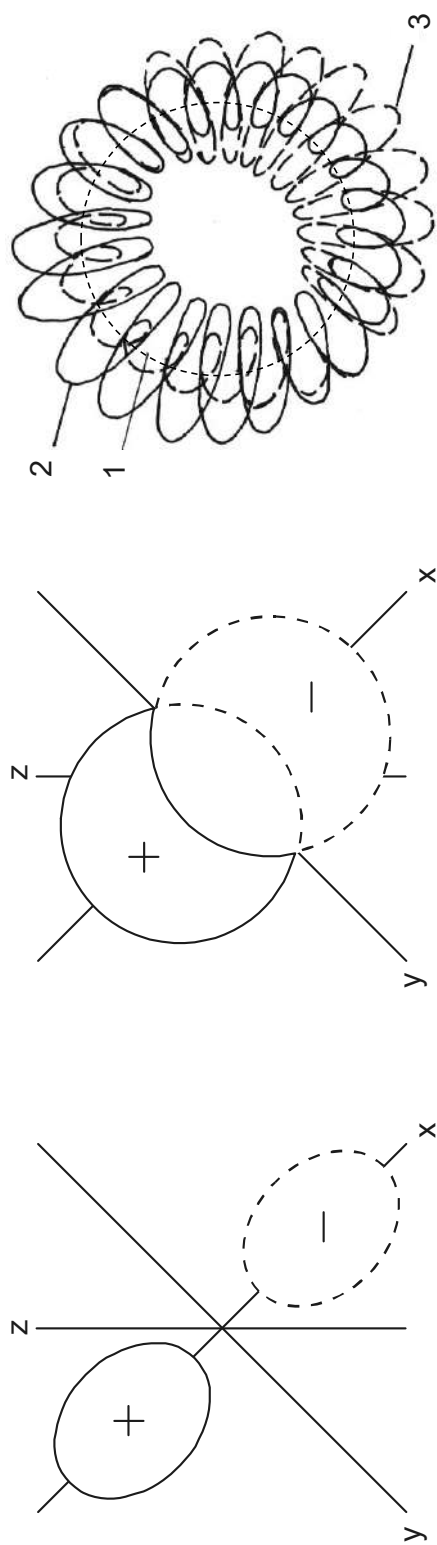
Весьма интересным является анализ решения уравнения Шредингера для определения плотности вероятности нахождения электрона в состоянии d, например $3d_{xz}$. Как видно из рис. 3.2, продублированного в плоскости xz на рис. 3.8а, квантово-механическое решение уравнения Шредингера характеризуется двумя спаренными между собой областями положительных функций и двумя спаренными между собой областями отрицательных функций. Такая интерпретация связи между собой областей положительных и отрицательных функций не отражает характер формирования стоячей волны электрона, так как в любой стоячей волне связанными меж положительная и отрицательная функции. Вероятно, более правильно графически интерпретировать результаты квантово-механического решения уравнения Шредингера для последовательного чередования непосредственно связанных функций, как это представлено на рис. 3.8б. Но наиболее верное d_{xz} состояние атома дано на рис. 3.8в на основе предложенной нами ядерно-электронно-фотонной модели атома, когда фотон, вращаясь вокруг орбитального электрона атома, на одной длине орбиты электрона, формирует две объемные стоячие волны. Состояние, когда положительно заряженная полумасса фотона находится с внешней от электрона стороны вращающегося фотона, соответствует состоянию положительной функции в решении уравнения Шредингера, а состояние, когда отрицательно заряженная полумасса фотона находится с внешней от электрона стороны вращающегося фотона, соответствует состоянию отрицательной функции в решении уравнения Шредингера. И в этом случае $n_\lambda = 2$.



а

б

Рис. 3.6. Характер формирования стоячей фотонной волны вокруг электрона атома при $n_1 = 0,5$, эквивалентный форме орбитали $1s$ в традиционной интерпретации решения уравнения Шредингера: а – в нечетные периоды вращения электрона вокруг ядра атома; б – в четные периоды вращения электрона вокруг ядра атома; 1 – траектория движения электрона по орбите; 2, 3 – траектории движения положительно и отрицательно заряженных полумасс фотона, вращающегося вокруг электрона

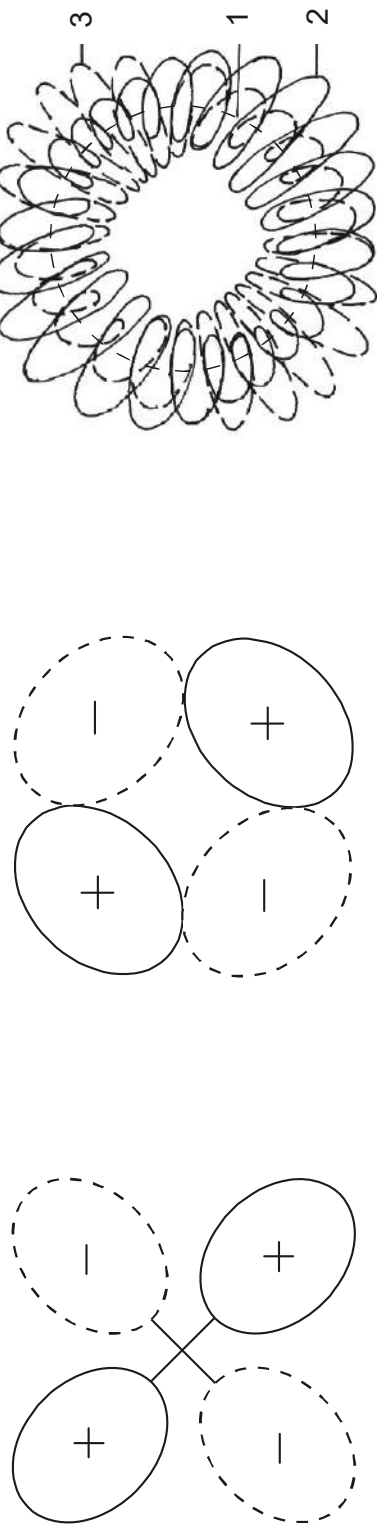


а

б

в

Рис. 3.7. Форма орбитали $2p_x$ электрона в старой и новой интерпретации в атоме водорода: а – характер связи положительной и отрицательной функций и графическое представление состояния $2p_x$ электрона в традиционной интерпретации решения уравнения Шредингера; б – предлагаемая графическая интерпретация состояния $2p_x$ электрона и характер связи положительной и отрицательной функций в виде единой стоячей волны на основе решения уравнения Шредингера; в – предлагаемое графическое представление состояния $2p_x$ электрона на основе стоячей фотонной волны с $n_\lambda = 1$ на основе ядерно-электронно-фотонной модели атома. 1 – траектория движения электрона по орбите; 2, 3 – траектории движения положительно и отрицательно заряженных полумасс фотона, вращающегося вокруг электрона



а

б

в

Рис. 3.8. Форма орбитали $3d_{xz}$ электрона в старой и новой интерпретации в атоме водорода: а – характер связи положительной и отрицательной функций и графическое представление состояния $3d_{xz}$ электрона в традиционной интерпретации решения уравнения Шредингера; б – предлагаемая графическая интерпретация состояния $3d_{xz}$ электрона и характер связи положительных и отрицательных функций в виде двух стоячих волн на основе решения уравнения Шредингера; в – предлагаемое графическое представление состояния $3d_{xz}$ электрона в виде стоячей фотонной волны с $n_\lambda = 2$ на основе ядерно-электронно-фотонной модели атома (1 – траектория движения электрона по орбите; 2, 3 – траектории движения положительно и отрицательно заряженных полумасс фотона, вращающегося вокруг электрона)

В научной литературе отсутствует информация о решении уравнения Шредингера для f-состояния электрона в атоме водорода и нет графического представления о характере распределения областей плотности вероятности нахождения электрона вокруг ядра. По аналогии с вышеописанным можно принять, что для случая $4f_{xz}$ -состояния электрона на основе традиционного квантово-механического решения уравнения Шредингера картина распределения положительных и отрицательных функций решения уравнения Шредингера, соответствующих плотности вероятности нахождения электрона в пространстве вокруг ядра атома водорода, должна выглядеть так, как на рис. 3.9а, а более правильная интерпретация этих областей и связи положительной и отрицательной функций – как на рис. 3.9б. Реальное же представление о модели атома на основе ядерно-электронно-фотонной модели атома представлено на рис. 3.9в, когда фотон, вращаясь вокруг орбитального электрона атома, на одной длине орбиты электрона формирует 4 длины стоячей волны, т. е. это соответствует состоянию $n_\lambda = 4$.

Для одного из g-состояний электрона в атоме водорода – $5g_{xz}$ на основе традиционного квантово-механического решения уравнения Шредингера картина распределения 8 положительных и 8 отрицательных функций представлена на рис. 3.10а, а более грамотная интерпретация – на рис. 3.10б. Реальное же схематическое представление модели атома представлено на рис. 3.10в, когда фотон, вращаясь вокруг орбитального электрона атома, на одной длине орбиты электрона формирует 8 длин стоячей волны, что соответствует состоянию $n_\lambda = 8$.

Аналогично можно было бы рассмотреть и графически представить и другие ситуации с различными величинами параметра n_λ и пространственным направлением вращения электрона вокруг ядра.

Таким образом, волновые свойства электрона должны проявляться не путем формирования в соответствии с решением уравнения Шредингера сложных поверхностей вероятности нахождения электрона вокруг ядра в форме s, p, d, f, g, h и т. д. орбитальных поверхностей, виды ряда которых даже не анализируются в научной литературе. Волновые свойства электрона должны проявляться в том, что фотоны, вращающиеся вокруг электрона атома, будут формировать на круговой траектории полета электрона стоячие волны, количество длин которых на одной длине орбиты электрона будет меняться в соответствии с радиусом вращения электрона по орбите вокруг ядра и длиной внешней фотонной волны. Чем больше радиус вращения электрона вокруг ядра, тем большее число стоячих фотонных волн будет укладываться на одной длине орбиты электрона, причем в серии Лаймана в основном состоянии атома при $n = 1$ и $m = 2$ на длине орбиты электрона укладывается одна длина стоячей фотонной волны (по расчетам $n_\lambda = 1,0677 \approx 1,0$). При $m > 2$ в серии излучения-поглощения Лаймана величина n_λ растет. При переходе к следующим сериям излучения-поглощения (Бальмера, Пашена, Бреккета, Пфунда и Хемфри) количество фотонных стоячих волн, укладывающихся на длине орбиты электрона в один оборот вокруг ядра, несколько снижается (табл. 3.4). Следовательно, электрон обладает волновыми свойствами, но волновыми свойствами обладает не его плотная масса, а

его электромагнитная «атмосфера» в виде вращающихся вокруг него фотонов, и в связи с этим трактовка решения уравнения Шредингера в соответствии с квантово-механическими представлениями является глубоко ошибочной и искажает физический смысл формирования химической связи и образования молекул вроде бы за счет перекрытия областями максимальной электронной плотности объединяющихся в молекулу атомов.

Каждый из фотонов, вращающихся вокруг электрона, будет описывать свои траектории, которые с учетом разлета разноименно заряженных полумасс фотонов будут формировать свои стоячие волны, имеющие форму гантелей, вытянутых вдоль окружности траектории полета электрона вокруг ядра, но не через ядро, как это принято сегодня на основе решения уравнения Шредингера для электрона атома. Причем каждый из фотонов будет описывать свои «гантели» – стоячие волны, которые за счет разной их длины волны будут смещены по траектории полета электрона. В результате огибающая поверхность фотонного поля будет сложной, но в каждый момент при данной температуре основная внешняя поверхность фотонного поля будет определяться траекторией полета вокруг электрона наиболее низкочастотного фотона.

Если же учесть, что вокруг электрона вращается несколько орбиталей фотонов, а в каждой фотонной орбитали свое множество фотонов, то картина еще более осложняется, но несомненно, что фотоны одной орбитали занимают свой сферический угол в пространстве, связывающем электрон с ядром атома.

В то же время можно принять, что электромагнитные фотонные волны одной орбитали, интерферируя между собой, могут образовать волновой пакет. Понятие волнового пакета было введено в квантовой механике в процессе ее разработки [2]. Почему возникла необходимость введения этого термина?

Де Бройль сделал гениальное предположение, что частицы вещества как-то связаны с необнаруженными еще в то время их волновыми свойствами. Таким образом, устанавливалось единство между веществом и светом. Оба они должны быть различными формами некоторого нового типа материального образования, которое может действовать иногда как волна, а иногда как частица.

Обычная плоская волна определенной длины λ размазана по всему пространству и потому не может быть использована для описания движения импульса, который локализован в сравнительно узкой области, но по теории де

Бройля волны вещества связаны с импульсом простым соотношением $\lambda = \frac{h}{p}$.

Чтобы получить волну, которая ограничена определенной областью пространства, предложили использовать так называемый волновой пакет. Представляется, что волновой пакет содержит группу волн с несколько различными длинами волн, фазы и амплитуды которых выбраны таким образом, что при интерференции волны усиливают друг друга только в очень небольшой области пространства, вне которой результирующая амплитуда их быстро спадает к нулю из-за интерференции.

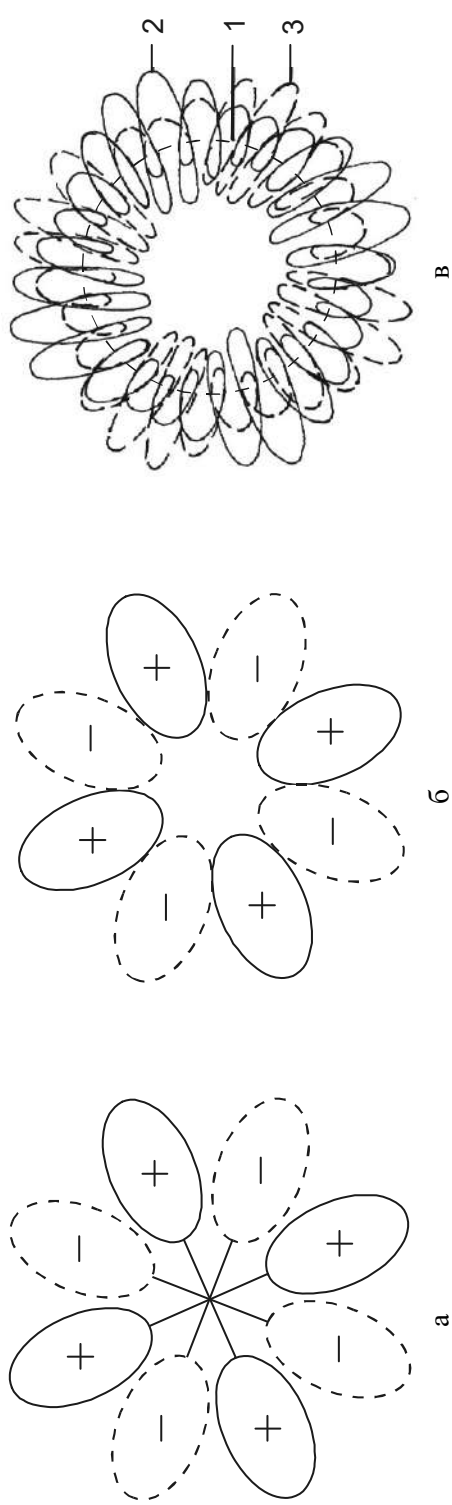


Рис. 3.9. Форма орбитали $4f_{7/2}$ электрона в старой и новой интерпретации в атоме водорода: а – характер связи положительной и отрицательной функций и графическое представление состояния $4f_{7/2}$ электрона в традиционной интерпретации решения уравнения Шредингера; б – предлагаемая графическая интерпретация состояния $4f_{7/2}$ электрона и характер связи положительных и отрицательных функций в виде четырех стоячих волн на основе решения уравнения Шредингера; в – предлагаемое графическое представление состояния $4f_{7/2}$ электрона в виде стоячей фотонной волны с $n_z = 4$ на основе ядерно-электронно-фотонной модели атома (1 – траектория движения электрона по орбите; 2, 3 – траектории движения положительно и отрицательно заряженных полумасс фотона, вращающегося вокруг электрона)

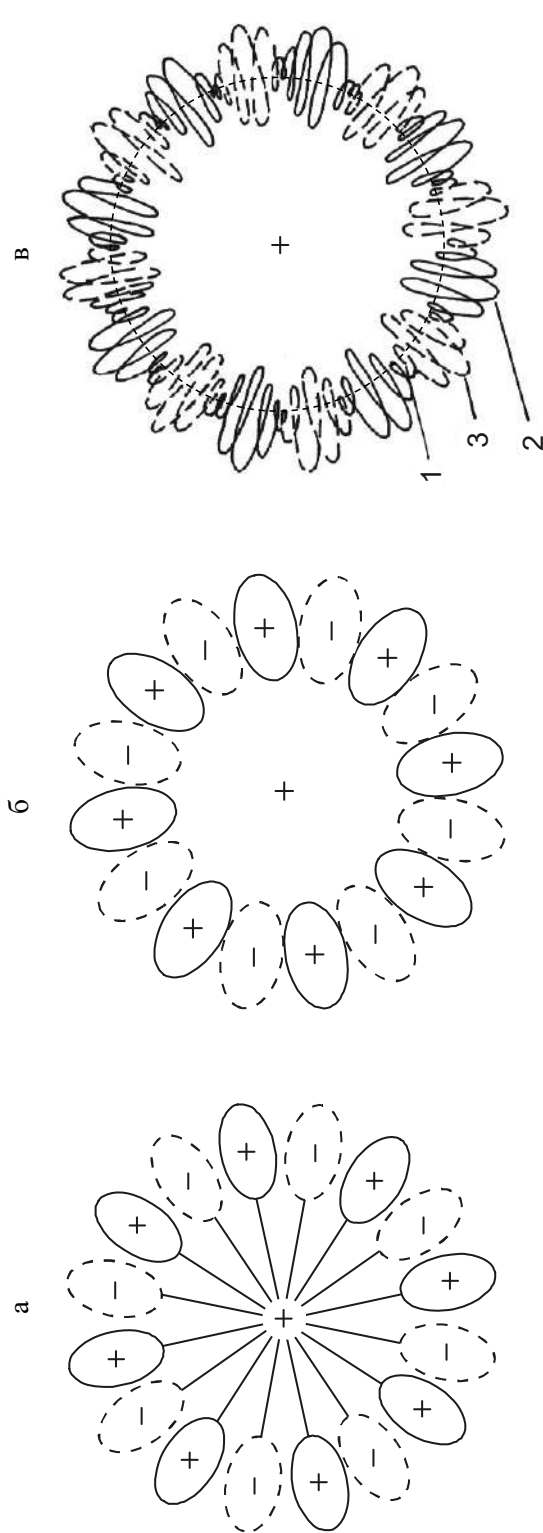


Рис. 3.10. Форма орбитали $5g_{xz}$ электрона в старой и новой интерпретации в атоме водорода: а – характер связи положительной и отрицательной функций и графическое представление состояния $5g_{xz}$ электрона в традиционной интерпретации решения уравнения Шредингера; б – предлагаемая графическая интерпретация состояния $5g_{xz}$ электрона и характер связи положительных и отрицательных функций в виде восьми стоячих волн на основе решения уравнения Шредингера; в – предлагаемое графическое представление состояния $5g_{xz}$ электрона в виде стоячей фотонной волны с $n_\lambda = 8$ на основе ядерно-электронно-фотонной модели атома (1 – траектория движения электрона по орбите; 2, 3 – траектория движения положительно и отрицательно заряженных полумасс фотона, вращающегося вокруг электрона)

Амплитуда ε одномерного волнового пакета (представляемая, например, Z-компонентой электрического поля) будет в общем случае изображаться кривой, показанной на рис. 3.11.

В работе [2] показано, что можно построить волновой пакет, взяв плоскую волну и проинтегрировав ее по малой области длин волн. Так, например:

$$\varepsilon_z(x) = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} e^{ik(x-x_0)} dk = 2 \frac{\sin \Delta k (x - x_0)}{(x - x_0)} e^{ik(x-x_0)}. \quad (3.85)$$

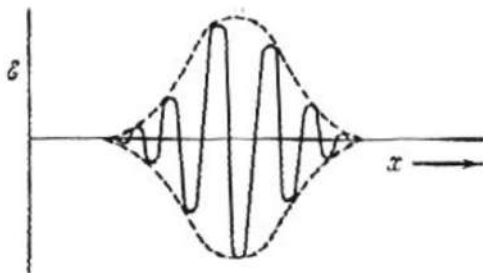


Рис. 3.11. Волновой пакет [2]

Если построить график этой функции от $(x - x_0)$, то вещественная часть $\varepsilon_z(x)$ будет иметь вид, показанный на рис. 3.12 ($\Delta k \ll k_0$). Мы видим, что амплитуда колебаний достигает максимума в точке $x = x_0$, падает до нуля при $(x - x_0) = \frac{\pi}{\Delta k}$, после чего превращается в быстро затухающую колеблющуюся функцию. Таким образом, мы получили волновую функцию, сконцентрированную в пакет.

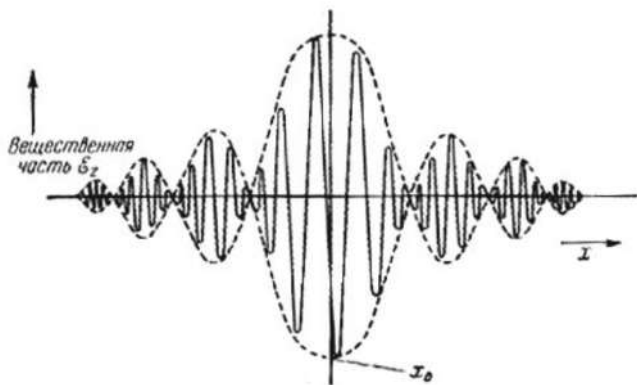


Рис. 3.12. Пример построения волновой функции, сконцентрированной в пакет [2]

Здесь Δk является мерой интервала волновых чисел k , присутствующих в пакете ($k = \frac{2\pi}{\lambda}$ – волновое число).

Если принять вместе с де Бройлем, что вещество действительно имеет волновую природу и что в макроскопических опытах мы наблюдаем именно волновые пакеты, то траекторию движения пакета можно считать классическим пределом траектории частицы. В связи с этим М. Бом [2] показал, что скорость волновых пакетов должна равняться классической скорости частицы, т. е.

$$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} = \frac{p}{m}, \quad (3.86)$$

где p , m – импульс и масса частицы, v_g – групповая скорость волнового пакета, k – волновое число, ω – круговая частота.

Но если воспользоваться соотношением

$$\omega = \frac{2\pi E}{h} = \frac{E}{\hbar}, \quad (3.87)$$

то найдем

$$\frac{\partial \omega}{\partial k} = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{\partial E}{\partial k}. \quad (3.88)$$

В классической механике энергия свободной частицы, например, электрона, равна

$$E = \frac{p^2}{2m_e}; \quad (3.89)$$

поэтому

$$\frac{\partial \omega}{\partial k} = \frac{p}{m_e \hbar} \cdot \frac{\partial p}{\partial k}. \quad (3.90)$$

Приравнявая эту величину наблюдаемой классической скорости частицы, получаем

$$\frac{p}{m_e \hbar} \cdot \frac{\partial p}{\partial k} = \frac{p}{m_e}. \quad (3.91)$$

$$p = \hbar k \quad \text{или} \quad p = \frac{h}{\lambda}. \quad (3.92)$$

Это и есть соотношение де Бройля. Тогда групповая скорость равна

$$v_g = \frac{p}{m_e} = \frac{\hbar k}{m_e} \quad (3.93)$$

и

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{p^2}{2m_e \hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m_e}. \quad (3.94)$$

Мы видим, что в противоположность световым волнам для электронов и в вакууме круговая частота ω не пропорциональна волновому числу k .

Не идеализируя математически полученное выражение, можно лишь утверждать, что зависимость круговой частоты волнового пакета от квадрата волнового числа может свидетельствовать, что волновой пакет электрона формируется в результате сложного процесса интерференции фотонных волн (квантов фотонов), вращающихся по спирали вокруг электрона, который одновременно летит вокруг ядра атома. Причем аналогичными гармониками волнового пакета, удовлетворяющими условиям его образования, можно принять спектр волн в каждой серии (Бальмера, Пашена и др.), учитывая, что фотонные волны в каждой серии спектра подчиняются определенным закономерностям в соответствии с формулой (3.5).

Следовательно, предлагаемая нами концепция наличия вокруг всех заряженных частиц электромагнитного поля в виде вращающихся фотонов позволяет обосновать физический смысл применения уравнения Шредингера в квантовой механике к описанию волновых свойств любой из этих частиц, но за счет их «электромагнитной атмосферы», в виде фотонных стоячих волн или волновых пакетов в каждой фотонной орбитали вокруг электрона атома и, таким образом, обосновать ядерно-электронно-фотонную модель атома. Это расширяет наши представления о строении материи и позволяет с единых позиций рассматривать многие физические явления, в которых важная объединяющая роль принадлежит фотону.

Характер распределения электронов по орбитам непосредственно связан с особенностью строения ядра, в котором определенная роль отводится и фотонам. В связи с этим рассмотрим вероятную модель строения ядер, а также роль и место фотонов в них.

3.2. Роль фотонов в строении ядра атома

Ко времени открытия ядра атома были известны только две частицы – протон и электрон. В соответствии с этим считалось вероятным, что ядро из них и состоит.

В работе [1] рассматриваются исторические аспекты вопроса «Есть ли электрон в атомном ядре?» и отмечается, что вопрос о том, есть ли электрон в ядре, появился потому, что Дж. Дж. Томсон первоначально представлял себе атом в виде маленького шарика, однородно заряженного положительным электричеством, в который погружены точечные электроны. Атом, по Дж. Дж. Томсону, не имел ядра. Впоследствии Резерфорд и Бор отбросили эту модель атома и провозгласили, что атом обладает массивным положительно заряженным ядром очень малых размеров, вокруг которого на больших расстояниях вращаются электроны. Но тем не менее вплоть до 1931 г. все думали, что в ядре имеются свои «ядерные» электроны и что суммарный положительный заряд ядра обязан избытку числа протонов над числом ядерных электронов. Например, ядро дейтерия представляли состоящим из двух протонов и одного «ядерного» электрона и считали, что избыток заряда ядра (+1e) компенсируется в нейтральном

атоме дейтерия одним электроном в его внешней оболочке. Однако в конце 1920-х гг. протонно-электронная гипотеза столкнулась с серьезной трудностью, получившей название азотной катастрофы: по протонно-электронной гипотезе ядро азота должно было содержать 21 частицу (14 протонов и 7 электронов), спин каждой из которых равен $\frac{1}{2}$. Спин ядра азота должен быть полуцелым, а согласно опытным данным, он оказался равным 1. Состав ядра атома был выяснен после открытия в 1932 г. Дж. Чедвиком нейтрона со спином $\frac{1}{2}$ [6]. Была

предложена новая теория структуры ядра, в которой отрицалось присутствие электронов в ядре. Согласно такой теории ядро содержит внутри себя только протоны и нейтроны и не имеет никаких «ядерных» электронов. С тех пор было проведено много различных экспериментов, которые вроде бы утвердительно доказали отсутствие электронов в ядре. Считается, что, если бы электроны в ядре были, магнитный момент ядра был бы порядка магнетона Бора, т. е. равен собственному магнитному моменту орбитального электрона, вращающегося вокруг ядра. Эксперименты же показывают, что магнитные моменты ядер в тысячу раз меньше боровского магнетона и поэтому очень многие эксперименты приводят к заключению, что ядро дейтерия имеет спин +1. На рис. 3.13 проиллюстрировано, как объясняется спин дейтерия по старой и новой теории (с учетом «ядерного» электрона и без него).

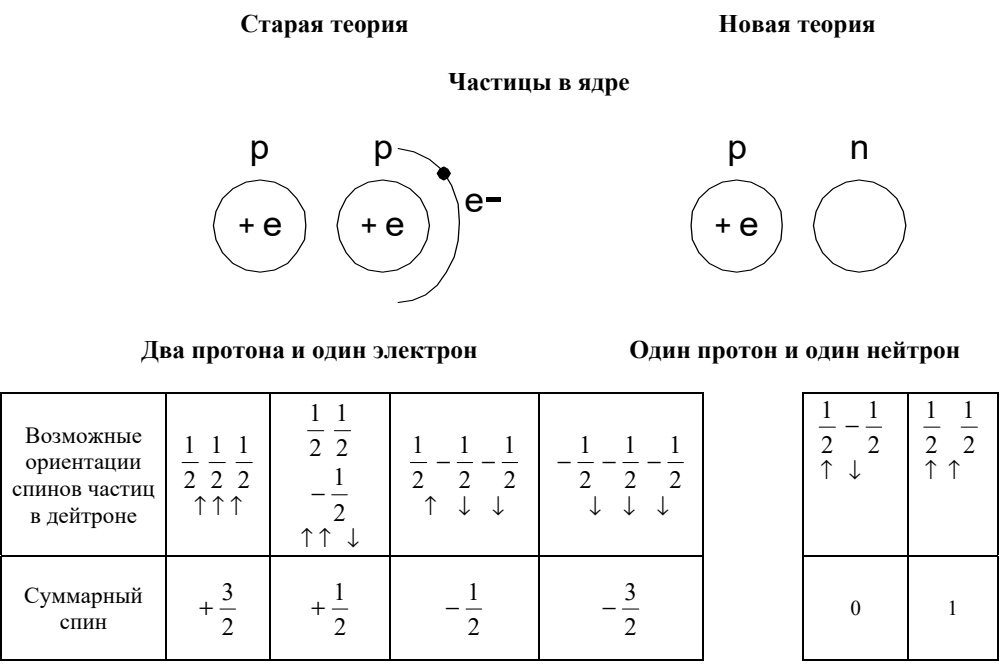


Рис. 3.13. Обоснование спина дейтерия по старой и новой теории строения ядра

Как видно из этого рисунка, при любой комбинации возможных ориентаций спинов одного электрона и двух протонов в ядре по старой теории получаются полуцелые значения спина, что противоречит эксперименту.

Другим опровергающим фактором принято считать эксперименты Резерфорда по рассеянию α -частиц, которые показали, что атомное ядро имеет размер порядка 10^{-14} м. Из этого делается вывод, что неопределенность положения «ядерного» электрона в ядре должна была быть $\Delta x = 10^{-14}$ м, и согласно соотношению неопределенности, неопределенность его импульса была бы

$$\Delta p = \frac{\hbar}{\Delta x} = 1,1 \cdot 10^{-20} \text{ кг} \cdot \text{м/с}. \quad (3.95)$$

Импульс такого электрона должен был бы быть не меньше этого значения, и кинетическая энергия «ядерного» электрона равнялась бы

$$W_K = \Delta p \cdot c = 3,3 \cdot 10^{-12} \text{ Дж} = 20 \text{ МэВ}, \quad (3.96)$$

где c – скорость света.

Энергия же электронов, вылетающих при распаде нестабильных ядер, оказывается порядка всего нескольких электронвольт, как об этом свидетельствуют эксперименты. Так что получается противоречие с приведенной теоретической оценкой, полученной на основе соотношения неопределенностей, если сделать предположение, что в ядре имеются «ядерные» электроны.

Таким образом, по современным представлениям ядро атома состоит из протонов и нейтронов. В атомной физике протон (p) и нейтрон (n) объединяются общим названием «нуклон». Общее число нуклонов в ядре атома называется массовым числом A , число протонов равно заряду ядра Z , число нейтронов $N = A - Z$. У ядер изотопов одно и то же Z , но разные A и N , у ядер-изобар одинаковые A и разные Z и N . Силы, удерживающие нуклоны в ядре, называются ядерными. Они являются проявлением самых интенсивных из всех известных в физике взаимодействий. Принято считать, что это взаимодействие нуклонов в ядре сводится к многократным актам испускания π -мезона одним из нуклонов и поглощения его другим.

Ядра характеризуются следующими основными свойствами [10].

1. Ядерные силы являются силами притяжения.

2. Ядерные силы являются короткодействующими – их действие проявляется только на расстоянии примерно 10^{-15} м. При увеличении расстояния между нуклонами ядерные силы быстро убывают до нуля, а при расстояниях, меньших их радиуса действия, оказываются в несколько раз больше электрических сил, действующих между протонами на том же расстоянии.

Считается, что радиус действия ядерных сил r_0 определяется комптоновской длиной волны π -мезонов λ_π , которыми обмениваются нуклоны в процессе ядерного взаимодействия.

$$r_0 = \lambda_\pi = \frac{\hbar}{\mu c} = 1,41 \cdot 10^{-15} \text{ м}, \quad (3.97)$$

где μ – масса π -мезона, c – скорость света, \hbar – постоянная Планка.

Межнуклонные расстояния в ядрах имеют именно такой порядок величины, однако, существенный вклад в ядерные силы вносит обмен и более тяжелыми мезонами. Точная зависимость ядерных сил от расстояния между двумя нуклонами и относительная интенсивность ядерных сил разного типа с определенностью не установлены. В многонуклонных ядрах возможны силы, которые не сводятся к взаимодействию только пар нуклонов. Роль так называемых многочастичных сил в структуре ядер пока не выяснена.

3. Ядерным силам свойственна зарядовая независимость: ядерные силы, действующие между протонами, или двумя нейтронами, или, наконец, между протоном и нейтроном, одинаковы по величине. Отсюда делают вывод, что ядерные силы имеют неэлектрическую природу.

4. Ядерным силам свойственно насыщение, т. е. каждый нуклон в ядре взаимодействует только с ограниченным числом ближайших к нему нуклонов. Насыщение проявляется в том, что удельная энергия связи нуклонов в ядре (если не учитывать легкие ядра) при увеличении числа нуклонов не растет, а остается приблизительно постоянной.

5. Ядерные силы зависят от взаимной ориентации спинов взаимодействующих нуклонов. Например, протон и нейтрон образуют дейтрон (ядро изотопа H^2) только при условии параллельной ориентации их спинов.

6. Ядерные силы не являются центральными, т. е. действующими по линии, соединяющей центры взаимодействующих нуклонов.

Многочастичная квантовая система с сильным взаимодействием, каковой является ядро, с теоретической точки зрения – объект исключительно сложный. Трудности связаны не только с вычислениями физических величин, характеризующих ядро, но и ядерных состояний, спектра энергетических уровней, механизма ядерных реакций [12]. К математическим трудностям добавляется недостаточная определенность данных о ядерных силах. Принято считать, что протон окружен облаком виртуальных частиц, которые он непрерывно испускает и поглощает. Взаимодействие протона с другими частицами (в ядре) рассматривается как процесс обмена виртуальными частицами. Например, ядерные силы и низкоэнергетические процессы объясняются в основном обменом виртуальных π -мезонов между нуклонами.

Экспериментальные данные по рассеянию частиц высоких энергий (сотни МэВ и выше) объясняются участием в виртуальных процессах наряду с π -мезонами других адронов и образованием при определенных условиях резонансов в промежуточных состояниях [12]. Поскольку межнуклонное взаимодействие сводится к обмену π -мезонами, объяснение свойств ядра в конечном счете должно опираться на реальную квантовую теорию элементарных частиц, которая сама по себе в современном ее состоянии несвободна от внутренних противоречий и не может считаться завершенной [12].

Сложный характер ядерных сил и трудность точного решения уравнений движения всех нуклонов ядра не позволили до настоящего времени разработать единую последовательную теорию атомного ядра. Поэтому на данной стадии прибегают к рассмотрению приближенных ядерных моделей, в которых ядро

заменяется некоторой моделью, описывающей только определенные свойства ядра и допускающей более или менее простую математическую трактовку. Из большого числа моделей, каждая из которых обязательно использует подобранные произвольные параметры, согласующиеся с экспериментом, наиболее разработанными и общепринятыми являются две: капельная и оболочечная.

Капельная модель

Капельная теория ядра является первой моделью и разработана в 1936 г. Н. Бором и Я. И. Френкелем. Она основана на аналогии между поведением нуклонов в ядре и поведением молекул в капле жидкости. Так, в обоих случаях силы, действующие между составными частицами – молекулами в жидкости и нуклонами в ядре, – являются короткодействующими, и им свойственно насыщение. Для капли жидкости при данных внешних условиях характерна постоянная плотность ее вещества. Ядра же характеризуются практически постоянной удельной энергией связи и постоянной плотностью, не зависящей от числа нуклонов в ядре. Наконец, объем капли, так же как и объем ядра, пропорционален числу частиц.

Существенное отличие ядра от капли жидкости в этой модели заключается в том, что она трактует ядро как каплю электрически заряженной несжимаемой жидкости (с плотностью, равной ядерной), подчиняющуюся законам квантовой механики.

Капельная модель ядра позволила получить полуэмпирическую формулу для энергии связи нуклонов в ядре, объяснила механизм ядерных реакций и особенно реакции деления ядер.

Оболочечная модель ядра

Была предложена в 1949-1950 гг. американским физиком М. Гепперт-Майером и немецким физиком Х. Иенсенем. Оболочечная модель предполагает распределение нуклонов в ядре по протонным и нейтронным оболочкам с дискретными энергетическими уровнями, заполненными нуклонами согласно принципу Паули, и связывает устойчивость ядер с заполнением этих уровней. Считается, что ядра с полностью заполненными оболочками являются наиболее устойчивыми. Такие особо устойчивые ядра действительно существуют. Они называются магическими. Из опыта известно, что магическими являются ядра, содержащие 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126 протонов или нейтронов. Существуют также и дважды магические ядра – ядра, в которых магическими являются как число протонов, так и число нейтронов. Этих ядер насчитывается всего пять: ${}^2\text{He}^4$, ${}^8\text{O}^{16}$, ${}^{20}\text{Ca}^{40}$, ${}^{20}\text{Ca}^{48}$, ${}^{82}\text{Pb}^{208}$, и они являются особенно устойчивыми.

Принято считать [12], что каждый нуклон находится в ядре в определенном квантовом состоянии, характеризуемом энергией, спином J .

Полный орбитальный момент заполненной оболочки равен нулю. Поэтому если ядро составлено только из заполненных протонных и нейтронных оболочек, то его спин будет также равен нулю.

Всякий раз, когда количество протонов или нейтронов в ядре достигает числа, отвечающего заполнению очередной оболочки, происходит скачкообразное

изменение некоторых характеризующих ядро величин (в частности, энергии связи). Это создает подобие периодичности в свойствах ядер в зависимости от A и Z , аналогичной периодическому закону для атомов. Оболочечная модель ядра позволила объяснить спины и магнитные моменты ядер, а также периодичность изменений их свойств. Эта модель особенно хорошо применима для описания легких и средних ядер, а также для ядер, находящихся в основном (невозбужденном) состоянии. Однако оболочечная структура ядер проявляется значительно слабее, чем в атомах. В ядрах индивидуальные квантовые состояния частиц («орбиты») возмущаются взаимодействием («столкновениями») их друг с другом гораздо сильнее, чем в атомах. Более того, известно, что большое число ядерных состояний совсем не похоже на совокупность движущихся в ядре независимо друг от друга нуклонов, т. е. не может быть объяснено в рамках оболочечной модели. Наличие таких коллективных состояний указывает на то, что представления об индивидуальных нуклонных состояниях – скорее методический базис, удобный для описания некоторых состояний ядра, чем физическая реальность. В этой связи в оболочечную модель вводят понятие квазичастиц. Ядро уподобляется «конечной» ферми-жидкости, а ядро в основном состоянии рассматривается как вырожденный ферми-газ квазичастиц, которые эффективно не взаимодействуют друг с другом, поскольку всякий акт столкновения, изменяющий индивидуальные состояния квазичастиц, запрещен принципом Паули. В возбужденном состоянии ядра, когда одна или две квазичастицы находятся на более высоких уровнях энергии, они, освободив орбиты внутри ферми-сферы, могут взаимодействовать как друг с другом, так и с образовавшейся дыркой в нижней оболочке. В результате этого взаимодействия может происходить переход квазичастиц из заполненных состояний в незаполненные, вследствие чего старая дырка исчезает, а новая появляется, что эквивалентно перемещению дырки по спектру состояний. Таким образом, согласно оболочечной модели, основывающейся на теории ферми-жидкости, спектр нижних возбужденных состояний ядер определяется движением 1-2 квазичастиц вне ферми-сферы и взаимодействием их друг с другом и с дырками внутри ферми-сферы.

Трудность теории состоит, однако, в том, что взаимодействие квазичастиц и дырок немало, и потому нет уверенности в невозможности появления низкоэнергетического возбужденного состояния, обусловленного большим числом квазичастиц вне ферми-сферы.

Таким образом, современная оболочечная модель ядра фактически является полуэмпирической схемой, позволяющей понять некоторые закономерности в структуре ядер, но неспособной последовательно количественно описать свойства ядер и рассматривается лишь как первое приближение к действительности [12]. В частности, не просто выяснить чисто теоретически порядок заполнения оболочек, а следовательно, и магические числа, которые служили бы аналогами периодов таблицы Менделеева для атомов.

По мере дальнейшего накопления экспериментальных данных о свойствах атомных ядер появлялись все новые факты, не укладывающиеся в рамки опи-

санных моделей. Так возникли обобщенная модель ядра (синтез капельной и оболочечной моделей), оптическая модель ядра (объясняет взаимодействие ядер с налетающими частицами) и т. д.

Ротационная модель

В области $150 < A < 190$ и $A > 200$ квадрупольные моменты Q ядер с $J > 1/2$ чрезвычайно велики – они отличаются от значений, представляемых оболочечной моделью в 10-100 раз. В этой же области связь энергии нижних возбужденных состояний ядер со спином ядра оказывается сходной с зависимостью энергии вращающегося волчка от его момента вращения. Эти факты послужили основанием для построения ротационной модели несферического ядра, впервые предложенной американским физиком Дж. Рейнуотером (1950 г.) и развитой в работах датского физика О. Бора и американского физика Б. Моттельсона [3]. Согласно этой модели, ядро представляет собой эллипсоид вращения. Его большая (α_1) и малая (α_2) полуоси выражаются через параметр деформации β ядра следующим образом:

$$\alpha_1 = \left(1 + \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \beta \right) R, \quad (3.98)$$

$$\alpha_2 = \left(1 - \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \beta \right) R, \quad (3.99)$$

где R – радиус вписанной в эллипсоид сферы; β – параметр деформации эллипсоида.

Параметры β варьируют в широких пределах (0,1-0,5) и особенно велики для ядер редкоземельных элементов. Описанная картина структуры несферического ядра соответствует обобщению оболочечной модели на случай движения квазичастиц в сферически несимметричном потенциальном поле (обобщенная модель). При этом несколько изменяется и схема энергетических состояний и квантовые числа, характеризующие индивидуальные «орбиты» частиц.

Существенная черта ротационной модели несферических ядер – сочетание медленного вращения всего ядра как целого с быстрым движением отдельных нуклонов в несферическом потенциальном поле. Это означает, что расстояние между соседними ротационными уровнями должно быть мало по сравнению с расстояниями между уровнями энергии нуклонов в потенциальной яме.

Данные о ротационных спектрах несферических ядер многочисленны. У некоторых ядер известно несколько ротационных полос (например, у ядра U^{235} 9 полос) [12]. Есть попытки интерпретировать некоторые легкие ядра как несферические (например, Mg^{24}). Моменты инерции таких ядер оказываются примерно в 10 раз меньше, чем у тяжелых.

Ротационная модель несферических ядер позволяет описать ряд существенных свойств большой групп ядер. Вместе с тем эта модель не является последовательной теорией, выведенной из «первых принципов». Ее исходные положения постулированы в соответствии с эмпирическими данными о ядрах. В рам-

ках этой модели не объяснен и сам факт возникновения ротационного спектра (вращения ядра как целого) [12].

Принято считать [3], что ядерное вещество обладает свойствами сверхтекучести вследствие «спаривания» нуклонов аналогично спариванию электронов в сверхпроводниках. Физической причиной спаривания считается притягательное взаимодействие частиц, движущихся по индивидуальным «орбитам» оболочечной модели.

В реальных ядрах предполагается спаривание нуклонов с одними и теми же значениями квантовых чисел (J, I) и с противоположными m полного момента вращения нуклонов.

Наиболее явное указание на сверхтекучесть ядерного вещества – отличие моментов инерции сильно несферических ядер от момента твердого эллипсоида. Теория сверхтекучести ядерного вещества удовлетворительно объясняет как величины моментов инерции, так и их зависимость от параметра деформации β . Однако в целом сверхтекучесть ядерного вещества выражена в реальных ядрах не так ярко, как сверхпроводимость металлов или сверхтекучесть жидкого гелия при низких температурах. Причина этого – ограниченность размеров ядер, сравнимых с размером куперовской пары. Поэтому менее надежны и выводы теории сверхтекучести ядер. Главным препятствием теории и здесь является то обстоятельство, что взаимодействие между ядерными частицами не может считаться слабым (в отличие, например, от спаривательного взаимодействия электронов в металле). Поэтому принято считать [3], что наряду с парными корреляциями следовало бы учитывать и корреляции большого числа частиц (например, четырех). Описанные ядерные модели являются основными, охватывающими главные свойства большинства ядер. Они, однако, недостаточны для описания всех наблюдаемых свойств основных и возбужденных состояний ядер. Так, в частности, для объяснения спектра коллективных возбуждений сферических ядер привлекается модель поверхностных и квадрупольных колебаний жидкой капли, с которой отождествляется ядро (вибрационная модель). Для объяснения свойств некоторых ядер используются представления о «кластерной» структуре ядра. Например, предполагается, что ядро Li значительную часть времени проводит в виде дейтрона и α – частицы, вращающихся относительно центра масс ядра.

Все ядерные модели играют роль более или менее вероятных рабочих гипотез. Последовательное же объяснение наиболее важных свойств ядер на прочной основе общих принципов и данных о взаимодействии нуклонов остается пока одной из нерешенных фундаментальных проблем современной ядерной физики [12]. Независимо от модели структуры ядра целостность ядра обусловлена проявлением ядерных сил между нуклонами, с которыми тесно связано понятие энергии связи ядра $\varepsilon_{св}$. Это энергия, которую необходимо затратить, чтобы расщепить ядро на отдельные нуклоны. Она равна разности суммы масс входящих в него нуклонов и массы ядра, умноженной на квадрат скорости света (c^2).

$$\varepsilon_{св} = (Zm_p + Nm_n - M)c^2, \quad (3.100)$$

здесь m_p , m_n и M – массы протона, нейтрона и ядра.

Особенностью ядер атомов является тот факт, что $\varepsilon_{св}$ приблизительно пропорционально числу нуклонов в ядре, так что удельная энергии связи $\varepsilon_{св}/A$ слабо меняется при изменении A (для большинства ядер $\varepsilon_{св}/A = 6-8$ МэВ). Это свойство, называемое насыщенностью ядерных сил, означает, что каждый нуклон эффективно связывается не со всеми нуклонами ядра (в этом случае энергия связи была бы пропорциональна A^2 при $A \gg 1$), а лишь с некоторыми из них. Считается, что теоретически это возможно, если силы при изменении расстояния изменяют знак (притяжение на одних расстояниях сменяется отталкиванием на других). Примерно аналогичный характер сил наблюдается при взаимодействии магнита и индукционной катушки. При приближении магнита к катушке в ней индуцируется ток, который своим магнитным полем противодействует (препятствует) приближению магнита, а при изменении движения магнита на обратное, т. е. удалении магнита, в катушке индуцируется ток, который своим магнитным полем противодействует удалению магнита, т. е. притягивает магнит. Зависимость $\varepsilon_{св}$ от A и Z для всех известных ядер приближенно описывается полумпирической массовой формулой

$$\varepsilon_{св}(A, Z) = \varepsilon A - \alpha A^{2/3} - \beta Z^2 A^{-1/3} - \gamma \frac{\left(\frac{A}{2} - Z\right)^2}{A} + \delta(A, Z), \quad (3.101)$$

где ε , α , β и γ – постоянные, имеющие размерность энергии ($\alpha = 13,03$ МэВ, $\beta = 0,5835$ МэВ, $\gamma = 77,25$ МэВ, $\varepsilon = 14,03$ МэВ).

Первое, и наибольшее, слагаемое определяет линейную зависимость энергии связи от A ; второй член, уменьшающий энергию связи, обусловлен тем, что часть нуклонов находится на поверхности ядра; третье слагаемое – энергия электростатического нуклонного отталкивания протонов (обратно пропорциональна радиусу ядра и пропорциональна квадрату его заряда); четвертое слагаемое учитывает влияние на энергию связи неравенства числа протонов и нейтронов в ядре и, наконец, пятое слагаемое зависит от четности чисел A и Z

$$\delta(A, Z) = \begin{cases} 33,57 A^{-3/4} \text{ МэВ} - \text{четные } A \text{ и } Z; \\ 0 - \text{нечетные } A; \\ -33,57 A^{-3/4} \text{ МэВ} - \text{четные } A, \text{ нечетные } Z. \end{cases} \quad (3.102)$$

Эта сравнительно небольшая поправка оказывается, однако, весьма существенной для ряда явлений, и, в частности, для деления тяжелых ядер. Именно она определяет делимость ядер нечетных по A изотопов урана под действием медленных нейтронов. Энергия отделения нуклонов в ядрах обнаруживает такие же закономерности, как и потенциала ионизации атомов [3]. Самые большие скачки энергии связи ядер наблюдаются при одинаковых числах нуклонов, равных 2, 8, 20, 28, 50, 82, и 126. С точки зрения структуры ядра эти числа аналогичны порядковым номерам инертных газов ($Z = 2, 10, 18, 36, 54$ и 86). Как и в случае атомов, они соответствуют заполнению главных оболочек. Такие же, но более слабые эффекты иногда наблюдаются при заполнении подоболочек. Это происходит в атомах с порядковыми номерами 4, 12, 30, 48 и 80 и

в ядрах с одинаковыми числами нуклонов 6, 16, 40 и 58. То обстоятельство, что заполнение протонных и нейтронных оболочек происходит при одних и тех же числах нуклонов, говорит о том, что форма среднего поля для протонов и нейтронов примерно одинакова [3].

Д. А. Асамбаевой [13, стр. 9-10 «Кристаллическая модель ядра и атома»] предлагается новая модель ядра и атома, разработанная на основе «Единой теории поля» С. Кадырова, согласно которой «...протон и электрон – абсолютно устойчивые, многослойные, самовращающиеся сгустки гравитационного поля, имеющие ядрышки, внутри которых масса, заряд и спин возрастают к их центрам». Предлагаемая ею модель ядра атома представляется в виде кристаллической решетки, в узлах которой, чередуясь, располагаются протоны и нейтроны. Протоны и нейтроны вступают во все виды взаимодействия (ядерное, электромагнитное и гравитационное). При этом протон и нейтрон притягиваются как разнородные частицы, а протон с протоном и нейтрон с нейтроном отталкиваются как однородные. При образовании атома по кристаллической модели ядра и атома Д. А. Асамбаевой, электроны и протоны перекрываются объемами. Во многоэлектронном атоме электроны не вращаются вокруг ядер, а каждый из них перекрывается с каждым протоном ядра. В результате атом также представляет собой кристаллическую решетку, состоящую из протонов с электронами и нейтронов, вращающихся с частотой де Бройля.

Некоторые исследователи предельно упрощают строение ядра и атома в целом. Так, например В. А. Лебедев [13, стр. 117-118], рассматривает гравитацию как ускоренное движение эфира к тяготеющим телам, ядро атома представляет как «стоки эфира». В связи с этим, по его мнению, материя существует в двух основных состояниях: ядро атома с известной плотностью $\approx 10^{14}$ г/см³ и эфир с вычисленной плотностью $\approx 10^{-25}$ г/см³, совпадающей с плотностью межзвездного пространства. Вток эфира в поверхность ядра со скоростью c определяет для тела с массой m внутреннюю энергию покоя – mc^2 . Причем величина c связана с процессом «фазового перехода» из эфирного состояния в ядерное.

По вопросу природы ядерных сил имеются также различные мнения. Например, Я. Г. Ключкин в работе «Гравитационное обобщение уравнений Максвелла» [13, стр. 92-93] с уверенностью утверждает, что силы, называемые ныне ядерными, на самом деле – гравитационные.

Из этого анализа следует, что проблема изучения особенностей строения ядер атомов еще далека от завершения. Пока остается больше вопросов, чем ответов на них. К примеру, если справедлива оболочечная модель строения ядра, то ядра должны состоять из последовательных протонных и нейтронных оболочек. В этом случае при переходе от более легких элементов к более тяжелым ядро должно было строиться сначала за счет поглощения только протонов (некоторого количества), затем только нейтронов и т. д. В действительности такого нет. Если проанализировать последовательность элементов либо путем изменения количества нейтронов n или протонов p , либо путем схемы деления ядер в рядах ядерных превращений, то этого не просматривается. Если энергия связи между нуклонами не зависит от вида нуклона, то должны были суще-

ствовать устойчиво с равной вероятностью и такие атомы, у которых $N_n < N_p$. Однако таких устойчивых атомов, кроме протия, когда в ядре только один протон и нет нейтронов, не существует. Таким образом, ядерная система из нуклонов, когда количество нейтронов в ядре было бы меньше чем протонов, должна быть очень неустойчива.

Более того, известно [3], что чем больше избыток нейтронов, тем легче их вырывать из ядра, а чем меньше избыток нейтронов, тем труднее их вырвать из ядра. В то же время чем больше избыток нейтронов, тем труднее вырывать протоны из ядра, а чем меньше избыток нейтронов, тем легче вырывать протоны из ядра. Таким образом, протоны и нейтроны в ядре находятся в определенном балансовом соотношении и это противоречит оболочечной модели ядра.

Как отмечает Дж. Орир [8], «...основная задача физики состоит в объяснении всех физических явлений на основе небольшого числа простых фундаментальных законов. Однако квантовая электродинамика не может объяснить структуры атомных ядер, которые, как теперь известно, состоят из протонов и нейтронов. Чтобы объяснить, почему протон внутри ядра столь прочно связан, пришлось ввести фундаментальные силы нового типа – ядерные. Для преодоления электростатического отталкивания протонов эти силы должны быть больше электростатических, причем на порядок больше потенциальной энергии электростатического отталкивания двух протонов». И далее Дж. Орир констатирует, что «...в атомной физике единственным атомом, легко поддающимся анализу, был атом с одним протоном и одним электроном, т. е. атом водорода. Аналогичная ситуация имеет место и в ядерной физике: простейшее ядро, поддающееся анализу, состоит из одного протона и одного нейтрона, т. е. представляет собой дейтрон. В дейтроне протон и нейтрон связаны друг с другом с энергией 2,22 МэВ. Эта величина получается из измеренных значений масс или энергий покоя протона, нейтрона и дейтрона, которые равны соответственно 938,21; 939,50 и 1875,49 МэВ. Энергия связи ядра определяется суммой масс отдельных нуклонов за вычетом массы ядра. В случае дейтрона энергия связи равна $m_p + m_n - m_d = 2,22$ МэВ».

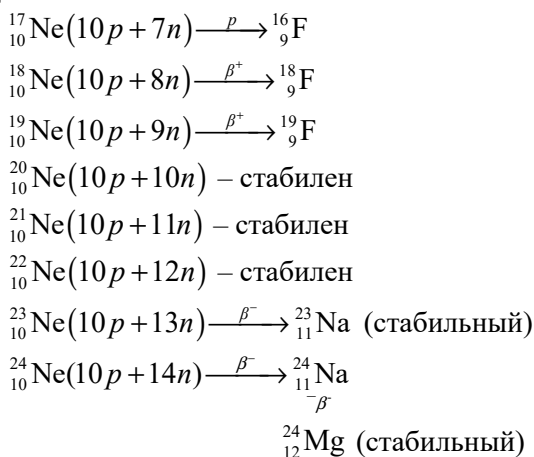
Для углубления наших знаний о строении ядра рассмотрим некоторые закономерности, основанные на анализе свойств ядер различных элементов и их изотопов по данным [11].

На рис. 3.14 представлены изотопы всех элементов с четным числом протонов в ядрах (четные элементы), а на рис. 3.15 – с нечетным числом протонов в ядрах (нечетные элементы) и условными обозначениями показаны вероятные процессы, происходящие с их ядрами. Как видно, большая часть элементов (до № 84) имеют стабильные изотопы, причем для четных элементов характерно наличие 3-6 стабильных изотопов у одного элемента, а для нечетных элементов 1-2 стабильных изотопа. Наряду с этим многие изотопы являются нестабильными, при этом возможен α -распад как всех атомов данного изотопа, так и небольшой его части (доли %); возможно спонтанное деление ядра на два осколка, вылет из ядра нейтрона, протона, позитрона, электрона или же наоборот – захват орбитального электрона. Причем проявление одного или другого ядер-

ного процесса имеет определенную закономерность, отражающуюся в избытке нейтронов или протонов в ядре. Для первых элементов таблицы Менделеева до титана (${}_{22}\text{Ti}$) включительно легкие изотопы четных элементов характеризуются ядерным распадом с вылетом положительно заряженных частиц – протона или позитрона. Причем протонный распад проявляется при наличии трех избыточных протонов в ядре по отношению к нейтронам. Такими являются, например, атомы ${}^{13}_8\text{O}$, ${}^{17}_{10}\text{Ne}$, ${}^{21}_{12}\text{Mg}$, ${}^{25}_{14}\text{Si}$, ${}^{29}_{16}\text{S}$, ${}^{33}_{18}\text{Ar}$, ${}^{37}_{20}\text{Ca}$, ${}^{41}_{22}\text{Ti}$. Ядра изотопов как четных, так и нечетных элементов, имеющие в избытке 1-2 протона по отношению к нейтронам, характеризуются позитронным распадом. При равенстве числа протонов и нейтронов в ядре для четных элементов характерна стабильность ядра (рис. 3.14), а для нечетных элементов – нестабильность ядра с излучением позитрона (рис. 3.15).

При дальнейшем увеличении атомной массы соответствующего элемента после стабильного изотопа ядрами выбрасываются избытки отрицательного заряда в виде электрона (β -распад).

Например, изотопы неона характеризуются следующей закономерностью распада:



Наиболее тяжелые изотопы отдельных элементов, такие, например, как ${}^{12}_4\text{Be}$, ${}^{16}_6\text{C}$ и ${}^{18}_7\text{N}$, при избытке 3-4 нейтронов в ядре распадаются с выбросом нейтрона (рис. 3.14, 3.15). Элементы с порядковым номером выше 23 не имеют изотопов, которые распадались бы с выделением протона или нейтрона, а в остальном повторяют предыдущую закономерность. В группе элементов от № 23 (${}_{23}\text{V}$) до №60 (${}_{60}\text{Nd}$) наиболее легкие изотопы каждого элемента характеризуются позитронным распадом, затем с увеличением атомной массы начинает проявляться захват ядром орбитального электрона; после стабильных, изотопы с повышенной атомной массой данного элемента характеризуются электронным (β^-) распадом, в результате которого происходит распад нейтрона на вылетающей из ядра электрон и остающийся в ядре протон и, как следствие, образование нового химического элемента на номер выше.

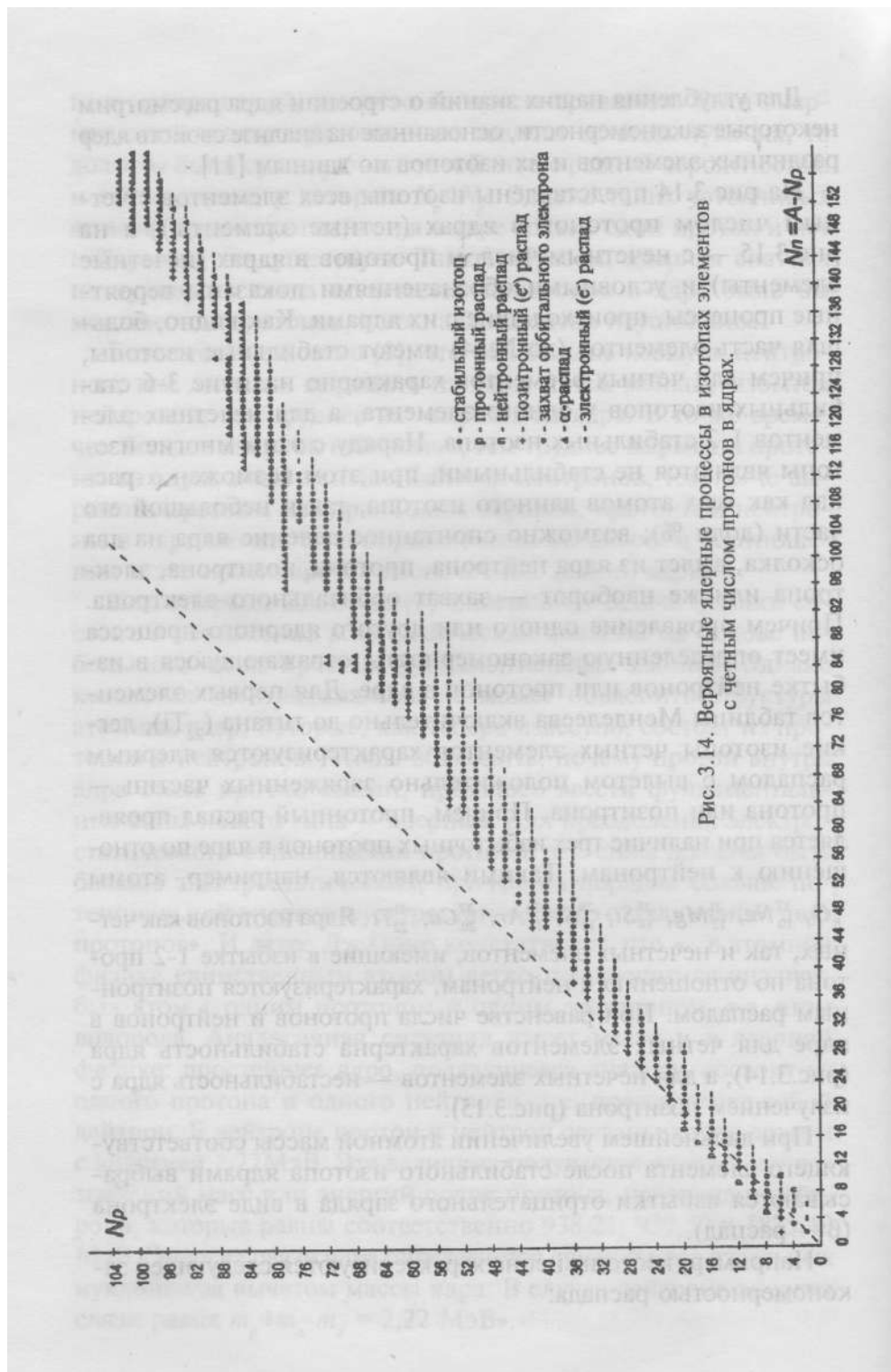


Рис. 3.14. Вероятные ядерные процессы в изотопах элементов с четным числом протонов в ядрах.

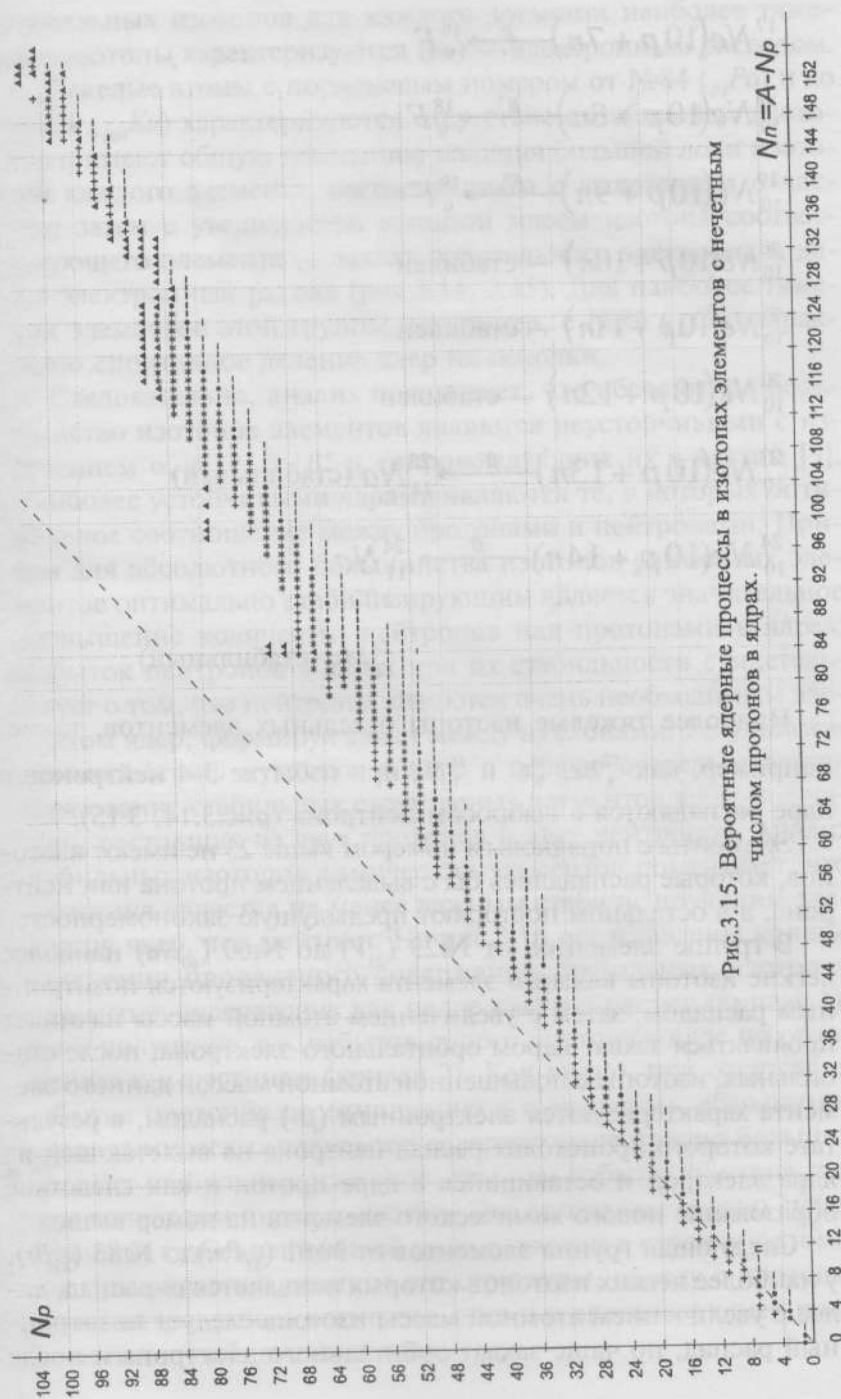


Рис.3.15. Вероятные ядерные процессы в изотопах элементов с нечетным числом протонов в ядрах.

Следующая группа элементов от № 61 (${}_{61}\text{Pm}$) до № 83 (${}_{83}\text{Br}$), у наиболее легких изотопов которых появляется α -распад, далее с увеличением атомной массы изотопа следует позитронный распад, но чаще захват орбитального электрона и после стабильных изотопов для каждого элемента наиболее тяжелые изотопы характеризуются (β^-)-электронным распадом.

Тяжелые атомы с порядковым номером от № 84 (${}_{84}\text{Po}$) и до № 104 (${}_{104}\text{Rb}$) характеризуются отсутствием стабильных изотопов и имеют общую тенденцию наличия большой доли изотопов каждого элемента, распадающихся с выделением α -частиц; затем с увеличением атомной массы изотопа соответствующего элемента – захват орбитального электрона и далее электронный распад (рис. 3.14, 3.15). Для наиболее тяжелых элементов этой группы, например, с № 96 (${}_{96}\text{Cm}$) характерно спонтанное деление ядер на осколки. Следовательно, анализ показывает, что абсолютное большинство изотопов элементов являются неустойчивыми с излучением α , p , n , β^- , β^+ и сопровождающих их γ -частиц [9]. Наиболее устойчивыми ядрами являются те, в которых оптимальное соотношение между протонами и нейтронами. Причем для абсолютного большинства изотопов различных элементов оптимально стабилизирующим является значительное превышение количества нейтронов над протонами в ядрах. Избыток нейтронов в ядрах при их стабильности свидетельствует о том, что нейтроны являются очень необходимым элементом ядер, формируя связи между нуклонами. Результатом взаимодействия нуклонов в ядре в первую очередь является образование стабильных структурных элементов ядра – α -частиц, состоящих из двух протонов и двух нейтронов. Анализ стабильных изотопов химических элементов показывает, что α -частица является не менее важным стабилизирующим элементов ядер, чем нейтрон. На рис. 3.16 представлены кривые изменения процентного содержания стабильных изотопов элементов, содержащих как целое число α -частиц (кривая 1), так и полуцелое, т. е. избыток одного протона в ядре по отношению к α -частицам (кривая 2). Как видно, при отсутствии избытка протонов по отношению к α -частицам, абсолютное число химических элементов содержат существенно больший процент стабильных изотопов, чем при избытке протона, т. е. при полуцелом числе α -частиц. Это свидетельствует о существенной стабилизирующей роли α -частиц в строении атома, как правой единицы его структуры, наряду с протонами и нейтронами, а возможно даже и о превалирующей роли α -частиц в стабилизации ядер.

В соответствии с нашими представлениями о роли и месте электронов и фотонов в атоме и ядре, структурно α -частицу можно представить как эллипсоид вращения, состоящий из 4 протонов и двух электронов (рис. 3.17). Четыре протона (p_1 – p_4) расположены в вершинах четырехугольника. Вокруг каждого из них вращаются фотоны в виде γ -квантов (γ_p). Вокруг двух противоположно расположенных протонов вращаются на близком расстоянии электроны (e_1 ; e_2). Вокруг этих электронов также вращаются фотоны в виде γ -квантов (γ_e).

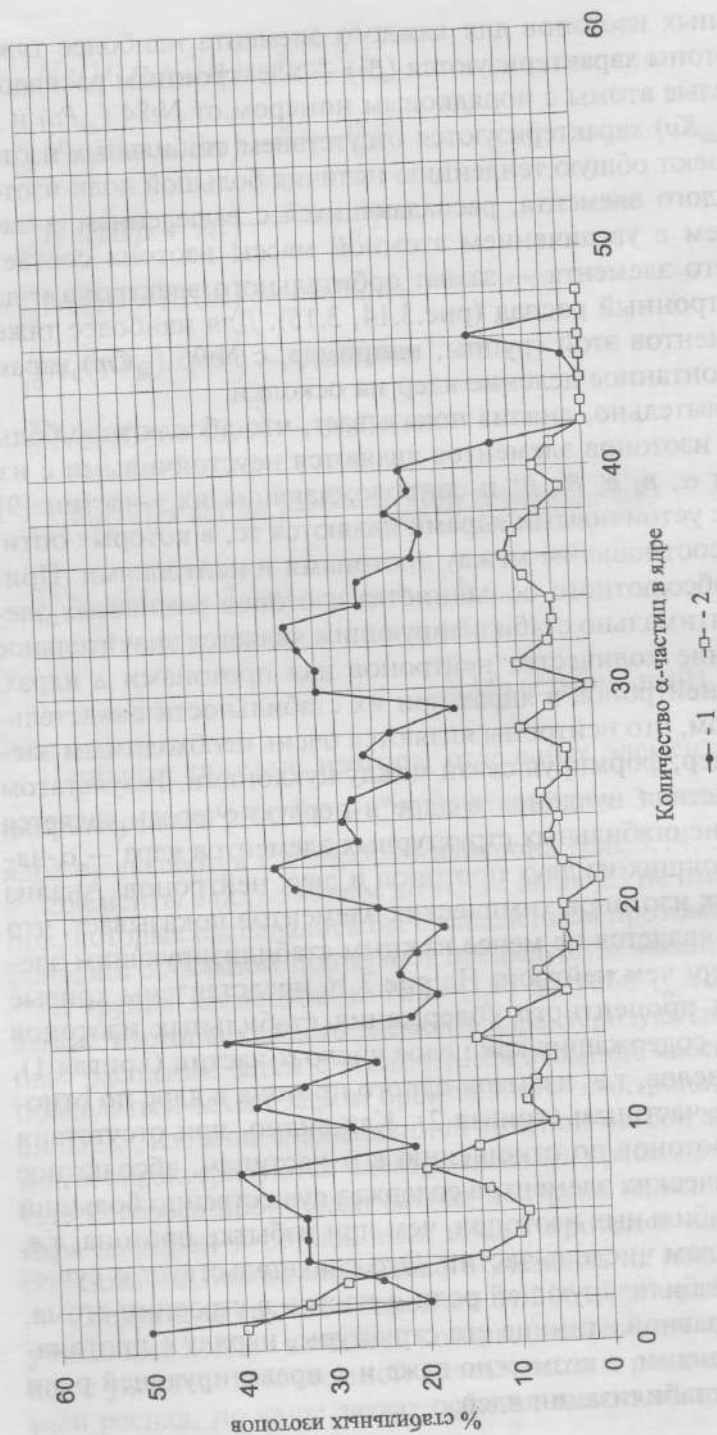


Рис.3.16. Процент стабильных изотопов элементов, содержащих целое число α -частиц (кривая 1) и полуцелое (кривая 2)

Таким образом, электроны вместе с протонами, вокруг которых они вращаются, представляют собой нейтроны, причем взаимодействие электронов с протонами в нейтронах осуществляется через электромагнитные поля фотонов γ -квантов как протонов, так и электронов. Фотоны (γ -кванты) состоят из разномыменно заряженных полумасс, колебания которых происходят синхронно таким образом, чтобы выстраивалась единая электрическая цепочка положительных и отрицательных зарядов электрона, фотонов и протона.

В момент пролета электрона e_1 между свободным протоном p_1 и протоном p_4 нейтрона n_1 , электрон e_1 совместно с фотонными полями электрона и протонов p_1 и p_4 осуществляет связующую цепь (рис. 3.17а). Через одну шестую часть периода вращения электрона e_1 вокруг протона p_4 в нейтроне n_1 этот электрон находится между протоном p_2 нейтрона n_2 и протоном p_4 нейтрона n_1 и через свое фотонное поле и фотонные поля этих протонов осуществляет связующую цепь между нейтронами n_1 и n_2 (рис. 3.17б). Одновременно электрон e_1 взаимодействует со свободными протонами p_1 и p_3 , притягивая их в направлении центра α -частицы. Через одну треть периода этот электрон (e_1) уже находится между свободным протоном p_3 и протоном p_4 нейтрона n_1 также совместно с фотонными полями электрона и протонов p_3 , p_4 осуществляет связующую цепь между свободным протоном p_3 и протоном p_4 нейтрона n_1 (рис. 3.17в).

Таким образом, в течение одного полупериода вращения электрона e_1 вокруг протона p_4 в нейтроне n_1 , он создает благоприятные условия для притяжения к себе и к нейтрону n_1 двух свободных протонов и нейтрона n_2 , а в следующий полупериод, когда электрон e_1 находится с внешней стороны протона p_4 , создаются условия для отталкивания свободных протонов p_1 и p_3 от протона p_4 нейтрона n_1 . Но в этот момент электрон e_2 нейтрона n_2 принимает на себя роль связующей цепи между нуклонами α -частицы. Как видно из рис. 3.17г, через полпериода синхронного вращения электронов в нейтронах n_1 и n_2 электрон e_2 нейтрона n_2 оказывается между свободным протоном p_3 и протоном p_2 нейтрона n_2 и совместно с фотонными полями протонов p_2 и p_3 и своим фотонным полем осуществляет связующую роль между нейтроном n_2 и свободным протоном p_3 . Еще через одну шестую периода синхронного вращения электрон e_2 уже находится на линии нейтронов n_1 и n_2 и через свое фотонное поле и фотонные поля протонов p_2 и p_4 создает электрическую связь притяжения между протонами p_2 и p_4 нейтронов n_1 и n_2 . Одновременно электрон e_2 взаимодействует со свободными протонами p_1 и p_3 , которые стремятся приблизиться к электрону e_2 и тем самым все протоны – свободные p_1 и p_3 и связанные p_2 и p_4 в нейтронах n_1 и n_2 испытывают силы притяжения, направленные к центру α -частицы (рис. 3.17д). В последнюю часть одной шестой периода синхронного вращения электронов e_1 и e_2 в нейтронах n_1 и n_2 α -частицы электрон e_2 оказывается на одной линии между свободным протоном p_1 и протоном p_2 нейтрона n_2 и через свое фотонное поле и фотонные поля протонов p_1 и p_2 приближает протон p_1 к нейтрону n_2 в α -частице. В целом результатом такого последовательного взаимодействия свободных протонов и протонов нейтронов через электроны является непрерывный колебательный процесс в виде сжатия и расширения α -частицы, но с сохранением ее целостности.

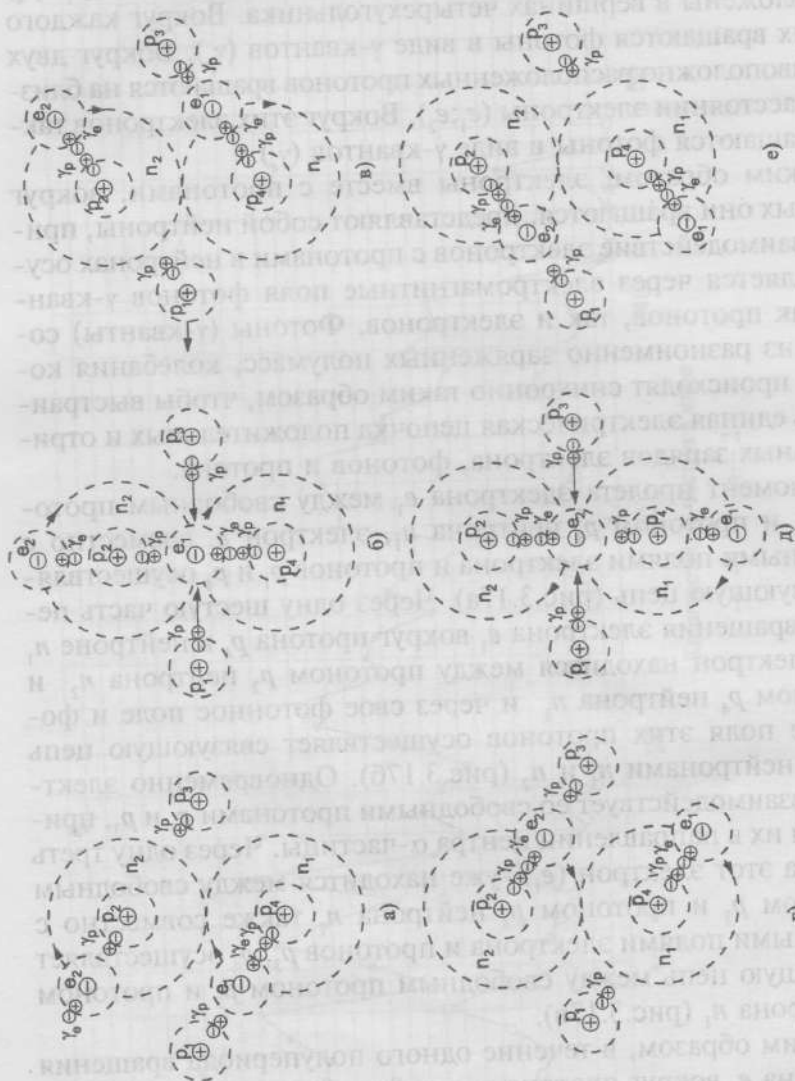


Рис. 3.17. Структура α-частицы в различные моменты вращения электронов вокруг протонов в нейтронах

При наличии в ядре нескольких α -частиц они могут взаимодействовать и удерживаться между собой либо через электроны нейтронов самих α -частиц, либо избыточными нейтронами за счет их связующего элемента – электрона.

Нейтрон состоит из протона и электрона, который вращается, как и в атоме водорода, вокруг протона, но на значительно меньшем расстоянии (10^{-16} – 10^{-17} м) и этот электрон нейтрона связывает между собой протон нейтрона и рядом расположенные протоны ядра. Можно предположить, что избыточное соотношение нейтронов в ядре по отношению к протонам является оптимальным лишь потому, что основным структурным элементом ядер является α -частица, а избыток нейтронов заполняет межвапдинное пространство между α -частицами, создавая этим самым наиболее прочную структуру ядра и внутриядерного взаимодействия нуклонов.

Наибольший процент стабильных изотопов имеют ядра с 1, 8, 11, 14, 22, 30–33 α -частицами в состоянии с оптимальным количеством нейтронов (рис. 3.16).

На рис. 3.18 для стабильных изотопов представлена статистическая связь между количеством α -частиц (N_α) и избыточным количеством нейтронов над числом α -частиц ($\Delta N_n = A - 2Z$). Как видно, для ядер с $N_\alpha \geq 20$, т. е. элементов с $Z \geq 40$, имеет место прямолинейная функциональная зависимость.

$$N_\alpha = 13 + 0,7\Delta N_n. \quad (3.103)$$

Экстраполяция этой кривой на ось N_α показывает, что 13 α -частиц теоретически могут существовать во внутренних оболочках ядер без избытка нейтронов, но при условии наличия внешних оболочек ядра из α -частиц и избыточных нейтронов из расчета 10 нейтронов на 7 α -частиц.

Таким образом, на первый взгляд, структурно ядра можно представить увеличивающимися от центра ядра оболочками, состоящими из α -частиц, которые дополнительно скрепляются избыточными нейтронами. Однако какой физический смысл имеет утверждение, что теоретически во внутренних оболочках ядра могут состоять из α -частиц без избытка нейтронов? Это говорит о том, что в этом случае α -частицы в ядре должны быть расположены строго последовательно, т. е. создают определенную кристаллическую структуру – определенную последовательность соединения между собой протонов и нейтронов в виде самостоятельных структурных единиц α -частиц. А что же происходит при дальнейшем увеличении числа протонов и нейтронов в ядре, причем со значительным избытком нейтронов? Логично предположить, что эти избыточные нейтроны в действительности и не являются избыточными, потому что с некоторого момента начинается формирование в ядрах α -частиц, но не полностью самостоятельных и состоящих из $2p$ и $2n$, а строящихся на основе одного из протонов уже имеющихся в ядре α -частиц. В этом случае для создания зависимой α -частицы необходимо дополнительно только $1p$ и $2n$, т. е. соотношение между протонами и нейтронами существенно изменяется. Проанализируем под этим углом зрения кривую зависимости $N_\alpha = f(\Delta N_n)$. Так, для верхней части прямолинейного участка при $N_\alpha = 40$ величина $\Delta N_n = 40$. В атоме, в ядре которого $N_\alpha = 40$ и $\Delta N_n = 40$, содержится $80p$ и $120n$. Это количество протонов и

нейтронов могут представлять 40 α -частиц с избытком 40 нейтронов, или можно представить, что имеется 20 полных α -частиц, состоящих каждая из $2p$ и $2n$, на строительство которых требуется $40p$ и $40n$, и 40 α -частиц неполных, т. е. образующихся на основе 40 протонов уже сформированных самостоятельных полных α -частиц. В этом случае потребуется $40p$ и $80n$, и тогда общее количество α -частиц в ядре достигает 60 единиц, причем они построены из $80p$ и $120n$. Несамостоятельные или надстроенные α -частицы, формирующиеся на основе протонов самостоятельных (основных, каркасных) α -частиц, будут расположены по обеим их сторонам и перпендикулярно плоскостям этих α -частиц. Таким образом будет формироваться кластерная кристаллическая структура с упорядоченным распределением протонов и нейтронов в узлах кристаллической решетки, основным структурным элементом которой является кристаллическая структура α -частицы.

Для начального участка прямолинейной зависимости $N_\alpha = f(\Delta N_n)$ (рис. 3.18) характерно $N_\alpha = 20$ и $\Delta N_n = 10$, т. е. ядро такого элемента содержит $40p$ и $50n$. Это ядро можно представить состоящим из 15 самостоятельных α -частиц ($30p + 30n$) и 10 неполных надстроенных α -частиц (т. е. $10p + 20n$), которые в целом и содержат $40p$ и $50n$.

Можно ли под этим углом зрения проинтерпретировать и криволинейный участок зависимости $N_\alpha = f(\Delta N_n)$ (рис. 3.18)? Криволинейный участок этой зависимости показывает, что статистически в среднем избыточное количество нейтронов составляет:

- на 5 α -частиц – 1 нейтрон;
- на 8 α -частиц – 2 нейтрона;
- на 12 α -частиц – 4 нейтрона;
- на 15 α -частиц – 6 нейтронов;
- на 18 α -частиц – 8 нейтронов.

Состояние ядра из 18 полных α -частиц и 8 избыточных нейтронов ($36p + 44n$) можно представить как 14 полных α -частиц, т. е. $28p + 28n$ и 8 неполных надстроенных α -частиц, т. е. $8p + 16n$. Общая сумма нуклонов в этом случае составляет также $36p$ и $44n$, объединенных в кристаллической структуре из 22 α -частиц.

Состояние ядра из 15 α -частиц и 6 избыточных нейтронов ($30p + 36n$) можно представить как 12 полных α -частиц ($24p + 24n$) и 6 неполных α -частиц ($6p + 12n$), т. е. общая сумма нуклонов $30p + 36n$.

Состояние ядра из 12 полных α -частиц ($24p + 24n$) и 4 избыточных нейтронов можно представить как систему из 10 полных α -частиц ($20p + 20n$) и 4 неполных надстроенных α -частиц ($4p + 8n$), т. е. общая сумма нуклонов $24p + 28n$.

Состояние ядра из 8 полных α -частиц ($16p + 16n$) и 2 избыточных нейтронов можно представить как 7 полных α -частиц ($14p + 14n$) и 2 надстроенных α -частиц ($2p + 4n$), т. е. общая сумма нуклонов $16p + 18n$.

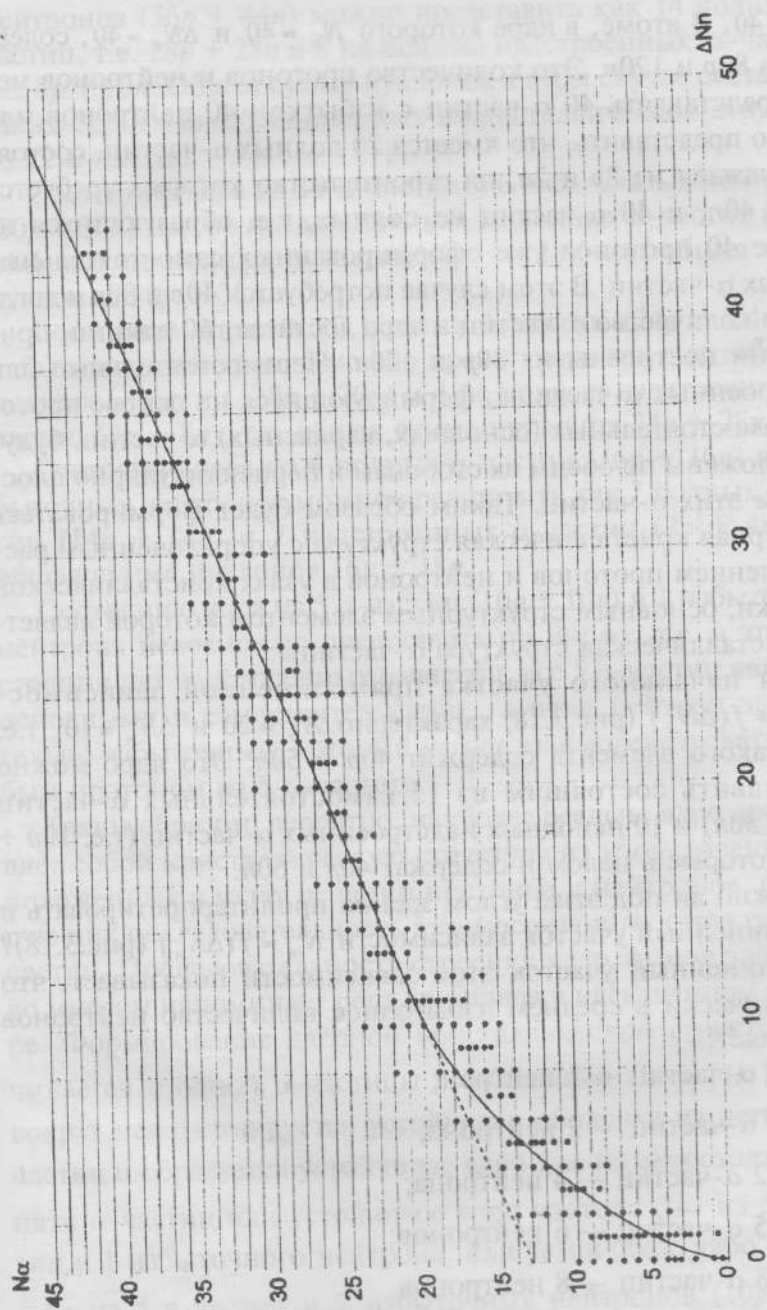


Рис. 3.18. Статистическая связь между количеством α -частиц ($N\alpha$) и избытком нейтронов (ΔNn) в ядрах стабильных изотопов

Состоянию ядра из 5 α -частиц ($10p + 10n$) и 1 избыточного нейтрона невозможно представить по-иному, т. е. в этом состоянии нет надстроенных α -частиц, все 5 α -частиц являются основными и самостоятельными, а один нейтрон действительно избыточный, который может взаимодействовать с любым протоном из 5 α -частиц.

Таким образом, вероятно, наиболее реально ядро представляет собой кристаллическую структуру из упорядоченно расположенных в узлах решетки протонов и нейтронов, формирующих последовательность взаимосвязанных структур из α -частиц. Последовательность строения ядер атомов элементов во многом напоминает рост кристалла в насыщенном растворе. Формирование ядерной кристаллической структуры начинается с одной α -частицы (стабильный атом ${}^4_2\text{He}$), затем вокруг нее формируется устойчивая оболочка из четырех α -частиц и образуется устойчивое ядро ${}^{20}_{10}\text{Ne}$ из самостоятельных пяти α -частиц или устойчивое ядро изотопа ${}^{21}_{10}\text{Ne}$ из 5 α -частиц и 1 избыточного нейтрона, или устойчивое ядро изотопа ${}^{22}_{10}\text{Ne}$ из 5 α -частиц и 2 избыточных нейтронов ($10p + 12n$) (рис. 3.14). Последнее состояние ядра изотопа можно представить также состоящим из 4 самостоятельных α -частиц ($8p + 8n$) и 2 надстроенных α -частиц ($2p + 4n$), т. е. общее число нуклонов $10p + 12n$.

При дальнейшем усложнении структуры ядра его кристаллическая решетка формируется как за счет образования дополнительно некоторого количества самостоятельных α -частиц из протонов и нейтронов, так и надстроенных α -частиц. Но в целом кристаллический каркас ядра формируется в виде последовательных оболочек из α -частиц вокруг единого центра, а в узлах кристаллической решетки находятся протоны и нейтроны, причем нейтроны состоят из протонов, вокруг которых вращаются электроны, при этом и протоны и электроны имеют вокруг себя электромагнитные поля в виде фотонов (γ_p, γ_e). Поле μ -квантов вокруг заряженных частиц ядра – протонов и электронов своей полярностью компенсирует их заряды и формирует общую электрическую цепь. Так как μ -кванты ядер имеют энергию достаточную для образования электрона и позитрона, то величины их положительного и отрицательного зарядов эквивалентны зарядам протона и электрона и поэтому компенсируют кулоновские силы отталкивания между протонами.

Следовательно, в ядре, так же как и вокруг него в атоме в целом, вращающимися вокруг других частиц являются фотоны и электроны.

В ядре нуклоны, т. е. протоны, нейтроны и α -частицы в целом не вращаются вокруг какого-то центра, они вращаются лишь вокруг своей оси под воздействием влияния вращающихся вокруг них фотонов. Вращение протонов приводит к появлению у них собственного механического и магнитного момента (спина), взаимодействие которых друг с другом, а также с орбитальными и собственными (спиновыми) магнитными моментами электронов и являются той дополнительной к электрическому взаимодействию нуклонов силой, результирующая которых и представляет собой так называемые ядерные силы, превали-

рующие над чисто электрическими силами между нуклонами в ядрах. Поэтому кажется, что электрические силы отталкивания между протонами меньше, чем ядерные силы взаимодействия, хотя природа ядерных сил также электромагнитная через электроны нейтронов и фотоны.

Если же представить, что ядро состоит не просто из протонов и нейтронов, а в нем есть электроны, т. е. ядро имеет протонно-электронно-фотонную структуру и кристаллический каркас из α -частиц, то как же объяснить отмеченные выше положения относительно азотной катастрофы и суммарного спинового числа ядра дейтерия?

Попробуем с этими противоречиями разобраться. Для этого надо вернуться к истории открытия спина электрона и выяснить, как он рассчитывается и одинаков ли для электронов, вращающихся вокруг ядра атома и внутри ядра вокруг протонов. Поэтому предварительно вернемся к структуре атома. В разделе 3.1 показано, что при движении электрона по орбите атома он обладает механическим орбитальным моментом количества движения p и орбитальным магнитным моментом p_m . Величина

$$p_m = J \cdot S = e \cdot v \cdot S = e \frac{v}{2\pi} \cdot \pi r^2 = \frac{evr}{2}, \quad (3.104)$$

где S – площадь орбиты электрона; J – сила тока; v – частота вращения электрона по орбите; v – скорость вращения электрона; r – радиус орбиты электрона; e – заряд электрона.

$$p = m_e \cdot v \cdot r, \quad (3.105)$$

где m_e – масса электрона.

Соотношение магнитного и механического орбитальных моментов электрона

$$\frac{p_m}{p} = \frac{evr}{2m_e vr} = \frac{e}{2m_e}, \quad (3.106)$$

и следовательно

$$\vec{p}_m = -\frac{e}{2m_e} \vec{p} = g \vec{p}, \quad (3.107)$$

так как векторы \vec{p}_m и \vec{p} направлены противоположно, где $g = -\frac{e}{2m_e}$ – гиромагнитное отношение для электрона.

Этот результат справедлив для любого электрона в атоме. Для атомов, у которых более одного электрона на орбите вокруг ядра, вектором орбитального магнитного момента атома \vec{P}_m называется векторная сумма орбитальных магнитных моментов всех его электронов (от $i=1$ до Z)

$$\vec{P}_m = \sum_{i=1}^Z \vec{p}_{m_i}. \quad (3.108)$$

Соответственно, вектором механического орбитального момента количества движения атома называется векторная сумма орбитальных механических моментов количества движения всех электронов в атоме

$$\vec{P} = \sum_{i=1}^Z \vec{p}_i \quad (3.109)$$

и, в целом, для атома справедливо соотношение:

$$\vec{P}_m = -\frac{e}{2m_e} \vec{P} = g \vec{P}. \quad (3.110)$$

Так как механический момент количества движения атома или молекулы связан с его магнитным моментом соотношением (3.110), то при помещении парамагнитного тела в магнитное поле его намагничивание сопровождается также преимущественной ориентацией векторов \vec{P}_i механических моментов количества движения его атомов

$$\sum_{i=1}^n \vec{P}_i = \frac{1}{g} \sum_{i=1}^n \vec{P}_{m_i} = \frac{\chi_m V}{g} \vec{H}, \quad (3.111)$$

здесь n – число атомов в объеме V парамагнетика; χ_m – магнитная восприимчивость парамагнетика.

Как видим, суммарный момент количества движения всех атомов парамагнетика пропорционален напряженности \vec{H} внешнего магнитного поля. Таким образом, одновременно с упорядочением направлений магнитных моментов и моментов количества движения парамагнитного тела в однородном магнитном поле, это тело должно начать вращаться вокруг оси, параллельной вектору \vec{H} .

Угловая скорость ω вращения тела должна быть таковой, чтобы соответствующий ей момент количества движения тела ($I\omega$, где I – момент инерции) был равен

$$I\omega = -\sum_{i=1}^n \vec{P}_i = -\frac{1}{g} \sum_{i=1}^n \vec{P}_{m_i} = -\frac{\chi_m V}{g} \vec{H}. \quad (3.112)$$

Это явление называется магнитомеханическим эффектом.

В 1915 г. С. Барнетт обнаружил обратный эффект – намагничивание быстро вращающегося металлического стержня при отсутствии внешнего магнитного поля, причем направление вектора магнитного момента оказалось противоположно направлению вектора угловой скорости вращения, т. е. в соответствии с теорией. Используя магнитомеханический эффект, А. Эйнштейн и А. де Гааз провели эксперимент по определению гиромагнитного отношения (g). Для этого стержень из парамагнитного материала они подвешивали на тонкой кварцевой нити и помещали его вовнутрь вертикального соленоида вдоль его оси. При пропускании через соленоид электрического тока стержень намагничивался и приобретал соответствующий вращательный импульс, под действием которого он поворачивался на некоторый угол, закручивая нить. Этот опыт привел к неожиданному результату. Гиромагнитное отношение по абсолютной величине оказалось в 2 раза больше, чем следовало из уравнения

$$g_s = g_{эсп} = -\frac{e}{m_e} \quad (3.113)$$

вместо $g = -\frac{e}{2m_e}$.

Для объяснения этого эффекта им пришлось предположить, что электрон, помимо орбитальных моментов \vec{p} и \vec{p}_m , обладает еще собственным моментом количества движения \vec{p}_s , который был назван спином электрона, и соответствующим ему собственным магнитным моментом \vec{p}_{ms} . Так как экспериментальное гиромагнитное отношение вдвое превышает теоретическое, соответствующее только орбитальному вращению электрона, то из этого следует, что механический орбитальный момент (p) электрона и его собственный момент (спин) (p_s) одинаковы, а следовательно и $p_{ms} = p_m$, при этом

$$p_{ms} = g \cdot p_s = \frac{1}{2} g_s \cdot p_s. \quad (3.114)$$

Вначале элементарное представление о спине связывали с вращением электрона вокруг собственной оси, но это, как считают, оказалось упрощено. Теперь принято считать [12], что спин – это собственный момент количества движения элементарных частиц, имеющий квантовую природу и не связанный перемещением частицы как целого. Однако если учесть, что спин электрона имеет размерность механического момента количества движения электрона по орбите и они даже численно равны, то представить это свойство электрона иначе, как состояние вращения его вокруг своей оси, совершенно невозможно.

Спин измеряется в единицах постоянной Планка $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ и равен $J \cdot \hbar$, где J – характерное для каждого сорта частиц целое (в том числе нулевое) или полуцелое положительное число, называемое спиновым квантовым числом. Обычно его называют спин и говорят о целом или полуцелом спине частицы. Естественно, приравнивание спинового квантового числа понятию самого спина вносит элемент путаницы и неопределенности. Проекция спина частицы на любое фиксированное направление Z в пространстве может принимать значения $-J, -J+1, \dots, J$. Таким образом, частица со спином J может находиться в $(2J+1)$ спиновых состояниях. Важной особенностью является то, что в магнитном поле любой природы спин электрона может быть ориентирован только двумя способами: либо параллельно вектору напряженности внешнего поля \vec{H} , либо антипараллельно, т. е. $2J+1 = 2$ и, следовательно, для электрона $J = 1/2$. Так как спин электрона может находиться в двух состояниях, то $J = +1/2$ при параллельности спина внешнему магнитному полю и $J = -1/2$ при антипараллельности. Со спином частицы, обладающей нулевой массой покоя, связан спиновый магнитный момент

$$p_{ms} = J g_s \cdot \hbar. \quad (3.115)$$

Для электрона величина

$$\mu_e = p_{ms} = Jg\hbar = \frac{1}{2} \cdot \frac{e}{m_e} \cdot \frac{h}{2\pi} = \frac{eh}{4\pi \cdot m_e}. \quad (3.116)$$

называется магнетоном Бора. Таким образом, спиновый магнитный момент электрона равен одному магнетону Бора.

Откуда же появилась величина $p_s = \hbar = \frac{h}{2\pi}$ и является ли она константой для любых условий нахождения электрона (в свободном состоянии, в атоме при вращении вокруг ядра или при вращении внутри ядра)? Так как этой величиной оперируют повсеместно и в различных источниках, то можно предположить, что принято считать величину спина электрона константой, поэтому и говорят о спине как о некоем свойстве по аналогии с его зарядом и массой. Попробуем разобраться в существе вопроса.

Собственный механический момент электрона (спин) принят равным механическому моменту количества движения его по орбите в соответствии с экспериментами А. Эйнштейна и А. де Гааза, т. е.

$$p_s = m_e v r = \frac{h}{2\pi}. \quad (3.117)$$

Если принять для атома водорода $r = 0,528 \cdot 10^{-10}$ м, а скорость вращения электрона по орбите оценить из условия равенства электрической силы F_e притяжения электрона ядром и центростремительной силы F_{uc} его вращения по орбите, причем

$$F_e = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}, \quad (3.118)$$

$$F_{uc} = \frac{m_e \cdot v^2}{r}. \quad (3.119)$$

Тогда
$$v = \sqrt{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r m_e}} = 2,19 \cdot 10^6 \frac{\text{м}}{\text{с}} \quad (3.120)$$

и
$$p_s = m_e v r = \sqrt{\frac{m_e^2 r^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r m_e}} = \frac{e}{2} \sqrt{\frac{m_e r}{\pi\epsilon_0}} =$$

$$= \frac{1,6 \cdot 10^{-19}}{2} \sqrt{\frac{9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 0,528 \cdot 10^{-10}}{3,14 \cdot 8,85 \cdot 10^{-12}}} = 1,052 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}, \quad (3.121)$$

что практически равно $\hbar = \frac{h}{2\pi} = \frac{6,63 \cdot 10^{-34}}{2 \cdot 3,14} = 1,055 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}.$

Поэтому для собственного механического момента электрона (спина) при его вращении по орбите вокруг ядра и ввели

$$p_s = \frac{h}{2\pi}. \quad (3.122)$$

Сохраняется ли величина спина электрона, когда он входит в состав ядра и вращается вокруг протона, образуя нейтрон. Если и в этом случае принимать

равенство ядерного орбитального механического момента количества движения электрона его собственному механическому моменту (спину), то величина последнего будет существенно отличаться от атомного орбитального механического момента электрона и, следовательно, атомного спина электрона. Для доказательства этого проведем следующие расчеты и рассуждения. При обосновании размера ядра в своих экспериментах Резерфорд бомбардировал α -частицами тонкую пленку из золота Au, порядковый номер которого 79 в таблице Менделеева, а атомная масса меняется от 176 до 204, т. е. в ядре атома золота содержится 79 протонов и (97÷125) нейтронов; из них стабильный изотоп $^{197}_{79}\text{Au}$, т. е. (79p+118n) в ядре. Если эти 197 нуклонов образуют ядро диаметром 10^{-14} м, то естественно предположить, что размер каждого нуклона будет значительно меньше. При плотной кубической упаковке шаров поровое пространство между ними составляет 0,476 от общего объема, поэтому можно принять равенство

$$\frac{4}{3}\pi R^3(1 - 0,476) = N \frac{4}{3}\pi r^3, \quad (3.123)$$

где R – радиус ядра (10^{-14} м); r – радиус нуклона; N – число нуклонов в ядре;

т. е. $r = R \sqrt[3]{\frac{0,524}{197}} = 1,38 \cdot 10^{-15}$ м.

Так как нуклоны взаимодействуют между собой электромагнитными полями вращающихся вокруг них фотонов, то реальный размер нуклона можно принять $\approx 10^{-16}$ м.

Если даже скорость вращения электрона вокруг протона в нейтроне принять $v = c = 3 \cdot 10^8$ м/с, то

$$p_{\text{я}} = m_e v r = 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 3 \cdot 10^8 \cdot 10^{-16} = 27,3 \cdot 10^{-39} = 2,73 \cdot 10^{-38} \text{ Дж} \cdot \text{с} = p_{\text{ся}}. \quad (3.124)$$

Как видно, отношение спина атомного электрона к спину ядерного электрона составляет

$$\frac{p_s}{p_{\text{ся}}} = \frac{1,052 \cdot 10^{-34}}{2,73 \cdot 10^{-38}} = 3,8 \cdot 10^3. \quad (3.125)$$

Эти расчеты подтверждают результаты экспериментов в том, что магнитные моменты ядер в тысячу раз меньше боровского магнетона и в связи с этим последнее вовсе не означает, что в ядре нет электронов. Просто ядерные электроны обладают собственным механическим моментом (спином) по меньшей мере в $3,8 \cdot 10^3$ раз меньше, чем атомные, т. е. при вращении вокруг ядра атома. Таким образом, модель ядра можно представить как структуру, состоящую из протонов, электронов и фотонов, причем они образуют эллипсоиды вращения в виде самостоятельных α -частиц (2 протона, 2 нейтрона) и надстроенных α -частиц ($1p + 2n$), во впадинах между которыми могут находиться шары меньшего размера в виде избыточных нейтронов. Электроны нейтронов α -частиц и избыточных являются связующим звеном между протонами в чистом виде и протонами – ядрами нейтронов. Вокруг всех заряженных частиц – протонов и электронов имеются электромагнитные поля в виде фотонов – γ -квантов, которые,

вращаясь вокруг заряженных частиц ядра, осуществляют двойную роль: с одной стороны замыкают связующую цепь между электронами и протонами, а с другой стороны не позволяют контактировать непосредственно друг с другом заряженным частицам и упасть электронам на протоны.

Таким образом, если последовательно рассмотреть формирование ядер атомов, то можно отметить следующее. Самый легкий элемент – протий – содержит в ядре один протон, вокруг которого вращается на расстоянии 10^{-8} м орбитальный электрон. Вокруг протона в ядре вращается фотон высокой частоты – γ -квант, а вокруг орбитального электрона вращаются фотоны низких частот. Структура атома дейтерия, более тяжелого изотопа водорода, отличается от структуры атома протия тем, что в ядре дейтерия кроме протона имеется еще нейрон. Последний образуется при взаимодействии протона с электроном, но как происходит это взаимодействие? Анализ показывает, что масса протона в 1836 раз больше массы электрона, а масса нейтрона в 1839 раз больше массы электрона. Таким образом, простое объединение масс протона и электрона составляет лишь $1837 m_e$ масс электрона. Из этого можно утверждать, что разница $(1839 - 1837)m_e = 2m_e$ в реальном нейтроне приходится на гамма-кванты, т. е. фотоны высокой энергии. Следовательно, структура нейтрона представляет собой ядро из протона, вокруг которого имеется электромагнитное поле из вращающихся фотонов гамма-квантов, а вокруг такого сложного ядра вращается на небольшом расстоянии ($10^{-15} \div 10^{-16}$ см) электрон со своим электронным полем вращающихся фотонов гамма-квантов. Таким образом, атом протия и нейтрон состоят из одинаковых элементарных частиц – протона и электрона, вокруг которых находятся свои электромагнитные поля фотонов, но в нейтроне электрон вращается вокруг протона на малой орбите радиуса $\sim 10^{-15} - 10^{-16}$ м (в пределах размера ядра), и они разделены электромагнитными полями фотонов высокой частоты, а в протии электрон вращается по орбите с радиусом $(0,5 \cdot 10^{-10} \div 0,7 \cdot 10^{-8})$ м и они разделены электромагнитными полями фотонов значительно меньшей частоты и энергии. Следовательно, имеющиеся в ядре дейтерия протон и нейрон уже составляют достаточно сложное образование из заряженных частиц, взаимодействующих не только через свои электромагнитные поля. Ядро дейтерия представляет собой конструкцию из двух протонов и одного электрона, вращающегося вокруг одного из протонов, причем каждая из этих элементарных частиц имеет свое электромагнитное поле фотонов высокой энергии – гамма-квантов.

Ядро трития в привычном для всех понимании состоит из одного протона и двух нейтронов. В новой трактовке – это три протона, вокруг двух из которых вращаются два электрона. Причем все эти элементарные частицы имеют свое электромагнитное поле из фотонов высокой энергии – гамма-квантов.

Безусловно, структура фотонных орбиталей внешнего электрона дейтерия и трития должна претерпеть определенные изменения за счет усложнения их ядер по сравнению с атомом протия. Это отражается на некотором изменении спектра излучения – поглощения дейтерия и трития по сравнению с протием, но больше на физико-химических и биологических свойствах тяжелой и сверхтяжелой воды на основе дейтерия и трития.

Добавление в ядро трития одного протона приводит к образованию ядра гелия – ${}^4_2\text{He}$, причем это ядро как цельная конструкция представляет собой α -частицу. Почему это оказалось возможным? Потому что нуклоны в таком ядре, по существу состоящем из четырех протонов и двух электронов, так компактно взаимодействуют через свои электромагнитные поля фотонов, что в совокупности представляют собой довольно цельное образование, взаимодействующее с веществом как единая α -частица.

При дальнейшем усложнении конструкции ядра за счет дополнительных протонов или нейтронов каждый нуклон обволакивается своим полем γ -квантов, затем группа нуклонов в виде α -частиц обволакивается полем γ -квантов, далее нуклоны объединяются едиными своими полями γ -квантов в более мощные группы, состоящие из магических чисел и т. д.

Имеющиеся вокруг каждой частицы ядра электромагнитные поля фотонов из γ -квантов, с одной стороны, препятствуют их слиянию, а с другой, противодействуя их слиянию, характеризуют энергию связи между нуклонами ядра. Последнее отражается в известной закономерности изменения средней энергии связи нуклонов в ядре в зависимости от атомной массы.

Природа взаимодействия нуклонов в ядре точно такая же электромагнитная, как и взаимодействие между отдельными атомами. При этом надо иметь в виду, что нет ни одного элемента в Периодической системе Менделеева, в котором было бы в ядре более одного протона в отсутствии нейтрона. Почему после гелия нет в ядре или два нейтрона (${}^4_2\text{He}$) или один нейтрон (${}^3_2\text{He}$), но нет гелия с атомной массой 2, т. е. ${}^2_2\text{He}$? Потому что ядро может быть стабильно за счет связывающего воздействия электронов ядра (электронов нейтронов), которые объединяют между собой протоны.

Имеющиеся электромагнитные поля фотонов в виде γ -квантов вокруг каждой элементарной заряженной частицы ядра и групп частиц в виде α -частиц не позволяют воссоединиться электронам ядра с протонами. Энергия этих ядерных фотонов (γ -квантов) и отражает энергию связи нуклонов в ядре.

Выводы по главе 3

1. Развиваются и дополняются современные представления о строении атома, как его внешней оболочки, так и ядра, в которых важная роль отводится фотонам. Показано, что вокруг всех заряженных частиц атома, как во внешней оболочке, так и в ядре, вращаются фотоны, причем частота и энергия этих фотонов повышается от периферической части атома к внутренним электронам и далее к ядру атома.

2. Утверждается, что вокруг электронов атома вращаются фотонные оболочки или фотонные орбитали, каждая из которых может включать фотоны определенной последовательности частот, составляющих волновой пакет. Эти фотонные орбитали создают вокруг электронов атома электромагнитное поле, не позволяющее электронам упасть на ядро. Излучение фотона или его поглощение атомом приводит к переходу электрона на новую стационарную орбиту.

3. Анализируется справедливость применения уравнения Шредингера к решению состояния электрона на внешней орбите атома водорода. Показано, что это уравнение описывает не плотность вероятности нахождения электрона вокруг ядра, а волновые свойства фотонного электромагнитного поля вокруг электрона.

4. Предлагается другая интерпретация решения уравнения Шредингера для электрона в атоме водорода, иной физический смысл s -, p -, d - и т. д. состояний электрона и иное распределение его положительных и отрицательных функций не в виде взаимной связи двух отрицательных и двух положительных функций через пространство ядра атома в p - и d -состояниях электрона, а в виде последовательной по кругу орбиты электрона цепочки положительных и отрицательных функций, характеризующих полупериоды стоячей фотонной волны электрона. Показана предлагаемая интерпретация решения стационарного уравнения Шредингера для стоячей волны при f - и h -состояниях электрона. Таким образом, в зависимости от принятого состояния электрона на его орбите укладывается следующее количество стоячих фотонных волн (n_λ):

s -состояние – $\frac{1}{2}n_\lambda$; p -состояние – n_λ ; d -состояние – $2n_\lambda$; f -состояние – $4n_\lambda$; g -состояние – $8n_\lambda$ и т. д.

5. При изменении температуры атома (излучение или поглощение фотонов) валентный электрон переходит на такой уровень, чтобы на длине его орбиты укладывалось целое число стоячих волн волнового пакета.

6. Распределение электронов по сферам и движение электронов по орбитам в атоме должно удовлетворять условию наименьших сил взаимодействия между ними. Это достигается за счет равномерного распределения электронов а каждой оболочке атома по поверхности оболочки. Распределение электронов в пространстве отражает структуру соответствующей ядерной оболочки с учетом характера её поверхности, в результате электронная оболочка может иметь некоторую толщину. Таким образом, движение всех электронов в атоме осуществляется синхронно и согласованно.

7. Возвращается утраченное понятие «ядерных» электронов. Утверждается, что нейтроны в ядрах атомов представляют собой не целое монолитное образование, а состоят из протонов, вокруг которых на близком расстоянии (10^{-16} – 10^{-15} м) вращаются электроны с фотонными орбиталями в виде гамма-квантов. Вокруг протонов в ядрах также вращаются фотоны гамма-кванты. Таким образом, фотонные поля гамма-квантов в ядре не позволяют им аннигилировать, но создают цельную структуру в виде нейтронов.

8. Объединение четырех протонов и двух электронов с учетом их фотонных полей создает устойчивую конструкцию в виде α -частицы. Наличие большего количества стабильных изотопов у элементов с целым числом α -частиц в ядрах свидетельствует о самостоятельной роли α -частиц в структуре ядер атомов. При этом показана последовательность взаимодействия двух электронов с четырьмя протонами в α -частице, позволяющая создавать стабильную ядерную структурную единицу, каковой и является α -частица.

9. Предлагается оболочечная кристаллическая структура ядра из самостоятельных и надстроенных α -частиц, следовательно, в которой элементарной кристаллической ячейкой является структура строения α -частицы, а в узлах решетки такой кристаллической структуры находятся протоны и нейтроны. Возможно некоторое количество избыточных нейтронов между структурным каркасом из α -частиц. Нейтроны состоят из протонов, вокруг которых вращаются электроны, при этом и протоны, и электроны имеют вокруг себя электромагнитные поля в виде фотонов – γ -квантов (γ_p, γ_e). Электроны взаимодействуют со свободными протонами и протонами нейтронов и совместно с электромагнитными полями γ -квантов вокруг заряженных частиц ядра – протонов и электронов формируют их электромагнитные силы взаимодействия и одновременно не позволяют им аннигилировать.

10. Таким образом, предлагается модель атома, в которой как на внешней его оболочке, так и в ядре важная роль отводится фотонам, частота которых повышается от периферии к ядру и, следовательно, модель атома является электронно-протонно-фотонной.

11. Показано, что собственный механический момент (спин) внешнего орбитального электрона – магнетон Бора существенно выше собственного момента (спина) ядерного электрона, вращающегося в ядре вокруг протона. Расчеты показывают, что ядерный спин электрона не более $2,73 \cdot 10^{-38}$ Дж·с, что на три порядка меньше магнетона Бора.

Литература к главе 3

1. Акоста, В. Основы современной физики / В. Акоста, К. Кован, Б. Грэм ; пер. с англ. В. В. Толмачева и В. Ф. Трифонова. – М. : Просвещение, 1981. – 495 с.
2. Бом, Д. Квантовая теория / пер. с англ. Л. А. Шубиной. – 2-е изд., испр. – М. : Наука, 1965. – 727 с.
3. Бор, О. Структура атомного ядра / О. Бор, Б. Моттельсон ; пер. с англ. – Т. 1, 2. – М. : Мир, 1971. – 905 с.
4. Голиков, Г. А. Руководство по физической химии. – М. : Высш. шк., 1988. – 383 с.
5. Даниэльс, Ф. Физическая химия / Ф. Даниэльс, Р. Олберти ; пер. с англ. – М. : Мир, 1978. – 645 с.
6. Жуховицкий, А. А. Физическая химия / А. А. Жуховицкий, Л. А. Шварцман. – 3-е изд., перераб. и доп. – М. : Metallurgia, 1976. – 542 с.
7. Канарев, Ф. М. Новый анализ фундаментальных проблем квантовой механики. – Краснодар : Краснодар. книж. изд-во, 1990. – 176 с.
8. Офир, Дж. Курс физики : в 2 т. / пер. с англ. под ред. Е. М. Лейкина. – М. : Мир, 1981. – 622 с.
9. Селинов, И. П. Изотопы. – Т. 1, 2. Справочные таблицы. – М. : Наука, 1970. – 1231 с.

-
10. Трофимова, Т. И. Курс физики. – 6-е изд., стер. – М. : Высш. шк., 2000. – 542 с.
 11. Физические величины. Справочник / под ред. И. С. Григорьева, Е. З. Мейлихова. – М. : Энергоатомиздат, 1991. – 1235 с.
 12. Физический энциклопедический словарь / гл. ред. А. М. Прохоров. – М. : Сов. энциклопедия, 1984. – 944 с.
 13. Фундаментальные проблемы естествознания: Междунар. науч. конгресс, 22-27 июня 1998 г. – Санкт-Петербург, Россия.
 14. Хомченко, Г. П. Неорганическая химия / Г. П. Хомченко, И. К. Цитович. – М. : Высш. шк., 1978. – 447 с.

Глава 4. РОЛЬ ФОТОНОВ В ФОРМИРОВАНИИ ХИМИЧЕСКИХ СВЯЗЕЙ И СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛ

Общий принцип природы состоит в том, что свойства вещества определяют его составом и строением.

Все тела состоят из молекул и атомов. При химических превращениях состав и строение молекул изменяется. Разрушаются или возникают новые химические связи в молекулах реагирующих веществ. В связи с этим принято считать, что химия есть наука об особой форме движения материи, характерной особенностью которой является качественное превращение веществ: в процессе химической реакции одни вещества как бы исчезают, а вместо них появляются новые вещества с новыми свойствами. При этом качественный скачок является результатом как количественного изменения состава вещества, так и внутренней молекулярной структуры.

Изучить химическую форму движения материи, законы этого движения, овладеть химическим процессом настолько, чтобы управлять им, – вот основная задача химии как науки. Для этого необходимо глубоко понять сущность химической связи и разработать ее теорию.

Понимание природы и законов химической связи необходимо для установления механизма элементарного акта химического процесса, в котором разрушаются и создаются молекулы.

4.1. Анализ существующих представлений о природе химических связей

Из многих известных видов элементарных частиц, образующих материю, химия, объектами изучения которой являются атомы, молекулы, их ионы и радикалы, в основном оперирует ядрами и электронами. Таким образом, самые различные химические проявления вещества – его реакционная способность, пространственное строение молекул, наиболее важные физические свойства атомов, молекул и их ансамблей – определяются движением ядер и электронов и физическими законами, описывающими взаимодействие ядер и электронов между собой.

В работе [17] отмечается, что подобно тому, как мы не можем произвести точные вычисления для многоэлектронного атома, невозможно и точное рассмотрение молекул, содержащих большое число электронов и ядер. В связи с этим для рассмотрения молекул необходимо ввести упрощающие приближения и существует несколько путей приближенного подхода, основанных на альтернативных постулатах.

Для объяснения механизма межатомных и межмолекулярных взаимодействий были предложены химические и физические теории, хотя деление это весьма условное, так как основные силы межатомного и межмолекулярного взаимодействия – это силы электрического и магнитного взаимодействия зарядов, которые являются предметом изучения в разделах электростатики и электродинамики физики.

Однако, несмотря на это, к чисто физическим относят ван-дер-ваальсовы силы, которые возникают в связи с ориентационным взаимодействием полярных

молекул, обладающих постоянным дипольным моментом, индукционным взаимодействием молекул, способных поляризоваться под действием соседних молекул, и дисперсионным взаимодействием мгновенных атомных диполей, имеющих постоянно меняющийся дипольный момент за счет несимметричного распределения зарядов колеблющихся ядер идвигающихся электронов.

К основным химическим связям относят [2, 22]:

- а) ионную (гетерополярную);
- б) ковалентную (гомеополярную);
- в) водородную.

На всех этапах развития химии вопросам химической связи уделялось больше внимания и создавались теории в соответствии с научными представлениями своего времени. Так, в начале XIX в., когда была известна только одна количественная характеристика атома – масса, возникновение химических сил объяснялось на основе гравитационной теории Бертолле взаимодействием масс атомов.

Гравитационная теория сменилась электрохимической теорией химической связи, предложенной шведским ученым Берцелиусом. В соответствии с этой теорией все атомы имеют положительный и отрицательный полюса, причем у одних атомов преобладает положительный заряд (электроположительные атомы), у других – отрицательные (электроотрицательные атомы). Атомы с противоположными зарядами притягиваются, образуя молекулу.

Теория Берцелиуса – это первая научная теория химической связи, которой приписывается электрическая природа. Но уже к середине XIX в. был накоплен большой экспериментальный материал, который противоречил этой теории. Например, она не могла объяснить существование двухатомных молекул, образованных одинаковыми атомами с одноименными зарядами (H_2 , N_2 , O_2 и др.). Поэтому от этой теории пришлось отказаться.

Большим вкладом в развитие представлений о строении молекул явилась теория химического строения органических соединений, разработанная в 1861 г. А. М. Бутлеровым. Основные положения этой теории следующие.

1. В молекулах атомы соединены друг с другом в определенной последовательности в соответствии с их валентностью. Порядок связи атомов называется химическим строением.

2. Свойства вещества зависят не только от того, какие атомы и в каком количестве входят в состав его молекулы, но и от того, в каком порядке они соединены между собой, т. е. от химического строения молекулы.

3. Атомы или группы атомов, образующие молекулу, взаимно влияют друг на друга как непосредственно, так и через другие атомы.

Теория А.М. Бутлерова позволила систематизировать большой экспериментальный материал по органической химии и обеспечить ее успешное развитие. Она дала возможность описывать строение молекул, предсказывать свойства веществ и намечать пути их синтеза. Однако считается [22], что решение вопроса о природе химической связи стало возможным только после открытия электронного строения атомов, так как это позволило установить фундаментальную роль электронов в образовании химической связи.

Роль отдачи и присоединения электронов в образовании химической связи впервые рассмотрена немецким ученым Косселем в 1916 г. В том же году американским ученым Льюисом предложена теория химической связи с помощью электронных пар, одновременно принадлежащих двум атомам. На базе работ Косселя и Льюиса развилось современное учение о химической связи. По современным представлениям химическая связь имеет электрическую природу, но осуществляется она по-разному. Считается, что межмолекулярные взаимодействия обусловлены электрическими полями атомных ядер и электронов, из которых состоят и молекулы.

С этих позиций механизм образования молекул объясняется так: на внешнем энергетическом уровне атома могут находиться от одного до восьми электронов. Если на внешнем уровне содержится максимальное число электронов, которое он может вместить, то такой уровень называется завершенным. Завершенные уровни отличаются большой прочностью и характерны для атомов благородных газов. У атомов других элементов внешние энергетические уровни не завершены. В процессе химической реакции осуществляется завершение внешних уровней, что достигается либо присоединением, либо отдачей электронов, а также образованием общих электронных пар.

Общепринятые взгляды на природу химических связей достаточно обстоятельно изложены Д. И. Блохинцевым в монографии «Основы квантовой механики» [2] и в учебнике по неорганической химии Г. П. Хомченко и И. К. Цитовича [22]. Ими отмечается, что ионная (гетерополярная) связь реализуется в тех случаях, когда молекулу можно представить себе как образование из положительных и отрицательных ионов (пример NaCl). Простейшая идея о природе ионной связи (валентности) заключается в следующем: гетерополярная валентность элемента попросту определяется числом электронов, которое нужно отнять (у электроположительного элемента) или прибавить (к электроотрицательному элементу), чтобы получить ион, имеющий электронную оболочку ближайшего инертного газа. Так, от Na нужно отнять один электрон, чтобы получить оболочку Ne. К Cl нужно прибавить один электрон, чтобы получить оболочку Ar. Таким образом, ионы Na^+ и Cl^- являются как бы заряженными атомами инертных газов. При этих условиях основную роль в ионной связи должно иметь кулоновское притяжение разноименно заряженных ионов, поскольку электронные оболочки инертных газов имеют сферическую симметрию и химически неактивны. Но по мере того, как ионы приближаются друг к другу и их замкнутые электронные оболочки начинают заметно перекрываться, возрастает их отталкивание. Считается, [2, 3, 4], что эти отталкивательные силы в классической теории не могли быть рассчитаны, но введение их казалось эмпирически обоснованным, поскольку атомы инертных газов отталкиваются друг от друга на малых расстояниях. Отталкивательные силы брались в виде функции $\frac{a}{r^{m+1}}$ [2], где a и m – эмпирически определяемые константы. Полная потенциальная энергия двух ионов поэтому имеет вид

$$U(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{a}{r^m}. \quad (4.1)$$

Ф. Даниельс и Р. Олберти [4] энергию отталкивания представляют в виде функции $b \cdot e^{-ar}$, и в целом выражение для потенциальной энергии двух атомов в виде

$$U = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + b \cdot e^{-ar} + 0,52, \quad (4.2)$$

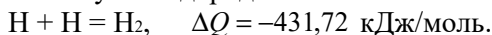
где $-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$ – энергия электростатического притяжения; а $b \cdot e^{-ar}$ – энергия отталкивания.

Постоянные «а» и «b» определяются эмпирически. Считается, что при достаточно малых расстояниях вклад второго члена становится более существенным, чем первого.

Однако авторы не объясняют, почему в уравнениях (4.1), (4.2) отталкивательные силы, имея также электрическую природу, математически определяются иными функциями, чем силы электрического притяжения.

Таким образом, если на указанном пути удавалось подойти к проблеме гетерополярной связи, то проблема ковалентной (гомополярной) связи оставалась совершенно темной.

Механизм возникновения ковалентной связи обычно рассматривается на примере образования молекулы водорода:



Как отмечается в работе [2], попытки рассчитать молекулу H_2 никогда не приводили к удовлетворительному результату. Решить проблему молекулы H_2 удалось лишь средствами квантовой механики, и это послужило исходным пунктом для квантовой теории гомополярной валентности.

Вся квантовая механика строится на нескольких основных положениях, которые не вытекают из какой-либо строгой теории и не имеют логических доказательств, а отражают лишь огромный экспериментальный опыт, сконцентрированный в определенной математической форме, и научную интуицию творцов этой науки.

Принято считать, что, опираясь на математический аппарат квантовой механики и на ее физические представления о непрерывном характере распределения электронного заряда в атомах и молекулах, В. Гайтлеру и Ф. Лондону в 1927 г. удалось решить проблему молекулы H_2 и показать причину химической связи. Для этого они рассмотрели задачу об изменении энергии двух электро нейтральных атомов водорода, находящихся в основном состоянии, когда их ядра сближаются до конечного расстояния r [5]. При этом имелось в виду, что магнитный момент, обязанный вращению электрона вокруг протона в основном состоянии атома водорода (т. е. при наименьшей возможной энергии), равен нулю [8]. В. Гайтлер и Ф. Лондон полагали, что атомы в молекуле в какой-то мере сохраняют свою индивидуальность и межатомное взаимодействие следует рассматривать как возмущение.

Когда атомы H_a и H_b пространственно удалены друг от друга, их можно считать невзаимодействующими и электронное состояние каждого из них описывается волновыми функциями $\varphi_a(1)$ и $\varphi_b(2)$ изолированных атомов H_a и H_b .

Если невзаимодействующие атомы рассматривать как единую систему, то произведение соответствующих им собственных функций представляет собой собственную функцию этой системы. При этом рассматриваются две двухэлектронные функции:

$\varphi_a(1) \cdot \varphi_b(2)$ – первый электрон около ядра А, второй – около ядра В.

$\varphi_a(2) \cdot \varphi_b(1)$ – первый электрон около В, второй – около А.

Вычисление этих функций энергии такой системы дает неглубокий минимум на кривой $E - r$ в точке с $r_0 = 0,09$ нм. Величина минимума (т. е. энергия диссоциации $D(H_2)$) составляет всего лишь 19,3 кДж/моль, в то время как по экспериментальным данным $r_0 = 0,07413$ нм и $D(H_2) = 458,5$ кДж/моль. В связи с этим были построены более приемлемые двухэлектронные функции с линейными комбинациями вида:

$$\begin{aligned}\psi_+ &= N_+ [\phi_a(1)\phi_b(2) + \phi_a(2)\phi_b(1)] \\ \psi_- &= N_- [\phi_a(1)\phi_b(2) - \phi_a(2)\phi_b(1)],\end{aligned}\tag{4.3}$$

где N_+ и N_- – нормировочные множители.

Эти функции, однако, не учитывают электронных спинов. Согласно принципу запрета Паули и в силу неразличимости электронов двух функций – произведений, на одной устойчивой орбитали может находиться не более двух электронов, а следовательно, их угловой и магнитный моменты должны иметь противоположные направления или, как иногда говорят, должны быть спарены. По принятой терминологии считают [7], что атом со всеми спаренными спинами находится в синглетном состоянии. Если атом имеет один неспаренный спин, то говорят, что он находится в дублетном состоянии. Атомы водорода в основном состоянии представляют собой дублеты. Атомы с двумя параллельными спинами находятся в триплетном состоянии.

В современной записи полные координатно-спиновые двухэлектронные функции молекулы H_2 по Гайтлеру – Лондону имеют более сложный вид.

Вычисление энергии синглетного и триплетного состояний с учетом спиновых функций позволило им получить следующее выражение:

$$E_{\pm} = 2E_H + \frac{Q \pm A}{1 \pm S^2},\tag{4.4}$$

где $2E_H$ – энергия двух изолированных атомов водорода, находящихся в основном состоянии; S – интеграл перекрывания орбиталей φ_a и φ_b , центрированных на разных атомах H_a и H_b ; Q – кулоновский интеграл; A – обменный интеграл.

При значительных межъядерных расстояниях r величина A становится малой и обменной энергией можно пренебречь. Напротив, при r , близких к равновесному, величина A становится большой и отрицательной, обуславливая около 90% химической связи в синглетном (основном) состоянии молекулы водорода.

Для триплетного же состояния при всех r наблюдается отталкивание атомов, так как A входит в это выражение с обратным знаком. Следовательно, лишь существенное перекрывание атомных орбиталей обеспечивает большое отрицательное значение обменного интеграла и связывающий характер основного (синглетного) состояния молекул H_2 в методе Гайтлера – Лондона. В «триплете» же перекрываются орбитали с различными знаками, что ослабляет плотность электронного облака между ядрами и приводит к отталкиванию атомов. Таким образом, при расчетах Гайтлер и Лондон исходили из условия, что ядро свободного атома водорода окружено сферически симметричным электронным облаком. При сближении атомов до определенного расстояния происходит перекрывание их электронных облаков. В результате между центрами обоих ядер возникает молекулярное двухэлектронное облако, обладающее максимальной электронной плотностью. Увеличение же плотности отрицательного заряда благоприятствует значительному возрастанию сил притяжения между ядрами и молекулярным облаком, сопровождающемуся уменьшением энергии системы. Если у свободных атомов водорода при максимальном сближении расстояние между ядрами составляет $1,06 \text{ \AA}$, то после перекрывания электронных облаков в результате образования молекулы H_2 это расстояние составляет $0,74 \text{ \AA}$. При этом каждый атом водорода достигает электронной конфигурации гелия. Ими было принято условие, что молекула водорода устойчива лишь тогда, когда силы притяжения уравнивают силы отталкивания. Оно отвечает определенной длине связи r_0 и минимуму потенциальной энергии. При дальнейшем уменьшении r над силами притяжения начинают преобладать силы отталкивания, энергия системы сильно возрастает, и атомы расходятся. Минимум на кривой потенциальной энергии часто называют «потенциальной ямой».

Считается [22], что результаты квантово-механических расчетов сильно зависят от направления спинов электронов взаимодействующих атомов. При параллельных спинах энергия системы из двух сближающихся атомов непрерывно возрастает, связь между атомами не возникает. При антипараллельных спинах сближающихся атомов энергия системы уменьшается и достигает минимального значения при $r_0 = 0,74 \text{ \AA}$. Именно это расстояние характерно для молекулы H_2 . Таким образом, Гайтлером и Лондоном для H_2 были получены два состояния: с параллельными и антипараллельными спинами. На рис. 4.1 изображено распределение плотности электрического заряда электронов ρ для этих двух состояний.

Так объяснялось возникновение ковалентной связи, которая осуществляется почти во всех органических веществах и в некоторых неорганических соединениях неионного типа.

Предложен также донорно-акцепторный механизм образования ковалентной связи. В соответствии с этим механизмом ковалентная связь образуется не только за счет перекрывания электронных облаков с противоположными спинами. Возможно возникновение химической связи за счет двухэлектронного облака одного атома и свободной орбитали другого.

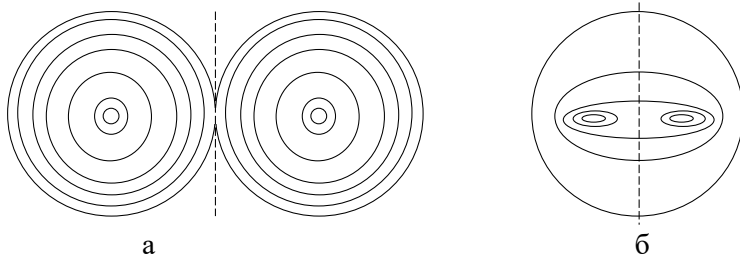


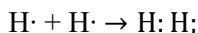
Рис. 4.1. Распределение плотности зарядов в двух отталкивающихся атомах H (а) и распределение плотности зарядов в молекуле H_2 (б)

Атом, предоставляющий для связи двуэлектронное облако (неподеленную пару), называют донором или нуклеофильным атомом. Атом, предоставляющий свободную орбиталь, – акцептором или электрофильным атомом [22]. Таким образом, механизм образования ковалентной связи за счет двуэлектронного облака одного атома (донора) и свободной орбитали другого атома (акцептора) называется донорно-акцепторным. Образованная таким путем ковалентная связь часто называется донорно-акцепторной или координационной связью. Однако это не особый вид связи, а лишь иной механизм образования ковалентной связи.

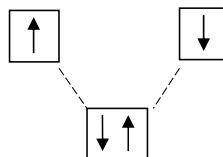
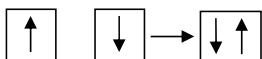
В то же время в некоторых работах отмечают [2], что строгого разграничения между гомеоплярной и ионной связью на самом деле провести нельзя. Это просто два крайних случая. В типичном случае гомеоплярной связи заряд распределен симметрично между обоими атомами. Если атомы не одинаковы, то такая симметрия нарушается. Если, наконец, симметрия нарушается резко, так что заряд электронов сосредотачивается преимущественно около одного из атомов, то мы получим случай ионной связи.

Изображают химические связи по-разному:

- 1) внешние электроны атомов для наглядности обозначают в виде точек у символа элемента, а обобщение электронов как общие двух атомов, например



- 2) с помощью квантовых ячеек, как соединение двух электронов в одной молекулярной квантовой ячейке.



Слейтер и Полинг в 1930-х гг. распространили некоторые изложенные идеи на многоатомные молекулы, и этот метод получил название метода валентных связей (ВС). Наряду с ним применяется метод молекулярных орбиталей (МО), развитый главным образом работами Милликена и Гунда.

Метод ВС основан на положении, что каждая пара атомов в молекуле удерживается вместе при помощи одной или нескольких общих электронных пар, и химическая связь между ними тем прочнее, чем сильнее перекрываются электронные облака атомов. Обычно наибольшее перекрывание последних осуществляется по прямой, соединяющей ядра двух атомов.

Простой молекулой, на примере которой обычно иллюстрируется теория валентных связей, является молекула аммиака (NH_3), в которой атом азота связан с тремя атомами водорода. Принимается условие, что атом азота идентичен изолированному атому N, т. е. что он имеет электронную конфигурацию $1s^2 2s^2 2p^3$ или $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1 2p_z^1$. Предполагается, что атомы водорода тоже имеют свою обычную конфигурацию $1s^1$. Сущность теории валентных связей состоит в том, что неспаренный электрон на орбитали одного атома, например, на p_x -орбитали атома N, находится в состоянии обменного взаимодействия с неспаренным электроном на орбитали соседнего атома, например, $1s$ -орбитали атома H. Обмен, обусловленный неразличимостью электронов, означает, что электрон атома N может меняться местами с электроном атома H. Обмен можно представить с помощью комбинации волновых функций, описывающих системы до и после обмена, например

$$\Psi_{p_x}^N(1)\Psi_S^H(2) \pm \Psi_{p_x}^N(2)\Psi_S^H(1),$$

где 1 и 2 обозначают электроны, а $\Psi_{p_x}^N$ и Ψ_S^H – орбитали атомов N и H. Отдельные волновые функции относятся к системам координат с началом у соответствующих ядер. Таким образом, комбинированная волновая функция $\Psi_{p_x}^N(1)\Psi_S^H(2)$ описывает такое положение, когда электрон 1 имеет волновую функцию $\Psi_{p_x}^N$, тогда как одновременно электрон 2 имеет волновую функцию Ψ_S^H . Второй член $\Psi_{p_x}^N(2)\Psi_S^H(1)$ просто соответствует перестановке электронов. Вследствие принципа исключения Паули волновая функция, в которой между этими двумя членами стоит знак плюс, возможна только в том случае, если электроны отличаются по спину. Это можно выразить и иначе, сказав, что два электрона могут меняться местами, т. е. по существу занимать одну и ту же область пространства, только в том случае, если их спины противоположны. Волновая функция, в которой между первым и вторым членами стоит знак минус, возможна только при условии, если два электрона имеют одинаковые спины. Однако в этом случае распределение вероятности таково, что пребывание электронов между ядрами маловероятно, и это состояние соответствует отталкиванию. Поскольку распределение электронов для спин-спаренного состояния (с антипараллельными спинами) характеризуется увеличением отрицательного заряда в области между ядрами, состояние соответствует притяжению и обладает более низкой энергией, чем состояние отталкивания. Таким образом, в теории валентных связей ответственными за образование связи считаются два электрона с противоположными спинами, принадлежащие двум соседним атомам; это соответствует связи, образованной обобществленной парой электронов.

Считается, что электронные облака различной формы (s-, p-, d- и f-орбитали) могут взаимодействовать между собой и перекрываться неодинаково. Возникают своеобразные модификации связей. Из них выделяют σ - и π -связи [13]. Характерные их особенности (рис. 4.2):

а) σ -связи: это ковалентные связи, получающиеся в результате взаимного перекрывания электронных облаков в направлении осевой линии, соединяющей центры атомов (рис. 4.2а);

б) π -связи: это ковалентные связи, образующиеся путем взаимного перекрывания электронных облаков в направлении, перпендикулярном осевой линии между атомами (рис. 4.2б).

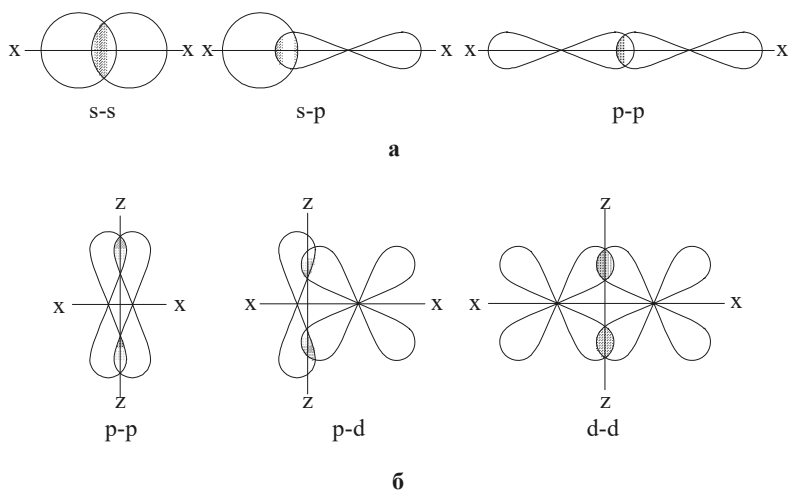


Рис. 4.2. Ковалентные связи, возникающие в результате перекрывания электронных облаков: а – различные формы σ -связи; б – различные формы π -связи: x-x – осевая линия, соединяющая центры ковалентно связанных атомов; z-z – направление, перпендикулярное осевой линии (по данным [13])

Степень перекрывания электронных облаков в случае σ -связи значительно превосходит перекрывание при π -связи, поэтому σ -связь обычно оказывается более прочной, чем π -связь.

Во многих случаях связь между атомами элементов-партнеров в молекулах осуществляется не одной электронной парой, а несколькими. Получаются связи двойные или тройные. Такие связи называются кратными.

Описанная выше модель молекулы аммиака должна приводить к трем валентным связям, направленным под прямыми углами друг к другу в соответствии с тем, что они образованы за счет p_x -, p_y - и p_z -орбиталей. Однако в действительности валентные углы H-N-H в молекуле NH_3 равны $107,3^\circ$. Хотя можно ожидать, что отталкивание протонов должно увеличивать углы по сравнению с 90° , этот эффект едва ли может объяснить такое большое увеличение [17]. В связи с этим считается [13, 17], что несколько более строгий подход в рамках метода валентных связей, позволяющий получить лучшее приближение к экспериментальному значению, основан на концепции гибридизации.

Гибридные орбитали

Считается, что представление о независимых электронных орбиталях является слишком упрощенным даже в случае многоэлектронного атома и становится еще менее приемлемым в более сложном случае молекулы. Поэтому для более точного описания строения молекул и их энергии была введена приближенная концепция гибридизации орбиталей. В основе этого подхода лежит замена набора водородоподобных атомных орбиталей новыми волновыми функциями, которые обладают комбинированными характеристиками волновых функций.

Представления о гибридизации атомных орбиталей были введены в 30-х гг. прошлого столетия Л. Полингом. Согласно этой концепции, взаимное перекрывание электронных облаков может привести к резкому изменению самой их формы. Это явление называют гибридизацией, а отвечающие им химические связи – гибридными [13].

Сначала в качестве частного примера рассматривают гибридизацию одной s -орбитали с одной p -орбиталью с образованием гибридных sp -орбиталей. Процесс гибридизации представляют математически как сложение отдельных волновых функций с соответствующими нормировочными множителями в качестве коэффициентов. В случае sp -гибридизации две результирующие волновые функции имеют вид

$$\begin{aligned}\Psi_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_s + \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_p \\ \Psi_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_s - \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_p.\end{aligned}$$

Их угловая зависимость выражается как

$$\Psi_{sp} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_s \pm \Psi_p) = \frac{1}{\sqrt{8\pi}} (1 \pm \sqrt{3} \cos \theta)$$

и представлена по данным [17] на рис. 4.3. Функции ψ_1 и ψ_2 даны в координатах, имеющих одно и то же начало и отличающихся только тем, что одна из них соответствует большей вероятности нахождения электрона по одну сторону от ядра, а другая – по другую сторону от ядра.

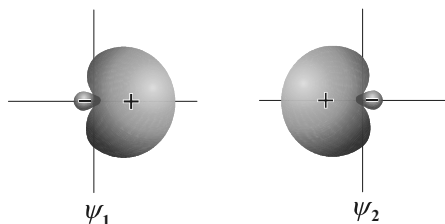


Рис. 4.3. sp -гибридные функции (по данным [17])

Использование двух таких равноценных гибридных орбиталей для связи с двумя дополнительными атомами должно приводить к линейной молекуле.

В работе [13] приводится несколько другой результат sp -гибридизации (рис. 4.4), при этом возникают две гибридные sp -орбитали, которые располага-

ются по одной прямой; угол между их направлениями равен 180° . Пример: хлорид бериллия BeCl_2 . Химические σ -связи осуществляются двумя гибридизированными sp -орбиталями бериллия и негибридизированными p -орбиталями атомов хлора (рис. 4.5). Молекула BeCl_2 имеет линейную форму Cl-Be-Cl , и две связи (Be-Cl) направлены взаимнопротивоположно.

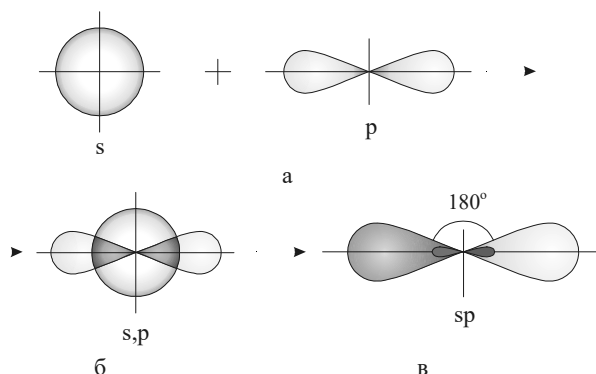


Рис. 4.4. sp -гибридизация: а – отдельно взятые sp -орбитали; б – их наложение; в – гибридизация орбиталей (по данным [13])

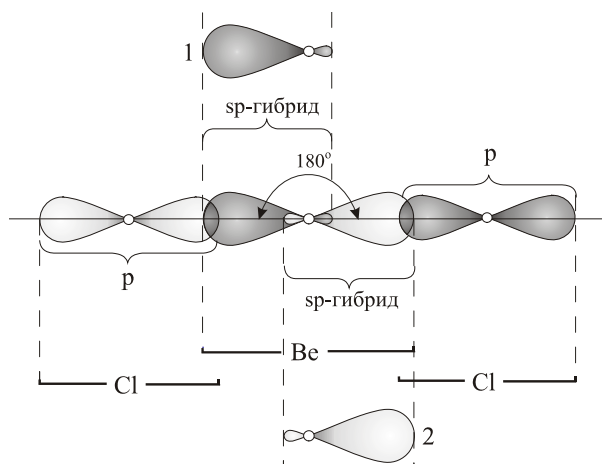


Рис. 4.5. Молекула BeCl_2 на основе sp -гибридизации. 1 и 2 – sp -гибридные орбитали по отдельности. Геометрия молекулы имеет линейное строение (по данным [13])

Считается [17], что гибридизация сама по себе требует затрат энергии, но они происходят потому, что результирующие связи оказываются прочнее вследствие повышенной электронной плотности в направлениях связей между ядрами.

Три гибридные орбитали, образующиеся при составлении линейных комбинаций из одной s - и двух p -орбиталей, обозначаемые sp^2 , по форме аналогичны приведенным на рис. 4.3, но ориентированы по отношению друг к другу под углами 120° и, таким образом, расположены в одной плоскости. Примерами мо-

лекул, в которых связи можно рассматривать как образованные гибридными sp^2 -орбиталями, являются BCl_3 (рис. 4.6) и др.

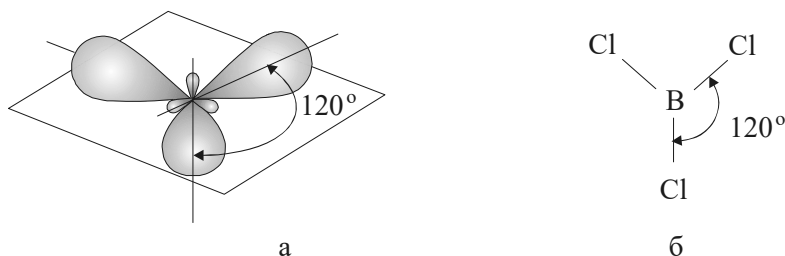


Рис. 4.6. sp -гибридизация на примере молекулы BCl_3 : а – гибридные sp^2 -орбитали; б – геометрия молекулы (по данным [13])

В качестве примера sp^3 -гибридизации часто рассматривается строение молекулы метана. Считается, что входящий в состав молекулы атом углерода, находясь в возбужденном состоянии, содержит три неспаренных p -электрона: $2p_x$, $2p_y$, $2p_z$, а также один неспаренный s -электрон: $2s^1$.

Указанные p -орбитали атома углерода с орбиталями атомов водорода образуют три sp -связи и одну ss -связь. s -Электрон по форме облака и по запасу энергии отличается от p -электрона. Естественно было ожидать, что связи sp по прочности и энергии будут в какой-то мере отличаться от связи ss . Однако опыт показывает, что все четыре связи в молекуле CH_4 совершенно равноценны. Это все σ -связи.

Согласно концепции гибридизации, этот факт объясняется следующим образом: из одного s -облака и трех p -облаков образуются четыре совершенно одинаковых между собой по форме и энергии гибридные орбитали. Они не похожи ни на s -, ни на p -орбитали отдельно взятые.

На рис. 4.7 схематически показано образование четырех sp^3 -гибридных орбиталей в молекуле CH_4 (s - p -орбитали занумерованы, s - s -орбиталь – без числового обозначения). Гибридные облака, как одноименно заряженные электростатическими силами, расталкиваются на максимальное расстояние друг от друга.

При наличии четырех орбиталей (как в молекуле CH_4) они располагаются под углом $109,5^\circ$ друг к другу. Такой угол говорит о том, что электронные орбитали атома углерода направлены к вершинам тетраэдра, а ядро C находится в центре его. Таким образом, молекула CH_4 по своей конфигурации представляет собой тетраэдр с атомами H по вершинам (рис. 4.8). Четыре σ -связи образуются за счет s - и p -облаков атомов C и H (четыре равноценных связи $C-H$).

В зависимости от числа и вида взаимодействующих орбиталей различают несколько видов гибридизации. В молекуле метана «переродились» три p - и одна s -орбиталь. Такой случай называют sp^3 -гибридизацией. Считается, что он характерен также для молекул NH_3 (рис. 4.9) и H_2O (рис. 4.10).

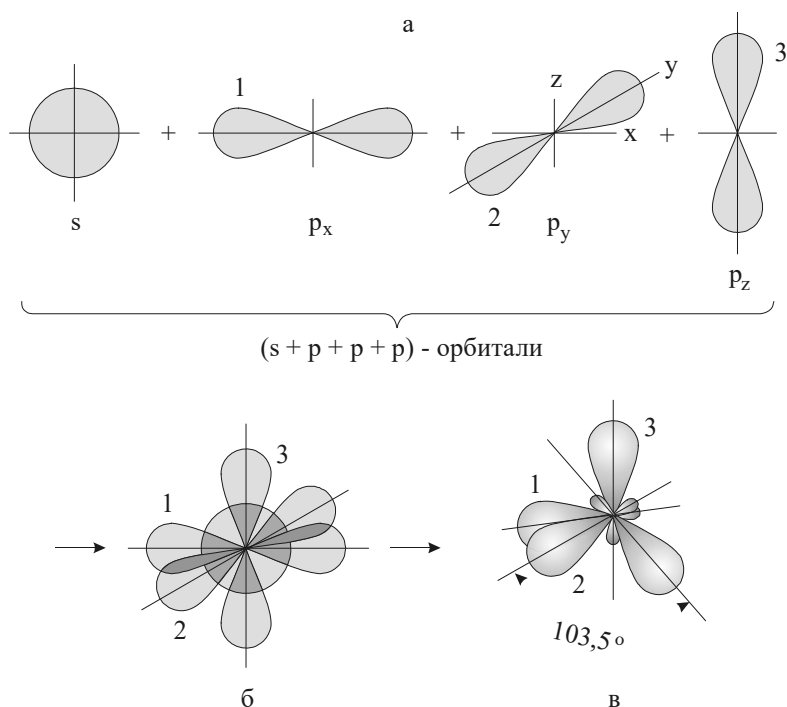


Рис. 4.7. sp^3 -гибридизация: а – орбитали s и p , представленные по отдельности; б – наложение орбиталей; в – их взаимная гибридизация (по данным [13])

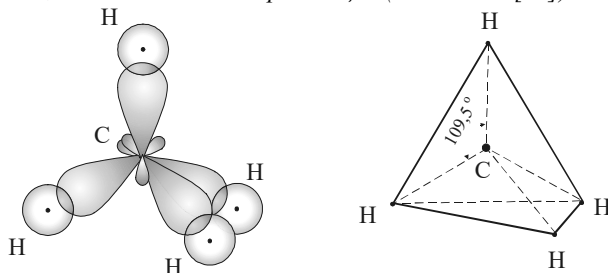


Рис. 4.8. Молекула CH_4 : слева – перекрывание sp^3 и s -орбиталей в молекуле; справа – геометрия молекулы (ее тетраэдрическая форма) (по данным [13])

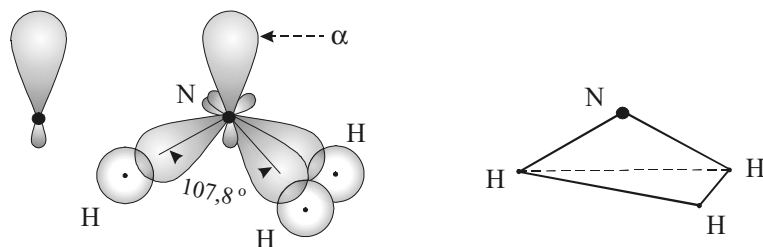


Рис. 4.9. Пример sp^3 -гибридизации в молекуле NH_3 : в центре – перекрывание sp^3 и s -орбиталей в молекуле; слева – sp^3 -орбиталь, предоставленная отдельно (все четыре sp^3 -орбитали идентичны); α – «неблокированная» двухэлектронная гибридная орбиталь; справа – геометрия молекулы (пирамидальная ее форма) (по данным [13])

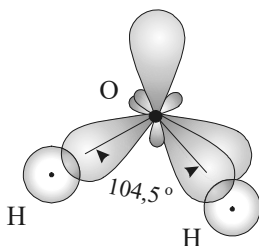


Рис. 4.10. Пример sp^3 -гибридизации в молекуле H_2O (по данным [13])

Валентные углы в NH_3 ($107,3^\circ$) сильно отличаются от значения 90° , ожидаемого при рассмотрении в методе валентных связей с учетом только р-орбиталей. Однако предполагается [13, 17], что орбитали азота сначала гибридизируются с образованием гибридных sp^3 -орбиталей и что три из них участвуют в обменном взаимодействии с s-орбиталями водорода, то тогда три связи N-H должны быть ориентированы под тетраэдрическими углами ($109,5^\circ$). Небольшое отклонение ожидаемого тетраэдрического угла от наблюдаемого значения объясняют отталкиванием между «неподеленной» парой электронов на четвертой sp^3 -орбитали и связующими парами на трех остальных орбиталях. Предполагают [17], что молекула H_2O содержит две «неподеленные» пары электронов на двух из гибридных sp^3 -орбиталей. Наблюдаемые значения угла $104,5^\circ$ еще больше отличаются от тетраэдрического угла, вероятно, вследствие более сильного отталкивания от двух «неподеленных» пар электронов [17].

Принято считать, что орбитали могут эффективно гибридизоваться лишь в том случае, если они имеют близкие энергии. У атомов с малым Z для гибридизации пригодны лишь s- и p-орбитали. У атомов с большими Z в гибридизации могут участвовать также d-орбитали, что значительно расширяет возможности осуществления различных симметрий. Считается, что октаэдрическая конфигурация, являющаяся наиболее важной из всех встречающихся в неорганической химии конфигураций, возникает тогда, когда к s- и p-орбиталям примешиваются еще две d-орбитали. При этом три взаимноперпендикулярные p-орбитали, ориентированные к центрам граней, и две d-орбитали (d_{z^2} и $d_{x^2-y^2}$), направленные точно так же, смешиваются со сферически симметричной s-орбиталью, образуя шесть гибридных орбиталей, каждая из которых ориентирована к центру грани куба. Это представлено схематически на рис. 4.11 в виде d^2sp^3 -гибридных функций.

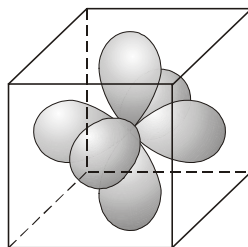
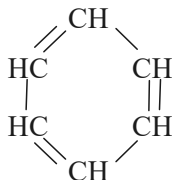


Рис. 4.11. Пример d^2sp^3 -гибридных функций (по данным [17])

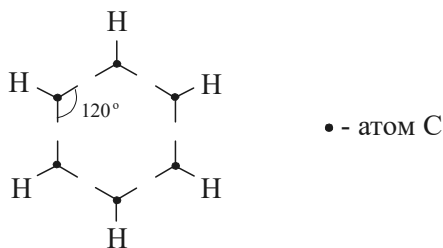
Делокализация π -связей

Одно из основных положений метода валентных связей гласит, что электронный дублет, лежащий в основе двухцентровой химической связи, в молекуле вещества локализован, т. е. занимает в ней строго фиксированное положение. Однако в отношении π -связей установлено, что они могут одновременно «обслуживать» несколько атомов-партнеров. Для примера рассматривают молекулу бензола C_6H_6 . Она имеет форму плоского шестиугольника.



Связи между шестью атомами С, создающие замкнутое кольцо, – это σ -связи. Кратными являются π -связи. В приведенной структурной формуле последние как бы двухцентровые и также локализованы. Однако отмечается [13], что современные научные данные вносят в этот вопрос существенное уточнение, суть которого сводится к следующему.

В возбужденном атоме углерода на втором энергетическом уровне имеются четыре неспаренных электрона: s , p_x , p_y и p_z . Орбитали первых трех (s , p_x , p_y) перестраиваются и дают три sp^2 -гибридных облака. Четвертый электрон (p_z) почему-то остается негибридным, его электронное облако в молекуле бензола не перерождается, хотя в метане CH_4 у атома углерода происходит sp^3 -гибридизация. Каждый атом С в бензольном кольце связан с тремя партнерами: с двумя соседними атомами С (справа и слева от себя) и с одним атомом Н:



Три sp^2 -гибридных облака образуют три σ -связи. Две из них осуществляют связь между соседними атомами С, а третья устанавливает связь с водородом: С-Н. Все эти связи лежат в плоскости бензольного кольца под углом 120° (рис. 4.12а). Негибридизированные p_z -облака каждого атома С вследствие отталкивающего действия sp^2 -облаков, образующих σ -связи, располагаются в плоскости, перпендикулярной плоскости бензольного кольца (рис. 4.12б). Каждое p_z -облако может устанавливать π -связь с p_z -облаком соседнего атома С, причем эта связь с равной вероятностью может распространяться на соседний атом С как с правой, так и с левой стороны. Это приводит к тому, что шесть p_z -

электронов образуют единую π -связь, которая (рис. 4.12б). Каждое p_z -облако может устанавливать π -связь с p_z -облаком соседнего атома С, причем эта связь с равной вероятностью может распространяться на соседний атом С как с правой, так и с левой стороны. Это приводит к тому, что шесть p_z -электронов образуют единую π -связь, которая охватывает все шесть атомов С бензольного кольца. Поэтому считают, что π -связь в этом случае не фиксирована в молекуле бензола (не локализована) и является не двухцентровой, а шестицентрковой. Таковую связь называют делокализованной и в структурных формулах отмечают пунктиром.

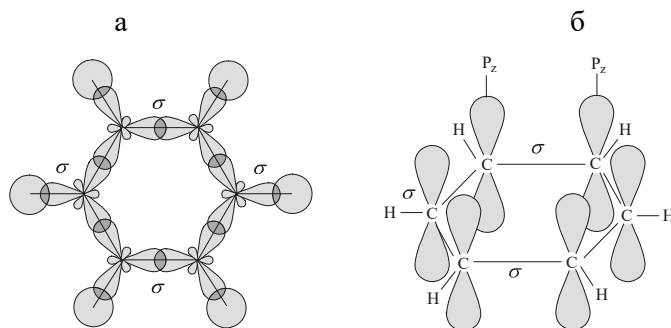


Рис. 4.12. Молекулы бензола C_6H_6 : а – σ -связи в молекуле; б – расположение p_z -электронных облаков в предположении, что они образуют локализованные π -связи. (по данным [13])

Теория молекулярных орбиталей

Теория валентных связей (ТВС) объясняет широкий круг вопросов по сущности химической связи. Однако обнаружилось много факторов, не укладывающихся в эту теорию. Более универсальной считают [13] теорию молекулярных орбиталей (ТМО). Ее основные положения сводятся к следующему.

1. В ТМО принимается, что при образовании молекул из атомов происходит обобществление всех атомных электронов. Путем взаимного наложения (перекрывания) облаков последних возникают новые комбинированные облака, уже являющиеся общими для всей молекулы в целом. Это молекулярные орбитали (МО). В молекуле они распределены по все возрастающим энергетическим уровням подобно тому, как и в атоме. В результате электронная оболочка молекулы приобретает как бы слоистое строение.

Молекулярные орбитали – образования, в принципе, многоцентровые. Поэтому они по своей форме сложнее атомных орбиталей (АО) – одноцентровых (в атоме – одно ядро, в молекуле же их несколько).

2. Взаимно комбинироваться в МО может не любая пара атомных электронов, а лишь близкие по своему энергетическому состоянию (как минимум должны находиться на одном и том же квантовом энергетическом уровне). Так, например, $1s$ -электроны ($n^{ка}=1$) двух атомов водорода могут создать молекулярную орбиталь, общую для всей молекулы H_2 . Электронное облако, отвечающее данной МО, имеет осевую симметрию (рис. 4.13). Такое облако обозна-

чают как σ -орбиталь. В ТМО принята своеобразная символика. Рассмотренная выше МО обозначается так: $(\sigma 1s)^2$. Эту запись следует читать так: одна σ -МО образована двумя s -электронами, находящимися на энергетическом уровне K ($n^{КБ}=1$).

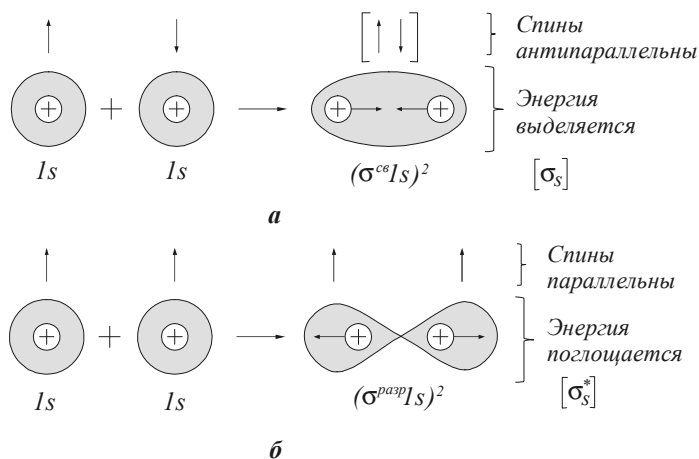


Рис. 4.13. Образование молекулярных орбиталей (МО): а – связывающая МО; б – разрыхляющая МО. Сверху стрелками указано направление спина электрона (по данным [13])

При р-АО в атомах соответствующих элементов орбитали ориентированы в пространстве по различным осям координат и их обозначают: p_x , p_y и p_z . Считается, что при сближении атомов между собой будут перекрываться только однотипные р-орбитали (т. е. расположенные вдоль одноименных осей координат). Например, в молекуле N_2 в одну общую МО между собой будут комбинироваться два атомных электрона $2p_x$ (по одному $2p_x$ -электрону от каждого атома N).

Двухэлектронное $2p_x$ -облако также имеет осевую симметрию и также будет обозначаться через σ – МО. Условная запись: $(\sigma 2p_x)^2$ – молекулярная орбиталь образована двумя p_x -электронами, находящимися на энергетическом уровне L ($n^{КБ} = 2$). Электроны ($p_y + p_y$), а также ($p_z + p_z$) одного и того же энергетического уровня также могут взаимно перекрываться, образуя МО. Однако отвечающие им электронные облака не имеют осевой симметрии, но имеют плоскость симметрии. Подобные орбитали отмечают буквой π (π – МО). Так, в упоминавшейся выше молекуле N_2 имеются две π -орбитали. Их обозначают: $(\pi 2p_y)^2$ и $(\pi 2p_z)^2$. Первая из них возникает в результате взаимного наложения двух $2p_y$ -, а вторая – из двух $2p_z$ -электронов (по одному электрону одного и другого типа от каждого атома N). Все указанные электроны в исходных атомах относились к энергетическому уровню L ($n^{КБ} = 2$).

3. Атомные орбитали, превращаясь путем взаимного наложения в молекулярные, как бы перерождаются. При этом происходит изменение энергетического состояния всей молекулярной системы как дискретной частицы в целом, что, в свою очередь, сильно влияет на прочность молекулы. Главное здесь – это ха-

рактически равномерного распределения электронной плотности между ядрами атомов, образующих молекулу. Если облако, отвечающее молекулярной орбитали, в основном сосредоточено между ядрами, то это будет упрочнять молекулу. В этом случае молекулярную орбиталь называют связывающей (обозначение: $MO^{св}$). Если же электронная плотность сосредотачивается за ядрами, то это приведет к взаимному отталкиванию ядер, что равносильно как бы разрыхлению молекулы. Тогда молекулярную орбиталь называют разрыхляющей (обозначение: $MO^{разр}$).

Сказанное иллюстрируется рис. 4.13, на котором схематически показано образование связывающей и разрыхляющей МО из двух $1s$ -атомных орбиталей. Обозначения: $(\sigma^{св} 1s)^2$ и $(\sigma^{разр} 1s)^2$. Надстрочное число (2), как уже указывалось, обозначает, что данная молекулярная орбиталь возникла из двух атомных орбиталей, а единица в скобках говорит о том, что исходные s -электроны относятся к энергетическому уровню K ($n^{кв}=1$).

Подобная точка зрения на природу и состояние изученности вопроса химических связей изложена во многих и других монографиях [3, 4, 6, 9, 10, 16, 22], включая физический и химический энциклопедические словари [20, 21].

Промежуточной между молекулярными и химическими силами является так называемая водородная связь [6]. В ряде случаев атом водорода связывается не с одним атомом, как это отвечало бы его валентности, а с двумя. Наиболее типичным проявлением водородной связи является ассоциация карбоновых кислот. На рис. 4.14 показана структура димера муравьиной кислоты.

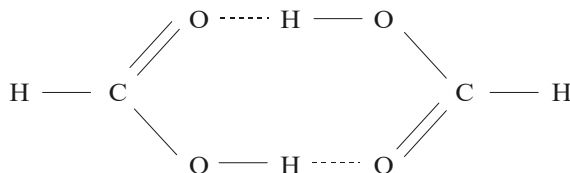


Рис. 4.14. Структура димера муравьиной кислоты

Мы видим, что прочность димера (энергия диссоциации 14 ккал) определяется двумя водородными связями, осуществляемыми каждым атомом водорода с кислородом «чужой» молекулы. Энергия одной водородной связи обычно колеблется между 5-9 ккал/моль. Водород способен давать водородную связь с кислородом, азотом и галоидами. Большую роль играет водородная связь в прочности ряда кристаллических тел. Так, твердая борная кислота состоит из слоев молекул $B(OH)_3$. Эти молекулы связаны водородными связями. Существенную роль водородная связь играет в кристаллах диаспора ($Al(OH)_2$) и лепидорита $FeO(OH)$, обеспечивая связь между соседними атомами кислорода.

Принято считать, что особенно велика роль водородной связи в структуре льда и воды. Малая плотность льда связана с малым числом соседей у атома кислорода (4 атома водорода). Приблизительно 3/4 теплоты сублимации льда обязано водородным связям.

Водородная связь играет большую роль в биологических процессах. Она определяет многие свойства высокополимеров. Однако природа водородной связи полностью не выяснена. То обстоятельство, что водород дает ее с элек-

троотрицательными атомами, делает вероятным существенную роль электростатического взаимодействия.

Почему атом водорода в отличие от других атомов проявляет дополнительную – водородную связь с более электроотрицательными атомами кислорода, фтора и т. д.? По нашему мнению, это обусловлено тем, что у атома водорода только один электрон, поэтому он летает вокруг ядра свободно и может взаимодействовать с другими атомами одновременно с одной и с другой стороны полета вокруг ядра. При этом должно соблюдаться состояние синхронизма движения валентных электронов уже для трех атомов.

Почему водородная связь проявляется именно с более электроотрицательными атомами? Это объясняется тем, что в сильно электроотрицательных атомах валентный электрон несколько больше удален от ядра, чем другие электроны на этой оболочке, и поэтому на электрон водорода в момент его пролета мимо электроотрицательного атома нет большого отталкивающего влияния других электронов этого атома.

Теоретически возможно, что атом водорода может одновременно проявлять двойную водородную связь с двумя сильно электроотрицательными атомами, т. е. взаимодействовать сразу с тремя атомами, находящимися под углом 120° друг от друга.

Таким образом, из анализа развития теории химической связи видно, что выполнен большой объем теоретических исследований, причем наметилась устойчивая тенденция развития, которую можно было бы назвать от состояния индивидуализма взаимодействия электронов атомов через гибридизацию к их полному обобществлению или глобализации в теории молекулярных орбиталей. Если эта тенденция еще продолжится, то следует ожидать, что глобализация электронов будет предложена уже на уровне не только отдельных молекул, но и целых кристаллов и далее всего объема исследуемой системы. Этот путь развития теории химической связи оказался тупиковым, так как на его основе невозможно объяснить многие физические явления, включая особенности изменения теплоемкости от температуры, природу фазовых переходов и другие. Все это явилось результатом того, что физическая интерпретация решения волнового уравнения Шредингера для электрона атома водорода относительно взаимосвязи отрицательных и положительных функций была выполнена ошибочно. В результате все дальнейшее развитие квантовой механики, начиная от форм s-, p-, d-, h- и f-состояний электрона в атоме водорода и их сущности, вопросы гибридизации, образования молекулярных орбиталей и т. д., пошли по ложному пути в науке.

Критический анализ сущности квантовой механики и получаемых результатов на основе решения уравнения Шредингера, данный в главе 3, дает основание негативно отнестись к возможности ее применения для обоснования механизма химической связи атомов и молекул в той интерпретации, которая сегодня общепризнанна.

4.2. Расчет сил взаимодействия атомов при образовании молекулы водорода

Нет сомнения, что электроны вращаются вокруг ядра по отведенным для них орбитам, и в связи с этим целесообразно попытаться рассчитать взаимодействия двух атомов водорода при различных ситуациях расположения электронов относительно друг друга.

При сближении двух атомов водорода для образования из них молекулы H_2 возможны различные ситуации нахождения атомов друг около друга.

1. Асинхронное движение двух электронов атомов. Это состояние менее предпочтительно для объединения атомов в молекулу.

2. Синхронное движение двух электронов, расположенных на параллельных орбитах при движении электронов как в одном, так и в разных направлениях с разными начальными сдвигами по фазе, например, кратно $\Delta\varphi = \frac{\pi}{2}$, с параллельными или антипараллельными спинами. В этом случае возможны следующие 18 ситуаций.

$$2.1. \Delta\varphi = 0, p_{m1} \uparrow\uparrow p_{m2}, p_{ms1} \uparrow\uparrow p_{ms2}, p_{ms1,2} \uparrow\uparrow p_{m1,2}$$

$$2.2. \Delta\varphi = \frac{\pi}{2}, \text{-----}$$

$$2.3. \Delta\varphi = \pi, \text{-----}$$

$$2.4. \Delta\varphi = 0, p_{m1} \uparrow\uparrow p_{m2}, p_{ms1} \uparrow\downarrow p_{ms2}, p_{ms1} \uparrow\downarrow p_{m1}$$

$$2.5. \Delta\varphi = \frac{\pi}{2}, \text{-----}$$

$$2.6. \Delta\varphi = \pi, \text{-----}$$

$$2.7. \Delta\varphi = 0, p_{m1} \uparrow\uparrow p_{m2}, p_{ms1} \uparrow\uparrow p_{ms2}, p_{ms1,2} \uparrow\downarrow p_{m1,2}$$

$$2.8. \Delta\varphi = \frac{\pi}{2}, \text{-----}$$

$$2.9. \Delta\varphi = \pi, \text{-----}$$

$$2.10. \Delta\varphi = 0, p_{m1} \downarrow\uparrow p_{m2}, p_{ms1} \uparrow\uparrow p_{m1}, p_{ms2} \uparrow\uparrow p_{m2}, p_{ms1} \downarrow\uparrow p_{ms2}$$

$$2.11. \Delta\varphi = \frac{\pi}{2}, \text{-----}$$

$$2.12. \Delta\varphi = \pi, \text{-----}$$

$$2.13. \Delta\varphi = 0, p_{m1} \downarrow\uparrow p_{m2}, p_{ms1} \downarrow\uparrow p_{m1}, p_{ms2} \uparrow\uparrow p_{m2}, p_{ms1} \uparrow\uparrow p_{ms2}$$

$$2.14. \Delta\varphi = \frac{\pi}{2}, \text{-----}$$

$$2.15. \Delta\varphi = \pi, \text{-----}$$

$$2.16. \Delta\varphi = 0, p_{m1} \downarrow\uparrow p_{m2}, p_{ms1} \uparrow\uparrow p_{m1}, p_{ms2} \uparrow\downarrow p_{m2}, p_{ms1} \uparrow\uparrow p_{m2}$$

$$2.17. \Delta\varphi = \frac{\pi}{2}, \text{-----}$$

$$2.18. \Delta\varphi = \pi, \text{-----}$$

3. Синхронное движение электронов в одном или разных направлениях на двух орбитах, расположенных на одной линии, с разным начальным сдвигом по фазе нахождения электронов на орбите, например, кратно $\Delta\varphi = \pi/2$, с параллельными или антипараллельными спинами. В этом случае возможно также 18 ситуаций:

- 3.1. $\Delta\varphi = 0, p_{m1} \uparrow\uparrow p_{m2}, p_{ms1} \uparrow\uparrow p_{ms2}, p_{ms1,2} \uparrow\uparrow p_{m1,2}$
- 3.2. $\Delta\varphi = \frac{\pi}{2},$ -----
- 3.3. $\Delta\varphi = \pi,$ -----
- 3.4. $\Delta\varphi = 0, p_{m1} \uparrow\uparrow p_{m2}, p_{ms1} \uparrow\downarrow p_{ms2}, p_{ms1} \uparrow\downarrow p_{m1}, p_{ms2} \uparrow\downarrow p_{m2}$
- 3.5. $\Delta\varphi = \frac{\pi}{2},$ -----
- 3.6. $\Delta\varphi = \pi,$ -----
- 3.7. $\Delta\varphi = 0, p_{m1} \uparrow\uparrow p_{m2}, p_{ms1} \uparrow\uparrow p_{ms2}, p_{ms1,2} \uparrow\downarrow p_{m1,2}$
- 3.8. $\Delta\varphi = \frac{\pi}{2},$ -----
- 3.9. $\Delta\varphi = \pi,$ -----
- 3.10. $\Delta\varphi = 0, p_{m1} \uparrow\downarrow p_{m2}, p_{ms1} \uparrow\uparrow p_{ms2}, p_{ms1} \downarrow\uparrow p_{m1}, p_{ms2} \uparrow\uparrow p_{m2}$
- 3.11. $\Delta\varphi = \frac{\pi}{2},$ -----
- 3.12. $\Delta\varphi = \pi,$ -----
- 3.13. $\Delta\varphi = 0, p_{m1} \uparrow\downarrow p_{m2}, p_{ms1} \downarrow\uparrow p_{ms2}, p_{ms1} \uparrow\uparrow p_{m1}, p_{ms2} \uparrow\uparrow p_{m2}$
- 3.14. $\Delta\varphi = \frac{\pi}{2},$ -----
- 3.15. $\Delta\varphi = \pi,$ -----
- 3.16. $\Delta\varphi = 0, p_{m1} \uparrow\downarrow p_{m2}, p_{ms1} \downarrow\uparrow p_{ms2}, p_{ms1} \uparrow\downarrow p_{m1}, p_{ms2} \uparrow\downarrow p_{m2}$
- 3.17. $\Delta\varphi = \frac{\pi}{2},$ -----
- 3.18. $\Delta\varphi = \pi,$ -----

4. Синхронное движение электронов при перпендикулярном расположении их орбит друг к другу с различным начальным сдвигом по фазе нахождения электронов на орбитах, например, кратно $\frac{\pi}{2}$, с параллельными или антипараллельными спинами электронов их орбитальным магнитным моментам. В этом случае возможно не менее 9 ситуаций, в том числе:

- 4.1. $\Delta\varphi = 0, p_{m1} \perp p_{m2}, p_{ms1} \perp p_{ms2}, p_{ms1} \uparrow\uparrow p_{m1}, p_{ms2} \uparrow\uparrow p_{m2}$
- 4.2. $\Delta\varphi = \frac{\pi}{2},$ -----
- 4.3. $\Delta\varphi = \pi,$ -----

$$4.4. \Delta\varphi = 0, p_{m1} \perp p_{m2}, p_{ms1} \perp p_{ms2}, p_{ms1} \uparrow\uparrow p_{m1}, p_{ms2} \uparrow\downarrow p_{m2}$$

$$4.5. \Delta\varphi = \frac{\pi}{2}, \text{-----}$$

$$4.6. \Delta\varphi = \pi, \text{-----}$$

$$4.7. \Delta\varphi = 0, p_{m1} \perp p_{m2}, p_{ms1} \perp p_{ms2}, p_{ms1,2} \uparrow\downarrow p_{m1,2}$$

$$4.8. \Delta\varphi = \frac{\pi}{2}, \text{-----}$$

$$4.9. \Delta\varphi = \pi, \text{-----}$$

Если исходить из условия, что собственный механический момент электрона (спин) и его собственный магнитный момент (p_{ms}) обусловлены вращением его как волчка вокруг собственной оси, то маловероятно, чтобы электрон вращался (спин) в полете в одну сторону, например, по часовой стрелке, а двигался вокруг ядра против часовой стрелки. Более вероятно, что если электрон кружится вокруг ядра по часовой стрелке, то и вращается как волчок он тоже по часовой стрелке, а не против часовой стрелки, т. е. направления орбитального магнитного момента электрона и его собственного (спинового) магнитного момента вероятнее всего совпадают.

Если предположить, что электрон, имея определенное направление вращения вокруг собственной оси (спин), захватился каким-то атомом и начал кружиться вокруг его ядра, а направление спинового магнитного момента не совпало с направлением орбитального магнитного момента, то собственный магнитный момент (спиновый) изменит свое направление за счет разворота оси вращения электрона в соответствии с направлением орбитального магнитного момента электрона. В связи с этим можно предположить несколько меньшее количество возможных ситуаций встречи двух атомов водорода при образовании из них молекулы.

Какие силы будут принимать участие при взаимодействии двух атомов и образовании из них молекулы? Такими силами являются: кулоновская сила электрического притяжения между электроном одного атома и протоном ядра другого, т. е. $F_{e_1 p_2}$ и $F_{e_2 p_1}$, сила электрического отталкивания между протонами разных атомов ($F_{p_1 p_2}$), сила электрического отталкивания между электронами разных атомов ($F_{e_1 e_2}$). Кроме электрических сил притяжения и отталкивания, между двумя атомами будут проявляться магнитные силы взаимодействия как орбитальных магнитных моментов электронов атомов, так и собственных магнитных моментов электронов (т. е. спинов). Знак взаимодействия магнитных сил орбитальных магнитных моментов (p_m) и собственных магнитных моментов (p_{ms}) электронов будет определяться направлением движения электронов по орбитам.

Очень важно оценить вклад электрических и магнитных сил взаимодействия зарядов. Наиболее наглядно соотношение этих сил будет проявляться при синхронном движении двух электронов, расположенных на параллельных орбитах и движении их в одном или в разных направлениях. В этих случаях силы элек-

трического и магнитного взаимодействия зарядов будут направлены по одной прямой. В связи с этим рассмотрим ситуацию 2.1 – синхронное движение двух электронов, расположенных на параллельных орбитах и движущихся в одном направлении с начальным сдвигом по фазе 0° (рис. 4.15). В этой ситуации $p_{m1} \uparrow \uparrow p_{m2}, p_{ms1} \uparrow \uparrow p_{ms2}, p_{ms1,2} \uparrow \uparrow p_{m1,2}$.

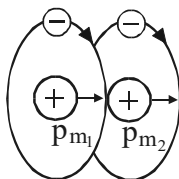


Рис. 4.15

Результирующая сила взаимодействия двух атомов водорода в этом случае будет определяться как:

$$F = \Sigma F_i = F_{e_1 p_2} + F_{e_2 p_1} + F_m + F_{ms} - F_{e_1 e_2} - F_{p_1 p_2}, \quad (4.5)$$

причем

$$F_{e_1 p_2} = F_{e_2 p_1} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(d^2 + r^2)}, \quad (4.6)$$

$$F_{e_1 e_2} = F_{p_1 p_2} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 d^2}, \quad (4.7)$$

здесь r – радиус вращения электрона в атоме водорода; d – расстояние между плоскостями орбит электронов; ϵ_0 – электрическая постоянная.

Расчет сил электрического взаимодействия по формулам (4.6) и (4.7) дает следующие результаты при $d = r = 10^{-10}$ м.

$$F_{e_1 p_2} = F_{e_2 p_1} = \frac{1,6^2 \cdot 10^{-38}}{4 \cdot 3,14 \cdot 8,85 \cdot 10^{-12} \cdot 2 \cdot 10^{-20}} = 1,15 \cdot 10^{-8} \text{ Н},$$

$$F_{e_1 e_2} = F_{p_1 p_2} = \frac{1,6^2 \cdot 10^{-38}}{4 \cdot 3,14 \cdot 8,85 \cdot 10^{-12} \cdot 1 \cdot 10^{-20}} = 2,3 \cdot 10^{-8} \text{ Н}.$$

Таким образом, результирующая четырех сил электрического взаимодействия зарядов при $d = r$ равна

$$F_{\Sigma} = F_{e_1 p_2} + F_{e_2 p_1} - F_{e_1 e_2} - F_{p_1 p_2} = 2 \cdot 1,15 \cdot 10^{-8} \text{ Н} - 2 \cdot 2,3 \cdot 10^{-8} \text{ Н} = -2,3 \cdot 10^{-8} \text{ Н},$$

т. е. соответствует силе электрического отталкивания величиной $2,3 \cdot 10^{-8}$ Н.

Результаты расчета сил электрического взаимодействия (ΣF_{Σ}) двух атомов водорода при разных параметрах d/r представлены в таблице 4.1.

Для расчета сил магнитного взаимодействия орбитальных магнитных моментов (p_m) электронов можно воспользоваться, в соответствии с [23], выражением силы, действующей на участок проводника длиной l при магнитном взаимодействии двух проводников с токами J_1 и J_2 в виде

$$F_m = \frac{\mu_0 \mu}{4\pi} \cdot \frac{2J_1 J_2}{d} \cdot l. \quad (4.8)$$

Таблица 4.1

Расчет сил взаимодействия двух атомов водорода при синхронном движении электронов, расположенных на параллельных орбитах и движущихся в одном направлении с начальным сдвигом по фазе 0°

Расстояние между орбитами электронов атомов (d/r)	$\sum F_{\varphi}$, н	F_m , н	F_{ms} , н	$\sum(F_{\varphi} + F_m + F_{ms})$ н
10^{-4}	$-4,55 \cdot 10^{-4}$	$2,04 \cdot 10^{-8}$	$1,1 \cdot 10^{-7}$	$-4,548 \cdot 10^{-4}$
10^{-3}	$-4,55 \cdot 10^{-5}$	$2,04 \cdot 10^{-9}$	$1,1 \cdot 10^{-8}$	$-4,548 \cdot 10^{-5}$
10^{-2}	$-4,55 \cdot 10^{-6}$	$2,04 \cdot 10^{-10}$	$1,1 \cdot 10^{-9}$	$-4,548 \cdot 10^{-6}$
10^{-1}	$-4,56 \cdot 10^{-7}$	$2,04 \cdot 10^{-11}$	$1,1 \cdot 10^{-10}$	$-4,559 \cdot 10^{-7}$
1	$-2,303 \cdot 10^{-8}$	$2,04 \cdot 10^{-12}$	$1,1 \cdot 10^{-11}$	$-2,301 \cdot 10^{-8}$
10	$-4,18 \cdot 10^{-10}$	$2,04 \cdot 10^{-13}$	$1,1 \cdot 10^{-12}$	$-4,166 \cdot 10^{-10}$

Применим это выражение для случая двух параллельных орбит электронов (рис. 4.15), когда сила магнитного взаимодействия орбитальных моментов электронов будет силой притяжения и максимальной по сравнению с другими ситуациями расположения и направления движения электронов.

Принимая $J = e v = e \frac{v}{2\pi r}$, (4.9)

$J_1 = J_2$, получим

$$F_m = \frac{\mu_0 \mu}{4\pi} \cdot \frac{2e^2 v^2}{4\pi^2 r^2} \cdot \frac{2\pi r}{d} = \frac{\mu_0 \mu e^2 v^2}{4\pi^2 r d}, \quad (4.10)$$

где e – заряд электрона; v – частота вращения электрона по орбите; v – скорость движения электрона по орбите. Из условия равенства центростремительной силы вращения электрона к протону ядра можно принять $v = 5 \cdot 10^6$ м/с; r – радиус орбиты электрона.

Рассчитаем множитель:

$$\frac{\mu_0 \mu}{4\pi^2} \cdot \frac{e^2 v^2}{r} = \frac{4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1,6^2 \cdot 10^{-38} \cdot 25 \cdot 10^{12}}{4\pi^2 \cdot 10^{-10}} = 2,04 \cdot 10^{-22},$$

тогда при $d = r = 10^{-10}$ м

$$F_m = 2,04 \frac{10^{-22}}{10^{-10}} = 2,04 \cdot 10^{-12} \text{ Н.}$$

Значения рассчитанных величин F_m для широкого диапазона изменения параметра d/r представлены в таблице 4.1.

Силу взаимодействия орбитальных магнитных моментов двух электронов, вращающихся по параллельным орбитам, можно так же приближенно рассчитать, как силу магнитного взаимодействия двух одинаковых квадратных контуров с токами J_1 и J_2 (стороны обоих квадратов параллельны и их центры лежат на прямой перпендикулярной к их плоскостям) [23] по формуле

$$F = \frac{\mu_0 \mu}{4\pi} 8J_1 J_2 \left\{ \frac{a^2 + 2d^2}{d\sqrt{a^2 + d^2}} - \frac{d\sqrt{2a^2 + d^2}}{a^2 + d^2} - 1 \right\}, \quad (4.11)$$

где a – сторона квадрата; d – расстояние между центрами квадратов. Контур притягивается при одинаковых направлениях токов и отталкивается в случае разных направлений токов.

В первом приближении примем движение электрона по кольцевой орбите эквивалентно движению по квадратному контуру, причем $a = r$. Оценим роль множителя в фигурной скобке при разных d .

При $d_1 = r = 10^{-10}$ м

$$X_1 = \left\{ \frac{r^2 + 2r^2}{r\sqrt{r^2 + r^2}} - \frac{r\sqrt{2r^2 + r^2}}{r^2 + r^2} - 1 \right\} = \left\{ \frac{3r^2}{r^2\sqrt{2}} - \frac{r^2\sqrt{3}}{2r^2} - 1 \right\} = \frac{3}{\sqrt{2}} - \frac{\sqrt{3}}{2} - 1 = 0,26,$$

при $d_2 = 0,1r = 10^{-11}$ м

$$X_2 = \left\{ \frac{r^2 + 0,02r^2}{0,01r\sqrt{r^2 + 0,01r^2}} - \frac{0,1r\sqrt{2r^2 + 0,01r^2}}{r^2 + 0,01r^2} - 1 \right\} = \left\{ \frac{1,02r^2}{0,1r^2} - \frac{0,1r^2\sqrt{2,01}}{1,01r^2} - 1 \right\} =$$

$$= 10,2 - 0,14 - 1 = 9,06,$$

при $d_3 = 10^{-2}r = 10^{-12}$ м

$$X_3 = \left\{ \frac{r^2 + 2 \cdot 10^{-4} \cdot r^2}{10^{-2}r\sqrt{r^2 + 10^{-4}r^2}} - \frac{10^{-2}r\sqrt{2r^2 + 10^{-4}r^2}}{r^2 + 10^{-4}r^2} - 1 \right\} =$$

$$= \frac{r^2(1,0002)}{10^{-2}r^2} - \frac{10^{-2}r^2\sqrt{2}}{r^2(1,0002)} - 1 = 100,02 - 0,014 - 1 = 98,986,$$

при $d_4 = 10^{-3}r = 10^{-13}$ м

$$X_4 = \left\{ \frac{r^2 + 2 \cdot 10^{-6} \cdot r^2}{10^{-3}r\sqrt{r^2 + 10^{-6}r^2}} - \frac{10^{-3}r\sqrt{2r^2 + 10^{-6}r^2}}{r^2 + 10^{-6}r^2} - 1 \right\} =$$

$$= \left\{ \frac{r^2}{10^{-3}r^2} - \frac{10^{-3}r^2\sqrt{2}}{r^2} - 1 \right\} = 999,$$

при $d_5 = 10^{-4}r = 10^{-14}$ м

$$X_5 = \left\{ \frac{r^2 + 2 \cdot 10^{-8} \cdot r^2}{10^{-4}r\sqrt{r^2 + 10^{-8}r^2}} - \frac{10^{-4}r\sqrt{2r^2 + 10^{-8}r^2}}{r^2 + 10^{-8}r^2} - 1 \right\} = 9999.$$

Принимая по формуле (4.9) $J = e v = e \frac{v}{2\pi r}$ и $J_1 = J_2$, получим

$$F_m = \frac{\mu_0 \mu}{4\pi} \cdot 8 \frac{e^2 v^2}{4\pi^2 r^2} \cdot X_i \quad (4.12)$$

при $v = 5 \cdot 10^6$ м/с; $r = 10^{-10}$ м, при $X_1 = 0,26$

$$F_{m_1} = \frac{4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 8 \cdot 1,6^2 \cdot 10^{-38} \cdot 25 \cdot 10^{12} \cdot 0,26}{4\pi \cdot 4 \cdot 3,14^2 \cdot 10^{-20}} = 3,375 \cdot 10^{-13} \text{ Н},$$

при $X_2 = 9,06$

$$F_{m_2} = 1,176 \cdot 10^{-11} \text{ Н};$$

при $X_3 = 98,986$

$$F_{m_3} = 1,28 \cdot 10^{-10} \text{ Н};$$

при $X_4 = 999$

$$F_{m_4} = 1,297 \cdot 10^{-9} \text{ Н};$$

при $X_5 = 9999$

$$F_{m_5} = 1,298 \cdot 10^{-8} \text{ Н}.$$

Разница в величинах F_m , рассчитанных по разным формулам (4.8) и (4.11), не принципиальная и с уменьшением d снижается, в связи с этим для конечных расчетов воспользуемся величинами F_m , рассчитанными по формуле (4.8).

Для перехода к взаимодействию спинов электронов воспользуемся выражением (4.8) и преобразуем его к виду

$$F_m = \frac{\mu_0 \mu}{4\pi} \cdot \frac{2J_1 J_2}{d} \cdot l = \frac{\mu_0 \mu}{4\pi} \cdot \frac{2J_1 S_1 \cdot J_2 S_2}{d \cdot S_1 \cdot S_2} \cdot l = \frac{\mu_0 \mu}{4\pi} \cdot \frac{2p_{m1} p_{m2}}{d \cdot S_1 \cdot S_2} \cdot l. \quad (4.13)$$

Заменим параметры p_{m1} и p_{m2} на p_{ms1} и p_{ms2} . Тогда сила взаимодействия спинов двух электронов, вращающихся по орбите,

$$F_{ms} = \frac{\mu_0 \mu}{4\pi} \cdot \frac{2p_{ms1} \cdot p_{ms2}}{d \cdot S_1 \cdot S_2} \cdot l, \quad (4.14)$$

так как $p_{ms} = \frac{h}{4\pi} \cdot \frac{e}{m_e}$, а $l = 2\pi r$, то

$$F_{ms} = \frac{\mu_0 \mu}{4\pi} \cdot \frac{2h^2 e^2 \ell}{16\pi^2 m_e^2 d \cdot S_1 \cdot S_2} = \frac{\mu_0 \mu h^2 e^2 2\pi r}{32\pi^3 m_e^2 d \pi^2 r^4} = \frac{\mu_0 \mu h^2 e^2}{16\pi^4 m_e^2 r^3 d}. \quad (4.15)$$

Просчитаем множитель:

$$\frac{\mu_0 \mu h^2 e^2}{16\pi^4 m_e^2 r^3} = \frac{4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 6,63^2 \cdot 10^{-68} \cdot 1,6^2 \cdot 10^{-38}}{16\pi^4 \cdot 9,11^2 \cdot 10^{-62} \cdot 10^{-30}} = 1,1 \cdot 10^{-21}.$$

Тогда:

$$\text{при } d = r = 10^{-10} \text{ м} \quad F_{ms} = 1,1 \frac{10^{-21}}{10^{-10}} = 1,1 \cdot 10^{-11} \text{ Н;}$$

$$\text{при } d = 0,1r = 10^{-11} \text{ м} \quad F_{ms} = 1,1 \frac{10^{-21}}{10^{-11}} = 1,1 \cdot 10^{-10} \text{ Н;}$$

$$\text{при } d = 10^{-2}r = 10^{-12} \text{ м} \quad F_{ms} = 1,1 \frac{10^{-21}}{10^{-12}} = 1,1 \cdot 10^{-9} \text{ Н;}$$

$$\text{при } d = 10^{-3}r = 10^{-13} \text{ м} \quad F_{ms} = 1,1 \frac{10^{-21}}{10^{-13}} = 1,1 \cdot 10^{-8} \text{ Н;}$$

$$\text{при } d = 10^{-4}r = 10^{-14} \text{ м} \quad F_{ms} = 1,1 \frac{10^{-21}}{10^{-14}} = 1,1 \cdot 10^{-7} \text{ Н.}$$

Для сравнительного анализа результаты расчетов представлены в таблице 4.1.

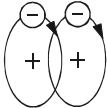
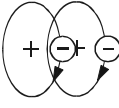
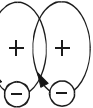
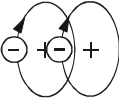
Как видно из сопоставления расчетов и данных таблицы 4.1, при одинаковых условиях, т. е. одинаковом расстоянии между электронами атомов водорода, результирующая сила электрического отталкивания электронов и протонов атомов водорода на 3-4 порядка превосходит силы магнитного притяжения как орбитальных магнитных моментов, так и магнитных спиновых моментов электронов. Поэтому результирующая сила всех электрических и магнитных сил взаимодействия атомов водорода практически равна силам электрического взаимодействия и, следовательно, при расчетах сил взаимодействия между атомами водорода при различных ситуациях взаиморасположения электронов атомов взаимодействием сил орбитальных магнитных моментов и собственных

магнитных моментов (спинов) электронов атомов водородов можно пренебречь. Кроме того, из анализа сопоставления сил электрического и магнитного взаимодействия можно сделать вывод, что невозможна ситуация, чтобы два спаренных электрона вращались либо в разные стороны и пролетали мимо друг друга на расстоянии 10^{-13} – 10^{-14} м и встречались через каждые полпериода времени своего полета, либо, вращаясь в одном направлении, не имели сдвига по фазе, находясь друг против друга. Поэтому остается открытым вопрос: что конструктивно представляют из себя спаренные электроны? Ответ на этот вопрос может дать только полный анализ сил взаимодействия двух атомов водорода. В связи с этим к вопросу природы спаренных электронов вернемся позже после рассмотрения различных ситуаций взаимодействия атомов водорода.

В таблице 4.2 представлены результаты расчетов результирующих сил электрического взаимодействия двух атомов водорода через каждый четверть периода обращения электронов вокруг ядер для условия синхронного движения двух электронов, расположенных на параллельных орбитах и движущихся в одном направлении с начальным сдвигом по фазе 0° . Как видно во всех положениях, суммарная сила электрического взаимодействия остается постоянной и является силой отталкивания при любых расстояниях между орбитами атомов.

Таблица 4.2

Синхронное движение двух электронов атомов водорода, расположенных на параллельных орбитах и движущихся в одном направлении с начальным сдвигом по фазе 0°

Расстояние между орбитами электронов $\left(\frac{d}{r}\right)$	$\Sigma F_{\text{э}i}$ в момент времени				Среднее значение $F_{\text{э}} = \frac{\Sigma F_{\text{э}i}}{4}$ за период обращения электронов
	$t = 0$	$t = \frac{1}{4} T$	$t = \frac{1}{2} T$	$t = \frac{3}{4} T$	
0,1	$-4,56 \cdot 10^{-6}$	$-4,56 \cdot 10^{-6}$	$-4,56 \cdot 10^{-6}$	$-4,56 \cdot 10^{-6}$	$-4,56 \cdot 10^{-6}$
0,2	$-1,107 \cdot 10^{-6}$	$-1,107 \cdot 10^{-6}$	$-1,107 \cdot 10^{-6}$	$-1,107 \cdot 10^{-6}$	$-1,107 \cdot 10^{-6}$
0,3	$-4,695 \cdot 10^{-7}$	$-4,695 \cdot 10^{-7}$	$-4,695 \cdot 10^{-7}$	$-4,695 \cdot 10^{-7}$	$-4,695 \cdot 10^{-7}$
0,4	$-2,482 \cdot 10^{-8}$	$-2,482 \cdot 10^{-8}$	$-2,482 \cdot 10^{-8}$	$-2,482 \cdot 10^{-8}$	$-2,482 \cdot 10^{-8}$
0,6	$-9,409 \cdot 10^{-8}$	$-9,409 \cdot 10^{-8}$	$-9,409 \cdot 10^{-8}$	$-9,409 \cdot 10^{-8}$	$-9,409 \cdot 10^{-8}$
0,8	$-4,387 \cdot 10^{-8}$	$-4,387 \cdot 10^{-8}$	$-4,387 \cdot 10^{-8}$	$-4,387 \cdot 10^{-8}$	$-4,387 \cdot 10^{-8}$
1	$-2,303 \cdot 10^{-8}$	$-2,303 \cdot 10^{-8}$	$-2,303 \cdot 10^{-8}$	$-2,303 \cdot 10^{-8}$	$-2,303 \cdot 10^{-8}$
1,5	$-6,285 \cdot 10^{-9}$	$-6,285 \cdot 10^{-9}$	$-6,285 \cdot 10^{-9}$	$-6,285 \cdot 10^{-9}$	$-6,285 \cdot 10^{-9}$
2	$-2,303 \cdot 10^{-9}$	$-2,303 \cdot 10^{-9}$	$-2,303 \cdot 10^{-9}$	$-2,303 \cdot 10^{-9}$	$-2,303 \cdot 10^{-9}$
3	$-5,118 \cdot 10^{-10}$	$-5,118 \cdot 10^{-10}$	$-5,118 \cdot 10^{-10}$	$-5,118 \cdot 10^{-10}$	$-5,118 \cdot 10^{-10}$
4	$-1,704 \cdot 10^{-10}$	$-1,704 \cdot 10^{-10}$	$-1,704 \cdot 10^{-10}$	$-1,704 \cdot 10^{-10}$	$-1,704 \cdot 10^{-10}$
5	$-7,093 \cdot 10^{-11}$	$-7,093 \cdot 10^{-11}$	$-7,093 \cdot 10^{-11}$	$-7,093 \cdot 10^{-11}$	$-7,093 \cdot 10^{-11}$
10	$-4,564 \cdot 10^{-12}$	$-4,564 \cdot 10^{-12}$	$-4,564 \cdot 10^{-12}$	$-4,564 \cdot 10^{-12}$	$-4,564 \cdot 10^{-12}$
20	$-4,6 \cdot 10^{-13}$	$-4,6 \cdot 10^{-13}$	$-4,6 \cdot 10^{-13}$	$-4,6 \cdot 10^{-13}$	$-4,6 \cdot 10^{-13}$
					

При синхронном движении двух электронов, расположенных на параллельных орбитах и движущихся в одном направлении с начальным сдвигом по фазе 180° (рис. 4.16) расчет сил электрического взаимодействия необходимо проводить по формулам (4.16)-(4.19), а результирующей силы – по формуле (4.20).

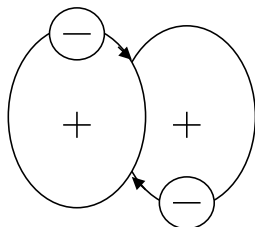


Рис. 4.16

$$F_{p_1 p_2} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 d^2}, \quad (4.16)$$

$$F_{e_1 e_2} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (4r^2 + d^2)}, \quad (4.17)$$

$$F_{e_1 p_2} = +\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (r^2 + d^2)}, \quad (4.18)$$

$$F_{e_2 p_1} = +\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (r^2 + d^2)}, \quad (4.19)$$





$$\begin{aligned} F_{\Sigma} = \Sigma F_{\Sigma} &= F_{e_1 p_2} + F_{e_2 p_1} - F_{p_1 p_2} - F_{e_1 e_2} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{2}{r^2 + d^2} - \frac{1}{d^2} - \frac{1}{4r^2 + d^2} \right) = \\ &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \left(\frac{2}{(d/r)^2 + 1} - \frac{1}{(d/r)^2} - \frac{1}{4 + (d/r)^2} \right). \end{aligned} \quad (4.20)$$

Расчеты по формуле (4.20) представлены в таблице 4.3. Анализ результатов расчета показывает, что во всех четвертьпериодах обращения электронов вокруг ядер атомов силы электрического взаимодействия являются одинаковыми при $d/r = \text{const}$ и являются силами притяжения при $d > r$ и силами отталкивания при $d < r$, т. е. при сближении на близкие расстояния ($d < r$) атомы отталкиваются, но если они разлетаются на расстояния $d > r$, то атомы начинают притягиваться. Сравнение величин результирующих сил электрического взаимодействия (табл. 4.3) с силой орбитального магнитного притяжения атомов (табл. 4.1) показывает, что последняя на несколько порядков меньше и ею можно пренебречь.

При синхронном движении двух электронов, расположенных на параллельных орбитах и движущихся в одном направлении с начальным сдвигом по фазе 90° (рис. 4.17), расчет сил электрического взаимодействия необходимо проводить по формулам (4.21)–(4.24), а результирующую силу по формуле (4.25).

Таблица 4.3

Синхронное движение двух электронов атомов водорода, расположенных на параллельных орбитах и движущихся в одном направлении с начальным сдвигом по фазе 180°

Расстояние между орбитами электронов $\left(\frac{d}{r}\right)$	$\Sigma F_{\text{э}i}$ в момент времени				Среднее значение $F_{\text{э}} = \frac{\Sigma \Sigma F_{\text{э}i}}{4}$ за период обращения электронов
	$t = 0$	$t = \frac{1}{4}T$	$t = \frac{1}{2}T$	$t = \frac{3}{4}T$	
0,1	$-2,26 \cdot 10^{-6}$	$-2,26 \cdot 10^{-6}$	$-2,26 \cdot 10^{-6}$	$-2,26 \cdot 10^{-6}$	$-2,26 \cdot 10^{-6}$
0,2	$-5,365 \cdot 10^{-7}$	$-5,365 \cdot 10^{-7}$	$-5,365 \cdot 10^{-7}$	$-5,365 \cdot 10^{-7}$	$-5,365 \cdot 10^{-7}$
0,3	$-2,189 \cdot 10^{-7}$	$-2,189 \cdot 10^{-7}$	$-2,189 \cdot 10^{-7}$	$-2,189 \cdot 10^{-7}$	$-2,189 \cdot 10^{-7}$
0,4	$-1,096 \cdot 10^{-7}$	$-1,096 \cdot 10^{-7}$	$-1,096 \cdot 10^{-7}$	$-1,096 \cdot 10^{-7}$	$-1,096 \cdot 10^{-7}$
0,6	$-6,91 \cdot 10^{-8}$	$-6,91 \cdot 10^{-8}$	$-6,91 \cdot 10^{-8}$	$-6,91 \cdot 10^{-8}$	$-6,91 \cdot 10^{-8}$
0,8	$-1,56 \cdot 10^{-8}$	$-1,56 \cdot 10^{-8}$	$-1,56 \cdot 10^{-8}$	$-1,56 \cdot 10^{-8}$	$-1,56 \cdot 10^{-8}$
1	$-4,6 \cdot 10^{-8}$	$-4,6 \cdot 10^{-8}$	$-4,6 \cdot 10^{-8}$	$-4,6 \cdot 10^{-8}$	$-4,6 \cdot 10^{-8}$
1,5	$2,517 \cdot 10^{-9}$	$2,517 \cdot 10^{-9}$	$2,517 \cdot 10^{-9}$	$2,517 \cdot 10^{-9}$	$2,517 \cdot 10^{-9}$
2	$5,75 \cdot 10^{-9}$	$5,75 \cdot 10^{-9}$	$5,75 \cdot 10^{-9}$	$5,75 \cdot 10^{-9}$	$5,75 \cdot 10^{-9}$
3	$2,75 \cdot 10^{-10}$	$2,75 \cdot 10^{-10}$	$2,75 \cdot 10^{-10}$	$2,75 \cdot 10^{-10}$	$2,75 \cdot 10^{-10}$
4	$1,173 \cdot 10^{-10}$	$1,173 \cdot 10^{-10}$	$1,173 \cdot 10^{-10}$	$1,173 \cdot 10^{-10}$	$1,173 \cdot 10^{-10}$
5	$5,56 \cdot 10^{-11}$	$5,56 \cdot 10^{-11}$	$5,56 \cdot 10^{-11}$	$5,56 \cdot 10^{-11}$	$5,56 \cdot 10^{-11}$
10	$4,248 \cdot 10^{-12}$	$4,248 \cdot 10^{-12}$	$4,248 \cdot 10^{-12}$	$4,248 \cdot 10^{-12}$	$4,248 \cdot 10^{-12}$
20	$2,71 \cdot 10^{-13}$	$2,71 \cdot 10^{-13}$	$2,71 \cdot 10^{-13}$	$2,71 \cdot 10^{-13}$	$2,71 \cdot 10^{-13}$
					

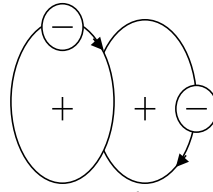


Рис. 4.17

$$F_{p_1 p_2} = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 d^2}, \quad (4.21)$$

$$F_{e_1 e_2} = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (2r^2 + d^2 + 2r\sqrt{r^2 + d^2})}, \quad (4.22)$$

$$F_{e_1 p_2} = + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (r^2 + d^2)}, \quad (4.23)$$

$$F_{e_2 p_1} = + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (r^2 + d^2)}, \quad (4.24)$$

$$\begin{aligned}
F_{\mathfrak{z}} &= \Sigma F_{\mathfrak{z}_i} = F_{e_1 p_2} + F_{e_2 p_1} - F_{p_1 p_2} - F_{e_1 e_2} = \\
&= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{2}{r^2 + d^2} - \frac{1}{d^2} - \frac{1}{2r^2 + d^2 + 2r\sqrt{r^2 + d^2}} \right) = \\
&= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \left(\frac{2}{(d/r)^2 + 1} - \frac{1}{(d/r)^2} - \frac{1}{2 + (d/r)^2 + 2\sqrt{1 + (d/r)^2}} \right).
\end{aligned} \tag{4.25}$$

Анализ результатов расчетов представлен в таблице 4.4 и свидетельствует, что как во всех четвертьпериодах, так и в целом за период обращения электронов, по аналогии с предыдущей ситуацией движения электронов по параллельным орбитам со сдвигом по фазе 180° , силы электрического взаимодействия одинаковы при $d/r = \text{const}$ и являются силами притяжения при $d > r$ и силами отталкивания при $d < r$.

При синхронном движении двух электронов, расположенных на параллельных орбитах и движущихся в противоположных направлениях с начальным сдвигом по фазе 0° или 180° расчет сил электрического взаимодействия в разные четвертьпериоды проводился с использованием исходных формул (4.6), (4.7), (4.20), и результаты представлены в таблицах 4.5 и 4.6. Анализ их показывает, что в обеих ситуациях в два четвертьпериода результирующая сила электрического взаимодействия является силой отталкивания при любых расстояниях между орбитами атомов, а при двух четвертьпериодах характер электрических сил взаимодействия атомов меняется на противоположный при $d = r$, причем при $d < r$ преобладают силы отталкивания, а при $d > r$ – силы притяжения. Однако результирующая всех сил за полный период обращения электронов по орбитам является силой отталкивания при всех расстояниях между орбитами электронов атомов.

В условиях синхронного движения двух электронов, расположенных на параллельных орбитах и движущихся в противоположных направлениях, но с начальным сдвигом по фазе 90° , отмечается картина, аналогичная движению электронов в одном направлении, т. е. при $d < r$ имеет место проявление сил отталкивания между атомами, а при $d > r$ – сил притяжения (табл. 4.7).

Таким образом, при сближении между собой двух атомов водорода параллельно расположенными орбитами вращения электронов вокруг ядер своих атомов возможен ряд ситуаций, когда на расстояниях до $d >$ или $= r$ атомы испытывают силы взаимного притяжения, а при $d < r$ – силы отталкивания, и эти ситуации могут реально проявляться при образовании молекулы H_2 , однако следует сразу оговориться, что роль как орбитальных, так и спиновых магнитных моментов электронов атомов в образовании молекулы практически сведена к нулю. Основную роль играют силы электрического взаимодействия электронов и протонов атомов водорода в образовании молекулы H_2 .

Таблица 4.4

Синхронное движение двух электронов атомов водорода, расположенных на параллельных орбитах и движущихся в одном направлении с начальным сдвигом по фазе 90°

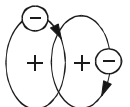
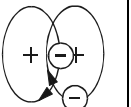
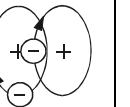
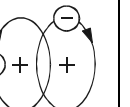
Расстояние между орбитами электронов $\left(\frac{d}{r}\right)$	$\Sigma F_{\text{э}i}$ в момент времени				Среднее значение $F_{\text{э}} = \frac{\Sigma \Sigma F_{\text{э}i}}{4}$ за период обращения электронов
	$t = 0$	$t = \frac{1}{4} T$	$t = \frac{1}{2} T$	$t = \frac{3}{4} T$	
0,1	$-2,26 \cdot 10^{-6}$	$-2,26 \cdot 10^{-6}$	$-2,26 \cdot 10^{-6}$	$-2,26 \cdot 10^{-6}$	$-2,26 \cdot 10^{-6}$
0,2	$-5,364 \cdot 10^{-7}$	$-5,364 \cdot 10^{-7}$	$-5,364 \cdot 10^{-7}$	$-5,364 \cdot 10^{-7}$	$-5,364 \cdot 10^{-7}$
0,3	$-2,188 \cdot 10^{-7}$	$-2,188 \cdot 10^{-7}$	$-2,188 \cdot 10^{-7}$	$-2,188 \cdot 10^{-7}$	$-2,188 \cdot 10^{-7}$
0,4	$-1,094 \cdot 10^{-7}$	$-1,094 \cdot 10^{-7}$	$-1,094 \cdot 10^{-7}$	$-1,094 \cdot 10^{-7}$	$-1,094 \cdot 10^{-7}$
0,6	$-3,49 \cdot 10^{-8}$	$-3,49 \cdot 10^{-8}$	$-3,49 \cdot 10^{-8}$	$-3,49 \cdot 10^{-8}$	$-3,49 \cdot 10^{-8}$
0,8	$-1,231 \cdot 10^{-8}$	$-1,231 \cdot 10^{-8}$	$-1,231 \cdot 10^{-8}$	$-1,231 \cdot 10^{-8}$	$-1,231 \cdot 10^{-8}$
1	$-4,354 \cdot 10^{-9}$	$-4,354 \cdot 10^{-9}$	$-4,354 \cdot 10^{-9}$	$-4,354 \cdot 10^{-9}$	$-4,354 \cdot 10^{-9}$
1,5	$1,000 \cdot 10^{-9}$	$1,000 \cdot 10^{-9}$	$1,000 \cdot 10^{-9}$	$1,000 \cdot 10^{-9}$	$1,000 \cdot 10^{-9}$
2	$1,253 \cdot 10^{-9}$	$1,253 \cdot 10^{-9}$	$1,253 \cdot 10^{-9}$	$1,253 \cdot 10^{-9}$	$1,253 \cdot 10^{-9}$
3	$7,167 \cdot 10^{-10}$	$7,167 \cdot 10^{-10}$	$7,167 \cdot 10^{-10}$	$7,167 \cdot 10^{-10}$	$7,167 \cdot 10^{-10}$
4	$3,907 \cdot 10^{-10}$	$3,907 \cdot 10^{-10}$	$3,907 \cdot 10^{-10}$	$3,907 \cdot 10^{-10}$	$3,907 \cdot 10^{-10}$
5	$1,003 \cdot 10^{-10}$	$1,003 \cdot 10^{-10}$	$1,003 \cdot 10^{-10}$	$1,003 \cdot 10^{-10}$	$1,003 \cdot 10^{-10}$
10	$1,61 \cdot 10^{-11}$	$1,61 \cdot 10^{-11}$	$1,61 \cdot 10^{-11}$	$1,61 \cdot 10^{-11}$	$1,61 \cdot 10^{-11}$
20	$5,177 \cdot 10^{-12}$	$5,177 \cdot 10^{-12}$	$5,177 \cdot 10^{-12}$	$5,177 \cdot 10^{-12}$	$5,177 \cdot 10^{-12}$
					

Таблица 4.5

Синхронное движение двух электронов атомов водорода, расположенных на параллельных орбитах и движущихся в противоположных направлениях с начальным сдвигом по фазе 0°

Расстояние между орбитами электронов $\left(\frac{d}{r}\right)$	$\Sigma F_{\text{э}i}$ в момент времени				Среднее значение $F_{\text{э}} = \frac{\Sigma \Sigma F_{\text{э}i}}{4}$ за период обращения электронов
	$t=0$	$t = \frac{1}{4} T$	$t = \frac{1}{2} T$	$t = \frac{3}{4} T$	
0,1	$-4,56 \cdot 10^{-6}$	$-2,26 \cdot 10^{-6}$	$-4,56 \cdot 10^{-6}$	$-2,26 \cdot 10^{-6}$	$-3,41 \cdot 10^{-6}$
0,2	$-1,107 \cdot 10^{-6}$	$-5,365 \cdot 10^{-7}$	$-1,107 \cdot 10^{-6}$	$-5,365 \cdot 10^{-7}$	$-8,217 \cdot 10^{-7}$
0,3	$-4,695 \cdot 10^{-7}$	$-2,189 \cdot 10^{-7}$	$-4,695 \cdot 10^{-7}$	$-2,189 \cdot 10^{-7}$	$-3,442 \cdot 10^{-7}$
0,4	$-2,482 \cdot 10^{-7}$	$-1,096 \cdot 10^{-7}$	$-2,482 \cdot 10^{-7}$	$-1,096 \cdot 10^{-7}$	$-1,789 \cdot 10^{-7}$
0,6	$-9,409 \cdot 10^{-8}$	$-6,54 \cdot 10^{-8}$	$-9,409 \cdot 10^{-8}$	$-6,54 \cdot 10^{-8}$	$-7,974 \cdot 10^{-8}$
0,8	$-4,387 \cdot 10^{-8}$	$-1,56 \cdot 10^{-8}$	$-4,387 \cdot 10^{-8}$	$-1,56 \cdot 10^{-8}$	$-2,973 \cdot 10^{-8}$
1	$-2,303 \cdot 10^{-8}$	$-4,6 \cdot 10^{-9}$	$-2,303 \cdot 10^{-8}$	$-4,6 \cdot 10^{-9}$	$-1,381 \cdot 10^{-8}$
1,5	$-6,285 \cdot 10^{-9}$	$2,517 \cdot 10^{-10}$	$-6,285 \cdot 10^{-9}$	$2,517 \cdot 10^{-10}$	$-3,016 \cdot 10^{-9}$
2	$-2,303 \cdot 10^{-9}$	$5,75 \cdot 10^{-10}$	$-2,303 \cdot 10^{-9}$	$5,75 \cdot 10^{-10}$	$-8,640 \cdot 10^{-10}$
3	$-5,118 \cdot 10^{-10}$	$2,75 \cdot 10^{-10}$	$-5,118 \cdot 10^{-10}$	$2,75 \cdot 10^{-10}$	$-1,184 \cdot 10^{-10}$

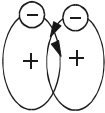
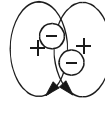
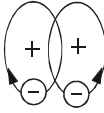
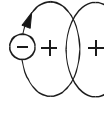
Расстояние между орби- тами элек- тронов $\left(\frac{d}{r}\right)$	ΣF_{zi} в момент времени				Среднее значение $F_z = \frac{\Sigma F_{zi}}{4}$ за период обраще- ния электронов
	$t = 0$	$t = \frac{1}{4} T$	$t = \frac{1}{2} T$	$t = \frac{3}{4} T$	
4	$-1,704 \cdot 10^{-10}$	$1,173 \cdot 10^{-10}$	$-1,704 \cdot 10^{-10}$	$1,173 \cdot 10^{-10}$	$-2,655 \cdot 10^{-11}$
5	$-7,093 \cdot 10^{-11}$	$5,56 \cdot 10^{-11}$	$-7,093 \cdot 10^{-11}$	$5,56 \cdot 10^{-11}$	$-7,665 \cdot 10^{-12}$
10	$-4,564 \cdot 10^{-12}$	$4,248 \cdot 10^{-12}$	$-4,564 \cdot 10^{-12}$	$4,248 \cdot 10^{-12}$	$-1,58 \cdot 10^{-13}$
20	$-4,6 \cdot 10^{-13}$	$2,71 \cdot 10^{-13}$	$-4,6 \cdot 10^{-13}$	$2,71 \cdot 10^{-13}$	$-9,45 \cdot 10^{-14}$
					

Таблица 4.6

Синхронное движение двух электронов атомов водорода, расположенных на параллельных орбитах и движущихся в противоположных направлениях с начальным сдвигом по фазе 180°

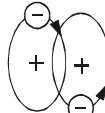
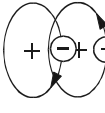
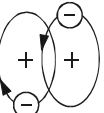
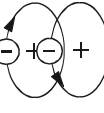
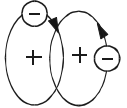
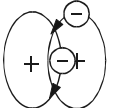
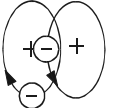
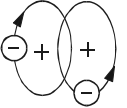
Расстояние между орби- тами электронов $\left(\frac{d}{r}\right)$	ΣF_{zi} в момент времени				Среднее значение $F_z = \frac{\Sigma F_{zi}}{4}$ за период обраще- ния электронов
	$t=0$	$t = \frac{1}{4} T$	$t = \frac{1}{2} T$	$t = \frac{3}{4} T$	
0,1	$-2,26 \cdot 10^{-6}$	$-4,56 \cdot 10^{-6}$	$-2,26 \cdot 10^{-6}$	$-4,56 \cdot 10^{-6}$	$-3,41 \cdot 10^{-6}$
0,2	$-5,365 \cdot 10^{-7}$	$-1,107 \cdot 10^{-6}$	$-5,365 \cdot 10^{-7}$	$-1,107 \cdot 10^{-6}$	$-8,217 \cdot 10^{-7}$
0,3	$-2,189 \cdot 10^{-7}$	$-4,695 \cdot 10^{-7}$	$-2,189 \cdot 10^{-7}$	$-4,695 \cdot 10^{-7}$	$-3,442 \cdot 10^{-7}$
0,4	$-1,096 \cdot 10^{-7}$	$-2,482 \cdot 10^{-8}$	$-1,096 \cdot 10^{-7}$	$-2,482 \cdot 10^{-8}$	$-1,789 \cdot 10^{-7}$
0,6	$-6,54 \cdot 10^{-8}$	$-9,409 \cdot 10^{-8}$	$-6,54 \cdot 10^{-8}$	$-9,409 \cdot 10^{-8}$	$-7,974 \cdot 10^{-8}$
0,8	$-1,56 \cdot 10^{-8}$	$-4,387 \cdot 10^{-8}$	$-1,56 \cdot 10^{-8}$	$-4,387 \cdot 10^{-8}$	$-2,973 \cdot 10^{-8}$
1	$-4,6 \cdot 10^{-9}$	$-2,303 \cdot 10^{-8}$	$-4,6 \cdot 10^{-9}$	$-2,303 \cdot 10^{-8}$	$-1,381 \cdot 10^{-8}$
1,5	$2,517 \cdot 10^{-10}$	$-6,285 \cdot 10^{-9}$	$2,517 \cdot 10^{-10}$	$-6,285 \cdot 10^{-9}$	$-3,016 \cdot 10^{-9}$
2	$5,75 \cdot 10^{-10}$	$-2,303 \cdot 10^{-9}$	$5,75 \cdot 10^{-10}$	$-2,303 \cdot 10^{-9}$	$-8,640 \cdot 10^{-10}$
3	$2,75 \cdot 10^{-10}$	$-5,118 \cdot 10^{-10}$	$2,75 \cdot 10^{-10}$	$-5,118 \cdot 10^{-10}$	$-1,184 \cdot 10^{-10}$
4	$1,173 \cdot 10^{-10}$	$-1,704 \cdot 10^{-10}$	$1,173 \cdot 10^{-10}$	$-1,704 \cdot 10^{-10}$	$-2,655 \cdot 10^{-11}$
5	$5,56 \cdot 10^{-11}$	$-7,093 \cdot 10^{-11}$	$5,56 \cdot 10^{-11}$	$-7,093 \cdot 10^{-11}$	$-7,665 \cdot 10^{-12}$
10	$4,248 \cdot 10^{-12}$	$-4,564 \cdot 10^{-12}$	$4,248 \cdot 10^{-12}$	$-4,564 \cdot 10^{-12}$	$-1,58 \cdot 10^{-13}$
20	$2,71 \cdot 10^{-13}$	$-4,6 \cdot 10^{-13}$	$2,71 \cdot 10^{-13}$	$-4,6 \cdot 10^{-13}$	$-9,45 \cdot 10^{-14}$
					

Таблица 4.7

Синхронное движение двух электронов атомов водорода, расположенных на параллельных орбитах и движущихся в противоположных направлениях с начальным сдвигом по фазе 90°

Расстояние между орбитами электронов $\left(\frac{d}{r}\right)$	$\Sigma F_{\pm i}$ в момент времени				Среднее значение $F_s = \frac{\Sigma \Sigma F_{\pm i}}{4}$ за период обращения электронов
	$t=0$	$t=\frac{1}{4}T$	$t=\frac{1}{2}T$	$t=\frac{3}{4}T$	
0,1	$-2,26 \cdot 10^{-6}$	$-2,26 \cdot 10^{-6}$	$-2,26 \cdot 10^{-6}$	$-2,26 \cdot 10^{-6}$	$-2,26 \cdot 10^{-6}$
0,2	$-5,364 \cdot 10^{-7}$	$-5,364 \cdot 10^{-7}$	$-5,364 \cdot 10^{-7}$	$-5,364 \cdot 10^{-7}$	$-5,364 \cdot 10^{-7}$
0,3	$-2,188 \cdot 10^{-7}$	$-2,188 \cdot 10^{-7}$	$-2,188 \cdot 10^{-7}$	$-2,188 \cdot 10^{-7}$	$-2,188 \cdot 10^{-7}$
0,4	$-1,094 \cdot 10^{-7}$	$-1,094 \cdot 10^{-7}$	$-1,094 \cdot 10^{-7}$	$-1,094 \cdot 10^{-7}$	$-1,094 \cdot 10^{-7}$
0,6	$-3,49 \cdot 10^{-8}$	$-3,49 \cdot 10^{-8}$	$-3,49 \cdot 10^{-8}$	$-3,49 \cdot 10^{-8}$	$-3,49 \cdot 10^{-8}$
0,8	$-1,231 \cdot 10^{-8}$	$-1,231 \cdot 10^{-8}$	$-1,231 \cdot 10^{-8}$	$-1,231 \cdot 10^{-8}$	$-1,231 \cdot 10^{-8}$
1	$-4,354 \cdot 10^{-9}$	$-4,354 \cdot 10^{-9}$	$-4,354 \cdot 10^{-9}$	$-4,354 \cdot 10^{-9}$	$-4,354 \cdot 10^{-9}$
1,5	$1,000 \cdot 10^{-9}$	$1,000 \cdot 10^{-9}$	$1,000 \cdot 10^{-9}$	$1,000 \cdot 10^{-9}$	$1,000 \cdot 10^{-9}$
2	$1,253 \cdot 10^{-9}$	$1,253 \cdot 10^{-9}$	$1,253 \cdot 10^{-9}$	$1,253 \cdot 10^{-9}$	$1,253 \cdot 10^{-9}$
3	$7,167 \cdot 10^{-10}$	$7,167 \cdot 10^{-10}$	$7,167 \cdot 10^{-10}$	$7,167 \cdot 10^{-10}$	$7,167 \cdot 10^{-10}$
4	$3,907 \cdot 10^{-10}$	$3,907 \cdot 10^{-10}$	$3,907 \cdot 10^{-10}$	$3,907 \cdot 10^{-10}$	$3,907 \cdot 10^{-10}$
5	$1,003 \cdot 10^{-10}$	$1,003 \cdot 10^{-10}$	$1,003 \cdot 10^{-10}$	$1,003 \cdot 10^{-10}$	$1,003 \cdot 10^{-10}$
10	$1,61 \cdot 10^{-11}$	$1,61 \cdot 10^{-11}$	$1,61 \cdot 10^{-11}$	$1,61 \cdot 10^{-11}$	$1,61 \cdot 10^{-11}$
20	$5,177 \cdot 10^{-12}$	$5,177 \cdot 10^{-12}$	$5,177 \cdot 10^{-12}$	$5,177 \cdot 10^{-12}$	$5,177 \cdot 10^{-12}$
					

Рассмотрим взаимодействие двух атомов водорода при синхронном движении в одном направлении электронов на двух орбитах, расположенных на одной линии и с различным начальным сдвигом по фазе. Для условий начального сдвига по фазе расположения электронов на орбитах 0° в ситуации рис. 4.18 расчет сил электрического взаимодействия проводился по исходным формулам (4.26)–(4.29) и обобщенной (4.30), а в ситуации рис. 4.19 – по исходным формулам (4.31)–(4.34) и обобщенной (4.35).

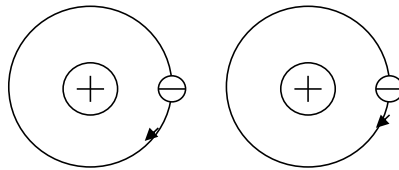


Рис. 4.18

$$F_{p_1 p_2} = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (2r + d)^2}. \quad (4.26)$$

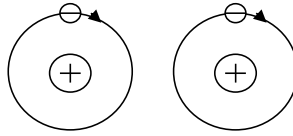


Рис. 4.19

$$F_{e_1 e_2} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(2r+d)^2}, \quad (4.27)$$

$$F_{e_1 p_2} = +\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(r+d)^2}, \quad (4.28)$$

$$F_{e_2 p_1} = +\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(3r+d^2)}, \quad (4.29)$$

$$\begin{aligned} F_3 = \Sigma F_{3_i} &= F_{e_1 p_2} + F_{e_2 p_1} - F_{p_1 p_2} - F_{e_1 e_2} = \\ &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{(r+d)^2} + \frac{1}{(3r+d)^2} - \frac{2}{(2r+d)^2} \right) = \\ &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \left(\frac{1}{(1+d/r)^2} + \frac{1}{(3+d/r)^2} - \frac{2}{(2+d/r)^2} \right), \end{aligned} \quad (4.30)$$

$$F_{p_1 p_2} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(2r+d)^2}, \quad (4.31)$$

$$F_{e_1 e_2} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(2r+d)^2}, \quad (4.32)$$

$$F_{e_1 p_2} = +\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0[r^2 + (2r+d)^2]}, \quad (4.33)$$

$$F_{e_2 p_1} = +\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0[r^2 + (2r+d)^2]}, \quad (4.34)$$

$$\begin{aligned} F_3 = \Sigma F_{3_i} &= F_{e_1 p_2} + F_{e_2 p_1} - F_{e_1 e_2} - F_{p_1 p_2} = \\ &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \left(\frac{2}{1+(2+d/r)^2} - \frac{2}{(2+d/r)^2} \right). \end{aligned} \quad (4.35)$$

Для условий начального сдвига по фазе расположения электронов на орбитах 90° в ситуации рис. 4.20 расчет проводился по исходным формулам (4.36)–(4.39) и обобщенной (4.40), а в ситуации рис. 4.21 – по исходным формулам (4.41)–(4.44) и обобщенной (4.45).

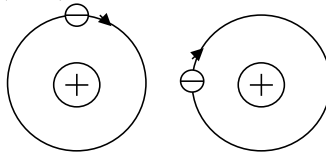


Рис. 4.20

$$F_{p_1 p_2} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(2r+d)^2}, \quad (4.36)$$

$$F_{e_1 e_2} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0[r^2 + (r+d)^2]}, \quad (4.37)$$

$$F_{e_1 p_2} = +\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0[r^2 + (2r+d)^2]}, \quad (4.38)$$

$$F_{e_2 p_1} = +\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(r+d)^2}, \quad (4.39)$$

$$F_{\text{э}} = \Sigma F_{\text{э}_i} = F_{e_1 p_2} + F_{e_2 p_1} - F_{e_1 e_2} - F_{p_1 p_2} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \times$$

$$\times \left(\frac{1}{1+(2+d/r)^2} + \frac{1}{(1+d/r)^2} - \frac{1}{1+(1+d/r)^2} - \frac{1}{(2+d/r)^2} \right). \quad (4.40)$$

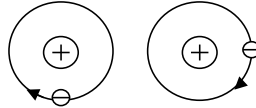


Рис. 4.21

$$F_{e_1 e_2} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0[r^2 + (3r+d)^2]}, \quad (4.41)$$

$$F_{p_1 p_2} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(2r+d)^2}, \quad (4.42)$$

$$F_{e_1 p_2} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0[r^2 + (2r+d)^2]}, \quad (4.43)$$

$$F_{e_2 p_1} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(3r+d)^2}, \quad (4.44)$$

$$F_{\text{э}} = \Sigma F_{\text{э}_i} = F_{e_1 p_2} + F_{e_2 p_1} - F_{e_1 e_2} - F_{p_1 p_2} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \times$$

$$\times \left(\frac{1}{1+(2+d/r)^2} + \frac{1}{(3+d/r)^2} - \frac{1}{1+(3+d/r)^2} - \frac{1}{(2+d/r)^2} \right). \quad (4.45)$$

Результаты расчетов взаимодействия атомов водорода при возможном образовании молекулы H_2 для случаев приближения атомов представлены в таблицах 4.8, 4.10, а для условия перекрытия электронных оболочек атомов при образовании молекулы в таблицах 4.9, 4.11. Как видно, при условии начального сдвига по фазе расположения электронов на орбитах 0° как при приближении атомов, так и при перекрытии их электронными оболочками происходит чередование четвертьпериодов, в которых поочередно проявляются результирующие силы притяжения и отталкивания, приводящие к гармоническим колебаниям атомов в молекуле около положения равновесия, но в целом за полный пе-

риод обращения электронов по своим орбитам превалируют силы притяжения, под воздействием которых может сформироваться молекула H_2 .

Таблица 4.8

Синхронное движение в одном направлении электронов атомов водорода на двух орбитах, расположенных на одной линии, и с начальным сдвигом по фазе 0°

Расстояние между орбитами электронов $\left(\frac{d}{r}\right)$	ΣF_{yi} в момент времени				Среднее значение $F_y = \frac{\Sigma \Sigma F_{yi}}{4}$ за период обращения электронов
	$t = 0$	$t = \frac{1}{4} T$	$t = \frac{1}{2} T$	$t = \frac{3}{4} T$	
0,1	$1,096 \cdot 10^{-8}$	$-1,928 \cdot 10^{-9}$	$1,096 \cdot 10^{-8}$	$-1,928 \cdot 10^{-9}$	$4,516 \cdot 10^{-9}$
0,2	$8,713 \cdot 10^{-9}$	$-1,626 \cdot 10^{-9}$	$8,713 \cdot 10^{-9}$	$-1,626 \cdot 10^{-9}$	$3,543 \cdot 10^{-9}$
0,3	$7,025 \cdot 10^{-9}$	$-1,384 \cdot 10^{-9}$	$7,025 \cdot 10^{-9}$	$-1,384 \cdot 10^{-9}$	$2,820 \cdot 10^{-9}$
0,4	$5,734 \cdot 10^{-9}$	$-1,183 \cdot 10^{-9}$	$5,734 \cdot 10^{-9}$	$-1,183 \cdot 10^{-9}$	$2,275 \cdot 10^{-9}$
0,6	$3,953 \cdot 10^{-9}$	$-8,776 \cdot 10^{-10}$	$3,953 \cdot 10^{-9}$	$-8,776 \cdot 10^{-10}$	$1,538 \cdot 10^{-9}$
0,8	$2,822 \cdot 10^{-9}$	$-6,647 \cdot 10^{-10}$	$2,822 \cdot 10^{-9}$	$-6,647 \cdot 10^{-10}$	$1,078 \cdot 10^{-9}$
1	$2,076 \cdot 10^{-9}$	$-5,111 \cdot 10^{-10}$	$2,076 \cdot 10^{-9}$	$-5,111 \cdot 10^{-10}$	$7,824 \cdot 10^{-10}$
1,5	$1,060 \cdot 10^{-9}$	$-2,829 \cdot 10^{-10}$	$1,060 \cdot 10^{-9}$	$-2,829 \cdot 10^{-10}$	$3,885 \cdot 10^{-10}$
2	$6,003 \cdot 10^{-10}$	$-1,702 \cdot 10^{-10}$	$6,003 \cdot 10^{-10}$	$-1,702 \cdot 10^{-10}$	$2,150 \cdot 10^{-10}$
3	$2,362 \cdot 10^{-10}$	$-7,13 \cdot 10^{-11}$	$2,362 \cdot 10^{-10}$	$-7,13 \cdot 10^{-11}$	$8,245 \cdot 10^{-11}$
4	$1,114 \cdot 10^{-10}$	$-3,462 \cdot 10^{-11}$	$1,114 \cdot 10^{-10}$	$-3,462 \cdot 10^{-11}$	$3,839 \cdot 10^{-11}$
5	$5,877 \cdot 10^{-11}$	$-1,877 \cdot 10^{-11}$	$5,877 \cdot 10^{-11}$	$-1,877 \cdot 10^{-11}$	$2,000 \cdot 10^{-11}$
10	$6,697 \cdot 10^{-12}$	$-2,201 \cdot 10^{-12}$	$6,697 \cdot 10^{-12}$	$-2,201 \cdot 10^{-12}$	$2,248 \cdot 10^{-12}$
20	$4,6 \cdot 10^{-13}$	$-1,88 \cdot 10^{-13}$	$4,6 \cdot 10^{-13}$	$-1,88 \cdot 10^{-13}$	$1,36 \cdot 10^{-13}$

Таблица 4.9

Синхронное движение в одном направлении электронов атомов водорода на двух орбитах, расположенных на одной линии в условиях перекрытия площадей орбит. Начальный сдвиг по фазе 0°

Расстояние между орбитами электронов $\left(-\frac{d}{r}\right)$	ΣF_{yi} в момент времени				Среднее значение $F_y = \frac{\Sigma \Sigma F_{yi}}{4}$ за период обращения электронов
	$t = 0$	$t = \frac{1}{4} T$	$t = \frac{1}{2} T$	$t = \frac{3}{4} T$	
0	$1,405 \cdot 10^{-8}$	$-2,3 \cdot 10^{-9}$	$1,405 \cdot 10^{-8}$	$-2,3 \cdot 10^{-9}$	$5,875 \cdot 10^{-9}$
-0,1	$1,838 \cdot 10^{-8}$	$-2,764 \cdot 10^{-9}$	$1,838 \cdot 10^{-8}$	$-2,764 \cdot 10^{-9}$	$7,808 \cdot 10^{-9}$
-0,2	$2,467 \cdot 10^{-8}$	$-3,348 \cdot 10^{-9}$	$2,467 \cdot 10^{-8}$	$-3,348 \cdot 10^{-9}$	$1,066 \cdot 10^{-8}$
-0,3	$3,417 \cdot 10^{-8}$	$-4,091 \cdot 10^{-9}$	$3,417 \cdot 10^{-8}$	$-4,091 \cdot 10^{-9}$	$1,503 \cdot 10^{-8}$
-0,4	$4,932 \cdot 10^{-8}$	$-5,047 \cdot 10^{-9}$	$4,932 \cdot 10^{-8}$	$-5,047 \cdot 10^{-9}$	$2,213 \cdot 10^{-8}$
-0,5	$7,523 \cdot 10^{-8}$	$-6,290 \cdot 10^{-9}$	$7,523 \cdot 10^{-8}$	$-6,290 \cdot 10^{-9}$	$3,447 \cdot 10^{-8}$
-0,6	$1,243 \cdot 10^{-7}$	$-7,928 \cdot 10^{-9}$	$1,243 \cdot 10^{-7}$	$-7,928 \cdot 10^{-9}$	$5,818 \cdot 10^{-8}$
-0,7	$2,327 \cdot 10^{-7}$	$-1,012 \cdot 10^{-8}$	$2,327 \cdot 10^{-7}$	$-1,012 \cdot 10^{-8}$	$1,112 \cdot 10^{-7}$
-0,8	$5,478 \cdot 10^{-7}$	$-1,309 \cdot 10^{-8}$	$5,478 \cdot 10^{-7}$	$-1,309 \cdot 10^{-8}$	$1,759 \cdot 10^{-7}$
-0,9	$2,267 \cdot 10^{-6}$	$-1,720 \cdot 10^{-8}$	$2,267 \cdot 10^{-6}$	$-1,720 \cdot 10^{-8}$	$1,125 \cdot 10^{-6}$
-0,95	$9,164 \cdot 10^{-6}$	$-1,984 \cdot 10^{-8}$	$9,164 \cdot 10^{-6}$	$-1,984 \cdot 10^{-8}$	$4,54 \cdot 10^{-6}$

При начальном сдвиге по фазе расположения электронов на орбитах 90° отмечается чередование не четверть-, а полупериодов, в которых поочередно проявляются результирующие силы притяжения и отталкивания, приводящие также к гармоническому колебанию атомов в молекуле около положения равновесия, так как в целом за период обращения электронов превалируют силы притяжения, но частота колебания атомов в молекуле уменьшается вдвое по сравнению с ситуацией начального сдвига по фазе 0° .

Таблица 4.10

Синхронное движение в одном направлении электронов атомов водорода на двух орбитах, расположенных на одной линии и с начальным сдвигом по фазе 90°

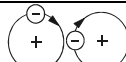
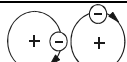
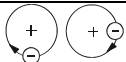
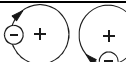
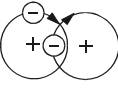
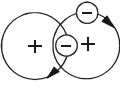
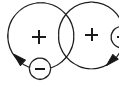
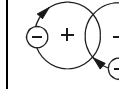
Расстояние между орбитами электронов $\left(\frac{d}{r}\right)$	$\Sigma F_{\pm i}$ в момент времени				Среднее значение $F_{\pm} = \frac{\Sigma \Sigma F_{\pm i}}{4}$ за период обращения электронов
	$t = 0$	$t = \frac{1}{4} T$	$t = \frac{1}{2} T$	$t = \frac{3}{4} T$	
0,1	$7,635 \cdot 10^{-9}$	$7,635 \cdot 10^{-9}$	$-7,407 \cdot 10^{-10}$	$-7,407 \cdot 10^{-10}$	$3,447 \cdot 10^{-9}$
0,2	$5,731 \cdot 10^{-9}$	$5,731 \cdot 10^{-9}$	$-6,525 \cdot 10^{-10}$	$-6,525 \cdot 10^{-10}$	$2,539 \cdot 10^{-9}$
0,3	$4,369 \cdot 10^{-9}$	$4,369 \cdot 10^{-9}$	$-5,160 \cdot 10^{-10}$	$-5,160 \cdot 10^{-10}$	$1,926 \cdot 10^{-9}$
0,4	$3,399 \cdot 10^{-9}$	$3,399 \cdot 10^{-9}$	$-4,328 \cdot 10^{-10}$	$-4,328 \cdot 10^{-10}$	$1,583 \cdot 10^{-9}$
0,6	$2,085 \cdot 10^{-9}$	$2,085 \cdot 10^{-9}$	$-3,128 \cdot 10^{-10}$	$-3,128 \cdot 10^{-10}$	$8,861 \cdot 10^{-10}$
0,8	$1,343 \cdot 10^{-9}$	$1,343 \cdot 10^{-9}$	$-2,302 \cdot 10^{-10}$	$-2,302 \cdot 10^{-10}$	$5,564 \cdot 10^{-10}$
1	$8,947 \cdot 10^{-10}$	$8,947 \cdot 10^{-10}$	$-1,709 \cdot 10^{-10}$	$-1,709 \cdot 10^{-10}$	$3,619 \cdot 10^{-10}$
1,5	$3,666 \cdot 10^{-10}$	$3,666 \cdot 10^{-10}$	$-9,844 \cdot 10^{-11}$	$-9,844 \cdot 10^{-11}$	$1,34 \cdot 10^{-10}$
2	$1,707 \cdot 10^{-10}$	$1,707 \cdot 10^{-10}$	$-4,922 \cdot 10^{-11}$	$-4,922 \cdot 10^{-11}$	$6,074 \cdot 10^{-11}$
3	$4,922 \cdot 10^{-11}$	$4,922 \cdot 10^{-11}$	$-1,794 \cdot 10^{-11}$	$-1,794 \cdot 10^{-11}$	$1,564 \cdot 10^{-11}$
4	$1,822 \cdot 10^{-11}$	$1,822 \cdot 10^{-11}$	$-8,05 \cdot 10^{-12}$	$-8,05 \cdot 10^{-12}$	$5,085 \cdot 10^{-12}$
5	$7,633 \cdot 10^{-12}$	$7,633 \cdot 10^{-12}$	$-4,326 \cdot 10^{-12}$	$-4,326 \cdot 10^{-12}$	$1,653 \cdot 10^{-12}$
10	$3,58 \cdot 10^{-13}$	$3,58 \cdot 10^{-13}$	$-3,08 \cdot 10^{-13}$	$-3,08 \cdot 10^{-13}$	$2,5 \cdot 10^{-14}$
20	$3,9 \cdot 10^{-14}$	$3,9 \cdot 10^{-14}$	$-1,6 \cdot 10^{-14}$	$-1,6 \cdot 10^{-14}$	$1,15 \cdot 10^{-14}$
					

Таблица 4.11

Синхронное движение в одном направлении электронов атомов водорода на двух орбитах, расположенных на одной линии в условиях перекрывания площадей орбит. Начальный сдвиг по фазе 90°

Расстояние между орбитами электронов $\left(-\frac{d}{r}\right)$	$\Sigma F_{\pm i}$ в момент времени				Среднее значение $F_{\pm} = \frac{\Sigma \Sigma F_{\pm i}}{4}$ за период обращения электронов
	$t=0$	$t = \frac{1}{4} T$	$t = \frac{1}{2} T$	$t = \frac{3}{4} T$	
0	$1,035 \cdot 10^{-8}$	$1,035 \cdot 10^{-8}$	$-8,945 \cdot 10^{-10}$	$-8,945 \cdot 10^{-10}$	$4,727 \cdot 10^{-9}$
-0,1	$1,715 \cdot 10^{-8}$	$1,715 \cdot 10^{-8}$	$-1,091 \cdot 10^{-9}$	$-1,091 \cdot 10^{-9}$	$8,029 \cdot 10^{-9}$
-0,2	$2,024 \cdot 10^{-8}$	$2,024 \cdot 10^{-8}$	$-1,342 \cdot 10^{-9}$	$-1,342 \cdot 10^{-9}$	$9,454 \cdot 10^{-9}$
-0,3	$2,946 \cdot 10^{-8}$	$2,946 \cdot 10^{-8}$	$-1,790 \cdot 10^{-9}$	$-1,790 \cdot 10^{-9}$	$1,380 \cdot 10^{-8}$

Расстояние между орбитами электронов $\left(-\frac{d}{r}\right)$	$\Sigma F_{\alpha i}$ в момент времени				Среднее значение $F_{\alpha} = \frac{\Sigma \Sigma F_{\alpha i}}{4}$ за период обращения электронов
	$t=0$	$t=\frac{1}{4}T$	$t=\frac{1}{2}T$	$t=\frac{3}{4}T$	
-0,4	$4,445 \cdot 10^{-8}$	$4,445 \cdot 10^{-8}$	$-2,085 \cdot 10^{-9}$	$-2,085 \cdot 10^{-9}$	$2,118 \cdot 10^{-8}$
-0,5	$7,045 \cdot 10^{-8}$	$7,045 \cdot 10^{-8}$	$-2,638 \cdot 10^{-9}$	$-2,638 \cdot 10^{-9}$	$3,390 \cdot 10^{-8}$
-0,6	$1,199 \cdot 10^{-7}$	$1,199 \cdot 10^{-7}$	$-3,374 \cdot 10^{-9}$	$-3,374 \cdot 10^{-9}$	$5,826 \cdot 10^{-8}$
-0,7	$2,294 \cdot 10^{-7}$	$2,294 \cdot 10^{-7}$	$-1,073 \cdot 10^{-8}$	$-1,073 \cdot 10^{-8}$	$1,093 \cdot 10^{-7}$
-0,8	$5,463 \cdot 10^{-7}$	$5,463 \cdot 10^{-7}$	$-5,732 \cdot 10^{-9}$	$-5,732 \cdot 10^{-9}$	$2,702 \cdot 10^{-7}$
-0,9	$2,268 \cdot 10^{-6}$	$2,268 \cdot 10^{-6}$	$-7,719 \cdot 10^{-9}$	$-7,719 \cdot 10^{-9}$	$1,130 \cdot 10^{-6}$
-0,95	$9,167 \cdot 10^{-6}$	$9,167 \cdot 10^{-6}$	$-8,870 \cdot 10^{-9}$	$-8,870 \cdot 10^{-9}$	$4,579 \cdot 10^{-6}$
					

В случае синхронного движения в одном направлении электронов на двух орбитах, расположенных на одной линии и с начальным сдвигом по фазе 180° расчет сил электрического взаимодействия атомов водорода в ситуации рис. 4.22 проводился по формулам (4.46)-(4.50), в ситуации рис. 4.23 по формулам (4.51)-(4.55) и в ситуации рис. 4.24 по формулам (4.56)-(4.60).

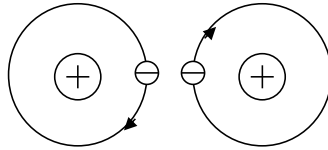


Рис. 4.22

$$F_{p_1 p_2} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(2r+d)^2}, \quad (4.46)$$

$$F_{e_1 e_2} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 d^2}, \quad (4.47)$$

$$F_{e_1 p_2} = +\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(r+d)^2}, \quad (4.48)$$

$$F_{e_2 p_1} = +\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(r+d)^2}, \quad (4.49)$$

$$\begin{aligned}
F_3 = \Sigma F_{3_i} &= F_{e_1 p_2} + F_{e_2 p_1} - F_{e_1 e_2} - F_{p_1 p_2} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \times \\
&\times \left(\frac{2}{(r+d)^2} - \frac{1}{d^2} - \frac{1}{(2r+d)^2} \right) = \\
&= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \left(\frac{2}{(1+d/r)^2} - \frac{1}{(d/r)^2} - \frac{1}{(2+d/r)^2} \right).
\end{aligned} \tag{4.50}$$

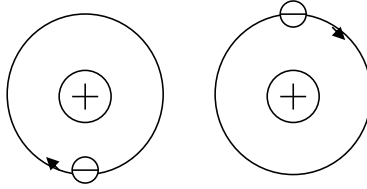


Рис. 4.23

$$F_{p_1 p_2} = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (2r+d)^2}, \tag{4.51}$$

$$F_{e_1 e_2} = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 [4r^2 + (2r+d)^2]}, \tag{4.52}$$

$$F_{e_1 p_2} = + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 [r^2 + (2r+d)^2]}, \tag{4.53}$$

$$F_{e_2 p_1} = + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 [r^2 + (2r+d)^2]}, \tag{4.54}$$

$$\begin{aligned}
F_3 = \Sigma F_{3_i} &= F_{e_1 p_2} + F_{e_2 p_1} - F_{e_1 e_2} - F_{p_1 p_2} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \times \\
&\times \left(\frac{2}{1+(2+d/r)^2} - \frac{1}{4+(2+d/r)^2} - \frac{1}{(2+d/r)^2} \right).
\end{aligned} \tag{4.55}$$

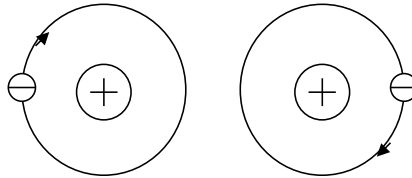


Рис. 4.24

$$F_{p_1 p_2} = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (2r+d)^2}, \tag{4.56}$$

$$F_{e_1 e_2} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(4r+d)^2}, \quad (4.57)$$

$$F_{e_1 p_2} = +\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(3r+d)^2}, \quad (4.58)$$

$$F_{e_2 p_1} = +\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(3r+d)^2}, \quad (4.59)$$

$$F_{\text{э}} = \Sigma F_{\text{э}_i} = F_{e_1 p_2} + F_{e_2 p_1} - F_{e_1 e_2} - F_{p_1 p_2} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \times$$

$$\times \left(\frac{2}{(3+d/r)^2} - \frac{1}{(2+d/r)^2} - \frac{1}{(4+d/r)^2} \right). \quad (4.60)$$

В условиях перекрытия орбит электронов (рис. 4.25) расчетные формулы (4.46)-(4.50) несколько изменяются, так как расстояние между атомами становится величиной отрицательной, а силы отталкивания между электронами выполняют роль сил притяжения между атомами. В этих условиях расчет сил проводился по формулам (4.61)-(4.65).

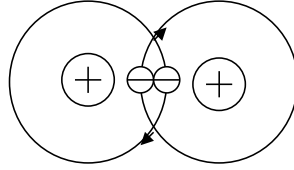


Рис. 4.25

$$F_{e_1 e_2} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(-d)^2}, \quad (4.61)$$

$$F_{p_1 p_2} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(2r-d)^2}, \quad (4.62)$$

$$F_{e_1 p_2} = +\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(r-d)^2}, \quad (4.63)$$

$$F_{e_2 p_1} = +\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(r-d)^2}, \quad (4.64)$$

$$F_{\text{э}} = \Sigma F_{\text{э}_i} = F_{e_1 p_2} + F_{e_2 p_1} - F_{e_1 e_2} - F_{p_1 p_2} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \times$$

$$\times \left(\frac{2}{(1-d/r)^2} - \frac{1}{(d/r)^2} - \frac{1}{(2-d/r)^2} \right). \quad (4.65)$$

Результаты расчетов представлены в таблицах 4.12, 4.13. Как видно из таблицы 4.12, при приближении атомов друг к другу их взаимодействие проявляется гармоническим колебательным процессом за счет четвертьпериодного че-

электрических сил взаимодействия атомов за полный период обращения электронов вокруг ядра характеризуется превалированием сил отталкивания над силами притяжения, и максимальное значение силы отталкивания, стремящейся к ∞ характерно при полном сближении атомов, т. е. при $d/r \rightarrow 0$ (таблица 4.13).

Если бы создались благоприятные предпосылки перекрытия орбит электронов двух атомов в условиях начального сдвига по фазе 180° , то результирующая сила электрического взаимодействия атомов оказалась бы силой притяжения, что способствовало бы формированию молекулы водорода. Однако преодолеть барьер бесконечно большой величины силы отталкивания при сближении атомов весьма маловероятно, поэтому весьма маловероятно образование молекулы водорода из двух атомов, в которых движение электронов по орбитам происходит синхронно, но с начальным сдвигом по фазе 180° . Из этого можно сделать вывод, что общепринятый способ формирования молекул на основе квантово-механических представлений за счет перекрытия поверхностями с максимальной вероятностью электронной плотности физически не может осуществиться и не отражает реального существа вопроса формирования молекул.

Таблица 4.12

Синхронное движение в одном направлении электронов атомов водорода на двух орбитах, расположенных на одной линии и с начальным сдвигом по фазе 180°

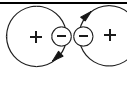
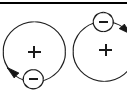
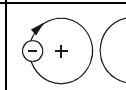
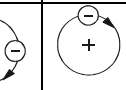
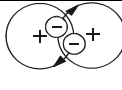
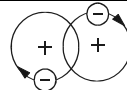
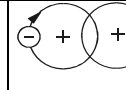
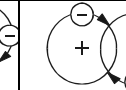
Расстояние между орбитами электронов $\left(\frac{d}{r}\right)$	$\Sigma F_{\pm i}$ в момент времени				Среднее значение $F_3 = \frac{\Sigma F_{\pm i}}{4}$ за период обращения электронов
	$t = 0$	$t = \frac{1}{4} T$	$t = \frac{1}{2} T$	$t = \frac{3}{4} T$	
0,1	$-2,267 \cdot 10^{-6}$	$5,53 \cdot 10^{-10}$	$-1,796 \cdot 10^{-9}$	$5,53 \cdot 10^{-10}$	$-5,67 \cdot 10^{-7}$
0,2	$-5,478 \cdot 10^{-7}$	$5,221 \cdot 10^{-10}$	$-1,563 \cdot 10^{-9}$	$5,221 \cdot 10^{-10}$	$-1,370 \cdot 10^{-7}$
0,3	$-2,327 \cdot 10^{-7}$	$4,89 \cdot 10^{-10}$	$-1,366 \cdot 10^{-9}$	$4,89 \cdot 10^{-10}$	$-5,827 \cdot 10^{-8}$
0,4	$-1,243 \cdot 10^{-7}$	$4,528 \cdot 10^{-10}$	$-1,202 \cdot 10^{-9}$	$4,528 \cdot 10^{-10}$	$-3,115 \cdot 10^{-8}$
0,6	$-4,932 \cdot 10^{-8}$	$3,88 \cdot 10^{-10}$	$-9,402 \cdot 10^{-10}$	$3,88 \cdot 10^{-10}$	$-1,237 \cdot 10^{-8}$
0,8	$-2,467 \cdot 10^{-8}$	$3,208 \cdot 10^{-10}$	$-7,452 \cdot 10^{-10}$	$3,208 \cdot 10^{-10}$	$-6,192 \cdot 10^{-9}$
1	$-1,405 \cdot 10^{-8}$	$2,757 \cdot 10^{-10}$	$-6,003 \cdot 10^{-10}$	$2,757 \cdot 10^{-10}$	$-3,522 \cdot 10^{-9}$
1,5	$-4,738 \cdot 10^{-9}$	$1,768 \cdot 10^{-10}$	$-3,661 \cdot 10^{-10}$	$1,768 \cdot 10^{-10}$	$-1,186 \cdot 10^{-9}$
2	$-2,077 \cdot 10^{-9}$	$1,173 \cdot 10^{-10}$	$-2,364 \cdot 10^{-10}$	$1,173 \cdot 10^{-10}$	$-5,197 \cdot 10^{-10}$
3	$-6,003 \cdot 10^{-10}$	$5,566 \cdot 10^{-11}$	$-1,117 \cdot 10^{-10}$	$5,566 \cdot 10^{-11}$	$-1,502 \cdot 10^{-10}$
4	$-2,364 \cdot 10^{-10}$	$2,811 \cdot 10^{-11}$	$-5,991 \cdot 10^{-11}$	$2,811 \cdot 10^{-11}$	$-6,002 \cdot 10^{-11}$
5	$-1,116 \cdot 10^{-10}$	$1,683 \cdot 10^{-11}$	$-3,335 \cdot 10^{-11}$	$1,683 \cdot 10^{-11}$	$-8,984 \cdot 10^{-11}$
10	$-9,531 \cdot 10^{-12}$	$2,198 \cdot 10^{-12}$	$-4,876 \cdot 10^{-12}$	$2,198 \cdot 10^{-12}$	$-2,502 \cdot 10^{-11}$
20	$-7,15 \cdot 10^{-13}$	$8,9 \cdot 10^{-14}$	$-5,08 \cdot 10^{-13}$	$8,9 \cdot 10^{-14}$	$-2,612 \cdot 10^{-13}$
					

Таблица 4.13

Синхронное движение в одном направлении электронов атомов водорода на двух орбитах, расположенных на одной линии в условиях перекрытия площадей орбит. Начальный сдвиг по фазе 180°

Расстояние между орбитами электронов $\left(-\frac{d}{r}\right)$	$\Sigma F_{\text{э}i}$ в момент времени				Среднее значение $F_{\text{э}} = \frac{\Sigma \Sigma F_{\text{э}i}}{4}$ за период обращения электронов
	$t=0$ $t=T$	$t=\frac{1}{4}T$	$t=\frac{1}{2}T$	$t=\frac{3}{4}T$	
0	$-\infty$	$5,75 \cdot 10^{-10}$	$-2,076 \cdot 10^{-9}$	$5,75 \cdot 10^{-10}$	$-\infty$
-0,1	$2,350 \cdot 10^{-6}$	$5,847 \cdot 10^{-10}$	$-2,413 \cdot 10^{-9}$	$5,847 \cdot 10^{-10}$	$5,872 \cdot 10^{-7}$
-0,2	$6,398 \cdot 10^{-7}$	$5,735 \cdot 10^{-10}$	$-2,823 \cdot 10^{-9}$	$5,735 \cdot 10^{-10}$	$1,595 \cdot 10^{-7}$
-0,3	$3,414 \cdot 10^{-7}$	$5,285 \cdot 10^{-10}$	$-3,328 \cdot 10^{-9}$	$5,285 \cdot 10^{-10}$	$8,478 \cdot 10^{-8}$
-0,4	$2,625 \cdot 10^{-7}$	$4,308 \cdot 10^{-10}$	$-3,954 \cdot 10^{-9}$	$4,308 \cdot 10^{-10}$	$6,485 \cdot 10^{-8}$
-0,5	$2,658 \cdot 10^{-7}$	$2,516 \cdot 10^{-10}$	$-4,739 \cdot 10^{-9}$	$2,516 \cdot 10^{-10}$	$6,539 \cdot 10^{-8}$
-0,6	$3,396 \cdot 10^{-7}$	$-5,322 \cdot 10^{-11}$	$-5,738 \cdot 10^{-9}$	$-5,322 \cdot 10^{-11}$	$8,344 \cdot 10^{-8}$
-0,7	$5,444 \cdot 10^{-7}$	$-5,512 \cdot 10^{-10}$	$-7,025 \cdot 10^{-9}$	$-5,512 \cdot 10^{-10}$	$1,340 \cdot 10^{-7}$
-0,8	$1,169 \cdot 10^{-6}$	$-1,347 \cdot 10^{-9}$	$-8,714 \cdot 10^{-9}$	$-1,347 \cdot 10^{-9}$	$2,893 \cdot 10^{-7}$
-0,9	$4,609 \cdot 10^{-6}$	$-2,608 \cdot 10^{-9}$	$-1,097 \cdot 10^{-8}$	$-2,608 \cdot 10^{-9}$	$1,148 \cdot 10^{-6}$
-0,95	$9,204 \cdot 10^{-6}$	$-3,490 \cdot 10^{-9}$	$-1,239 \cdot 10^{-8}$	$-3,490 \cdot 10^{-9}$	$2,296 \cdot 10^{-6}$
					

Для условий синхронного движения, но в разных направлениях электронов на двух орбитах, расположенных на одной линии и с различным начальным сдвигом по фазе (0° , 90° , 180°) для разных ситуаций используются представленные выше формулы, а результаты расчетов отражены в таблицах 4.14-4.17. Из анализа таблиц следует, что при начальном сдвиге по фазе 0° движения электронов по орбитам в противоположные стороны и сближении электронов во всех четвертьпериодах отмечается результирующая сила притяжения (табл. 4.14). В условиях же перекрытия орбит электронов в отдельные четвертьпериоды возможны проявления сил отталкивания, хотя результирующие силы за полный оборот вращения электронов являются только силами притяжения (табл. 4.15).

При начальном сдвиге фаз вращения электронов 90° (табл. 4.16, 4.17) как в условиях сближения атомов, так и в условиях перекрытия их орбит по полпериода имеют место силы притяжения, а полпериода – силы отталкивания, но в целом, за весь период обращения электронов преобладают силы притяжения. Таким образом, ситуации приближения двух атомов водорода, орбиты вращения электронов которых расположены на одной линии и в условиях начального сдвига по фазе 0° и 90° , являются благоприятными для образования молекулы водорода.

Ситуация существенно изменяется при начальном сдвиге по фазе 180° (табл. 4.18, 4.19). При приближении двух атомов друг к другу и синхронном движении электронов в разных направлениях при начальном сдвиге по фазе 180° во всех четвертьпериодах обращения и в целом за весь период обращения

электронов отмечается проявление сил отталкивания (табл. 4.18), что препятствует образованию молекулы H_2 из двух атомов. При перекрытии орбит электронов один четвертьпериод обеспечивает общее притяжение (табл. 4.19), но создать такие условия нереально, так как при бесконечно близком приближении атомов друг к другу сила отталкивания возрастает до бесконечности.

Таблица 4.14

Синхронное движение в разных направлениях электронов атомов водорода на двух орбитах, расположенных на одной линии и с начальным сдвигом по фазе 0°

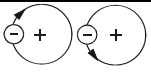
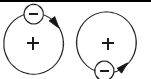
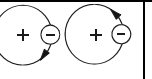
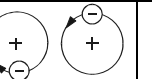
Расстояние между орбитами электронов $\left(\frac{d}{r}\right)$	$\Sigma F_{\pm i}$ в момент времени				Среднее значение $F_s = \frac{\Sigma \Sigma F_{\pm i}}{4}$ за период обращения электронов
	$t=0$	$t=\frac{1}{4}T$	$t=\frac{1}{2}T$	$t=\frac{3}{4}T$	
0,1	$1,096 \cdot 10^{-8}$	$5,53 \cdot 10^{-10}$	$1,096 \cdot 10^{-8}$	$5,53 \cdot 10^{-10}$	$5,756 \cdot 10^{-9}$
0,2	$8,713 \cdot 10^{-9}$	$5,221 \cdot 10^{-10}$	$8,713 \cdot 10^{-9}$	$5,221 \cdot 10^{-10}$	$4,617 \cdot 10^{-9}$
0,3	$7,025 \cdot 10^{-9}$	$4,89 \cdot 10^{-10}$	$7,025 \cdot 10^{-9}$	$4,89 \cdot 10^{-10}$	$3,757 \cdot 10^{-9}$
0,4	$5,734 \cdot 10^{-9}$	$4,528 \cdot 10^{-10}$	$5,734 \cdot 10^{-9}$	$4,528 \cdot 10^{-10}$	$3,093 \cdot 10^{-9}$
0,6	$3,953 \cdot 10^{-9}$	$3,88 \cdot 10^{-10}$	$3,953 \cdot 10^{-9}$	$3,88 \cdot 10^{-10}$	$2,17 \cdot 10^{-9}$
0,8	$2,822 \cdot 10^{-9}$	$3,208 \cdot 10^{-10}$	$2,822 \cdot 10^{-9}$	$3,208 \cdot 10^{-10}$	$1,571 \cdot 10^{-9}$
1	$2,076 \cdot 10^{-9}$	$2,757 \cdot 10^{-10}$	$2,076 \cdot 10^{-9}$	$2,757 \cdot 10^{-10}$	$1,176 \cdot 10^{-9}$
1,5	$1,060 \cdot 10^{-9}$	$1,786 \cdot 10^{-10}$	$1,060 \cdot 10^{-9}$	$1,768 \cdot 10^{-10}$	$6,193 \cdot 10^{-10}$
2	$6,003 \cdot 10^{-10}$	$1,173 \cdot 10^{-10}$	$6,003 \cdot 10^{-10}$	$1,173 \cdot 10^{-10}$	$3,588 \cdot 10^{-10}$
3	$2,362 \cdot 10^{-10}$	$5,566 \cdot 10^{-11}$	$2,362 \cdot 10^{-10}$	$5,566 \cdot 10^{-11}$	$1,459 \cdot 10^{-10}$
4	$1,114 \cdot 10^{-10}$	$2,811 \cdot 10^{-11}$	$1,114 \cdot 10^{-10}$	$2,811 \cdot 10^{-11}$	$6,975 \cdot 10^{-11}$
5	$5,877 \cdot 10^{-11}$	$1,683 \cdot 10^{-11}$	$5,877 \cdot 10^{-11}$	$1,683 \cdot 10^{-11}$	$3,78 \cdot 10^{-11}$
10	$6,697 \cdot 10^{-12}$	$2,198 \cdot 10^{-12}$	$6,697 \cdot 10^{-12}$	$2,198 \cdot 10^{-12}$	$4,447 \cdot 10^{-12}$
20	$4,6 \cdot 10^{-13}$	$8,9 \cdot 10^{-14}$	$4,6 \cdot 10^{-13}$	$8,9 \cdot 10^{-14}$	$2,745 \cdot 10^{-13}$
					

Таблица 4.15

Синхронное движение в разных направлениях электронов атомов водорода на двух орбитах, расположенных на одной линии в условиях перекрытия площадей орбит.

Начальный сдвиг по фазе 0°

Расстояние между орбитами электронов $\left(\frac{d}{r}\right)$	$\Sigma F_{\pm i}$ в момент времени				Среднее значение $F_s = \frac{\Sigma \Sigma F_{\pm i}}{4}$ за период обращения электронов
	$t=0$ $t=T$	$t=\frac{1}{4}T$	$t=\frac{1}{2}T$	$t=\frac{3}{4}T$	
0	$1,405 \cdot 10^{-8}$	$5,75 \cdot 10^{-10}$	$1,405 \cdot 10^{-8}$	$5,75 \cdot 10^{-10}$	$7,412 \cdot 10^{-9}$
-0,1	$1,838 \cdot 10^{-8}$	$5,847 \cdot 10^{-10}$	$1,838 \cdot 10^{-8}$	$5,847 \cdot 10^{-10}$	$9,482 \cdot 10^{-9}$
-0,2	$2,467 \cdot 10^{-8}$	$5,735 \cdot 10^{-10}$	$2,467 \cdot 10^{-8}$	$5,735 \cdot 10^{-10}$	$1,262 \cdot 10^{-8}$
-0,3	$3,417 \cdot 10^{-8}$	$5,285 \cdot 10^{-10}$	$3,417 \cdot 10^{-8}$	$5,285 \cdot 10^{-10}$	$1,735 \cdot 10^{-8}$
-0,4	$4,932 \cdot 10^{-8}$	$4,308 \cdot 10^{-10}$	$4,932 \cdot 10^{-8}$	$4,308 \cdot 10^{-10}$	$2,487 \cdot 10^{-8}$

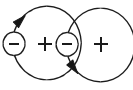
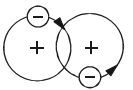
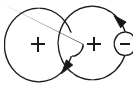
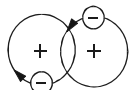
Расстояние между орби- тами элект- ронов $\left(-\frac{d}{r}\right)$	$\Sigma F_{\pm i}$ в момент времени				Среднее значение $F_{\pm} = \frac{\Sigma \Sigma F_{\pm i}}{4}$ за период обраще- ния электронов
	$t=0$ $t=T$	$t=\frac{1}{4}T$	$t=\frac{1}{2}T$	$t=\frac{3}{4}T$	
-0,5	$7,523 \cdot 10^{-8}$	$2,516 \cdot 10^{-10}$	$7,523 \cdot 10^{-8}$	$2,516 \cdot 10^{-10}$	$3,774 \cdot 10^{-8}$
-0,6	$1,243 \cdot 10^{-7}$	$-5,322 \cdot 10^{-11}$	$1,243 \cdot 10^{-7}$	$-5,322 \cdot 10^{-11}$	$6,212 \cdot 10^{-8}$
-0,7	$2,327 \cdot 10^{-7}$	$-5,512 \cdot 10^{-10}$	$2,327 \cdot 10^{-7}$	$-5,512 \cdot 10^{-10}$	$1,163 \cdot 10^{-7}$
-0,8	$5,478 \cdot 10^{-7}$	$-1,347 \cdot 10^{-9}$	$5,478 \cdot 10^{-7}$	$1,347 \cdot 10^{-9}$	$2,732 \cdot 10^{-7}$
-0,9	$2,267 \cdot 10^{-6}$	$-2,608 \cdot 10^{-9}$	$2,267 \cdot 10^{-6}$	$-2,608 \cdot 10^{-9}$	$1,132 \cdot 10^{-6}$
-0,95	$9,164 \cdot 10^{-6}$	$-3,490 \cdot 10^{-9}$	$9,164 \cdot 10^{-6}$	$-3,490 \cdot 10^{-9}$	$4,580 \cdot 10^{-6}$
					

Таблица 4.16

Синхронное движение в разных направлениях электронов атомов водорода на двух орбитах, расположенных на одной линии и с начальным сдвигом по фазе 90°

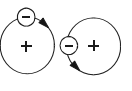
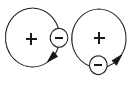
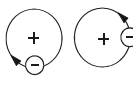
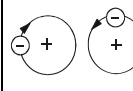
Расстояние между орби- тами элект- ронов $\left(\frac{d}{r}\right)$	$\Sigma F_{\pm i}$ в момент времени				Среднее значение $F_{\pm} = \frac{\Sigma \Sigma F_{\pm i}}{4}$ за пе- риод обращения электронов
	$t=0$ $t=T$	$t=\frac{1}{4}T$	$t=\frac{1}{2}T$	$t=\frac{3}{4}T$	
0,1	$7,635 \cdot 10^{-9}$	$7,635 \cdot 10^{-9}$	$-7,407 \cdot 10^{-10}$	$-7,407 \cdot 10^{-10}$	$3,447 \cdot 10^{-9}$
0,2	$5,731 \cdot 10^{-9}$	$5,731 \cdot 10^{-9}$	$-6,525 \cdot 10^{-10}$	$-6,525 \cdot 10^{-10}$	$2,539 \cdot 10^{-9}$
0,3	$4,369 \cdot 10^{-9}$	$4,369 \cdot 10^{-9}$	$-5,160 \cdot 10^{-10}$	$-5,160 \cdot 10^{-10}$	$1,926 \cdot 10^{-9}$
0,4	$3,399 \cdot 10^{-9}$	$3,399 \cdot 10^{-9}$	$-4,328 \cdot 10^{-10}$	$-4,328 \cdot 10^{-10}$	$1,483 \cdot 10^{-9}$
0,6	$2,085 \cdot 10^{-9}$	$2,085 \cdot 10^{-9}$	$-3,128 \cdot 10^{-10}$	$-3,128 \cdot 10^{-10}$	$8,861 \cdot 10^{-10}$
0,8	$1,343 \cdot 10^{-9}$	$1,343 \cdot 10^{-9}$	$-2,302 \cdot 10^{-10}$	$-2,302 \cdot 10^{-10}$	$5,564 \cdot 10^{-10}$
1	$8,947 \cdot 10^{-10}$	$8,947 \cdot 10^{-10}$	$-1,709 \cdot 10^{-10}$	$-1,709 \cdot 10^{-10}$	$3,619 \cdot 10^{-10}$
1,5	$3,666 \cdot 10^{-10}$	$3,666 \cdot 10^{-10}$	$-9,844 \cdot 10^{-11}$	$-9,844 \cdot 10^{-11}$	$1,341 \cdot 10^{-10}$
2	$1,707 \cdot 10^{-10}$	$1,707 \cdot 10^{-10}$	$-4,922 \cdot 10^{-11}$	$-4,922 \cdot 10^{-11}$	$6,074 \cdot 10^{-11}$
3	$4,922 \cdot 10^{-11}$	$4,922 \cdot 10^{-11}$	$-1,794 \cdot 10^{-11}$	$-1,794 \cdot 10^{-11}$	$1,527 \cdot 10^{-11}$
4	$1,822 \cdot 10^{-11}$	$1,822 \cdot 10^{-11}$	$-8,05 \cdot 10^{-12}$	$-8,05 \cdot 10^{-12}$	$5,085 \cdot 10^{-12}$
5	$7,663 \cdot 10^{-12}$	$7,663 \cdot 10^{-12}$	$-4,326 \cdot 10^{-12}$	$-4,326 \cdot 10^{-12}$	$1,653 \cdot 10^{-12}$
10	$3,58 \cdot 10^{-13}$	$3,58 \cdot 10^{-13}$	$-3,08 \cdot 10^{-13}$	$-3,08 \cdot 10^{-13}$	$2,5 \cdot 10^{-14}$
20	$3,9 \cdot 10^{-14}$	$3,9 \cdot 10^{-14}$	$-1,6 \cdot 10^{-14}$	$-1,6 \cdot 10^{-14}$	$1,15 \cdot 10^{-14}$
					

Таблица 4.17

Синхронное движение в разных направлениях электронов атомов водорода на двух орбитах, расположенных на одной линии в условиях перекрытия площадей орбит. Начальный сдвиг по фазе 90°

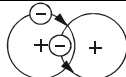
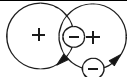
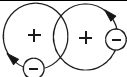
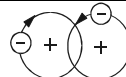
Расстояние между орбитами электронов $\left(-\frac{d}{r}\right)$	ΣF_{zi} в момент времени				Среднее значение $F_z = \frac{\Sigma \Sigma F_{zi}}{4}$ за период обращения электронов
	$t=0$ $t=T$	$t=\frac{1}{4}T$	$t=\frac{1}{2}T$	$t=\frac{3}{4}T$	
0	$1,035 \cdot 10^{-8}$	$1,035 \cdot 10^{-8}$	$-8,945 \cdot 10^{-10}$	$-8,945 \cdot 10^{-10}$	$4,724 \cdot 10^{-9}$
-0,1	$1,715 \cdot 10^{-8}$	$1,715 \cdot 10^{-8}$	$-1,091 \cdot 10^{-9}$	$-1,091 \cdot 10^{-9}$	$8,029 \cdot 10^{-9}$
-0,2	$2,024 \cdot 10^{-8}$	$2,024 \cdot 10^{-8}$	$-1,342 \cdot 10^{-9}$	$-1,342 \cdot 10^{-9}$	$9,454 \cdot 10^{-9}$
-0,3	$2,946 \cdot 10^{-8}$	$2,946 \cdot 10^{-8}$	$-1,790 \cdot 10^{-9}$	$-1,790 \cdot 10^{-9}$	$1,380 \cdot 10^{-8}$
-0,4	$4,445 \cdot 10^{-8}$	$4,445 \cdot 10^{-8}$	$-2,085 \cdot 10^{-9}$	$-2,085 \cdot 10^{-9}$	$2,118 \cdot 10^{-8}$
-0,5	$7,045 \cdot 10^{-8}$	$7,045 \cdot 10^{-8}$	$-2,638 \cdot 10^{-9}$	$-2,638 \cdot 10^{-9}$	$3,390 \cdot 10^{-8}$
-0,6	$1,199 \cdot 10^{-7}$	$1,199 \cdot 10^{-7}$	$-3,374 \cdot 10^{-9}$	$-3,374 \cdot 10^{-9}$	$5,826 \cdot 10^{-8}$
-0,7	$2,294 \cdot 10^{-7}$	$2,294 \cdot 10^{-7}$	$-1,073 \cdot 10^{-8}$	$-1,073 \cdot 10^{-8}$	$1,093 \cdot 10^{-7}$
-0,8	$5,463 \cdot 10^{-7}$	$5,463 \cdot 10^{-7}$	$-5,732 \cdot 10^{-9}$	$-5,732 \cdot 10^{-9}$	$2,702 \cdot 10^{-7}$
-0,9	$2,268 \cdot 10^{-6}$	$2,268 \cdot 10^{-6}$	$-7,719 \cdot 10^{-9}$	$-7,719 \cdot 10^{-9}$	$1,130 \cdot 10^{-6}$
-0,95	$9,167 \cdot 10^{-6}$	$9,167 \cdot 10^{-6}$	$-8,870 \cdot 10^{-9}$	$-8,870 \cdot 10^{-9}$	$4,579 \cdot 10^{-6}$
					

Таблица 4.18

Синхронное движение в разных направлениях электронов атомов водорода на двух орбитах, расположенных на одной линии и с начальным сдвигом по фазе 180°



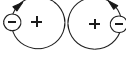
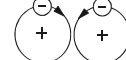
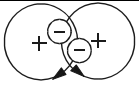
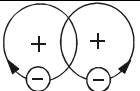
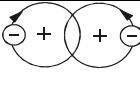
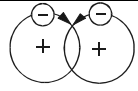
Расстояние между орбитами электронов $\left(\frac{d}{r}\right)$	ΣF_{zi} в момент времени				Среднее значение $F_z = \frac{\Sigma \Sigma F_{zi}}{4}$ за период обращения электронов
	$t=0$ $t=T$	$t=\frac{1}{4}T$	$t=\frac{1}{2}T$	$t=\frac{3}{4}T$	
0,1	$-2,267 \cdot 10^{-6}$	$-1,928 \cdot 10^{-9}$	$-1,796 \cdot 10^{-9}$	$-1,928 \cdot 10^{-9}$	$-5,682 \cdot 10^{-7}$
0,2	$-5,478 \cdot 10^{-7}$	$-1,626 \cdot 10^{-9}$	$-1,563 \cdot 10^{-9}$	$-1,626 \cdot 10^{-9}$	$-1,381 \cdot 10^{-7}$
0,3	$-2,327 \cdot 10^{-7}$	$-1,384 \cdot 10^{-9}$	$-1,366 \cdot 10^{-9}$	$-1,384 \cdot 10^{-9}$	$-5,92 \cdot 10^{-8}$
0,4	$-1,243 \cdot 10^{-7}$	$-1,183 \cdot 10^{-9}$	$-1,202 \cdot 10^{-9}$	$-1,183 \cdot 10^{-9}$	$-3,197 \cdot 10^{-8}$
0,6	$-4,932 \cdot 10^{-8}$	$-8,776 \cdot 10^{-10}$	$-9,402 \cdot 10^{-10}$	$-8,776 \cdot 10^{-10}$	$-1,300 \cdot 10^{-8}$
0,8	$-2,467 \cdot 10^{-8}$	$-6,647 \cdot 10^{-10}$	$-7,452 \cdot 10^{-10}$	$-6,647 \cdot 10^{-10}$	$-6,686 \cdot 10^{-9}$
1	$-1,405 \cdot 10^{-8}$	$-5,111 \cdot 10^{-10}$	$-6,003 \cdot 10^{-10}$	$-5,111 \cdot 10^{-10}$	$-3,918 \cdot 10^{-9}$
1,5	$-4,738 \cdot 10^{-9}$	$-2,829 \cdot 10^{-10}$	$-3,661 \cdot 10^{-10}$	$-2,829 \cdot 10^{-10}$	$-1,417 \cdot 10^{-9}$
2	$-2,077 \cdot 10^{-9}$	$-1,702 \cdot 10^{-10}$	$-2,364 \cdot 10^{-10}$	$-1,702 \cdot 10^{-10}$	$-6,634 \cdot 10^{-10}$
3	$-6,003 \cdot 10^{-10}$	$-7,13 \cdot 10^{-11}$	$-1,117 \cdot 10^{-10}$	$-7,13 \cdot 10^{-11}$	$-1,885 \cdot 10^{-10}$
4	$-2,364 \cdot 10^{-10}$	$-3,462 \cdot 10^{-11}$	$-5,991 \cdot 10^{-11}$	$-3,462 \cdot 10^{-11}$	$-9,138 \cdot 10^{-11}$
5	$-1,116 \cdot 10^{-10}$	$-1,877 \cdot 10^{-11}$	$-3,335 \cdot 10^{-11}$	$-1,877 \cdot 10^{-11}$	$-4,562 \cdot 10^{-11}$
10	$-9,531 \cdot 10^{-12}$	$-2,201 \cdot 10^{-12}$	$-4,876 \cdot 10^{-12}$	$-2,201 \cdot 10^{-12}$	$-4,702 \cdot 10^{-12}$
20	$-7,15 \cdot 10^{-13}$	$-1,88 \cdot 10^{-13}$	$-5,08 \cdot 10^{-13}$	$-1,88 \cdot 10^{-13}$	$-3,997 \cdot 10^{-13}$
					

Таблица 4.19

Синхронное движение в разных направлениях электронов атомов водорода на двух орбитах, расположенных на одной линии в условиях перекрытия площадей орбит. Начальный сдвиг по фазе 180°

Расстояние между орбитами электронов $\left(-\frac{d}{r}\right)$	$\Sigma F_{\pm i}$ в момент времени				Среднее значение $F_{\pm} = \frac{\Sigma \Sigma F_{\pm i}}{4}$ за период обращения электронов
	$t=0$ $t=T$	$t=\frac{1}{4}T$	$t=\frac{1}{2}T$	$t=\frac{3}{4}T$	
0	$-\infty$	$-2,3 \cdot 10^{-9}$	$-2,076 \cdot 10^{-9}$	$-2,3 \cdot 10^{-9}$	$-\infty$
-0,1	$2,350 \cdot 10^{-6}$	$-2,764 \cdot 10^{-9}$	$-2,413 \cdot 10^{-9}$	$-2,764 \cdot 10^{-9}$	$5,855 \cdot 10^{-7}$
-0,2	$6,398 \cdot 10^{-7}$	$-3,348 \cdot 10^{-9}$	$-2,823 \cdot 10^{-9}$	$-3,348 \cdot 10^{-9}$	$1,575 \cdot 10^{-7}$
-0,3	$3,414 \cdot 10^{-7}$	$-4,091 \cdot 10^{-9}$	$-3,328 \cdot 10^{-9}$	$-4,091 \cdot 10^{-9}$	$8,247 \cdot 10^{-8}$
-0,4	$2,625 \cdot 10^{-7}$	$-5,047 \cdot 10^{-9}$	$-3,954 \cdot 10^{-9}$	$-5,047 \cdot 10^{-9}$	$6,211 \cdot 10^{-8}$
-0,5	$2,658 \cdot 10^{-7}$	$-6,290 \cdot 10^{-9}$	$-4,739 \cdot 10^{-9}$	$-6,290 \cdot 10^{-9}$	$6,212 \cdot 10^{-8}$
-0,6	$3,396 \cdot 10^{-7}$	$-7,928 \cdot 10^{-9}$	$-5,738 \cdot 10^{-9}$	$-7,928 \cdot 10^{-9}$	$7,950 \cdot 10^{-8}$
-0,7	$5,444 \cdot 10^{-7}$	$-1,012 \cdot 10^{-8}$	$-7,025 \cdot 10^{-9}$	$-1,012 \cdot 10^{-8}$	$1,292 \cdot 10^{-7}$
-0,8	$1,169 \cdot 10^{-6}$	$-1,309 \cdot 10^{-8}$	$-8,714 \cdot 10^{-9}$	$-1,309 \cdot 10^{-8}$	$2,835 \cdot 10^{-7}$
-0,9	$4,609 \cdot 10^{-6}$	$-1,720 \cdot 10^{-8}$	$-1,097 \cdot 10^{-8}$	$-1,720 \cdot 10^{-8}$	$1,141 \cdot 10^{-6}$
-0,95	$9,204 \cdot 10^{-6}$	$-1,984 \cdot 10^{-8}$	$-1,239 \cdot 10^{-8}$	$-1,984 \cdot 10^{-8}$	$2,288 \cdot 10^{-6}$
					

Рассмотрим взаимодействие двух атомов водорода при синхронном движении электронов на двух орбитах, расположенных перпендикулярно друг к другу и к плоскости чертежа. В положении, когда орбиты электронов атомов водорода расположены перпендикулярно к плоскости чертежа, при начальном сдвиге фаз вращения электронов 0° или 180° и обоих по часовой стрелке, то в зависимости от конкретной ситуации расположения электронов (рис. 4.26, 4.27, 4.28) расчет сил электрического взаимодействия проводился по формулам (4.66)-(4.70), (4.71)-(4.75), (4.76)-(4.80).

Ситуация I

$$F_{e_1 e_2} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(r^2 + d^2)}, \quad (4.66)$$

$$F_{p_1 p_2} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(r + d)^2}, \quad (4.67)$$

$$F_{e_1 p_2} = +\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0[r^2 + (r^2 + d^2)]}, \quad (4.68)$$

$$F_{e_2 p_1} = +\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 d^2}, \quad (4.69)$$

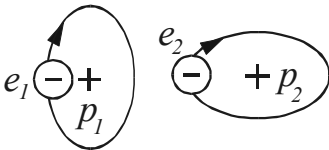


Рис. 4.26

$$F_9 = \Sigma F_{9_i} = F_{e_1 p_2} + F_{e_2 p_1} - F_{e_1 e_2} - F_{p_1 p_2} =$$

$$= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \left[\frac{1}{1 + \left(1 + \frac{d}{r}\right)^2} + \frac{1}{\left(\frac{d}{r}\right)^2} - \frac{1}{1 + \left(\frac{d}{r}\right)^2} - \frac{1}{\left(1 + \frac{d}{r}\right)^2} \right]. \quad (4.70)$$

Ситуация II

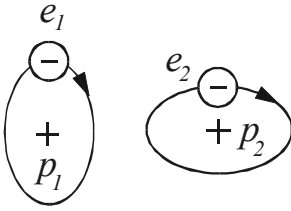


Рис. 4.27

$$F_{e_1 e_2} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (2r^2 + (r+d)^2)}, \quad (4.71)$$

$$F_{p_1 p_2} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (r+d)^2}, \quad (4.72)$$

$$F_{e_1 p_2} = +\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 [r^2 + (r+d)^2]}, \quad (4.73)$$

$$F_{e_2 p_1} = +\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 [r^2 + (r+d)^2]}, \quad (4.74)$$

$$F_9 = \Sigma F_{9_i} = F_{e_1 p_2} + F_{e_2 p_1} - F_{e_1 e_2} - F_{p_1 p_2} =$$

$$= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \left[\frac{2}{1 + \left(1 + \frac{d}{r}\right)^2} - \frac{1}{2 + \left(1 + \frac{d}{r}\right)^2} - \frac{1}{1 + \left(\frac{d}{r}\right)^2} \right]. \quad (4.75)$$

Ситуация III

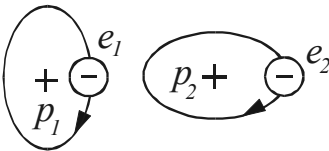


Рис. 4.28

$$F_{e_1 e_2} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (r^2 + (2r+d)^2)}, \quad (4.76)$$

$$F_{p_1 p_2} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (r+d)^2}, \quad (4.77)$$

$$F_{e_1 p_2} = +\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 [r^2 + (r+d)^2]}, \quad (4.78)$$

$$F_{e_2 p_1} = +\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (2r+d)^2}, \quad (4.79)$$

$$F_3 = \Sigma F_{3i} = F_{e_1 p_2} + F_{e_2 p_1} - F_{e_1 e_2} - F_{p_1 p_2} =$$

$$= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \left[\frac{1}{1 + \left(1 + \frac{d}{r}\right)^2} - \frac{1}{\left(2 + \frac{d}{r}\right)^2} - \frac{1}{1 + \left(2 + \frac{d}{r}\right)^2} - \frac{1}{\left(1 + \frac{d}{r}\right)^2} \right]. \quad (4.80)$$

Результаты расчета представлены в таблице 4.20. Как видно, три четверти периода преобладают силы отталкивания между атомами, но за счет одного четверть периода в целом за полный период обращения электронов атомы могут удерживаться друг около друга, но учитывая, что только лишь одну четверть периода преобладают силы притяжения, то колебания между атомами будут значительными и молекула H_2 , образованная при таком взаимоотношении орбит друг к другу, будет характеризоваться слабой степенью устойчивости.

При начальном сдвиге фаз вращения электронов 90° и расположения перпендикулярно друг к другу орбит электронов, расчет сил электрического взаимодействия проводился по формулам (4.81)-(4.85) в ситуации IV, по формулам (4.86)-(4.90) в ситуации V, по формулам (4.91)-(4.95) в ситуации VI.

Таблица 4.20

**Синхронное движение двух электронов атомов водорода, расположенных на перпендикулярных друг к другу и к плоскости чертежа орбитах.
Движение электронов по часовой стрелке. Начальный сдвиг по фазе 0° (180°)**

Расстояние между орбитами электронов $\left(\frac{d}{r}\right)$	ΣF_{3i} в момент времени				Среднее значение $F_3 = \frac{\Sigma \Sigma F_{3i}}{4}$ за период обращения электронов
	$t=0$ $t=T$	$t=\frac{1}{4}T$	$t=\frac{1}{2}T$	$t=\frac{3}{4}T$	
0,1	$2,268 \cdot 10^{-6}$	$-4,679 \cdot 10^{-9}$	$-7,637 \cdot 10^{-9}$	$-4,679 \cdot 10^{-9}$	$5,627 \cdot 10^{-7}$
0,2	$5,483 \cdot 10^{-7}$	$-3,807 \cdot 10^{-9}$	$-5,732 \cdot 10^{-9}$	$-3,807 \cdot 10^{-9}$	$1,337 \cdot 10^{-7}$
0,3	$2,294 \cdot 10^{-7}$	$-2,742 \cdot 10^{-9}$	$-4,370 \cdot 10^{-9}$	$-2,742 \cdot 10^{-9}$	$5,488 \cdot 10^{-8}$
0,4	$1,199 \cdot 10^{-7}$	$-2,003 \cdot 10^{-9}$	$-3,374 \cdot 10^{-9}$	$-2,003 \cdot 10^{-9}$	$2,813 \cdot 10^{-8}$
0,6	$4,433 \cdot 10^{-8}$	$-1,107 \cdot 10^{-9}$	$-2,084 \cdot 10^{-9}$	$-1,107 \cdot 10^{-9}$	$1,000 \cdot 10^{-8}$
0,8	$2,024 \cdot 10^{-8}$	$-6,380 \cdot 10^{-10}$	$-1,344 \cdot 10^{-9}$	$-6,380 \cdot 10^{-10}$	$4,405 \cdot 10^{-9}$
1	$1,035 \cdot 10^{-8}$	$-3,841 \cdot 10^{-10}$	$-8,947 \cdot 10^{-10}$	$-3,841 \cdot 10^{-10}$	$2,172 \cdot 10^{-9}$
1,5	$2,636 \cdot 10^{-9}$	$-1,242 \cdot 10^{-10}$	$-3,657 \cdot 10^{-10}$	$-1,242 \cdot 10^{-10}$	$5,054 \cdot 10^{-10}$
2	$8,947 \cdot 10^{-10}$	$-4,625 \cdot 10^{-11}$	$-1,704 \cdot 10^{-10}$	$-4,625 \cdot 10^{-11}$	$1,579 \cdot 10^{-10}$
3	$1,704 \cdot 10^{-10}$	$-1,035 \cdot 10^{-11}$	$-4,830 \cdot 10^{-11}$	$-1,035 \cdot 10^{-11}$	$2,535 \cdot 10^{-11}$
4	$4,322 \cdot 10^{-11}$	$-2,53 \cdot 10^{-12}$	$-1,800 \cdot 10^{-11}$	$-2,53 \cdot 10^{-12}$	$6,54 \cdot 10^{-12}$
5	$1,824 \cdot 10^{-11}$	$-8,67 \cdot 10^{-12}$	$-8,066 \cdot 10^{-12}$	$-8,67 \cdot 10^{-12}$	$2,1 \cdot 10^{-12}$
10	$8,28 \cdot 10^{-13}$	$-1,01 \cdot 10^{-13}$	$-4,69 \cdot 10^{-13}$	$-1,01 \cdot 10^{-13}$	$3,925 \cdot 10^{-14}$
20	$6,9 \cdot 10^{-14}$	0	$-3,4 \cdot 10^{-14}$	0	$8,75 \cdot 10^{-15}$

Ситуация IV

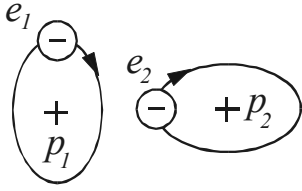


Рис. 4.29

$$F_{e_1 e_2} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(r^2 + d^2)}, \quad (4.81)$$

$$F_{p_1 p_2} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(r + d)^2}, \quad (4.82)$$

$$F_{e_1 p_2} = +\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0[r^2 + (r + d)^2]}, \quad (4.83)$$

$$F_{e_2 p_1} = +\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 d^2}, \quad (4.84)$$

$$\begin{aligned} F_{\text{з}} = \Sigma F_{\text{з}_i} &= F_{e_1 p_2} + F_{e_2 p_1} - F_{e_1 e_2} - F_{p_1 p_2} = \\ &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \left[\frac{1}{1 + \left(1 + \frac{d}{r}\right)^2} + \frac{1}{\left(\frac{d}{r}\right)^2} - \frac{1}{1 + \left(\frac{d}{r}\right)^2} - \frac{1}{\left(1 + \frac{d}{r}\right)^2} \right]. \end{aligned} \quad (4.85)$$

Ситуация V

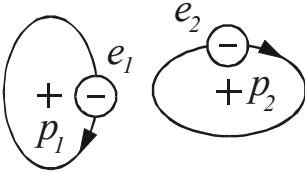


Рис. 4.30

$$F_{e_1 e_2} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(r + d)^2}, \quad (4.86)$$

$$F_{p_1 p_2} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(r + d)^2}, \quad (4.87)$$

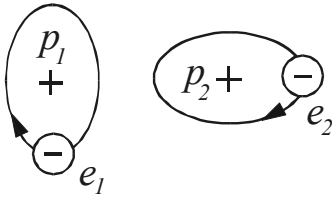
$$F_{e_1 p_2} = +\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0[r^2 + (r + d)^2]}, \quad (4.88)$$

$$F_{e_2 p_1} = +\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0[r^2 + (r + d)^2]}, \quad (4.89)$$

$$\begin{aligned} F_{\text{з}} = \Sigma F_{\text{з}_i} &= F_{e_1 p_2} + F_{e_2 p_1} - F_{e_1 e_2} - F_{p_1 p_2} = \\ &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \left[\frac{2}{1 + \left(1 + \frac{d}{r}\right)^2} - \frac{1}{\left(1 + \frac{d}{r}\right)^2} \right]. \end{aligned} \quad (4.90)$$

Ситуация VI

$$F_{e_1 e_2} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 [r^2 + (2r + d)^2]}, \quad (4.91)$$



$$F_{p_1 p_2} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (r + d)^2}, \quad (4.92)$$

$$F_{e_1 p_2} = +\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 [r^2 + (r + d)^2]}, \quad (4.93)$$

$$F_{e_2 p_1} = +\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (2r + d)^2}, \quad (4.94)$$

$$F_{\Sigma} = \Sigma F_{\Sigma i} = F_{e_1 p_2} + F_{e_2 p_1} - F_{e_1 e_2} - F_{p_1 p_2} =$$

$$= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \left[\frac{1}{1 + \left(1 + \frac{d}{r}\right)^2} + \frac{1}{\left(2 + \frac{d}{r}\right)^2} - \frac{1}{1 + \left(2 + \frac{d}{r}\right)^2} - \frac{1}{\left(1 + \frac{d}{r}\right)^2} \right]. \quad (4.95)$$

Результаты расчетов представлены в таблице 4.21. Как видно, во всех четвертьпериодах и в целом за полный период обращения электронов по орбитам преобладают силы отталкивания и, следовательно, молекула H_2 при таком расположении орбит электронов и начальном сдвиге их по фазе 90° не может сформироваться.

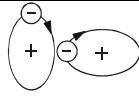
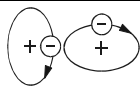
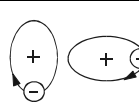
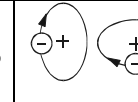
При синхронном движении двух электронов, расположенных на перпендикулярных друг к другу орбитах с перпендикулярными осями орбит, но движение одного из электронов происходит против часовой стрелки, расчет проводился с использованием вышеописанных формул в зависимости от конкретной ситуации расположения электронов.

Результаты расчетов оказались практически совпадающими с ситуациями однонаправленного вращения электронов и соответствующим начальным сдвигом по фазе расположения электронов. Например, в таблице 4.22 представлены результаты расчета для случая начального сдвига по фазе 0° .

Таблица 4.21

Синхронное движение электронов атомов водорода, расположенных на перпендикулярных друг к другу и к плоскости чертежа орбитах.
Движение электронов по часовой стрелке; начальный сдвиг по фазе 90°

Расстояние между орбитами электронов $\left(\frac{d}{r}\right)$	$\Sigma F_{\Sigma i}$ в момент времени				Среднее значение $F_{\Sigma} = \frac{\Sigma \Sigma F_{\Sigma i}}{4}$ за период обращения электронов
	$t=0$ $t=T$	$t=\frac{1}{4}T$	$t=\frac{1}{2}T$	$t=\frac{3}{4}T$	
0,1	$-4,679 \cdot 10^{-9}$	$-1,720 \cdot 10^{-8}$	$-7,637 \cdot 10^{-9}$	$-1,720 \cdot 10^{-8}$	$-1,168 \cdot 10^{-8}$
0,2	$-3,807 \cdot 10^{-9}$	$-1,309 \cdot 10^{-8}$	$-5,732 \cdot 10^{-9}$	$-1,309 \cdot 10^{-8}$	$-8,929 \cdot 10^{-9}$

Расстояние между орби- тами элек- тронов $\left(\frac{d}{r}\right)$	$\Sigma F_{\alpha i}$ в момент времени				Среднее значе- ние $F_{\alpha} = \frac{\Sigma \Sigma F_{\alpha i}}{4}$ за период обра- щения электро- нов
	$t=0$ $t=T$	$t=\frac{1}{4}T$	$t=\frac{1}{2}T$	$t=\frac{3}{4}T$	
0,3	$-2,742 \cdot 10^{-9}$	$-1,012 \cdot 10^{-8}$	$-4,370 \cdot 10^{-9}$	$-1,012 \cdot 10^{-8}$	$-6,838 \cdot 10^{-9}$
0,4	$-2,003 \cdot 10^{-9}$	$-7,930 \cdot 10^{-9}$	$-3,374 \cdot 10^{-9}$	$-7,930 \cdot 10^{-9}$	$-5,309 \cdot 10^{-9}$
0,6	$-1,107 \cdot 10^{-9}$	$-5,047 \cdot 10^{-9}$	$-2,084 \cdot 10^{-9}$	$-5,047 \cdot 10^{-9}$	$-3,321 \cdot 10^{-9}$
0,8	$-6,380 \cdot 10^{-10}$	$-3,348 \cdot 10^{-9}$	$-1,344 \cdot 10^{-9}$	$-3,348 \cdot 10^{-9}$	$-2,335 \cdot 10^{-9}$
1	$-3,841 \cdot 10^{-10}$	$-2,300 \cdot 10^{-9}$	$-8,947 \cdot 10^{-10}$	$-2,300 \cdot 10^{-9}$	$-1,470 \cdot 10^{-9}$
1,5	$-1,242 \cdot 10^{-10}$	$-1,017 \cdot 10^{-9}$	$-3,673 \cdot 10^{-10}$	$-1,017 \cdot 10^{-9}$	$-6,314 \cdot 10^{-10}$
2	$-4,625 \cdot 10^{-11}$	$-5,111 \cdot 10^{-10}$	$-1,704 \cdot 10^{-10}$	$-5,111 \cdot 10^{-10}$	$-3,097 \cdot 10^{-10}$
3	$-1,035 \cdot 10^{-11}$	$-1,702 \cdot 10^{-10}$	$-4,968 \cdot 10^{-11}$	$-1,702 \cdot 10^{-10}$	$-1,001 \cdot 10^{-10}$
4	$-2,53 \cdot 10^{-12}$	$-7,084 \cdot 10^{-11}$	$-1,824 \cdot 10^{-11}$	$-7,084 \cdot 10^{-11}$	$-4,061 \cdot 10^{-11}$
5	$-8,67 \cdot 10^{-13}$	$-3,453 \cdot 10^{-11}$	$-7,767 \cdot 10^{-12}$	$-3,453 \cdot 10^{-11}$	$-1,942 \cdot 10^{-11}$
10	$-1,01 \cdot 10^{-13}$	$-3,194 \cdot 10^{-12}$	$-4,69 \cdot 10^{-13}$	$-3,194 \cdot 10^{-12}$	$-1,739 \cdot 10^{-12}$
20	0	$-2,360 \cdot 10^{-13}$	$-3,4 \cdot 10^{-14}$	$-2,360 \cdot 10^{-13}$	$-1,265 \cdot 10^{-13}$
					

Таким образом, в целом ситуации расположения перпендикулярно друг к другу орбит электронов в соответствии с рис. 4.29-4.31 являются неблагоприятными для формирования устойчивой молекулы H_2 .

Весьма интересными для формирования молекулы водорода является ситуации синхронного движения двух электронов, расположенных на перпендикулярных друг к другу орбитах, одна из которых в плоскости чертежа.

При движении электронов по часовой стрелке и начальном сдвиге по фазе 0° расчет сил электрического взаимодействия проводился по формулам (4.96)–(4.100) – ситуация I и по формулам (4.101)–(4.105) – ситуация II.

Ситуация I

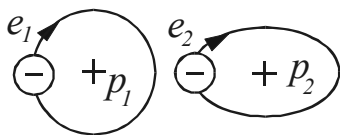


Рис. 4.32

$$F_{e_1 e_2} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (2r+d)^2}, \quad (4.96)$$

$$F_{p_1 p_2} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (2r+d)^2}, \quad (4.97)$$

$$F_{e_1 p_2} = +\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (3r+d)^2}, \quad (4.98)$$

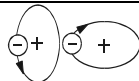
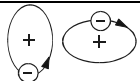
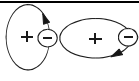
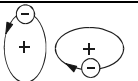
$$F_{e_2 p_1} = +\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (r+d)^2}, \quad (4.99)$$

$$F_{\circ} = \Sigma F_{\circ i} = F_{e_1 p_2} + F_{e_2 p_1} - F_{e_1 e_2} - F_{p_1 p_2} =$$

$$= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \left[\frac{1}{\left(3 + \frac{d}{r}\right)^2} + \frac{1}{\left(1 + \frac{d}{r}\right)^2} - \frac{2}{\left(2 + \frac{d}{r}\right)^2} \right]. \quad (4.100)$$

Таблица 4.22

Синхронное движение электронов атомов водорода, расположенных на перпендикулярных друг к другу и к плоскости чертежа орбитах. Движение электронов в вертикальной плоскости против часовой стрелки. Начальный сдвиг по фазе 0°

Расстояние между орбитами электронов $\left(\frac{d}{r}\right)$	$\Sigma F_{\circ i}$ в момент времени				Среднее значение $F_{\circ} = \frac{\Sigma \Sigma F_{\circ i}}{4}$ за период обращения электронов
	$t=0$ $t=T$	$t=\frac{1}{4}T$	$t=\frac{1}{2}T$	$t=\frac{3}{4}T$	
0,1	$2,268 \cdot 10^{-6}$	$-5,360 \cdot 10^{-9}$	$-7,637 \cdot 10^{-9}$	$-5,360 \cdot 10^{-9}$	$5,624 \cdot 10^{-7}$
0,2	$5,463 \cdot 10^{-7}$	$-3,807 \cdot 10^{-9}$	$-5,732 \cdot 10^{-9}$	$-3,807 \cdot 10^{-9}$	$1,332 \cdot 10^{-7}$
0,3	$2,294 \cdot 10^{-7}$	$-2,742 \cdot 10^{-9}$	$-4,370 \cdot 10^{-9}$	$-2,742 \cdot 10^{-9}$	$5,490 \cdot 10^{-8}$
0,4	$1,199 \cdot 10^{-7}$	$-2,001 \cdot 10^{-9}$	$-3,374 \cdot 10^{-9}$	$-2,001 \cdot 10^{-9}$	$2,813 \cdot 10^{-8}$
0,6	$4,445 \cdot 10^{-8}$	$-1,107 \cdot 10^{-9}$	$-2,084 \cdot 10^{-9}$	$-1,107 \cdot 10^{-9}$	$1,004 \cdot 10^{-8}$
0,8	$2,024 \cdot 10^{-8}$	$-6,380 \cdot 10^{-10}$	$-1,344 \cdot 10^{-9}$	$-6,380 \cdot 10^{-10}$	$4,405 \cdot 10^{-9}$
1	$1,035 \cdot 10^{-8}$	$-3,833 \cdot 10^{-10}$	$-8,947 \cdot 10^{-10}$	$-3,833 \cdot 10^{-10}$	$2,172 \cdot 10^{-9}$
1,5	$2,636 \cdot 10^{-9}$	$-1,245 \cdot 10^{-10}$	$-3,657 \cdot 10^{-10}$	$-1,245 \cdot 10^{-10}$	$5,053 \cdot 10^{-10}$
2	$8,947 \cdot 10^{-10}$	$-4,625 \cdot 10^{-11}$	$-1,704 \cdot 10^{-10}$	$-4,625 \cdot 10^{-11}$	$1,579 \cdot 10^{-10}$
3	$1,702 \cdot 10^{-10}$	$-1,035 \cdot 10^{-11}$	$-4,830 \cdot 10^{-11}$	$-1,035 \cdot 10^{-11}$	$2,53 \cdot 10^{-11}$
4	$4,968 \cdot 10^{-11}$	$-2,691 \cdot 10^{-12}$	$-1,800 \cdot 10^{-11}$	$-2,691 \cdot 10^{-12}$	$6,574 \cdot 10^{-12}$
5	$1,815 \cdot 10^{-11}$	$-8,740 \cdot 10^{-13}$	$-8,066 \cdot 10^{-12}$	$-8,740 \cdot 10^{-13}$	$2,084 \cdot 10^{-12}$
10	$7,26 \cdot 10^{-13}$	$-2,300 \cdot 10^{-14}$	$-4,69 \cdot 10^{-13}$	$-2,300 \cdot 10^{-14}$	$5,275 \cdot 10^{-14}$
20	$1,1 \cdot 10^{-14}$	0	$-3,4 \cdot 10^{-14}$	0	$5,75 \cdot 10^{-15}$
					

Ситуация II

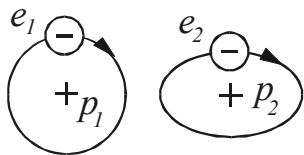


Рис. 4.33

$$F_{e_1 e_2} = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 [2r^2 + (2r + d)^2]}, \quad (4.101)$$

$$F_{p_1 p_2} = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (2r + d)^2}, \quad (4.102)$$

$$F_{e_1 p_2} = + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 [r^2 + (2r + d)^2]}, \quad (4.103)$$

$$F_{e_2 p_1} = + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 [r^2 + (2r + d)^2]}, \quad (4.104)$$

$$\begin{aligned} F_3 = \Sigma F_{3i} &= F_{e_1 p_2} + F_{e_2 p_1} - F_{e_1 e_2} - F_{p_1 p_2} = \\ &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \left[\frac{2}{1 + \left(2 + \frac{d}{r}\right)^2} - \frac{1}{2 + \left(2 + \frac{d}{r}\right)^2} - \frac{1}{\left(2 + \frac{d}{r}\right)^2} \right]. \end{aligned} \quad (4.105)$$

Результаты расчетов представлены в таблицах 4.23 и 4.24.

Как видно, при приближении атомов водорода в такой ситуации расположения орбит электронов и их начальном сдвиге по фазе 0° будет иметь место равномерное чередование четверть периодов сил притяжения и отталкивания с превалированием сил электрического притяжения. Расположение электронов на орбитах является благоприятным для их перекрытия, при котором также имеет место гармоническое колебание атомов около положения равновесия за счет периодичности проявления сил притяжения и отталкивания (табл. 4.24).

Если происходит сближение двух атомов водорода при синхронном движении их электронов, расположенных на перпендикулярных друг к другу орбитах, одна из которых в плоскости чертежа, а начальный сдвиг по фазе для электронов 90° , то расчет сил электрического взаимодействия должен проводиться по формулам (4.106)–(4.110) при ситуации III, (4.111)–(4.115) при ситуации IV, (4.116)–(4.120) при ситуации V и (4.121)–(4.125) при ситуации VI.

Таблица 4.23

Синхронное движение электронов атомов водорода, расположенных на перпендикулярных друг к другу орбитах, одна из которых в плоскости чертежа. Движение электронов по часовой стрелке; начальный сдвиг по фазе 0°

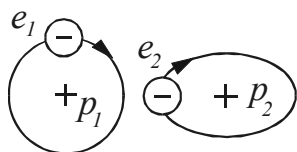
Расстояние между орбитами электронов $\left(\frac{d}{r}\right)$	ΣF_{3i} в момент времени				Среднее значение $F_3 = \frac{\Sigma F_{3i}}{4}$ за период обращения электронов
	$t=0$ $t=T$	$t=\frac{1}{4}T$	$t=\frac{1}{2}T$	$t=\frac{3}{4}T$	
0,1	$1,097 \cdot 10^{-8}$	$-3,008 \cdot 10^{-10}$	$1,097 \cdot 10^{-8}$	$-3,008 \cdot 10^{-10}$	$5,335 \cdot 10^{-9}$
0,2	$6,676 \cdot 10^{-9}$	$-2,379 \cdot 10^{-10}$	$6,676 \cdot 10^{-9}$	$-2,379 \cdot 10^{-10}$	$3,219 \cdot 10^{-9}$
0,3	$7,025 \cdot 10^{-9}$	$-1,896 \cdot 10^{-10}$	$7,025 \cdot 10^{-9}$	$-1,896 \cdot 10^{-10}$	$3,418 \cdot 10^{-9}$
0,4	$5,738 \cdot 10^{-9}$	$-1,522 \cdot 10^{-10}$	$5,738 \cdot 10^{-9}$	$-1,522 \cdot 10^{-10}$	$2,793 \cdot 10^{-9}$
0,6	$3,954 \cdot 10^{-9}$	$-1,000 \cdot 10^{-10}$	$3,954 \cdot 10^{-9}$	$-1,000 \cdot 10^{-10}$	$1,927 \cdot 10^{-9}$
0,8	$2,823 \cdot 10^{-9}$	$-6,746 \cdot 10^{-11}$	$2,823 \cdot 10^{-9}$	$-6,746 \cdot 10^{-11}$	$1,378 \cdot 10^{-9}$
1	$2,076 \cdot 10^{-9}$	$-4,625 \cdot 10^{-11}$	$2,076 \cdot 10^{-9}$	$-4,625 \cdot 10^{-11}$	$1,015 \cdot 10^{-9}$
1,5	$1,062 \cdot 10^{-9}$	$-1,988 \cdot 10^{-11}$	$1,062 \cdot 10^{-9}$	$-1,988 \cdot 10^{-11}$	$5,210 \cdot 10^{-10}$
2	$6,003 \cdot 10^{-10}$	$-9,384 \cdot 10^{-12}$	$6,003 \cdot 10^{-10}$	$-9,384 \cdot 10^{-12}$	$2,954 \cdot 10^{-10}$
3	$2,364 \cdot 10^{-10}$	$-2,622 \cdot 10^{-12}$	$2,364 \cdot 10^{-10}$	$-2,622 \cdot 10^{-12}$	$1,169 \cdot 10^{-10}$

Расстояние между орби- тами элек- тронов $\left(\frac{d}{r}\right)$	$\Sigma F_{\text{э}i}$ в момент времени				Среднее значение $F_{\text{э}} = \frac{\Sigma \Sigma F_{\text{э}i}}{4}$ за пе- риод обращения электронов
	$t=0$ $t=T$	$t=\frac{1}{4}T$	$t=\frac{1}{2}T$	$t=\frac{3}{4}T$	
4	$1,114 \cdot 10^{-10}$	$-9,06 \cdot 10^{-13}$	$1,114 \cdot 10^{-10}$	$-9,06 \cdot 10^{-13}$	$5,525 \cdot 10^{-11}$
5	$5,947 \cdot 10^{-11}$	$-3,7 \cdot 10^{-13}$	$5,947 \cdot 10^{-11}$	$-3,7 \cdot 10^{-13}$	$2,955 \cdot 10^{-11}$
10	$6,628 \cdot 10^{-12}$	$-1,3 \cdot 10^{-14}$	$6,628 \cdot 10^{-12}$	$-1,3 \cdot 10^{-14}$	$3,307 \cdot 10^{-12}$
20	$5,81 \cdot 10^{-13}$	0	$5,81 \cdot 10^{-13}$	0	$2,905 \cdot 10^{-13}$

Таблица 4.24

Синхронное движение электронов атомов водорода, расположенных на перпендикулярных друг к другу орбитах, одна из которых в плоскости чертежа. Движение электронов по часовой стрелке; начальный сдвиг по фазе 0°

Расстояние между орби- тами электро- нов $\left(-\frac{d}{r}\right)$	$\Sigma F_{\text{э}i}$ в момент времени				Среднее значе- ние $F_{\text{э}} = \frac{\Sigma \Sigma F_{\text{э}i}}{4}$ за период обра- щения электро- нов
	$t=0$ $t=T$	$t=\frac{1}{4}T$	$t=\frac{1}{2}T$	$t=\frac{3}{4}T$	
0	$1,405 \cdot 10^{-8}$	$-3,832 \cdot 10^{-10}$	$1,405 \cdot 10^{-8}$	$-3,832 \cdot 10^{-10}$	$6,833 \cdot 10^{-9}$
-0,1	$1,838 \cdot 10^{-8}$	$-4,924 \cdot 10^{-10}$	$1,838 \cdot 10^{-8}$	$-4,924 \cdot 10^{-10}$	$8,947 \cdot 10^{-9}$
-0,2	$2,467 \cdot 10^{-8}$	$-6,38 \cdot 10^{-10}$	$2,467 \cdot 10^{-8}$	$-6,38 \cdot 10^{-10}$	$1,201 \cdot 10^{-8}$
-0,3	$3,417 \cdot 10^{-8}$	$-8,374 \cdot 10^{-10}$	$3,417 \cdot 10^{-8}$	$-8,374 \cdot 10^{-10}$	$1,664 \cdot 10^{-8}$
-0,4	$4,932 \cdot 10^{-8}$	$-1,106 \cdot 10^{-9}$	$4,932 \cdot 10^{-8}$	$-1,106 \cdot 10^{-9}$	$2,410 \cdot 10^{-8}$
-0,5	$7,523 \cdot 10^{-8}$	$-1,480 \cdot 10^{-9}$	$7,523 \cdot 10^{-8}$	$-1,480 \cdot 10^{-9}$	$3,687 \cdot 10^{-8}$
-0,6	$1,243 \cdot 10^{-7}$	$-2,002 \cdot 10^{-9}$	$1,243 \cdot 10^{-7}$	$-2,002 \cdot 10^{-9}$	$6,115 \cdot 10^{-8}$
-0,7	$2,327 \cdot 10^{-7}$	$-2,742 \cdot 10^{-9}$	$2,327 \cdot 10^{-7}$	$-2,742 \cdot 10^{-9}$	$1,15 \cdot 10^{-7}$
-0,8	$5,478 \cdot 10^{-7}$	$-3,948 \cdot 10^{-9}$	$5,478 \cdot 10^{-7}$	$-3,948 \cdot 10^{-9}$	$3,294 \cdot 10^{-7}$
-0,9	$2,267 \cdot 10^{-6}$	$-5,359 \cdot 10^{-9}$	$2,267 \cdot 10^{-6}$	$-5,359 \cdot 10^{-9}$	$1,13 \cdot 10^{-6}$
-0,95	$9,164 \cdot 10^{-6}$	$-6,396 \cdot 10^{-9}$	$9,164 \cdot 10^{-6}$	$-6,396 \cdot 10^{-9}$	$1,465 \cdot 10^{-6}$

Ситуация III

$$F_{e_1 e_2} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (r^2 + (r+d)^2)}, \quad (4.106)$$

$$F_{p_1 p_2} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (2r+d)^2}, \quad (4.107)$$

Рис. 4.34

$$F_{e_1 p_2} = + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 [r^2 + (2r + d)^2]}, \quad (4.108)$$

$$F_{e_2 p_1} = + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (r + d)^2}, \quad (4.109)$$

$$\begin{aligned} F_{\mathfrak{g}} = \Sigma F_{\mathfrak{g}_i} &= F_{e_1 p_2} + F_{e_2 p_1} - F_{e_1 e_2} - F_{p_1 p_2} = \\ &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \left[\frac{1}{1 + \left(2 + \frac{d}{r}\right)^2} + \frac{1}{\left(1 + \frac{d}{r}\right)^2} - \frac{1}{1 + \left(1 + \frac{d}{r}\right)^2} - \frac{1}{\left(2 + \frac{d}{r}\right)^2} \right]. \end{aligned} \quad (4.110)$$

Ситуация IV

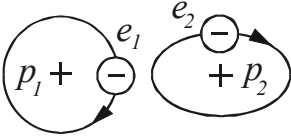


Рис. 4.35

$$F_{e_1 e_2} = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 [r^2 + (r + d)^2]}, \quad (4.111)$$

$$F_{p_1 p_2} = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (2r + d)^2}, \quad (4.112)$$

$$F_{e_1 p_2} = + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (r + d)^2}, \quad (4.113)$$

$$F_{e_2 p_1} = + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 [r^2 + (2r + d)^2]}, \quad (4.114)$$

$$\begin{aligned} F_{\mathfrak{g}} = \Sigma F_{\mathfrak{g}_i} &= F_{e_1 p_2} + F_{e_2 p_1} - F_{e_1 e_2} - F_{p_1 p_2} = \\ &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \left[\frac{1}{\left(1 + \frac{d}{r}\right)^2} + \frac{1}{1 + \left(2 + \frac{d}{r}\right)^2} - \frac{1}{1 + \left(1 + \frac{d}{r}\right)^2} - \frac{1}{\left(2 + \frac{d}{r}\right)^2} \right]. \end{aligned} \quad (4.115)$$

Ситуация V

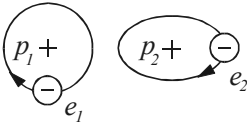


Рис. 4.36

$$F_{e_1 e_2} = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 [r^2 + (3r + d)^2]}, \quad (4.116)$$

$$F_{p_1 p_2} = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (2r + d)^2}, \quad (4.117)$$

$$F_{e_1 p_2} = + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 [r^2 + (2r + d)^2]}, \quad (4.118)$$

$$F_{e_2 p_1} = + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(3r+d)^2}, \quad (4.119)$$

$$\begin{aligned} F_3 = \Sigma F_{3_i} &= F_{e_1 p_2} + F_{e_2 p_1} - F_{e_1 e_2} - F_{p_1 p_2} = \\ &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \left[\frac{1}{1 + \left(2 + \frac{d}{r}\right)^2} + \frac{1}{\left(3 + \frac{d}{r}\right)^2} - \frac{1}{1 + \left(3 + \frac{d}{r}\right)^2} - \frac{1}{\left(2 + \frac{d}{r}\right)^2} \right]. \end{aligned} \quad (4.120)$$

Ситуация VI

$$F_{e_1 e_2} = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 [r^2 + (3r+d)^2]}, \quad (4.121)$$

$$F_{p_1 p_2} = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (2r+d)^2}, \quad (4.122)$$

$$F_{e_1 p_2} = + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (3r+d)^2}, \quad (4.123)$$

$$F_{e_2 p_1} = + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 [r^2 + (2r+d)^2]}, \quad (4.124)$$

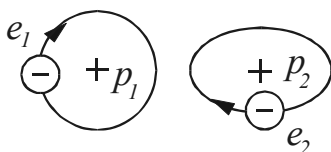


Рис. 4.37

$$\begin{aligned} F_3 = \Sigma F_{3_i} &= F_{e_1 p_2} + F_{e_2 p_1} - F_{e_1 e_2} - F_{p_1 p_2} = \\ &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \left[\frac{1}{\left(3 + \frac{d}{r}\right)^2} + \frac{1}{1 + \left(2 + \frac{d}{r}\right)^2} - \frac{1}{1 + \left(3 + \frac{d}{r}\right)^2} - \frac{1}{\left(2 + \frac{d}{r}\right)^2} \right]. \end{aligned} \quad (4.125)$$

Результаты расчетов по этим формулам представлены в таблицах 4.25 и 4.26. Как следует из результатов расчета, при сближении двух атомов водорода или перекрытии их электронных орбит происходит полупериодное чередование сил притяжения и отталкивания, но с преобладанием сил притяжения, что является благоприятным фактором возможности формирования молекул водорода при таких условиях.

Если происходит сближение двух атомов водорода при синхронном движении их электронов, расположенных на перпендикулярных друг к другу орбитах, одна из которых в плоскости чертежа, а начальный сдвиг по фазе для электронов 180° , то расчет сил электрического взаимодействия должен проводиться по формулам (4.126)–(4.130) при ситуации VII, по формулам (4.131)–(4.135) при ситуации VIII и по формулам (4.136)–(4.140) при ситуации IX.

Ситуация VII

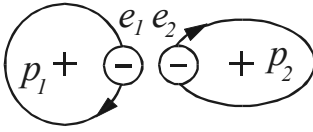


Рис. 4.38

$$F_{e_1 e_2} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 d^2}, \quad (4.126)$$

$$F_{p_1 p_2} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (2r + d)^2}, \quad (4.127)$$

$$F_{e_1 p_2} = +\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (r + d)^2}, \quad (4.128)$$

$$F_{e_2 p_1} = +\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (r + d)^2}, \quad (4.129)$$

$$F_3 = \Sigma F_{3i} = F_{e_1 p_2} + F_{e_2 p_1} - F_{e_1 e_2} - F_{p_1 p_2} =$$

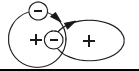
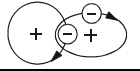
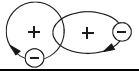
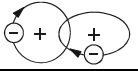
$$= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \left[\frac{2}{\left(1 + \frac{d}{r}\right)^2} + \frac{1}{\left(\frac{d}{r}\right)^2} - \frac{1}{\left(2 + \frac{d}{r}\right)^2} \right]. \quad (4.130)$$

Таблица 4.25

Синхронное движение электронов атомов водорода, расположенных на перпендикулярных друг к другу орбитах, одна из которых в плоскости чертежа. Движение электронов по часовой стрелке; начальный сдвиг по фазе 90°

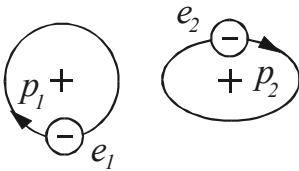
Расстояние между орбитами электронов $\left(\frac{d}{r}\right)$	ΣF_{3i} в момент времени				Среднее значение $F_3 = \frac{\Sigma \Sigma F_{3i}}{4}$ за период обращения электронов
	$t=0$ $t=T$	$t=\frac{1}{4}T$	$t=\frac{1}{2}T$	$t=\frac{3}{4}T$	
0,1	$7,895 \cdot 10^{-9}$	$7,895 \cdot 10^{-9}$	$-7,408 \cdot 10^{-10}$	$-7,408 \cdot 10^{-10}$	$3,577 \cdot 10^{-9}$
0,2	$5,732 \cdot 10^{-9}$	$5,732 \cdot 10^{-9}$	$-6,143 \cdot 10^{-10}$	$-6,143 \cdot 10^{-10}$	$2,558 \cdot 10^{-9}$
0,3	$4,368 \cdot 10^{-9}$	$4,368 \cdot 10^{-9}$	$-5,137 \cdot 10^{-10}$	$-5,137 \cdot 10^{-10}$	$1,927 \cdot 10^{-9}$
0,4	$3,405 \cdot 10^{-9}$	$3,405 \cdot 10^{-9}$	$-4,319 \cdot 10^{-10}$	$-4,319 \cdot 10^{-10}$	$1,470 \cdot 10^{-9}$
0,6	$2,085 \cdot 10^{-9}$	$2,085 \cdot 10^{-9}$	$-3,114 \cdot 10^{-10}$	$-3,114 \cdot 10^{-10}$	$8,868 \cdot 10^{-10}$
0,8	$1,291 \cdot 10^{-9}$	$1,291 \cdot 10^{-9}$	$-2,286 \cdot 10^{-10}$	$-2,286 \cdot 10^{-10}$	$5,312 \cdot 10^{-10}$
1	$8,944 \cdot 10^{-10}$	$8,944 \cdot 10^{-10}$	$-1,709 \cdot 10^{-10}$	$-1,709 \cdot 10^{-10}$	$3,617 \cdot 10^{-10}$
1,5	$3,658 \cdot 10^{-10}$	$3,658 \cdot 10^{-10}$	$-8,838 \cdot 10^{-11}$	$-8,838 \cdot 10^{-11}$	$1,387 \cdot 10^{-10}$
2	$1,709 \cdot 10^{-10}$	$1,709 \cdot 10^{-10}$	$-4,922 \cdot 10^{-11}$	$-4,922 \cdot 10^{-11}$	$6,084 \cdot 10^{-11}$
3	$4,922 \cdot 10^{-11}$	$4,922 \cdot 10^{-11}$	$-1,801 \cdot 10^{-11}$	$-1,801 \cdot 10^{-11}$	$1,560 \cdot 10^{-11}$
4	$1,815 \cdot 10^{-11}$	$1,815 \cdot 10^{-11}$	$-7,997 \cdot 10^{-12}$	$-7,997 \cdot 10^{-12}$	$5,076 \cdot 10^{-12}$
5	$7,879 \cdot 10^{-12}$	$7,879 \cdot 10^{-12}$	$-3,866 \cdot 10^{-12}$	$-3,866 \cdot 10^{-12}$	$2,006 \cdot 10^{-12}$
10	$4,556 \cdot 10^{-13}$	$4,556 \cdot 10^{-13}$	$-3,08 \cdot 10^{-13}$	$-3,08 \cdot 10^{-13}$	$7,35 \cdot 10^{-14}$
20	$1,8 \cdot 10^{-14}$	$1,8 \cdot 10^{-14}$	$-2,0 \cdot 10^{-15}$	$-2,0 \cdot 10^{-15}$	$8,0 \cdot 10^{-15}$

Синхронное движение электронов атомов водорода, расположенных на перпендикулярных друг к другу орбитах, одна из которых в плоскости чертежа, в условиях перекрытия их площадей. Движение электронов по часовой стрелке; начальный сдвиг по фазе 90°

Расстояние между орбитами электронов $\left(-\frac{d}{r}\right)$	$\Sigma F_{\text{э}i}$ в момент времени				Среднее значение $F_{\text{э}} = \frac{\Sigma F_{\text{э}i}}{4}$ за период обращения электронов
	$t=0$ $t=T$	$t=\frac{1}{4}T$	$t=\frac{1}{2}T$	$t=\frac{3}{4}T$	
0	$1,035 \cdot 10^{-8}$	$1,035 \cdot 10^{-8}$	$-8,945 \cdot 10^{-10}$	$-8,945 \cdot 10^{-10}$	$4,724 \cdot 10^{-9}$
-0,1	$1,132 \cdot 10^{-8}$	$1,132 \cdot 10^{-8}$	$-1,091 \cdot 10^{-9}$	$-1,091 \cdot 10^{-9}$	$5,114 \cdot 10^{-9}$
-0,2	$2,024 \cdot 10^{-8}$	$2,024 \cdot 10^{-8}$	$-1,342 \cdot 10^{-9}$	$-1,342 \cdot 10^{-9}$	$9,444 \cdot 10^{-9}$
-0,3	$2,946 \cdot 10^{-8}$	$2,946 \cdot 10^{-8}$	$-1,665 \cdot 10^{-9}$	$-1,665 \cdot 10^{-9}$	$1,380 \cdot 10^{-8}$
-0,4	$4,445 \cdot 10^{-8}$	$4,445 \cdot 10^{-8}$	$-2,085 \cdot 10^{-9}$	$-2,085 \cdot 10^{-9}$	$2,118 \cdot 10^{-8}$
-0,5	$7,045 \cdot 10^{-8}$	$7,045 \cdot 10^{-8}$	$-2,638 \cdot 10^{-9}$	$-2,638 \cdot 10^{-9}$	$3,390 \cdot 10^{-8}$
-0,6	$1,199 \cdot 10^{-7}$	$1,199 \cdot 10^{-7}$	$-3,373 \cdot 10^{-9}$	$-3,373 \cdot 10^{-9}$	$5,826 \cdot 10^{-8}$
-0,7	$2,294 \cdot 10^{-7}$	$2,294 \cdot 10^{-7}$	$-4,368 \cdot 10^{-9}$	$-4,368 \cdot 10^{-9}$	$1,124 \cdot 10^{-7}$
-0,8	$5,463 \cdot 10^{-7}$	$5,463 \cdot 10^{-7}$	$-5,732 \cdot 10^{-9}$	$-5,732 \cdot 10^{-9}$	$2,702 \cdot 10^{-7}$
-0,9	$2,268 \cdot 10^{-6}$	$2,268 \cdot 10^{-6}$	$-7,636 \cdot 10^{-9}$	$-7,636 \cdot 10^{-9}$	$1,130 \cdot 10^{-6}$
-0,95	$9,167 \cdot 10^{-6}$	$9,167 \cdot 10^{-6}$	$-8,870 \cdot 10^{-9}$	$-8,870 \cdot 10^{-9}$	$4,579 \cdot 10^{-6}$
					

Ситуация VIII

$$F_{e_1 e_2} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 [2r^2 + (2r+d)^2]}, \quad (4.131)$$



$$F_{p_1 p_2} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (2r+d)^2}, \quad (4.132)$$

$$F_{e_1 p_2} = +\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 [r^2 + (2r+d)^2]}, \quad (4.133)$$

Рис. 4.39

$$F_{e_2 p_1} = +\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 [r^2 + (2r+d)^2]}, \quad (4.134)$$

$$F_{\text{э}} = \Sigma F_{\text{э}i} = F_{e_1 p_2} + F_{e_2 p_1} - F_{e_1 e_2} - F_{p_1 p_2} =$$

$$= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \left[\frac{2}{1 + \left(2 + \frac{d}{r}\right)^2} - \frac{1}{2 + \left(2 + \frac{d}{r}\right)^2} - \frac{1}{\left(2 + \frac{d}{r}\right)^2} \right]. \quad (4.135)$$

Ситуация IX

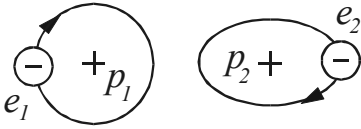


Рис. 4.40

$$F_{e_1 e_2} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (4r+d)^2}, \quad (4.136)$$

$$F_{p_1 p_2} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (2r+d)^2}, \quad (4.137)$$

$$F_{e_1 p_2} = +\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (3r+d)^2}, \quad (4.138)$$

$$F_{e_2 p_1} = +\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (3r+d)^2}, \quad (4.139)$$

$$\begin{aligned} F_9 = \Sigma F_{9_i} &= F_{e_1 p_2} + F_{e_2 p_1} - F_{e_1 e_2} - F_{p_1 p_2} = \\ &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \left[\frac{2}{\left(3 + \frac{d}{r}\right)^2} - \frac{1}{\left(4 + \frac{d}{r}\right)^2} - \frac{1}{\left(2 + \frac{d}{r}\right)^2} \right]. \end{aligned} \quad (4.140)$$

Результаты расчета сил электрического взаимодействия по этим формулам представлены в таблицах 4.27 и 4.28. Как видно, при сближении атомов водорода во всех четверть периодах преобладают силы отталкивания, а при $d \rightarrow 0$ сила электрического отталкивания между двумя атомами стремится к бесконечности. Поэтому вероятность достичь состояния перекрытия орбит электронов атомов в этих условиях равна нулю, хотя по расчетам в условиях перекрытия орбит электронов результирующая сила электрического взаимодействия является силой притяжения, невзирая на то, что в течение трех четвертьпериодов превалируют силы электрического отталкивания.

Следовательно, при аналогичных условиях взаимоотношения атомов водорода молекула водорода образоваться не может и квантово-механический принцип формирования молекулы водорода за счет перекрытия облаков с максимальной электронной плотностью не отражает физическую реальность соотношения сил отталкивания и притяжения на этапе сближения атомов, а потому является глубоко ошибочным методическим подходом в решении теории формирования молекул вообще.

На основании выше приведенных расчетов, представленных в сводной таблице 4.29, можно сделать вывод, что образование молекулы водорода из двух нейтральных атомов может происходить при разных ситуациях их взаимного сближения, в том числе:

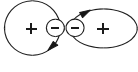
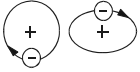
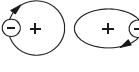
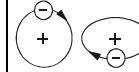
1. при синхронном движении в одном или разных направлениях электронов на двух орбитах, расположенных на одной линии и с начальным сдвигом по фазе 0° или 90° , причем при любых расстояниях атомов друг от друга, включая и состояние перекрытия электронных орбит (табл. 4.8-4.11; 4.14-4.17);

2. при синхронном движении двух электронов на перпендикулярных друг к другу орбитах, одна из которых расположена в плоскости чертежа, движении электронов по часовой стрелке и начальном сдвиге по фазе 0° или 90° , включая и состояние перекрытия электронных орбит (табл. 4.23-4.26).

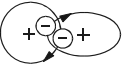
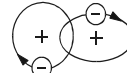
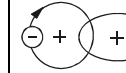
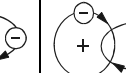
Большое разнообразие возможных ситуаций взаимодействия двух атомов водорода с образованием молекулы водорода при различных ориентациях плоскостей орбит электронов подтверждается и весьма высокой активностью взаимодействия водорода с большинством химических элементов. Водород образует соединения почти со всеми элементами (кроме благородных газов и благородных металлов), и он хорошо растворяется во многих металлах, например в Pt, Ni, Pd (до 850% по объему), непосредственно соединяется с F_2 (даже в темноте при -252°C), с Cl_2 (на свету), с O_2 (при температуре выше 550°C) и т. д.

Таблица 4.27

Синхронное движение двух электронов атомов водорода, расположенных на перпендикулярных друг к другу орбитах, одна из которых в плоскости чертежа. Движение электронов по часовой стрелке; начальный сдвиг по фазе 180°

Расстояние между орбитами электронов $\left(\frac{d}{r}\right)$	ΣF_{zi} в момент времени				Среднее значение $F_z = \frac{\Sigma \Sigma F_{zi}}{4}$ за период обращения электронов
	$t=0$ $t=T$	$t=\frac{1}{4}T$	$t=\frac{1}{2}T$	$t=\frac{3}{4}T$	
0,1	$-2,267 \cdot 10^{-6}$	$-3,008 \cdot 10^{-10}$	$-1,797 \cdot 10^{-9}$	$-3,008 \cdot 10^{-10}$	$-5,673 \cdot 10^{-7}$
0,2	$-5,479 \cdot 10^{-7}$	$-2,379 \cdot 10^{-10}$	$-1,563 \cdot 10^{-9}$	$-2,379 \cdot 10^{-10}$	$-1,347 \cdot 10^{-7}$
0,3	$-2,327 \cdot 10^{-7}$	$-1,896 \cdot 10^{-10}$	$-1,367 \cdot 10^{-9}$	$-1,896 \cdot 10^{-10}$	$-5,861 \cdot 10^{-8}$
0,4	$-1,243 \cdot 10^{-7}$	$-1,522 \cdot 10^{-10}$	$-1,202 \cdot 10^{-9}$	$-1,522 \cdot 10^{-10}$	$-3,145 \cdot 10^{-8}$
0,6	$-4,932 \cdot 10^{-8}$	$-1,000 \cdot 10^{-10}$	$-9,397 \cdot 10^{-10}$	$-1,000 \cdot 10^{-10}$	$-1,256 \cdot 10^{-8}$
0,8	$-2,467 \cdot 10^{-8}$	$-6,746 \cdot 10^{-11}$	$-7,463 \cdot 10^{-10}$	$-6,746 \cdot 10^{-11}$	$-6,387 \cdot 10^{-9}$
1	$-1,405 \cdot 10^{-8}$	$-4,625 \cdot 10^{-11}$	$-6,005 \cdot 10^{-10}$	$-4,625 \cdot 10^{-11}$	$-3,685 \cdot 10^{-9}$
1,5	$-4,739 \cdot 10^{-9}$	$-1,988 \cdot 10^{-11}$	$-3,664 \cdot 10^{-10}$	$-1,988 \cdot 10^{-11}$	$-1,286 \cdot 10^{-9}$
2	$-2,076 \cdot 10^{-9}$	$-9,384 \cdot 10^{-12}$	$-2,364 \cdot 10^{-10}$	$-9,384 \cdot 10^{-12}$	$-5,828 \cdot 10^{-10}$
3	$-6,005 \cdot 10^{-10}$	$-2,364 \cdot 10^{-12}$	$-1,116 \cdot 10^{-10}$	$-2,364 \cdot 10^{-12}$	$-1,794 \cdot 10^{-10}$
4	$-2,363 \cdot 10^{-10}$	$-9,06 \cdot 10^{-13}$	$-5,937 \cdot 10^{-11}$	$-9,06 \cdot 10^{-13}$	$-7,435 \cdot 10^{-11}$
5	$-1,116 \cdot 10^{-10}$	$-3,7 \cdot 10^{-13}$	$-3,457 \cdot 10^{-11}$	$-3,7 \cdot 10^{-13}$	$-3,672 \cdot 10^{-11}$
10	$-9,761 \cdot 10^{-12}$	$-1,3 \cdot 10^{-14}$	$-4,977 \cdot 10^{-12}$	$-1,3 \cdot 10^{-14}$	$-3,689 \cdot 10^{-12}$
20	$-7,15 \cdot 10^{-13}$	0	$-5,08 \cdot 10^{-13}$	0	$-3,057 \cdot 10^{-13}$
					

Синхронное движение электронов атомов водорода, расположенных на перпендикулярных друг к другу орбитах, одна из которых в плоскости чертежа. Движение электронов по часовой стрелке; начальный сдвиг по фазе 180°

Расстояние между орбитами электронов $\left(-\frac{d}{r}\right)$	ΣF_{zi} в момент времени				Среднее значение $F_z = \frac{\Sigma \Sigma F_{zi}}{4}$ за период обращения электронов
	$t=0$ $t=T$	$t=\frac{1}{4}T$	$t=\frac{1}{2}T$	$t=\frac{3}{4}T$	
0	$-\infty$	$-3,832 \cdot 10^{-10}$	$-4,472 \cdot 10^{-9}$	$-3,832 \cdot 10^{-10}$	$-\infty$
-0,1	$2,350 \cdot 10^{-6}$	$-4,924 \cdot 10^{-10}$	$-2,413 \cdot 10^{-9}$	$-4,924 \cdot 10^{-10}$	$5,866 \cdot 10^{-7}$
-0,2	$6,397 \cdot 10^{-7}$	$-6,38 \cdot 10^{-10}$	$-2,824 \cdot 10^{-9}$	$-6,38 \cdot 10^{-10}$	$1,589 \cdot 10^{-7}$
-0,3	$3,414 \cdot 10^{-7}$	$-8,374 \cdot 10^{-10}$	$-3,328 \cdot 10^{-9}$	$-8,374 \cdot 10^{-10}$	$8,409 \cdot 10^{-8}$
-0,4	$2,625 \cdot 10^{-7}$	$-1,106 \cdot 10^{-9}$	$-3,954 \cdot 10^{-9}$	$-1,106 \cdot 10^{-9}$	$6,408 \cdot 10^{-8}$
-0,5	$3,577 \cdot 10^{-7}$	$-1,480 \cdot 10^{-9}$	$-4,739 \cdot 10^{-9}$	$-1,480 \cdot 10^{-9}$	$8,750 \cdot 10^{-8}$
-0,6	$3,396 \cdot 10^{-7}$	$-2,002 \cdot 10^{-9}$	$-5,738 \cdot 10^{-9}$	$-2,002 \cdot 10^{-9}$	$8,246 \cdot 10^{-8}$
-0,7	$5,444 \cdot 10^{-7}$	$-2,742 \cdot 10^{-9}$	$-7,025 \cdot 10^{-9}$	$-2,742 \cdot 10^{-9}$	$1,329 \cdot 10^{-7}$
-0,8	$1,169 \cdot 10^{-6}$	$-3,948 \cdot 10^{-9}$	$-8,714 \cdot 10^{-9}$	$-3,948 \cdot 10^{-9}$	$2,880 \cdot 10^{-7}$
-0,9	$4,609 \cdot 10^{-6}$	$-5,359 \cdot 10^{-9}$	$-1,097 \cdot 10^{-8}$	$-5,359 \cdot 10^{-9}$	$1,146 \cdot 10^{-6}$
-0,95	$1,840 \cdot 10^{-5}$	$-6,396 \cdot 10^{-9}$	$-1,238 \cdot 10^{-8}$	$-6,396 \cdot 10^{-9}$	$4,593 \cdot 10^{-6}$
					

Все это свидетельствует о том, что водород, в силу особенностей строения атома только с одним электроном на орбите, так хорошо взаимодействует со всеми элементами только потому, что этот единственный электрон может приближаться к другому атому по-разному, в зависимости от конкретных условий. И на этот единственный электрон в атоме влияет только сферически симметричное электрическое поле заряда ядра, так как нет на орбитах других внутренних электронов у атома. Поэтому электрон атома может очень легко переходить на другую орбиту для осуществления синхронного движения по орбите в соответствии с движением валентного электрона взаимодействующего с ним атома, т. е. легко приспосабливаться к движению валентных электронов других атомов.

Какое из этих возможных ситуаций взаимодействия между собой атомов водорода является наиболее устойчивым и, следовательно, предпочтительным?

Анализ показывает, что при $d = r$ сила электрического притяжения изменяется в пределах $3,6 \cdot 10^{-10}$ н до $2,17 \cdot 10^{-9}$ н, а при условии перекрытия орбит электронов в пределах $3,39 \cdot 10^{-8}$ до $6,54 \cdot 10^{-8}$, т. е. величины очень близкие.

Однако можно выделить некоторые из этих ситуаций взаимоотношения орбит электронов атомов, которые могут быть предпочтительнее других, а именно синхронное движение двух электронов, расположенных на перпендикулярных друг к другу орбитах, одна из которых в плоскости чертежа, и в условиях перекрытия их площадей, когда начальный сдвиг по фазе составляет 0° или 90° .

Сводная таблица результатов расчета суммарных сил взаимодействия двух атомов водорода при их сближении
за период обращения электронов

Относительное расстояние между орбитами электронов $\frac{d}{r}$	Среднее значение $F_s = \frac{\sum \sum F_s}{4}$ за период синхронного обращения электронов											
	Орбиты электронов параллельны						Орбиты электронов перпендикулярны друг к другу и к плоскости чертежа					
	$\varphi=0^\circ$ →	$\varphi=180^\circ$ →	$\varphi=90^\circ$ →	$\varphi=0^\circ$ ←	$\varphi=180^\circ$ ←	$\varphi=90^\circ$ →	$\varphi=0^\circ$ →	$\varphi=90^\circ$ →	$\varphi=180^\circ$ ←	$\varphi=90^\circ$ →	$\varphi=0^\circ$ →	$\varphi=180^\circ$ ←
0,1	$-4,56 \cdot 10^{-6}$	$-2,26 \cdot 10^{-6}$	$-2,26 \cdot 10^{-6}$	$-3,41 \cdot 10^{-6}$	$-3,41 \cdot 10^{-6}$	$-2,26 \cdot 10^{-6}$	$5,627 \cdot 10^{-7}$	$-1,168 \cdot 10^{-8}$	$5,627 \cdot 10^{-7}$	$-1,168 \cdot 10^{-8}$	$5,624 \cdot 10^{-7}$	$5,624 \cdot 10^{-7}$
0,2	$-1,107 \cdot 10^{-6}$	$-5,365 \cdot 10^{-7}$	$-5,364 \cdot 10^{-7}$	$-8,217 \cdot 10^{-7}$	$-8,217 \cdot 10^{-7}$	$-5,364 \cdot 10^{-7}$	$1,337 \cdot 10^{-7}$	$-8,929 \cdot 10^{-9}$	$1,337 \cdot 10^{-7}$	$-8,929 \cdot 10^{-9}$	$1,332 \cdot 10^{-7}$	$1,332 \cdot 10^{-7}$
0,3	$-4,695 \cdot 10^{-7}$	$-2,189 \cdot 10^{-7}$	$-2,188 \cdot 10^{-7}$	$-3,442 \cdot 10^{-7}$	$-3,442 \cdot 10^{-7}$	$-2,188 \cdot 10^{-7}$	$5,488 \cdot 10^{-8}$	$-6,838 \cdot 10^{-9}$	$5,488 \cdot 10^{-8}$	$-6,838 \cdot 10^{-9}$	$5,490 \cdot 10^{-8}$	$5,490 \cdot 10^{-8}$
0,4	$-2,482 \cdot 10^{-8}$	$-1,096 \cdot 10^{-7}$	$-1,094 \cdot 10^{-7}$	$-1,789 \cdot 10^{-7}$	$-1,789 \cdot 10^{-7}$	$-1,094 \cdot 10^{-7}$	$2,813 \cdot 10^{-8}$	$-5,309 \cdot 10^{-9}$	$2,813 \cdot 10^{-8}$	$-5,309 \cdot 10^{-9}$	$2,813 \cdot 10^{-8}$	$2,813 \cdot 10^{-8}$
0,6	$-9,409 \cdot 10^{-8}$	$-6,91 \cdot 10^{-8}$	$-3,49 \cdot 10^{-8}$	$-7,974 \cdot 10^{-8}$	$-7,974 \cdot 10^{-8}$	$-3,49 \cdot 10^{-8}$	$1,000 \cdot 10^{-8}$	$-3,321 \cdot 10^{-9}$	$1,000 \cdot 10^{-8}$	$-3,321 \cdot 10^{-9}$	$1,004 \cdot 10^{-8}$	$1,004 \cdot 10^{-8}$
0,8	$-4,387 \cdot 10^{-8}$	$-1,56 \cdot 10^{-8}$	$-1,231 \cdot 10^{-8}$	$-2,973 \cdot 10^{-8}$	$-2,973 \cdot 10^{-8}$	$-1,231 \cdot 10^{-8}$	$4,405 \cdot 10^{-9}$	$-2,335 \cdot 10^{-9}$	$4,405 \cdot 10^{-9}$	$-2,335 \cdot 10^{-9}$	$4,405 \cdot 10^{-9}$	$4,405 \cdot 10^{-9}$
1	$-2,303 \cdot 10^{-8}$	$-4,6 \cdot 10^{-8}$	$-4,354 \cdot 10^{-9}$	$-1,381 \cdot 10^{-8}$	$-1,381 \cdot 10^{-8}$	$-4,354 \cdot 10^{-9}$	$2,172 \cdot 10^{-9}$	$-1,470 \cdot 10^{-9}$	$2,172 \cdot 10^{-9}$	$-1,470 \cdot 10^{-9}$	$2,172 \cdot 10^{-9}$	$2,172 \cdot 10^{-9}$
1,5	$-6,285 \cdot 10^{-9}$	$2,517 \cdot 10^{-9}$	$1,000 \cdot 10^{-9}$	$-3,016 \cdot 10^{-9}$	$-3,016 \cdot 10^{-9}$	$1,000 \cdot 10^{-9}$	$5,054 \cdot 10^{-10}$	$-6,314 \cdot 10^{-10}$	$5,054 \cdot 10^{-10}$	$-6,314 \cdot 10^{-10}$	$5,053 \cdot 10^{-10}$	$5,053 \cdot 10^{-10}$
2	$-2,303 \cdot 10^{-9}$	$5,75 \cdot 10^{-9}$	$1,253 \cdot 10^{-9}$	$-8,64 \cdot 10^{-10}$	$-8,64 \cdot 10^{-10}$	$1,253 \cdot 10^{-9}$	$1,579 \cdot 10^{-10}$	$-3,097 \cdot 10^{-10}$	$1,579 \cdot 10^{-10}$	$-3,097 \cdot 10^{-10}$	$1,579 \cdot 10^{-10}$	$1,579 \cdot 10^{-10}$
3	$-5,118 \cdot 10^{-10}$	$2,75 \cdot 10^{-10}$	$7,167 \cdot 10^{-10}$	$-1,184 \cdot 10^{-10}$	$-1,184 \cdot 10^{-10}$	$7,167 \cdot 10^{-10}$	$2,535 \cdot 10^{-11}$	$-1,001 \cdot 10^{-10}$	$2,535 \cdot 10^{-11}$	$-1,001 \cdot 10^{-10}$	$2,53 \cdot 10^{-11}$	$2,53 \cdot 10^{-11}$
4	$-1,704 \cdot 10^{-10}$	$1,173 \cdot 10^{-10}$	$3,907 \cdot 10^{-10}$	$-2,655 \cdot 10^{-11}$	$-2,655 \cdot 10^{-11}$	$3,907 \cdot 10^{-10}$	$6,54 \cdot 10^{-12}$	$-4,061 \cdot 10^{-11}$	$6,54 \cdot 10^{-12}$	$-4,061 \cdot 10^{-11}$	$6,574 \cdot 10^{-12}$	$6,574 \cdot 10^{-12}$
5	$-7,093 \cdot 10^{-11}$	$5,56 \cdot 10^{-11}$	$1,003 \cdot 10^{-10}$	$-7,665 \cdot 10^{-12}$	$-7,665 \cdot 10^{-12}$	$1,003 \cdot 10^{-10}$	$2,1 \cdot 10^{-12}$	$-1,942 \cdot 10^{-11}$	$2,1 \cdot 10^{-12}$	$-1,942 \cdot 10^{-11}$	$2,084 \cdot 10^{-12}$	$2,084 \cdot 10^{-12}$
10	$-4,564 \cdot 10^{-12}$	$4,248 \cdot 10^{-12}$	$1,61 \cdot 10^{-11}$	$-1,58 \cdot 10^{-13}$	$-1,58 \cdot 10^{-13}$	$1,61 \cdot 10^{-11}$	$3,925 \cdot 10^{-14}$	$-1,739 \cdot 10^{-12}$	$3,925 \cdot 10^{-14}$	$-1,739 \cdot 10^{-12}$	$5,275 \cdot 10^{-14}$	$5,275 \cdot 10^{-14}$
20	$-4,6 \cdot 10^{-13}$	$2,71 \cdot 10^{-13}$	$5,177 \cdot 10^{-12}$	$-9,45 \cdot 10^{-14}$	$-9,45 \cdot 10^{-14}$	$5,177 \cdot 10^{-12}$	$8,75 \cdot 10^{-15}$	$-1,265 \cdot 10^{-13}$	$8,75 \cdot 10^{-15}$	$-1,265 \cdot 10^{-13}$	$5,75 \cdot 10^{-15}$	$5,75 \cdot 10^{-15}$

**Сводная таблица результатов расчета суммарных сил взаимодействия
двух атомов водорода при их сближении за период обращения электронов**

Относительное расстояние между орбитами электронов $\frac{d}{r}$	Среднее значение $F_s = \frac{\sum \sum F_{s_i}}{4}$ за период синхронного обращения электронов								
	Орбиты электронов расположены на одной линии						Орбиты электронов перпендикулярны друг к другу, одна из которых в плоскости чертежа		
	$\varphi=0^\circ$ → →	$\varphi=90^\circ$ → →	$\varphi=180^\circ$ → →	$\varphi=0^\circ$ → ←	$\varphi=90^\circ$ → ←	$\varphi=180^\circ$ → ←	$\varphi=0^\circ$ → →	$\varphi=90^\circ$ → →	$\varphi=180^\circ$ → →
-0,95	4,54·10 ⁻⁶	4,579·10 ⁻⁶	2,296·10 ⁻⁶	4,58·10 ⁻⁶	4,579·10 ⁻⁶	2,288·10 ⁻⁶	1,465·10 ⁻⁶	4,579·10 ⁻⁶	4,593·10 ⁻⁶
-0,9	1,125·10 ⁻⁶	1,13·10 ⁻⁶	1,148·10 ⁻⁶	1,132·10 ⁻⁶	1,13·10 ⁻⁶	1,141·10 ⁻⁶	1,13·10 ⁻⁶	1,13·10 ⁻⁶	1,146·10 ⁻⁶
-0,8	1,759·10 ⁻⁷	2,702·10 ⁻⁷	2,893·10 ⁻⁷	2,732·10 ⁻⁷	2,702·10 ⁻⁷	2,835·10 ⁻⁷	3,294·10 ⁻⁷	2,702·10 ⁻⁷	2,880·10 ⁻⁷
-0,7	1,112·10 ⁻⁷	1,093·10 ⁻⁷	1,340·10 ⁻⁷	1,163·10 ⁻⁷	1,093·10 ⁻⁷	1,292·10 ⁻⁷	1,15·10 ⁻⁷	1,124·10 ⁻⁷	1,329·10 ⁻⁷
-0,6	5,818·10 ⁻⁸	5,826·10 ⁻⁸	8,344·10 ⁻⁸	6,212·10 ⁻⁸	5,826·10 ⁻⁸	7,950·10 ⁻⁸	6,115·10 ⁻⁸	5,826·10 ⁻⁸	8,246·10 ⁻⁸
-0,5	3,447·10 ⁻⁸	3,390·10 ⁻⁸	6,539·10 ⁻⁸	3,774·10 ⁻⁸	3,390·10 ⁻⁸	6,212·10 ⁻⁸	3,687·10 ⁻⁸	3,390·10 ⁻⁸	8,750·10 ⁻⁸
-0,4	2,213·10 ⁻⁸	2,118·10 ⁻⁸	6,485·10 ⁻⁸	2,487·10 ⁻⁸	2,118·10 ⁻⁸	6,211·10 ⁻⁸	2,410·10 ⁻⁸	2,118·10 ⁻⁸	6,408·10 ⁻⁸
-0,3	1,503·10 ⁻⁸	1,380·10 ⁻⁸	8,478·10 ⁻⁸	1,735·10 ⁻⁸	1,380·10 ⁻⁸	8,247·10 ⁻⁸	1,664·10 ⁻⁸	1,380·10 ⁻⁸	8,409·10 ⁻⁸
-0,2	1,066·10 ⁻⁸	9,454·10 ⁻⁹	1,595·10 ⁻⁷	1,262·10 ⁻⁸	9,454·10 ⁻⁹	1,575·10 ⁻⁷	1,201·10 ⁻⁸	9,444·10 ⁻⁹	1,589·10 ⁻⁷
-0,1	7,808·10 ⁻⁹	8,029·10 ⁻⁹	5,872·10 ⁻⁷	9,482·10 ⁻⁹	8,029·10 ⁻⁹	5,855·10 ⁻⁷	8,947·10 ⁻⁹	5,114·10 ⁻⁹	5,866·10 ⁻⁷
0	5,875·10 ⁻⁹	4,727·10 ⁻⁹	∞	7,412·10 ⁻⁹	4,727·10 ⁻⁹	∞	6,833·10 ⁻⁹	4,724·10 ⁻⁹	∞
0,1	4,516·10 ⁻⁹	3,447·10 ⁻⁹	-5,67·10 ⁻⁷	5,756·10 ⁻⁹	3,447·10 ⁻⁹	-5,682·10 ⁻⁷	5,335·10 ⁻⁹	3,577·10 ⁻⁹	-5,673·10 ⁻⁷
0,2	3,543·10 ⁻⁹	2,539·10 ⁻⁹	-1,370·10 ⁻⁷	4,617·10 ⁻⁹	2,539·10 ⁻⁹	-1,381·10 ⁻⁷	3,219·10 ⁻⁹	2,558·10 ⁻⁹	-1,347·10 ⁻⁷
0,3	2,820·10 ⁻⁹	1,926·10 ⁻⁹	-5,827·10 ⁻⁸	3,757·10 ⁻⁹	1,926·10 ⁻⁹	-5,92·10 ⁻⁸	3,418·10 ⁻⁹	1,927·10 ⁻⁹	-5,861·10 ⁻⁸
0,4	2,275·10 ⁻⁹	1,583·10 ⁻⁹	-3,115·10 ⁻⁸	3,093·10 ⁻⁹	1,583·10 ⁻⁹	-3,197·10 ⁻⁸	2,793·10 ⁻⁹	1,470·10 ⁻⁹	-3,145·10 ⁻⁸
0,6	1,538·10 ⁻⁹	8,861·10 ⁻¹⁰	-1,237·10 ⁻⁸	2,17·10 ⁻⁹	8,861·10 ⁻¹⁰	-1,300·10 ⁻⁸	1,927·10 ⁻⁹	8,868·10 ⁻¹⁰	-1,256·10 ⁻⁸
0,8	1,078·10 ⁻⁹	5,564·10 ⁻¹⁰	-6,192·10 ⁻⁹	1,571·10 ⁻⁹	5,564·10 ⁻¹⁰	-6,686·10 ⁻⁹	1,378·10 ⁻⁹	5,312·10 ⁻¹⁰	-6,387·10 ⁻⁹
1,0	7,824·10 ⁻¹⁰	3,619·10 ⁻¹⁰	-3,522·10 ⁻⁹	1,176·10 ⁻⁹	3,619·10 ⁻¹⁰	-3,918·10 ⁻⁹	1,015·10 ⁻⁹	3,617·10 ⁻¹⁰	-3,685·10 ⁻⁹
1,5	3,885·10 ⁻¹⁰	1,34·10 ⁻¹⁰	-1,186·10 ⁻⁹	6,193·10 ⁻¹⁰	1,34·10 ⁻¹⁰	-1,417·10 ⁻⁹	5,210·10 ⁻¹⁰	1,387·10 ⁻¹⁰	-1,286·10 ⁻⁹
2	2,150·10 ⁻¹⁰	6,074·10 ⁻¹¹	-5,197·10 ⁻¹⁰	3,588·10 ⁻¹⁰	6,074·10 ⁻¹¹	-6,634·10 ⁻¹⁰	2,954·10 ⁻¹⁰	6,084·10 ⁻¹¹	-5,828·10 ⁻⁹
3	8,245·10 ⁻¹¹	1,564·10 ⁻¹¹	-1,502·10 ⁻¹⁰	1,459·10 ⁻¹⁰	1,564·10 ⁻¹¹	-1,885·10 ⁻¹⁰	1,169·10 ⁻¹⁰	1,560·10 ⁻¹¹	-1,794·10 ⁻¹⁰
4	3,839·10 ⁻¹¹	5,085·10 ⁻¹²	-6,002·10 ⁻¹¹	6,975·10 ⁻¹¹	5,085·10 ⁻¹²	-9,138·10 ⁻¹¹	5,525·10 ⁻¹¹	5,076·10 ⁻¹²	-7,435·10 ⁻¹¹
5	2,000·10 ⁻¹¹	1,653·10 ⁻¹²	-8,984·10 ⁻¹¹	3,78·10 ⁻¹¹	1,653·10 ⁻¹²	-4,562·10 ⁻¹¹	2,955·10 ⁻¹¹	2,006·10 ⁻¹²	-3,672·10 ⁻¹¹
10	2,248·10 ⁻¹²	2,5·10 ⁻¹⁴	-2,502·10 ⁻¹¹	4,447·10 ⁻¹²	2,5·10 ⁻¹⁴	-4,702·10 ⁻¹²	3,307·10 ⁻¹²	7,35·10 ⁻¹⁴	-3,689·10 ⁻¹²
20	1,36·10 ⁻¹³	1,15·10 ⁻¹⁴	-2,612·10 ⁻¹³	2,745·10 ⁻¹³	1,15·10 ⁻¹⁴	-3,997·10 ⁻¹³	2,905·10 ⁻¹³	8,0·10 ⁻¹⁵	-3,057·10 ⁻¹³

Для понимания отличительной особенности этих ситуаций от остальных возможных взаимоотношений атомов необходимо вникнуть в вопросы магнитной гидродинамики – раздел физики, изучающий движение электропроводящих жидкостей и газов в магнитном поле [1].

Из электродинамики известно, что в проводнике, если он движется в магнитном поле, пересекая силовые линии, возникает электродвижущая сила, приводящая при определенных условиях (а практически почти всегда) к появлению электрических токов. При этом совершенно безразлично, что это за проводник: рамка из медного провода, массивное проводящее тело, проводящая жидкость или газ (плазма) или отдельный электрический заряд, движение которого уже представляет электрический ток.

С другой стороны известно, что на проводник с током в магнитном поле действует сила, приводящая проводник в движение, если он не закреплен. А если проводящая среда жидкая или газообразная и ее частицы могут перемещаться относительно свободно, то их вообще не закрепишь. И тут начинают проявляться законы гидродинамики. Кажется, все просто. На самом деле законы движения проводящей среды в магнитном поле не такие простые и очевидные. Встречается много неожиданных эффектов и нетривиальных объяснений физических явлений.

На первый взгляд кажется, что законы магнитной гидродинамики можно применить только к МГД-процессам в земной лаборатории, но это не так.

МГД-явления в природе не менее распространены и обычны, чем, скажем, ядерные реакции внутри звезд, вращение планет или излучение электромагнитных волн.

Дело в том, что почти все вещество Вселенной находится в четвертом агрегатном состоянии – в состоянии плазмы. Плазма – это газ, у которого атомы полностью или частично ионизированы, т. е. от них оторваны электроны (один или несколько).

Однако космическая плазма – отнюдь не единственная среда, представляющая интерес для магнитной гидродинамики. Молния, электрическая дуга, неоновая лампа, пламя – всюду мы сталкиваемся с плазмой. Поэтому магнитная гидродинамика занимается и жидкими металлами, и так называемой низкотемпературной плазмой (получаемой в частности при сжигании топлива и имеющей температуру в несколько тысяч градусов), и намагничивающимися жидкостями, и другими, порой весьма экзотическими средами. К таким экзотическим средам, вероятно, можно отнести состояние движения электронов в атоме на основе выдвигаемой концепции вращения фотонных оболочек вокруг этих электронов, представляющих собой электромагнитное поле.

Для такой системы также просматривается состояние принципа МГД-динамо, но уже на микроуровне с проявлением состояния самовозбуждения при взаимодействии отдельных атомов и формировании химических связей.

Принято говорить, что МГД-процессы описываются совокупностью уравнений гидродинамики и уравнений Максвелла. Вместо того чтобы разбираться в сложностях этих уравнений, пытаемся понять главное в самих процессах, рассматривая это на конкретных «идеальных экспериментах».

В магнитной термодинамике термин «динамо» используется несколько необычно. Проблемой «МГД-динамо» называют проблему самовозбуждения магнитного поля в телах с однородно распределенными электрической проводимостью и магнитной проницаемостью, приводящее к индуцированию токов и полей и вмораживания их. Вмороженность описывается с помощью анализа уравнений Максвелла, дополненных законом Ома в виде

$$j = \sigma(\vec{E} + \vec{v} \cdot \vec{B}). \quad (4.141)$$

В настоящее время предложен ряд моделей и развиты очень сложные и изящные математические теории. Попробуем воспользоваться результатами этих разработок, но применительно к микрообъектам, каковыми являются атомы и их совокупности молекулы.

Модель Штеенбека

В основе этой модели самовозбуждения лежит идея (впервые предложенная Паркером) о том, что турбулентное движение при определенных условиях способно возбуждать электрическое поле, параллельное магнитному ($\vec{E} = \alpha \vec{B}$) [1]. Для этого турбулентность должна иметь винтовую асимметрию, т. е. в достаточно больших областях в течении должно преобладать либо правовинтовое, либо левовинтовое движение. Математически это требование выражается в том, что скалярное произведение пульсаций скорости \vec{v} и их ротора $\text{rot} \vec{v}$ при усреднении во времени должно иметь в областях достаточно больших размеров значение, отличающееся от нуля, и при этом быть всюду в них либо положительным, либо отрицательным. В первом случае в области преобладает правовинтовое движение, во втором – левовинтовое.

Величина $\vec{v} \cdot \text{rot} \vec{v}$ входит сомножителем в коэффициент α . Следовательно, при правовинтовом движении \vec{E} параллельно \vec{B} ; при отрицательном $\vec{v} \cdot \text{rot} \vec{v}$ векторы \vec{E} и \vec{B} антипараллельны.

В Институте физики АН Латвийской ССР был проведен эксперимент, подтверждающий этот эффект и по букве, обозначающей коэффициент, получивший официальное название α -эффекта [1]. Наглядной моделью, объясняющей общий механизм самовозбуждения и поддержания поля, являются два связанных вместе взаимно перпендикулярных тора (рис. 4.41).

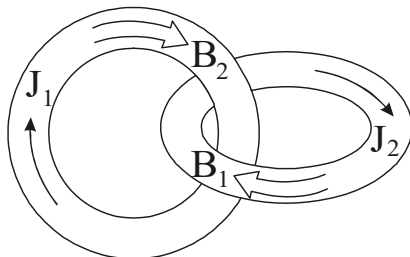


Рис. 4.41. Взаимоподдерживающие, взаимовозбуждающие торы; внутри каждого из них полем \vec{B} обуславливается ток J посредством поля $\vec{v} \cdot \vec{B}$ [1]

Ток первого тора поддерживает по обычным законам поле второго тора и наоборот, поэтому и индексы на рис. 4.41 проставлены так, чтобы проиллюстрировать эту причинную взаимосвязь. Внутри каждого из них полем \vec{B} обуславливается ток J посредством поля $(\vec{v} \cdot \vec{B})$.

Легко видеть, что взаимодействие основного (первичного) течения (векторы \vec{v}) с вторичным (индуцированным) полем \vec{B} приводит к возникновению электрического поля $\vec{J} = \sigma(\vec{v} \cdot \vec{B})$, которое параллельно первичному полю \vec{B} .

Таким образом, при перекрытии орбит вращения электронов в виде взаимоподдерживающих торов, под действием дополнительного магнитного поля, появляющегося в каждом из торов, и соответственно возникновения индукционного тока за счет увеличения скорости вращения электронов по орбитам должно усиливаться взаимодействие атомов и появляться более прочная связь между двумя атомами в молекуле. В связи с этим для образования молекулы водорода при взаимодействии двух атомов водорода наиболее предпочтительна ситуация синхронного движения электронов атомов водорода, расположенных на перпендикулярных друг к другу орбитах, одна из которых в плоскости чертежа и в условиях перекрытия их площадей, причем начальный сдвиг по фазе движения электронов должен быть 0° (табл. 4.24). Вероятно, в этой конфигурации и объединяются два атома водорода в молекулу в большинстве случаев, хотя возможны и другие ситуации. Казалось бы, что в этой ситуации должно произойти полное сближение атомов, т. е. до соединения протонов ядер и электронов противоположных атомов. Однако этого не происходит.

Почему не происходит бесконечное приближение атомов друг с другом в условиях перекрытия их орбит?

Это не происходит, потому что:

а) в разные четверть периоды вращения электронов они последовательно испытывают то силы притяжения с ядром, то силы отталкивания, хотя в целом за период преобладают силы притяжения (табл. 4.24, 4.26);

б) величина расстояния между атомами регулируется температурой вещества, которая, как будет показано далее, определяется объемной концентрацией фотонной энергии вокруг валентных электронов. Как только температура снижается и излучаются фотоны, атомы автоматически приближаются друг к другу на меньшее расстояние, так как уменьшается сила противодействия электромагнитного поля фотонов, вращающихся вокруг электронов, приближению отрицательно заряженного электрона к положительно заряженному протону ядра. И наоборот, с повышением внешней температуры тела происходит «поглощение» фотонов в виде «адсорбции» их на электронах и вращения их вокруг электронов по своим орбитам, что способствует удалению электрона от протона ядра и переход на новый уровень их равновесного сосуществования.

Атом водорода может взаимодействовать как в жесткой связи с другим атомом путем перекрытия орбит вращения электронов, так и на некотором расстоянии. Вероятно, второе состояние и представляет собой водородную связь, при этом соотношение плоскостей орбит электронов взаимодействующих атомов

может быть различным в зависимости от конкретных условий формирования каркаса структуры многоатомных молекул (табл. 4.3, 4.7, 4.8, 4.10, 4.14, 4.16, 4.23, 4.25).

Следует иметь в виду, что перекрывание орбит вращения электронов двух атомов водорода не эквивалентно понятию перекрывания областей с максимальной плотностью вероятности нахождения электронов на орбитах в атомах водорода.

Таким образом, методы классической физики, в противоположность общепринятому мнению, позволяют рассматривать на уровне взаимодействия электромагнитных сил возможности возникновения молекулы водорода при сближении двух атомов водорода при различных взаимоположениях плоскостей орбит электронов, и это дает основание подойти критически к расчетам по Гайтлеру – Лондону на основе квантово-механического описания формирования молекулы водорода и, в связи с этим, вообще критически рассматривать реальные возможности формирования молекулярных связей по принципу перекрытия электронных облаков с максимальной вероятностью плотности их нахождения и физический смысл отрицательного и положительного значения функции ψ . Положительное значение функции ψ при решении уравнения Шредингера может означать пучность положительной полумассы фотона и узел отрицательной полумассы фотона в полуволне стоячей фотонной волны при вращении фотона вокруг электрона или нахождение положительных полумасс фотонов в интерференционном максимуме фотонного волнового пакета. В этом полупериоде стоячей фотонной волны ближе к электрону расположены отрицательные полумассы фотонов. Отрицательное значение функции ψ при решении уравнения Шредингера может означать пучность отрицательной полумассы фотона и узел положительной полумассы в полуволне стоячей фотонной волны при вращении фотона вокруг электрона или нахождении отрицательных полумасс фотонов в интерференционном максимуме фотонного волнового пакета. В этом полупериоде стоячей фотонной волны ближе к электрону расположены положительные полумассы фотонов. Поэтому лучшее взаимодействие атомов происходит в том случае, когда вокруг них синхронно вращаются валентные электроны, причем в тот момент, когда электрон первого атома пролетает между атомами, то для формирования сил притяжения между атомами необходимо, чтобы вокруг этого электрона была пучность из отрицательной полумассы фотона в фотонной стоячей волне (отрицательная функция ψ).

Через полпериода вращения электронов между ядрами атомов будет находиться электрон второго атома, и для устойчивого формирования сил притяжения между атомами необходимо, чтобы вокруг этого электрона в этот момент также была пучность отрицательной полумассы в фотонной стоячей волне (отрицательная функция ψ).

Следовательно, на основе синхронного движения по орбитам валентных электронов двух соседних атомов с учетом равенства формирования вокруг них фотонных стоячих волн и особенностей взаимного расположения их пучностей (интерференционных максимумов фотонных волновых пакетов) и образуется химическая связь между атомами.

4.3. Обоснование критериев синхронного взаимодействия двух атомов

Из вышеописанного следует, что в формировании связи между атомами важную роль играют фотоны на внешней орбитали, вращаясь вокруг электрона, и фотоны (гамма-кванты), вращающиеся вокруг нуклонов в ядре атома. Если проанализировать развернутую картину вращения разноименно заряженных полумасс фотона вокруг электрона в пределах одного оборота электрона вокруг ядра (рис. 4.42), то видно, что наиболее благоприятные условия взаимодействия двух атомов проявляются в том случае, когда электроны двух атомов двигаются синхронно и находятся на орбитах идентично, т. е. со сдвигом по фазе 0° , и в момент нахождения одного из электронов на линии между атомами вокруг электрона формируется пучность отрицательной полумассы стоячей фотонной волны (отрицательная функция ψ). В этот момент вокруг протонов ядер обоих атомов формируются пучности положительных полумасс фотонов в стоячей фотонной волне (положительная функция ψ), т. е. взаимодействие электронов с отрицательными фотонными волновыми функциями ψ с протонами ядер атомов через их положительные фотонные волновые функции ψ .

В этом случае проявляется наиболее тесная и четкая взаимосвязь цепочки зарядов между атомами через следующую последовательность заряженных частиц $p_1(+) \rightarrow \Phi_{p_1}(-) \rightarrow \Phi_{p_1}(+) \rightarrow \Phi_{e_1}(-) \rightarrow \Phi_{e_1}(+) \rightarrow e_1(-) \rightarrow \Phi_{p_2}(+) \rightarrow : \rightarrow \Phi_{p_2}(-) \rightarrow p_2(+)$ (рис. 4.42а).

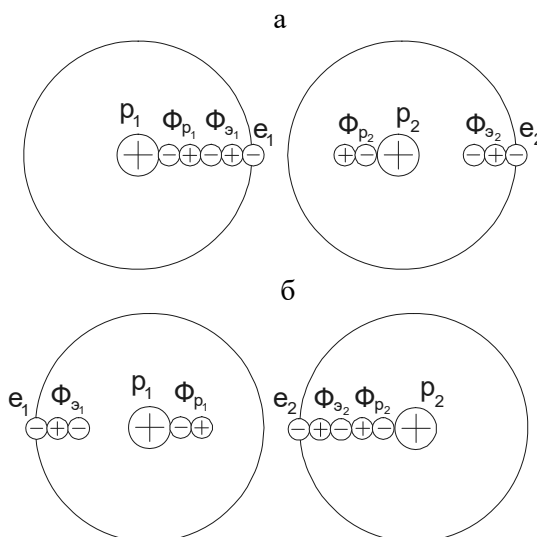


Рис. 4.42. Последовательность расположения цепочки зарядов электронов, протонов и фотонов при взаимодействии двух атомов водорода и образовании молекулы H_2

Через полпериода синхронного вращения электронов такая же связь осуществляется через электрон второго атома, т. е.

$p_1(+) \rightarrow \Phi_{p_1}(-) \rightarrow \Phi_{p_1}(+) \rightarrow e_2(-) \rightarrow \Phi_{e_2}(+) \rightarrow \Phi_{e_2}(-) \rightarrow \Phi_{p_2}(+) \rightarrow \Phi_{p_2}(-) \rightarrow p_2(+)$ (рис. 4.42б).

В связи с этим важное значение для формирования прочной химической связи двух атомов имеет не только синхронное обращение двух электронов соседних атомов, но и равенство количества стоячих фотонных волн, укладывающихся на длинах орбит электронов при вращении их вокруг своих ядер. Следовательно, для формирования устойчивой химической связи между двумя атомами необходимо, чтобы валентные электроны, через которые взаимодействуют эти атомы, вращались синхронно, т. е. с одинаковыми периодами обращения вокруг своих ядер, независимо от радиусов вращения этих электронов, и на длинах орбит электронов образовывалось одинаковое число (n_λ) стоячих фотонных волн. Если два взаимодействующих атома представляют один и тот же химический элемент, то радиусы вращения валентных электронов взаимодействующих атомов будут одинаковы и состояние синхронизма достигается очень просто. Если же взаимодействуют и вступают в химическую реакцию атомы разных химических элементов, то для образования между ними устойчивой химической связи необходимо одновременное соблюдение двух вышеуказанных условий.

Математически соблюдение этих условий выглядит следующим образом.

Из условия равенства периодов обращения вокруг ядер взаимодействующих валентных электронов $T_{\omega_1} = T_{\omega_2}$ следует, что

$$\frac{2\pi r_1}{v_1} = \frac{2\pi r_2}{v_2}, \quad (4.142)$$

т. е.

$$\frac{r_1}{v_1} = \frac{r_2}{v_2}, \quad (4.143)$$

где r_1 , v_1 – радиус и скорость движения по орбите валентного электрона первого атома; r_2 , v_2 – соответственно те же параметры второго атома.

Второе условие синхронизма и образования химической связи $n_{\lambda_1} = n_{\lambda_2}$, т. е. с учетом выражения (3.81)

$$\frac{2\pi r_1}{v_1} v_1 = \frac{2\pi r_2}{v_2} v_2. \quad (4.144)$$

Но если $\frac{r_1}{v_1} = \frac{r_2}{v_2}$, то $v_1 = v_2$, где ν_1 , ν_2 – частоты фотонов на последних фотонных орбиталях, вращающихся вокруг валентных электронов, через которые происходит химическая связь атомов.

Параметры r и v электрона каждого атома взаимосвязаны, причем соотношение между радиусом r и скоростью v вращения электрона вокруг ядра атома регулируется для каждого атома элемента из условия равенства силы электрического притяжения этого валентного электрона ядром атома и возникающей в результате этого центробежной силы вращения электрона, т. е.

$$\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = \frac{m_e v^2}{r}, \quad (4.145)$$

откуда

$$r = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 m_e v^2} = A \cdot \frac{Z}{v^2}, \quad (4.146)$$

здесь m_e и e – масса заряда электрона; ϵ_0 – электрическая постоянная; Z – заряд ядра атома.

$$A = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e} = 2,53 \cdot 10^{-2}.$$

Если воспользоваться условием $n_{\lambda_1} = n_{\lambda_2}$, т. е. уравнением (4.144), и подставить выражения r_1 и r_2 из (4.146), то получим

$$\frac{AZ_1}{v_1^3} v_1 = \frac{AZ_2}{v_2^3} v_2 \quad (4.147)$$

или

$$\frac{Z_1}{v_1^3} v_1 = \frac{Z_2}{v_2^3} v_2. \quad (4.148)$$

Можно из (4.145) выразить

$$v = \sqrt{\frac{AZ}{r}}, \quad (4.149)$$

тогда после подстановки в (4.147) получим

$$\frac{r_1^{3/2}}{\sqrt{Z_1}} v_1 = \frac{r_2^{3/2}}{\sqrt{Z_2}} v_2 \quad (4.150)$$

или

$$\frac{r_1^{3/2}}{\sqrt{Z_1} \cdot \lambda_1} = \frac{r_2^{3/2}}{\sqrt{Z_2} \cdot \lambda_2}. \quad (4.151)$$

Таким образом, при равенстве частот или длин волн фотонов в пределах допустимой погрешности для двух разных атомов возможно образование между ними химической связи, причем в момент образования химической связи эти фотоны с одинаковыми или очень близкими частотами должны быть внешними на фотонных орбиталях валентных электронов. Например, статистическая обработка результатов оценки среднего расстояния между атомами различных химических элементов в органических молекулах разного строения по данным [11] показала (рис. 4.43, табл. 4.30), что наименьшее вероятное значение расстояния характерно между атомами углерода и азота ($l = 1,34 \text{ \AA}$), а наибольшее – между атомами углерода и брома ($1,9 \text{ \AA}$).

Вероятный диапазон расстояний между атомами в органических соединениях по данным [11]

	Вид связи	Вероятные значения расстояния между атомами, соответствующие максимумам на кривых распределения, Å	Диапазон изменения расстояния между атомами, Å
Цепочка одновалентная	C-C	1,51	1,45-1,57
	C-N	I 1,34 II 1,48	1,31-1,37 1,42-1,51
	C-O	1,40	1,23-1,48
	C-S	1,78	1,71-1,83
	C-Cl	1,73	1,68-1,81
	C-Br	1,90	1,82-2,05
Кольцо, одновалентная связь	C-N	I 1,36 II 1,46	1,32-1,40 1,42-1,50
	C-O	1,42	1,35-1,48
	C-S	1,76	1,69-1,85
Цепочка, двухвалентная связь	C-C	1,35	1,31-1,39
	C-N	I 1,28 II 1,355	1,25-1,31 1,34-1,37
	C-O	1,22	1,18-1,26
	C-S	1,67	1,62-1,71
Кольцо, двухвалентная связь	C-C	1,385	1,32-1,44
	C-N	1,31	1,29-1,37
	C-O	1,22	1,19-1,245

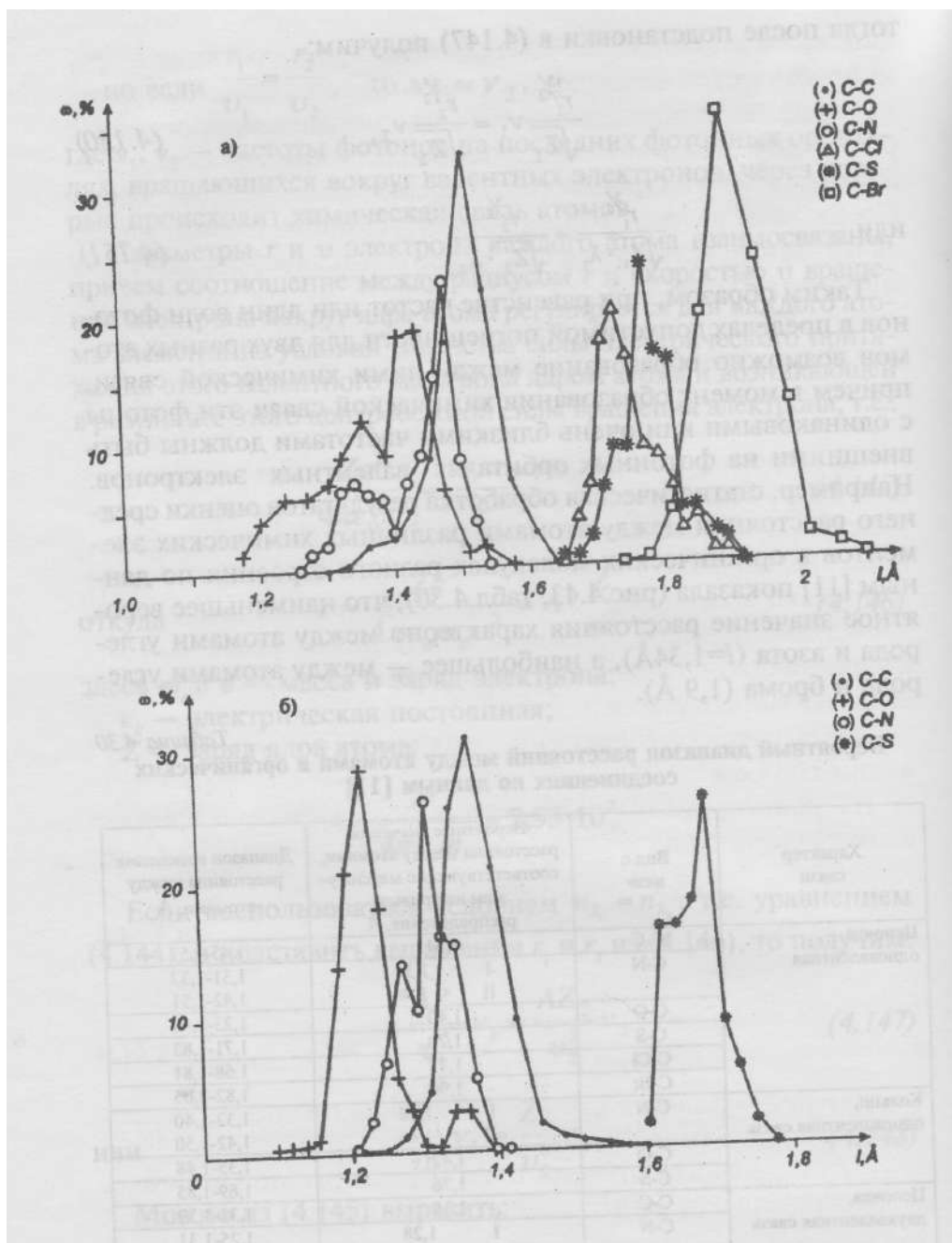


Рис. 4.43. Кривые распределения расстояния между атомами органических молекул для одинарной связи в цепочке (а) и двойной связи совместно в цепочке и кольце (б)

Таблица 4.31

**Сравнение спектров химических элементов с углеродом
по эквивалентным длинам волн**

$\frac{C}{Br}, \text{\AA}$	$\frac{C}{S}, \text{\AA}$	$\frac{C}{Cl}, \text{\AA}$	$\frac{C}{N}, \text{\AA}$	$\frac{C}{O}, \text{\AA}$
10753,98 (10754,13)			13581,35 (13581,33)	18021,06 (18021,21)
9078,278 (9078,64)		7952,188 (7952,49)		12569,04 (12570,04)
8335,149 (8334,7)			7122,196 (7122,98)	10753,985 (10753,53)
6671,840 (6672,15)			6653,946 (6653,460)	7987,889 (7987,33)
6578,772 (6579,14)	6413,553 (6413,89)		6242,699 (6242,41)	
6337,196 (6336,56)	6397,979 (6397,87)	6397,979 (6398,64)	6215,850 (6215,43)	
6335,704 (6335,48)	6042,457 (6041,93)	6342,315 (6341,7)	5940,100 (5940,24)	
5950,040 (5950,32)	5996,057 (5996,14)	6094,298 (6094,65)	5616,59 (5616,54)	5159,920 (5160,02)
5039,069 (5038,74)	5819,499 (5819,14)	4771,747 (4771,09)	5551,589 (5551,92)	5018,068 (5018,78)
4775,907 (4775,2)	5526,833 (5526,15)	4209,710 (4209,68)	5543,817 (5543,47)	4943,576 (4943,06)
4766,676 (4766,00)	4991,408 (4991,90)	3833,347 (3833,40)	5526,833 (5526,24)	4890,645 (4890,93)
4742,570 (4742,64)	4464,778 (4464,43)	3705,557 (3705,45)	5023,849 (5023,05)	4783,795 (4783,43)
4735,165 (4735,41)	4463,886 (4463,58)		4991,24 (4991,408)	4467,309 (4467,88)
4477,472 (4477,72)	4269,02 (4269,72)		4348,966 (4348,36)	4466,476 (4466,28)
4223,360; 4223,15 (4223,89)	4153,374 (4153,10)		4082,415 (4082,27)	4348,966 (4349,44)
3997,136 (3997,23)	4028,355 (4028,79)		4073,327 (4073,04)	4222,446 (4222,78)
3986,879 (3986,54)			1751,827 (1751,75)	4153,374 (4153,31)

$\frac{C}{Br}, \text{\AA}$	$\frac{C}{S}, \text{\AA}$	$\frac{C}{Cl}, \text{\AA}$	$\frac{C}{N}, \text{\AA}$	$\frac{C}{O}, \text{\AA}$
<u>3828,849</u> (3828,50)	<u>3595,456</u> (3595,99)		<u>1494,532</u> (1494,67)	<u>4072,643</u> (4072,16)
<u>3793,678</u> (3794,03)	<u>1472,231</u> (1472,99)		<u>1492,737</u> (1492,82)	<u>3961,403</u> (3961,59)
<u>3735,776</u> (3735,80)			<u>1310,637</u> (1310,55)	<u>3762,25</u> (3762,63)
<u>2967,214</u> (2967,21)	<u>1194,063</u> (1194,02)		<u>1188,883</u> (1188,01)	<u>3757,048</u> (3757,21)
<u>1313,464;1313,38</u> (1313,5)				<u>3729,026</u> (3729,03)
<u>1279,89;1279,498</u> (1279,48)				<u>3712,035</u> (3712,74)
<u>1266,415;1266,27</u> (1266,20)				<u>1763,909</u> (1763,22)
<u>1261,552;1261,425</u> (1261,66)				<u>1355,844</u> (1355,60)
<u>1189,63;1189,447</u> (1189,50)				
<u>1189,248</u> (1189,28)				

Сопоставление спектров излучения различных пар элементов между собой показывает, что для каждой пары этих элементов в их спектрах находится определенное количество длин волн, практически одинаковых или очень близких. В таблице 4.31 дано сопоставление длин волн электромагнитного излучения атома углерода с атомами Br, S, Cl, N и O. В таблицу включены по данным [18, 19] только те пары волн, которые отличаются друг от друга не более чем на 0,01%. Если исключить из рассмотрения наиболее высокие значения длин волн, излучение которых соответствует повышенным температурам, то просматривается некоторая закономерность в связи расстояния между атомами и верхним значением длин волн. Чем меньше расстояние между атомами (табл. 4.30), тем меньше верхнее значение длины излучаемой волны (табл. 4.31). Если исходить из того, что взаимодействующие атомы контактируют между собой через фотоны одинаковой или очень близкой длины волны $\lambda_1 \approx \lambda_2$, то тогда можно оценить соотношение радиусов взаимодействующих атомов в соответствии с уравнением (4.151) из условия

$$\frac{r_1}{r_2} = \sqrt[3]{\frac{Z_1}{Z_2}}, \quad (4.152)$$

Например, $\frac{r_C}{r_N} = \sqrt[3]{\frac{6}{7}} = 0,95$, $\frac{r_C}{r_O} = \sqrt[3]{\frac{6}{8}} = 0,909$, $\frac{r_C}{r_S} = \sqrt[3]{\frac{6}{16}} = 0,723$,

$$\frac{r_C}{r_{Cl}} = \sqrt[3]{\frac{6}{17}} = 0,709, \quad \frac{r_C}{r_{Br}} = \sqrt[3]{\frac{6}{35}} = 0,558.$$

Из условия (4.151) следует, что для синхронизма электронов двух атомов и образования между ними устойчивой химической связи необязательно абсолютное равенство $\nu_1 = \nu_2$ (или $\lambda_1 = \lambda_2$) фотонов на внешних орбиталях вокруг валентных электронов этих атомов. Для этого достаточно соблюдения последних условий (4.150) или (4.151), при которых величины ν_1 и ν_2 (или λ_1 и λ_2) могут несколько отличаться, но различие между ними не должно быть существенным. Если в первом приближении принять, что радиус атома углерода остается неизменным при взаимодействии с разными атомами других элементов, то можно примерно оценить соотношение между длинами волн фотонов валентных электронов этих элементов и длиной волны фотона атома углерода.

Примем $r_C = \frac{l_{C-C}}{2} = \frac{1,51}{2} = 0,755 \text{ \AA}$, а $r_X = l_{C-X} - r_C$, то для связи C-N, с учетом

$$Z_C = 6, \quad Z_N = 7, \quad l_{C-N} = 1,34 \text{ \AA}, \quad r_N = 0,585 \text{ \AA}, \quad \frac{\lambda_N}{\lambda_C} = \sqrt{\frac{Z_C \cdot r_N^3}{Z_N \cdot r_C^3}} = 0,6314.$$

Для связи C-O, при $Z_O = 8$, $l_{C-O} = 1,4 \text{ \AA}$, $r_O = 0,645 \text{ \AA}$, $\frac{\lambda_O}{\lambda_C} = \sqrt{\frac{Z_C \cdot r_O^3}{Z_O \cdot r_C^3}} = 0,684$.

Для связи C-S, при $Z_S = 16$, $l_{C-S} = 1,78 \text{ \AA}$, $r_S = 1,025 \text{ \AA}$, $\frac{\lambda_S}{\lambda_C} = \sqrt{\frac{Z_C \cdot r_S^3}{Z_S \cdot r_C^3}} = 0,969$.

Для связи C-Cl, при $Z_{Cl} = 17$, $l_{C-Cl} = 1,73 \text{ \AA}$, $r_{Cl} = 0,975 \text{ \AA}$,

$$\frac{\lambda_{Cl}}{\lambda_C} = \sqrt{\frac{Z_C \cdot r_{Cl}^3}{Z_{Cl} \cdot r_C^3}} = 0,872.$$

Для связи C-Br, при $Z_{Br} = 35$, $l_{C-Br} = 1,9 \text{ \AA}$, $r_{Br} = 1,145 \text{ \AA}$,

$$\frac{\lambda_{Br}}{\lambda_C} = \sqrt{\frac{Z_C \cdot r_{Br}^3}{Z_{Br} \cdot r_C^3}} = 0,773.$$

В действительности величина r_C при взаимодействии атома углерода с атомами других элементов также будет меняться и полученные значения отношений длин фотонных волн являются весьма приближенными.

Что же происходит при смешивании некоторых объемов химических веществ, которые могут вступить в реакцию? Атомы одного и того же химического элемента при постоянной температуре характеризуются некоторой вероятной скоростью и радиусом вращения валентного электрона, но эти величины могут изменяться в достаточно широких диапазонах. Поэтому при смешивании

некоторых объемов химических веществ будут вступать в первую очередь в химическое взаимодействие те атомы разных элементов, у которых соблюдаются условия синхронизма для образования химической связи. Другие же атомы, для которых эти условия не полностью соблюдаются, но имеются предпосылки для образования химической связи, сближаются друг с другом и выдавливают все фотоны в фотонных орбиталях до состояния равенства частот фотонов на внешних орбиталях вокруг валентных электронов атомов, и это приводит к выделению энергии в химической реакции и нагреву системы. Если же в каком-то из контактирующих атомов недостает на внешней фотонной орбитали фотонов нужной частоты и которые свойственны спектру поглощения – излучения для этого элемента, то эти фотоны могут поглощаться из окружающего пространства или вакуума, происходит охлаждение системы и достигается состояние синхронизма.

4.4. Влияние температуры и катализаторов на скорость химических реакций

Принято считать, что скорость химической реакции с ростом температуры всегда увеличивается [12]. При небольшом изменении температуры достаточно точным является правило Вант Гоффа: «повышение температуры на каждые 10° увеличивает скорость реакции в 1–4 раза».

$$\frac{v_{T+\Delta T}}{v_T} = \frac{K_{T+\Delta T}}{K_T} = \gamma^{\frac{\Delta T}{10}}, \quad (4.153)$$

где v_T и K_T – скорость и константа скорости реакции при температуре T ; $v_{T+\Delta T}$ и $K_{T+\Delta T}$ – скорость и константа скорости реакции при температуре, превышающей T на ΔT ; γ – коэффициент, принимающий значения от 2 до 4.

В широком интервале температур применимо уравнение Аррениуса.

$$k = Ae^{\frac{E}{RT}}, \quad (4.154)$$

где k – константа скорости реакции; e – основание натурального логарифма; R – универсальная газовая постоянная; T – абсолютная температура; A и E – постоянные.

Однако можно привести немало исключений из общего правила о росте скорости химических реакций с увеличением температуры.

Мы привыкли, что химические реакции лучше протекают при повышенных температурах и в бытовых условиях загрязненная посуда или руки отмываются с мылом лучше в горячей воде. Однако известно исключение из правила. Если посуда или руки запачканы рыбьим жиром, то при использовании для мытья горячей воды остается рыбий запах, т. е. полностью не удаляются молекулы рыбьего жира. В то же время в холодной воде результат другой – запаха рыбьего жира не остается. В рыбе, в отличие от всех других продуктов, имеются высокомолекулярные ненасыщенные жирные кислоты, которые, вероятно, могут вступать в химическую реакцию с поверхностно-активным веществом – мылом – при низких температурах, так как именно при таких низких температурах

имеет место резонанс колебания фотонов на орбитах внешних валентных электронов атомов этих кислот, ПАВ (мыла) и воды.

Считается, что уравнение Аррениуса объясняет очень важное для кинетики противоречие, которое состоит в том, что если бы любое столкновение частиц приводило к их взаимодействию, то все газовые реакции частиц происходили мгновенно, однако этого не происходит. Число столкновений молекул газа в 1 см^3 за 1 с при нормальных условиях (273,5 К, 101,3 кПа) равно примерно 10^{27} , т. е. в десять миллионов раз больше числа молекул, содержащихся в этом объеме газа $\left(\frac{6,022 \cdot 10^{23} \text{ молекул/моль}}{22,4 \cdot 10^3 \text{ мл/моль}} = 2,69 \cdot 10^{19} \text{ молекул/мл} \right)$. Реальные же газо-

вые реакции протекают в 10^{10} – 10^{29} раз медленнее. Для разрешения этого предложена теория активных соударений, в которой множитель A отождествляется с числом геометрически «удачных» столкновений.

Если принимать во внимание, что взаимодействие атомов при химической реакции происходит путем перекрывания их электронных облаков, которые занимают не менее $1/10$ сферы вокруг ядра атома, то вероятность встречи и перекрывания облаков должна была быть очень высокой. Но число геометрически «удачных» столкновений оказывается только на несколько порядков меньше, чем 10^{27} , и этого уменьшения скорости недостаточно для объяснения противоречия. В связи с этим считается, что полное объяснение таково: взаимодействие при геометрически «удачных» столкновениях происходит только в тех случаях, когда кинетическая энергия этих столкновений достаточно велика, т. е. столкновение «активно». Кинетическая энергия столкновения должна превышать так называемую энергию активации для того, чтобы столкнувшиеся молекулы могли образовать активированный переходный комплекс. Активизированный переходный комплекс представляет собой соединение, в котором ослаблены и удлинены связи, разрывающиеся в ходе данной реакции. Ослабление и удлинение связей требует затрат энергии. Эти затраты покрываются за счет кинетической энергии столкновения молекул реагентов, которая превращается в потенциальную энергию растяжения связей в переходном комплексе. Ход реакции поэтому иллюстрируют энергетической диаграммой, которая обычно называется диаграммой преодоления энергетического барьера. Высота этого барьера E – это энергия ак-

тивации, а фактор $e^{-\frac{E}{RT}}$ – это доля столкновений, энергия которых при данной температуре превышает E . Однако не только температура играет большую роль в скорости химических реакций. Наряду с температурой, огромную роль в химическом производстве играет катализ. Более 80% реакций в химической промышленности проводят с использованием катализаторов.

Катализ – это изменение скорости химических реакций под воздействием веществ, количество и природа которых после завершения реакции остаются такими же, как и до реакции.

Катализатор – это нерасходуемый реагент, увеличивающий скорость реакции. В отличие от катализаторов ингибиторы – вещества, препятствующие протеканию реакции, они расходуются в ходе реакции. Катализ бывает гомоген-

ным и гетерогенным. При гомогенном катализе катализатор вместе с реагентами образует раствор. Гетерогенный катализ происходит на поверхности раздела двух различных фаз. Любые каталитические реакции обладают следующими общими для них особенностями.

1. Катализатор не оказывает влияния на глубину протекания реакции, т. е. на ее равновесие и константу равновесия. Он лишь ускоряет реакцию.

2. Катализаторы по своему действию селективны, т. е. избирательны. Они ускоряют только одну или две-три из большого числа возможных реакций. Например, из этилового спирта можно получить следующие продукты: уксусный альдегид, этилуксусный эфир, бутadiен, ацетон, ацетилен, но каждая из реакций превращения этилового спирта проходит только в присутствии «своего» специфического катализатора.

3. По общепринятой версии ускоряющая роль катализатора объясняется образованием активированных переходных комплексов, в состав которых входит катализатор. Активированный комплекс, образованный с участием катализатора, имеет более низкую энергию активации, чем активированный комплекс, возникающий в отсутствие катализатора.

4. Скорость реакции в присутствии катализатора пропорциональна концентрации (гомогенный катализ) или поверхности (гетерогенный катализ) катализатора.

Неоценимая роль биологических катализаторов – ферментов. Почти все биологические реакции проходят в живой клетке с их участием. В природе известно более 2000 ферментов, которые почти одинаковы для растительных и животных клеток, для высших и простейших организмов. Ферменты отличаются от других катализаторов особенно большой ускоряющей способностью, селективностью и весьма сложным молекулярным ускорением.

Фермент обычно представляет собой клубок из больших белковых цепей – глобулу. В глобуле располагается активный центр, который часто содержит катион металла или водорода. Подошедшая из раствора к глобуле фермента молекула субстрата связывается и ориентируется ферментом так, чтобы активный центр мог осуществлять превращение субстрата. Соответствие между формами и размерами молекулы субстрата и активного центра является очень точным, как у ключа и замка. Ферменты осуществляют химическое превращение субстратов в несколько стадий с небольшими энергиями активации. Благодаря этому они повышают скорости катализируемых реакций в 10^8 – 10^{20} раз.

Ускоряющее действие ферментов становится наибольшим при определенных температурах, превышение которых снижает скорость биохимических реакций. При высоких температурах перестают действовать белковые цепи глобул. Будучи нативными, т. е. способными осуществлять свои функции только при строго соблюдаемых условиях, при высоких температурах они изменяют свою структуру, «свертываются», как свертывается белок альбумин куриного яйца при температуре около 100°C .

Таким образом, много общего в роли температуры, катализаторов и ферментов в ускорении химических реакций. Но из существующих представлений этого не следует. Если принять, что с ростом температуры возрастает кинетиче-

ская энергия столкновений атомов и это повышает число «геометрически» удачных столкновений с превышением энергии активации, то наличие нужного химического вещества-катализатора снижает энергию активации реакции и, следовательно, число геометрически удачных столкновений возрастает автоматически.

Фактически все значительно проще. Известно, что многие химические реакции происходят при нагревании и в некотором оптимальном диапазоне температур скорость химической реакции действительно увеличивается с ростом температуры. Другие химические реакции протекают в обычных температурных условиях с выделением тепла, при этом скорость химической реакции достаточно высока, иначе не зафиксировалось бы повышение температуры системы. Есть реакции, которые происходят также с большой скоростью, но с поглощением тепла из окружающего пространства и, как следствие, с охлаждением системы.

В действительности роль температуры и катализаторов (ферментов) сводится к тому, что скорость химических реакций увеличивается, если уменьшается соотношение между количеством и длин фотонных волн на длинах орбит электронов взаимодействующих атомов. Изменение температуры в определенном диапазоне способствует состоянию синхронизма электронов атомов, а катализаторы и ферменты позволяют делать этот переход более плавно, постадийно, увеличивая степень синхронизма валентных электронов взаимодействующих атомов.

Выводы по главе 4

Основными положениями, на которых базируется формирование химических связей, являются следующие.

1. В связи с тем, что физическая интерпретация решения волнового уравнения Шредингера для электрона атома водорода относительно взаимосвязи отрицательных и положительных функций была выполнена ошибочно, то все дальнейшее развитие квантовой механики, начиная от форм s -, p -, d -, h -, f -состояний электрона в атоме водорода и их сущности, вопросы гибридизации, образования молекулярных орбиталей и, следовательно, в целом развитие теории химической связи пошли в науке по ложному пути. Это дает основание негативно отнестись к возможности применения существующих решений квантовой механики для обоснования механизма химической связи атомов и молекул.

2. Движение электронов в атомах осуществляется по определенным круговым или эллиптическим орбитам. Расположение электронов в пространстве вокруг ядра полностью подчиняется распределению нуклонов в ядре, и в связи с этим на каждый внешний электрон в атоме приходится свой сферический угол взаимодействия с ядром.

3. Наряду с образованием молекул на основе ионных связей, возможно образование молекул из электронейтральных атомов. Межатомные взаимодействия электронейтральных атомов обусловлены электрическими полями атомных ядер и внешних валентных электронов.

4. Роль магнитных сил, в том числе спинов в формировании химических связей существенно преувеличена, так как электрические силы, действующие между протонами ядер и внешними электронами атомов, по величине на порядки превышают силы магнитного взаимодействия.

5. Спаренными электронами у атома можно считать только те, которые синхронно вращаются в одной плоскости, в одном направлении и имеют сдвиг по фазе 180° . В результате они никогда не оказывают существенного отталкивающего влияния друг на друга, и в этом случае направление спинов электронов не имеет принципиального значения.

6. В образовании химической связи, наряду с фундаментальной ролью валентных электронов, важная роль принадлежит фотонам, создающим электромагнитные поля вокруг этих электронов. Наиболее благоприятные условия создания устойчивой химической связи возможны только при синхронизме вращения взаимодействующих электронов и синхронизме формирования фотонных волновых пакетов вокруг валентных электронов и наиболее устойчиво при сдвиге по фазе движения электронов по орбитам $0^\circ \div 90^\circ$.

7. В молекулах атома соединены друг с другом в определенной последовательности в соответствии с их валентностью. Направление связей атома с соседними атомами контролируется направлением плоскостей вращения валентных электронов и корректируется направлением вращения внешних фотонных орбиталей вокруг валентных электронов. Взаимодействие атомов осуществляется не просто через фотонные орбитали валентных электронов, а через пучности фотонных стоячих волн (или интерференционные максимумы фотонных волновых пакетов), за счет чего и достигается строгая направленность в расположении атомов в молекулах и формирование кристаллической решетки.

8. Если молекула формируется путем подхода двух атомов перпендикулярно друг к другу орбит валентных электронов при сдвиге их по фазе 0° или 90° , то возможно переплетение орбит электронов. Эти связи будут более прочными, но только при наличии синхронизма вращения электронов и формирования фотонных волновых пакетов вокруг этих электронов.

9. Разрушение внешней фотонной орбитали при снижении температуры или формирование новой фотонной орбитали при повышении температуры приводит к изменению направления вращения внешних фотонных орбиталей и изменению направления связи между атомами и, как следствие, к фазовому переходу в твердом состоянии вещества.

10. В формировании двойных связей между атомами участвуют по два валентных электрона каждого атома, причем прочная двойная связь проявляется лишь в том случае, когда наблюдается синхронизм взаимодействия всех четырех электронов с их фотонными волновыми пакетами.

Каждая одинарная связь двойной связи имеет меньшую энергию связи, так как формируются нецентральные силы взаимодействия, т. е. не по одной линии, а под некоторым углом. В целом двойные связи больше, так как взаимодействие ядер атомов с электронами происходит через каждую четверть периода по сравнению с полупериодом при одинарной связи.

11. На взаимодействие атомов через валентные электроны оказывают влияние ближайшие к ним электроны оболочки, в связи с этим инертные газы являются не активными, потому что электроны последней оболочки равномерно распределены по поверхности сферы электронной оболочки с минимальной площадью, приходящейся на электрическое поле каждого электрона, и поэтому сила отталкивания окружающих электронов при столкновении с другим атомом оказывается больше, чем сила притяжения за счет взаимодействия «валентного» электрона атома, который мог бы провзаимодействовать с другим атомом, и образовать электрическую связь между ними.

12. Увеличение скорости химических реакций с ростом температуры и присутствие катализаторов (ферментов) способствует повышению состояния синхронизма валентных электронов взаимодействующих атомов.

Литература к главе 4

1. Бирзвалк, Ю. А. Магнитная гидродинамика. – М. : Знание, 1979. – 63 с.
2. Блохинцев, Д. И. Основы квантовой механики. – М. : Наука, 1983. – 664 с.
3. Голиков, Г. А. Руководство по физической химии. – М. : Высш. шк., 1988. – 383 с.
4. Даниэлс, Ф. Физическая химия / Ф. Даниэлс, Р. Олберти ; пер. с англ. – М. : Мир, 1978. – 645 с.
5. Дмитриев, И. С. Электрон глазами химика (очерки о современной квантовой химии). – 2-е изд., испр. – Л. : Химия ; Ленингр. отд., 1986. – 225 с.
6. Жуковичкий, А. А. Физическая химия. – 3-е изд. – М. : Металлургия, 1976. – 543 с.
7. Ингольд, К. Теоретические основы органической химии : пер. с англ. – М. : Мир, 1973. – 1054 с.
8. Каганов, М. М. Природа магнетизма / М. М. Каганов, В. М. Цукерник // Библиотека квант. – Вып. 16. – М. : Наука, 1982. – 192 с.
9. Капустинский, А. Ф. Физическая химия металлургических процессов. Т. 1. – ОНТИ. «Госметаллургиздат», 1933. – 222 с.
10. Карапетьянц, М. Х. Химическая термодинамика. – 3-е изд., перераб. и доп. – М. : Химия, 1975. – 584 с.
11. Китайгородский, А. И. Строение органического вещества. Данные структурных исследований 1971–1973 гг. / А. И. Китайгородский, П. М. Зорьский, В. К. Бельский. – М. : Наука, 1982. – 510 с.
12. Князев, Д. А. Неорганическая химия / Д. А. Князев, С. Н. Смарыгин. – М. : Высш. шк., 1990. – 430 с.
13. Кузьман, А. Г. Общая химия. – 3-е изд. – М. : Колос, 1979. – 528 с.
14. Малая советская энциклопедия. – 3-е изд. – Т. 10. – М. : Сов. энциклопедия, 1961.
15. Минкин, В. И. Теория строения молекул / В. И. Минкин, Б. Я. Симкин, Р. М. Миняев. – 2-е изд. – Ростов-н/Д : Феникс, 1997. – 558 с.
16. Бурмистрова, О. А. Практикум по физике химии / О. А. Бурмистрова, М. Х. Карапетьянц, Г. С. Каретников [и др.] ; под ред. С. В. Горбачева. – М. : Высш. шк., 1963.

-
17. Сиенко, М., Структурная неорганическая химия / М. Сиенко, Р. Плейн, Р. Хестер ; пер. с англ. М. Е. Дяткиной. – М. : Мир, 1968. – 344 с.
 18. Стриганов, А. Р. Таблица спектральных линий атомов и ионов. Справочник / А. Р. Стриганов, Г. А. Одинцова. – М. : Энергоиздат, 1982. – 312 с.
 19. Зайдель, А. Н. Таблицы спектральных линий / А. Н. Зайдель, В. К. Прокофьев, С. М. Райский [и др.]. – 4-е изд., испр. и доп. – М. : Наука, 1977. – 800 с.
 20. Физический энциклопедический словарь / гл. ред. А. М. Прохоров. – М. : Сов. энциклопедия, 1984. – 944 с.
 21. Химический энциклопедический словарь / гл. ред. И. Л. Кнунянц. – М. : Сов. энциклопедия, 1983.
 22. Хомченко, Г. П. Неорганическая химия / Г. П. Хомченко, И. К. Цитович. – М. : Высш. шк., 1978. – 447 с.
 23. Яворский, Б. М. Справочник по физике / Б. М. Яворский, А. А. Детлаф. – М. : Наука, 1980. – 507 с.

Глава 5. ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ И ПРОЦЕССЫ

5.1. Теплота, работа, энергия

Теория тепла возникла не сразу. Очень долго не могли понять ни что такое тепло, ни какая разница между температурой и теплом.

Понятие «тепло» и «температура» разделить было очень трудно. Когда нагревают тело, температура его повышается. Когда тепло перетекает от одного тела к другому, температура одного тела падает, а другого – повышается. Тепло во многих случаях ведет себя, как ручей, текущий с горы в долину. Поэтому многие ученые прошлого времени думали, что теплота – это вещество. Они считали ее жидкостью (флюидом), которая может перетекать от одного тела к другому. Этот флюид получил название теплорода. Аналогия между теплом и жидкостью стала еще более убедительной после открытия электрических явлений: электрический ток также течет по проводам, как река, выравнивая потенциал между двумя заряженными телами. Модель теплорода объясняла очень многое и завоевала широкое признание в последней четверти XVIII века. Теплород, казалось, хорошо объяснял свойства тепла. Теория теплового двигателя, построенного Карно, была основана на модели теплорода. Тот факт, что большинство веществ расширяется при нагревании и сжимается при охлаждении, казалось, подтверждал материальную теорию теплоты, потому что теплород занимает место.

Смущало только то обстоятельство, что имеется несколько веществ, которые при нагревании сжимаются, а при охлаждении расширяются. Кроме того, если теплота есть вещество, то в горячем состоянии тело должно весить больше, чем в холодном. Опыт, однако, показывает, что это не так. Таким образом, модель теплорода не выдерживала испытаний, когда дело касалось закона сохранения. Рассуждали так: если бы тепло было какой-то жидкостью, то она, протекая, сохранялась бы, ее количество не должно было изменяться. Сколько тепла забрали от нагревателя, столько должен получить и холодильник.

На первый взгляд так оно и есть: охлаждается чайник, нагревается воздух. Но часто бывает совсем не так. Первым, кто обратил на это внимание, был Бенджамин Томсон (граф Румфорд). Наблюдая за сверлением пушечных стволов, он заметил выделение большого количества тепла, – особенно, если сверла были тупые. Это заставило его задуматься, что могло быть источником теплоты. Согласно теории теплорода, теплота могла появиться или из металла, или из окружающего пространства. Но ни то, ни другое, по мнению Румфорда, не являлось источником теплоты. Чтобы проверить теорию, Румфорд взвесил пушки до сверления и потом взвесил ствол и стружки после сверления. Оба взвешивания дали одинаковый результат. Единственное решение могло бы состоять в том, что в стружках содержится меньше теплорода, чем в сплошной отливке, и избыток его выделяется при сверлении. Но тогда стружку было бы легче нагреть, чем сплошной металл, у стружек должна была быть меньшая теплоемкость, чем у сплошного металла. Но это также не подтвердилось опытом.

Он применил для охлаждения ствола воду, но все равно ствол при сверлении нагревался.

Полученные результаты убедили Румфорда, что теплород, если он действительно существует, не мог прийти ни из металла, ни из окружающего пространства. Все это никак не укладывалось в простую модель перетекающего с места на место теплорода.

Так как никаких других возможных источников теплоты не было, Румфорд заключил, что теплота получалась как результат работы сверления. Другими словами, он пришел к выводу, что теплота – энергия. Как описано в [15], для дальнейшей проверки гипотезы Румфорда, что теплота – это энергия, современник Румфорда Хемфри Дэви (1778-1829) придумал очень простой решающий опыт. Опыт состоял в трении двух кусков льда друг о друга при температуре ниже температуры плавления этих кусков льда. Оказалось, что при этом лед плавился, и отсюда неизбежно вытекало заключение, что теплота, которая расплавляла лед, получалась из работы на преодоление трения кусков льда. Таким образом, чаша весов склонялась к тому, чтобы связать природу теплоты с движением.

Понятие о величине, характеризующей движение и имеющей по современной терминологии размерность «энергии», впервые появилось в механике. Основоположниками здесь являются Галилей (1564-1642), Гюйгенс (1629-1695) и Ньютон (1642-1727). Согласно этим авторам при падении тела массой m с высоты h и ускорении силы тяжести g убыль потенциальной энергии тела (его гравитационной энергии) mgh равна приращению его кинетической энергии $\frac{mv^2}{2}$ (т. е. $mgh = \frac{mv^2}{2}$).

Сформулированный здесь закон сохранения энергии до середины XIX в. казался частным случаем, реализующимся в «чистой механике» в отсутствии трения. Да и самого понятия «энергия» не было до начала XIX в., когда оно было введено в механику Юнгом. Р. Клаузиусу (1864) приписывают идею окончательного введения этого термина в физику.

Так что же такое энергия? Ее нельзя увидеть, потрогать или понюхать, как какое-нибудь вещество. Она представляет для нас более абстрактное понятие. Поэтому следует попытаться проанализировать существующие определения энергии и рассмотреть это понятие с общих позиций, прежде чем углубляться в дальнейшее обсуждение.

Энергия (от греческого *energeia* – действие, деятельность) – общая количественная мера движения и взаимодействия всех видов материи [11]. Энергия не возникает из ничего и не исчезает, она может только переходить из одной формы в другую. Энергия связывает воедино все явления природы.

Ранее часто вместо энергии говорили «сила», приписывая один и тот же термин величинам разной размерности. Даже Гельмгольц (1874) статью, посвященную закону сохранения энергии, озаглавил «О сохранении силы». Между тем по Ньютону сила – это причина, вызывающая движение, которая, совершая на известном пути работу, сообщает телу энергию. Таким образом, с

понятием энергии неразрывно связано другое понятие той же размерности – «работа».

Работа (A), совершаемая системой, обусловлена взаимодействием между системой и внешней средой, в результате которого преодолеваются внешние силы, нарушившие равновесие в системе. Работа определяется суммой произведений действующих на систему сил на соответствующий путь (давление, изменение объема, поверхностного натяжения, изменение поверхности и т. д.).

Таким образом, работа процесса – это энергия, передаваемая одним телом другому при их взаимодействии, не зависящая от температуры этих тел и не связанная с переносом вещества от одного тела к другому [4].

Наиболее затруднительным явилось установление общего закона сохранения энергии, включая действия диссипативных сил, приводящих к рассеянию работы и превращению ее в теплоту.

Р. Клаузиус (1850) первый заговорил об эквиваленте тепла и работы как о первом начале теории тепла и написал уравнение, которого не хватало Карно. Для этого надо было, прежде всего, сказать простую вещь: всякое тело имеет внутреннюю энергию. Принято считать [11], что внутренняя энергия равна сумме кинетической энергии хаотического движения молекул относительно центра масс тел и потенциальной энергии взаимодействия молекул друг с другом. Внутреннюю энергию можно увеличить двумя путями – производя над телом работу (ΔA) и подводя к нему тепло (ΔQ).

Смысл этого глубокого утверждения заключен в союзе «и» и описывается простой формулой

$$\Delta U = \Delta Q + \Delta A. \quad (5.1)$$

Очень важно понимать, что по конечному состоянию системы нельзя никаким образом обнаружить, за счет чего система увеличила свою энергию: за счет тепла или за счет работы. Сам Р. Клаузиус называл U «теплом, содержащимся в теле», противопоставляя ему Q – «тепло, сообщенное телу». В этом отличии кроется глубокий смысл. Сейчас U называют внутренней энергией (или просто энергией), а ΔU есть ее приращение.

Таким образом, единственный элемент – энергия – связывает воедино чрезвычайно широкое многообразие явлений, а закон сохранения этого «элемента» не знает исключений ни в макро-, ни в микромире. Энергия, по Ф. Энгельсу, есть мера движения при переходе одной формы движения в другую [16]. Это определение философа дополняет определение физика М. Планка: «Энергия материальной системы в определенном состоянии, взятая по отношению к другому определенному «нулевому» состоянию, имеет однозначное значение» [6]. На основании этого можно говорить о запасе или о «содержании» энергии в системе. Энергия системы однозначно зависит от параметров, характеризующих состояние системы. В случае непрерывной среды или поля вводятся понятия плотности энергии, т. е. энергии в единице объема, и плотности потока энергии, равной произведению плотности энергии на скорость ее перемещения.

А. Эйнштейн показал, что энергия тела (E) неразрывно связана с его массой m соотношением

$$E = mc^2, \quad (5.2)$$

где c – скорость света.

Любое тело обладает энергией. Если масса покоящегося тела m_0 , то его энергия покоя $E_0 = m_0 c^2$; эта энергия может переходить в другие виды энергии при превращениях частиц (распадах, ядерных реакциях и т. д.). Ю. Г. Белостоцкий [13, стр. 15] высказал предположение, что при ускорении материального тела происходит увеличение его собственного гравиполя, причем запас кинетической энергии содержится в гравитационном поле движущегося тела. Это, по его мнению, позволяет определить энергию как процесс превращения вещества в поле. Поэтому формула $E = mc^2$ характеризует зависимость количества энергии тела от количества превращенного вещества в поле, причем m в этой формуле является полевой массой.

Рассматривая идеальные газы на базе эфирной природы теплоты, С. Д. Брусин и Л. Д. Брусин [13, стр. 24] отмечают, что количество тепловой энергии Q характеризуется массой эфира m и определяется простым соотношением $Q = mc^2$ (где c – скорость света). Газы представляются состоящими из частичек, сгруппированных в молекулы, и эфира, находящегося как между частичками молекул (молекулярная область), так и между молекулами (межмолекулярная область).

Согласно классической физике энергия любой системы меняется непрерывно и может принимать любые значения. Квантовая теория утверждает, что энергия микрочастиц, движение которых происходит в ограниченном объеме пространства (например, электронов в атоме), принимает дискретный ряд значений. Так, атомы испускают электромагнитную энергию в виде дискретных порций – световых квантов или фотонов.

Опыт, накопленный при наблюдении множества различных процессов, свидетельствует о том, что, хотя энергия может передаваться от одного тела к другому, а также переходить из одной формы в другую, она никогда не создается из ничего и не исчезает.

Подобные наблюдения, подтвержденные количественными измерениями теплоты и работы, лежат в основе первого закона термодинамики.

Ситуация с энергией во многом напоминает ситуацию с веществом – при любом приращении энергии некоторая часть ее всегда превращается в теплоту, которая рассеивается в окружающую среду и, следовательно, не может быть использована для выполнения работы. Так, на практике большая часть энергии, запасенной в угле или бензине, превращается в теплоту. Таким образом, энергия – это способность к выполнению работы, переносу тепла, а работа и теплота являются количественными характеристиками двух форм обмена энергией между системой и окружающей средой, причем работа является макрофизической формой передачи энергии, а теплота микрофизической. Эти превращения, согласно Майеру, осуществляются в определенных эквивалентах соотношениях. Однако согласно второму закону термодинамики эти формы не равноценны, и если в каком-то процессе работа превращается в теплоту (например, посред-

ством трения), то такое превращение ничем не ограничено, обратное же превращение теплоты в работу ограничено определенными условиями. В этом и заключается главная «хитрость» природы, путь к пониманию которой оказался столь трудным и долгим [8]. Была еще одна трудность, которую встретила модель теплорода. Если теплород – это род жидкости, которая совершает работу при перетекании от более высокого уровня (от более высокой температуры) к более низкому, то нельзя было понять, что происходит в неоднородно нагретом теле в процессе выравнивания температуры: куда девается работа, которая должна возникнуть при перетекании теплорода.

Но даже если не обращать внимания на «пропажу» работы, такая картина не смогла объяснить, как передается тепло через вакуум – например, от Солнца к Земле. Говорили о колебаниях эфира, но получить из таких представлений сколько-нибудь убедительную теорию было нельзя. Теория теплорода явно терпела одну неудачу за другой. Согласившись, что теплота есть энергия, естественно было задать вопрос: на что идет эта энергия? Известно, что потенциальная энергия есть энергия положения, а кинетическая – энергия движения. Может ли теплота быть одним из этих видов энергии или, быть может, и тем и другим сразу? Мы уже знаем, что вещество построено из молекул и что если газ или жидкость нагревается, то броуновское движение, как показывают наблюдения, становится более оживленным. Это указывает на усиление движения молекул. Такие наблюдения возможны только в жидкостях и газах, но легко согласиться, что при нагревании увеличиваются колебания молекул и в твердых телах. Таким образом, экспериментальные наблюдения в сочетании с логическими заключениями привели к выводу, что теплота есть кинетическая энергия молекулярного движения. О том, что теплота связана с движением, говорили многие естествоиспытатели. Писал об этом Декарт. Галилей был одним из первых, кто писал о механической природе тепла. Даниил Бернулли пытался вывести формулу для давления газа. Гук очень ясно говорил о связи между теплотой и движением – колебаниями частиц в нагретом теле. Но высказывая блестящие гипотезы, он не умел их проверить, не умел перевести идеи на язык математики. Подобные идеи высказывали Ломоносов, многие философы. Но они не могли превратить эти высказывания в физическую теорию, которую можно проверить на опыте.

Количественная связь энергии с теплотой была установлена в опыте Джеймса Джоуля (1873). Джоуль показал, что, размешивая мешалкой жидкость и нагревая ее таким образом, надо тратить 460 кгм работы на каждую большую калорию, полученную жидкостью.

Несколько раньше Джоуля эту же величину, но с меньшей точностью (365 кгм/ккал) вычислил Роберт Майер, используя результаты опытов Гей-Люссака по расширению газов в пустоту.

Дальше всех продвинулся Максвелл. Принято считать, что кинетическая теория тепла, созданная Максвеллом, позволила понять тепловые явления на основе классической механики. В работе Максвелла появилась формула для распределения движущихся частиц по скоростям: формула позволила вычис-

лить постоянные, характеризующие свойства тел, – такие как теплопроводность и вязкость газа, и установить их зависимость от температуры. Максвелл положил начало статистической физики или кинетической теории газов. Но как отмечает Я. А. Смородинский [8], у Максвелла был предшественник – Ватерсон, первую формулу новой теории тепла которого мало кто заметил. Как описано в [8], в 1845 г. в Английскую академию наук (Королевское общество) была представлена работа Ватерсона. В ней было показано, что давление газа на стенки сосуда можно объяснить ударами атомов. Хотя сама идея о том, что газ состоит из атомов, была не нова, мало кто принимал всерьез утверждение, что атомы могут свободно двигаться в сосуде от стенки к стенке, а упругие свойства газа можно свести просто к классической механике атомов.

Работа Ватерсона не понравилась членам ученого общества и рецензентом Королевского общества была отклонена. Лишь много лет спустя, в 1892 г., Рэлей нашел ее в архиве и опубликовал в журнале «Философские сообщения Королевского общества». То, что было сделано одним человеком и осталось незамеченным, было открыто впоследствии лишь в результате работы нескольких ученых, а окончательная формула была написана Максвеллом только в 1859 г. Теперь модель неуничтожающейся жидкости – теплорода стала помехой для дальнейшего развития теории тепла и быстро сошла со сцены.

Как видим, происходили удивительные вещи: из вроде бы наивных представлений о теплороде были выведены правильные результаты и разработана гениальная теория тепла Карно. Понятие об атомах, молекулах долго казалось не нужным для теории тепла, но в окончательном результате стало приоритетным. А как же связана теплота и температура с потенциальной энергией молекул тела? Для ответа на этот вопрос Л. Эллиот и У. Уилкоккс [15] рассматривают опыты плавления льда и кипения воды. Известно, что для плавления льда надо подвести тепло и при этом во время процесса плавления температура не будет изменяться. Точно так же требуется теплота для того, чтобы воду превратить в пар, и при этом опять температура во время кипения не изменяется. Сегодня общепризнано, что температура тела есть мера средней кинетической энергии его молекул или температура есть мера нагретости тела. Так как поглощенная теплота при плавлении и кипении не вызывает никакого повышения температуры, а следовательно, и усиления молекулярного движения, то она не должна изменять кинетическую энергию молекул. Такую теплоту называют скрытой. Так как теплота есть энергия, а энергия не может быть уничтожена (в соответствии с законом сохранения энергии), то делается [15] вывод, что поглощенная теплота должна привести к изменению только потенциальной энергии молекул.

С этим выводом трудно согласиться, так как молекула воды, перейдя из жидкого состояния в газообразное при $t = \text{const} = 100^\circ\text{C}$, безусловно, имеет более высокую кинетическую энергию. Но так как система не выявляет себя нагревом, а кинетическая энергия молекул системы, как принято и сегодня, растет только с увеличением температуры, то и делается неверный вывод, что полученное системой тепло затрачивается только на изменение потенциальной энергии. Более того, как можно интерпретировать работу расширения воды при

ее охлаждении от +4°C до 0°C в жидком состоянии? При охлаждении выделяется теплота и одновременно совершается работа расширения, можно считать, за счет убыли внутренней энергии в соответствии с формулой (5.1).

Однако при кристаллизации температура не изменяется, т. е. внутренняя энергия должна оставаться постоянной, но происходит увеличение объема, т. е. совершается работа расширения. За счет чего же совершается работа расширения, если одновременно с этим при кристаллизации выделяется теплота кристаллизации? Ответа на этот вопрос в научной литературе нет.

Это возможно лишь в том случае, когда излучаются фотоны одной из орбиталей и происходит перестройка атомов и в целом молекул воды между собой за счет контакта их следующими орбиталями фотонов.

Таким образом, можно сделать вывод, что есть понятия энергии механического движения тела. К ним относятся кинетическая энергия поступательного

движения тела $E_{к.п.} = \frac{mv^2}{2}$, кинетическая энергия вращательного движения те-

ла $E_{к.вр.} = \frac{J\omega^2}{2}$ и потенциальная энергия состояния тела относительно Земли

$E_n = mgh = G \frac{mM_3h}{R_3^2}$ или другой большой гравитационной массы

$E_n = mg^*h = G \frac{mM_xh}{R_x^2}$ (где m , v – масса тела и скорость его поступательного дви-

жения; J – момент инерции тела при вращении; ω – круговая частота вращения тела; G – мировая гравитационная постоянная; M_3 и R_3 – масса и радиус Земли; g и g^* – ускорение свободного падения в гравитационном поле Земли или другой гравитационной массы; M_x и R_x – масса и радиус этой большой гравитационной массы; h – высота над поверхностью Земли или другой гравитационной массы).

Кроме того, тело обладает внутренней энергией или внутренней теплотой. Она обусловлена энергией фотонов, вращающихся вокруг электронов на внешней оболочке атома, а также вокруг заряженных частиц – протонов и электронов в ядре атома. Эта внутренняя энергия тела может увеличиваться при механическом воздействии на тело, приводящем к увеличению результирующей частоты колебаний фотонов вокруг заряженных частиц атомов вещества, и эта внутренняя теплота, содержащаяся в теле, может перетекать от тела с большей концентрацией теплоты к телу с меньшей концентрацией теплоты или при наличии перепада температур с окружающей средой путем теплового электромагнитного излучения за счет внешних фотонных орбиталей электронов атомов или при ядерных процессах, приводящих к излучению фотонов гамма-квантов.

5.2. Тепловое излучение и его спектр

Понятие теплоты тесно связано с понятием излучения. В те годы, когда еще была популярна теория теплорода, большие споры вызывал вопрос о том, куда девается теплород, когда тепло тратится на излучение.

Тепло передается от одного тела к другому не только при контакте. Еще Архимед знал, что можно фокусировать тепловые лучи с помощью зеркал. В 1778 г. в книге Шееля «О свете и огне» впервые появился термин «лучистая теплота» [8]. Шеель заметил, что кроме тепла, которое поднимается над огнем вместе с воздухом, есть тепло, которое мы ощущаем, стоя лицом к огню. Но тепло задерживалось стеклом, а свет нет, и это долго ставило в тупик ученых. «Свет и тепло – все-таки вещи разные», – заключали они. В конце концов они решили, что свет и тепло – явления одного типа и потому тепло, как и свет, есть колебания эфира. Это заблуждение исчезло не скоро. Дело в том, что кроме газов, которые не так уж трудно представить как собрание молекул, существовало еще излучение. Излучение, источником которого могли служить, например, атомы газа, несет с собой энергию, интенсивность излучения (или распределение энергии по длине вдоль спектра) определяется температурой излучающего газа. Энергия излучения казалась не связанной с атомами, и понять его природу было очень трудно. Как образно отмечает Я. А. Смородинский [8], природа разыгрывала с физиками порой комические истории. Когда все уверились в том, что для распространения света требуется эфир, он оказался лишним. Когда же физики были уверены, что тепло – это теплород, который существует сам по себе и которому носитель не нужен, оказалось, что теплорода никакого нет, а тепло переносится электромагнитными волнами.

Нагретое тело испускает свет: при низких температурах – это инфракрасное излучение, при высоких – видимое. Излучение нагретого тела содержит широкий спектр частот, но основная часть энергии сосредоточена в сравнительно узком участке спектра. Где лежит этот участок спектра, где его максимум и какова форма спектра – это важнейшая задача, которой занимались многие выдающиеся физики в конце XIX в. Электромагнитные волны считались тогда колебаниями мировой среды – эфира, непрерывно заполняющего все пространство, а потому именно эфир и должен был быть носителем тепловой энергии и вместе с ней температуры.

Поэтому трудно было объяснить, куда девается энергия, которую газ отдает излучению. Трудности с излучением возникли не на пустом месте. Еще Кельвин не мог понять, какая доля энергии в газе приходится на колебания молекул. Молекулу представляли себе в виде очень маленького упругого шарика, подобного сложному, запутанному клубку пружинок, каждая из которых должна забирать свою долю энергии. Но такая модель явно противоречила опыту. Количество тепла, которое надо затратить на нагревание газа, т. е. теплоемкость газа, было таким, какое должно было тратиться на движение молекул как целого, на долю колебаний практически ничего не оставалось. Кельвин был в полном недоумении и даже думал, что теоремы кинетической теории тепла, открытые Максвеллом, неверны. Главным препятствием к пониманию этого было излучение, которое совсем не похоже на собрание атомов и казалось непрерывной средой. Парадоксы со спектром излучения и с теплоемкостью молекул казались ловушкой, хитро подстроенной природой. Считается, что решение пришло только с квантовой гипотезой Планка. Говоря о спектрах излучения нагретых

тел следует отметить, что в космосе галактики излучают в рентгеновской области и даже в области γ -лучей. Причем в целом излучение любого источника описывается свойствами спектра, а функция распределения энергии излучения по частотам спектра похожа по смыслу на функцию Максвелла распределения атомов газа по скоростям. Представление о температуре излучения и о функции распределения для спектра излучения нагретого тела было первым успехом на этом пути. Для описания излучения использовали идею о тепловом равновесии. Для этого ввели в рассмотрение замкнутый объем, в котором находятся электромагнитные волны. При этом волны могут излучаться и поглощаться стенками сосуда (резонатора), который имеет определенную температуру T , каким-то образом все время поддерживаемую.

В состоянии равновесия энергия, которая излучается стенками, должна в точности компенсироваться энергией, которая стенками поглощается. Причем компенсация должна выполняться для каждого интервала частоты излучения. Поэтому естественно было считать, что в равновесии излучение имеет ту же температуру T , что и стенки сосуда.

Из самых общих соображений можно утверждать, что электромагнитное поле внутри резонатора является такой же системой, как и идеальный газ, в том смысле, что поле обменивается энергией со стенками (излучение поглощается и испускается) и что этот процесс приводит к тепловому, термодинамическому равновесию.

Когда была сформулирована такая задача, то решение ее поначалу оказалась слишком трудным.

Первая попытка состояла в том, чтобы уподобить атомы в стенках сосуда газу или, вернее, набору колеблющихся зарядов – осцилляторов, каждый из которых, в соответствии с теорией Максвелла, имеет в среднем энергию kT (половина этой величины приходится на кинетическую, а половина – на потенциальную энергию). Здесь k – постоянная Больцмана. В результате первое решение в 1900 г. предложил Дж. У. Рэлей на основе классических представлений о равномерном распределении энергии по степеням свободы. В 1905-1909 гг. Дж. Джинс применил методы классической статистической физики к волнам в полости и пришел к той же формуле, что и Дж. У. Рэлей. Поэтому закон распределения энергии в спектре излучения абсолютно черного тела в зависимости от температуры носит название закона излучения Рэля – Джинса и описывается формулой

$$U_\nu = \frac{8\pi k T \nu^2}{c^3}, \quad (5.3)$$

где U_ν – плотность излучения, соответствующая частоте ν ; k – постоянная Больцмана; c – скорость света; T – абсолютная температура.

Оказалось, что при низких частотах эта формула согласуется с опытом, но с ростом частоты число осцилляторов растет беспрестанно, и если каждому осциллятору будем приписывать энергию kT , то энергия излучения окажется бесконечной. Это решение было названо ультрафиолетовой катастрофой. Распределение энергии для ультрафиолетового участка спектра хорошо описывается формулой Вина

$$U_\nu = a\nu^3 e^{\frac{b\nu}{T}}, \quad (5.4)$$

где a и b – некоторые постоянные.

Эта формула никакого отношения к кинетической теории не имела и для малых частот была непригодна. Таким образом, одна формула была хороша с теоретической точки зрения, но приводима к абсурду, ультрафиолетовой катастрофе; вторая справлялась с катастрофой при высоких частотах, но была неверна при низких частотах. Однако в формулах Рэля – Джинса и Вина находился ключ к разгадке, который использовал М. Планк, дав следующую формулу:

$$U_\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \cdot \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}, \quad (5.5)$$

здесь k – постоянная Больцмана; h – постоянная Планка.

Предположив, что энергия может излучаться и поглощаться только в виде конечных порций – квантов, связанных с частотой формулой $\varepsilon = h\nu$, Планк обнаружил, что при этом ультрафиолетовая катастрофа исчезает и формула описывает распределение по всему спектру частот. При каждой температуре спектр можно разбить на две части: в одной – частоты с энергией, большей kT , в другой – частоты с энергией, меньшей kT . Величина kT характеризует то место в спектре, в котором сосредоточена большая часть энергии. Когда $h\nu \gg kT$, то формула Планка преобразуется к виду

$$U_\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \cdot e^{-h\nu/kT}, \quad (5.6)$$

т. е. эта формула воспроизводит поведение функции распределения Вина.

При низких частотах ($h\nu \ll kT$) формула Планка преобразуется в формулу Рэля – Джинса

$$U_\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} kT. \quad (5.7)$$

Расчеты по формуле Планка дают плотность энергии излучения в единице объема (закон Стефана – Больцмана):

$$E_0 = \alpha T^4, \quad (5.8)$$

где

$$\alpha = \frac{\pi^2 k^4}{15 h^3 c^3} = 1,917 \cdot 10^{-15} \frac{\text{эрг}}{\text{см}^3 \cdot \text{град}^4}.$$

В эту формулу входят сразу три фундаментальные постоянные: k , h и c .

k – постоянная Больцмана из кинетической теории;

h – постоянная Планка из квантовой механики;

c – скорость света из теории электромагнитного поля Максвелла.

Следует обратить внимание, что плотность энергии излучения в единице объема не одно и то же, что плотность энергии в единице объема самого вещества.

Если разделить плотность энергии E_0 на энергию одного колебания, т. е. на kT , то получим величину, которую можно интерпретировать как число квантов

в единице объема. Оно оказывается примерно $14T^3$. Это значит, что число квантов не остается постоянным, а растет с температурой. Этим газ из фотонов отличается от идеального газа, т. е. газа из постоянного числа атомов.

Открытие Планка обрело физическое содержание, когда Эйнштейн понял, что электромагнитное поле состоит из квантов – фотонов, а осциллятор излучает и поглощает фотоны – частицы с энергией ε , массой покоя, равной нулю, и движущихся со скоростью света.

Появление фотонов в физике было настолько неожиданным и их существование было настолько трудно признать, что только в 1924 г. фотоны стали рассматривать как газ и применять к нему законы статистической физики. В этом же году индийский физик Бозе обнаружил, что распределение Планка можно получить почти таким же образом, как и распределение Максвелла, если считать электромагнитное поле системой из множества фотонов, т. е. считать его идеальным фотонным газом. Равновесное распределение такого фотонного газа было названо бозе-газом. После этого электромагнитное поле (поле фотонов) стало примером нового идеального газа, у которого уравнение состояния не имеет ничего общего с уравнением Клапейрона – Менделеева.

Рассмотрим вывод уравнения состояния фотонного газа, описанный в [8]. Если плотность энергии излучения E_0 умножить на объем V , то получим внутреннюю энергию излучения.

$$U = \alpha T^4 V. \quad (5.9)$$

Объем, который определяет плотность энергии излучателя, и общий объем фотонного газа – это, вероятно, разные вещи, поэтому вывод уравнения состояния фотонного газа не совсем корректен. Однако рассмотрим вопрос в том понимании, как он представляется в [8].

Для того чтобы увеличить энергию на ΔU , надо повысить температуру на некоторую величину ΔT :

$$U + \Delta U = \alpha (T + \Delta T)^4 V, \quad (5.10)$$

но

$$(T + \Delta T)^4 = T^4 \left(1 + \frac{\Delta T}{T} \right) \approx T^4 \left(1 + \frac{4\Delta T}{T} \right),$$

т. е.

$$U + \Delta U = U + 4\alpha T^3 V \Delta T. \quad (5.11)$$

Это значит, что увеличение энергии ΔU связано с увеличением температуры соотношением

$$\Delta U = 4\alpha T^3 V \Delta T. \quad (5.12)$$

Но увеличение энергии при $\Delta T = 1$ есть теплоемкость системы при постоянном объеме:

$$\Delta U = C \Delta T, \quad (5.13)$$

следовательно,

$$C_v = 4\alpha T^3 V. \quad (5.14)$$

Далее анализируется [8], как изменяется энтропия:

$$\Delta S = \frac{\Delta Q}{T} = \frac{C_v \Delta T}{T} = 4\alpha T^2 V \Delta T, \quad (5.15)$$

так как тепло, подводимое к фотонному газу, идет на увеличение его внутренней энергии.

Предполагается [8], что связь между энтропией и температурой определяется выражением вида

$$S = AT^B, \quad (5.16)$$

т. е.

$$S + \Delta S = A(T + \Delta T)^B \approx AT^B + ABT^{B-1} \cdot \Delta T$$

или

$$\Delta S = ABT^{B-1} \cdot \Delta T. \quad (5.17)$$

Таким образом, сравнивая с предыдущей формулой для ΔS , нашли коэффициент $B = 3$, $A = \frac{4}{3}\alpha V$,

$$\text{следовательно,} \quad S = \frac{4}{3}\alpha T^3 V. \quad (5.18)$$

Так как энтропия фотонного газа зависит от объема газа, то, следовательно, излучение ведет себя как газ, его можно сжимать, затрачивая работу, а при расширении оно само совершает работу. Развивая эту логическую мысль, предполагается, что объем, в котором находится излучение, увеличивается от значения V_1 до V_2 . Если температура при этом поддерживается постоянной и процесс обратимый, то при увеличении объема энтропия возрастает на

$$\Delta S = S_2 - S_1 = \frac{4}{3}\alpha T^3 (V_2 - V_1). \quad (5.19)$$

Так как с увеличением энтропии связан подвод тепла,

$$\Delta S = \frac{\Delta Q}{T}, \quad (5.20)$$

то

$$\Delta Q = \frac{4}{3}\alpha T^4 (V_2 - V_1). \quad (5.21)$$

В соответствии с формулой $U = \alpha T^4 V$, энергия излучения возрастает при расширении на величину

$$\Delta U = U_2 - U_1 = \alpha T^4 (V_2 - V_1). \quad (5.22)$$

Как видно, энергия возросла меньше, чем поступило тепла, и, следовательно, часть тепла пошла на совершение работы. Из этих последних формул следует, что эта работа

$$A = \frac{1}{3}\alpha T^4 (V_2 - V_1). \quad (5.23)$$

Но работа обычно равна произведению давления на увеличение объема,

т. е.

$$A = p(V_2 - V_1). \quad (5.24)$$

Отсюда получается, что давление излучения равно

$$p = \frac{1}{3}\alpha T^4. \quad (5.25)$$

Это и есть уравнение состояния фотонного газа [8].

Как видно, оно резко отличается от уравнения состояния идеального газа. Наиболее удивительно, что давление не зависит от объема, т. е. фотонный газ можно сжимать изотермически и его давление не будет при этом возрастать. Однако в этом выводе нет ничего странного, если принимать, что число фотонов не сохраняется. При сжатии часть фотонов исчезает, поглощается стенками сосуда, а при расширении газа «рождаются» новые фотоны из окружающей среды. В том и есть глубокий смысл и отличие фотонного газа от идеального газа, представленного атомами и молекулами вещества в газообразном состоянии.

Однако следует иметь в виду, что при выводе этого уравнения исходили из того представления, что плотность энергии излучения в единице объема эквивалентна плотности энергии в единице объема самого вещества. Однако эти понятия, вероятно, не эквивалентны. Внимательный анализ излучения разреженных газов, т. е. излучения отдельных атомов и молекул, показал, что оно характеризуется определенным спектром, т. е. каждому газу присущ вполне определенный линейчатый спектр, состоящий из отдельных спектральных линий или групп близко расположенных линий. Самым изученным оказался спектр наиболее простого атома – атома водорода.

Швейцарский ученый И. Бальмер (1825-1898) подобрал империческую формулу, описывающую длины волн всех известных в то время спектральных линий водорода в видимой области спектра.

$$\frac{1}{\lambda} = R^1 \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 3, 4, 5 \dots), \quad (5.26)$$

где $R^1 = 1,10 \cdot 10^7$ – постоянная Ридберга.

Так как $\nu = \frac{c}{\lambda}$, то формула (5.26) переписывается для частот

$$\nu = R \cdot \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 3, 4, 5 \dots), \quad (5.27)$$

где $R = R^1 \cdot c = 3,29 \cdot 10^{15} \frac{1}{c}$ – также постоянная Ридберга.

Здесь c – скорость света, λ , ν – длина и частота излучаемых электромагнитных волн.

Из этих формул вытекает, что спектральные линии, отличающиеся различными значениями n , образуют группу или серию линий, называемую серией Бальмера. С увеличением n линии серии сближаются; значение $n = \infty$ определяет границу серии, к которой со стороны больших частот примыкает сплошной спектр.

В дальнейшем в спектре водорода было обнаружено еще несколько серий. В ультрафиолетовой области спектра находится серия Лаймана:

$$\nu = R \cdot \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 2, 3, 4, \dots). \quad (5.28)$$

В инфракрасной области спектра были обнаружены:
серия Пашена

$$\nu = R \cdot \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 4, 5, 6, \dots), \quad (5.29)$$

серия Брэкета

$$\nu = R \cdot \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 5, 6, 7, \dots), \quad (5.30)$$

серия Пфунда

$$\nu = R \cdot \left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 6, 7, 8, \dots), \quad (5.31)$$

серия Хэмфри

$$\nu = R \cdot \left(\frac{1}{6^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n = 7, 8, 9, \dots), \quad (5.32)$$

Таким образом, было выявлено шесть серий спектральных линий. Все приведенные выше серии в спектре водорода описываются одной формулой, называемой обобщенной формулой Бальмера:

$$\nu = R \cdot \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad (5.33)$$

где m имеет в каждой данной серии постоянное значение, $m = 1, 2, 3, 4, 5, 6$ (определяет серию), n принимает целочисленные значения, начиная с $m + 1$, и определяет отдельные линии этой серии. Приведенные выше сериальные формулы подобраны эмпирически и долгое время не имели теоретического обоснования, хотя и были подтверждены экспериментально с очень большой точностью. Вид этих сериальных формул, удивительная повторяемость в них целых чисел, универсальность постоянной Ридберга свидетельствуют о глубоком физическом смысле найденных закономерностей, вскрыть которые в рамках классической физики считается невозможным. Исследования более сложных спектров – спектров паров щелочных металлов (например, Li, Na, K) – показало, что они представляются набором незакономерно расположенных линий. Ридбергу все же удалось разделить их на три серии, в каждой из которых расположение линий похоже на закономерное их расположение в бальмеровской серии.

Однако, выявив закономерность излучения на основе водорода очень важно понять, почему существует линейчатый спектр излучения, причем с определенной закономерностью частот в спектре. И более того, существует не единая спектральная серия, а закономерные серии спектральных линий. В чем глубинная природа этого явления? Частично ответить на этот вопрос нам позволяет анализ строения атома, из которого следует, что вокруг каждого электрона атома по определенным орбиталям вращаются серии фотонов разной частоты. Количество орбиталей фотонов, их наклон друг к другу и спектр частот определяются структурой ядра и являются индивидуальной особенностью не только каждого атома химического элемента, но и каждого изотопа химического элемента. О количестве фотонных орбиталей и спектре частот фотонов каждой ор-

битали можно приблизительно судить по результатам совместного анализа полного спектра излучения соответствующего изотопа элемента и различных фазовых переходов, характерных для данного изотопа элемента.

Важным моментом излучения атомов является тот факт, что спектральные линии разных длин волн существенно отличаются по яркости или интенсивности свечения (табл. 5.1). Чем же это может быть обусловлено?

Таблица 5.1

Спектр излучения атома водорода [10]

Длина волны λ , Å	Яркость, В	Энергия возбуждения, эВ
914,58	5	13,55
914,92	6	13,54
915,33	7	13,54
915,82	8	13,53
916,43	10	13,52
917,18	12	13,51
918,13	16	13,50
919,35	20	13,48
920,96	30	13,45
923,15	40	13,42
926,23	50	13,38
930,75	80	13,31
937,80	125	13,21
949,74	220	13,05
972,53	400	12,74
1025,72	1000	12,09
1215,67	3500	10,20
3656,67	-	13,59
3657,27	-	13,59
3657,93	-	13,58
3659,42	-	13,58
3660,28	-	13,58
3661,22	-	13,58
3662,26	-	13,57
3663,41	-	13,57
3664,68	-	13,57
3666,10	-	13,57
3667,68	-	13,57
3669,47	-	13,57
3671,48	-	13,57
3673,76	-	13,56
3676,36	-	13,56
3679,36	-	13,56
3682,81	-	13,56
3686,83	-	13,55
3691,56	2	13,55
3697,15	3	13,54
3703,86	4	13,54

Длина волны λ , Å	Яркость, В	Энергия возбуждения, эВ
3711,97	5	13,53
3721,94	6	13,52
3734,37	8	13,51
3750,15	10	13,50
3770,63	15	13,48
3797,90	20	13,45
3835,39	40	13,42
3839,05	60	13,38
3970,07	80	13,37
4101,74	100	13,21
4340,47	200	13,05
4861,33	500	12,74
6562,73	1000	12,09
6562,85	2000	12,09
8862,78	-	13,48
9014,91	-	13,45
9229,02	-	13,42
9545,97	-	13,38
10049,38	6	13,31
10938,1	28	13,21
12818,1	140	13,05
18751,1	700	12,74
26251,3	40	13,21
40511,4	120	13,05
74577,6	20	13,21
75004,5	-	13,38
113057	-	13,42
123684	-	13,31
190569	-	13,38

Для понимания сущности вопроса надо проанализировать понятие яркости. Энергетической яркостью (L) поверхности в точке элемента поверхности ds называется отношение энергетической силы излучения dJ с этого элемента поверхности к площади ds [5].

$$L = \frac{dJ}{ds}. \quad (5.34)$$

Так как энергетическая сила излучения dJ элементарного источника определяется отношением мощности излучения dP в элемент телесного угла $d\Omega$ к величине этого угла $d\Omega$

$$dJ = \frac{dP}{d\Omega}, \quad (5.35)$$

то

$$L = \frac{dP}{d\Omega \cdot ds}. \quad (5.36)$$

Мощность излучения определяется суммарной энергией излучения dW источником в течение времени dt , т. е.

$$P = \frac{dW}{dt}. \quad (5.37)$$

Следовательно,

$$L = \frac{dW}{dt \cdot d\Omega \cdot ds}. \quad (5.38)$$

В первом приближении можно принять, что при выполнении спектрального анализа параметры dt , $d\Omega$ и ds для различных частот спектра одинаковы, поэтому различие в величинах энергетической яркости различных линий спектра определяется суммарной энергией излучения на разных частотах спектра. Энергия электромагнитного излучения на элементарную площадку определяется частотой излучения и количеством падающих фотонов. Анализ яркости спектральных линий для водорода показывает, что яркость линий каждой из спектральных серий увеличивается с увеличением длины волны (табл. 5.1). С увеличением же длины волны энергия фотонов должна уменьшаться, поэтому можно сделать только один вывод:

с увеличением длины волны закономерно увеличивается яркость спектральных линий лишь за счет возрастания количества излучаемых фотонов с одинаковой или очень близкой и трудно различимой частотой.

Подтверждением этого являются известные эффекты Штарка (расщепление спектральных линий атомов, молекул и других квантовых систем в электрическом поле) и Зеемана (расщепление уровней энергии и спектральных линий атома и других атомных систем в магнитном поле) [3].

Под действием магнитного или электрического поля возникает расщепление спектральной линии излучения фотона на несколько. Что это может означать? Может ли расщепиться одна спектральная линия на несколько, т. е. может ли один и тот же фотон излучиться несколько раз с разной частотой? Вероятно, нет. Это возможно только в том случае, если на одной орбитали одновременно находятся несколько или множество фотонов с одинаковой или очень близкой частотой. В обычных условиях они будут излучаться одновременно, т. е. создавать спектральную линию высокой яркости, а при наличии магнитного или электрического поля излучаться отдельными порциями, т. е. одновременно та совокупность фотонов, орбита которых была в определенном диапазоне угла наклонена к направлению внешнего магнитного или электрического поля. Поэтому происходит расщепление всей совокупности фотонов на одной орбитали на несколько групп фотонов.

5.3. Температура

Ключевым моментом во всех тепловых процессах является температура, поэтому целесообразно подробно остановиться на анализе этой физической величины.

Температура (*temperatura*) – по латыни «смесь», и свое название ведет от смешивания различных лекарств, которое великий врач древности (II в.) Гален

предлагал классифицировать по градусам: градус тепла, градус холода, градус влажности, градус сухости. Но теория тепла и техника его измерения возникли не сразу. Лишь к началу XIX в. термометр стал совсем обычным прибором. Как отмечает Я. К. Смородинский [8], «все, что касается тепла, изложено в учебниках обычно столь ясно и просто, что этот раздел физики кажется даже скучным». Но это кажущаяся простота, правильнее сказать, простота от нашего недопонимания. В нашей обыденной жизни мы часто говорим о температуре и большей частью забываем о сложных процессах, связанных с этим понятием. Научившись измерять температуру много лет назад, физики очень долго не могли понять, как температура связана с количеством теплоты. Можно сказать, что и сегодня физики не продвинулись до конца в понимании того, что же такое температура и что измеряет термометр.

Температура определяет: распределение образующих систему частиц по уровням энергии (статистика Больцмана) и распределение частиц по скоростям (распределение Максвелла); степень ионизации вещества (формула Саха); спектральную плотность излучения (закон излучения Стефана – Больцмана) и т. д.

Температуру, входящую в качестве параметра в распределение Больцмана, часто называют температурой возбуждения, в распределение Максвелла – кинетической температурой, в формулу Саха – ионизационной температурой, в закон Стефана – Больцмана – радиационной температурой. Поскольку для системы, находящейся в термодинамическом равновесии, все эти параметры равны друг другу, их называют просто температурой системы.

За единицу абсолютной температуры в Международной системе единиц (СИ) принят Кельвин (К). Часто температуру измеряют по шкале Цельсия (t , °C), она связана с T (в К) равенством $t = T - 273,15$ К, причем $1^\circ\text{C} = 1$ К.

Температурный диапазон физических явлений исключительно широк: практически от абсолютного нуля температуры (низкие температуры) до 10^{11} °К и выше (высокие температуры).

Строго говоря, температура характеризует лишь равновесное состояние тел, однако понятием температура часто пользуются при рассмотрении неравновесных распределений частиц и квазичастиц в физических системах (электронная и ионная температура неравновесной плазмы, цветовая температура, яркостная температура и т. д.). Так, например, физический параметр, применяемый для количественной характеристики спектральной плотности энергетической яркости любого тела, нагретого до температуры T и имеющего сплошной спектр, называется яркостной температурой (T_e). Спектральной плотностью энергетической яркости « e » $= f(\lambda, T)$ называется величина энергии излучения в единичном интервале длин волн, испущенных в единицу времени в единичный телесный угол, и приходящаяся на единичную площадь поверхности, перпендикулярной направлению распространения излучения.

Яркостная температура T_e равна такой температуре T абсолютно черного тела, при которой « e » $_{ч.т.} = f(\lambda, T)$ черного тела равна « e » $= f(\lambda, T)$ исследуемого тела (в одном и том же интервале длин волн). Понятие яркостная температура

применяется в оптической пирометрии, при изучении космических источников излучения (Солнца, звезд, газовых туманностей, планет, и др.). В общем случае яркостная температура определяется по формуле Планка (закон излучения Планка).

Термодинамическая температура влияет на изменение многих физических параметров, однако до настоящего времени отсутствует единая трактовка сущности понятия температуры для описания вещества в различных агрегатных состояниях, при низких температурах вблизи абсолютного нуля, внутри атомного ядра и т. д. Этот факт говорит сам за себя.

Так как же сегодня объясняется сущность понятия температуры вещества? В фундаментальном учебном пособии «Термодинамика» (авторы М. П. Вукалович и И. И. Новиков) [2] дается следующая характеристика: «температура есть присущая каждому состоянию равновесия интенсивная величина; у всех систем, находящихся в тепловом равновесии друг с другом, температуры одинаковы. Температура определяет направление перехода теплоты, т. е. выступает прежде всего как мера нагретости тела».

В другом фундаментальном учебном пособии «Химия – в центре наук» (авторы Т. Браун, Г. Ю. Лемей) [1] в разделе «Температура» описываются температурные шкалы, их особенности, а о сущности температуры сказано лишь следующее: «Чувственность ощущения температуры дает нам представление о том, горяч или холоден предмет. Температура относится к так называемым интенсивным свойствам».

В «Химическом энциклопедическом словаре» [14] температура определяется как: «физическая величина, характеризующая состояние термодинамического равновесия макроскопической системы. Одинакова для всех частей изолированной системы, если нет перехода энергии (теплоты) от одной части системы к другой. Если изолированная система не находится в равновесии, то с течением времени переход энергии (теплоты) от более нагретых частей системы к менее нагретым приводит к выравниванию температуры (первый постулат или нулевое начало термодинамики). Теоретически температура определяется на основании второго начала термодинамики как производная энергии тела по его энтропии. Таким образом, определенная температура всегда положительна; ее называют абсолютной температурой по термодинамической температурной шкале (термодинамическая температура)».

В «Физическом энциклопедическом словаре» [11] приводится практически аналогичная характеристика, но в заключении добавляется, что ... «в равновесных условиях температура пропорциональна средней кинетической энергии частиц тела».

Как видим, эти характеристики температуры как параметра системы не раскрывают ее внутренней сущности.

Я. А. Смородинский [8] в своей фундаментальной работе о температуре и теплоте пишет: «из школьного учебника всем известно, что частицы в газах, жидкостях и твердых телах находятся в непрерывном движении и что это движение воспринимается как тепло. Энергия движения частиц, усредненная по их

огромному числу, определяет температуру». Это и есть принятая на сегодня основная формулировка понятия температуры. Она определяет сущность кинетической теории температуры вещества. Однако эта теория не дает научного объяснения ряда эффектов, в том числе физической сущности абсолютного нуля температуры.

Так Б. М. Яворский и другие [17] замечают, что «...при низких температурах даже разряженные газы не подчиняются закону распределения Максвелла, а следуют, в зависимости от строения атомных ядер, либо распределению Бозе (для многих разреженных газов), либо распределению Ферми (для некоторых разряженных газов и для так называемого электронного газа в металлах). Такие состояния газов называются вырожденными. В этих состояниях нарушается прямая пропорциональность между средней кинетической энергией, приходящейся на одну степень свободы поступательного движения молекулы, и абсолютной температурой. Средняя энергия является сложной функцией температуры. Это означает, что при низких температурах молекулярно-кинетическая трактовка абсолютной температуры, как меры средней кинетической энергии поступательного движения молекул, является неверной. К сожалению, затруднительно дать какое-либо новое «наглядное» представление об абсолютной температуре, справедливое во всей области ее возможных изменений».

Учитывая отсутствие единого подхода к понятию сущности температуры вещества, атомов, ядер атомов, целесообразно подробно остановиться на анализе этих теоретических подходов. Это позволит дальше наметить единый подход в понимании сущности температуры независимо от состояния вещества.

Так, при выводе кинетической теории температуры Кл. Э. Суорц [9] рассматривает один атом газа массой m , заключенный в кубическом ящике со стороной, равной L . Принимается, что атом движется случайным образом, ударяясь о стенки под различными углами. Прослеживается только одна из компонент его скорости, направленная по оси x (v_x), и смотрится, что происходит, когда атом ударяется о стенки, ориентированные в y - и z -плоскостях, перпендикулярных этой компоненте скорости. Для того чтобы отчетливо представить себе происходящее, принимается, что атом просто движется взад и вперед в x -направлении. В этом случае, двигаясь вправо, атом имеет импульс, равный $m \cdot v_x$. Когда он ударяется о стенку и отскакивает назад, его импульс становится равным $(-m \cdot v_x)$. Изменение импульса $\Delta(\text{Импульс}) = 2 \cdot m \cdot v_x$. Стенка воспринимает импульс отдачи, направленный вправо, и так происходит каждый раз, когда атом отскакивает назад. Чтобы найти время Δt между двумя отскоками, путь, проходимый атомом поперек ящика и обратно, делится на скорость:

$$\Delta t = \frac{2L}{v_x}. \quad (5.39)$$

В соответствии со вторым законом Ньютона сила

$$F = \frac{\Delta(\text{Импульс})}{\Delta t} = \frac{2m \cdot v_x}{\frac{2L}{v_x}} = \frac{m \cdot v_x^2}{L}. \quad (5.40)$$

Если в ящике находится N атомов газа, движущихся в одном направлении, то средняя сила будет равна

$$\bar{F} = \frac{N \cdot m \cdot \bar{v}_x^2}{L}. \quad (5.41)$$

Атомы газа, однако, не движутся в одном направлении. Их движение является совершенно случайным, и отскакивают они не только от стенок, но и друг от друга, поэтому на основе теоремы Пифагора находится соотношение между квадратом вектора и квадратами его компонент в x -, y - и z -направлениях:

$$v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2. \quad (5.42)$$

У любого конкретного атома в определенный момент времени одна из компонент скорости может быть гораздо больше, чем любая из двух других. Однако в среднем компоненты в x -направлении будут такими же, как и в y - и z -направлениях, поэтому $v_x^2 = v_y^2 = v_z^2$.

Следовательно,

$$v_x^2 = \frac{1}{3} v^2. \quad (5.43)$$

Сила, действующая на стенку ящика, расположенную в y -, z -плоскости, усредненная как по времени, так и по совокупности различных атомов газа, равна

$$\bar{F} = \frac{1}{3} \frac{N \cdot m \cdot \bar{v}^2}{L}. \quad (5.44)$$

Вместо силы, действующей на стенку, можно рассмотреть давление

$$p = \frac{F}{S}, \quad (5.45)$$

где S – площадь стенки, расположенной в y -, z -плоскости

$$p = \frac{\bar{F}}{S} = \frac{\frac{1}{3} Nm \cdot \bar{v}^2}{LS} = \frac{\frac{1}{3} Nm \cdot \bar{v}^2}{V}, \quad (5.46)$$

где V – объем ящика.

Теперь уравнение преобразуется к виду

$$pV = \frac{1}{3} Nm \cdot \bar{v}^2. \quad (5.47)$$

Существует еще одно соотношение, содержащее величину $m\bar{v}^2$, – это средняя кинетическая энергия атомов или молекул в ящике

$$\bar{\epsilon}_k = \frac{1}{2} m\bar{v}^2. \quad (5.48)$$

Поэтому уравнение для pV записывается как

$$pV = \frac{2}{3} N \cdot \frac{1}{2} m\bar{v}^2 = \frac{2}{3} N \bar{\epsilon}_k. \quad (5.49)$$

При изучении газов было установлено на опыте, что закон идеального газа имеет вид

$$pV = N \cdot k \cdot T, \quad (5.50)$$

где k – постоянная Больцмана.

Далее исходят из того, что если принятая модель и теоретический вывод правильный, то эти уравнения для pV должны быть идентичными:

$$pV = \frac{2}{3} N \cdot \bar{\epsilon}_k \quad (\text{теория})$$

$$pV = N \cdot k \cdot T. \quad (\text{эксперимент})$$

Поэтому

$$\bar{\epsilon}_k = \frac{3}{2} k \cdot T. \quad (5.51)$$

На основе полученного равенства утверждают, что средняя кинетическая энергия молекул газа пропорциональна его температуре, т. е. физическая величина температура газа является аргументом, а физическая величина средняя кинетическая энергия молекулы газа является функцией, зависящей от температуры.

Можно ли из этого выражения получить обратную зависимость? Математически можно.

$$T = \frac{2}{3} \frac{\bar{\epsilon}_k}{k} \quad (5.52)$$

Поэтому на основе этого выражения в классической физике дается обоснование физической сущности понятия температуры в различных агрегатных состояниях – газообразном, жидком и кристаллическом: «температура вещества есть мера кинетической энергии движения его молекул».

Вероятно, такое объяснение может иметь право на существование, если первопричиной изменения кинетической энергии молекул газа является не подвод тепловой энергии, а механический способ изменения кинетической энергии молекул.

Это наблюдается на практике, но чаще для твердого или жидкого состояния вещества. Так, известно, что во время шторма вода в океане несколько нагревается, а при трении о твердое тело или сверлении отверстия в нем это тело тоже нагревается.

Однако еще в 1893 г. французский физик Бриллюэн писал так: «что касается меня, то я остаюсь при убеждении, что определение температуры тела как количества энергии, полной или частичной, одной обыкновенной материи представляется ошибочным».

Несмотря на это, многие ученые продолжают придерживаться этой формулировки и, более того, распространяют ее и на четвертое состояние вещества – плазму.

Так, Д. А. Франк-Каменецкий [12], отмечает, что «основным понятием термодинамики является температура, характеризующая распределение энергии между частицами вещества (в случае плазмы между электронами и ионами). Плазма – это газ, состоящий из положительно заряженных ионов и отрицательно заряженных электронов в таких пропорциях, что общий заряд равен нулю. В полностью ионизированной плазме электроны и ионы могут совершать только поступательное движение (внутренних степеней свободы у них нет). Поэто-

му тепловая энергия полностью ионизированной равновесной плазмы, приходящаяся на одну частицу, выражается очень просто:

$$\varepsilon = \frac{3}{2} kT. \quad (5.53)$$

Если энергия взаимодействия между частицами мала по сравнению с тепловой энергией, то плазма ведет себя в термодинамическом состоянии как идеальный газ. При этом полная энергия плазмы практически полностью совпадает с ее тепловой энергией, а давление находится по уравнению состояния идеального газа

$$p = (n_e + n_i) kT = (n_e + n_i) \frac{2}{3} \varepsilon, \quad (5.54)$$

где n_e , n_i – концентрации электронов и ионов».

Здесь следует отметить, что за единицу температуры плазмы принято считать электрон-вольт, равный 11600°С. Про плазму с температурой десять или сто тысяч градусов говорят: «Всего несколько электрон-вольт – это холодная плазма». У горячей плазмы температура измеряется сотнями электрон-вольт, т. е. миллионами градусов. Казалось бы, все ясно, однако можно усомниться, имеет ли выражение (5.52) реальный физический смысл, так как оно получено путем перестановки аргумента и функции местами.

Если принять, что данная формулировка понятия температуры отражает существующую реальность для всех четырех агрегатных состояний вещества, то с понижением температуры кинетическая энергия молекул вещества должна уменьшаться, независимо от его агрегатного состояния и фазовых переходов, и, как следствие, должно уменьшаться давление такого вещества. Однако при общей справедливости принципа уменьшения кинетической энергии различных веществ при уменьшении температуры в любом агрегатном состоянии, имеется ряд веществ (например, вода), которые при снижении температуры и переходе из жидкого состояния в кристаллическое увеличиваются в объеме, а при постоянном объеме сосуда создают громадное давление до 2500 кг/см², т. е. их давление увеличивается в 2500 раз в условиях перехода из жидкого состояния в твердое. Более того, вода имеет максимальную плотность 1·10³ кг/м³ при температуре +4°С, поэтому при снижении температуры воды в жидком состоянии до 0°С плотность ее начинает уменьшаться, объем увеличиваться и также создаются большие давления в условиях постоянного объема, в котором заключена жидкость. В связи с этим показанный выше вывод [9], позволивший судить о понятии температуры как о мере кинетической энергии молекул, в котором как промежуточная стадия определяется давление в системе газа в виде суммарного импульса от ударов отдельных молекул о стенку сосуда, является проблематичным. Вероятно, природа давления в любом агрегатном состоянии вещества, включая и газообразное, другая, и если можно понять эту общую природу давления, то тогда можно будет объяснить, почему используемый физикоматематический прием вывода формулы давления газа согласуется с опытными данными, но не отражает общий принцип, общую природу давления.

Справедливость этих сомнений усугубляется при обосновании физической сущности абсолютного нуля температуры 0°К или -273,15 градуса Цельсия.

Из кинетической теории газов казалось естественным, что при абсолютном нуле температуры должно прекращаться всякое движение атомов, так как термодинамическая температура T есть мера их кинетической энергии. Но это простое и почти наглядное объяснение, как отмечает Я. А. Смородинский [8], было неверным. И с этим утверждением нельзя не согласиться. Электроны в металлах движутся с большими скоростями даже при $T = 0$. В связи с этим физиками была сделана попытка обоснования физической сущности температуры и ее абсолютного нуля на основе квантово-механических представлений. При обосновании этого вопроса на квантово-механическом уровне главная роль отводится спину атома и электрона. Рассматривается поведение спина в естественных условиях и при помещении атома или вещества в постоянное магнитное поле. В квантовой механике это описывается [8] следующим образом. Предположим, что имеется кристаллическая решетка, в узлах которой расположены неподвижные одинаковые атомы. Пусть у каждого атома есть собственный механический момент-спин и связанный со спином магнитный момент. Если абсолютная величина спина атома равна $s\hbar$, то его проекции на направление магнитного поля могут принимать не любые значения, а лишь $(2s + 1)$ значений, равных

$$-s\hbar, -(s-1)\hbar, \dots (s-1)\hbar, s\hbar.$$

Магнитный момент атома направлен по его спину, а потому его проекции на магнитное поле также принимают $(2s + 1)$ значений.

Если обозначить максимальную величину проекции магнитного поля через $(g \cdot \mu \cdot s)$, то его возможные проекции будут

$$-g \cdot \mu \cdot s, -g \cdot \mu \cdot (s-1), \dots g \cdot \mu \cdot (s-1), g \cdot \mu \cdot s,$$

где μ — это единица измерения. Если магнитный момент связан с электронами,

то $\mu = \mu_0 = \frac{e\hbar}{2m_0c}$ — магнетон Бора и магнитный момент gs измеряется в магнето-

нах Бора; g — это отношение магнитного момента к механическому — так называемое гиромангнитное отношение. Оно может быть положительным и отрицательным. У электрона $g = -1$, у нейтрона $g = -1,9$, у протона $g = 2,8$.

Во внешнем магнитном поле с магнитной индукцией B энергия магнитного момента атома равна $-mg \cdot \mu_0 \cdot B$,

m — m -й уровень энергии, который может принимать одно из $2s + 1$ значений $m = -s, -(s+1), \dots (s-1), s$.

То есть в магнитном поле электрон может иметь $(2s + 1)$ уровней энергии, таких, что разность энергий между уровнями постоянна и пропорциональна величине магнитного поля.

Предположим, что сначала вблизи вещества, о температуре которого идет речь, никакого магнитного поля нет. Тогда повороты спинов электронов этого вещества не влияют на их энергии, и спин с одинаковой вероятностью имеет любую из $2s+1$ проекций. Условно эта картина изображается так, что на каждом из $2s+1$ уровней, которые имеют одинаковую энергию, рисуется одинаковое число кружков.

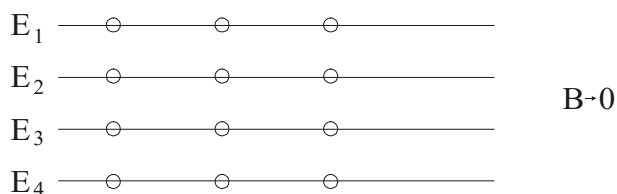


Рис. 5.1. Распределение атомов без магнитного поля

После включения магнитного поля в первый момент количество атомов на каждом уровне не успеет измениться, хотя энергия (E_m) уровней станет разной согласно формуле

$$E_m = -mg \cdot \mu_o \cdot B. \quad (5.55)$$

Если бы атомы были полностью изолированы, то их спины, как свободные магнитные стрелки, не могли бы остановиться – для остановки нужно трение в опоре. Роль трения для атомов играет их взаимодействие с другими атомами, с которыми они обмениваются энергией. Это и является процессом установления теплового равновесия. В результате через некоторое время распределение спинов атомов по уровням будет описываться формулой, похожей на формулу Максвелла, а именно: число атомов, которые будут находиться на m уровне и иметь энергию E_m , пропорционально экспоненте

$$\omega(m) = A \cdot \exp\left(-\frac{E_m}{kT}\right) = A \cdot \exp\left(-\frac{mg\mu_o B}{kT}\right). \quad (5.56)$$

Коэффициент A определяется из условий, что полное число атомов задано и равно, например, N :

$$A \cdot \sum_{m=-s}^s \omega(m) = N. \quad (5.57)$$

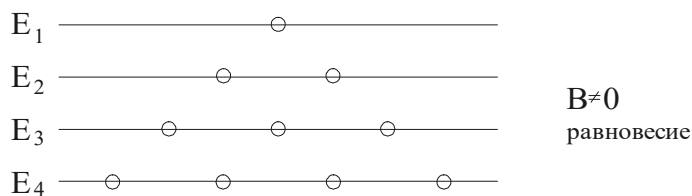


Рис. 5.2. Спины в магнитном поле в тепловом равновесии

Распределение спинов атомов в тепловом равновесии иллюстрируется на рис. 5.2.

На основании этого делается вывод [8], что можно говорить о спиновой температуре атомов. Это есть величина, которая определяет закон распределения спинов по разным проекциям в магнитном поле.

Модель электронов в магнитном поле в рамках квантово-механической теории, по мнению Я. А. Смородинского [8], оказывается полезной для понимания того, что такое абсолютный нуль температуры. Считается, что при любой тем-

температуре два возможных направления спина будут встречаться с разной вероятностью. Причем при очень низких температурах почти все электроны будут находиться на нижнем уровне – их спины будут смотреть против поля. Верхний уровень будет практически пустым – не «заселенным».

Чем выше температура, тем больше «заселяется» верхний уровень, и, например, при очень высоких температурах обе проекции спина будут иметь почти равную вероятность (рис. 5.3).

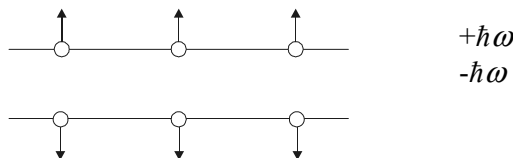


Рис. 5.3. Равные вероятности заселения уровней ($T = \infty$)

Причем

$$\omega_0 = \frac{eB}{2 \cdot m_0 \cdot c}. \quad (5.58)$$

Если температура понижается, то все большая доля электронов будет иметь спины, направленные против поля. Если $T=0$, то против поля окажутся направленными спины всех электронов (рис. 5.4).

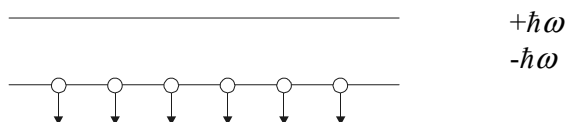


Рис. 5.4. Все электроны на нижнем уровне ($T = 0$)

Такое состояние системы отвечает абсолютному нулю температуры. При абсолютном нуле система находится в основном состоянии, и поэтому она не может отдавать энергию никакой другой системе просто потому, что у нее нет более низких уровней, на которые она могла бы перейти, потеряв энергию. На этом основании делается [8] вывод, что в квантовой теории понятие абсолютного нуля приобретает очень четкий смысл.

В определенной мере эта теория подтверждается известным принципом магнитного охлаждения вещества, особенно эффективным в области, близкой к абсолютному нулю температуры.

Как видим, спиновая теория дает объяснение некоторым моментам, в частности физической сущности абсолютного нуля температуры, однако в этой теории ситуация изменения температуры связывается только с влиянием внешнего постоянного магнитного поля на спин электрона, а вопрос о понижении температуры системы без влияния внешнего постоянного магнитного поля на направление спинов электронов вообще не ставится. В этом слабое место теории.

Можно ли вообще достичь температуры абсолютного нуля? Для того чтобы охладить тело до абсолютного нуля, необходимо отобрать у него конечное количество теплоты. Это количество теплоты легко вычислить, если известно, как зависит теплоемкость тела от температуры.

Можно ли отобрать у тела все это количество теплоты в один прием? Оказалось, что именно в этом состоит трудность. При любом методе охлаждения температура понижается в заданное число раз, а не на заданную величину. Когда была описана термодинамическая шкала, обнаружилось, что эта шкала обладает симметрией.

Если все значения температур умножить на один и тот же множитель, то формулы останутся без изменений. Это значит, что на понижение температуры заданного тела от 100 до 99 градусов и от 200 до 198 градусов надо затратить одно и то же количество работы, так как $100:99 = 200:198$.

Но если в термодинамике во все расчеты входят только отношения температур, отношения объемов и т. д., то в любом процессе, используемом для охлаждения, конечная (низкая) температура будет пропорциональна начальной (высокой), т. е. любая операция понижения температуры может только изменить масштаб – уменьшить температуру в какое-то число раз. Это подтверждается циклом Карно, в котором выполняется соотношение

$$\frac{T_1}{T_2} = \frac{Q_1}{Q_2}. \quad (5.59)$$

В него, очевидно, не входят ни количество теплоты (Q), ни температуры (T) сами по себе, а только их отношения.

Поэтому можно понять, что для того чтобы понизить температуру какого-то тела до абсолютного нуля, совершая работу, надо выполнить бесконечное число операций. Каждая операция – это может быть замкнутый цикл или отдельный процесс, например адиабатического расширения охлаждающегося газа. В каждой операции затрачивается определенная конечная работа, и температура понижается в некоторое конечное число раз. А так как на каждую операцию уходит конечное время, то полное время, нужное для охлаждения до абсолютного нуля, будет бесконечным. Так обосновывается невозможность реально достичь абсолютного нуля.

Считается, что если бы система находилась в бесконечном космосе, в полной пустоте, и излученная энергия уходила бы навсегда, то, конечно, спины потеряли бы всю энергию, и система перешла бы в состояние, отвечающее температуре абсолютного нуля. Но если система находится в каком-то замкнутом объеме, ограниченном стенками, температура которых поддерживается постоянной, то такая система будет иметь температуру стенок и сделать ее ниже этой температуры без совершения работы невозможно.

Теоретически систему можно привести в состояние $T = 0$, когда все спины в магнитном поле будут направлены против поля. Но если учесть, что спины составляют обычно только часть какой-то большой системы, они будут получать энергию от окружающих электронов (или других частиц), и состояние с $T = 0$ разрушится, как только установится тепловое равновесие. Тем не менее счита-

ется, что состояние с температурой, очень близкой к абсолютному нулю, может «жить» в спиновой системе достаточно долгое время, так как время выравнивания температуры оказывается большим. Вот так делается окончательный вывод о причинах невозможности достижения абсолютного нуля температуры.

При обосновании температуры атомных ядер в квантовой механике исходят [8] из того, что атомное ядро характеризуется набором значений энергии, которое называется спектром атомного ядра.

Если атомное ядро получило извне большую энергию, например, оно захватило нейтрон, то после такого акта захвата оно с примерно равной вероятностью может оказаться в одном из многих «конечных» состояний. В каждом маленьком интервале энергии расположено сравнительно много уровней энергии, и мы можем говорить о числе уровней Δn на единичном интервале энергии ΔE . Величину $\frac{\Delta n}{\Delta E}$ называют плотностью состояний и обозначают $\rho(E)$.

Высказывается такая гипотеза:

Вероятность найти ядро (после захвата нейтрона) в некотором состоянии пропорциональна плотности состояний в том интервале, в который попадает ядро по закону сохранения энергии. Если выбрать какую-то плотность состояний за стандартную, эталонную ρ_0 и относить плотность состояний к этой произвольно выбранной единице, то для энтропии по формуле Больцмана получают

$$S = \ln \frac{\rho}{\rho_0}. \quad (5.60)$$

Этой формулой воспользовались для оценки температуры ядра.

Известно, что, если возбудить ядро, добавив ему энергию ΔE , то его энтропия возрастает на

$$\Delta S = \frac{\Delta Q}{T} = \frac{\Delta E}{T}. \quad (5.61)$$

В данном случае увеличение энергии ΔE ядра и подвод тепла (ΔQ) к ядру эквивалентно. Тогда, подставляя в последнюю формулу значение ΔS из предыдущей, получают

$$\frac{1}{T} = \kappa \frac{\Delta \ln \rho}{\Delta E}. \quad (5.62)$$

Здесь учтено, что

$$\Delta \ln \frac{\rho}{\rho_0} = \Delta (\ln \rho - \ln \rho_0) = \Delta \ln \rho, \quad (5.63)$$

поскольку $\rho_0 = \text{const}$ и $\Delta \ln \rho_0 = 0$.

Таким образом, получено, что величина, обратная температуре, равна скорости логарифма плотности состояний с энергией возбуждения. Т. е. чем сильнее возбуждение, тем больше плотность состояний и тем больше температура ядра.

Написанная формула (5.62) кажется не похожей на те формулы, которые были представлены раньше. Естественно, говоря об атомном ядре как квантовой системе, описываются его возможные состояния как системы отдельных дискретных уровней. При описании же идеального газа его состояние характеризуется

скоростями молекул. Считается [8], что этим и объясняется различие в формулах. Формула для энтропии идеального газа выводится из вероятности найти N частиц в одном и том же объеме пространства скоростей. Поэтому, чтобы получить формулу, которая была только что получена для ядра, оценивают объем, который занимает газ в пространстве скоростей. Обозначают среднюю скорость молекул газа через v_{cp} . Интересующий нас объем представляет собой шаровой слой, сосредоточенный около сферы с радиусом v_{cp} . Толщина такого слоя, очевидно, равна ширине распределения Максвелла, которая, как известно, пропорциональна \sqrt{kT} или, что то же, пропорциональна той же средней скорости v_{cp} .

Таким образом, объем шарового слоя $V_{ш}$ оказывается равен $V_{ш} = \alpha \cdot v^3$, при этом численное значение α нас не интересует.

Теперь можно утверждать, что вероятность найти N молекул в объеме Ω равна

$$\Omega^N \approx \alpha v^{3N} \quad (5.64)$$

(опять опускается коэффициент).

По определению энтропия

$$S = k \cdot \ln \Omega^N = \frac{3}{2} N \cdot k \cdot \ln E + const. \quad (5.65)$$

В $const$ включен вклад от опущенных факторов. Эту формулу переписывают теперь так

$$\Omega^N = A \cdot e^{\frac{s}{k}}, \quad (5.66)$$

здесь A – постоянный множитель.

Мы видим, роль плотности уровней играет объем Ω^N . Этим и устанавливается соответствие между старыми и новыми формулами. Температуру ядра принято измерять не в Кельвинах, а в энергетических единицах, т. е. в джоулях, избавившись, наконец, от постоянной Больцмана k . Однако джоуль – единица слишком большая, поэтому температуру (так же, как и энергию возбуждения ядра) принято измерять в миллионах электрон-вольт:

$$1 \text{ МэВ} = 1,6 \cdot 10^{-13} \text{ Дж} \quad \text{или} \quad 1 \text{ МэВ} = 10^{10} \text{ К.}$$

Пример с температурой ядра интересен для нас еще и тем, что в ядре в единицах энергии измеряют две величины – величину возбуждения и температуру, показывающую, как изменяется плотность уровней с ростом энергии возбуждения. Именно это различие между количеством теплоты, как отмечает Я. А. Смородинский [8], и температурой трудно было понять нашим предкам.

Следует обратить внимание, что обычно температуру вещества измеряют в градусах, а температуру в плазме, в ядрах атомов – в энергетических единицах, эквивалентных градусам Кельвина. Поэтому здесь следует подробнее остановиться на вопросе о размерности температуры. Как утверждает Я. А. Смородинский [8], температура должна быть определена, по крайней мере теоретически, без ссылок на свойства каких-либо конкретных веществ, пусть даже идеальных газов.

Как известно, в мировой практике используются по крайней мере три температурных шкалы: Цельсия, Кельвина и Фаренгейта. К примеру, шкала Цельсия возникла случайно – поставили число 100° в точке кипения воды и 0° в точке ее кристаллизации. В то же время этот акт имел важные последствия: в уравнении состояния идеального газа Менделеева – Клапейрона появилась газовая постоянная $R = 8,3157 \text{ Дж}/(\text{моль}\cdot\text{К})$. Такое число возникло только потому, что величина градуса была введена очень давно и все изменения, происходящие с газами, по привычке относились к довольно случайно выбранной шкале температур. Было бы удобнее сейчас изменить определение градуса и «привязать» его к уравнению идеальных газов. Как отмечает Я. А. Смородинский [8], для этого надо просто уменьшить величину градуса в 8,3157 раза и считать, что температура в такой «идеально-газовой» шкале

$$\Theta = 8,3157T. \quad (5.67)$$

Тогда уравнение Менделеева – Клапейрона имело бы вид

$$pV = \Theta, \quad (5.68)$$

и справа не было бы никакой постоянной. Но так пока не принято делать, и постоянную R в науке сохранили, а величину градуса продолжают определять по старому термометру Цельсия. Постоянная R имеет размерность Дж/(моль·К). Выбирая другую единицу для градуса, можно, как мы видели, сделать $R = 1$. Это значит, что градусы можно измерять в джоулях – единицах энергии. Градусы, калории и джоули в конце концов оказываются только разными единицами для измерения одной и той же величины – энергии. Это очень важный вывод. Связь калорий с джоулем определяет «механический эквивалент тепла»; связь градуса и джоуля – постоянная Больцмана. Их существование – напоминание о том, что учения о теплоте и механике были разными науками. Все это нам очень важно для последующего обоснования.

Таким образом, проанализировав все вышесказанное и основываясь на спиновой гипотезе сущности температуры вещества, так же как на теории кинетической энергии молекул газа или плотности состояния энергий возбуждения в ядре, нельзя составить себе единое представление о физической сущности температуры, тем более нет математического описания этой величины как функции, а не аргумента.

На сегодня существуют два взаимно не исключających подхода к понятию температуры – кинетический и квантово-механический. Согласно кинетической точки зрения, движение частиц в газах, жидкостях и твердых телах воспринимается как тепло, а энергия движения частиц, усредненная по их огромному числу, определяет температуру [8]. В соответствии с квантово-механической теорией, всякое тело, поглощая тепло в виде квантов различной энергии (фотонов), нагревается, а излучая фотоны, – охлаждается. При этом предполагается, что излучение фотонов происходит электронами и сопровождается переходом их с высших на низшие энергетические уровни. Вероятно, наиболее правильная точка зрения о природе температуры вещества должна строиться на синтезе этих двух подходов. Для этого прежде всего необходимо несколько пересмотр-

реть наши представления о структуре атома. Очень близко о реальном понятии физической сущности температуры отражено в «Справочнике по физике» Б. М. Яворского и А. А. Детлафа [17]. Они отмечают, что «все тела в той или иной степени излучают электромагнитные волны». Электромагнитное излучение, испускаемое веществом и возникающее за счет его внутренней энергии, называется теплом, или температурным излучением. Оно зависит только от температуры и оптических свойств излучающего тела. Если расход энергии тела на тепловое излучение не восполняется за счет подвода к телу теплоты, то его температура постепенно понижается, а тепловое излучение уменьшается.

Теплообменом излучения (радиационным теплообменом) называется самопроизвольный процесс передачи энергии в форме теплоты от более нагретого тела к менее нагретому, осуществляющийся путем теплового излучения и поглощения электромагнитных волн этими телами. Тепловое излучение – единственное, которое может находиться в термодинамическом равновесии с веществом. При равновесии расход энергии тела на тепловое излучение компенсируется за счет поглощения телом такого же количества энергии падающего на него излучения. Равновесное излучение устанавливается в адиабатически замкнутой системе, все тела которой находятся при одной и той же температуре.

Из второго начала термодинамики следует, что равновесное излучение не зависит от материала тел, образующих термодинамически равновесную систему. Объемная плотность энергии равновесного излучения и ее распределение по частотам являются универсальными функциями температуры [17]. Действительно, в противном случае можно было бы взять две адиабатически замкнутые системы А и В (рис. 5.5), находящиеся при одинаковой температуре $T_A = T_B = T$, и осуществить между ними теплообмен излучением, проделав для этого небольшое отверстие в разделяющей их теплонепроницаемой стенке. Если объемная плотность энергии равновесного излучения в системе $A(\omega_A)$ больше, чем в системе $B(\omega_B)$, т. е. $\omega_A > \omega_B$, то за счет теплообмена между системами энергия излучения в системе А и ее температура должна уменьшаться, энергия излучения в системе В и ее температура должна увеличиваться. Этот процесс должен идти до тех пор, пока значения объемной плотности энергии в системах А и В не станут равными: $\omega'_A = \omega'_B$. Однако при этом $T'_B > T'_A$, так что рассматриваемый процесс противоречит второй формулировке 2-го начала термодинамики: «невозможен процесс, единственным результатом которого является передача энергии в форме теплоты от тела менее нагретого к телу более нагретому». Следовательно, ω_A не может быть больше ω_B . Точно так же ω_B не может быть больше ω_A , т. е. $\omega_A = \omega_B = \omega(T)$ – универсальная функция температуры». Таким образом, если за систему А принять интересующее нас тело, температура которого измеряется, то системой В является окружающая среда. И следовательно, температуру тела А можно измерить лишь только в том случае, когда будет равновесное излучение тепла телом А и поглощение им тепла из окружающей среды В.

Как видим, по Б. М. Яворскому и А. А. Детлафу [17] объемная плотность энергии равновесного излучения является функцией температуры, и поэтому

можно сказать, что температура есть количественная мера объемной плотности энергии равновесного излучения. Однако каким образом объемная плотность энергии излучения отражает энергию или объемную плотность энергии, заключенную в самом веществе, в самом теле, являются ли эти понятия эквивалентными, и к какому объему необходимо относить энергию, запасенную в веществе? Об этом в работе [17] ничего не указывается.

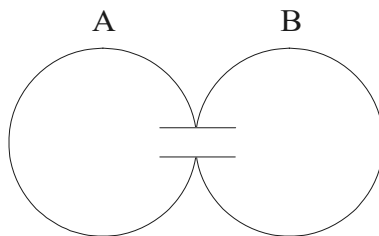


Рис. 5.5. Теплообмен между двумя адиабатически замкнутыми системами

Имеются некоторые предпосылки получить математическое выражение описания температуры как функции, используя формулу Планка, которая выражает плотность энергии теплового излучения в единице объема [7] в узком диапазоне длин волн с центром на длине волны λ .

$$U_{\lambda} = \frac{8\pi \cdot h \cdot c}{\lambda^5} \left(e^{\frac{h \cdot c}{k \cdot T \cdot \lambda}} - 1 \right)^{-1}. \quad (5.69)$$

В этой формуле T (К) – температура излучения по шкале Кельвина, c – скорость света, h – постоянная Планка, k – постоянная Больцмана, e – числовая константа, равная 2,718...

На длинах волн, значительно превышающих $\frac{hc}{kT}$, формула Планка сводится к простому выражению

$$U_{\lambda} = \frac{8 \cdot \pi \cdot k \cdot T}{\lambda^4}, \quad (5.70)$$

которое известно как предел Рэлея – Джинса. Вместо λ принято использовать частоту ν излучения, определяемую как $\nu = \frac{c}{\lambda}$. Формула Рэлея – Джинса, выраженная через плотность энергии в узком интервале частот с центром на частоте ν , показывает, что U_{ν} пропорционально $k \cdot T \cdot \nu^2$. Как правило, эта зависимость выполняется хорошо для радиоволн. Она перестает быть справедливой при длинах волн, много меньших $\frac{hc}{kT}$. В самом общем случае распределение

Планка имеет максимум на длине волны $\lambda = 0,2 \frac{hc}{kT}$. При более коротких длинах волн плотность излучения быстро падает. Полная плотность энергии теплового излучения получается сложением вкладов в U_{λ} на всех длинах волн, как

больших, так и малых. Такое суммирование (точнее, интегрирование по бесконечно малым интервалам длин волн, каждый с центром на длине волны λ_i , при этом λ меняется от 0 до ∞) дает [7]

$$U = \frac{8 \cdot \pi^5 (k \cdot T)^4}{15 (h \cdot c)^3}. \quad (5.71)$$

Для удобства эту формулу принято записывать в виде

$$U = a \cdot T^4, \quad (5.72)$$

где T – температура (°K); $a = \frac{8 \cdot \pi^5 \cdot k^4}{15 \cdot h^3 \cdot c^3}$ – константа плотности излучения,

U – интегральная излучательность абсолютно черного тела.

Таким образом, из формулы (5.72) следует, что температура есть корень четвертой степени из плотности энергии излучения, приходящейся на единицу объема:

$$T = \sqrt[4]{\frac{U}{a}} = \sqrt[4]{\frac{15 \cdot h^3 \cdot c^3}{8 \cdot \pi^5 \cdot k^4} U} = \frac{h \cdot c}{\pi \cdot k} \sqrt[4]{\frac{15}{8} \cdot \frac{U}{\pi \cdot h \cdot c}}. \quad (5.73)$$

Суммарная энергия фотонов (U) в единице объема это и есть объемная плотность энергии. Она-то и определяет величину температуры. Однако в данном случае не совсем ясно, в единице какого объема сосредоточена энергия фотонов. Фотоны в объеме вещества распределены неравномерно, они сконцентрированы вокруг электронов, вращаются и сгруппированы по нескольким орбиталам.

Наиболее близко к физической сущности понятия температуры в последние годы подошли С. Д. Брусин и Л. Д. Брусин [17, стр. 24]. Отстаивая эфирную природу теплоты, они считают, что «температура газа определяется массой эфира, приходящейся на межмолекулярную область одной молекулы». Для определения теплового состояния систем ими вводится параметр «теплосодержание системы», характеризующееся массой эфира в системе.

Я. А. Смородинский [8] отмечает, что «сравнивая тепловое поведение двух тел, мы натываемся на трудность. Легко сравнить, какое из двух тел теплее и какое холоднее, но нельзя «отнять» у одного тела один градус и нагреть на этот же градус другое тело. Теплоемкость – количество тепла, нужное для нагревания тела на один градус, – разное у разных тел, да еще и изменяется с температурой. Было ясно, что если два тела имеют одинаковую температуру, то отсюда совсем не следует, что в них заключена одинаковая энергия». Можно лишь утверждать, что они обладают одинаковой объемной плотностью энергии излучения.

Таким образом, до настоящего времени нет окончательной формулировки физической сущности понятия температуры, и чтобы дать ее, необходимо проанализировать многие моменты, связанные с температурой, в том числе учесть следующее:

1. При работе трения увеличивается температура тела, хотя к телу тепло не подводится, но в теплоту переходит работа. Каким образом работа переходит в

теплоту и повышает температуру тела? Работа трения приводит к увеличению амплитуды колебания атомов около положения равновесия в узлах кристаллической решетки и это приводит к повышению объемной плотности энергии фотонов, вращающихся вокруг электронов. При этом надо помнить, что одна и та же работа нагревает тело не на одинаковое количество градусов, а изменяет его первоначальную температуру в одинаковое количество раз, скажем, от 5°K до 10°K или от 40°K до 80°K .

2. Космические тела – «черные дыры» все поглощают, но ничего не излучают, даже электромагнитных волн света. В них очень высокая плотность вещества, следовательно, очень высокая плотность энергии и высокая температура, но их температура излучения близка к 0°K , так как они ничего не излучают. Следовательно, о температуре вещества мы можем судить по объемной плотности фотонной энергии излучения в веществе, но не всегда по объемной плотности фотонной энергии излучения поверхностью этого вещества.

3. Температура вещества проявляется при излучении фотонов этим веществом. Излучение или поглощение должно происходить при условии отсутствия равновесия объемной плотности фотонной энергии в окружающем веществе пространстве и в пределах валентных внешних электронов атомов вещества. Таким образом, этот процесс – излучения, поглощения эквивалентен диффузии атомов газа, которая идет в направлении меньшей концентрации (меньшей объемной плотности энергии). Следовательно, фотонный газ вокруг электронов вещества и фотонный газ в окружающем пространстве представляют собой фотонные поля, которые диффундируют в направлении меньшей концентрации, меньшей объемной плотности, стремясь выровнять объемные плотности фотонной энергии во всем пространстве, включая внешние электроны атомов. Объемная плотность фотонной энергии вокруг внутренних электронов иная и существенно выше.

4. В состоянии равновесия объемной плотности энергии в веществе и в окружающей среде либо происходит равновесное излучение и одновременно поглощение тепловой энергии в виде фотонов веществом, либо наоборот прекращается всякое излучение и, следовательно, поглощение фотонной энергии или этот процесс существенно замедляется и, следовательно, объемная плотность излучения веществом не соответствует температуре этого вещества. В этой ситуации мы, измеряя температуру вещества методом касания к нему термометра, фактически измеряем объемную плотность фотонной энергии в окружающем пространстве, а так как окружающее пространство находится в состоянии равновесия объемных плотностей фотонных энергий с веществом, то можно считать, что замеренная температура отражает температуру вещества.

5. При излучении спектров фотонов для каждого элемента выявляется существенное различие в яркости отдельных линий спектра, что отражает количественное различие излучаемых фотонов – одних фотонов (фотонов одной частоты) значительно больше, а других меньше. Это свидетельствует о том, что в спектральных сериях фотонов, отражающих фотонные оболочки разной оси направленности вращения вокруг электронов, имеются разной ширины подобо-

лочки и, как правило, фотонные оболочки представляют собой клинообразное строение с разной шириной клина, расширяющегося наружу. Это подтверждается тем, что вблизи фазовых переходов второго рода теплоемкость низкотемпературной фазы, как правило, больше теплоемкости высокотемпературной фазы.

Количество фотонных оболочек валентных электронов возможно должно дополнять количество электронов на последней орбитали так, чтобы общее число фотонных оболочек всех валентных электронов было равно 8, как и общее количество валентных электронов у инертных газов.

6. Если анализировать три агрегатных состояния вещества: газ (пар), жидкость, твердое (кристаллическое) тело, то мы видим, что в объеме газа объем фотонного поля, находящегося около молекул газа, превалирует, и поэтому для идеального газа четко отмечается связь изменения объема газа с температурой (уравнение Менделеева – Клапейрона):

$$pV = \frac{m}{M} \cdot R \cdot T, \quad (5.74)$$

где p – давление газа; V – занимаемый объем; m – фактическая масса газа; M – молярная масса газа; R – универсальная газовая постоянная; T – абсолютная температура.

В реальном газе необходимо учитывать объем, занимаемый самими молекулами газа, кроме общего объема газа, и взаимодействие молекул газа между собой, приводящее к увеличению давления (уравнение Ван-дер-Ваальса)

$$\left(p + \frac{a}{V_m^2} \right) (V_m - b) = R \cdot T, \quad (5.75)$$

здесь a и b – постоянные Ван-дер-Ваальса, причем b – объем, занимаемый самими молекулами газа, V_m – объем, занимаемый одним молем газа.

В жидком состоянии соотношение объемов фотонного газа и самих молекул уже не в пользу фотонного поля. В кристаллическом состоянии при уменьшении объема в процессе кристаллизации соотношение объемов самих молекул и фотонного газа еще несколько увеличивается или наоборот снижается, если происходит увеличение объема при кристаллизации, как, например, при замерзании воды, висмута.

В жидком и кристаллическом состоянии вещества по сравнению с газообразным резко уменьшается кинетическая энергия молекул за счет практически отсутствия их поступательного движения. Таким образом, на температуру вещества влияет объемная плотность энергии фотонного газа вокруг валентных электронов, зависящая как от их концентрации и частоты, так и от механического перемещения, вращения и колебания молекул.

7. Удельные теплоемкости газов из расчета на 1 г или 1 кг существенно различаются. Но если пересчитать удельные теплоемкости газов на их молярные теплоемкости или из расчета на 1 атом, то их молярные теплоемкости будут отличаться меньше (табл. 5.2).

Это свидетельствует о том, что на нагрев одного атома (молекулы) разного газа требуются близкие величины тепловой энергии независимо от их массы. То есть эта энергия распределяется вокруг атома (молекулы), поэтому темпера-

тура – это не просто мера механической энергии или движения, а мера концентрации фотонной энергии в пределах внешних электронов атомов (молекул).

Таблица 5.2

Удельные и молярные теплоемкости газов

Газ	Молярная масса	t, °C	Удельная теплоемкость кДж/(кг·°K)	Молярная теплоемкость кДж/(кмоль·°K)
Азот (N ₂)	28	0-200	1,0	28
Водород (H ₂)	2	0-200	14,2	28,4
Водяной пар (H ₂ O)	18	100-500	2,0	36,0
Воздух	29	0-400	1,0	29
Гелий (He)	4	0-600	5,2	20,8
Кислород (O ₂)	32	20-440	0,92	29,14
Хлор (Cl ₂)	70	13-200	0,5	35

8. Для многих веществ при переходе из жидкого в газообразное состояние удельные теплоемкости снижаются примерно вдвое (табл.5.3).

Таблица 5.3

Удельная теплоемкость

Газ	Удельная теплоемкость, кДж/(кг · °K)		
	твердое	жидкое	газообразное
Азот (N ₂)	0,46	2,01	1,0
Воздух	2,0	1,97	1,0
Кислород (O ₂)	1,6	1,63	0,92
Вода (H ₂ O)	2,10	4,19	2,0
Водород (H ₂)	-	7,41	14,2
Гелий (He)	-	4,19	5,2

Это свидетельствует о том, что температура – объемная концентрация энергии, зависящая не только от энергии фотонов в веществе, но и от скорости движения молекул вещества.

9. Некоторые газы, например, водород и гелий, которые находятся в жидком состоянии при очень низких температурах, характеризуются увеличением теплоемкости при переходе из жидкого состояния в газ; а для азота характерно резкое увеличение теплоемкости при переходе из твердого в жидкое состояние при температуре, близкой к абсолютному нулю. Это косвенно свидетельствует о существенном изменении количества фотонных оболочек вокруг валентных электронов атомов при фазовых переходах из одного агрегатного состояния в другое.

10. При плавлении и испарении температуры плавления ($T_{пл}$) и испарения ($T_{исп}$) веществ остаются постоянными, но одновременно меняются агрегатные состояния, занимаемые объемы веществом и количество фотонных оболочек

вокруг валентных электронов. При этом одни вещества увеличиваются в объеме при плавлении, а некоторые (вода, висмут) – уменьшаются. В этих условиях растет внутренняя энергия, но объемная концентрация энергии остается постоянной и, следовательно, сохраняется постоянной температура. Однако на основании этого нельзя сказать, что температура – это объемная плотность энергии в теле, т. е. энергия, приходящаяся на единицу объема тела. Температура связана с объемной плотностью фотонной энергии в пределах фотонных оболочек валентных электронов атомов.

При расширении газа его температура снижается, и это происходит всегда, а при сжатии – температура увеличивается. В этих ситуациях меняется объемная плотность энергии в пределах всего объема газа. Здесь речь идет обо всем объеме, а не только об объеме фотонных оболочек. Когда вещество испаряется и его атомы находятся в газообразном состоянии, то объем газа во много раз больше, чем объем атомов испарившегося вещества (например, для воды в 1600 раз). Поэтому молекулы газа взаимодействуют через фотонные оболочки, размеры которых существенно превалируют над размерами атомов этого вещества. В связи с этим сжатие передается на фотонные оболочки, и температура отражает концентрацию фотонной энергии – объемную плотность фотонной энергии, так как в такой системе имеет место равновесное состояние излучения – поглощения фотонов.

12. При освобождении атома или молекулы из жидкого состояния и переходе его в газообразное состояние происходит охлаждение оставшейся массы вещества. Этот факт свидетельствует о том, что не просто забирается какая-то кинетическая энергия от системы, а забирается вполне вещественная энергия в виде фотонов и уменьшается их концентрация в фотонных оболочках электронов оставшегося вещества.

13. Оказалось, что если растворять газ гелий с атомным весом 3 (He^3) в обычном жидком гелии (He^4), то температура раствора понижается. Так получают температуру до 0,001 K [8]. Однако автор не объясняет физическую причину этого эффекта. На наш взгляд, эффект снижения температуры, вероятно, получается потому, что до смешения He^3 и He^4 имели одинаковые температуры, но в He^3 , как в газе, концентрация фотонов была ниже при одинаковой объемной плотности фотонной энергии, так как часть ее определялась повышенной кинетической энергией движения молекул. Растворяясь в жидкости He^4 , газ He^3 переходит в полужидкое состояние и теряет подвижность, у его молекул уменьшается кинетическая энергия движения, т. е. уменьшается объемная плотность фотонной энергии в He^3 и, следовательно, во всем растворе, а это приводит к снижению температуры всего раствора.

14. Когда атом в основном (нормальном невозбужденном) состоянии с $n=1$, то энергия его минимальная, электрон вращается по первой боровской орбите, находится в невозбужденном состоянии и ниже он (электрон) уже не может опуститься. Это состояние с минимумом энергии и должно бы соответствовать температуре абсолютного нуля. При температуре ниже этой электрон должен упасть на ядро и им захватиться.

Таким образом, физический смысл абсолютного нуля температуры по шкале Кальвина заключается в том, что валентные орбитальные и свободные электроны в веществе полностью теряют фотоны. В этом случае, независимо от наличия движения атомов, их колебания и вращения валентных электронов по орбитам, объемная плотность фотонной энергии остается равной нулю.

Как только появляется хоть один фотон вокруг валентных электронов, то объемная плотность энергии будет зависеть не только от количества фотонов и их частоты колебаний, но и от движения и колебания электронов и в целом атомов, которым принадлежат фотоны. Это приводит к росту объемной плотности фотонной энергии.

При таком объяснении нет необходимости привлекать спины электронов и атомов для объяснения физического смысла абсолютного нуля температуры.

15. Плотность энергии излучения – это не то же самое, что плотность энергии в атоме, внутри излучающей системы. Вероятно, излучение происходит из поверхностного слоя атома, которое правда и определяет ту температуру, которую мы ощущаем и измеряем, т. е. это излучающие фотонные оболочки внешних электронов.

При обычной химической реакции горения веществ температура может подняться лишь на несколько сотен или тысяч градусов, когда вещество находится в виде молекул и атомов либо частично ионизируется.

Внутренние электроны содержат другой спектр фотонных оболочек, которые если и излучаются, то лишь частично и не определяют температуру тела. Поэтому температура в десятки и даже сотни тысяч градусов достигается в плазменном состоянии вещества, когда атомы разлагаются на ионы и электроны. В плазме электроны внешние и внутренние отрываются от атомов и приобретают полную свободу движения. В горячей плазме частицы быстро проносятся одна мимо другой, не успевая «зацепиться» друг за друга. Температура при этом столь резко возрастает, вероятно, за счет выделения фотонов в свободное состояние не только внешними, но и внутренними электронами атомов, резкого увеличения механического движения ионов, электронов, что приводит к существенному возрастанию концентрации фотонной энергии.

Еще более высокая температура может быть достигнута в миллионы градусов при разложении ядер атомов на протоны, нейтроны и электроны с выделением γ -квантов высокой энергии. Так, например, в недрах Солнца сжатая плазма имеет температуру свыше 10000000°K . При этой температуре атомные ядра сталкиваются с такой силой, что соединяются между собой. Происходят термоядерные реакции, приводящие к слиянию атомов водорода с образованием атомов гелия и выделению громадного количества энергии.

Таким образом, температура на каждом срезе атома, включая ядро, изменяется скачкообразно и возрастает, так как вскрываются электроны и другие элементарные частицы, вокруг которых вращаются фотоны с большей и большей энергией.

Следовательно, замеряя температуру вещества, мы фиксируем минимальную температуру атомов (молекул) данного вещества, соответствующую в каждый

момент объемной плотности энергии орбиталей фотонов, вращающихся вокруг электронов внешней оболочки атома (молекулы), т. е. валентных электронов.

В связи с этим под температурой вещества следует понимать физическую величину, характеризующую объемную плотность фотонной энергии внешней оболочки атомов (молекул) в пределах валентных электронов.

Каждый атом вещества характеризуется внешней, внутренней и ядерной температурой. Внешняя определяется объемной плотностью энергии фотонов в околоэлектронном пространстве последней оболочки валентных электронов; внутренняя – объемной плотностью энергии фотонов в пределах каждой орбитали внутренних электронов атома, а ядерная температура – объемной плотностью фотонной энергии в пределах ядра. На внутренних электронных оболочках объемная плотность энергии фотонов повышается от периферии к ядру и, следовательно, повышается температура.

Для математического обоснования физической сущности температуры необходимо исходить из того, что:

1) фотоны в веществе находятся не в статическом, а динамическом состоянии, «адсорбируясь» на электронах атомов, они вращаются вокруг них по определенным орбитам с собственной частотой колебания и линейной скоростью, равной скорости света;

2) фотоны в веществе обладают начальной собственной частотой колебаний по аналогии с их параметрами в вакууме;

3) на несущую частоту собственных колебаний фотонов накладываются круговая частота и орбитальный радиус вращения электронов, частота и амплитуда собственных и вынужденных колебаний электронов и атомов в целом кристаллической решетки, а также линейное перемещение свободных электронов;

4) объемная плотность энергии фотонов в веществе определяется их концентрацией, частотой собственных колебаний, а также частотой и орбитальным радиусом вращения электронов, амплитудой и частотой собственных и вынужденных колебаний электронов и атомов или скоростью линейного перемещения свободных электронов под воздействием разности потенциалов, так как происходит модулирование собственных колебаний фотонов, т. е. наложение на частоту собственных колебаний фотонов частоты и амплитуды как собственных, так и вынужденных колебаний и перемещений электронов, вокруг которых вращаются фотоны. Поэтому при более высокой собственной частоте колебаний электронов и атомов, появлении вынужденных колебаний электронов и атомов за счет воздействия внешней механической работы либо движении свободных электронов при наличии разности потенциалов увеличивается суммарная частота сложных колебаний фотонов по сравнению с их собственной частотой, и это приводит к увеличению объемной плотности фотонной энергии.

Исходя из вышесказанного, выражение, определяющее температуру вещества, как меру объемной плотности фотонной (квантовой) энергии, в общем виде можно представить следующим образом:

$$T = \frac{E}{k \cdot V} = \frac{E_{c.ф.}}{k \cdot V} \cdot (1+U) = \frac{\sum_{n=1}^{n=i} h \cdot \nu_i}{k \cdot V} \cdot (1+U) = \frac{\sum_{n=1}^{n=i} h \cdot \nu_i \cdot \delta}{k \cdot m} \cdot (1+U), \quad (5.76)$$

где T – абсолютная температура вещества; E – общая фотонная энергия в пределах внешних валентных электронов атомов вещества; $E_{с.ф.}$ – энергия фотонов внешних валентных электронов в веществе, обусловленная только собственной частотой колебания фотонов; ν_i – собственная частота колебаний фотонов внешних валентных электронов в веществе; h – постоянная Планка; V , m , δ – объем, масса и плотность вещества; U – индекс возбужденного состояния вещества; k – доля от общего объема вещества, приходящаяся на внешние оболочки атомов в пределах валентных электронов.

Индекс возбужденного состояния вещества складывается из индекса орбитального движения электронов ($U_{ог}$), собственных периодических колебаний электронов и атомов в целом ($U_{ск}$), вынужденных затухающих колебаний электронов и атомов в целом ($U_{вк}$) при воздействии внешней механической работы и поступательного движения свободных электродов при протекании электрического тока в веществе ($U_{нс}$), и в общем случае равен

$$U = (1 - \beta)U_{ог} + U_{ск} + U_{вк} + \beta \cdot U_{нс}; \quad (5.77)$$

здесь β – доля свободных электронов в веществе от общего количества валентных электронов в нем.

Следовательно:

– при отсутствии внешних механических и электромагнитных воздействий

$$U = U_{ог} + U_{ск} = U_{нк} \quad (5.78)$$

и

$$T = \frac{E_{сф} (1 + U_{нк}) \delta}{k \cdot m}; \quad (5.79)$$

здесь $U_{нк}$ – индекс начальных колебаний системы электронов и атомов в веществе;

– при наличии внешних механических воздействий

$$T = \frac{E_{сф} (1 + U_{нк} + U_{вк}) \cdot \delta}{k \cdot m}; \quad (5.80)$$

– при протекании электрического тока в веществе

$$T = \frac{E_{сф} (1 + U_{нк} + \beta \cdot U_{нс}) \cdot \delta}{k \cdot m}; \quad (5.81)$$

– при совместном воздействии внешней механической работы и протекании электрического тока

$$T = \frac{E_{сф} (1 + U_{нк} + U_{вк} + \beta \cdot U_{нс}) \cdot \delta}{k \cdot m}; \quad (5.82)$$

– после воздействия постоянного магнитного поля высокой напряженности и проявлении магнитокалорического эффекта

$$T = \frac{E_{сф} (1 + U_{нк}^{\min}) \cdot \delta}{k \cdot m} \cong \frac{E_{сф} [1 + (1 - \beta)U_{ог}] \cdot \delta}{k \cdot m}; \quad (5.83)$$

здесь $U_{нк}^{\min}$ – индекс минимального уровня собственных начальных колебаний после успокоения системы атомов магнитным полем;

$$U_{нк}^{\min} \approx U_{ог} \cdot (1 - \beta). \quad (5.84)$$

Уравнение (5.76) можно также представить в виде

$$T = \frac{Q}{k \cdot V} = \frac{Q_{cf}}{k \cdot V} (1 + U) = \frac{Q_{cf} \cdot \delta}{k \cdot m} (1 + U), \quad (5.85)$$

где Q – общее количество тепла в веществе, в пределах валентных и свободных электронов, обусловленное фотонной и кинетической составляющими; Q_{cf} – количество тепла в веществе, в пределах валентных и свободных электронов, обусловленное только частотой собственных колебаний фотонов в веществе, так как

$$Q_{cf} = E_{cf} = \sum_{n=1}^{n=i} h \cdot \nu_i. \quad (5.86)$$

Известно, что протекание электрического тока в проводнике приводит к его нагреву и выделению тепла, причем количество выделяемого тепла

$$\Delta Q = 0,24 \cdot J^2 R t = 0,24 \cdot J^2 t \cdot R_{20} [1 + \alpha(T - 293)], \quad (5.87)$$

где J – сила тока в проводнике (в амперах); R – электрическое сопротивление проводника при температуре T (в Ом); R_{20} – электрическое сопротивление проводника при 293°К (в Ом); α – температурный коэффициент сопротивления проводника; t – время (в с).

В соответствии с уравнениями (5.76)-(5.85), изменение количества тепла проводника за счет движения свободных электронов при протекании электрического тока равно

$$\Delta Q = E_{cf} \cdot \beta \cdot U_{nc} = Q_{cf} \cdot \beta \cdot U_{nc}. \quad (5.88)$$

Приравнявая уравнения (5.87) и (5.88), получим

$$U_{nc} = \frac{0,24 \cdot J^2 t \cdot R_{20} [1 + \alpha(T - 293)]}{\beta \cdot E_{cf}}. \quad (5.89)$$

Таким образом, уравнение (5.76) и его частные случаи в виде выражений (5.79)-(5.83) и (5.85) обосновывают объединение кинетических и квантово-механических представлений о природе температуры вещества и позволяют дать физическое объяснение различных термических эффектов и природных явлений, связанных с проявлением температуры вещества как объемной плотности фотонной энергии в пределах валентных и свободных электронов в веществе.

Рассмотрим с позиций данной теории температуры обоснование физической сущности различных процессов, связанных с ее проявлением. Во-первых, под температурой абсолютного нуля следует понимать такое состояние вещества, при котором в нем в пределах валентных и свободных электронов полностью отсутствует фотонная энергия. Таким образом, до тех пор, пока в околоэлектронном пространстве валентных электронов вещества будет находиться хотя бы один фотон, температура вещества не будет равна нулю и будет определяться как частотой этого фотона, так и индексом возбужденного состояния электрона, вокруг которого вращается этот фотон. В то же время при отсутствии

фотонов вокруг валентных электронов в веществе, независимо от величины индекса возбужденного состояния, температура будет равна нулю. Однако достигнуть такого состояния, при котором в веществе концентрация фотонов вокруг валентных электронов будет равна нулю, невозможно, потому что в пространстве, окружающем данное вещество, всегда имеется хотя бы минимальная концентрация фотонов, которая стремится прийти в равновесие с окружающей средой. Кроме того, в этом случае возможен переход фотонов от внутренних электронов к электронам внешним – валентным.

В соответствии с уравнениями (5.76), (5.80) и другими, становится понятно, почему, затрачивая одинаковое количество механической работы и тем самым увеличивая индекс возбужденного состояния вещества на одну и ту же величину, температура его изменяется в одинаковое количество раз, а не на одну и ту же величину, независимо от ее первоначального значения.

Описанная теория позволяет объяснить физический смысл различия температур электронов и ионов в плазме вещества за счет разной плотности фотонной энергии вокруг свободных электронов и отдельных ионов плазмы. Проводя аналогию, можно утверждать, что валентные электроны кристаллической решетки вещества и его свободные электроны могут также характеризоваться разной плотностью фотонной энергии и соответственно разной температурой.

Основываясь на понятии температуры вещества как меры объемной плотности фотонной энергии в пределах валентных и свободных электронов в нем, можно дать объяснение и многих других физических явлений, связанных с термическими эффектами. Например, известен факт, что нагретое тело краснеет, но облучение его рентгеновскими лучами не очень нагревает тело. Это свидетельствует о том, что рентгеновские фотоны поглощаются внутренними электронами, фотонная энергия которых, характеризуя их температуру, никак не влияет на регистрируемую нами температуру тела, потому что температура тела, регистрируемая нами, отражает лишь энергию фотонов внешних электронов атома.

5.4. Термобарическое изменение объема вещества

Сжимаемость – это способность вещества изменять свой объем под действием всестороннего давления [11]. Сжимаемостью обладают все вещества. Если вещество в процессе упругого сжатия под давлением не испытывает химических, структурных и других изменений, то при возвращении внешнего давления к исходному значению начальный объем восстанавливается. Именно обратимое изменение занимаемого веществом объема V под равномерным гидростатическим давлением p и называется обычно сжимаемостью или объемной упругостью. Величину сжимаемости характеризуют коэффициентом сжимаемости β , который выражает уменьшение единичного объема (или плотности) тела при увеличении p на единицу:

$$\beta = -\frac{1}{V} \left(\frac{\Delta V}{\Delta p} \right) = \frac{1}{\rho} \left(\frac{\Delta \rho}{\Delta p} \right), \quad (5.90)$$

где ΔV и $\Delta \rho$ – изменение объема V и плотности ρ при изменении давления на величину Δp .

При исследовании сжимаемости тел используют также величину, обратную коэффициенту сжимаемости, – модуль объемной упругости (модуль объемного сжатия, объемный модуль) $K = \frac{1}{\beta}$.

Для твердых тел

$$K = \frac{E \cdot G}{3(3G - E)}, \quad (5.91)$$

где E – модуль Юнга; G – модуль сдвига.

Для идеальных газов в широком диапазоне температур $K = p$ или $\beta = \frac{1}{p}$.

В общем случае сжимаемость вещества, а следовательно, K и β зависят от p и T . Как правило β убывает при увеличении p и растет с T . Часто сжимаемость характеризуют относительной плотностью $\delta = \frac{\rho}{\rho_0}$, где ρ_0 – плотность при $t = 0^\circ\text{C}$ и $p = 1$ атм.

Сжатие может происходить как при $T = \text{const}$ (изотермически), так и с одновременным разогревом сжимаемого тела (например, в адиабатном процессе). В последнем случае значения K будут большими, чем при изотермическом сжатии (для большинства тел при обычной T – на несколько %).

Сжимаемость можно определить, измеряя линейную деформацию твердого тела под гидростатическим давлением. Для изотропного тела коэффициент линейной сжимаемости

$$\frac{1}{L} = \left(\frac{\Delta L}{\Delta p} \right) = \frac{1}{3} \beta, \quad (5.92)$$

где L – линейный размер тела.

Сжимаемость газов, будучи очень большой при $p < 10^3$ атм., по мере приближения их плотности к плотности жидкостей становится близкой к сжимаемости жидкостей. Последняя с ростом p уменьшается сначала резко, а затем меняется весьма мало: в интервале $(6-12) \cdot 10^3$ атм. β уменьшается примерно также, как в интервале от 1 атм до 10^3 атм (примерно в 2 раза), и при 10^4 атм. составляет 5–10% от начального значения. При $(3,0-5,0) \cdot 10^4$ атм модули K жидкостей по порядку величины близки к модулю объемной упругости K твердых тел.

Для твердых тел при 10^5 атм $\frac{\Delta \rho}{\rho} \approx (15-25)\%$. Для отдельных веществ,

например, для щелочных металлов $\frac{\Delta \rho}{\rho} \approx 40\%$, для большинства других метал-

лов $\frac{\Delta \rho}{\rho} \approx (6-15)\%$.

Линейная сжимаемость анизотропных веществ зависит от кристаллографических направлений (во всяком случае до давлений в 10^4 атм.), причем вдоль направлений со слабым межатомным взаимодействием она может в 8–10 раз превосходить сжимаемость по направлениям, вдоль которых в кристаллической решетке имеет место более сильная связь; изменение параметров решетки в этих направлениях в определенном интервале давлений может быть даже положительным (теллур, селен). Таким образом, если, например, к металлическому стержню длиной L и площадью сечения S приложить направленную вдоль оси силу F , то приложенная сила создает по сечению S давление

$$p = \frac{F}{S}. \quad (5.93)$$

Под действием этого давления стержень сожмется на величину $\Delta L_{сж.}$ и его относительная деформация составит $\frac{\Delta L_{сж.}}{L}$. Следует отметить, что изменение длины стержня (укорочение) будет не безгранично, так как стержень сопротивляется сжатию в связи с тем, что в нем возникает напряжение (σ), численно равное давлению, но противоположное ему по направлению.

Почему в стержне возникает напряжение и он сопротивляется сжатию? Потому что молекулы, объединенные в кристаллическую структуру, сопротивляются сближению их друг к другу, так как они взаимодействуют через электромагнитные поля фотонных оболочек электронов.

Что произойдет, если этот стержень с одного конца закрепить и подвесить, а с другого конца приложить к нему растягивающую силу, например, подвесить какой-то груз? В этом случае стержень будет деформироваться, удлиниться на величину $\Delta L_{раст.}$. В стержне также будет возникать напряжение ($\sigma_{раст.}$), численно равное

$$\sigma_{раст.} = \frac{F}{S}. \quad (5.94)$$

Более того, вектор напряжения будет направлен противоположно приложенной силе. Таким образом, в случае растяжения стержня в нем формируются силы, препятствующие его разрушению и удалению молекул друг от друга. Следовательно, в стержне возникает ситуация, аналогичная опыту Фарадея при обосновании явления электромагнитной индукции с учетом правила Ленца о направлении индукционного тока в катушке под действием магнита, приближающегося или удаляющегося от нее.

На основании закона Фарадея – Ленца под действием изменяющегося потока магнитного поля в катушке возникает индукционный ток такого направления, что создаваемый им магнитный поток препятствует изменению основного магнитного потока, создающего индукционный ток. Как известно, в каждом теле есть электроны, вращение которых вокруг ядра эквивалентно электрическому круговому току, а в соответствии с нашей концепцией о строении атома, вокруг электронов вращаются фотонные оболочки, т. е. электромагнитное поле. При сжатии или растяжении тела (стержня) происходит изменение

потока электромагнитного фотонного поля, которое приводит к соответствующему изменению кругового тока электронов, т. е. к возникновению индукционного кругового тока электронов в полном соответствии с законом Фарадея – Ленца, и как результат тело сопротивляется сжатию или растяжению. Изменение объема вещества при сжатии происходит за счет уменьшения объема фотонного поля вокруг валентных электронов. Это приводит к повышению температуры тела, которая при постоянном действии нагрузки постепенно снижается до состояния равновесия с окружающей средой путем излучения фотонов.

Как видим, природа сжимаемости объясняется межатомным взаимодействием с участием фотонного электромагнитного поля электронов, а величина сжимаемости зависит от соотношения сил этих взаимодействий.

Однако сжатие тела по всему объему или в определенном направлении, а также растяжение его и увеличение объема в целом может быть достигнуто значительно проще – без приложения силы или всестороннего давления, а просто изменением температуры тела.

Тепловое расширение (сжатие) – это изменение размера тела в процессе его нагревания (охлаждения) [11]. Количественно тепловое расширение (сжатие) при постоянном давлении p характеризуется изобарным коэффициентом расширения (сжатия) (коэффициентом объемного теплового расширения (сжатия)).

$$\alpha = \frac{1}{V} \left(\frac{dV}{dT} \right)_p, \quad (5.95)$$

где V – объем тела (твердого, жидкого или газообразного); T – его абсолютная температура.

Практически значение α определяется формулой

$$\alpha = \frac{V_2 - V_1}{V(T_2 - T_1)}, \quad (5.96)$$

где V_1 и V_2 – объемы тела при температуре T_1 и T_2 соответственно.

Для идеальных газов:

$$V = V_0(1 + \alpha t) \quad (5.97)$$

или

$$V = \alpha T V_0, \quad (5.98)$$

где $\alpha = \frac{1}{273}$; V , V_0 – объем газа при температуре t и при температуре $t = 0^\circ\text{C}$.

Для характеристики теплового объемного расширения (сжатия) твердых тел наряду с α вводят коэффициент линейного теплового расширения:

$$\alpha_x = \frac{1}{l} \left(\frac{dl}{dt} \right)_p, \quad (5.99)$$

где l – начальная длина тела вдоль выбранного направления.

В общем случае анизотропных тел $\alpha = \alpha_x + \alpha_y + \alpha_z$, причем различие или равенство коэффициентов теплового расширения α_x , α_y , α_z вдоль кристалло-

графических осей X, Y, Z определяется симметрией кристалла. Например, для кристаллов кубической системы, так же как и для изотропных тел $\alpha_x = \alpha_y = \alpha_z = \alpha_l$ и $\alpha = 3\alpha_l$.

Для большинства тел коэффициент теплового расширения $\alpha > 0$, но существуют исключения. Например, вода при нагреве от 0 до 4°C при атмосферном давлении сжимается ($\alpha < 0$).

Зависимость α от T наиболее заметна у газов (для идеальных газов $\alpha = \frac{1}{T}$), у жидкостей она проявляется слабее. У некоторых веществ в твердом состоянии (кварц, инвар и др.) коэффициент α мал и практически постоянен в широком интервале температур. При $T \rightarrow 0$ коэффициент $\alpha \rightarrow 0$. Таким образом, для идеальных газов в соответствии с уравнением Менделеева – Клапейрона $pV = RT$ для моля газа наблюдается обратно пропорциональное влияние температуры и давления на объем газа, то в жидких и твердых (кристаллических) телах этого соответствия уже не отмечается.

Принято считать [11], что температурное расширение газов обусловлено увеличением кинетической энергии частиц газа при его нагреве и совершением за счет этой энергии работы против внешнего давления.

При достаточно низкой температуре любой газ можно превратить в жидкость, приложив внешнее давление, при этом объем уменьшается, а молекулы сближаются настолько, что силы притяжения между ними оказываются достаточными, чтобы вызвать конденсацию. Ниже некоторой температуры, называемой критической, между жидкой и паровой фазами существует мениск, но при достижении критической температуры мениск исчезает. Для чистого вещества критическое состояние может определяться любым из следующих двух критериев:

- 1) критическому состоянию соответствует температура и давление, при которых газовая и жидкая фазы становятся настолько близкими по свойствам, что не могут более существовать как отдельные фазы;
- 2) критическая температура чистого вещества – это самая высокая температура, при которой газ и жидкость еще могут существовать как отдельные фазы [3].

Критическим давлением называется давление в критической точке, а критическим объемом – значение мольного объема при этих условиях.

Самым важным и интересным моментом оказалось то, что около критической точки сжимаемость вещества в газо-жидкостном состоянии так велика, что ускорение силы тяжести приводит к значительным различиям плотности в верхней и нижней частях сосуда. Так, в столбике вещества высотой всего несколько сантиметров разность плотностей, возникающая под действием изменяющейся по высоте столбика силы тяжести, может достигать 10% [3]. Аномально высокую сжимаемость около критической точки можно объяснить существенным преобладанием сил межмолекулярного притяжения по сравнению с силами межмолекулярного отталкивания фотонными полями атомов и молекул, характерного для идеальных газов. Этот эффект начинает проявляться уже в реальных газах,

для которых еще Ван-дер-Ваальс в уравнение состояния ввел поправку на молекулярное притяжение, прибавив к измеряемому давлению p в уравнение состояния член $\frac{na}{V^2}$, где a – константа Ван-дер-Ваальса, а n – число молей газа.

Большинство жидких и твердых тел расширяется при увеличении температуры. На первый взгляд может показаться, что расширение можно объяснить увеличением амплитуды колебаний связанных атомов. В конце концов, если каждый атом совершает колебания в увеличивающейся с ростом средней кинетической энергии области, то разве не будет при этом увеличиваться в размере все тело? Однако такой довод считают ошибочным и проводят аналогию с колеблющимся грузом. Что происходит с положением равновесия груза, колеблющегося на пружине, при увеличении амплитуды колебаний? Независимо от амплитуды колеблющегося на пружине груза, его среднее положение остается неизменным. Если бы увеличение объема нагретого тела определялось только большей амплитудой колебаний каждого атома, то вклад давали бы только атомы, находящиеся на поверхности. Увеличение объема было бы ничтожным. Поэтому принято считать [9, 11], что это явление обусловлено не просто большей амплитудой колебания атомов. Для обоснования этого ввели искусственное, по нашему мнению, понятие несимметричности потенциала взаимодействия атомов вещества в решетке. В связи с этим форма потенциальной ямы, в которой связан каждый атом, принимается асимметричной (рис. 5.6). Это вроде бы приводит к ангармонизму колебаний атомов относительно среднего положения.

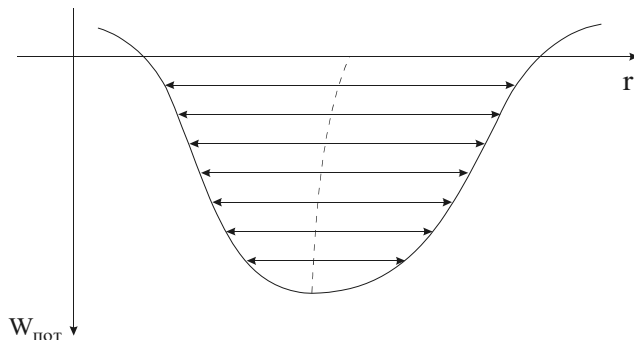


Рис. 5.6. Характер потенциала взаимодействия атомов в веществе [9]

На рисунке показано среднее положение в такой асимметричной яме. При увеличении амплитуды колебаний то же самое происходит и со средним удалением каждого атома от его соседей. При росте температуры увеличивается и среднее расстояние между атомами. Поэтому твердое тело при росте температуры расширяется.

В соответствии с нашей концепцией строения атома и понятия температуры вещества, реальная природа термического расширения и сжатия газообразных, жидких и твердых тел – изменение объема фотонного поля вокруг валентных электронов при изменении температуры тела. При снижении температуры тела

происходит излучение части фотонов, вращавшихся вокруг валентных электронов, т. е. удаление из вещества части фотонного поля электронов. За счет этого валентные электроны приближаются к ядрам атомов и стягивают соседние атомы между собой. Объем тела уменьшается.

При увеличении температуры тела за счет поглощения подводимого извне тепла, т. е. подводимых извне фотонов, происходит увеличение диаметров фотонных орбиталей валентных электронов. Это приводит к увеличению внутреннего распирающего давления фотонного поля валентных электронов и их удалению от ядра атомов и, следовательно, увеличению расстояний между атомами и в целом – к увеличению объема тела.

В тех случаях, когда поглощение фотонов или их излучение совпадает с моментом начала формирования очередной фотонной оболочки валентных электронов и следующие друг за другом фотонные оболочки имеют разную структуру, то происходит перегруппировка атомов за счет их взаимодействия новыми фотонными орбиталями валентных электронов, и в этот момент происходит более активное изменение объема вещества.

Если предыдущая, удаленная при излучении фотонная оболочка имела более округлую форму, а последующая фотонная оболочка имеет эллипсообразную форму и наклонена под другим углом к плоскости орбиты электрона, то при температуре, соответствующей моменту перехода взаимодействия атомов через новую (эллипсообразную) фотонную оболочку, возможно увеличение объема вещества, хотя будет иметь место снижение температуры. Ярким примером этого является вода.

При замерзании объем воды возрастает внезапно примерно на 11% и так же внезапно, скачком, уменьшается в обратном направлении при таянии льда при 0°C. При замерзании воды в замкнутом пространстве и превращении ее в лед происходит расширение объема, что приводит к возникновению избыточного давления, достигающего 2500 кгс/см². Именно этим объясняется разрушительная сила замерзающей воды в замкнутых пустотах, трещинах горных пород, откалывающая подчас многотонные глыбы и дробящая их в дальнейшем на мелкие осколки, а также разрывы водопроводных труб при замерзании в них воды.

Однако если смена фотонных орбиталей не приводит к перегруппировке атомов в связи с тем, что сменяющиеся фотонные орбитали имеют одинаковую структуру, то резкого изменения объема вещества может не происходить, но может значительно измениться теплоемкость вещества в данном температурном интервале, так как, например, суженная внутренняя часть орбитали излучившихся фотонов сменится расширенной внешней частью последней орбитали фотонов валентных электронов. Если структура и форма сменяющихся фотонных оболочек существенно различаются, то при снижении температуры может наблюдаться не только сжатие вещества, но и его расширение, либо это расширение будет иметь место не по всему объему равномерно, а в каком-либо направлении.

Таким образом, при термобарическом изменении объема вещества основную роль играют фотонные оболочки, фотонные орбитали вокруг валентных электронов атомов, объемная плотность энергии которых с одной стороны характе-

ризует температуру тела, а с другой стороны регулирует взаимодействие валентных электронов с ядром атома, взаимодействие между атомами и контролирует изменение объема вещества при снижении температуры или при увеличении температуры и давления.

5.5. Физический смысл универсальной газовой постоянной и постоянной Больцмана

В «Физическом энциклопедическом словаре» [11] дана следующая характеристика: «Больцмана постоянная (k) – одна из фундаментальных физических констант, равная отношению газовой постоянной R к Авогадро постоянной N_A . Больцмана постоянная входит в ряд важнейших соотношений физики: в уравнение состояния идеального газа, в выражение для средней энергии теплового движения частиц, связывает энтропию физической системы с её термодинамической вероятностью. Больцмана постоянная $1k = 1,380662(44) \cdot 10^{-23}$ Дж/К.

Как видим, из этой формулировки вообще не вытекает физическая сущность постоянной Больцмана, хотя она относится к фундаментальным физическим константам. Если же она действительно претендует на роль одной из фундаментальных физических констант, то должна нести определенный физический смысл. Чтобы докопаться до сути, необходимо разобрать смысл величин, из которых она вытекает.

$$k = \frac{R}{N_A}, \quad (5.100)$$

здесь N_A – число Авогадро, или число атомов (молекул) любого газа в одном моле.

Таким образом, при нормальных условиях $6,022 \cdot 10^{23}$ молекул содержится в одном моле любого газа и они занимают объем $V_\mu = 22,41 \cdot 10^{-3}$ м³. Исходя из физического смысла параметра N_A , размерность его должна быть не $\left[\frac{1}{\text{моль}} \right]$, а $\left[\frac{\text{молекул}}{\text{моль}} \right]$.

Из соотношения (5.100) следует, что k – газовая постоянная, отнесённая к одной молекуле газа.

А что же означает универсальная газовая постоянная R ? По формулировке того же источника [11], «Газовая постоянная (R) – универсальная физическая постоянная, входящая в уравнение состояния 1 моля идеального газа: $pV_\mu = RT$, где p – давление, V_μ – объем моля, T – абсолютная температура. Газовая постоянная по своему физическому смыслу – работа расширения 1 моля идеального газа под постоянным давлением при нагревании на 1 К. С другой стороны, газовая постоянная – разность молярных теплоемкостей при постоянном давлении и при постоянном объеме $C_p - C_v = R$ (для всех сильно разреженных газов). Численное значение $R = 8,31441(26) \frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}}$.

Как видим, дается две, на первый взгляд, разные, далекие друг от друга трактовки физического смысла газовой постоянной. С одной стороны, это работа расширения 1 моля идеального газа под постоянным давлением при нагревании на 1 К, а с другой, это просто разность между молярными теплоемкостями при постоянном давлении и постоянном объеме. Чтобы разобраться глубже в физической сущности параметра R , рассмотрим исторически появление этой величины.

Клапейрон, используя законы идеального газа Бойля – Мариотта

$$pV = \text{const} \quad (5.101)$$

при $M = \text{const}$ и $T = \text{const}$
и Гей-Люссака

$$p = p_0(1 + \alpha t) = p_0 \alpha T \quad (5.102)$$

при $V = \text{const}$ и $M = \text{const}$

$$V = V_0(1 + \alpha t) = V_0 \alpha T \quad (5.103)$$

при $M = \text{const}$ и $p = \text{const}$,
получил уравнение

$$\frac{pV}{T} = \text{const} \quad (5.104)$$

или

$$pV = c^* T, \quad (5.105)$$

где c^* – коэффициент пропорциональности или газовая постоянная; V, p – объем и давление газа при температуре t ; V_0, p_0 – объем и давление газа при температуре $t_0 = 0^\circ\text{C}$.

Если масса газа M , то объем, занимаемый газом,

$$V = M \cdot v, \quad (5.106)$$

где v – удельный объем газа, т. е. объем идеального газа, занимаемый единицей его массы.

Тогда

$$pMv = c^* T \quad (5.107)$$

или

$$pv = \frac{c^*}{M} T = BT, \quad (5.108)$$

здесь $B = \frac{c^*}{M}$ – газовая постоянная, отнесенная к единице массы или удельная газовая постоянная, не зависящая от его массы.

Если обозначить объем одного кило-моля газа через V_0 , то

$$v = \frac{V_0}{\mu}, \quad (5.109)$$

где μ – молярная масса, т. е. масса одного кило-моля газа.

Тогда из $pv = BT$ следует, что

$$\frac{pV_0}{\mu} = BT \quad (5.110)$$

или

$$\frac{pV_0}{T} = \mu B = R \quad (5.111)$$

и, следовательно,

$$pV_0 = RT, \quad (5.112)$$

где R – газовая постоянная, отнесенная к кило-молю или универсальная газовая постоянная.

Часто в уравнении состояния идеального газа используется другая газовая постоянная – постоянная Больцмана k .

Но в чем же более глубокий физический смысл газовых постоянных – констант R и k ?

Если проанализировать смысл двух понятий параметра R , то вытекает следующее: молярная теплоемкость – это энергия, необходимая для нагревания 1 моля вещества на 1 К. Следовательно, разность молярных теплоемкостей при постоянном давлении и постоянном объеме – это энергия, которая необходима для нагрева дополнительного объема, равного величине приращения объема 1 моля газа при расширении за счет нагрева на 1 градус при постоянном давлении. То есть это энергия фотонного газа, заключительного в этом приращении объема одного моля газа. Эта энергия фотонного газа и равна работе по расширению 1 моля газа при нагреве его на 1 градус при постоянном давлении. Таким образом, при нагреве 1 моля газа на 1 градус при постоянном давлении часть тепловой энергии в виде фотонного газа идет на увеличение тепловой (фотонной) энергии самих молекул газа в объеме V_μ и эта энергия равна C_V , а часть энергии фотонного газа идет на создания температуры такой же величины, как и около каждой молекулы газа, но в дополнительном объеме ΔV_μ (объеме расширения), и эта часть энергии равна R . Общая затраченная энергия при нагреве на 1 градус при постоянном давлении $C_p = C_V + R$.

Таким образом, глубинный физический смысл универсальной газовой постоянной R – это энергия фотонов (фотонного газа или фотонного поля), которые занимают объем, равный приращению объема 1 моля газа при его расширении за счет нагрева газа на 1 градус при постоянном давлении.

Так как 1 моль любого газа содержит $N_A = 6,022 \cdot 10^{23}$ молекул (атомов), то, следовательно, $k = \frac{R}{N_A} = 1,38 \cdot 10^{-23} \frac{\text{Дж}}{\text{К} \cdot \text{молекула}}$, и это есть фотонная энергия расширения в объеме ΔV при нагреве на 1 К при $p = \text{const}$, приходящаяся на 1 молекулу (атом) газа.

Какой же дополнительный объем занимает это фотонное поле, энергия которого равна $R = C_p - C_V$?

До нагрева 1 моля газа справедливо равенство

$$V_\mu = \frac{RT}{p}. \quad (5.113)$$

После нагрева системы на 1К и изменении объема на ΔV

$$(V_\mu + \Delta V_\mu) = \frac{R}{p}(T + \Delta T) = \frac{R}{p}T + \frac{R}{p}\Delta T, \quad (5.114)$$

т. е.

$$\Delta V_\mu = \frac{R}{p}\Delta T, \quad (5.115)$$

где $T = 1\text{К}$, а $p = \text{const}$ и при нормальных условиях $p = 1 \text{ атм} = 1,013 \cdot 10^5 \text{ Па}$.

Тогда

$$\begin{aligned} \Delta V_\mu &= \frac{8,31 \cdot 1}{1,013 \cdot 10^5} = 8,2033 \cdot 10^{-5} \frac{\text{Дж}}{\text{Па} \cdot \text{моль}} = \\ &= 8,2033 \cdot 10^{-5} \frac{\text{м}^3}{\text{моль}} = 82,033 \frac{\text{см}^3}{\text{моль}}. \end{aligned}$$

Дополнительный объем, занимаемый фотонным полем при нагреве на 1 К и $p = \text{const}$, и приходящийся на одну молекулу, составит

$$\Delta v = \frac{\Delta V_\mu}{N_A} = \frac{82,033}{6,022 \cdot 10^{23}} \left[\frac{\text{см}^3}{\text{молекула}} \right] = 1,3622 \cdot 10^{-22} \frac{\text{см}^3}{\text{молекула}}.$$

Таким образом, при нагреве газа на 1°К и $p = \text{const}$ дополнительная фотонная энергия, приходящаяся на 1 молекулу газа, составляет $1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж и она сосредоточена вокруг каждой молекулы в дополнительном объеме $\Delta v = 1,3622 \cdot 10^{-22} \text{ см}^3$. В этом и есть физический смысл постоянной Больцмана k , а общая дополнительная фотонная энергия при нагреве на 1°К и $p = \text{const}$, приходящаяся на все молекулы одного моля, составляет 8,31 Дж, и она сосредоточена вокруг всех молекул 1 моля в дополнительном объеме $\Delta V_\mu = 82,033 \text{ см}^3$. В этом физический смысл универсальной газовой постоянной R .

Выводы по главе 5

1. Энергию любого тела можно подразделить на механическую энергию, включая кинетические энергии поступательного и вращательного движений и потенциальную энергию тела относительно поверхности Земли, и внутреннюю энергию тела или внутреннюю теплоту. Последняя обусловлена энергией фотонов, вращающихся вокруг электронов на внешней оболочке атома, а также вокруг заряженных частиц – протонов и электронов в ядре атома. Внутренняя энергия тела может увеличиваться не только за счет дополнительного поглощения фотонов, но и при механическом воздействии на тело, приводящее к увеличению результирующей частоты колебаний фотонов вокруг заряженных частиц атомов вещества. Таким образом, теплота – это сконцентрированная энергия фотонов, которая может быть увеличена за счет механического воздействия, приводящего к повышению результирующей частоты колебания фотонов и, следовательно, концентрации энергии фотонов. Без наличия фотонов в веществе механически невозможно повысить температуру тела и количество теплоты в нем.

2. Внутренняя энергия тела может перетекать от тела с большой концентрацией теплоты к телу с меньшей концентрацией теплоты или, при наличии перепада температур с окружающей средой, путем теплового электромагнитного излучения за счет внешних фотонных орбиталей электронов атомов или при ядерных процессах, приводящих к излучению фотонов гамма-квантов.

3. Анализ яркости спектральных линий для водорода показывает, что яркость линий каждой из спектральных серий увеличивается с увеличением длины волны. С увеличением же длины волны энергия фотонов должна уменьшаться, поэтому можно сделать вывод, что с увеличением длины волны закономерно увеличивается яркость спектральных линий лишь за счет возрастания количества излучаемых фотонов с одинаковой или очень близкой и трудно различимой частотой. Под действием же магнитного или электрического полей возникает расщепление спектральных линий излучения такого пакета фотонов с очень близкой частотой на несколько «фотонов», представляющих пакеты с еще меньшим диапазоном частот фотонов.

Таким образом, на одной фотонной орбитали вокруг электрона атома водорода одновременно находятся несколько или множество фотонов с одинаковой или очень близкой частотой. В обычных условиях они излучаются одновременно и создают спектральную линию высокой яркости, а при наличии магнитного или электрического поля могут излучаться отдельными порциями, пакетами с еще меньшим диапазоном частот, и происходит расщепление всей совокупности фотонов «одной» частоты на несколько групп фотонов.

4. Под температурой вещества, регистрируемой инструментально, следует понимать физическую величину, характеризующую объемную плотность фотонной энергии внешней оболочки атомов (молекул) в пределах валентных электронов.

5. Внутренние электроны атомов содержат другой спектр фотонных оболочек с частотой фотонов существенно выше, чем спектр фотонов валентных электронов, поэтому температура в пределах внутренних электронов атомов существенно выше. В связи с этим температура в десятки и сотни тысяч градусов достигается в плазменном состоянии вещества, когда атомы разлагаются на ионы и электроны, и выделяется большое количество фотонов в свободное состояние. Температура при этом столь резко возрастает за счет выделения фотонов в свободное состояние не только внешними, но и внутренними электронами атомов, многие из которых отрываются от атомов, а также резкого увеличения механического движения ионов, электронов, что приводит к существенному возрастанию концентрации фотонной энергии.

6. Вокруг заряженных частиц ядра – протонов и электронов – вращаются фотоны наиболее высоких частот гамма-кванты, поэтому объемная плотность фотонной энергии с учетом малого объема ядра резко возрастает, что соответствует еще более высокой температуре в ядре по сравнению с внешней оболочкой атома. В связи с этим еще более высокая температура в миллионы градусов может быть достигнута при разложении ядер на протоны,

нейтроны и электроны с выделением фотонов высоких энергий в виде гамма-квантов.

7. Таким образом, температура на каждом срезе атома, включая ядро, изменяется скачкообразно и возрастает от периферии к ядру, так как вскрываются электроны и другие элементарные частицы, вокруг которых вращаются фотоны с большей и большей энергией. Следовательно, измеряя температуру вещества, мы фиксируем минимальную температуру атомов (молекул) данного вещества, соответствующую в каждый момент объемной плотности энергии орбиталей фотонов, вращающихся вокруг электронов внешней оболочки атомов (молекул), т. е. валентных электронов.

8. На несущую частоту собственных колебаний фотонов в атоме накладывается круговая частота и орбитальный радиус вращения электронов, частота и амплитуда собственных и вынужденных колебаний электронов и атомов в целом кристаллической решетки, а также линейное перемещение свободных электронов, поэтому объемная плотность энергии фотонов в веществе определяется их концентрацией, частотой собственных колебаний, а также частотой и орбитальным радиусом вращения электронов, амплитудой и частотой собственных и вынужденных колебаний электронов и атомов или скоростью линейного перемещения свободных электронов, так как происходит модулирование собственных колебаний фотонов, т. е. наложение на частоту собственных колебаний фотонов частоты и амплитуды как собственных, так и вынужденных колебаний и перемещений электронов, вокруг которых вращаются фотоны. Поэтому при более высокой собственной частоте колебаний электронов и атомов, появлении вынужденных колебаний электронов и атомов за счет воздействия внешней механической работы либо движению свободных электронов при наличии разности потенциалов увеличивается суммарная частота сложных колебаний фотонов по сравнению с их собственной частотой, и это приводит к увеличению объемной плотности фотонной энергии и температуры вещества.

9. С учетом этих факторов предложено выражение, определяющее температуру вещества как меру объемной плотности фотонной (квантовой) энергии с учетом энергии фотонов внешних валентных электронов в веществе, обусловленной не только собственной частотой колебания фотонов, но и индексом возбужденного состояния вещества.

10. Таким образом, предложенная формулировка и математическое выражение температуры вещества обосновывают объединение кинетических и квантово-механических представлений о природе температуры вещества и позволяют дать физическое объяснение различных термических эффектов и природных явлений, связанных с проявлением температуры вещества, как объемной плотности фотонной энергии в пределах валентных и свободных электронов в веществе.

11. С позиций предложенной теории температуры под температурой абсолютного нуля следует понимать такое состояние вещества, при котором в нем в пределах валентных и свободных электронов полностью отсутствует

фотонная энергия. В связи с этим до тех пор, пока в околоэлектронном пространстве валентных электронов вещества будет находиться хотя бы один фотон, температура вещества не будет равна абсолютному нулю и будет определяться как частотой этого фотона, так и индексом возбужденного состояния электрона, вокруг которого вращается этот фотон. В то же время, при отсутствии фотонов вокруг валентных электронов в веществе, независимо от величины индекса возбужденного состояния, температура будет равна нулю. Однако достичь такого состояния, при котором в веществе концентрация фотонов вокруг валентных электронов будет равна нулю, невозможно, потому что в пространстве, окружающем данное вещество, всегда имеется хотя бы минимальная концентрация фотонов, которая стремится прийти в равновесие с окружающей средой. Кроме того, в этом случае возможен переход фотонов от внутренних электронов к электронам внешним – валентным.

12. Изменение объема тела в целом или его линейных размеров можно достичь как за счет механического приложения силы, так и изменением температуры вещества. Способность изменять свой объем под действием всестороннего давления – сжимаемость, либо способность тела изменять размеры в процессе нагревания (охлаждения) – тепловое расширение (сжатие) имеют общую физическую основу. Так, изменение объема вещества при сжатии происходит за счет уменьшения объема фотонного поля вокруг валентных электронов. Это приводит к повышению температуры тела, которая при постоянном действии нагрузки постепенно снижается до состояния равновесия с окружающей средой путем излучения фотонов.

Природа термического расширения и сжатия газообразных, жидких и твердых тел – изменение объема фотонного поля вокруг валентных электронов при изменении температуры тела. При снижении температуры тела происходит излучение части фотонов, вращающихся вокруг валентных электронов, т. е. удаление из вещества части фотонного поля электронов. За счет этого валентные электроны приближаются к ядрам атомов и стягивают соседние атомы между собой, объем тела уменьшается. При увеличении температуры тела за счет поглощения подводимого извне тепла, т. е. подводимых извне фотонов, происходит увеличение диаметров фотонных орбиталей валентных электронов. Это приводит к увеличению внутреннего распирающего давления фотонного поля валентных электронов и их удалению от ядра атома и в целом – к увеличению объема тела.

13. В тех случаях, когда поглощение фотонов или их излучения совпадает с моментом начала формирования очередной фотонной оболочки (орбитали) валентных электронов и следующие друг за другом фотонные оболочки имеют разную структуру, то происходит перегруппировка атомов за счет их взаимодействия новыми фотонными орбиталями валентных электронов, и в этот момент происходит более активное изменение объема вещества. Если предыдущая, т. е. удаленная при излучении фотонов оболочка имела более округлую форму, а последующая фотонная оболочка имеет эллипсоидальную форму и наклонена под другим углом к плоскости орбиты электрона, то при темпера-

туре, соответствующей моменту перехода взаимодействия атомов через новую (эллипсообразную) фотонную оболочку возможно увеличение объема вещества, хотя происходит снижение температуры. Примером такого вещества является вода в момент ее замерзания.

14. Таким образом, при термобарическом изменении объема вещества основную роль играют фотонные оболочки, фотонные орбитали вокруг валентных электронов атомов, объемная плотность энергии которых, с одной стороны, характеризует температуру тела, а с другой стороны, регулирует взаимодействие валентных электронов с ядром атома, взаимодействие между атомами и контролирует изменение объема вещества при снижении температуры или при увеличении температуры и давления.

15. Физический смысл универсальной газовой постоянной $R = 8,31 \frac{\text{Дж}}{\text{моль}}$ заключается в том, что дополнительная фотонная энергия при нагреве на 1°К и $p=\text{const}$, приходящаяся на все молекулы одного моля и она сосредоточена вокруг всех молекул одного моля в дополнительном объеме $\Delta V_\mu = 82,033 \text{ см}^3$. Дополнительная фотонная энергия, приходящаяся на 1 молекулу газа при его нагреве на 1°К и $p=\text{const}$, составляет $1,38 \cdot 10^{-23} \text{ Дж}$, и она сосредоточена вокруг каждой молекулы в дополнительном объеме $\Delta v = 1,3622 \cdot 10^{-22} \text{ см}^3$. В этом заключен физический смысл постоянной Больцмана k .

Литература к главе 5

1. Браун, Г. Химия в центре наук : в 2 ч. : пер. с англ. / Г. Браун, Г. Ю. Лемей. – Ч. 1. – М. : Мир, 1983. – 448 с.
2. Вукалович, М. П. Термодинамика : учеб. пособие для вузов / М. П. Вукалович, И. И. Новиков. – М. : Машиностроение, 1972. – 672 с.
3. Даниэльс, Р. Физическая химия / Р. Даниэльс, Р. Олберти. – М. : Химия, 1978. – 645 с.
4. Каркапетьянц, М. Х. Химическая термодинамика. – 3-е изд., перераб. и доп. – М. : Химия, 1975. – 584 с.
5. Матвеев, А. Н. Оптика : учеб. пособие для студентов физических специальностей вузов. – М. : Высш. шк., 1985. – 351 с.
6. Планк, М. Принцип сохранения энергии. – М. ; Л. : ГОНТИ, 1938.
7. Силк, Дж. Большой взрыв. – М. : Мир, 1982.
8. Смородинский, Я. А. Температура. Библиотека квант. – М. : Наука, 1981. – 160 с.
9. Суорц, Кл. Э. Необыкновенная физика обыкновенных явлений. – Т. 1. – М. : Наука, 1986. – 400 с.
10. Зайдель, А. Н. Таблицы спектральных линий. / А. Н.Зайдель, В. К. Прокофьев. С. М. Райский [и др.]. – 4-е изд., испр. и доп. – М. : Наука, 1977. – 798 с.
11. Физический энциклопедический словарь / гл. ред. А. М. Прохоров. – М. : Сов. энциклопедия, 1984.

-
12. *Франк-Каменецкий, Д. А.* Плазма – четвертое состояние вещества. – 3-е изд. – М. : Атомиздат, 1968. – 160 с.
 13. Фундаментальные проблемы естествознания: Междунар. науч. конгресс, 22-27 июня 1998 г. – Санкт-Петербург, Россия.
 14. Химический энциклопедический словарь / гл. ред. И. Л. Кнунянц. – М. : Сов. энциклопедия, 1983. – 790 с.
 15. *Эллиот, Л.* Физика / Л. Эллиот, У. Уилкоккс ; пер. с англ. под ред. А. И. Китайгородского. – 3-е изд. – М. : Наука, 1975. – 736 с.
 16. *Энгельс, Ф.* Диалектика природы. – М. : Политиздат, 1965.
 17. *Яворский, Б. М.* Справочник по физике / Б. М. Яворский, А. А. Детлаф. – М. : Наука, 1980. – 507 с.

Глава 6. ТЕПЛОЕМКОСТЬ И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ

Теплоемкость веществ в значительной степени зависит от температуры и наиболее резко изменяется при фазовых переходах. В связи с этим вопросы теплоемкости и фазовых переходов рассматриваются во взаимосвязи.

Теплоемкостью тела называется количество теплоты, поглощаемой телом при нагревании на 1 градус (1°C или 1 K), или отношение количества теплоты, поглощаемой телом при бесконечно малом изменении его температуры, к этому изменению [13].

Теплоемкость подразделяется [11] на удельную (c) и молярную (C). Удельной теплоемкостью (c) называется физическая величина, характеризующая количество теплоты Q , необходимое для нагрева единицы массы вещества на один градус, Дж /кг·К:

$$c = \frac{Q}{m \cdot \Delta T}. \quad (6.1)$$

Молярной теплоемкостью (C) называется физическая величина, характеризующая количество теплоты Q , необходимое для нагрева одного моля вещества на один градус, Дж /моль·К:

$$C = \frac{MQ}{m \cdot \Delta T}, \quad (6.2)$$

где Q – количество поглощенной веществом теплоты; m – масса вещества; M – молярная масса, т. е. масса одного моля вещества, кг; ΔT – разность между конечной и начальной температурой нагреваемой массы вещества.

Удельная и молярная теплоемкости связаны соотношением

$$C = M \cdot c. \quad (6.3)$$

Теплоемкость тела зависит от условий нагревания. Наиболее употребительны: теплоемкость при постоянном давлении (изобарная теплоемкость) C_p , теплоемкость при постоянном объеме (изохорная теплоемкость) C_V и теплоемкость под давлением насыщенных газов (вдоль линии сосуществования фаз) C_s .

Для химически инертной системы с фиксированной массой внутренняя энергия (U) является функцией температуры и объема [5]. Поскольку U – функция состояния, то ее дифференциал

$$dU = \left(\frac{dU}{dT} \right)_V \cdot dT + \left(\frac{dU}{dV} \right)_T \cdot dV. \quad (6.4)$$

Первый член представляет собой изменение внутренней энергии за счет температуры, второй член – изменение внутренней энергии за счет изменения объема. Поскольку при нагревании, как правило, производится работа расширения, то изменение теплоты

$$dQ = dU + pdV = \left(\frac{dU}{dT} \right)_V \cdot dT + \left(p + \frac{dU}{dV} \right)_T \cdot dV = C_p \cdot dT. \quad (6.5)$$

Таким образом, количество поглощенной теплоты зависит не только от прироста температуры, но и от изменения объема, что особенно существенно при

нахождении системы в газообразном состоянии. Если объем системы поддерживается постоянным, то работа внешних сил равна нулю и сообщаемая извне теплота идет только на увеличение внутренней энергии (U).

$$dQ_V = \left(\frac{dU}{dT} \right)_V \cdot dT = C_V \cdot dT. \quad (6.6)$$

Величины C_p и C_V для одного моля, по данным [12], связаны соотношением

$$C_p - C_V = \alpha^2 \frac{TV_m}{K_t}, \quad (6.7)$$

где α – температурный коэффициент объемного расширения, K^{-1} ; T – температура, K ; V_m – молярный объем, $m^3/моль$; K_t – изотермическая сжимаемость, $н/м^2$ (Па).

Из этих характеристик можно сделать вывод, что теплоемкость – это простой физический параметр и никаких проблем с его изучением не следует ожидать. Однако все не так просто.

Во-первых, было бы весьма полезным ввести понятие атомной или молекулярной теплоемкости, т. е. количества тепловой энергии, необходимой для увеличения температуры одного атома (молекулы) на один градус. В этом случае можно будет говорить о распределении атомов (молекул) по величине температуры, аналогично максвелловскому распределению молекул газа по скоростям теплового движения.

Теплоемкость в расчете на один атом, выраженная в калориях или джоулях, недостаточно наглядна и становится более привлекательной и понятной, если выражается в электрон-вольтах, естественных единицах энергии в атомном мире. Перевод величины молярной теплоемкости в атомную можно проводить по формуле

$$C_a = C \cdot \frac{1}{6,02 \cdot 10^{23} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}} = 1,04 \cdot 10^{-5} \cdot C \text{ эВ/атом} \cdot K, \quad (6.8)$$

если молярная теплоемкость была выражена в Дж/(моль·K), или

$$C_a = C \frac{4,17}{6,02 \cdot 10^{23} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}} = 4,34 \cdot 10^{-5} \cdot C \text{ [эВ/атом} \cdot K], \quad (6.9)$$

если молярная теплоемкость была выражена в кал/(моль·K).

Если в первом приближении принять, что величина молярной теплоемкости не изменяется с температурой и составляет 6 кал/(моль·K), что характерно для ряда металлов, то при $T = 300 \text{ K}$ величина внутренней тепловой энергии каждого атома составит

$$U_a = C_a \cdot \Delta T = 4,34 \cdot 10^{-5} \cdot 6 \cdot 300 = 7,8 \cdot 10^{-2} \text{ эВ/атом}. \quad (6.10)$$

Это число всего в 2-3 раза отличается от значений, вычисленных более совершенными методами.

Наиболее удовлетворительно вопрос с теплоемкостью решается для газов.

Так, разность изобарной и изохорной молярных теплоемкостей $C_p - C_V$ идеальных разреженных газов описывается соотношением

$$C_p - C_v = R, \quad (6.11)$$

где R – универсальная газовая постоянная ($R = 8,314$ Дж/моль·К).

Из формул (6.7) и (6.11) следует, что для разреженного газа

$$R = \alpha^2 \frac{TV}{K_t}. \quad (6.12)$$

При обосновании величины теплоемкости газов с позиций классической физики полная внутренняя энергия газа определяется кинетической энергией поступательного движения N частиц и равна

$$U = N \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{m}{v^2} = N \frac{3}{2} kT = \frac{3}{2} RT, \quad (6.13)$$

здесь v^2 – среднее значение квадратов скоростей N молекул газа; k – постоянная Больцмана.

В простой модели газа изменение температуры на ΔT приводит к изменению внутренней энергии на величину $\Delta U = \frac{3}{2} R \Delta T$.

Если тепло поступает в газ, находящийся при постоянном объеме, то никакой работы не совершается и

$$C_v = \frac{\Delta Q}{\Delta T} = \frac{\Delta U}{\Delta T} + 0 = \frac{3}{2} \frac{R \Delta T}{\Delta T} = \frac{3}{2} R = 3 \text{ кал/моль·К}.$$

Если давление газа поддерживается постоянным, а температура при этом увеличивается, то должен увеличиваться и объем. Тогда в соответствии с уравнением газового состояния для 1 моля

$$p \Delta V = R \Delta T. \quad (6.14)$$

Так как совершаемая работа $A = p \Delta V$, то первый закон термодинамики для одного моля записывается

$$\Delta Q = \Delta U + A = \frac{3}{2} R \Delta T + R \Delta T = \frac{5}{2} R \Delta T \quad (6.15)$$

и молярная теплоемкость при постоянном давлении равна

$$C_p = \left(\frac{\Delta Q}{\Delta T} \right)_p = \frac{5}{2} R = 5 \text{ кал/моль·К}.$$

Согласно такой простой модели, значения молярной теплоемкости должны быть одинаковы для всех газов, а разность между молярными теплоемкостями при постоянном давлении и постоянном объеме равна 2 кал/(моль·К). Фактически разность $C_p - C_v = R$ действительно имеет значение, равное 2 кал/(моль·К) (табл. 6.1). Более того, теплоемкости аргона и гелия в точности совпадают с вычисленными значениями, т. е. они полностью соответствуют такой простой модели. Однако для двухатомных и многоатомных газов, имеющих более сложные молекулы, величины теплоемкостей существенно выше и для их обоснования потребовалась более сложная модель. При этом исходят из того,

что поглощаемая молекулой энергия должна переходить не только в кинетическую энергию поступательного движения, но и в энергию вращательного и колебательного движений.

Таблица 6.1

Молярная теплоемкость газов при комнатной температуре

Тип газа	Газ	C_p , кал/моль·К	C_v , кал/моль·К	$C_p - C_v$, кал/моль·К	$\gamma = \frac{C_p}{C_v}$
<i>Одноатомные</i>	He	4,97	2,98	1,99	1,67
	Ar	4,97	2,98	1,99	1,67
<i>Двухатомные</i>	H ₂	6,87	4,88	1,99	1,41
	O ₂	7,03	5,03	2,00	1,40
	N ₂	6,95	4,96	1,99	1,40
	CO	6,97	4,97	2,00	1,40
	Cl ₂	8,25	6,15	1,96	1,32
	HCl	7,05	5,00	1,45	1,29
<i>Многоатомные</i>	CO ₂	8,96	6,92	2,03	1,30
	SO ₂	9,65	7,50	2,15	
	NH ₃	8,80	6,65	2,15	
	C ₂ H ₆	12,71	10,65	2,05	
	H ₂ O	7,91	5,93	1,98	
	CH ₄	8,60	6,59	2,01	

В классической статистической физике принят закон Больцмана о равномерном распределении энергии по степеням свободы молекул, причем на каждую поступательную и вращательную степени свободы приходится в среднем кинетическая энергия, равная $1/2kT$, а на каждую колебательную степень – энергия kT за счет кинетической и потенциальной её составляющих. Принцип равнораспределения энергии служил краеугольным камнем в классической механике. Однако при учете влияния температуры простая классическая модель именно в этом месте начинала «трещать по швам». Даже для самой простой молекулы H₂ изменение теплоемкости от температуры не может быть объяснено на основе классической механики. Молекула двухатомного газа обладает тремя поступательными, двумя вращательными и одной колебательной степенями свобода. По закону равномерного распределения энергии по степеням свободы для двухатомной молекулы $i = 7$ и $C_v = 7/2 R$. Однако из экспериментальной зависимости молярной теплоемкости C_v молекулы водорода (рис. 6.1) следует, что C_v фактически зависит от температуры: при низкой температуре (~ 50 К) $C_v = 3/2 \cdot R$, при комнатной $C_v = 5/2 \cdot R$ (вместо расчетных $7/2 \cdot R$!) и при очень высокой температуре $C_v = 7/2 \cdot R$.

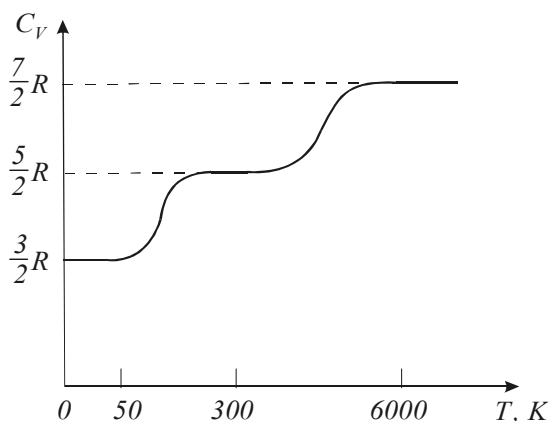


Рис. 6.1. Экспериментальная зависимость молярной теплоемкости C_V водорода от температуры (по данным [11])

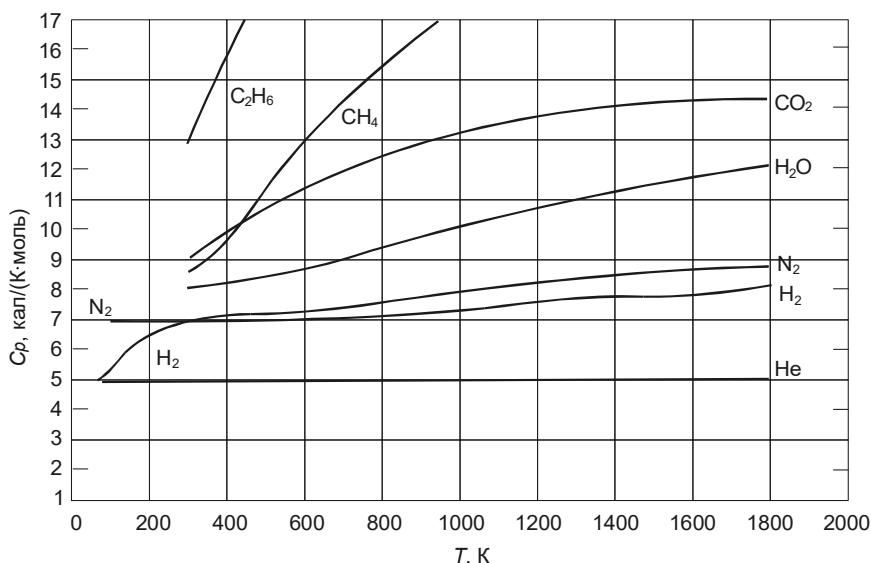


Рис. 6.2. Влияние температуры на молярную теплоемкость газов при постоянном давлении (по данным [5])

Это объясняют [11] тем, что при низких температурах имеет место только поступательное движение молекул, при комнатных – добавляются их вращения, а при высоких температурах – к этим двум видам движения добавляются еще колебания молекул. Считается, что если энергия теплового движения недостаточна, например, для возбуждения вращения или колебания, то эти движения не вносят своего вклада в теплоемкость, соответствующие степени свободы «замораживаются» и к ним не применим закон равного распределения энергии. Этим объясняется факт, что теплоемкость моля двухатомного газа – водорода – при комнатной температуре равна $5/2 \cdot R$ вместо $7/2 \cdot R$, а при низких температурах лишь $3/2 \cdot R$.

В целом можно сделать вывод, что чем сложнее молекула, тем больше её молярная теплоемкость и тем больше влияния оказывает температура на изменение теплоемкости (рис. 6.2). Принято считать [5], что молярную теплоемкость простых газов можно с большей точностью вычислить из спектроскопических данных, чем непосредственно измерить в эксперименте, особенно при высоких температурах. Зависимости $C_p = f(T)$ в диапазоне 300–1500°K для многих газов описываются уравнением вида

$$C_p = a + bT + dT^2. \quad (6.16)$$

Постоянные a, b, d представлены в таблице 6.2 по данным [5].

Таблица 6.2

Газ	Параметры уравнения		
	a	$b \cdot 10^3$	$d \cdot 10^7$
He	4,98	0	0
H ₂	6,9469	-0,1999	4,808
N ₂	6,4492	1,4125	-0,807
O ₂	6,0954	3,2533	-10,171
CO	6,3424	1,8363	-2,801
HCl	6,7319	0,4325	3,697
Cl ₂	7,5755	2,4244	-9,650
H ₂ O	7,1873	2,3733	2,084
CO ₂	6,3957	10,1933	-35,333
NH ₃	6,189	7,887	-7,28
CH ₄	3,422	17,845	-41,65
C ₂ H ₆	1,375	41,852	-138,27

Для реальных газов в отличие от разреженных разность молярных теплоемкостей ($C_p - C_V$) может существенно отличаться от универсальной газовой постоянной R . Молярная теплоемкость плотного газа, как правило, больше, чем разреженного. С приближением к критической точке теплоемкость газа возрастает и в критической точке обращается в бесконечность [12].

Фактически для многих веществ при переходе из газообразного состояния в жидкое теплоемкость увеличивается почти вдвое и далее сохраняется при переходе в твердое состояние (табл. 6.3).

Таблица 6.3

Удельная теплоемкость некоторых веществ в различном фазовом состоянии

Вещество	Удельная теплоемкость, кДж/(кг·К)		
	твердое	жидкое	газообразное
Азот	0,46	2,01	1,0
Воздух	2,0	1,97	1,0
Кислород	1,6	1,63	0,92
Вода	2,10	4,19	2

В то же время для водорода и гелия, для которых характерны очень низкие температуры перехода из газообразного состояния в жидкое, наблюдается обратное соотношение теплоемкостей. Для водорода в жидком состоянии $C_p = 7,41$, а в газообразном $C_p = 14,2$ кДж/(кг·К), для гелия в жидком состоянии $C_p = 4,19$, а в газообразном состоянии $C_p = 5,2$ кДж/(кг·К).

Для ряда веществ, например, азота и воды, переход из жидкого состояния в кристаллическое сопровождается снижением теплоемкости. Теплоемкость льда вдвое меньше, чем у жидкой воды, хотя плотность льда ниже, чем у воды. Более того, в интервале от 0°C до 100°C кривая теплоемкости воды в жидком состоянии проходит через минимум при $t = 35^\circ\text{C}$.

Для описания теплоемкости жидкости не существует простых закономерностей. Таким образом, задача ещё более усложняется при изучении теплоемкости вещества в жидком и кристаллическом состоянии.

Разность ($C_p - C_V$) для твердых тел обычно невелика и существенно ниже величины R . Теплоемкость твердых тел, за исключением твердого гелия, слабо зависит от давления.

В таблице 6.4 приведены значения удельной теплоемкости некоторых веществ в интервале от 0 до 100°C.

Таблица 6.4

Вещество	Удельная теплоемкость кал/(г·°C) или ккал/(кг·°C)
Алюминий	0,215
Углерод (графит)	0,121
Медь	0,0923
Серебро	0,0564
Вольфрам	0,0321
Свинец	0,0305
Вода	1,000

Как видим, значения удельных теплоемкостей меняются в широком диапазоне. У воды очень большая удельная теплоемкость по сравнению с любым другим обычным веществом, а у большинства металлов удельная теплоемкость очень мала.

В середине XIX века Дюлонг и Пти заметили, что в характере теплоемкости большинства элементов в твердом состоянии все-таки существует определенная закономерность: у металлов с небольшими атомными номерами удельная теплоемкость велика, а у металлов с большими атомными номерами – мала (рис. 6.3) [10].

Если удельную теплоемкость, измеренную в калориях на грамм на градус Цельсия (кал/г·°C), умножить на молярную массу, мы в действительности находим молярную теплоемкость – количество калорий, необходимое для того, чтобы увеличить температуру 1 моля вещества на 1°C. Анализ показывает, что для молярной теплоемкости наблюдается еще большая закономерность. Ниже в таблице 6.5 приводятся молярные теплоемкости для ряда веществ.

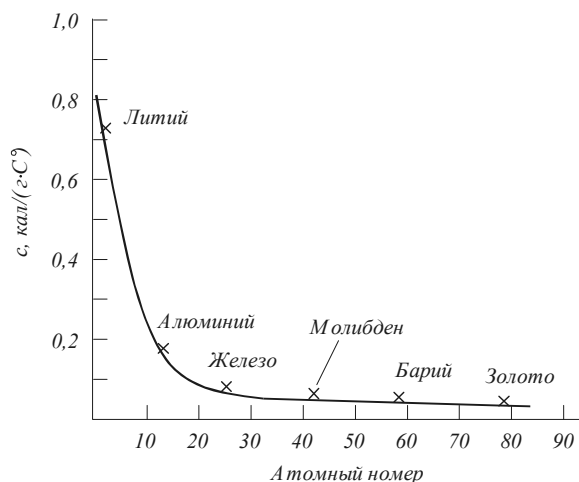


Рис. 6.3. Зависимость удельной теплоемкости металлов в твердом состоянии от атомного номера элемента (по данным [10])

Таблица 6.5

**Молярная теплоемкость некоторых твердых тел и жидкостей
при комнатной температуре**

Вещество	Молярная теплоемкость, кал/(моль·°K)	Молярная теплоемкость, Дж/(моль·°K)
Алюминий	5,82	24,4
Углерод (графит)	1,46	6,1
Медь	5,85	24,5
Свинец	6,32	26,4
Серебро	6,09	26,5
Вольфрам	5,92	24,8
Уран	6,7	28,0
Вода	18,0	75,3
Бром	18,1	75,7
Ртуть	6,69	28,0

Как видно, для веществ с близкой кристаллической структурой, например для металлов, при комнатной температуре существует простое соотношение между энергией на моль и температурой, т. е. $C_V \sim 6$ кал/(моль·°K). Теоретически это объясняется следующим образом. В твердых телах частицы не могут свободно перемещаться в пространстве. Для них практически все степени свободы относятся к колебаниям, поэтому теплоемкость моля должна быть равна $3R$ калорий/градус – по R на колебание в каждом из трех направлений. Так как $R = 2$ кал/(моль·K), то теплоемкость всех веществ в твердом состоянии должна была бы равняться 6, что соответствует величине теплоемкости металлов и составляет содержание закона Дюлонга и Пти. Опыт, однако, показывает, что реально теплоемкость металлов равна 6 кал/(моль·K) только при комнатной тем-

пературе и исключая легкие металлы. Теплоемкость вещества не остается постоянной, а зависит от температуры. Особенно ярко несогласие с законом Дюлонга и Пти было обнаружено у углерода (рис. 6.4). Кроме того, в металлах присутствуют свободные электроны, создающие электрический ток, которые как будто бы не участвуют в тепловом движении. Их степени свободы как бы «замерзли». Поэтому теплоемкость твердого тела при комнатной температуре можно вычислить, совсем забыв про электроны, учитывая только колебания тяжелых ядер. Этот вывод казался в то время очень странным, так как он противоречил закону равномерного распределения. Следствия отклонений от закона Дюлонга и Пти оказались, однако, более серьезными, чем можно было ожидать. Принято считать, что понять это странное явление удалось лишь тогда, когда была создана квантовая механика. Расхождение теории и эксперимента вроде бы можно объяснить тем, что при вычислении теплоемкости надо учитывать квантовые энергии вращения и колебания молекул.

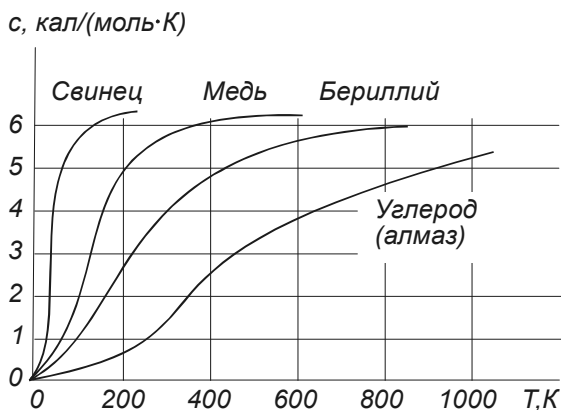


Рис. 6.4. Влияние температуры на молярную теплоемкость ряда металлов и углерода (по данным [10])

В 1907 г. Эйнштейн дал квантовомеханическую трактовку теплоемкости идеального кристалла, исходя из допущения, что все осцилляторы имеют одну и ту же частоту ν . Согласно теории Эйнштейна, графики зависимости $C_V = f(T)$ совпадают, если разделить T на некоторую величину θ , значения которой могут различаться для разных атомных кристаллов. Величина θ , называемая характеристической температурой вещества (дебаевский параметр), обычно имеет порядок 100–400 К и определяется соотношением

$$k\theta = h\nu, \quad (6.17)$$

где k – постоянная Больцмана, Дж/К; h – постоянная Планка, Дж·с; ν – максимальная частота колебаний атома в кристалле, Гц.

Для веществ, теплоемкость которых достигает значения 6 кал/(моль·К) только при высоких температурах, значение θ оказывается большим; так, для алмаза оно равно 1860 К. Считается, что подобное поведение характерно для твердых

тел с сильными межатомными связями (например, алмаз, графит), а в частотном спектре таких твердых тел имеются высокие частоты, которые при комнатной температуре возбуждены не полностью. Для мягких и ковких металлов с низкой температурой плавления (например, медь, серебро) значения θ меньше (соответственно 315 и 215 К). Считается, что у таких твердых тел со слабыми межатомными связями решетчатые колебания имеют низкие частоты, которые полностью возбуждены уже при температурах ниже комнатных [5].

Теория Эйнштейна описывает изменение теплоемкости с температурой лишь приближенно. Поэтому принято [5], что более точная теория была разработана Дебаем, который расширил область теоретического объяснения природы теплоемкости. Вместо одной колебательной частоты он ввел некоторый диапазон частот.

Рассматривая модель кристалла как совокупность зависимых колеблющихся с одинаковой частотой гармонических осцилляторов, Дебай пришел к выводу, что основной вклад в среднюю энергию квантового осциллятора вносят колебания низких частот, соответствующих упругим волнам. Поэтому тепловое возбуждение твердого тела предложил описывать в виде упругих волн, распространяющихся в кристалле. Согласно корпускулярно-волновому дуализму свойств вещества, упругим волнам в кристалле сопоставляют фононы, обладающие энергией $E = h\omega$.

Фонон есть квант энергии звуковой волны, так как упругие волны – волны звуковые. Фононы являются квазичастицами – элементарными возбуждениями, ведущими себя подобно микрочастицам. Подобно тому, как квантование электромагнитного излучения привело к представлению о фотонах, квантование упругих волн привело к представлению о фононах. Квазичастицы, в частности фонон, сильно отличаются от обычных частиц (например, электронов, протонов, фотонов), так как они связаны с коллективным движением многих частиц системы. Квазичастицы не могут возникнуть в вакууме, они существуют только в кристалле. Энергия кристаллической решетки рассматривается как энергия фононного газа, подчиняющегося статистике Бозе – Эйнштейна, так как фононы являются бозонами (их спин равен нулю).

Фононы могут испускаться и поглощаться, но их число не сохраняется постоянным.

В соответствии с квантовой теорией Дебая молярная колебательная теплоемкость твердого тела C_V , Дж/(моль·К), определяется [12] соотношением

$$C_V = 3RnD\left(\frac{\theta}{T}\right), \quad (6.18)$$

где R – газовая постоянная; n – число атомов в молекуле; D – функция Дебая (табулирована в таблицах [12]); θ – дебаевский параметр; T – температура.

При температуре, больше дебаевской ($T > \theta$), выполняется закон Дюлонга – Пти

$$C_V = 3R \cdot n = 25n \text{ (Дж/моль·К)}. \quad (6.19)$$

При низкой температуре по сравнению с дебаевским параметром ($T < 0,1 \theta$) молярную теплоемкость твердого тела C_V обычно представляют так

$$C_V = 1944n \left(\frac{T}{\theta} \right)^3 + YT, \quad (6.20)$$

где n , T и θ – те же величины, что и в предыдущих соотношениях; Y – коэффициент электронной теплоемкости, Дж/(моль·К²). Для диэлектриков и полупроводников $Y = 0$.

Как видно, при низких температурах (квантовая область) – теплоемкость твердых тел пропорциональна кубу термодинамической температуры. Однако эти закономерности не являются универсальными. Большие отклонения температурного хода теплоемкости от приведенного выше соотношения наблюдаются в лантаноидах, актиноидах, их химических соединениях, а также при наличии в веществе магнитных ионов, когда принято считать [12], что существенный вклад в теплоемкость дают тепловые возбуждения электронов внутренних оболочек атомов и магнитных моментов ионов. Таким образом, теплоемкость – не простой физический параметр, она изменяется с температурой вещества и особенно резко при фазовых переходах I и II ряда.

Фазовые переходы первого ряда характеризуются скачкообразным изменением и ряда других свойств вещества, сопровождаясь поглощением или выделением тепла. Скачкообразно изменяются при переходе через кривую фазового равновесия объем и энергия, энтальпия и теплоемкость. К фазовым переходам первого рода относятся испарение и конденсация, плавление и кристаллизация, а также многие переходы из одной кристаллической модификации в другую.

Полиморфные модификации существуют у твердых кристаллических веществ и жидких кристаллов. Модификации одного и того же вещества различаются структурой кристаллической решетки и являются устойчивыми в определенном интервале значений температур, давлений и других внешних параметров. Переходы из одной модификации в другую связаны с изменением энтальпии вещества ΔH и сопровождаются изменением теплоемкости и выделением (или поглощением) соответствующего количества теплоты $Q_m = \Delta H$. Значение Q_m для некоторых полиморфных переходов приведены в таблице 6.6.

Очень важно понять природу фазовых переходов. Так, некоторым фазовым переходам I рода в литературе дается объяснение. Например, считается [11], что телу нужно сообщить некоторое количество теплоты, чтобы вызвать разрушение кристаллической решетки. Подводимая при плавлении теплота идет не на нагрев тела, а на разрыв межатомных связей, поэтому плавление протекает при постоянной температуре. Отмечается [11], что при переходах из более упорядоченного кристаллического состояния в менее упорядоченное жидкое состояние степень беспорядка увеличивается и, с точки зрения второго начала термодинамики, этот процесс связан с возрастанием энтропии системы. Если переход происходит в обратном направлении (кристаллизация), то система теплоту выделяет.

Таблица 6.6

Вещество	Температуры перехода T_{nn} , °C	Тип решетки		Q_{nn} , кДж/моль
		ниже T_{nn}	выше T_{nn}	
Железо	910	Кубическая объемно-центрированная	Кубическая-гранецентрированная	0,878
	1400	Кубическая-гранецентрированная	Кубическая объемно-центрированная	0,46
Кальций	464	Кубическая-гранецентрированная	Гексагональная	1,0
Марганец	727	Кубическая объемно-центрированная (α -фаза)	Кубическая объемно-центрированная (β -фаза)	2,24
	1101	Кубическая объемно-центрированная	Тетрагональная	2,28
	1137	Центрированная тетрагональная	Кубическая объемно-центрированная	1,8
Титан	1080	Гексагональная	Кубическая объемно-центрированная	3,4
Уран	662	Орторомбическая	Тетрагональная	2,93
	769	Тетрагональная	Кубическая объемно-центрированная	4,78
Хром	1840	Кубическая объемно-центрированная	Кубическая-гранецентрированная	1,46

При фазовом переходе I рода теплоемкость изменяется скачком. Это связывают с зародышевым характером процесса образования новой фазы. При этом скачок конечен, но в эксперименте он обычно маскируется более или менее острым пиком, площадь которого равна скрытой теплоте перехода. Наиболее интересным случаем фазового перехода первого рода является переход кристаллического вещества из одной модификации в другую. Наиболее изученными в этом отношении являются вода и нормальные углеводороды в твердом состоянии. Например, лед встречается в пяти [8, 11] или шести [3, 6] различных модификациях – фазах.

Исследования, проведенные Бриджменом для изучения хода зависимости давления и температуры, обнаружили существование даже семи различных кристаллических модификаций льда, пять из которых плотнее воды [5]. Первая из этих новых форм льда появляется при давлении 2047 атм, а последняя – при 21680 атм.

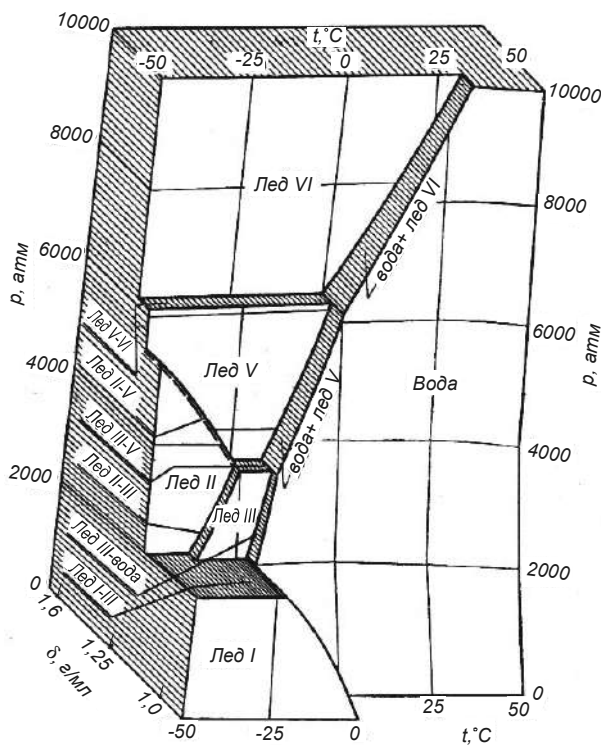


Рис. 6.5. Объемная диаграмма состояния воды (по данным [3])

Ниже дается описание шести разновидностей льда по данным [3, 6], различающихся давлениями и температурами (рис. 6.5).

Лед I – обыкновенный лед, легче воды, существующий при давлении до 220 МПа, устойчивый в нормальных условиях. При дальнейшем повышении давления (выше 220 МПа) переходит в разновидность II.

Лед II – характеризуется уменьшением объема на 18-20%, поэтому тонет в воде. Его плотность может достигать $1,2 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$ (при 0°C), он очень неустойчив и легко переходит в модификацию III.

Лед III – также тяжелее воды, его плотность на 5% больше плотности льда I, из которого непосредственно может быть получена описываемая модификация.

Лед IV – легче воды, существует при небольшом давлении и температуре ниже 0°C , неустойчив и легко переходит в разновидность I. Вероятно, по этой причине о нем не упоминается в других работах [8, 11].

Лед V – может существовать при давлении от 360 до 630 МПа, его плотность выше плотности льда III на 5,5 и воды на 6%.

Лед VI – может быть получен непосредственно из воды при температуре 60°C и давлении 1650 МПа. При давлении 2100 МПа температура этой модификации льда достигает 76°C , его плотность выше плотности льда V на 4 и воды на 6%. Это так называемый «горячий» лед.

Эти шесть модификаций льда образуют резко различные полиморфные группы. В одну группу могут быть включены льды, которые легче воды (лед I, IV), в другую – более тяжелые (лед II, III, V, VI). При плавлении льдов первой группы вещество сокращается в объеме, а второй, наоборот, увеличивается. Различия между модификациями льда обусловлены не химическими свойствами, а молекулярным строением льда.

В Астрофизическом центре Университета Толедо (США) американскими учеными Д. Дальсоном и А. Венджером [6] была открыта сверхплотная модификация льда при температуре ниже -173°C и давлении $(6-8) \cdot 10^{-3}$ мм рт. ст. Плотность этой модификаций $2,3 \cdot 10^3$ кг/м³. Этот лед аморфен. По остальным модификациям льда в литературе отсутствует информация о типе кристаллической решетки. Ведь, судя по свойствам этих модификаций льда, а с изменением давления и температуры происходит не просто увеличение или уменьшение плотности при одном и том же типе кристаллической структуры, вероятно, происходят фазовые переходы и изменения типа кристаллической структуры. Однако этот вопрос в литературе не затрагивается, и ничего не говорится о природе перекристаллизации.

Очень интересным объектом, достаточно хорошо изученным с точки зрения процессов кристаллизации, фазовых переходов, условий, влияющих на эти процессы, являются высокомолекулярные нормальные алканы, т. е. нормальные парафины. Они, наряду с водой, широко распространены в природе – в восковых покрытиях листьев, фруктов, орехов, многих других сельскохозяйственных продуктов, в секретах различных форм животной жизни, во многих фракциях нефти, сланцевом масле, смолах, углях и др. [14]. Нормальные алканы, являющиеся важной составной частью нефтяных восков и важным компонентом восков с низким молекулярным весом, обычно известны как парафины. В простой алифатической цепочке структуры нормальных парафинов к каждому атому углерода присоединяются два других атома С и два атома Н по вершинам тетраэдра, близкого к правильному кубическому (рис. 6.6).

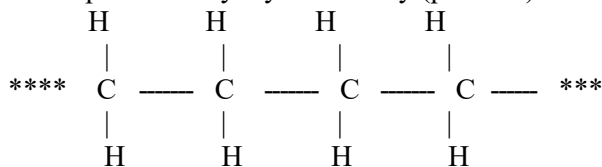


Рис. 6.6. Структурная схема нормальных алканов

Во всех *n*-парафинах оси зигзагообразных цепочек располагаются параллельно друг другу и кристаллографической оси «с», причем атомы водорода находятся в слоях, проходящих через атомы углерода перпендикулярно оси цепочки. Угол $\text{H} - \text{C} - \text{H}$ равен $108 - 109^{\circ}$ [7].

Нормальные парафины обнаруживают разнообразие полиморфных форм. Это разнообразие рассматривают как в зависимости от длины цепочки (числа *n*), геометрии концевых групп (четности числа *n*), симметрии подъячейки, так и от температуры. В зависимости от условий выделяют элементарные ячейки: ром-

бическую, триклинную, моноклинную, гексагональную, косоугольную и прямоугольную и различные типы подъячеек. В таблице 6.7 указаны размеры этих подъячеек, а в таблице 6.8 – возможные упаковки молекул в *n*-парафинах [9].

Таблица 6.7

Размеры подъячеек *n*-парафинов [9]

Подъячейка	<i>a</i> , Å	<i>b</i> , Å	<i>c</i> , Å	α , °	β , °	γ , °
H	4,8	-	-	90°	90°	120°
R	7,42	4,96	2,54	90°	90°	90°
M	4,2	4,4	2,54	90°	90°	111°
T	4,3	4,45	2,54	90°	107° 30 ¹	102°

Таблица 6.8

Возможные упаковки молекул *n*-парафинов [9]

Слой	Параметры ячейки слоя, Å			φ_1 , °	φ_2 , °	φ_3 , °
H [0, 0]	<i>a</i> =4,8			90°	90°	0°
R [0,0]	<i>a</i> =7,42	<i>b</i> =4,96	γ =90°	90°	90°	0°
R [0,±2]	<i>a</i> =9,0	<i>b</i> =4,96	γ =90°	90°	55° 30 ¹	34° 30 ¹
	<i>a</i> =7,42	<i>b</i> =5,57	γ =90°		124° 30 ¹	
R [±1,0]	<i>a</i> =7,85	<i>b</i> =4,96	γ =90°	63°, 117 ¹	90°	27°
R [0, ±1]	<i>a</i> =7,85	<i>b</i> =5,57	γ =81° 30 ¹	90°	71°, 109°	19°
R [±1, ±1]	<i>a</i> =7,85	<i>b</i> =5,57	γ =98° 30 ¹	63°, 117 ¹	71°, 109°	31° 30 ¹
R [±1, ±1]	<i>a</i> =4,2	<i>b</i> =4,4	γ =111°	63°, 117 ¹	71°, 109°	31° 30 ¹
M [0,0]	<i>a</i> =4,9	<i>b</i> =4,4	γ =107°	90°	90°	0°
M [±1,0]	<i>a</i> =4,2	<i>b</i> =5,1	γ =107°	59°, 121 ¹	90°	32°
M [0, ±1]	<i>a</i> =4,3	<i>b</i> =4,5	γ =103°	90°	60°, 120°	32°
T[±1/2,0]				73°, 107 ¹	90°	18°
T[1/2,1]	<i>a</i> =4,3	<i>b</i> =5,2	γ =109°			
T[-1/2,1]				73°, 107 ¹	120°, 60°	36°

Многими исследователями [7, 9, 14] установлено, что при некоторой температуре, близкой к температуре плавления, парафины переходят в высокотемпературную модификацию. Считается, что эта форма возникает за счет вращения цепочек вокруг своих осей и соответствует плотной упаковке цилиндров. На основании данных высокотемпературной масс-спектрометрии и рентгенографии ряда авторов [7, 9, 14] на рис. 6.7 приводится зависимость температуры плавления *n*-парафинов от числа атомов углерода в молекуле (*n*=4-26).

В. Р. Турнер [14] приводит данные, указывающие на существование у *n*-парафинов C₃₆H₇₄ двойного обратимого фазового перехода по схеме: гексагональная – моноклинная – ромбическая.

Хотя литературные данные о полиморфных превращениях *n*-парафинов ещё противоречивы, однако имеющиеся сведения указывают на наличие разных модификаций фазового состояния кристаллов *n*-парафинов и, самое главное, наличие их фазовых переходов в твердом, кристаллическом состоянии. Следует отметить, что связи между отдельными молекулами *n*-парафинов осуществляются через атомы водорода, так же как и в молекуле воды. (Структурная формула воды H – O – H, угол между двумя атомами водорода 104°27¹ и близок к

углу Н – С – Н, равному $108-109^\circ$.) Это дает основание полагать, что многие фазовые переходы, которые выявлены для воды (льда) при большом диапазоне температур и давлений, вероятно еще не выявлены для n-парафинов, так как приведенные в литературе экспериментальные исследования по парафинам относятся к узкому диапазону температур и только к нормальному атмосферному давлению, т. е. совершенно не исследовано влияние давления на полиморфные превращения n-парафинов. Вероятно, выявленный так называемый высокотемпературный фазовый переход в n-парафинах вблизи температуры плавления аналогичен переходу льда из IV в I модификацию вблизи температуры плавления льда.

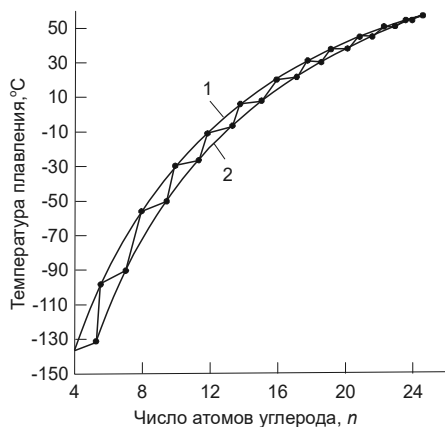


Рис. 6.7. Зависимость температуры плавления n-алканов от числа атомов углерода в молекуле: 1 — при четном числе атомов углерода, 2 — при нечетном их числе

Можно привести еще данные о фазовых переходах в кристаллическом состоянии, например, серы, цинка и других, однако самое главное, в литературе отсутствует информация о природе этих фазовых переходов в кристаллическом состоянии вещества. Выявленным многочисленным фактам фазовых переходов в кристаллическом состоянии вещества на сегодня не дано научного объяснения.

Кроме фазовых переходов первого рода существуют фазовые переходы, при которых выделения или поглощения теплоты и изменения объема не происходит. Такие фазовые переходы называются фазовыми переходами второго рода.

При фазовых переходах второго рода скачкообразное изменение объема и энтропии и соответственно внутренней энергии и энтальпии не наблюдается. Зато происходящие в твердом теле процессы упорядочения (структурного, магнитного, сверхпроводящего и др.) ведут к существенным аномалиям теплоемкости, при этом в узком диапазоне температур отмечается резкое изменение величины теплоемкости.

При вазовом переходе II рода теплоемкость имеет характерный λ -образный вид, являющийся аномалией собственно теплоемкости, так как теплота фазового перехода II рода равна нулю.

Температурный интервал, в котором проявляется λ -особенность теплоемкости, может быть очень узким, и экспериментальные зависимости иногда имеют

вид, сходный с аналогичными зависимостями для фазовых переходов I рода. Так, например, вдвое возрастает молярная теплоемкость при температуре 140 К для гольмия и при $T = 175$ К для диспрозия (рис. 6.8). Вблизи ферромагнитного фазового перехода молярная теплоемкость железа при $T = 1040$ К, а кобальта при $T = 1375$ К возрастают в 1,5-2 раза [12].

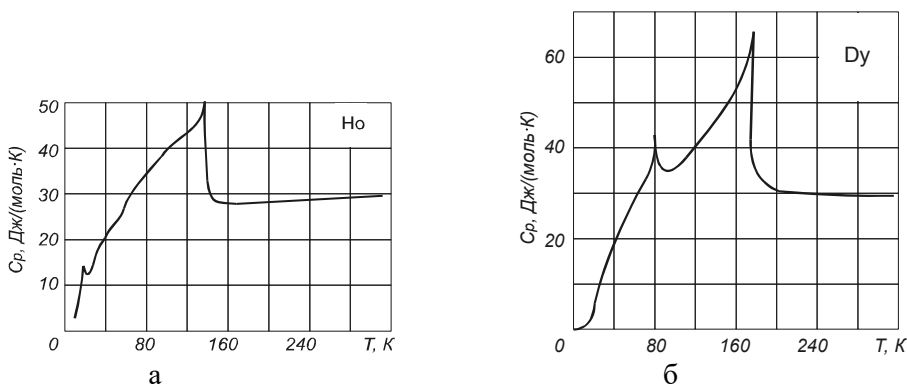


Рис. 6.8. Молярные теплоемкости гольмия (а) и диспрозия (б) [12]

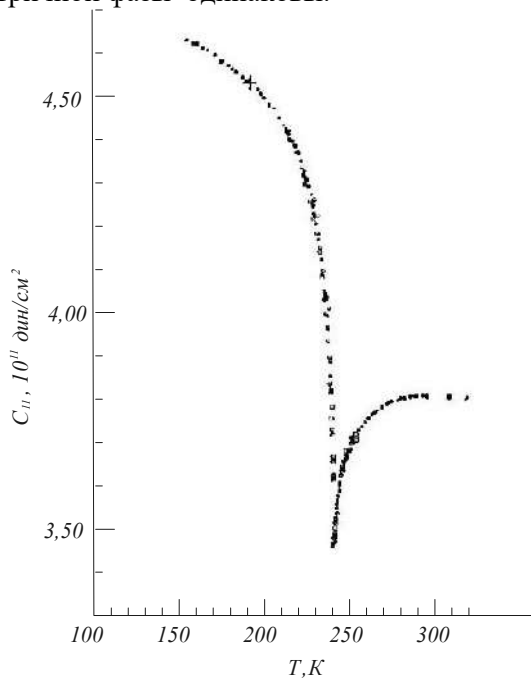
При фазовом переходе второго рода изменяется не только теплоемкость, но одновременно и другие физические параметры, например, коэффициент упругости вещества (рис. 6.9).

Принято считать, что фазовые переходы второго рода характерны для кристаллов и состоят в изменении при определенной температуре степени симметрии кристалла, т. е. в переходе к более высокой симметрии. Однако, кроме кристаллов, фазовый переход второго рода может наблюдаться и в жидком состоянии вещества, например, в гелии вблизи абсолютного нуля (рис. 6.10). Фазовым переходом второго рода являются также переход железа в парамагнитное состояние в точке Кюри и переход некоторых металлов и сплавов при низких температурах в сверхпроводящее состояние.

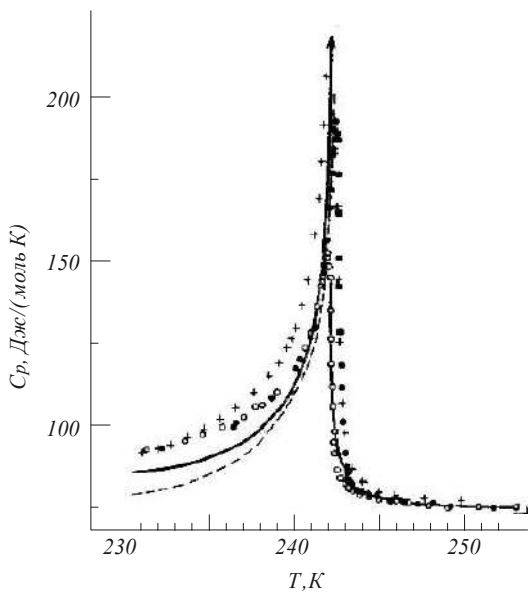
Структурированные фазовые переходы возникают, когда изменяется кристаллографическая структура вещества. Такие переходы были открыты и описаны в результате изучения макроскопических свойств: теплоемкости, диэлектрической восприимчивости или теплового расширения. Так как макроскопические свойства меняются при фазовых переходах, их изучение весьма существенно для разнообразных применений соответствующих веществ.

Много усилий различных исследователей было затрачено на изучение микроскопической природы структурных фазовых переходов. Эти исследования начались с тщательного определения кристаллической структуры фаз по обе стороны от точки фазового перехода. Одни из первых измерений были выполнены на BaTiO_3 Мегу (1947), Кенцигом (1951), Ширане и другими (1955), Харрадой и другими (1970) [1]. Результаты этих исследований показали, что атомы в низкотемпературной фазе смещены относительно centrosymmetричных положений, занимаемых ими в высокотемпературной кубической фазе. В сегнето-

электрическом BaTiO_3 статистические смещения атомов в каждой элементарной ячейке несимметричной фазы одинаковы.



а



б

Рис. 6.9. Температурная зависимость коэффициента упругости C_{11} (а) и молярной теплоемкости (б) в NH_4Cl при атмосферном давлении (по данным [1])

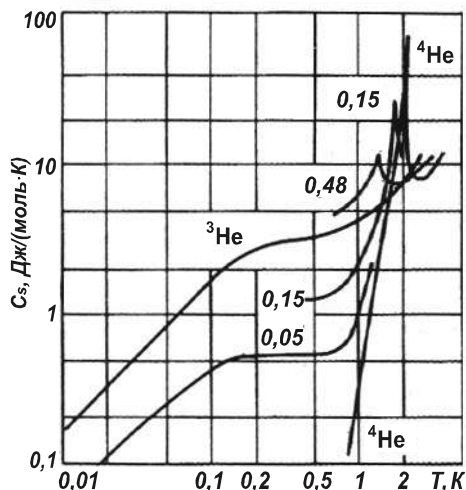


Рис. 6.10. Молярные теплоемкости C_s жидких изотопов гелия ^3He и ^4He и растворов ^3He - ^4He с молярной долей ^3He , равной 0,05; 0,15; 0,48 при давлении насыщающих паров [2]

При других структурных фазовых переходах элементарная ячейка несимметричной фазы состоит из двух, четырех и, возможно, большего числа элементарных ячеек высокотемпературной фазы. В качестве примера фазового перехода этого типа в [1] показана структура SiTiO_3 ниже перехода при $T = 110\text{K}$. В этом случае высокотемпературная перовскитовая структура искажается в результате поворота в противопазе соседних кислородных октаэдров.

Рассматриваемые изменения, по мнению А. Брус и Р. Каули [1], показывают, что, по крайней мере, при некоторых структурных фазовых переходах атомы в несимметричной фазе незначительно смещены относительно равновесных положений, занимаемых ими в высокотемпературной фазе. Исходя из этого, со ссылкой на Кокрен и Андерсона, высказывается [1] предположение, что такие фазовые переходы могут быть вызваны неустойчивостью кристалла относительно некоторых его нормальных мод в высокотемпературной фазе.

После появления этого предположения было выполнено много измерений так называемых мягких мод, соответствующих структурным фазовым переходам. Считается, что существование таких мод, по крайней мере, для фазовых переходов типа смещения, хорошо установлено. В работе [1], отмечается, что возможны и другие структурные фазовые переходы, а именно переходы, обусловленные упорядочением некоторых ионов, разупорядоченных в высокотемпературной фазе, т. е. состояние упорядоченности и разупорядоченности относительно температурной фазы противоположно вышеописанному. Примером такого перехода типа порядок – беспорядок может служить сегнетоэлектрический фазовый переход в NaNO_3 . В высокотемпературной (параэлектрической) фазе ионы в треугольных группах NO_2 с одинаковой вероятностью смещены в положительном и отрицательном направлениях оси «в». Однако ниже температуры 436 K ионы N стремятся расположиться так, чтобы направление смещения

было одинаковым у всех ионов. Так как перемещения групп NO_2 приводят к очень большим смещениям, в частности ионов N, считается [1], что это движение нельзя описывать, пользуясь представлением о малых смещениях относительно равновесных положений. Следовательно, в этих системах типа порядок – беспорядок представление о «мягкой моде» менее полезно, чем в системах типа смещения.

Существует и другой тип фазового перехода порядок – беспорядок, а именно переход, наблюдающийся в сплавах типа CuZn (β -латунь). Выше температуры упорядочения, равной 741 К, атомы Cu и Zn расположены хаотично в объемно-центрированной кубической решетке, однако ниже перехода они расположены регулярно.

Привлекательно иметь такую теорию твердого тела, которая позволила бы, например, только по химическому составу вещества предсказать все его свойства. Однако такой теории на сегодняшний день не существует. Приближением к идеальному варианту могла бы служить теория, которая содержит малое число феноменологических параметров, характеризующих отдельные атомы или связи между ними. Определяя эти параметры из одних экспериментов, можно было бы точно предсказать результаты других. Попыток создать такую феноменологическую микроскопическую или макроскопическую теорию много, и все они основываются на очень правдоподобных гипотезах. Однако специфические трудности микроскопических теорий заставляют в поисках адекватного описания фазовых превращений переходить к изучению серий последовательно усложняющихся феноменологических моделей.

В течение 1960-1970-х гг. изучение структурных фазовых переходов развивалось весьма успешно, в основном благодаря созданию экспериментальных методов, которые позволили более точно изучать микроскопические свойства. В частности, методы нейтронной спектроскопии, комбинационного рассеяния, а также магнитного резонанса оказались особенно эффективными; они показали, насколько многочисленные и разнообразные явления могут протекать в системах, испытывающих структурные фазовые переходы.

Простейшей теорией математического описания структурных фазовых переходов является феноменологическая теория Ландау (1937). Теория Ландау содержит большое число параметров, которые на феноменологическом уровне для конкретного вещества должны быть определены из эксперимента. В чем сущность теории Ландау? Ниже критической температуры структурного фазового перехода среднее положение атома смещается относительно его положения в высокосимметричной фазе. Поэтому в теории структурных фазовых переходов используются результаты, полученные при описании смещений атомов из их положения равновесия. Ландау предположил, что свободную энергию, приходящуюся на одну элементарную ячейку кристалла, от величины которой зависит состояние фазы, или в целом термодинамический потенциал, который характеризует вещество при заданных условиях на термостате, можно разложить в ряд по степеням параметра порядка, ввиду того, что возможны флуктуации «обобщенных координат», характеризующих состояние вещества. В связи с

этим, термодинамический потенциал можно рассматривать как функционал этих отклонений.

Такой функционал называется неравновесным термодинамическим потенциалом или потенциалом Ландау.

Для того чтобы некоторая фаза существовала при заданных условиях, неравновесный термодинамический потенциал должен достигать минимума при равновесных значениях обобщенных координат, соответствующих этой фазе. Для того чтобы потенциал Ландау как функционал выбранных обобщенных координат имел несколько минимумов, соответствующих разным фазам, он должен быть нелинейным функционалом этих координат. Следовательно, и «уравнения состояния», определяющие значения обобщенных координат в той или иной фазе, – это тоже нелинейные уравнения.

Решение системы нелинейных уравнений – сложная и не всегда разрешимая задача. Однако в последние десятилетия были предложены методы, позволившие существенно продвинуться в решении ряда задач методами феноменологической теории, основанной на рассмотрении неравновесного термодинамического потенциала Ландау.

Рассмотрим феноменологическую теорию Ландау применительно к структурным фазовым переходам в простейшем случае, когда параметр порядка имеет только одну компоненту $Q_i = Q$, которую всегда можно выбрать вещественной. В этом случае функционал в соответствии с [1, 4] можно представить нелинейным уравнением следующего вида:

$$G = G_0 + \frac{1}{2}rQ^2 + dQ^3 + uQ^4, \quad (6.21)$$

где коэффициенты могут быть функциями температуры.

Фаза устойчива только при выполнении условий:

$$\left. \frac{\partial G}{\partial Q} \right|_{Q_0} = 0, \quad \left. \frac{\partial G^2}{\partial Q^2} \right|_{Q_0} > 0. \quad (6.22)$$

Тогда высокосимметричная фаза $\langle Q \rangle = Q_0 = 0$ устойчива только в том случае, когда в (6.21) линейный член по Q отсутствует, а коэффициент r положителен.

Система находится в несимметричной фазе, если коэффициент r отрицателен. Кроме того, при непрерывном фазовом переходе свободная энергия G должна возрастать с увеличением $|Q|$ и при T_c ($r = 0$), поэтому $d = 0$, а $u > 0$. Теория Ландау, таким образом, дополняется еще одним предположением: так как коэффициент r меняет свой знак при T_c , его можно записать вблизи T_c в виде аналитической функции от T_c :

$$r = \alpha(T - T_c). \quad (6.23)$$

В то же время предполагается, что достаточно близко от T_c коэффициент u от температуры не зависит. В этом случае свободная энергия такой простейшей модели принимает вид:

$$G = G_0 + \frac{1}{2}\alpha(T - T_c) \cdot Q^2 + uQ^4. \quad (6.24)$$

Условия устойчивости низкотемпературной фазы при $T < T_c$ приводят к следующему значению параметра порядка:

$$Q_0^2 = \frac{\alpha}{4u}(T - T_c). \quad (6.25)$$

Свободная энергия при равновесном значении параметра порядка принимает вид:

$$G_s = \langle G \rangle = G_0 - \frac{\alpha^2}{16u}(T_c - T)^2, \quad T < T_c, \quad (6.26)$$

и, следовательно, изменение теплоемкости равно:

$$C = -T \frac{\partial^2 G}{\partial T^2} = \frac{\alpha^2 T}{8u}, \quad T < T_c. \quad (6.27)$$

$$C = 0, \quad T > T_c.$$

Здесь предполагалось, что в (6.24) $d=0$. Это предположение справедливо всегда, если параметр порядка имеет только одну компоненту, однако оно не обязательно выполняется в случае многокомпонентного параметра порядка, например, при некоторой неустойчивости относительно деформации решетки.

Если коэффициент d не равен нулю, то фазовый переход относится к первому роду и разложение (6.21) становится сомнительным. Тем не менее, считается, что во многих системах фазовый переход близок к непрерывному, и его можно анализировать, используя разложение Ландау. Переход возникает при $T = T_1$, причем

$$T_1 = T_c + \frac{d^2}{2\alpha u}. \quad (6.28)$$

Параметр порядка принимает при T_1 значение $Q_0 = -\frac{d}{2u}$, а ниже T_1 он определяется выражением:

$$Q_0 = \frac{-3d - 9d^2 - 16u\alpha(T - T_c)^{1/2}}{8u}. \quad (6.29)$$

Фазовый переход первого рода имеет место, если симметрия допускает существование ненулевого кубического члена d . В таком случае он обусловлен именно симметрией.

Переход первого рода возникает в простейшей модели также, если $u < 0$, но в этом случае он обусловлен не симметрией, а изменением знака у коэффициента u в разложении Ландау. Если коэффициент « u » отрицателен, то свободная энергия G становится неограниченной и разложение необходимо дополнить членами выше четвертого порядка. Поэтому свободную энергию в этом случае записывают в виде

$$G = G_0 + \frac{1}{2}\alpha(T - T_c)Q^2 + uQ^4 + hQ^6 + \dots, \quad (6.30)$$

где коэффициент u теперь отрицателен, а коэффициент h предполагается положительным. Переход в этом случае относится к первому роду и имеет место при температуре:

$$T_1 = T_c + \frac{u^2}{2\alpha h}, \quad u < 0. \quad (6.31)$$

Скачок параметра порядка при T_1 равен:

$$Q_0 \pm \left[\frac{\alpha(T_1 - T_c)}{|u|} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (6.32)$$

Тогда как ниже T_1 параметр порядка определяется выражением:

$$Q_0^2 = \frac{-4u + [16u^2 - 24\alpha h(T - T_c)]^{\frac{1}{2}}}{12h}. \quad (6.33)$$

На основании феноменологической теории Ландау разработаны также возможности математического описания многокомпонентных параметров порядка при структурных фазовых переходах [1].

Таким образом, считается, что на основе теории Ландау можно решать достаточно сложные задачи, последовательно разбивая их на задачи о виде фазовой диаграммы, задачи об аномалиях термодинамических характеристик на линиях перехода и задачи о выборе термодинамического пути в пространстве феноменологических параметров и описании эксперимента. Считается, что это утверждение можно распространить и на переходы первого рода. Описание фазовых границ при переходах первого рода считается несколько более сложной алгебраической задачей, чем описание фазовых границ при переходах второго рода, однако и она в принципе может быть математически решена путем вычисления результатов уравнений состояния и условий устойчивости, уравнений состояния и равенства энергий фаз.

Аналитическая зависимость между феноменологическими параметрами неравновесного потенциала на границах областей устойчивости фаз и поверхностей равенства их энергий в этом методе оказывается достаточно сложной, но полиномиальной [4] и поддающейся решению на основе использования соответствующего аппарата алгебры.

Таким образом, из всего вышеописанного следует, что на основе теории Ландау математически можно описать характер термодинамического состояния вещества, подобрать соответствующие коэффициенты, степени основного параметра и т. д., и теоретическая кривая будет удовлетворительно согласовываться с экспериментальной кривой, но только лишь в тех пределах параметров, для которых проведен эксперимент. Экстраполяция по теоретической кривой за пределы экспериментального исследования термодинамических параметров может привести к существенным ошибкам, так как в этой неисследованной области данное вещество может иметь и другие переходы, т. е. теория Ландау позволяет подобрать теоретическое уравнение, удовлетворительно описывающее для конкретного вещества результаты конкретных экспериментальных исследований, но не объясняет физическую природу этих фазовых переходов. Никак нельзя согласиться, что основной причиной фазового перехода является переход атомов вещества из состояния порядка в состояние беспорядка или наоборот. Необходимо признать, что как в высокотемпературной, так и в

низкотемпературной фазах кристаллических решеток атомы находятся каждый раз в нормальном порядке, но в том порядке, который им обеспечивают их связи с соседними атомами, зависящие от характера и формы последней фотонной оболочки валентного электрона или валентных электронов атомов. Таким образом, отсутствует теория, объясняющая общий механизм изменения теплоемкости элементов и веществ с изменением температуры и давления в широком диапазоне, при фазовых переходах I и II рода.

Даже в фундаментальном учебном пособии по термодинамике [2] говорится лишь, в чем сущность фазовых переходов I и II рода, но не объясняются физические причины, их вызывающие. Вероятно, физическую сущность изменения теплоемкости элементов и веществ, а также фазовых переходов можно понять лишь на основе новой концепции развития представлений о строении атома и физической сущности понятия температуры вещества. Причина фазового перехода не в переходе из порядка в беспорядок расположения атомов или наоборот, а в особенностях внешних фотонных оболочек валентных электронов при данной температуре.

Характер кривых интенсивного пикообразного изменения теплоемкости от температуры для многих элементов в точках температур фазовых переходов свидетельствует о том, что при температуре фазового перехода происходит разрушение одной фотонной оболочки и начинается взаимодействие атомов через следующую фотонную оболочку.

Величина теплоемкости вещества при данном агрегатном состоянии и температуре зависит от:

1) характера распределения поглощенной теплоты, что определяется количеством фотонных оболочек и шириной фотонной орбитали у внешних валентных электронов;

2) агрегатного состояния вещества, определяющего степень участия атомов и молекул в поступательном, колебательном и вращательном движениях.

В газообразном состоянии возможны все три вида движения, в жидком – преимущественно колебания и вращения, а в твердом – колебания.

При снижении температуры и переходе от газообразного к жидкому и далее к твердому состоянию снижается количество фотонных оболочек. Следует учитывать, что поглощаемые фотоны идут на достройку последней фотонной оболочки при данной температуре;

3) объема, приходящегося на валентные электроны атомов вещества, так как температура вещества определяется объемной плотностью фотонной энергии в пределах валентных электронов.

Таким образом, удельная (или молярная) теплоемкость – это количество тепловой энергии, которая необходима для увеличения ее объемной плотности в пределах объема валентных электронов атомов и прироста температуры на один градус в единице массы (или одного моля) вещества при постоянном давлении или при постоянном объеме.

Исходя из этой формулировки, становится понятен физический смысл особенностей изменения удельной и молярной теплоемкостей в широком диапа-

зоне температур и агрегатных состояний вещества. Так, при переходе вещества в газообразное состояние резко увеличивается объем атомов и молекул за счет фотонного поля вокруг них и, в связи с этим, должна бы резко возрасти теплоемкость, т. е. количество тепловой энергии, необходимой для повышения температуры вещества на 1°K . Но так как температура вещества характеризуется объемной плотностью фотонной энергии в пределах валентных электронов, которая определяется как концентрацией и энергией поглощенных фотонов (количеством поглощенной тепловой энергии), так и степенью или индексом возбужденного состояния атомов и молекул вещества, то в газообразном состоянии вещества последний фактор играет очень важную роль и вносит существенный вклад в объемную плотность фотонной энергии. В связи с этим, за счет повышенного индекса возбужденного состояния атомов и молекул вещества в газообразном состоянии, теплоемкость уменьшается по сравнению с жидким и кристаллическим состояниями, так как в этих условиях меньшее количество подведенной фотонной энергии создает большую объемную плотность фотонной энергии в пределах валентных электронов. Следовательно, на величину теплоемкости оказывают влияние две составляющие изменения внутренней энергии системы при изменении объемной плотности фотонной энергии – за счет количества и частоты поглощенных фотонов, т. е. их концентрации и спектра энергий, и за счет механической энергии поступательного, колебательного и вращательного движения атомов и молекул вещества.

С понижением температуры вещества одновременно с уменьшением индекса возбужденного состояния атомов и молекул вещества в большей степени уменьшается объем фотонного пространства (поля) около валентных электронов атомов, поэтому одинаковое количество теплоты или одинаковая концентрация поглощенных фотонов приводит к большему увеличению объемной плотности фотонной энергии и, как следствие, наблюдается снижение теплоемкости с понижением температуры.

На характер изменения теплоемкости от температуры существенную роль оказывают фазовые переходы при определенных температурах, так как при температурах фазовых переходов происходит разрушение одной фотонной оболочки и взаимодействие атомов через следующую фотонную оболочку, строение которой может существенно отличаться от предыдущей.

Наличие вокруг валентных электронов разнонаправленных фотонных оболочек, которые появляются или исчезают с изменением температуры, и является причиной фазовых переходов в твердом и жидком состоянии вещества.

Наиболее простым и в то же время очень важным фазовым переходом I рода является переход вещества из жидкой фазы в газообразную (пар) при кипении жидкости. Принято считать, что кипение – это процесс бурного выделения молекул за счет приобретения ими кинетической энергии и происходящий с образованием в объеме жидкости пузырьков пара или заполненных паром полостей на нагреваемых поверхностях. Пузырьки растут (вследствие испарения в образующуюся полость жидкости), всплывают, и содержащийся в них насыщенный пар переходит в паровую фазу над жидкостью [13]. Для поддержания кипения к

жидкости необходимо подводить теплоту, которая расходуется на парообразование и на работу пара против внешнего давления при увеличении объема паровой фазы.

При кипении в жидкости устанавливается определенное распределение температуры: у поверхностей нагрева (стенок сосуда, труб и т. п.) жидкость заметно перегрета (рис. 6.11). Величина перегрева зависит от ряда физических и химических свойств как самой жидкости, так и граничных твердых поверхностей. Опыты показывают, что тщательно очищенные жидкости, лишенные растворенных газов (воздуха), можно при соблюдении особых мер предосторожности перегреть на десятки градусов без закипания, т. е. без всплытия пузырьков пара.

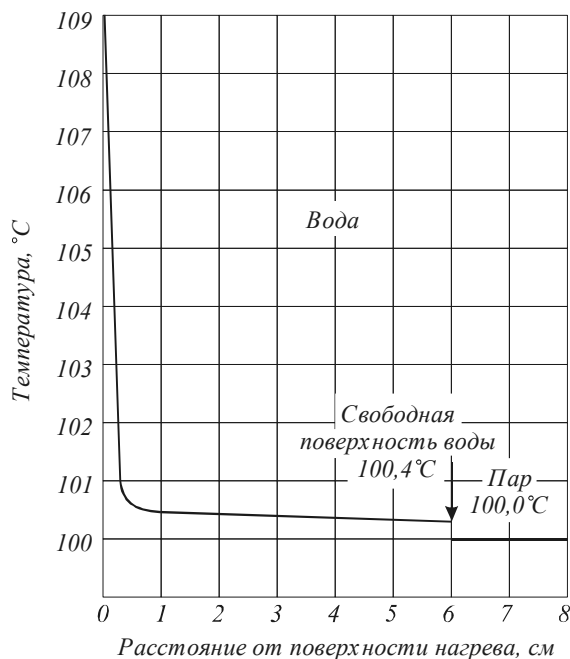


Рис. 6.11. Распределение температуры в жидкости над горизонтальной поверхностью нагрева при пузырьковом кипении (по данным [13])

Когда такая перегретая жидкость вскипает, то процесс кипения протекает бурно, напоминая взрыв. Теплота перегрева расходуется на парообразование, поэтому закипевшая жидкость быстро охлаждается до температуры насыщенного пара, с которым она находится в равновесии.

Возможность перегрева чистой жидкости без кипения объясняется затрудненностью возникновения начальных маленьких пузырьков (зародышей): энергетические затраты на образование пузырьков значительны из-за большой поверхностной энергии пузырька. Если же жидкость содержит растворенные газы и различные мельчайшие взвешенные частицы, то уже незначительный перегрев (на десятые доли градуса) вызывает устойчивое и спокойное кипение, при котором начальными зародышами паровой фазы служат газовые пузырьки, образующиеся на поверхности твердых частиц.

Основные центры парообразования находятся в точках нагреваемой поверхности, где имеются мельчайшие поры с адсорбированным газом, а также различные неоднородности.

Для роста образовавшегося пузырька необходимо, чтобы давление пара в нем несколько превышало сумму внешнего давления, давления вышележащего слоя жидкости и капиллярного давления, которое зависит от кривизны поверхности пузырька. Это условие осуществляется, когда пар и окружающая его жидкость, находящаяся с паром в тепловом равновесии, имеют температуру, превышающую $T_{кип}$. В повсеместной практике наблюдается именно этот вид кипения, его называют пузырьковым. Если повысить температуру поверхности нагрева T (увеличить температурный напор, измеряемый разностью $T - T_{кип}$), то число центров парообразования резко возрастает, все большее количество отошедших пузырьков всплывает в жидкости, вызывая ее интенсивное перемешивание. Это приводит к значительному росту теплового потока от поверхности нагрева к кипящей жидкости (росту теплоотдачи). Соответственно возрастает и количество образующегося пара.

При достижении максимального (критического) значения теплового потока (для кипящей воды $\sim 1500 \text{ кВт/м}^2$ при $T - T_{кип} = 25\text{--}30^\circ\text{C}$) начинается второй переходный режим кипения. При этом режиме теплоотдача и скорость парообразования резко снижаются, так как большая доля поверхности нагрева покрывается сухими пятнами из-за слияния образующихся пузырьков пара. Когда вся поверхность обволакивается тонкой паровой пленкой, возникает третий, пленочный режим кипения, при котором теплота от раскаленной поверхности передается к жидкости через паровую пленку путем теплоизоляции и излучения.

Все три режима кипения можно наблюдать в обратном порядке, когда массивное металлическое тело погружают в воду для его закалки: вода закипает, охлаждение тела идет вначале медленно (пленочное кипение), потом скорость охлаждения начинает быстро увеличиваться (переходное кипение) и достигает наибольших значений в конечной стадии охлаждения (пузырьковое кипение). Теплоотвод в режиме пузырькового кипения является одним из наиболее эффективных способов охлаждения.

Кипение возможно не только при нагревании жидкости в условиях постоянного давления. Снижением внешнего давления при постоянной температуре можно также вызвать перегрев жидкости и ее вскипание (за счет уменьшения температуры насыщения). Этим объясняется, в частности, явление кавитации – образование паровых полостей в местах понижения давления жидкости [13].

Таким образом, принято считать, что процесс кипения начинается с возникновения зародышей в виде маленьких пузырьков, которые, увеличиваясь в размере до состояния, когда давление пара в пузырьке несколько превышает сумму внешнего давления, давления вышележащего слоя жидкости и капиллярного давления. Последнее зависит от кривизны поверхности пузырька, а энергетические затраты на образование пузырьков значительны из-за большой поверхностной энергии пузырька.

В действительности все значительно проще. Если на поверхности твердых частиц имеются адсорбированные молекулы газа, то им достаточно небольшой фотонной энергии, чтобы размеры молекул газа увеличились до такого состояния, чтобы они начали отрываться от этой поверхности под действием выталкивающей силы в соответствии с законом Архимеда. До тех пор пока величина выталкивающей силы Архимеда меньше силы адсорбционного притяжения молекулы газа к поверхности, эта молекула не всплывает и остается в адсорбированном состоянии на поверхности. Когда же эта молекула поглотит некоторое количество фотонов (тепловой энергии) и, в соответствии с предлагаемой концепцией вращения фотонов вокруг электронов атома это приведет к увеличению эффективного диаметра молекулы и снижению ее объемной плотности, то выталкивающая сила Архимеда превысит силу адсорбционного притяжения молекулы газа к нагреваемой поверхности, и такая молекула газа оторвется от поверхности и начнет всплывать.

Что же происходит, когда в жидкости нет адсорбированных на внутренней поверхности пузырьков воздуха? В этом случае тепловую энергию в виде фотонов получают сразу молекулы воды, и когда те молекулы, эффективный диаметр которых за счет поглощенных фотонов будет достаточно большим, и молекулы жидкости превратятся в молекулы пара, то подъемная сила, равная выталкивающей силе Архимеда, станет достаточной и молекулы пара начнут всплывать в жидкости. Достигнув поверхности жидкости, эти молекулы пара вылетают в пространство воздуха. Можно считать, что по тому же закону Архимеда эти молекулы пара, попав в атмосферу воздуха, т. е. в пространство, насыщенное молекулами воздуха, находятся под действием выталкивающей силы Архимеда. Но величина этой выталкивающей силы в атмосфере воздуха будет существенно меньше и равна весу воздуха, вытесненной этой молекулой пара. В этом случае молекула пара как любое тело массой m и объемом V_T , поднятое над поверхностью Земли на некоторую высоту h , обладает потенциальной энергией

$$E_n = mgh, \quad (6.34)$$

а помещенное в жидкостную или газообразную среду оно теряет в величине потенциальной энергии, так как по закону Архимеда вес тела уменьшается на величину веса вытесненной этим телом жидкости

$$\Delta P = V_T \cdot \rho_{жс} \cdot g \quad (6.35)$$

или газа

$$\Delta P = V_T \cdot \rho_g \cdot g, \quad (6.36)$$

здесь g – ускорение свободного падения у поверхности Земли; $\rho_{жс}$, ρ_g – плотность жидкости и газа.

Таким образом, потенциальная энергия тела, помещенного в жидкость ($E_{пжс}$) на высоте h

$$E_{пжс} = (m - V_T \cdot \rho_{жс})gh, \quad (6.37)$$

а помещенного в газообразную среду

$$E_{пг} = (m - V_T \cdot \rho_g)gh, \quad (6.38)$$

где

$$V_T \cdot \rho_{ж} \cdot g = F_{выт.ж} \quad (6.39)$$

и

$$V_T \cdot \rho_{г} \cdot g = F_{выт.г}, \quad (6.40)$$

соответственно выталкивающая сила жидкости $F_{выт.ж}$ и газа $F_{выт.г}$, действующие на тело в определенном направлении снизу вверх.

Величина

$$V_T \cdot \rho_{ж} \cdot gh = F_{выт.ж} \cdot h = \Delta E_{пот.ж} \quad (6.41)$$

– убыль потенциальной энергии тела, находящегося в жидкости, а

$$V_T \cdot \rho_{г} \cdot gh = F_{выт.г} \cdot h = \Delta E_{пот.г} \quad (6.42)$$

– убыль потенциальной энергии тела в газообразной среде.

Если величина выталкивающей силы среды окажется равной весу тела, то тело будет уравновешено и находиться во взвешенном состоянии в данной среде, а если величина выталкивающей силы среды окажется больше веса тела, то тело будет выталкиваться вверх в этой среде, как пробка в воде, до тех пор, пока не наступит состояние равновесия за счет изменения плотности среды или тело достигнет поверхности этой среды.

Все эти рассуждения достаточно тривиальны с точки зрения любого тела, помещенного в жидкость или газообразную среду.

Эти рассуждения справедливы как для макро-, так и для микротела на уровне отдельной молекулы или атома, помещенных в инородную жидкостную или газообразную среду. Однако сразу здесь встает вопрос, а как же молекулы газа воздуха оказываются во взвешенном состоянии, т. е. как реально физически осуществляется фазовый переход жидкого азота, кислорода, водорода, гелия, окиси углерода и других компонент воздуха в газообразное состояние и всплытие этих молекул газа над поверхностью планеты, создавая ту газообразную среду атмосферы Земли, которая сформировалась около нее?

Сегодня принято считать [11], что молекулы газов формируют атмосферу и находятся во взвешенном состоянии за счет преобладающего влияния кинетической энергии их движения, которая способствует удалению молекул газа от поверхности Земли и их рассеянию, над действием гравитационных сил, стремящихся вернуть молекулы газа на поверхность Земли.

Из этого логично следует, что равнодействующая сила за счет кинетической энергии при хаотическом движении молекулы газа должна быть направлена строго вверх, хотя при хаотическом движении молекул газа равновероятно направление их движения во все стороны. Следовательно, наличие кинетической энергии теплового движения молекул газа не является причиной воздымания молекул газа воздуха вверх от поверхности Земли. Тогда что же является истинной причиной? Не является ли такой причиной некоторая среда, в которой плавают сами молекулы газа воздуха и по закону Архимеда всплывают в этой среде? Тогда эта среда должна быть первичной и образовываться в условиях Земли или другой планеты до появления ее газовой атмосферы.

Анализ возможных причин показывает, что наиболее вероятной первичной средой может быть фотонный газ, который появился у планет Солнечной системы в самые первые мгновения образования этих планет за счет излучения Солнца и межзвездного излучения.

Если встать на эту точку зрения и считать, что молекулы газа, формирующие атмосферу планет, находятся во взвешенном состоянии в фотонном силовом поле, действие которого по выталкиванию молекул будет эквивалентно действию жидкости или газа на тело, помещенное в эту среду, то можно показать, что энергия выталкивающей силы фотонного поля равна

$$E_{\text{выт.}}^{\text{фот.}} = V_{\text{м}} \cdot \rho_{\text{фот}}^{\text{экв}} \cdot g \cdot h, \quad (6.43)$$

а сама выталкивающая сила

$$F_{\text{выт}}^{\text{фот}} = V_{\text{м}} \cdot \rho_{\text{фот}}^{\text{экв}} \cdot g. \quad (6.44)$$

При этом величину энергии фотонного поля, выталкивающей молекулу газа, можно представить равной энергии фотонного поля в объеме, занимаемом молекулой газа, т. е.

$$E_{\text{выт}}^{\text{фот}} = E_{\text{уд}}^{\text{фот}} \cdot V_{\text{м}} \quad (6.45)$$

и, следовательно,

$$E_{\text{уд}}^{\text{фот}} = \frac{E_{\text{выт}}^{\text{фот}}}{V_{\text{м}}} = \rho_{\text{фот}}^{\text{экв}} \cdot g \cdot h, \quad (6.46)$$

здесь $V_{\text{м}}$ – объем молекулы; $\rho_{\text{фот}}^{\text{экв}}$ – эквивалентная по эффекту воздействия плотность материи фотонного поля; $E_{\text{уд}}^{\text{фот}}$ – удельная энергия фотонного поля, т. е. энергия фотонного поля в единице объема.

Таким образом, из условия

$$E_{\text{выт}} = E_{\text{выт}}^{\text{фот}} = V_{\text{м}} \cdot \rho_{\text{фот}}^{\text{экв}} \cdot g \cdot h = F_{\text{выт}}^{\text{фот}} \cdot h = E_{\text{уд}}^{\text{фот}} \cdot V_{\text{м}} \quad (6.47)$$

следует, что

$$F_{\text{выт}}^{\text{фот}} = \frac{E_{\text{уд}}^{\text{фот}} \cdot V_{\text{м}}}{h}. \quad (6.48)$$

Но в условиях равновесного в пространстве состояния молекулы на высоте h , выталкивающая сила равна весу молекулы, т. е.

$$F_{\text{выт}}^{\text{фот}} = \frac{E_{\text{уд}}^{\text{фот}} \cdot V_{\text{м}}}{h} = P = mg = M(a.e.m.)g \quad (6.49)$$

где m – масса молекулы; M – молекулярная масса газа, выраженная в атомных единицах массы; $a.e.m.$ – атомная единица массы, равная $1,6605 \cdot 10^{-24}$ г.

Из равенства (6.49) следует, что для подъема конкретной молекулы объемом $V_{\text{м}}$ на минимальную высоту h_{min} над поверхностью планеты фотонное поле на этой высоте должно обладать соответствующим минимумом фотонной энергии

$$E_{\text{уд. min}}^{\text{фот}} = \frac{M(a.e.m.) \cdot g \cdot h_{\text{min}}}{V_{\text{м}}} = \frac{M(a.e.m.) \cdot g \cdot h_{\text{min}}}{\frac{4}{3} \pi \cdot r_{\text{м}}^3}, \quad (6.50)$$

где $r_{\text{м}}$ – радиус молекулы в газообразном состоянии вещества.

Здесь удельная фотонная энергия поля является функцией высоты h в том смысле, что для выталкивания молекулы массой M и объемом V_m на разные высоты h_i и уравнивания силы тяжести молекулы на этих высотах фотонное поле должно обладать на этих высотах соответствующей величиной энергии.

С удалением от поверхности Земли или другой планеты, уменьшается ускорение свободного падения по закону

$$g^* = g \frac{R^2}{(R+h)^2}, \quad (6.51)$$

здесь R – радиус планеты; h – высота над поверхностью планеты.

То есть при расчете удельной фотонной энергии поля, необходимой для подъема молекулы газа на высоту h над поверхностью Земли, строго говоря, необходимо использовать формулу

$$E_{y\partial}^{фот} = \frac{M(a.e.m.) \cdot g \cdot R_s^2 \cdot h}{(R_s + h)^2 \cdot \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot r_m^3}. \quad (6.52)$$

По формуле (6.50) можно рассчитать минимальное значение удельной фотонной энергии, которой достаточно для подъема на высоту $h = 1$ м над поверхностью Земли молекулы соответствующего газа при температуре кипения.

Для выяснения достоверности формул (6.46) и (6.50) или (6.52), позволяющих рассчитать удельную энергию фотонного поля, проверим размерность получаемой величины $E_{y\partial}^{фот}$.

По формуле (6.46)

$$E_{y\partial}^{фот} = \rho_{фот}^{экв} \cdot g \cdot h \left[\frac{\text{кг}}{\text{м}^3} \cdot \frac{\text{м}}{\text{с}^2} \cdot \text{м} \right] = \left[\frac{\text{кг} \cdot \text{м}}{\text{с}^2} \cdot \frac{\text{м}}{\text{м}^3} \right] = \text{Н} \cdot \frac{\text{м}}{\text{м}^3} = \frac{\text{Дж}}{\text{м}^3}.$$

По формуле (6.50)

$$E_{y\partial, \min}^{фот} = \frac{M(a.e.m.) \cdot g \cdot h_{\min}}{\frac{4}{3} \pi \cdot r_m^3} \left[\frac{\text{кг} \cdot \text{м}}{\text{с}^2} \cdot \frac{\text{м}}{\text{м}^3} \right] = \text{Н} \cdot \frac{\text{м}}{\text{м}^3} = \frac{\text{Дж}}{\text{м}^3}.$$

По формуле (6.52)

$$E_{y\partial}^{фот} = \frac{M(a.e.m.) \cdot g \cdot R_s^2 \cdot h}{(R_s + h)^2 \cdot \frac{4}{3} \pi \cdot r_m^3} \left[\frac{\text{кг} \cdot \text{м} \cdot \text{м}^2 \cdot \text{м}}{\text{с}^2 \cdot \text{м}^2 \cdot \text{м}^3} \right] = \frac{\text{Н} \cdot \text{м}}{\text{м}^3} = \frac{\text{Дж}}{\text{м}^3}.$$

Как видно, получаемая размерность соответствует понятию удельной энергии и, следовательно, формулы (6.46), (6.50) или (6.52) могут быть использованы для расчетов удельной энергии фотонного поля.

Для расчета $E_{y\partial, \min}^{фот}$ и $E_{y\partial}^{фот}$ по формулам (6.50) и (6.52) необходимо знать величину радиуса молекулы газа при соответствующей температуре.

Расчет радиуса молекул газа при температуре его кипения можно оценить по величине плотности газа при этой температуре.

С учетом предложенной концепции наличия фотонных оболочек вокруг электронов атомов, а также качественной и количественной их связи с темпера-

турой, должна прослеживаться связь между размерами молекул и температурой среды. Известно, что плотность каждого газа при данной температуре и давлении характеризуется определенной величиной. При этом плотность газа при нормальном давлении зависит от температуры по формуле

$$\rho_t = \rho_0 \frac{T_0}{T} = \rho_0 \frac{273}{(273+t)}, \quad (6.53)$$

где ρ_0 , ρ_t – плотность газа при нуле градусов по Цельсию и при температуре t ; T_0 , T – абсолютная (термодинамическая) температура при $t = 0^\circ\text{C}$ и t .

Это свидетельствует о том, что при данной температуре и наличии достаточного притока молекул газа в соответствующий объем свободного сосуда без дополнительного принудительного давления молекулы газа распределяются таким образом, что каждая из них занимает определенный оптимальный объем, описываемый эффективным диаметром молекулы.

Вероятно, эффективный диаметр молекулы в газообразном состоянии существенно больше, чем в жидком и тем более в твердом состоянии вещества из этих молекул. В первом приближении в расчетах можно принять, что масса молекулы газа равномерно распределена в пределах ее эффективного объема, и поэтому по величине плотности газа при соответствующей температуре можно рассчитать эффективный диаметр (радиус) молекул различных газов.

Если плотность газа ρ_z в г/см³, то масса вещества, находящегося в 1 см³:

$$m = V \cdot \rho_z.$$

В 1 см³ газа находится N молекул, причем

$$N = \frac{m}{M(a.e.m.)} = \frac{V \cdot \rho_z}{M(a.e.m.)} = \frac{\rho_z}{M(a.e.m.)} \quad (6.54)$$

так как $V = 1$.

Объем пространства, который приходится на 1 молекулу в 1 см³ газа

$$V_{\text{мол}} = \frac{1}{N} = \frac{M(a.e.m.)}{\rho_z}, \quad (6.55)$$

тогда эффективный радиус молекулы

$$r_{\text{эф}} = \frac{d_{\text{эф}}}{2} = \frac{\sqrt[3]{V_{\text{мол}}}}{2} = \frac{\sqrt[3]{\frac{M(a.e.m.)}{\rho_z}}}{2}. \quad (6.56)$$

Здесь принимается, что диаметр шара, вписанного в куб, равен стороне куба.

Таким образом, подставляя выражение (6.56) для $r_{\text{эф}}$ в формулу (6.50), можно показать, что расчет удельной фотонной энергии на уровне h_{min} над поверхностью планеты при соответствующей плотности газа этого вещества описывается формулой

$$E_{\text{уд}}^{\text{фот}} = \frac{6}{\pi} \cdot \rho_z \cdot g \cdot h_{\text{min}}, \quad (6.57)$$

а на любой высоте над поверхностью планеты (Земли) и знании плотности газообразного вещества на данной высоте по формуле

$$E_{y0}^{fom} = \frac{6}{\pi} \cdot \rho_z g \frac{hR_z^2}{(R_z + h)^2}. \quad (6.58)$$

Размерность получаемой величины E_{y0}^{fom} по формуле (6.57) с учетом того, что плотность вещества в газообразном состоянии в г/л, выражается в Дж/м³.

$$E_{y0}^{fom} = \frac{\Gamma}{\text{л}} \cdot \frac{\text{м}}{\text{с}^2} \cdot \text{м} = \frac{10^{-3} \text{кг}}{10^{-3} \text{м}^3} \cdot \frac{\text{м}}{\text{с}^2} \cdot \text{м} = \frac{\text{кг} \cdot \text{м}}{\text{с}^2} \cdot \frac{\text{м}}{\text{м}^3} = \frac{\text{Н} \cdot \text{м}}{\text{м}^3} = \frac{\text{Дж}}{\text{м}^3}.$$

Аналогично в Дж/м³ получается размерность и по формуле (6.58). По формуле (6.58) был выполнен расчет необходимой удельной фотонной энергии поля в Дж/м³, которая достаточна, чтобы подняться (всплыть) молекулам соответствующего вещества на определенную высоту над поверхностью планеты Земля при переходе этого вещества в газообразное состояние при температуре испарения. Для этого предварительно проводился перерасчет по формуле (6.53) плотности газов при температуре 273°К к температурам их испарения. Результаты расчетов представлены в таблице 6.9 и на рисунках 6.12-6.14.

Как видно из таблицы, эффективные радиусы молекул различных газов при температуре $t = 0^\circ\text{C}$, рассчитанные по формуле (6.56), практически одинаковы $(1,655 \div 1,677) \cdot 10^{-7} \text{ см} \approx 1,667 \cdot 10^{-7} \text{ см}$. Это согласуется с представлениями о том, что при нормальных условиях ($t = 0^\circ\text{C}$ и $p = 1 \text{ атм}$) в 1 моле любого газа содержится одинаковое количество молекул, равное числу Авогадро $N_A = 6,022 \cdot 10^{23}$ 1/моль, а 1 моль любого газа при этих условиях занимает постоянный объем $V_M = 22,45 \text{ л}$.

Эффективные радиусы молекул различных газов при температуре их испарения, рассчитанные по формуле (6.56) через плотности этих газов при температуре кипения, укладываются в определенную закономерность, увеличиваясь с ростом температур кипения этих газов (рис. 6.12).

На величину эффективного радиуса молекул газа при температуре испарения оказывает влияние также молекулярная масса газа (рис. 6.13). При этом для одноатомных инертных газов характерна своя зависимость увеличения радиуса атомов с ростом атомной массы, а для двух и более атомных молекул отмечается другая зависимость более активного увеличения радиуса молекул с ростом молекулярной массы (рис. 6.13). Эффективные радиусы молекул вещества в газообразном состоянии (r_z) при температурах кипения и в жидком состоянии ($r_{ж}$) при температурах, близких к температурам кипения, отличается примерно в 6,5 раза (рис. 6.14). Увеличение радиуса молекул при переходе из жидкого в газообразное состояние приводит к соответствующему увеличению объема молекулы. Причем прирост объема молекулы $\Delta V = \frac{4}{3} \pi (r_z^3 - r_{ж}^3)$ хорошо коррелируется с величиной скрытой теплоты испарения, т. е. энергии $\Delta H_{исп}$, поглощаемой при переходе жидкости в газ при температуре кипения (рис. 6.15).

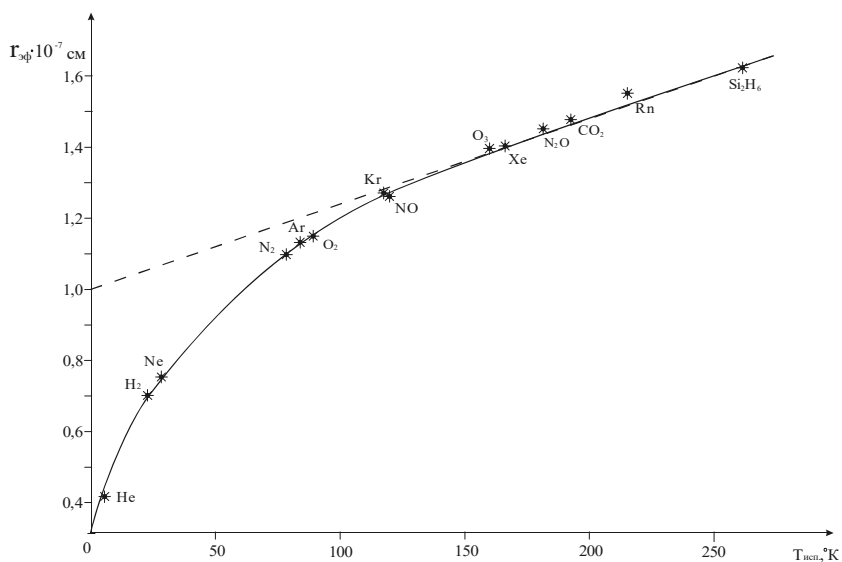


Рис. 6.12. Зависимость эффективного радиуса молекул газов от температуры испарения

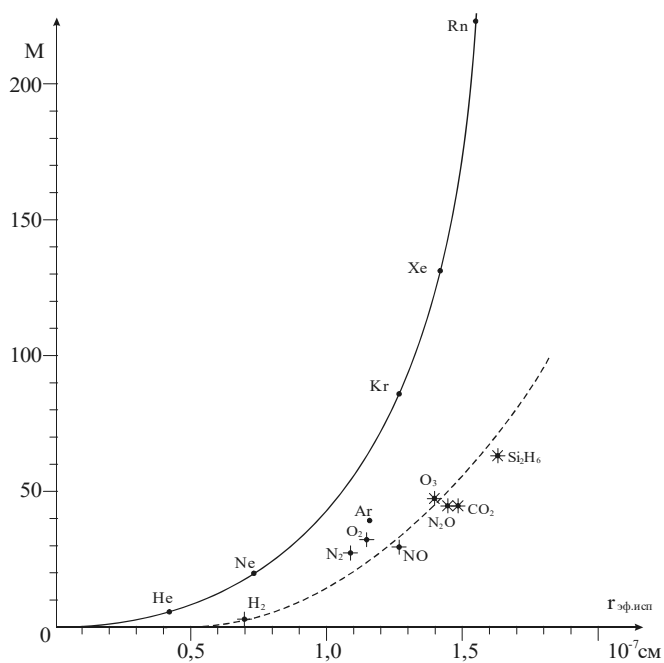


Рис. 6.13. Связь эффективного радиуса молекул газов при температуре испарения с их молекулярной массой

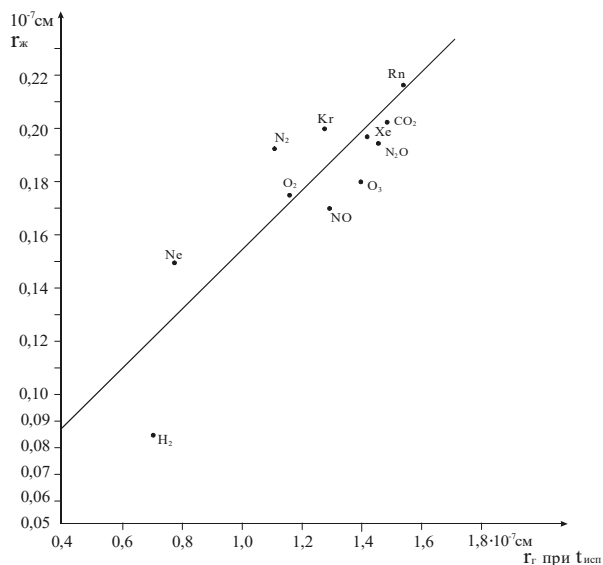


Рис. 6.14. Связь эффективного радиуса молекул вещества в газообразном состоянии (r_g) при температурах испарения и в жидком состоянии ($r_{ж}$) при температурах, близких к температурам кипения

Таблица 6.9

Некоторые теплофизические параметры газов.

Газ	Молекулярный вес, М, г/моль	Температура испарения		Плотность газа в г/л при			Эффективный радиус молекулы в см · 10 ⁻⁷ при		$E_{уд}^{фот}$, Дж/м ³ при	
		$t_{исп}, ^\circ\text{C}$	$T_{исп}, ^\circ\text{C}$	$t=0^\circ\text{C}$	$t_{исп}$	$t=20^\circ\text{C}$	$t=0^\circ\text{C}$	$t_{исп}$	$t=20^\circ\text{C}$	$t_{исп}$
H ₂	2,02	-252,77	20,23	0,08988	1,2129	0,08374	1,675	0,7025	1,568	22,736
N ₂	28,01	-195,8	77,2	1,2506	4,4224	1,1652	1,675	1,095	21,819	82,900
O ₂	32	-182,77	90,03	1,429	4,333	1,331	1,675	1,1526	24,924	81,233
Ar	39,95	-185,9	87,1	1,7839	5,591	1,662	1,675	1,14	31,155	104,805
Kr	83,8	-153,22	119,78	3,708	8,45	3,455	1,675	1,28	64,765	158,397
Xe	131,3	-108,12	164,88	5,851	9,688	5,452	1,675	1,41	102,199	181,604
Rn	222	-61,9	211,1	9,73	12,583	9,066	1,677	1,54	169,944	235,871
Ne	20,179	-246,0	27,0	0,90035	9,1035	0,8389	1,675	0,77	15,725	170,647
O ₃	48	-111,9	161,1	2,144	3,633	1,9976	1,675	1,4	37,445	68,101
NO	30,01	-151,7	121,3	1,3402	3,0162	1,2487	1,675	1,27	23,407	56,539
N ₂ O	44,01	-88,5	184,5	1,9778	2,9265	1,8428	1,665	1,46	34,544	54,858
CO ₂	44,01	-78,5	194,5	1,977	2,775	1,842	1,665	1,487	34,529	52,018
Si ₂ H ₆	62,22	-14,5	258,5	2,85	3,0098	2,655	1,655	1,625	49,768	56,419
He	4	-268,9	4,1	0,1785	11,885	0,1663	1,665	0,415	3,117	222,787

Наличие такой связи однозначно свидетельствует о том, что при поглощении тепловой энергии атомами и переходе их в газообразное состояние не просто происходит поглощение квантов энергии электронами, а имеет место разбухание атомов в соответствии с предложенной нами концепцией вращения фотонов вокруг электронов и других заряженных частиц в атоме.

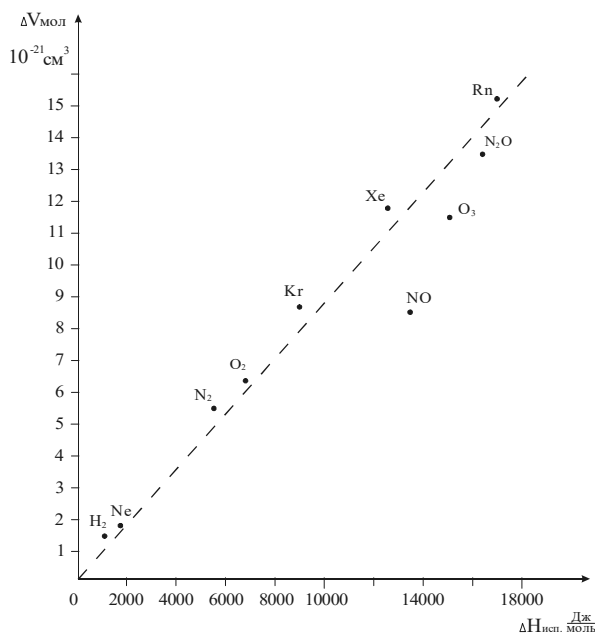


Рис. 6.15. Связь скрытой теплоты испарения ($\Delta H_{\text{исп}}$), поглощаемой при переходе жидкости в газ, с приростом объема молекулы ($\Delta V_{\text{мол}}$)

Выводы по главе 6

1. Теплоемкость веществ является неоднозначным параметром и существенно изменяется от температуры и при фазовых переходах как I, так и II рода.

2. При фазовых переходах II рода теплоемкость имеет характерный λ -образный вид, являющийся аномалией собственно теплоемкости, так как теплота фазового перехода II рода равна нулю.

3. Считается, что это состояние фазового перехода можно объяснить состоянием системы порядок-беспорядок, а теорией математического описания структурных фазовых переходов является феноменологическая теория Ландау, на основе которой можно математически описать характер термодинамического состояния вещества, подобрав по экспериментальным данным для конкретного вещества соответствующие коэффициенты, степени основного параметра и т. д. и теоретическая кривая будет удовлетворительно согласовываться с экспериментальной кривой, но только лишь в тех пределах параметров, для которых проведен эксперимент.

Таким образом, теория Ландау позволяет подобрать теоретическое уравнение, удовлетворительно описывающее для данного вещества результаты конкретных экспериментальных исследований, но не объясняет физическую природу этих фазовых переходов.

4. Нельзя согласиться, что основной причиной фазового перехода является переход атомов вещества из состояния порядка в состояние беспорядка или наоборот. Необходимо признать, что как в высокотемпературной, так и в низкотемпературной фазах кристаллических решеток атомы находятся каждый раз в нормальном порядке, но в том порядке, который им обеспечивают их связи с соседними атомами, зависящие от характера и формы последней фотонной оболочки валентного электрона или валентных электронов атомов.

5. В атоме водорода или другого элемента каждый электрон вращается вокруг ядра и направление плоскости его вращения в принципе не ясно к чему соотносить, так как ядро – это точка, а не плоскость. Другое дело – вращение фотонов вокруг электрона. Здесь плоскость вращения орбитали фотонов можно соотносить с плоскостью вращения электрона, и так как каждая совокупность фотонов, входящая в определенную орбиталь, вращается вокруг электрона под своим определенным углом к плоскости вращения электрона, то при излучении всех фотонов одной орбитали атом будет взаимодействовать с другим атомом через новую орбиталь фотонов, т. е. атом повернется на некоторый угол, соответствующий величине угла между предыдущей и последующей орбиталями фотонов. Переход взаимодействия атомов от одной фотонной орбитали к другой соответствует состоянию фазового перехода. Таким образом, характер кривых интенсивного пикообразного изменения теплоемкости от температуры для многих элементов в точках температур фазовых переходов свидетельствует о том, что при температуре фазового перехода происходит разрушение одной фотонной оболочки и начинается взаимодействие атомов через следующую фотонную оболочку.

6. Величина теплоемкости вещества при данном агрегатном состоянии и температуре зависит от:

а) характера распределения поглощенной теплоты, что определяется количеством фотонных оболочек и шириной фотонной орбитали у внешних валентных электронов;

б) агрегатного состояния вещества, определяющего степень участия атомов и молекул в поступательном, колебательном и вращательном движениях. В газообразном состоянии возможны все три вида движения; в жидком – преимущественно колебания и вращения, а в твердом – колебания. При снижении температуры и переходе от газообразного к жидкому и далее твердому состоянию снижается количество фотонных оболочек, а поглощаемые фотоны идут на достройку последней фотонной оболочки при данной температуре;

в) объема, приходящегося на валентные электроны атомов вещества, так как температура вещества определяется объемной плотностью фотонной энергии в пределах валентных электронов.

7. Таким образом, удельная (или молярная) теплоемкость – это количество тепловой энергии, которая необходима для увеличения ее объемной плотности в пределах объема валентных электронов атомов и прироста температуры на один градус в единице массы (или одного моля) вещества соответственно при постоянном объеме.

8. Так как на величину теплоемкости оказывают влияние две составляющие изменения внутренней энергии системы при изменении объемной плотности фотонной энергии – за счет количества и частоты поглощенных фотонов, т. е. их концентрации и спектра энергии, и за счет механической энергии поступательного, колебательного и вращательного движения атомов и молекул вещества, то становится понятен физический смысл особенностей изменения удельной и молярной теплоемкостей в широком диапазоне температур и агрегатных состояний вещества.

9. С понижением температуры одновременно с уменьшением индекса возбужденного состояния атомов и молекул вещества в большей степени уменьшается объем фотонного пространства (поля) около валентных электронов атомов, поэтому одинаковое количество теплоты или одинаковая концентрация поглощенных фотонов приводит к большему увеличению объемной плотности фотонной энергии и, как следствие, наблюдается снижение теплоемкости с понижением температуры.

10. На характер изменения теплоемкости от температуры существенную роль оказывают фазовые переходы, так как при температурах фазовых переходов происходит разрушение одной фотонной оболочки и взаимодействие атомов через следующую фотонную оболочку, строение которой может существенно отличаться от предыдущей.

Наличие вокруг валентных электронов разнонаправленных фотонных оболочек, которые появляются или исчезают с изменением температуры, и является причиной фазовых переходов в твердом и жидком состоянии вещества.

11. При переходе вещества в газообразное состояние резко увеличивается объем атомов и молекул за счет фотонного поля вокруг них, и в связи с этим, должна бы резко возрасти теплоемкость. Но так как температура вещества характеризуется объемной плотностью фотонной энергии в пределах валентных электронов, которая определяется как концентрацией и энергией поглощенных фотонов, так и индексом возбужденного состояния атомов и молекул вещества, то в газообразном состоянии вещества последний фактор играет очень важную роль и вносит существенный вклад в объемную плотность фотонной энергии. В связи с этим за счет повышенного индекса возбужденного состояния атомов и молекул вещества в газообразном состоянии, теплоемкость уменьшается по сравнению с жидким и кристаллическим состояниями, так как в этих условиях меньшее количество подведенной фотонной энергии создает большую объемную плотность фотонной энергии в пределах валентных электронов.

12. При фазовом переходе I рода – превращение жидкости в пар – в первую очередь процесс кипения формируется за счет адсорбированных на нагреваемой поверхности молекул газа, которые при нагревании превращаются в пузырьки. Всплывание пузырьков газа происходит под действием выталкивающей силы в соответствии с законом Архимеда, когда последняя превышает силу адсорбционного притяжения молекул газа к нагреваемой поверхности. Эффективный диаметр молекул газа увеличивается при поглощении некоторого

количества фотонов (тепловой энергии) и, в соответствии с предлагаемой концепцией вращения фотонов вокруг электронов атомов, это приводит к увеличению объема атома (молекулы) и к снижению его объемной плотности.

Когда же в жидкости нет адсорбированных на нагреваемой поверхности пузырьков воздуха, то тепловую энергию в виде фотонов при нагреве получают сразу молекулы жидкости, и когда те молекулы, эффективный диаметр которых за счет поглощенных фотонов будет достаточно большим и молекулы жидкости превратятся в молекулы пара, то подъемная сила, равная выталкивающей силе Архимеда, станет достаточной, и молекулы пара начнут всплывать в жидкости, а, достигнув поверхности жидкости, они вылетают в пространство воздуха. В среде воздуха на эти молекулы пара вещества может действовать выталкивающая сила Архимеда, но величина ее будет существенно меньше и равна лишь весу воздуха, вытесняемого этой молекулой пара.

13. Молекулы, формирующие газообразную атмосферу воздуха над поверхностью Земли или другой планеты при переходе из жидкого состояния в газообразное могут всплывать, и на них может воздействовать выталкивающая сила Архимеда лишь при условии, что такой средой, в которой плавают газообразные молекулы воздуха, является фотонный газ, фотонное силовое поле, действие которого по выталкиванию молекул газа воздуха эквивалентно действию жидкости или газа на тело, помещенное в эту среду.

14. Выполнен расчет необходимой фотонной энергии поля, которая достаточна, чтобы подняться (всплыть) молекулам соответствующего вещества на определенную минимальную высоту над поверхностью планеты Земля при переходе этого вещества в газообразное состояние при температуре испарения.

15. Рассчитаны эффективные радиусы молекул различных газов при температуре $t = 0^\circ\text{C}$, которые оказались практически одинаковыми и равны $1,667 \cdot 10^{-7}$ см. Эффективные радиусы молекул различных газов при температуре их испарения, рассчитанные через плотности этих газов при температуре кипения, укладываются в определенную закономерность, увеличиваясь с ростом температур кипения этих газов.

16. Эффективные радиусы молекул вещества в газообразном состоянии при температурах кипения и в жидком состоянии при температурах, близких к температурам кипения, отличаются примерно в 6,5 раза. Увеличение радиуса молекул газа при переходе из жидкого в газообразное состояние приводит к соответствующему увеличению объема молекулы, причем прирост объема молекулы хорошо коррелируется с величиной скрытой теплоты испарения, т. е. энергии, поглощаемой при переходе жидкости в газ при температуре кипения. Наличие такой связи однозначно свидетельствует о том, что при поглощении тепловой энергии атомами и переходе их в газообразное состояние не просто происходит поглощение квантов энергии электронами, а имеет место возбуждение атомов в соответствии с предложенной нами концепцией вращения фотонов вокруг электронов и других заряженных частиц в атоме.

Литература к главе 6

1. Брус, А. Структурные фазовые переходы / А. Брус, Р. Каули ; пер. с англ. В. Л. Аксенова ; под ред. Н. М. Плакиды. – М. : Мир, 1984. – 407 с.
2. Вукалович, М. П. Термодинамика : учеб. пособие для вузов / М. П. Вукалович, И. И. Новиков. – М. : Машиностроение, 1972. – 672 с.
3. Герасимов, Я. И. Курс физической химии / Я. И. Герасимов, В. П. Древинг, Е. Н. Еремин [и др.]. – Т. I. – М. : Химия, 1970. – 592 с.
4. Гуфан, Ю. М. Структурные фазовые переходы. – М. : Наука, 1982. – 304 с.
5. Даниэльс, Ф. Физическая химия / Ф. Даниэльс, Р. Олберти. – М. : Мир, 1978. – 645 с.
6. Дерпгольц, В. Ф. Мир воды. – Л. : Недра, Ленингр. отд., 1979. – 254 с.
7. Китайгородский, А. И. Молекулярные кристаллы. – М. : Наука, 1971. – 424 с.
8. Краткий справочник физико-химических величин. – 5-е изд., перераб. и доп. – Л. : Химия, Ленингр. отд., 1967. – 184 с.
9. Мнюх, Ю. В. Структура нормальных парафинов и их твердых растворов // Структурная химия. – 1960. – Т. 1. – № 3. – С. 370-388.
10. Суорц, Кл. Э. Необыкновенная физика обыкновенных явлений. – Т. 1. – М. : Наука, 1986. – 400 с.
11. Трофимова, Т. И. Курс физики. – М. : Высш. шк., 2000. – 542 с.
12. Физические величины. Справочник / под ред. И. С. Григорьева, Е. З. Мейлихова. – М. : Энергоатомиздат, 1991. – 1235 с.
13. Физический энциклопедический словарь / гл. ред. А. М. Прохоров. – М. : Сов. энциклопедия, 1984. – 944 с.
14. Turner, W. Normal Alkanes // Ind. Eng. Chem. Prod. Res. Develop. – V.10. – № 3. – 1971. – P. 238-260.

Глава 7. РОЛЬ ФОТОНОВ В ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ И СВЕРХПРОВОДИМОСТИ ВЕЩЕСТВА

Все твердые вещества по способности проводить электрический ток делят на три категории: проводники, полупроводники и диэлектрики (не проводники, изоляторы). К проводникам относятся металлы. Металлы (как проводники первого рода) отличаются высокой электронной проводимостью, удельная электропроводность их варьирует от 10^2 до 10^4 Ом⁻¹·м⁻¹. Для диэлектриков, наоборот, характерны низкие значения удельной электропроводности от 10^{-8} до 10^{-20} Ом⁻¹·м⁻¹. Диэлектрики (алмаз, силикаты, слюда, полимерные материалы) – проявляют изолирующие свойства. У полупроводников удельная электропроводность колеблется от 10^{-8} до 10^2 Ом⁻¹·м⁻¹ [34].

Из анализа обобщающих работ по проводникам [15], полупроводникам [23] и диэлектрикам [5] видно, что к вопросу изучения их электрических свойств подходят совершенно самостоятельно, в отрыве друг от друга, хотя границы электросопротивления между ними установлены весьма условно и это вызывает большое недоумение. Нет математического выражения, описывающего весь диапазон электрических сопротивлений различных веществ, независимо от их принадлежности к проводникам, полупроводникам или диэлектрикам и тем более с переходом в сверхпроводящее состояние.

Как отмечают В. Л. Гинзбург и Е. А. Андрюшин [6], довольно сложно объяснить, почему одни вещества оказываются металлами, а другие – диэлектриками. По их мнению, это зависит от того, из каких атомов они составлены и как эти атомы расположены. Иногда возможны превращения, когда расположение атомов меняется, например, под действием давления атомы сближаются, диэлектрик становится металлом [6].

Через диэлектрик ток не течет, но и в металлах электроны движутся не вполне свободно. Они наталкиваются на атомные «остовы», от которых «оторвались», и рассеиваются на них. При этом возникает трение и электрический ток испытывает сопротивление. А при сверхпроводимости сопротивление исчезает, становится равным нулю, т. е. движение электронов происходит без трения, хотя казалось бы, такое движение невозможно. На разрешение этого противоречия были направлены работы физиков на протяжении десятков лет. Открытое свойство настолько необычно, что металлы, обладающие сопротивлением, в противоположность сверхпроводникам называются нормальными.

У чистой меди при комнатной температуре удельное электрическое сопротивление $\rho = 1,75 \cdot 10^{-4}$ Ом·м. Медь – один из наиболее хорошо проводящих ток металлов, и она очень широко используется для этой цели. Некоторые другие металлы при комнатной температуре проводят электрический ток хуже:

алюминий $\rho = 2,8 \cdot 10^{-4}$ Ом·м;

свинец $\rho = 21,1 \cdot 10^{-4}$ Ом·м;

ртуть $\rho = 95,8 \cdot 10^{-4}$ Ом·м.

При снижении температуры T удельное сопротивление меди постепенно понижается и при температуре в несколько градусов Кельвина составляет 10^{-7} Ом·м, но сверхпроводником медь не становится.

В то же время алюминий, свинец и ртуть переходят в сверхпроводящее состояние и проведенные с ними опыты показывают, что удельное сопротивление сверхпроводника во всяком случае не превышает 10^{-21} Ом·м – в сто триллионов раз меньше, чем у меди.

Как видим, электропроводность различных веществ – явление не простое и чтобы в нем разобраться, необходимо подробнее рассмотреть различные аспекты этой проблемы и состояния ее изученности.

Проводники (металлы)

60 элементов таблицы Менделеева относятся к металлам. Наиболее важными физическими свойствами металлов являются тепло- и электропроводность. Хорошо проводят тепло и электричество серебро и медь, затем золото, алюминий, железо, хуже – свинец и ртуть.

Все металлы (кроме ртути) при обычной температуре – твердые вещества. По степени твердости они сильно отличаются друг от друга: калий и натрий легко режутся ножом, а хром по своей твердости близок к алмазу. По плотности металлы условно делятся на легкие и тяжелые: металлы с плотностью меньше 5 называются легкими, а с большей – тяжелыми. К легким относятся щелочные, щелочноземельные металлы, бериллий, магний, алюминий. Самым легким металлом является литий с плотностью $0,53$ г/см³, а самым тяжелым – осмий, имеющий плотность $22,48$ г/см³. Характерное свойство металлов – ковкость. Наибольшей ковкостью обладают золото, серебро, медь, а наименьшей – висмут, марганец. По способности вытягиваться в проволоку (тягучесть) первое место занимают золото и серебро, а последнее – висмут и марганец. По температурам плавления металлы также отличаются друг от друга: температура плавления ртути – 39°C , калия $+62,3^{\circ}\text{C}$, а вольфрам плавится при 3370°C . Температуры кипения металлов очень высоки: калий кипит при 760°C , медь – при 2300°C , железо – при 3000°C , вольфрам – при 5900°C . В парообразном состоянии металлы одноатомны. Металлы принято делить на следующие группы:

1. Черные (железо, марганец, хром и их сплавы).
2. Цветные: а) легкие (алюминий, магний, кальций); б) тяжелые (медь, свинец, олово, цинк).
3. Редкие (литий, бериллий, ванадий, молибден, вольфрам и др.).
4. Драгоценные (платина, золото, серебро, иридий, осмий, родий, палладий).

В соответствии с классической теорией носителями тока в металлах являются свободные электроны.

Доказательством того, что проводимость в металлах обусловлена движением электронов, явился простой опыт Толмана [36] с измерением тока в момент резкой остановки движущегося линейного проводника. Толман не только констатировал таким образом наличие тока, но и показал, производя количественные измерения, наличие отрицательного заряда этих частиц и тождество отношения их заряда к их массе с таким же отношением для свободных, изолиро-

ванных в вакууме электронов. Таким образом, был сделан вывод, что связь электронов с атомами должна быть лабильной (подвижной), электрон с легкостью должен переходить от одного атома к другому и существование свободных электронов является характерной чертой металлического состояния вещества. Это положение явилось основой электронной теории металлов, впервые предложенной Друдом и Лоренцем, в которой было принято равенство концентрации свободных электронов, участвующих в проводимости электрического тока, концентрации валентных электронов в металлах. Чтобы понять, соответствует это положение действительности, целесообразно рассмотреть этот опыт и его результаты подробнее. При проведении опыта Толман принимал условие, что свободные электроны после остановки линейного проводника по инерции имели такую же скорость движения в проводнике, как и до остановки проводника. А так как смогли зафиксировать ток, то можно считать, что он протекал хотя и кратковременное, но реально осязаемое время. При выводе формулы относительного заряда исходили [36] из того, что при торможении проводника кинетическая энергия носителя тока (электрона) расходуется на работу тока в замкнутой цепи. По закону Джоуля – Ленца работа dA , совершаемая током за время dt в цепи с сопротивлением R , равна:

$$dA = I^2 R dt, \quad (7.1)$$

так как

$$J = i \cdot S = n_0 \cdot q \cdot v_0 \cdot S, \quad (7.2)$$

то

$$dA = n_0 q \cdot v_0 \cdot S \cdot R \cdot J dt = n_0 q \cdot v_0 \cdot S \cdot R \cdot dQ, \quad (7.3)$$

где v_0 – скорость носителя тока относительно узлов кристаллической решетки, в данном случае соответствующая скорости движения проводника в момент начала торможения; J , i – сила и плотность тока; q – заряд подвижной в проводнике частицы; S – площадь сечения образца; n_0 – количество свободных зарядов в единице объема стержня; $dQ = J \cdot dt$ – электрический заряд, переносимый током за время dt через гальванометр.

С другой стороны – эту работу можно представить как изменение общей кинетической энергии всех электронов в стержне проводника, т. е.

$$dA = -N \cdot d(W_k) = -N d\left(\frac{mv^2}{2}\right) = -N \cdot m v dv. \quad (7.4)$$

Если

$$N = n_0 S \cdot l, \quad (7.5)$$

то

$$dA = -n_0 \cdot S \cdot l m v \cdot dv, \quad (7.6)$$

где N – общее число электронов; l – длина стержня.

Приравнявая два выражения (7.3) и (7.6) работы

$$dA = -n_0 S l \cdot m \cdot v \cdot dv \quad \text{и} \quad dA = n_0 q v \cdot S \cdot R \cdot dQ,$$

нашли

$$q R dQ = -l m dv.$$

Интегрируя это равенство по v от v_0 до 0, получили суммарный заряд Q , проходящий через гальванометр при торможении стержня.

$$Q = \frac{m}{q} \cdot \frac{l}{R} v_0, \quad (7.7)$$

откуда

$$\frac{q}{m} = \frac{l v_0}{QR}. \quad (7.8)$$

Оказалось, что для всех металлов величина $\frac{q}{m}$ одинакова и соответствует относительному заряду электрона, т. е. $\frac{e}{m}$. Существование свободных электро-

нов в металлах объясняют следующим образом: при образовании кристаллической решетки металла (в результате сближения изолированных атомов) валентные электроны, сравнительно слабо связанные с атомными ядрами, отрываются от атомов металла, становятся «свободными» и могут перемещаться по всему объему. Таким образом, в узлах кристаллической решетки располагаются ионы металла, а между ними хаотически движутся свободные электроны, образуя своеобразный электронный газ, обладающий, согласно электронной теории металлов, свойствами идеального газа. Электроны проводимости при своем движении сталкиваются с ионами решетки, в результате чего устанавливается тепловое равновесие между электронным газом и решеткой.

Однако имеется и несколько иная точка зрения на характер движения «свободных» электронов. Так, по мнению А. Ф. Капустинского [19], ионы металла, обладающие значительным силовым полем, конечно, не могут допустить сколько-нибудь значительного свободного пробега электрона, в то же время при пропускании электрического тока длина свободного пробега электрона в решетке металлов в несколько десятков раз превышает межионное расстояние.

Исходя из электронных моделей атомов (и ионов), связанные электроны находятся на более близких энергетических уровнях по отношению к ядру атома, благодаря чему они связаны с последним более прочно, чем свободные электроны, находящиеся на более удаленных уровнях, что позволяет им и вращаться вокруг «своего» иона, и переходить к соседним ионам. С подобной точки зрения свободный пробег представляет змееобразную линию в пространстве (рис. 7.1). Пунктиром обозначено стабильное положение электронов, змееобразной же линией – свободный пробег электрона. Таким образом, по мнению А. Ф. Капустинского [19], свободные электроны в решетке металла принадлежат одновременно всем ионам металла и движутся от сферы влияния одного иона к сфере влияния другого иона по искривленным траекториям.

По теории Друде – Лоренца свободные электроны обладают такой же энергией теплового движения, как и молекулы одноатомного газа. Поэтому, применяя выводы молекулярно-кинетической теории, можно найти среднюю скорость теплового движения электронов

$$\langle u \rangle = \sqrt{8kT / \pi m_e}, \quad (7.9)$$

которая для $T = 300$ К оказывается равной $1,08 \cdot 10^5$ м/с. Здесь k – постоянная Больцмана; m_e – масса электрона.

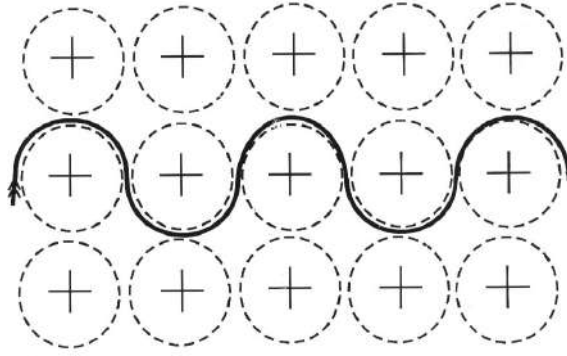


Рис. 7.1. Змееобразный пробег электронов в пространстве кристаллической решетки

Тепловое движение электронов, являясь хаотическим, не может привести к возникновению тока.

При наложении внешнего электрического поля на металлический проводник, кроме теплового движения электронов, возникает их упорядоченное движение, т. е. возникает электрический ток. Среднюю скорость $\langle v \rangle$ упорядоченного движения электронов можно оценить согласно формуле для плотности тока

$$i = ne\langle v \rangle \quad (7.10)$$

Выбрав допустимую плотность тока, например для медных проводов 10^7 А/м², получили, что при концентрации свободных носителей тока, соответствующей концентрации валентных электронов в меди $n = 8 \cdot 10^{28}$ м⁻³, средняя скорость $\langle v \rangle$ упорядоченного движения электронов составляет всего лишь $7,8 \cdot 10^{-4}$ м/с.

Следовательно, $v \ll u$, т. е. средняя скорость упорядоченного движения электронов, обуславливающая электрический ток, более чем на восемь порядков меньше их скорости теплового движения. Однако считается, что полученное значение столь низкой скорости упорядоченного движения электронов не противоречит скорости распространения электрического тока по цепи, равной скорости света в вакууме $c = 3 \cdot 10^8$ м/с, так как скорость c является скоростью распространения электромагнитного поля вдоль проводов.

В этой связи интересно провести встречный расчет концентрации свободных электронов в металлическом проводнике в соответствии с результатами эксперимента Толмана. Если по результатам эксперимента справедливо соотношение (7.8)

$$\frac{lv_0}{QR} = \frac{q}{m} = \frac{e}{m_e} = \frac{1,6 \cdot 10^{-19}}{9,1 \cdot 10^{-31}} = 1,758 \cdot 10^{11} \left[\frac{\text{Кл}}{\text{кг}} \right].$$

то, задаваясь оптимальными параметрами проводника, например, $l = 1$ м; $v_0 = 1$ м/с; $d = 1 \cdot 10^{-2}$ м; $\rho = 10^{-4}$ Ом·м и учитывая, что $R = \rho \frac{l}{S}$, можно рассчитать величину заряда Q .

$$Q = \frac{l \cdot v_0}{R \cdot 1,758 \cdot 10^{11}} = \frac{1 \cdot 1 \cdot 3,14 \cdot 10^{-4}}{10^{-4} \cdot 4 \cdot 1,758 \cdot 10^{11}} = 4,465 \cdot 10^{-12} \text{ Кл.}$$

Принимая, что ток протекал в момент замыкания электрической цепи в течение 1 с, а

$$Q = J \cdot t = e \cdot n \cdot v_0 S \cdot t, \quad (7.11)$$

можно оценить концентрацию:

$$n = \frac{Q}{e \cdot v_0 \cdot S \cdot t} = \frac{4,465 \cdot 10^{-12} \cdot 4}{1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 1 \cdot 3,14 \cdot 10^{-4} \cdot 1} = 3,555 \cdot 10^{11} \frac{1}{\text{м}^3}.$$

Как видно, из эксперимента Толмана совсем не следует, что все валентные электроны являются свободными электронами проводимости, а принятие других исходных величин параметров l , v_0 , S , d не может принципиально изменить конечный результат расчета концентрации свободных электронов.

Некоторым подтверждением наших расчетов является точка зрения составителей учебного пособия по химии [26]. По их мнению, для кристаллической решетки металлов характерно одновременно присутствие нейтральных и ионизированных атомов, т. е. потерявших электроны. Переход электрона от нейтрального атома к ионизированному осуществляется без затраты энергии, поэтому в металлической структуре постоянно совершается обмен электронами и всегда имеется некоторое количество свободных электронов, не принадлежащих в данный момент каким-либо определенным атомам [26].

Наличие свободных электронов во всех металлических структурах обуславливает общие свойства металлов: высокую электропроводность, теплопроводность, металлический блеск и др. Чем выше концентрация свободных электронов, тем ярче выражены перечисленные свойства. Количество свободных электронов у разных металлов различно, к тому же проявляются индивидуальные особенности нейтральных атомов и положительных ионов, находящихся в узлах кристаллической решетки, поэтому наряду с общими свойствами каждый металл отличается своими собственными и присущими только ему свойствами [26]. В связи с этим рассмотрение этого вопроса представляет самостоятельную задачу.

При обосновании выражения удельной электропроводности металлов на основе классических представлений рассматривается металлический проводник, в котором существует электрическое поле напряженностью $E = \text{const}$. В этом случае со стороны поля электрон с зарядом « e » испытывает действие силы $F = eE$ и приобретает ускорение:

$$a = \frac{F}{m_e} = \frac{eE}{m_e}, \quad (7.12)$$

Таким образом, под действием силы электроны движутся равноускоренно, приобретая к концу свободного пробега максимальную скорость.

$$v_{\max} = \frac{eE\langle t \rangle}{m_e}, \quad (7.13)$$

где $\langle t \rangle$ – среднее время между двумя последовательными соударения электрона с ионами решетки.

Согласно теории Друде – Лоренца, в конце свободного пробега электрон, сталкиваясь с ионами решетки, отдает им накопленную в электрическом поле энергию, поэтому скорость его упорядоченного движения становится равной нулю. Следовательно, средняя скорость направленного движения электрона

$$\langle v \rangle = \frac{v_{\max} + 0}{2} = \frac{eE \cdot \langle t \rangle}{2m_e}, \quad (7.14)$$

Классическая теория не учитывает распределение электронов по скоростям, поэтому среднее время $\langle t \rangle$ свободного пробега упрощенно определяется средней длиной свободного пробега $\langle \lambda \rangle$ и средней скоростью движения электронов относительно кристаллической решетки проводника, равной $(u + v)$, где $\langle u \rangle$ – средняя скорость теплового движения электронов. Как показано выше $v < u$,

поэтому принимается $\langle t \rangle = \frac{\langle \lambda \rangle}{\langle u \rangle}$.

Подставив это значение t в формулу (7.14), получили

$$\langle v \rangle = \frac{eE\langle \lambda \rangle}{2m_e \cdot \langle u \rangle}. \quad (7.15)$$

Плотность тока в металлическом проводнике в соответствии с (7.10):

$$i = ne \cdot \langle v \rangle = \frac{ne^2 \cdot \langle \lambda \rangle}{2m_e \cdot \langle u \rangle} E. \quad (7.16)$$

Таким образом, получен закон Ома в дифференциальной форме, где коэффициент пропорциональности между i и E есть не что иное, как удельная электропроводимость материала

$$\sigma = \frac{ne^2 \cdot \langle \lambda \rangle}{2m_e \cdot \langle u \rangle}, \quad (7.17)$$

которая тем больше, чем больше концентрация свободных электронов и средняя длина их свободного пробега.

Аналогичным образом выводится и закон Джоуля – Ленца в дифференциальной форме:

$$\omega = \frac{ne^2 \cdot \langle \lambda \rangle}{2m_e \cdot \langle u \rangle} E^2 = \sigma \cdot E^2, \quad (7.18)$$

здесь ω – удельная тепловая мощность тока.

Таким образом, в классической теории металлов дано обоснование законов Ома и Джоуля – Ленца, однако теория столкнулась с рядом трудностей при объяснении различных опытных данных, включая зависимость электрического сопротивления металлов от температуры, оценке средней длины свободного

пробега электронов в металлах и теплоемкости металлов. Так, из формулы удельной электропроводимости (7.17) следует, что удельное электрическое сопротивление металлов (ρ), т. е. величина, обратная σ , должна возрастать пропорционально \sqrt{T} , так как n и $\langle \lambda \rangle$ от температуры не зависят, а $\langle v \rangle$ пропорциональна \sqrt{T} . Этот вывод электронной теории противоречит опытным данным.

Чтобы по формуле (7.17) получить σ , совпадающее с опытными значениями, надо принимать $\langle \lambda \rangle$ значительно больше истинных, т. е. предполагать, что электрон проходит без соударений с ионами решетки сотни межузельных расстояний. Такое предположение не согласуется с теорией Джоуля – Ленца. Следовательно, из этого можно сделать вывод, что электрон движется не прямолинейно в металле, а между ионами решетки как бы в магнитном поле и поэтому не сталкивается ни с чем.

Теплоемкость металла по классическим представлениям должна складываться из теплоемкости его кристаллической решетки и теплоемкости электронного газа. Поэтому мольная теплоемкость металла должна быть значительно больше, чем мольная теплоемкость диэлектриков, у которых, как общепринято, нет свободных электронов.

Согласно закону Дюлонга и Пти, теплоемкость одноатомного кристалла равна $3R$, здесь R – универсальная газовая постоянная. Учитывая, что хаотическое движение электронов характеризуется тремя степенями свободы, получим, что теплоемкость электронного газа равна $\frac{3}{2}R$. Тогда мольная теплоемкость металлов должна быть близка к $4,5R$. Однако опыт показывает, что она равна $3R$, т. е. для металлов, так же как и для диэлектриков, хорошо выполняется закон Дюлонга и Пти. Следовательно, наличие электронов проводимости практически не сказывается на значении теплоемкости, что непонятно с точки зрения классической электронной теории.

Принято считать, что указанные расхождения теории с опытом снимаются в рамках квантовой механики, так как движение электронов в металлах подчиняется не законам классической механики, а законам квантовой механики и поведение электронов проводимости надо описывать не статистикой Максвелла – Больцмана, а квантовой статистикой.

Однако прежде чем рассматривать вопросы электропроводимости металлов с позиции квантовой механики, целесообразно проанализировать основные представления о полупроводниках и диэлектриках в свете классических законов физики.

Полупроводники

Полупроводники – довольно многочисленная группа простых веществ и соединений. К ним относятся некоторые минералы, элементарные вещества (кремний, германий, фосфор, мышьяк, селен, теллур, бор), оксиды металлов (одноокись цинка, двуокись титана, трехокиси молибдена и вольфрама), сульфиды, селениды и теллуриды металлов IV- и ПВ-групп.

По определению А. М. Иоффе, полупроводники – это неметаллические проводники с электронным механизмом тока. Сходство их с металлами состоит в

одинаковом электронном механизме проводимости. Длительные прохождения электрического тока через металлы и полупроводники не изменяет их физические и химические свойства. Большой интерес к полупроводникам вызван и тем, что по величинам электропроводности они занимают промежуточное положение между металлами и диэлектриками.

При повышении температуры наблюдается падение удельной электропроводимости металла. В противоположность этому проводимость полупроводников с повышением температуры растет (у диэлектриков это выражено слабее).

Электропроводность полупроводников в отличие от металлов не уменьшается, а увеличивается в присутствии небольших количеств примесей, при наличии дефектов в строении кристаллических решеток, а также под действием света и различного рода излучений. Объясняют это следующими причинами. Если в металлах все внешние электроны существуют в свободном состоянии, как электронный газ, то в диэлектриках они связаны с ядрами атомов плотно, а в полупроводниках их связь с ядрами так слаба, что внешние тепловые и световые воздействия приводят эти электроны в свободное состояние. При этом электропроводность полупроводника повышается [34].

Беспримесные полупроводники плохо проводят ток при невысоких температурах, поскольку собственных свободных электронов содержат очень мало. У полупроводников, в которые специально внесены ничтожные количества примесей, электрические свойства усиливаются в миллион раз, так как примеси легко ионизируются под влиянием внешних воздействий и выделяют свободные электроны, т. е. носители электрического тока [34].

Это общепринятая научная точка зрения на уровне классической физики.

Диэлектрики

Термин диэлектрик введен М. Фарадеем для обозначения сред, через которые проникает электрическое поле (в отличие от металлов, экранизирующих электрическое поле). Создаваемое внешними источниками и поддерживаемое в веществе постоянное электрическое поле вызывает направленное перемещение зарядов, т. е. электрический ток, а также приводит к перераспределению электрических зарядов и появлению (или изменению) электрического дипольного момента в любом объеме вещества, т. е. к его поляризации. В зависимости от того, поляризация или электропроводность определяет электрические свойства среды, принято деление веществ на диэлектрики (изоляторы) и проводники (металлы, электролиты, плазма) [5, 32]. Электропроводность диэлектриков по сравнению с металлами очень мала, однако она всегда отлична от нуля (табл. 7.1).

Таблица 7.1

Удельное сопротивление $\rho = \frac{1}{\sigma}$ и электрическая прочность $E_{пр}$
некоторых твердых диэлектриков (по данным [16, 32])

Диэлектрик	$\frac{1}{\sigma}$, Ом. м.	$E_{пр.}$, В/см.
Кварцевое стекло	$10^{14} - 10^{16}$	$2 - 3 \cdot 10^5$
Полиэтилен	$10^{13} - 10^{14}$	$4 \cdot 10^5$

Диэлектрик	$\frac{1}{\sigma}$, Ом. м.	$E_{пр.}$, В/см.
Слюда	$10^{11}-10^{14}$	$1-2 \cdot 10^6$
Электрофарфор	$10^{10}-10^{13}$	$3 \cdot 10^5$
Мрамор	10^6-10^7	$2-3 \cdot 10^5$
Алмаз	$10^{10}-10^{11}$	
Береза сухая	10^8	
Бумага	10^{10}	
Воск пчелиный	$2 \cdot 10^{13}$	
Гетинакс	10^9-10^{12}	
Дуб сухой	10^{10}	
Канифоль	$10^{12}-10^{13}$	
Капрон	10^8-10^9	
Лавсан	$10^{14}-10^{16}$	
Органическое стекло	$10^{11}-10^{13}$	
Парафин	10^{14}	
Полистирол	$10^{13}-10^{15}$	
Полихлорвинил	$10^{10}-10^{12}$	
Резина электроизоляционная	10^{13}	
Текстолит	10^8	
Фибра	10^8	
Фторопласт-4	$10^{16}-10^{17}$	
Церезин	$10^{13}-10^{15}$	
Шифер	$4 \cdot 10^5$	
Эбонит	$10^{12}-10^{14}$	
Эпоксидная смола	$10^{12}-10^{13}$	
Янтарь	$10^{15}-10^{17}$	

Носителями заряда в диэлектриках могут быть ионы, электроны и молекулы – заряженные коллоидные частицы [5]. Идеальный диэлектрик, не существующий в действительности, не содержит свободных носителей и потому не способен проводить электрический ток: у него удельная электропроводность σ и плотность тока i равны нулю, а ρ бесконечно велико. У реальных диэлектриков $\rho = 10^7 \div 10^{18}$ Ом·м, их удельная проводимость вследствие малой concentra-

ции носителей так мала, что их считают практически не проводящими ток материалами. Между диэлектриками и полупроводниками нет четкой границы, так что нижнее значение диапазона величин ρ диэлектриков условно.

Принято считать [32], что электронная проводимость диэлектриков в обычных условиях мала по сравнению с ионной. Ионная проводимость может быть обусловлена перемещением как собственных ионов, так и примесных. Возможность перемещения ионов по кристаллу связана с наличием в них дефектов. Если, например, в кристаллах есть вакансии, то под действием поля соседний ион может перескочить и заполнить ее, во вновь образовавшуюся вакансию может перескочить следующий ион и т. д. В итоге происходит движение вакансий, которое приводит к переносу заряда через весь кристалл.

С ростом T ионная проводимость увеличивается, так как растет подвижность ионов, связанная с преодолением потенциальных барьеров при их перескоках под действием тепловой активизации. Заметный вклад в электропроводность диэлектриков может вносить поверхностная проводимость [32]. Почему же по поверхности электронам легче перемещаться, чем внутри кристалла? Ответа на этот вопрос в литературе нет.

Электрический ток в диэлектрике пропорционален напряженности электрического поля E . Однако в достаточно сильных полях ток растет быстрее, чем по закону Ома, и при некотором критическом поле $E_{пр}$ наступает электрический пробой диэлектрика [32]. При пробое однородное токовое состояние становится неустойчивым и почти весь ток начинает течь по узкому каналу. Плотность тока в этом канале достигает больших значений, что приводит к необратимым изменениям в диэлектрике. На рис. 7.2 приведена зависимость плотности тока i от E , рассчитанная в предположении, что ток однороден по сечению образца.

Из рисунка видно, что с ростом i величина $\frac{dE}{di}$, называемая дифференциальным сопротивлением, может стать отрицательной. Состояние с отрицательным дифференциальным сопротивлением является неустойчивым и приводит к образованию канала тока при $E \geq E_{пр}$.

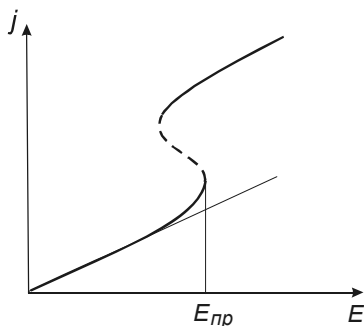


Рис. 7.2. Зависимость плотности тока от напряженности электрического поля в диэлектрике

По аналогии с E_{np} минимальное напряжение, приложенное к образцу диэлектрика и вызывающее его пробой, называют пробивным напряжением U_{np} . Поскольку образцы одного и того же диэлектрика различной толщины пробиваются при разных напряжениях, величина U_{np} не может характеризовать стойкость материала к пробую. Поэтому параметром диэлектрического материала, определяющим его способность противостоять пробую, является электрическая прочность E_{np} – напряженность электрического поля в диэлектрике, при достижении которой происходит его пробой, причем

$$E_{np} = \frac{U_{np}}{d}, \quad (7.19)$$

где d – толщина образца диэлектрика в месте пробоя. Величину E_{np} принято выражать в мегавольтах на метр $\left(\frac{\text{МВ}}{\text{м}}\right)$.

В практике электрическую прочность удобно оценивать в киловольтах на миллиметр ($1 \text{ кВ/мм} = 1 \text{ МВ/м}$).

Механизм пробоя диэлектриков может быть и тепловой. Электрический пробой представляет собой разрушение диэлектрика силами электрического поля и сопровождается образованием электрических лавин. Тепловой пробой обусловлен нагревом диэлектрика до критической температуры, при которой происходят диэлектрические потери вследствие нарушения в диэлектрике теплового равновесия. Значение E_{np} при электрическом пробое составляет примерно $100\text{--}1000 \left(\frac{\text{МВ}}{\text{м}}\right)$, а при тепловом $1\text{--}10 \left(\frac{\text{МВ}}{\text{м}}\right)$ [5].

К электрическим параметрам диэлектриков относится диэлектрическая проницаемость, характеризующая способность материала создавать электрическую емкость. В системе СИ различают относительную диэлектрическую проницаемость ε , величину безразмерную, и абсолютную диэлектрическую проницаемость $(\varepsilon \cdot \varepsilon_0)$, $\frac{\Phi}{\text{м}}$ (где ε_0 – электрическая постоянная или диэлектрическая проницаемость вакуума, равная $8,854 \cdot 10^{-12} \frac{\Phi}{\text{м}}$).

Принято считать, что диэлектрики в силу того, что свободных носителей заряда в них мало, состоят, по сути, из связанных заряженных частиц: положительно заряженных ядер и обращающихся вокруг них электронов в атомах, молекулах и ионах, а также упруго связанных разноименных ионов, расположенных в узлах решетки ионных кристаллов. Поляризация диэлектриков – упорядоченное смещение связанных зарядов под действием внешнего электрического поля (положительные заряды смещаются по направлению вектора напряженности поля E , а отрицательные – против него). Смещение L невелико и прекращается, когда сила электрического поля, вызывающая движение зарядов относительно друг друга, уравнивается силой взаимодействия между ними. В результате поляризации каждая молекула или иная частица диэлектрика становится электрическим диполем – системой двух связанных одинаковых по вели-

чине и противоположных по знаку зарядов q (Кл), расположенных на расстоянии L (м) друг от друга, причем q – это либо заряд иона в узле кристаллической решетки, либо эквивалентный заряд системы всех положительных, либо системы всех отрицательных зарядов поляризующейся частицы. Считают, что в результате процесса поляризации в частице индуцируется электрический момент:

$$p = q \cdot L. \quad (7.20)$$

У линейных диэлектриков (их большинство) между индуцируемым моментом и напряженностью электрического поля E , действующей на частицу, существует прямая пропорциональность

$$p = \alpha \cdot E. \quad (7.21)$$

Коэффициент пропорциональности α ($\text{Ф} \cdot \text{м}^2$) называют поляризуемостью данной частицы. Количественно интенсивность поляризации определяется поляризованностью P диэлектрика, которая равна сумме индуцированных электрических моментов всех N поляризованных частиц, находящихся в единице объема вещества:

$$P = p \cdot N \text{ или } P = \alpha N E, \quad (7.22)$$

где P – в $\text{Кл}/\text{м}^2$; N – в м^{-3} ; E – в $\text{В}/\text{м}$.

Следовательно, чем больше поляризуемость отдельной частицы α и выше концентрация частиц N , т. е. чем больше произведение $\alpha \cdot N$, тем интенсивнее процесс поляризации. Поляризуемость частицы α зависит от механизма поляризации, определяемого природой диэлектрика.

Основными видами поляризации являются: электронная, ионная и дипольная. Электронная поляризация – упругое смещение электронных орбит относительно ядер в атомах, молекулах и ионах под действием внешнего электрического поля. Таким образом, электронная поляризация происходит во всех диэлектриках независимо от существования в них других видов поляризации. Это быстрая поляризация, совершающаяся за время порядка 10^{-14} – 10^{-15} с, сравнимое с периодом световых колебаний. В неполярных диэлектриках существует только электронная поляризация и поэтому $\alpha = \alpha_e$ (электронная поляризуемость). Неполярные молекулы имеют симметричное строение и поэтому центр тяжести эквивалентных положительного и отрицательного зарядов у них совпадают, так что в отсутствие внешнего поля неполярные молекулы не имеют собственного электрического момента ($p = 0$).

Ионная поляризация – упругое смещение противоположно заряженных ионов в узлах кристаллической решетки ионных кристаллов под действием внешнего поля. Это тоже быстрый вид поляризации, устанавливающийся за время порядка 10^{-12} – 10^{-13} с. Поскольку в ионных кристаллах существует еще и электронная поляризация, $\alpha = \alpha_e + \alpha_i$ (α_i – ионная поляризуемость) и такие диэлектрики отличаются большим значением ϵ , чем неполярные.

Дипольная поляризация характерна для полярных диэлектриков. Полярные молекулы имеют несимметричное строение. Центры тяжести эквивалентных разноименных зарядов у них не совпадают, и поэтому в отсутствие внешнего

поля эти молекулы обладают собственным электрическим моментом $p \neq 0$, т. е. являются жесткими (постоянными) диполями. Сущность дипольной поляризации состоит в повороте (ориентации) этих жестких диполей в направлении электрического поля. Поскольку в полярной молекуле существует также и электронная поляризация, $\alpha = \alpha_0 + \alpha_0$, где α_0 – дипольная поляризуемость и поэтому полярные диэлектрики имеют ϵ больше, чем неполярные. Дипольная поляризация относится к замедленным (релаксационным) видам поляризации. Для ее завершения требуется время порядка 10^{-2} – 10^{-10} с. Поляризации релаксационного вида запаздывают во времени от изменения вызывающего их внешнего электрического поля и сопровождаются потерями энергии.

Нелинейным диэлектрикам – сегнетоэлектрикам наряду с электронной и ионной свойственна спонтанная (самопроизвольная) поляризация, относящаяся к числу релаксационных видов. Спонтанная поляризация возникает в определенном температурном интервале, ограниченном сегнетоэлектрическими точками Кюри, под влиянием внутренних процессов самопроизвольно. При этом структура элементарной ячейки кристалла становится несимметричной, приобретая электрический момент. В пределах небольших областей (доменов) электрические моменты соседних элементарных ячеек сориентированы параллельно, так что домен самопроизвольно весьма интенсивно поляризуется. Соседние домены поляризуются в различных направлениях, и первоначально поляризованность P образца материала в целом равна нулю. При воздействии внешнего электрического поля векторы поляризованности доменов ориентируются параллельно, и весь образец оказывается интенсивно поляризованным в одном направлении. Значение ϵ у сегнетоэлектриков может достигать вблизи точки Кюри до 10^6 .

Таким образом, различие в электропроводности металлов (проводников), полупроводников и диэлектриков различными исследователями единогласно определяется разной степенью связи валентных электронов в атомах этих веществ. Причем в металлах электроны считаются свободными, а в диэлектриках все электроны связаны в атомах и внешнее электрическое поле не отрывает их, а лишь смещает, т. е. поляризует диэлектрик. Вероятно, это должно подтверждаться соответствующими различиями в радиусах вращения валентных электронов атомов этих веществ, т. е. различием размеров атомов и логично предположить, что атомы металлов в свободном состоянии должны характеризоваться максимальными размерами, атомы полупроводников – средними, а атомы веществ диэлектриков – минимальными размерами. Однако анализ таблицы № 7.2 по данным [34] свидетельствует, что лишь у элементов-полупроводников – бора, фосфора и кремния радиус атомов действительно меньше, чем у всех элементов-металлов, однако у других элементов-полупроводников (германия, мышьяка, селена и теллура), радиусы атомов сопоставимы с радиусами элементов-металлов. Следовательно, не радиус атома играет преобладающую роль в электропроводности вещества за счет перехода валентных электронов в свободное состояние.

Таблица 7.2

Радиусы атомов элементов металлов и полупроводников

Элементы	Радиус атома, Å
Металлы	
Никель	1,31
Медь	1,33
Родий	1,33
Рутений	1,34
Осмий	1,35
Иридий	1,35
Рений	1,36
Кобальт	1,37
Палладий	1,37
Платина	1,38
Молибден	1,38
Алюминий	1,40
Вольфрам	1,40
Цинк	1,43
Железо	1,43
Золото	1,43
Серебро	1,44
Ниобий	1,45
Тантал	1,45
Хром	1,5
Уран	1,53
Ванадий	1,56
Литий	1,58
Гафний	1,59
Магний	1,6
Ртуть	1,6
Цирконий	1,6
Кадмий	1,62
Титан	1,68
Таллий	1,71
Свинец	1,75
Торий	1,8
Лантан	1,86
Натрий	1,97
Кальций	2,14
Стронций	2,3
Барий	2,5
Калий	2,58
Рубидий	2,79

Элементы	Радиус атома, Å
Полупроводники	
Бор	0,85
Фосфор	1,16
Кремний	1,24
Германий	1,38
Мышьяк	1,47
Селен	1,59
Теллур	1,7

В настоящее время различия в электропроводности металлов, полупроводников и диэлектриков объясняют также на основе квантовой теории строения кристаллических веществ или так называемой теории энергетических зон. Сущность ее состоит в следующем. Электроны ближайших к ядру энергетических уровней атомов полностью насыщают эти уровни, находятся в устойчивых состояниях и образуют так называемую заполненную валентную зону. Электропроводность вещества не связана с электронами этой зоны. В электропроводности могут участвовать только электроны периферических ненасыщенных энергетических уровней. При этом полосы основных и возбужденных (периферических) энергетических уровней разделяются промежуточными свободными полосами, которые не имеют возможных для электрона квантовых состояний. Эту энергетическую зону, промежуточную между зонами основных и возбужденных уровней, называют запрещенной зоной.

Твердые тела, в атомах которых все квантовые уровни полностью насыщены электронами, не могут участвовать в процессах электропроводности и ведут себя как диэлектрики. В атомах проводников зона внешних электронов заполнена частично, электроны слабо связаны с ядром, легко подвижны и обеспечивают высокую электропроводность, у полупроводников основная энергетическая зона также насыщена, но запрещенная зона уже, чем у диэлектриков. Поэтому под влиянием внешних воздействий электроны заполненной зоны могут перебрасываться в зону проводимости и обуславливать электропроводность.

Иначе говоря, полупроводники и диэлектрики отличаются от металлов тем, что валентная зона у них заполнена электронами, а ближайшая свободная зона (зона проводимости) отделена от валентной зоной запрещенных состояний. При этом ширина запрещенной зоны у полупроводников от десятых долей до 3 эВ, а у диэлектриков больше – от 3 до 5 эВ. (рис. 7.3). Однако в некоторых случаях применение зонной теории оказывается недостаточным для решения вопроса о том, является вещество диэлектриком или проводником. Взаимодействие электронов при определенных условиях может приводить к тому, что вещество с незаполненной достаточно узкой разрешенной зоной является диэлектриком [32].

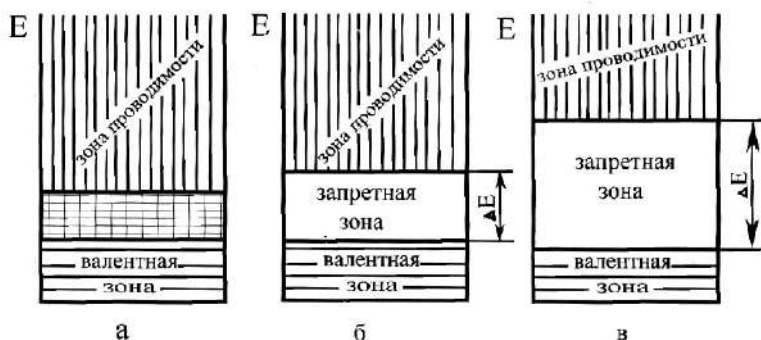


Рис. 7.3. Схема энергетических зон. а) в металле, б) в полупроводнике, в) в диэлектрике (ΔE – ширина запрещенной зоны)

Для прохождения тока в металлах не требуется иного воздействия, кроме наложения электрического поля, так как валентная зона в них не заполнена или перекрывается зоной проводимости. Но чтобы возбудить проводимость в полупроводнике, необходимо электрону заполненной валентной зоны сообщить энергию, достаточную для преодоления запрещенной зоны. При этом электрон будет переброшен из верхнего края валентной зоны в свободную зону и у полупроводника появится электропроводность. Чем меньше ширина запрещенной зоны и выше температура или интенсивность облучения полупроводника фотонами, тем выше его проводимость.

Теория энергетических зон предусматривает один существенный процесс, происходящий в полупроводниках. При нагревании или освещении полупроводника электроны переходят в зону проводимости и оставляют свободные места в валентной зоне, которая оказывается частично незаполненной. Эти свободные места (под действием электрического поля) могут заполняться электронами нижележащих уровней, а вновь освобождающиеся места – электронами еще ниже расположенных уровней. Таким образом, свободное место, получившее название «дырки», может перемещаться в кристаллической решетке полупроводника в направлении, противоположном перемещению электрона. Поэтому в полупроводниках различают два вида электропроводности: электронную проводимость, связанную с движением электронов (электронный ток), и дырочную проводимость, связанную с движением «дырок» (дырочный ток). Таким образом, удельную проводимость σ в полупроводниках определяют по формуле

$$\sigma = e(n\mu_n + p\mu_p), \quad (7.23)$$

где μ_n , μ_p – дрейфовая подвижность электронов и дырок; n и p – концентрация соответственно электронов и дырок.

Собственная концентрация носителей n_i в полупроводниках соответствует идеально чистому материалу и вычисляется [23] по формуле

$$n_i = 4,82 \cdot 10^{15} T^{3/2} \left(\frac{m_{dn} \cdot m_{dp}}{m_e^2} \right)^{3/4} \exp \left(\frac{E_o - \alpha_m T}{2kT} \right), \quad (7.24)$$

где m_{dn} , m_{dp} – эффективные массы плотности состояний электронов и дырок соответственно; m_e – масса свободного электрона; k – постоянная Больцмана; α_m – коэффициент температурной зависимости ширины запрещенной зоны.

Обычно n_i определяют экспериментально по данным измерений эффекта Холла и проводимости в соответствующем интервале температур.

Вводится [23] понятие времени жизни носителей τ . Оно представляет собой время, за которое неравновесная концентрация носителей спадает за счет их рекомбинации до равновесного значения. Основными механизмами рекомбинации считаются: излучательный, когда энергия рекомбинирующей пары электрон – дырка излучается в виде фотона; фононный (энергия передается решетке) и ударный (энергия пары передается третьей частице). Причем чаще всего имеет место не прямая рекомбинация, а процесс идет через рекомбинационные центры (примеси, дефекты) [23]. Более того, введено [29] даже понятие «электронно-дырочная жидкость», что на наш взгляд является совершенно абсурдным по той причине, что «дырки» не являются материальными частицами, как, например, электрон. «Дырка» – это пустота, это не занятое в пространстве конкретного атома место после удаления электрона. В связи с этим неправомерно даже говорить о явлении рекомбинации электрона и дырки, просто электрон занимает свое место в атоме и тем более не энергия рекомбинирующей пары электрона и дырки излучается в виде фотона, а при занятии электроном своего места в атоме (т. е. в дырке) он (электрон) излучает некоторую энергию в виде фотона, а точнее с его фотонной орбитали срывается фотон.

При разработке квантовой механики большой вклад внес Энрико Ферми, и в связи с этим введены такие понятия, как поверхность Ферми, уровень Ферми, энергия Ферми. Одним из важнейших объектов изучения квантовой статистики, как и классической, является идеальный газ, под которым понимается газ свободных электронов в металлах. Причем к металлам в квантовой механике относятся вещества, в которых при абсолютном нуле температуры имеется одна или несколько не полностью заполненных электронами энергетических зон, а энергия Ферми – это значение энергии, ниже которой все состояния системы частиц, подчинявшихся статистике Ферми – Дирака (фермионов), при абсолютном нуле температуры заняты [33]. Уровень Ферми – это некоторый условный уровень энергии системы фермионов, в частности электронов твердого тела, соответствующий энергии Ферми, а поверхность в конфигурационном (импульсном) пространстве, разграничивающая занятые и пустые состояния, носит название поверхности Ферми (ПФ) [15]. Наличием ПФ металлы отличаются от всех прочих веществ, а ее формой – друг от друга.

В чем же принципиальное различие распределения частиц электронного газа в классической статистике Максвелла – Больцмана и в квантовой статистике Ферми – Дирака?

В последней состояние системы невзаимодействующих частиц задается с помощью так называемых чисел заполнения N_i – чисел, указывающих степень заполнения квантового состояния, характеризуемого данным набором i квантовых чисел, частицами системы, состоящей из многих тождественных частиц.

Для системы частиц, образованных бозонами – частицами с нулевым или целым спином, числа заполнения могут принимать любые целые значения: 0, 1, 2, Для систем частиц, образованных фермионами – частицами с полуцелым спином, числа заполнения могут принимать лишь два значения: 0 – для свободных состояний и 1 – для занятых. Сумма всех чисел заполнения должна быть равна числу частиц системы. Квантовая статистика позволяет подсчитать среднее число частиц в данном квантовом состоянии, т. е. определить среднее число заполнения (N_i).

Идеальный газ из бозонов – бозе-газ – описывается квантовой статистикой Бозе – Эйнштейна. Распределение бозонов по энергиям вытекает из так называемого большого канонического распределения Гиббса (с переменным числом частиц), при условии, что число тождественных бозонов в данном квантовом состоянии может быть любым.

$$\langle N_i \rangle = \frac{1}{e^{(E_i - \mu)/KT} - 1}. \quad (7.25)$$

Это распределение называется распределением Бозе – Эйнштейна. Здесь $\langle N_i \rangle$ – среднее число бозонов в квантовом состоянии с энергией E_i ; k – постоянная Больцмана; T – термодинамическая температура; μ – химический потенциал. Он определяет изменение внутренней энергии системы при добавлении к ней одной частицы при условии, что все остальные величины, от которых зависит внутренняя энергия, фиксированы.

Идеальный газ из фермионов – ферми-газ – описывается квантовой статистикой Ферми – Дирака. Распределение фермионов по энергиям имеет вид:

$$\langle N_i \rangle = \frac{1}{e^{(E_i - \mu)/kT} + 1}, \quad (7.26)$$

где $\langle N_i \rangle$ – среднее число фермионов в квантовом состоянии с энергией E_i ; μ – химический потенциал.

Если $e^{(E_i - \mu)/KT} \gg 1$, то распределение Бозе – Эйнштейна (7.25) и Ферми – Дирака (7.26) переходят в классическое распределение Максвелла – Больцмана:

$$\langle N_i \rangle = A e^{-E_i/kT}, \quad (7.27)$$

где

$$A = e^{\mu/kT}. \quad (7.28)$$

Таким образом, при высоких температурах оба «квантовых» газа ведут себя подобно классическому газу.

Система частиц называется вырожденной, если ее свойства существенным образом отличаются от свойств систем, подчиняющихся классической статистике.

Поведение как бозе-газа, так и ферми-газа отличается от классического газа, они являются вырожденными газами. Считается, что вырождение газов становится существенным при весьма низких температурах и больших плотностях.

Параметром вырождения называется величина A . При $A \ll 1$, т. е. при малой степени вырождения, распределения Бозе – Эйнштейна (7.25) и Ферми – Дирака (7.26) переходят в классическое распределение Максвелла – Больцмана (7.27).

Температурой вырождения T_0 называется температура, ниже которой отчетливо проявляются квантовые свойства идеального газа, обусловленные тождественностью частиц, т. е. T_0 – температура, при которой вырождение становится существенным. Если $T > T_0$, то поведение системы частиц (газа) описывается классически. Эти выводы в первую очередь относятся к электронному газу в металлах.

Кроме того, распределение электронов по различным квантовым состояниям подчиняется принципу Паули, согласно которому в одном состоянии не может быть двух одинаковых (с одинаковым набором четырех квантовых чисел) электронов, они должны отличаться какой-то характеристикой, например, направлением спина. Следовательно, по квантовой теории, электроны в металле не могут располагаться на самом низшем энергетическом уровне даже при 0°K . Считается, что принцип Паули вынуждает электроны взбираться вверх по «энергетической лестнице».

Электроны проводимости в металле рассматривают как идеальный газ, подчиняющийся распределению Ферми – Дирака (7.26). Если μ_0 – химический потенциал электронного газа при $T = 0^\circ\text{K}$ то, согласно (7.26), среднее число $\langle N(E) \rangle$ электронов в квантовом состоянии на энергетическом уровне с энергией E равно:

$$\langle N(E) \rangle = \frac{1}{e^{(E-\mu_0)/kT} + 1}. \quad (7.29)$$

Из (7.29) следует, что при $T = 0^\circ\text{K}$ функция распределения $\langle N(E) \rangle = 1$, если $E < \mu_0$ и $\langle N(E) \rangle = 0$, если $E > \mu_0$. График этой функции приведен на рис. 7.4 по данным [30].

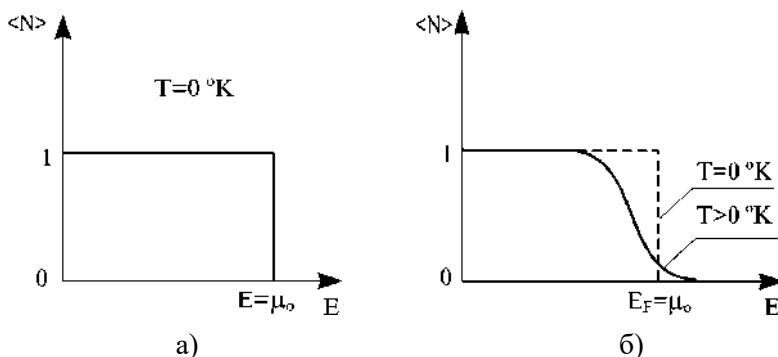


Рис. 7.4. График функции $N = f(E)$ по данным [30]

В области энергии от 0 до μ_0 функция $N(E)$ равна единице. При $E = \mu_0$ она скачкообразно изменяется до нуля. Это означает, что при $T = 0^\circ\text{K}$ все нижние квантовые состояния, вплоть до состояния с энергией $E = \mu_0$, заполнены электронами, а все остальные с энергией больше μ_0 , свободны.

Следовательно, μ_0 есть не что иное, как максимальная энергия, которую могут иметь электроны проводимости в металле при 0°K . Эта максимальная энергия называется энергией Ферми и обозначается E_F ($E_F = \mu_0$). Поэтому распределение Ферми – Дирака обычно записывается в виде

$$N(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/(kT)} + 1}. \quad (7.30)$$

Таким образом, наивысший энергетический уровень, занятый электронами, называется уровнем Ферми. Уровню Ферми соответствует энергия Ферми E_F , которую имеют электроны на этом уровне. Уровень Ферми, очевидно, будет тем выше, чем больше плотность электронного газа. Поэтому считается, что работу выхода электрона из металла нужно отсчитывать не от дна «потенциальной ямы», как это делается в классической теории, а от уровня Ферми, т. е. от верхнего из занятых электронами энергетических уровней.

Для металлов при не слишком высоких температурах выполняется неравенство $kT \ll E_F$. Это означает, что электронный газ в металлах практически всегда находится в состоянии сильного вырождения. Температура T_0 вырождения находится из условия $kT_0 = E_F$. Она определяет границу, выше которой квантовые эффекты перестают быть существенными. Соответствующие расчеты показывают, что для электронов в металле $T_0 \approx 10^4$ °K, т. е. для всех температур, при которых металл может существовать в твердом состоянии, электронный газ в металле вырожден.

При температурах, отличных от 0°K , функция распределения Ферми – Дирака (7.30) плавно изменяется от 1 до 0 в узкой области (порядка kT) в окрестности E_F (рис. 7.46). Это объясняется тем, что при $T > 0^\circ\text{K}$ небольшое число электронов с энергией, близкой к E_F , возбуждается за счет теплового движения и их энергия становится больше E_F . Соответственно вблизи границы Ферми при $E < E_F$ среднее число электронов меньше единицы, а при $E > E_F$ больше нуля. В тепловом движении участвует лишь небольшое число электронов, например при комнатной температуре $T \approx 300^\circ\text{K}$ и температуре вырождения $T_0 = 3 \cdot 10^4$ °K, это 10^{-5} от общего числа электронов. Это очень важный вывод квантовой механики, свидетельствующий о том, что лишь один из 100000 валентных электронов в металле является свободным и принимает участие в проводимости электрического тока.

Если $(E - E_F) \gg kT$ (хвост функции распределения), то единицей в знаменателе (7.30) можно пренебречь по сравнению с экспонентной, и тогда распределение Ферми – Дирака переходит в распределение Максвелла – Больцмана. Таким образом, при $(E - E_F) \gg kT$, т. е. при высоких температурах, к электронам в металле применима классическая статистика, в то же время, когда $(E - E_F) \ll kT$, к ним применима только квантовая статистика Ферми – Дирака.

Для идеального вырожденного газа фермионов, к которым относится электронный газ проводимости, ферми-энергия совпадает со значением химического потенциала при $T = 0^\circ\text{K}$ и выражается через число N частиц газа в единице объема:

$$E_F = \left[\frac{(2\pi\hbar)^2}{2m} \right] \cdot \left[\frac{3N}{(2S+1)4\pi} \right]^{2/3}, \quad (7.31)$$

где m и S – масса и спин частицы.

Величина

$$p_F = \sqrt{2m \cdot E_F} = 2\pi\hbar [3N(2S+1)4\pi]^{1/3} \quad (7.32)$$

называется ферми-импульсом.

При $T = 0^\circ\text{K}$ все состояния с импульсом $p < p_F$ заняты, а с $p > p_F$ свободны. Иными словами, при $T = 0^\circ\text{K}$ фермионы занимают в импульсном пространстве состояние внутри сферы $p^2 = 2 \cdot m E_F$ с радиусом p_F (ферми-сферы).

В общем случае принято считать, что ферми-поверхность – это изоэнергетическая поверхность в пространстве квазиимпульсов $E(\vec{p}) = E_F$, отделяющая область занятых электронных состояний металла от области, в которой при $T = 0^\circ\text{K}$ электронов нет. Электроны, имеющие энергию E_F , расположены на ферми-поверхности. Для неидеального ферми-газа также существует граничная энергия Ферми, хотя его частицы не находятся в определенных квантовых состояниях, как у идеального ферми-газа.

Таким образом, в квантовой теории электропроводности металлов – теории электропроводности, основывающейся на квантовой механике и квантовой статистике Ферми – Дирака, – проведен пересмотр вопроса об электропроводности металлов. Выполненный на основе этой теории, он приводит к выражению для удельной электрической проводимости металла

$$\sigma = \frac{ne^2 \langle \lambda_F \rangle}{m \langle u_F \rangle}, \quad (7.33)$$

которое по внешнему виду аналогично классической формуле (7.17), но имеет другое физическое содержание. Здесь n – также концентрация электронов проводимости в металле, $\langle \lambda_F \rangle$ – средняя длина свободного пробега электрона, имеющего энергию Ферми, $\langle u_F \rangle$ – средняя скорость теплового движения такого электрона. Считается, что выводы, полученные на основе формулы (7.33) полностью соответствуют опытным данным.

Квантовая теория [30] рассматривает движение электронов с учетом их взаимодействия с кристаллической решеткой. Согласно корпускулярно-волновому дуализму, движению электрона соответствует волновой процесс. Считается, что идеальная кристаллическая решетка (в ее узлах находятся неподвижные частицы и в ней отсутствуют нарушения периодичности) ведет себя подобно оптически однородной среде – она «электронные волны» не рассеивает. Это соответствует тому, что металл не оказывает электрическому току – упорядоченному движению электронов – никакого сопротивления. «Электронные волны», распространяясь в идеальной кристаллической решетке, как бы огибают узлы решетки и проходят значительные расстояния. В реальной кристаллической решетке всегда имеются неоднородности, которыми могут быть, например, примеси, вакансии; неоднородности обуславливаются также тепловыми колебаниями.

Известно [19], что прибавление посторонних веществ к чистому металлу (образование сплава), наличие примесей, вакансий, как и повышение температуры ведет к понижению его теплопроводности и электропроводности, тот же эффект вызывает и деформация решетки металла, происходящая при его механической обработке. Поэтому в реальной кристаллической решетке происходит рассеяние «электрических волн» на неоднородностях, что и является причиной электрического сопротивления металлов. Рассеяние «электрических волн» на неоднородностях, связанных с тепловыми колебаниями, рассматривается как столкновения электронов с фононами. Таким образом, рассматривая электрический ток как распространение «электрических волн» в металле, отбрасывается материальность электронов и перенос ими, а не их волнами, электрического заряда. В квантовой теории средняя скорость v_F от температуры практически не зависит, так как доказывается, что с изменением температуры уровень Ферми остается практически неизменным. Однако с повышением температуры рассеяние «электронных волн» на тепловых колебаниях решетки (на фононах) возрастает, что соответствует уменьшению средней длины свободного пробега электронов. В области комнатных температур λ_F обратно пропорциональна абсолютной температуре, поэтому, учитывая независимость v_F от температуры, получили, что удельное сопротивление металлов $\rho = \frac{1}{\sigma}$ растет пропорционально T . Таким образом считается, что квантовая теория электропроводности металла устранила эту трудность классической теории.

В обобщающей работе [15] дается более углубленный анализ параметра сопротивления металлов электрическому току, при этом удельное электрическое сопротивление ρ описывается следующим выражением:

$$\rho = \frac{m}{Ne^2\tau} = \frac{mv_F}{N \cdot e^2 \cdot l}, \quad (7.34)$$

где m , e – масса и заряд электрона; N – эффективная плотность электронов; v_F – скорость электрона на поверхности Ферми; τ – среднее время жизни электрона между двумя актами рассеяния; l – соответствующая средняя длина пробега.

Как видно, в этой формуле используется не концентрация свободных носителей тока n , соответствующая концентрации валентных электронов, а эффективная плотность электронов N , под которой, вероятно, подразумевается все-таки концентрация электронов ($1/\text{м}^3$), участвующих в проводимости электрического тока, а не объемная плотность $\text{кг}/\text{м}^3$ электронов. Так как принимается [15], что существуют два основных механизма рассеяния: 1) столкновение электронов с локальными неподвижными центрами-примесями, дефектами; и 2) рассеяние тепловыми колебаниями решетки – фононами, то в меру зависимости этих процессов эффективная частота соударений равна сумме частот соударений первого и второго процессов, т. е.

$$\frac{1}{\tau_{\text{эф}}} = \frac{1}{\tau_{\text{прим}}} + \frac{1}{\tau_{\text{фон}}}. \quad (7.35)$$

Это приводит к правилу Матиссена

$$\rho_{\text{полн}} = \rho_{\text{ост}} + \rho_{\text{ид}}(T), \quad (7.36)$$

где $\rho_{\text{ост}}$ – не зависящее от температуры T остаточное сопротивление, связанное с технологией изготовления данного образца металла и тем меньшее, чем совершеннее образец; $\rho_{\text{ид}}(T)$ – сопротивление идеальной решетки данного металла, обусловленное рассеянием на фононах и сильно зависящие от температуры, которое описывается формулой Блоха – Грюнайзена:

$$\rho_{\text{ид}} = \frac{K \cdot T^5}{M\theta^6} \int_0^{\theta/T} \frac{\xi \cdot d\xi}{(e^\xi - 1)(1 - e^{-\xi})}, \quad (7.37)$$

здесь K – постоянная, связанная с удельным объемом металла; M – атомная масса; θ – характеристическая температура Дебая – параметр металла, характеризующий максимальную частоту колебаний решетки ($\hbar\omega_{\text{max}} \equiv \kappa\theta$).

Из формулы (7.37) следует, что параметр $\xi = \frac{\theta}{T}$.

Для высоких температур $\frac{T}{\theta} \geq 1$

$$\rho = \frac{KT}{4M\theta^2}, \quad (7.38)$$

т. е. сопротивление растет с увеличением температуры линейно; для низких температур $\frac{T}{\theta} \ll 1$,

$$\rho = 124,4 \frac{KT^5}{M\theta^6}, \quad (7.39)$$

Для металлов с ПФ, близкой к сферической, закон $\rho \propto T^5$ начинает выполняться при $T < 0,1\theta$.

Для металлов со сложной ПФ этот закон начинает выполняться при гораздо более низких температурах, когда значение импульса тепловых фононов становится меньше всех характерных размеров поверхности Ферми. (Так, для висмута $T < 0,1$ К [15].)

Наличие некоторых примесей может заметно влиять на $\rho_{\text{ид}}(T)$, это является причиной отклонений от правила Матиссена.

Рассеяние на магнитных примесях приводит к логарифмически возрастающей с уменьшением температуры добавке к сопротивлению – эффекту Кондо, что используется в термометре. Минимально возможная длина пробега (порядка межатомных расстояний) определяет максимальное металлическое удельное сопротивление

$$\rho_{\max}^{\text{мет}} \approx \frac{a\hbar^2}{e^2} \approx 0,2 \cdot 10^{-3} \text{ Ом} \cdot \text{см} = 0,2 \cdot 10^{-1} \text{ Ом} \cdot \text{м}, \quad (7.40)$$

где a – межатомное расстояние; \hbar – постоянная Планка с черточкой; e – заряд электрона.

В таблице справочника [15] приведены значения удельного сопротивления ρ_0 , изменяющиеся для разных металлов в пределах $(1,55 \div 278)10^{-4}$ Ом·м и температурного коэффициента сопротивления $\alpha_0 = \frac{1}{\rho_0} \cdot \frac{d\rho_0}{dT}$ при 0°C , изменяющиеся в пределах $(50 \div 900)10^{-5}^\circ\text{C}^{-1}$.

Представление данных этой таблицы в виде графика в функции $\alpha_0 = f(\lg \rho_0)$ показывает, что статистически параметр α_0 линейно уменьшается с ростом $\lg \rho_0$ (рис. 7.5).

Из рис. 7.5 видно, что статистическую связь можно аппроксимировать прямой вида $\lg \rho_0 = A - \frac{\alpha_0}{B}$, причем параметры $A = \lg(1,1 \cdot 10^{-4})$, а $B = 6,00159 \cdot 10^{-3}$.

Параметр α_0 для металлов изменяется в пределах $(50 \div 900) \cdot 10^{-5}$ 1/К и является положительным. Экстраполяция этой статистической зависимости в область больших величин удельного электрического сопротивления, т. е. $\rho_0 > 1,1 \cdot 10^{-4}$ Ом·см, приводит к изменению знака параметра α_0 . В таблице 7.3 приведены рассчитанные величины параметра α_0 для соответствующих значений ρ_0 .

Таблица 7.3

ρ_0 , Ом·см	α_0 , 1/К	ρ_0 , Ом·см	α_0 , 1/К
10^{-6}	$+1,225 \cdot 10^{-2}$	10^8	$-7,175 \cdot 10^{-2}$
10^{-5}	$+6,248 \cdot 10^{-3}$	10^9	$-7,775 \cdot 10^{-2}$
10^{-4}	$+2,483 \cdot 10^{-4}$	10^{10}	$-8,375 \cdot 10^{-2}$
10^{-3}	$-5,752 \cdot 10^{-3}$	10^{11}	$-8,977 \cdot 10^{-2}$
10^{-2}	$-1,175 \cdot 10^{-2}$	10^{12}	$-9,577 \cdot 10^{-2}$
10^{-1}	$-1,775 \cdot 10^{-2}$	10^{13}	$-1,018 \cdot 10^{-1}$
10^0	$-2,375 \cdot 10^{-2}$	10^{14}	$-1,078 \cdot 10^{-1}$
10^1	$-2,976 \cdot 10^{-2}$	10^{15}	$-1,138 \cdot 10^{-1}$
10^2	$-3,575 \cdot 10^{-2}$	10^{16}	$-1,198 \cdot 10^{-1}$
10^3	$-4,175 \cdot 10^{-2}$	10^{17}	$-1,258 \cdot 10^{-1}$
10^4	$-4,775 \cdot 10^{-2}$	10^{18}	$1,318 \cdot 10^{-1}$
10^5	$-5,375 \cdot 10^{-2}$	10^{19}	$-1,378 \cdot 10^{-1}$
10^6	$-5,975 \cdot 10^{-2}$	10^{20}	$-1,438 \cdot 10^{-1}$
10^7	$-6,575 \cdot 10^{-2}$	10^{21}	$-1,498 \cdot 10^{-1}$

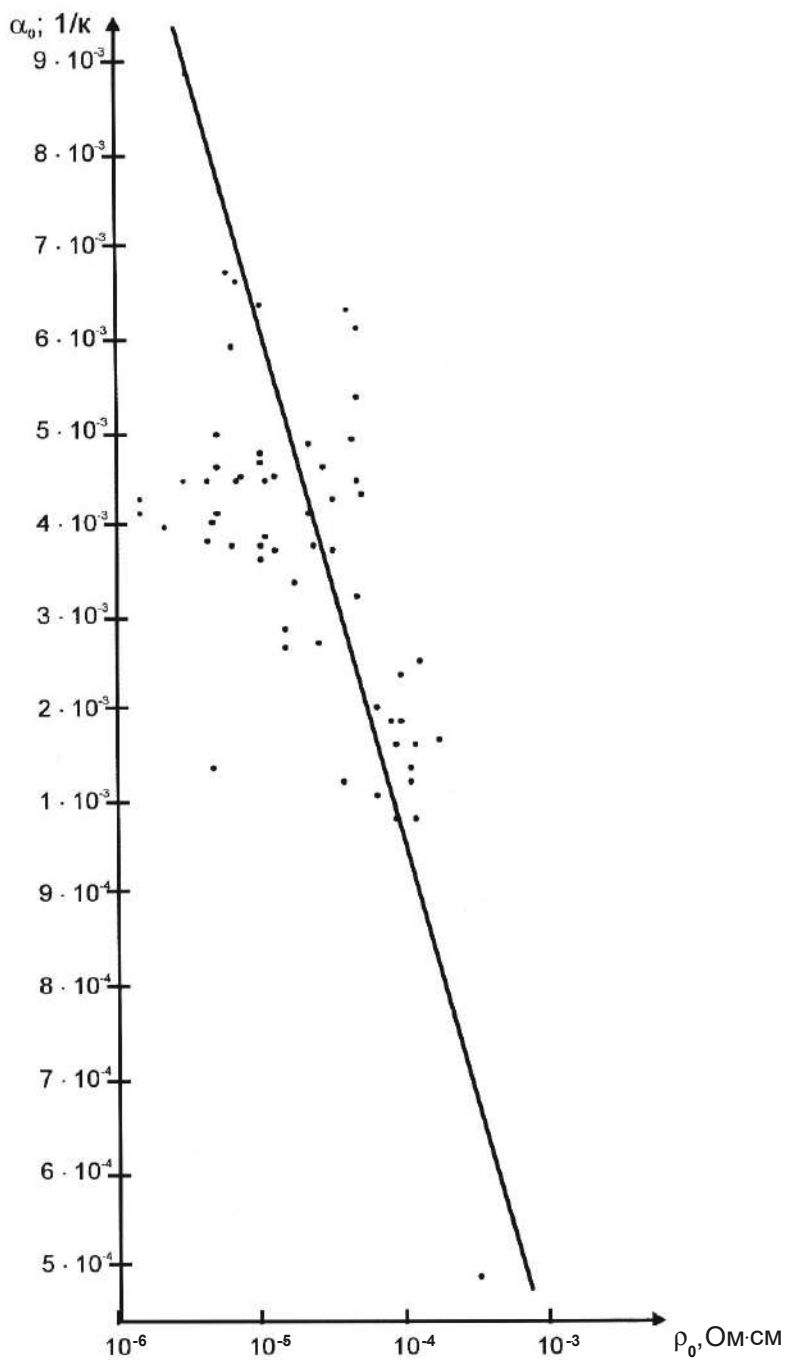


Рис. 7.5. Зависимость температурного коэффициента (α_0) от величины удельного электрического сопротивления металлов

Как видно, экстраполяция зависимости $\lg \rho_0 = f(\alpha_0)$ для металлов в область полупроводников и диэлектриков позволяет рассчитать величину параметра α_0 для широкого диапазона электрических сопротивлений полупроводников и диэлектриков, причем для них α_0 отрицательная величина, что отражает принципиальный ход зависимости $P_i = \frac{\rho_i}{\rho} = f(t)$ [11] и одновременно дает основание согласиться с мнением А. М. Иоффе о едином электронном механизме электропроводности как металлов, так и кристаллических полупроводников и диэлектриков. Идея о «дырочной» проводимости в полупроводниках и «ионно-дырочной» в диэлектриках является весьма проблематичной.

На величину температурного коэффициента сопротивления металлов существенное влияние оказывают фазовые переходы в кристаллическом состоянии. Например, на рис. 7.6 представлена зависимость $\alpha_0 = f(T)$ для никеля, из которой следует, что при $T \approx 630^\circ\text{K}$ почти в 3 раза увеличивается α_0 по сравнению с $T < 300^\circ\text{K}$ и $T > 700^\circ\text{K}$.

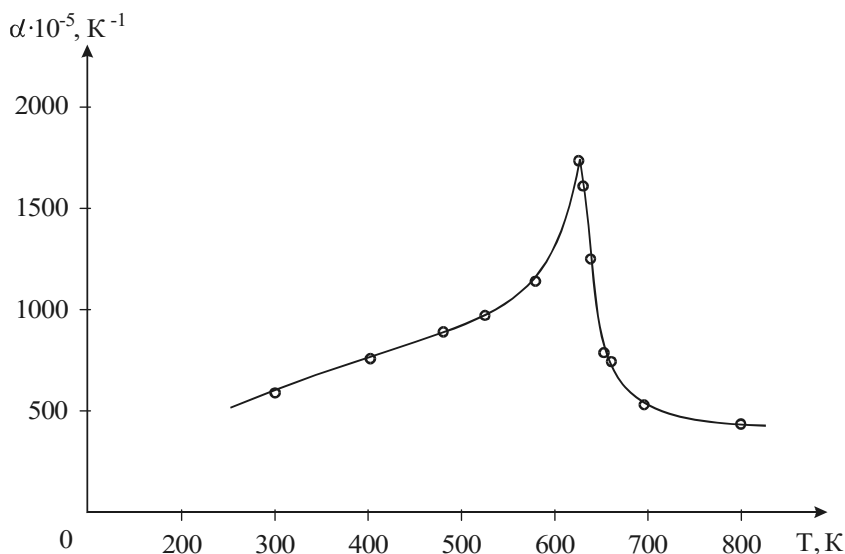


Рис. 7.6. Зависимость температурного коэффициента сопротивления никеля от температуры

Некоторые металлы при низких температурах переходят в сверхпроводящее состояние.

Сверхпроводимость вещества

Сверхпроводимость — физическое явление, для характеристики которого не жалеют эпитетов. И действительно, долгие годы ее природа была совершенно неясна. Потребовалось несколько десятилетий и усилий многих физиков, чтобы предложить какой-то механизм этого явления. Однако и сейчас, уже после открытия в 1986 и 1987 гг. так называемых высокотемпературных сверхпровод-

ников, тайна окутывает сверхпроводимость, до сих пор остаются принципиальные вопросы, на которые нет ответа [6].

Принято считать, что сверхпроводимость – это особое квантовое явление, возникающее вследствие Бозе-конденсации пар электронов проводимости. Прежде чем на основе квантовой теории приступить к качественному объяснению явления сверхпроводимости, рассмотрим некоторые свойства сверхпроводников.

Различные опыты, поставленные с целью изучения свойств сверхпроводников, приводят к выводу, что при переходе металла в сверхпроводящее состояние не изменяется структура его кристаллической решетки, не изменяются его механические и оптические (в видимой и инфракрасных областях) свойства. Однако при таком переходе наряду со скачкообразным изменением электрических свойств качественно меняются его магнитные и тепловые свойства. Так, в отсутствие магнитного поля переход в сверхпроводящее состояние сопровождается скачкообразным изменением теплоемкости, а при переходе во внешнем магнитном поле скачком изменяется и теплопроводность и теплоемкость (такие явления характерны для фазовых переходов II рода).

Достаточно сильное магнитное поле (а следовательно, и сильный электрический ток, протекающий по сверхпроводнику) разрушает сверхпроводящее состояние. Таким образом, двумя важнейшими макроскопическими признаками возникновения сверхпроводящего состояния являются: 1) отсутствие сопротивления протекающему постоянному электрическому току при температуре ниже некоторой критической T_c ; 2) выталкивание магнитного поля из объема сверхпроводника (эффект Мейснера). Существуют критическое магнитное поле H_c и критическая плотность тока j_c , при превышении которых сверхпроводимость исчезает. Зависимость критической напряженности магнитного поля от температуры с хорошей точностью описывается [15] формулой

$$H_c(T) = H_{co} \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^2 \right], \quad (7.41)$$

где T – абсолютная температура; H_{co} – критическая напряженность магнитного поля при нулевой температуре.

Интересным является замеченный факт, что разные кристаллические модификации одного и того же вещества имеют различную температуру перехода в сверхпроводящее состояние. T_c зависит от внешнего давления p .

Большинство сверхпроводящих сплавов относится к так называемым сверхпроводникам II рода, в которых возможно сосуществование сверхпроводимости и магнитного поля (фаза Шубникова). Магнитное поле вызывает появление в объеме таких сверхпроводников тонких нитей нормального металла (вихрей Абрикосова) с характерным размером – λ , каждая из которых несет квант магнитного потока:

$$\Phi_0 = \frac{\hbar \cdot c}{2 \cdot e}, \quad (7.42)$$

где \hbar – постоянная Планка; c – скорость света; e – заряд электрона.

В связи с тем, что в сверхпроводниках II рода нет полного эффекта Мейснера, в них сверхпроводимость существует при гораздо более высоких значениях напряженности магнитных полей H_{c2} . Общность эффектов, наблюдаемых в сверхпроводящем состоянии различных металлов, их соединений и сплавов, указывает на то, что явление сверхпроводимости обусловлено физическими причинами, общими для различных веществ, т. е. должен существовать единый для всех сверхпроводников механизм этого явления.

В 1934 г. голландские физики К. Гортер и Х. Казимир предложили рассматривать сверхпроводник как смесь двух электронных жидкостей – нормальной и сверхпроводящей. Нормальная электронная жидкость обладает теми же свойствами, что и электроны в нормальном металле, а вот сверхпроводящая течет без трения. Обе жидкости тщательно перемешаны, в каждом кусочке сверхпроводника есть электроны обоих сортов. Количество или, точнее, доля сверхпроводящих электронов зависит только от температуры. Когда мы охлаждаем металл до критической температуры, то сверхпроводящие электроны появляются, а при абсолютном нуле все электроны являются сверхпроводящими. Сверхпроводнику, через который течет постоянный ток, сопоставляют [6] эквивалентную электрическую схему (рис. 7.7): два параллельно соединенных электрических сопротивления, одно из которых обращается в нуль при сверхпроводящем переходе. Нулевое сопротивление как бы шунтирует цепь, и весь ток идет по «сверхпроводящей ветви». Значит, какова бы ни была плотность сверхпроводящей электронной жидкости, если она есть, то и сверхпроводимость есть, мы регистрируем нулевое сопротивление и не можем заметить «нормальную ветвь». Зато она проявляет себя в другом – чем больше плотность сверхпроводящих электронов, тем больший сверхпроводящий ток способна пропустить цепь. Сверхпроводящие электроны стремятся взять на себя весь ток, но зато они оказываются не способными проводить тепло, т. е. переносить энергию из одного конца образца в другой [6].



Рис. 7.7. Эквивалентная электрическая схема нормальной и сверхпроводящей электронных жидкостей

Более современная физическая теория природы сверхпроводимости была предложена лишь в 1967 г. американскими физиками Д. Бардиным, Л. Купером и Д. Шриффером и усовершенствована Н. Н. Боголюбовым на основе теории Л. Ландау о сверхтекучести гелия, созданной в 1941 г. Согласно этой теории качественно явление сверхпроводимости объясняют так. Между электронами

металла помимо кулоновского отталкивания, в достаточной степени ослабленного экранирующим действием положительных ионов решетки, в результате электрон-фоонного взаимодействия (взаимодействия электронов с колебаниями решетки) возникает слабое взаимное притяжение. Это взаимное притяжение при определенных условиях может преобладать над отталкиванием. В результате электроны проводимости, притягиваясь, образуют своеобразное связанное состояние, называемое куперовской парой. Волны кристаллической решетки, возникающие за счет колебания атомов, И. Е. Тамм назвал фононами. При этом считается, что волны кристаллической решетки подчиняются законам квантовой механики и ведут себя не только как волны, но и как частицы. Фонон рассматривают как летящую частицу, обладающую определенной энергией и скоростью, причем энергия такой частицы пропорциональна частоте соответствующей волны. Правда, реально в действительности никакой такой частицы нет, но процесс распространения волновых колебаний в кристаллической решетке уподобляют некоторой частице, так называемому фонону, энергия которой, по аналогии с фотоном, пропорциональна частоте колебаний атомов или частоте распространяемых ими волн в кристаллической решетке. Более подробно механизм этого взаимодействия представляют следующим образом. В решетке пролетел электрон и вызвал колебание ионов, расположенных в узлах решетки. Электрон несет отрицательный заряд, а ионы заряжены положительно. Поэтому ионы слегка притягиваются к пролетевшему электрону. Но ионы гораздо тяжелее электрона, поэтому их движение более медленное. Электрон уже «давно» пролетел, а ионы еще только подтянулись к тому месту, где он был. Значит, в этом месте образовался на некоторое время небольшой избыточный положительный заряд и уже другой летящий мимо этого места электрон почувствует его и изменит свое движение, притянется к этому месту. Вот таким способом, считается, фононы создают слабое притяжение между электронами. Но притягиваются электроны, находящиеся на больших расстояниях друг от друга. Ведь для того чтобы второй электрон притянулся ионом, первый должен уже далеко улететь, иначе его отрицательный заряд перекомпенсирует все притяжение. Электроны, находящиеся вблизи, отталкиваются, как и положено двум отрицательным зарядам по закону Кулона, а на достаточно больших расстояниях они притягиваются за счет фононов. Из такой трактовки взаимодействия далеко друг от друга движущихся электронов делают вывод, что притяжение между электронами приводит к связыванию их в пары, которые и называются куперовскими. В куперовской паре электроны находятся на большом расстоянии, которое может быть в тысячи раз больше, чем среднее расстояние между электронами в металле, т. е. между двумя соответствующими паре электронами свободно бегают огромное количество других электронов, относящихся к другим парам. Это что-то вроде большущей толпы, в которой вы не просто видите своего друга далеко от вас и не теряете его из виду, но его движение через эту толпу оказывает влияние на ваше движение, и оба движения являются согласованными. То есть возникает порядок движения, но такой порядок движения электронов сравнивают не с однородными движениями солдат в колонне, а с

хитрым сплетением движений танцующих в затейливом хороводе. Но ведь эти движения должны быть не просто согласованными, а способствовать равномерному или даже ускоренно направленному движению этих электронов без сопротивления, без препятствия со стороны непрерывно встречающихся на их пути ионов кристаллической решетки. Введено даже понятие длины корреляции, равное среднему расстоянию между электронами в их паре и обозначаемое греческой буквой ξ . Это расстояние, на котором электроны чувствуют друг друга и на котором существенно изменяются сверхпроводящие свойства. Величина ξ для разных сверхпроводящих материалов оказалось разной. Например, в работе [6] для температуры, стремящейся к абсолютному нулю, приведены следующие величины ξ :

Алюминий	$\xi = 1500 \text{ \AA}$
Олово	$\xi = 2500 \text{ \AA}$
Таллий	$\xi = 2700 \text{ \AA}$
Ниобий	$\xi = 600 \text{ \AA}$
Сплав ниобия и тантала	$\xi = 300 \text{ \AA}$

Принято считать, что электроны, входящие в куперовскую пару, имеют противоположно направленные спины. Поэтому спин такой пары равен нулю, и она представляет собой бозон. К бозонам принцип Паули неприменим, и число бозе-частиц, находящихся в одном состоянии, не ограничено. Поэтому при сверхнизких температурах бозоны скапливаются в основном состоянии, из которого их довольно трудно перевести в возбужденное. Система бозе-частиц – куперовских пар, обладая устойчивостью относительно возможного отрыва электрона, может под действием внешнего электрического поля двигаться без сопротивления проводнику, что и приводит к сверхпроводимости.

Пары обладают нулевым значением спина и подчиняются Бозе – Эйнштейна статистике. В сверхпроводящем металле пары испытывают так называемую бозе-конденсацию, и поэтому система куперовских пар обладает свойством сверхтекучести. Таким образом, сверхпроводимость представляет собой сверхтекучесть электронной жидкости.

В заключение рассмотрения этого вопроса В. Л. Гинзбург и Е. А. Андрюшин [6] замечают, что сколь бы сложным ни казался механизм явления сверхпроводимости, на самом деле он еще сложнее, так как сверхпроводимость обусловлена коллективным, а не только парным поведением электронов. Взаимосвязано не только движение двух электронов в куперовской паре, но и движение всех пар между собой, которые движутся в фазе.

При $T = 0$ в пары связаны все электроны проводимости. Энергия связи электронов в пары весьма мала: она равна примерно $3,5kT_k$. При разрыве пары, происходящем, например, при поглощении кванта электромагнитного поля (фотона) или кванта звука (фонона), в системе возникает возбуждение. При отличной от нуля температуре имеется определенная равновесная концентрация элементарных возбуждений (квазичастиц), она возрастает с температурой, а концентрация пар электронов соответственно уменьшается. Энергия связи пары определяет так называемую щель в энергетическом спектре возбуждений, т. е. ми-

нимальную энергию, необходимую для создания отдельного возбуждения. Считается, что природа сил притяжения между электронами, приводящих к образованию пар, вообще говоря, может быть различной, хотя у всех известных сверхпроводников эти силы определяются взаимодействием электронов с фононами.

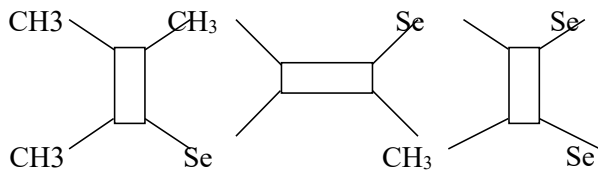
Механизм объяснения сверхпроводимости на основе куперовских пар электронов, по нашему мнению, является больше экзотическим, чем физическим явлением. Он никак не объясняет причину перехода вещества из нормального состояния в сверхпроводящее, а этот момент и является самым важным в понимании этого вопроса. Тем не менее развитие теории сверхпроводимости стимулировало поиски других механизмов сверхпроводимости.

В этом плане особое внимание уделяется так называемым нитевидным (одномерным) и сложным (двумерным) структурам, обладающим достаточно большой проводимостью, в которых, считают, можно ожидать более интенсивного притяжения между электронами, чем в обычных сверхпроводниках, а следовательно, и более высокой температуры перехода в сверхпроводящее состояние.

В связи с этим особый интерес представляет высокотемпературная сверхпроводимость образцов на основе керамики [2, 3, 9, 22] типа $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCuO}_x$; $\text{Ba}_2\text{YCu}_3\text{O}_{7-x}$; и др.

Как видно, в таких образцах металлы составляют небольшую долю образца, однако критическая температура сверхпроводящего состояния достигает 90–110°K, что более чем в 20 раз превышает критическую температуру сверхпроводящего перехода для чистых металлов. Этот парадокс ставит под сомнение достоверность разработанной теории сверхпроводимости металлов на основе куперовских пар электронов проводимости, да и вообще участия подавляющего большинства валентных электронов металла в проводимости электрического тока.

Кроме того, известны [31] даже органические сверхпроводники типа $(\text{TMTSF})_2 \text{X}$, основанные на молекуле тетраметилтетраселен-фурвалена



и имеющие в качестве X^- один из симметричных октаэдрических анионов PF_6^- , AsF_6^- , SbF_6^- , TaF_6^- , которые обнаруживают сверхпроводимость при больших давлениях $p = (0 - 18) \cdot 10^8$ Па и $T \approx 1$ К.

Как видно, разработаны классическая и квантовая природа электропроводности металлов и их сверхпроводимости. Однако еще осталось много противоречий. Так в квантовой механике принято считать, что электронные волны не рассеиваются на узлах кристаллической решетки, они как бы огибают узлы решетки, но рассеяния их происходят на неоднородностях, к которым относят примеси, вакансии, а также тепловые колебания. Однако при переходе к состо-

янию сверхпроводимости почему-то умалчивается о тепловых колебаниях решетки и других дислокациях, которые при возможном объединении электронов в куперовские пары по каким-то непонятным причинам в условиях низких температур не реагируют на эти неоднородности. В этих условиях сопротивление проводника становится равным нулю, и при протекании по нему тока тепло в соответствии с законом Джоуля – Ленца не выделяется.

В обобщающих теориях о проводимости полупроводников [23] и сверхпроводимости металлов [15] прослеживается некоторая аналогия. Во-первых, уделяется внимание взаимодействию электронов и дырок, что приводит к их рекомбинации и спаду концентрации носителей электрического тока. В металлических сверхпроводниках отсутствие электрического сопротивления связывается с взаимодействием пар электронов между собой через фононы, но ничего не говорится о возможной роли дырок в проводимости металлов, хотя их в металлах должно быть на многие порядки больше, чем в полупроводниках, и, естественно, ни о какой их рекомендации речи не идет.

В соответствии с классической теорией проводимости металлов средняя длина свободного пробега равна размеру межузельных расстояний, однако, исходя из экспериментальных данных, средняя длина свободного пробега электрона в металлах достигает сотен межузельных расстояний. Следовательно, из этого можно сделать вывод, что электрон движется не прямолинейно в металле, а между ионами решетки как бы в магнитном поле и поэтому не сталкивается ни с чем. Такое предположение косвенно подтверждается еще тем, что с ростом напряженности внешнего магнитного поля снижается температура перехода в сверхпроводящее состояние.

Сверхпроводящее состояние в магнитном поле нарушается, так как силовые линии магнитного поля взаимодействуют с фотонным полем электронов проводимости и это, по нашему мнению, эквивалентно увеличению в диаметре размеров фотонного поля вокруг электронов.

Таким образом, какие же основные факторы способствуют появлению электрической сверхпроводимости в металлах при температурах, близких к абсолютному нулю, и в металлизированной керамике при температурах на порядок выше?

Для понимания этого необходимо проанализировать некоторые особенности высокотемпературных сверхпроводников. Так например, имеются убедительные свидетельства того, что в образцах $\text{Ba}_2\text{La}_2\text{CuO}_4$ сверхпроводящий переход обеспечивается фазой с составом La_2CuO_4 , разбавленным Ba. Изначально в этой фазе решетка имела орторомбические искажения, с увеличением концентрации Ba параметры решетки монотонно изменяются так, что восстанавливается тетрагональная структура. Наивысшее значение T_c было достигнуто при концентрациях Ba, близких к тем, при которых происходит переход в тетрагональную структуру. В то же время, если в образце доминирует фаза со структурой перовскита, то переход оказывается подавленным и образец демонстрирует только металлические свойства.

Рассматривая роль водорода в керамике $\text{Ba}_2\text{YCu}_3\text{O}_7$, Ю. М. Байков, Е. А. Егоров и другие [2] обнаружили, что замена кислорода на серу и другие

галогены не приводит к существенному росту температуры сверхпроводящего состояния T_c . Однако, несмотря на отсутствие столь важного утилитарного эффекта, интеркаляция галогенов интересна тем, что приводит к образованию ромбической фазы со сверхпроводящими свойствами из несверхпроводящей тетрагональной YBCO.

В работе [3] показана связь особенностей кристаллизации с величиной T_c , для сверхпроводящих монокристаллов соединения $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCuO}_x$. Установлено, что отжиг их в атмосфере воздуха повышает температуру сверхпроводящего перехода с 75°K до 86°K и уменьшает ΔT_c с 10 до 8°K . Причем данные рентгеноструктурного анализа ламелей этого соединения, полученных до и после отжига, позволили авторам предположить, что роль отжига сводится лишь к упорядочению собственных дефектов кристаллической решетки, например, вакансий кислорода и возможных антиструктурных дефектов $[\text{Ca}_{\text{Sr}}, \text{Sr}_{\text{Ca}}]$.

В. Л. Гинзбург и Е. А. Андрушин [6] рассматривают влияние кристаллической решетки на сверхпроводимость металлов. Для этого ими в первом приближении берется идеально правильная кристаллическая решетка. Отмечается, что исчезновение электрического сопротивления, экранирование внешнего магнитного поля, скачок теплоемкости при сверхпроводящем фазовом переходе – все эти свойства относятся к электронам. Кристаллическая решетка представляет собой как бы сосуд, емкость, в которую налита, по их мнению, электронная «жидкость». И на первый взгляд при сверхпроводящем переходе меняются свойства жидкости, а сосуд здесь ни при чем. Авторы [6] отмечают, что это первое впечатление неверно. Действительно, в подавляющем большинстве случаев сверхпроводящий переход почти не влияет на решетку, но кристаллическая решетка на сверхпроводимость влияет, более того, определяет сверхпроводимость, причем исключений из этого закона пока не обнаружено. Существует много видов кристаллических решеток. Часто одно и то же вещество может иметь кристаллические решетки разных видов, т. е. одни и те же атомы могут быть расположены относительно друг к другу по-разному. Переход одного типа кристаллической решетки к другому происходит при изменении либо температуры, либо давления, либо еще какого-нибудь параметра. Такой переход, как и возникновение сверхпроводимости и плавления, является фазовым.

Весьма интересная информация по влиянию структуры кристаллической решетки на величину удельного электрического сопротивления приведена Ю. М. Гуфаном [10]. Им отмечается, что в чистой двуокиси ванадия VO_2 при $T \approx 339 \text{ K}$ наблюдается фазовый переход с изменением симметрии. Высокотемпературная фаза имеет структуру рутила и симметрию D_{4h}^{14} (фаза R), в низкотемпературной фазе структура рутила слегка искажается и пространственная группа симметрии понижается до C_{2h}^3 (фаза M_1), причем трансляционная симметрия понижается в два раза. Новые элементарные трансляции d_i выражаются через старые a_i следующим образом:

$$d_i = a_i; \quad d_2 = a_2 + a_3; \quad d_3 = a_2 - a_3.$$

Считается, что структура при переходе искажается слабо, малы и тепловые эффекты, но переход интересен тем, что электропроводность при переходе в низкосимметричную фазу скачком уменьшается в 10^5 раз.

Интересным является и другой факт – симметрия фаз двуокиси ванадия неустойчива по отношению к минимальным легирующим добавкам. Так замещение $(1\div 2)10^{-2}$ атомного процента ионов ванадия ионами хрома приводит к тому, что наблюдается серия переходов с последовательными изменениями симметрии $D_{4h}^{14} - C_{2h}^3(2) - (T?) - C_{2h}^5(2)$ (фаза M_2). Символом (T?) обозначена малоизученная экспериментально триклинная фаза (фаза Т). Дальнейшее увеличение процентного содержания ионов хрома (до 20%) приводит к тому, что на фазовой Т-х-диаграмме появляются еще две моноклинные фазы (M_3 и M_4) и одна тетрагональная, которую обозначают (R"). О структуре и симметрии этих фаз известно очень мало. Однако весьма интересным является тот факт, что все фазы, кроме той, которая имеет структуру рутила, непроводящие [10].

Влияние кристаллической решетки на сверхпроводимость продемонстрировал открытый в 1950 г. изотоп – эффект. При замене одного изотопа на другой вид кристаллической решетки не меняется, электронная жидкость вообще не затрагивается, меняется только масса атомов. Оказалось, что от массы атомов зависит T_c многих сверхпроводников. Чем меньше масса, тем больше T_c . В результате этого пришли к выводу [55], что T_c пропорциональна частоте колебаний атомов решетки. В связи с этим придают большое значение колебаниям атомов (ионов) кристаллической решетки или волнам, распространяющимся в решетке. Видов таких волн может быть довольно много: тем больше, чем сложнее вид кристаллической решетки.

В работе [9] представлены результаты визуализации областей пленок $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ с различными T_c в растровом электронном микроскопе, на основании которого впервые визуализированы области, имеющие различные критические температуры T_c , а также линии размерами 5–20 мкм протекания сверхпроводящего тока с разрешением порядка 2 мкм. Таким образом, впервые показано, что сверхпроводящий ток течет не однородно по сечению сверхпроводника, а вдоль локализованных каналов.

Интересным является также другой факт, что температура сверхпроводящего перехода T_c для чистого металла молибдена, имеющего объемноцентрированную кубическую кристаллическую структуру, составляет 0,92°K, а соединение металла молибдена с азотом (MoN), имеющее гексагональную структуру, характеризуется величиной $T_c = 12,0^\circ K$ [31].

Таким образом, замещение половины металла Мо на неметалл N хотя и приводит к снижению вдвое концентрации свободных электронов, но одновременно изменение кристаллической структуры резко увеличивает температуру сверхпроводящего перехода от 0,92°K до 12°K, т. е. главенствующую роль играет структура кристаллической решетки. Для чистого металла тантала (Ta) $T_c = 4,46^\circ K$ при объемноцентрированной кристаллической решетке и $T_c = 10,6^\circ K$ для Ta_2N при гексагональной структуре. Аналогичные результаты можно приводить и по другим металлам и их соединениям.

Имеется обширный класс соединений, включающих бориды, карбиды, нитриды, окислы переходных металлов, кристаллизующихся в структуре типа NaCl. Среди них немало соединений с высокими температурами сверхпроводящего перехода, которые уже начали использоваться для изготовления различных технических сверхпроводящих устройств [4]. Кристаллическая структура соединений рассматриваемого класса с химической формулой АВ имеет следующие особенности. Атомы металла А образуют кубическую гранецентрированную решетку, а атомы неметалла В занимают все октаэдрические пустоты. В результате получается структура, идентичная структуре NaCl (В-1), т. е. две вставленные друг в друга кубические гранецентрированные решетки (рис. 7.8). Каждый атом металла окружен октаэдром из атомов другого сорта и наоборот, т. е. координация атомов разного сорта является одинаковой.

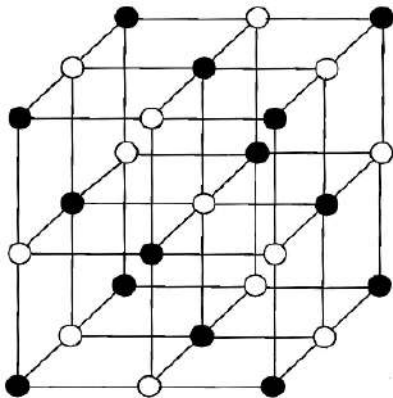


Рис. 7.8. Кристаллическая структура типа В-1 (NaCl)

В качестве атомов А обычно выступают переходные металлы 3; 4; 5 и 6 подгрупп периодической системы элементов, а в качестве В атомов – непереходные элементы этих же подгрупп. Большая часть рассматриваемых соединений является соединениями переменного состава, т. е. в одной и той же кристаллической структуре (в одном случае типа NaCl) могут наблюдаться отклонения от стехиометрического состава в ту и другую сторону. Например, соединения типа TiO_x имеют область гомогенности $x = 0,7-1,25$.

В работе [4] отмечается, что физические свойства соединений со структурой NaCl не могут быть поняты, если не принимать во внимание тот факт, что в них всегда имеется некоторое количество вакансий. Так, сопоставление пикнометрической и рассчитанной (с учетом параметра решетки) плотностей показало, что даже у ряда стехиометрических соединений указанного класса в очень широком диапазоне составов могут одновременно отсутствовать атомы как металла, так и неметалла. Оказалось, что эквивалентному составу отвечает не формула $Ti_{1,0}O_{1,0}$, а $Ti_{0,85}O_{0,85}$ или составу NaO формула $Na_{0,75}O_{0,75}$, что означает фактически наличие 15% и 25% вакансий соответственно в обеих подрешетках. Как правило, вакансии распределены по решетке хаотически, однако структурные исследования показали, что при определенных составах рассматриваемых со-

единений может наблюдаться упорядочение вакансий с образованием сверхструктуры как в металлоидной ($\text{Ti}_{1,0}\text{O}_{0,7}$, $\text{V}_{1,0}\text{C}_{0,84}$, $\text{V}_{1,0}\text{N}_{0,75}$, $\text{Na}_{1,0}\text{C}_{0,75}$, $\text{Ta}_{1,0}\text{C}_{0,76}$), так и в металлической ($\text{V}_{0,763}\text{C}_{1,0}$) подрешетках. В соединениях $\text{Ti}_{0,85}\text{O}_{0,85}$ и $\text{Na}_{0,75}\text{O}_{0,75}$ обнаружено упорядочение вакансий в обеих подрешетках [4].

Из 40 исследованных соединений переходных металлов со структурой NaCl сверхпроводящими оказалось 26 [4]. В шести из них T_c превышает 10°K .

Сверхпроводящие свойства соединений со структурой NaCl оказались очень чувствительными к отклонениям от стехиометрического состава. Так, например, в карбидах Na и Ta, и нитридах Ti и V отчетливо отмечается падение температуры перехода в сверхпроводящее состояние при уменьшении отношения углерод/металл или азот/металл, которое сопровождается увеличением числа вакансий в неметаллической решетке. С другой стороны, установлено, что образование вакансий в металлической подрешетке также уменьшает T_c в соединениях этого типа [4].

Наличие этих закономерностей указывает на четкости в расположении атомов в узлах кристаллических решеток, что затрудняет движение электронов в межатомном пространстве. Кроме того, в ряде работ [2, 3] отмечается, что в гранулированных материалах высокотемпературных сверхпроводников наблюдается некоторое смещение T_c в сторону более высоких температур. Следовательно, на состояние сверхпроводимости существенное влияние оказывает структура кристаллической решетки металла, степень гранулированности исходного материала, наличие сквозных локализованных каналов, дислокаций и вакансий. Весьма любопытным является анализ структур кристаллической решетки элементов, относящихся к металлам и полупроводникам. Различают три основных типа кристаллических решеток металлов (рис. 7.9):

- **объемоцентрированная кубическая решетка** плотной упаковки – характерна для натрия, калия, α -железа, α -хрома, ванадия, молибдена, вольфрама и др.;

- **гранецентрированная кубическая решетка** плотной упаковки – присуща кристаллам кальция, γ -железа, алюминия, меди, никеля, серебра, золота, некоторых других металлов;

- **гексагональная решетка** плотной упаковки – встречается у бериллия, магния, кадмия, титана, цинка, циркония, осмия и др.

Кроме того, небольшая часть металлов (As, Sb, Bi, Hg) кристаллизуется в ромбоэдрической сингонии.

В работе [19] по данным Нейбургера и Шмидта и в [21] собраны в развернутой периодической таблице Менделеева кристаллические формы элементов (табл. 7.4). Примечательно то, что основные элементы, относящиеся к полупроводникам, а именно кремний (Si) и германий (Ge), кристаллизуются в кубической алмазной решетке. Такую же решетку имеют кристаллы олова в α -фазе (Sn- α) и, естественно, углерод в виде алмаза. Углерод в виде графита характеризуется гексагональной структурой кристаллической решетки. В связи с этим представляет особый интерес рассмотреть более подробно различие свойств алмаза и графита.

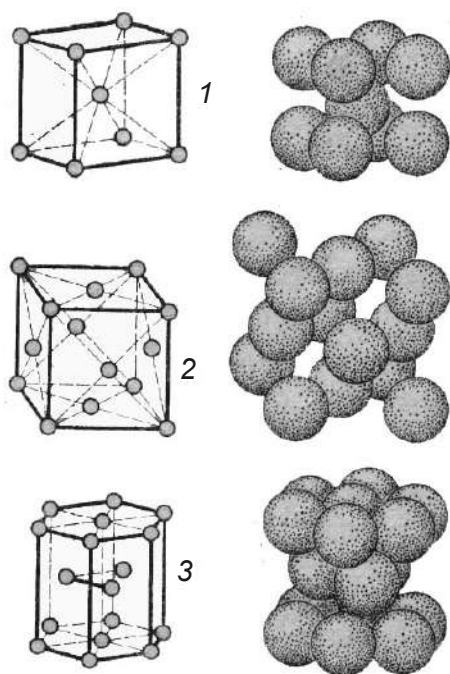


Рис. 7.9. Типы пространственных кристаллических решеток металлов:

- 1 – объемноцентрированная кубическая,
- 2 – гранецентрированная кубическая,
- 3 – гексагональная решетка плотной упаковки.

В соответствии с [33], алмаз – природный и синтетический кристалл углерода. В природе встречается в виде отдельных монокристаллов или скоплений кристаллических зерен и агрегатов. Точечная группа симметрии $m\bar{3}m$, что соответствует гексоктаэдрическому классу кубической сингонии (рис. 7.10). Атомы углерода (C) в структуре алмаза связаны прочной ковалентной связью с четырьмя соседними атомами, расположенными в вершинах тетраэдра. Этим, а также малыми межатомными расстояниями (0,154 нм) объясняются свойства алмаза, в частности его уникальная твердость (10 по шкале Мооса) и химическая стойкость. Плотность 3,07-3,56 г/см³. При $t > 1000^\circ\text{C}$ происходит превращение алмаза в графит. Алмаз имеет большую теплопроводность (в 5 раз большую, чем у Cu); при комнатной температуре диамагнитен. Удельное электрическое сопротивление алмазов 1-го типа $\rho = 10^{12}\text{-}10^{14}$ Ом·м (диэлектрик). Алмазы 1-го типа избирательно поглощают электромагнитное излучение в ИК области ($\lambda = 8\text{-}10$ мкм) и УФ области ($\lambda = 0,3$ мкм).

Алмазы 2-го типа прозрачны при $\lambda = 0,22\text{-}1000$ мкм. Такое различие спектроскопических свойств объясняют содержанием примесей (главным образом азота). Алмазы 2-го типа имеют $\rho = 0,5\text{-}10$ Ом·м. Они являются примесными полупроводниками p -типа (встречаются кристаллы алмазов с $\rho \approx 10^{-2}$ Ом·м). Алмазы – полупроводники обладают большой шириной запрещенной зоны и уникальной теплопроводностью. У некоторых неполупроводниковых кристал-

лов 2-го типа электропроводность резко возрастает при облучении их заряженными частицами и γ -квантами.

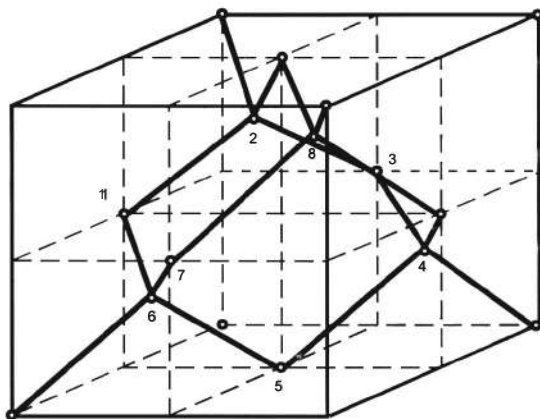


Рис. 7.10. Объемная модель кристаллической структуры алмаза

Синтетические алмазы получают из графита и углеродсодержащих веществ. Давление равновесия термодинамического p_p между алмазом и графитом при 0°K равно 10^8 Па и возрастает с ростом температуры. При $p < p_p$ стабилен графит, при $p > p_p$ – алмаз. Однако превращение алмаза в графит при $p_p < p$ происходит с заметной скоростью только при достаточно высокой температуре. Поэтому при атмосферном давлении и температуре до 1000°C алмаз «живет» неограниченно долго (метастабильное состояние). Минимальные параметры превращения графита в алмаз: температура $t \cong 1100^\circ\text{C}$ и давление $p \cong 4$ ГПа. Для облегчения синтеза используются различные агенты (Fe, Ni и их сплавы), способствующие разрушению или деформации кристаллической решетки графита или снижающие энергию, необходимую для ее перестройки. После создания необходимого давления смесь нагревают до температуры синтеза, а затем охлаждают до комнатной температуры и снимают давление.

Графит, по данным [33], – природный и синтетический кристалл углерода, устойчивый при нормальных условиях. Точечная группа симметрии $6/mmm$, что соответствует дигексагонально-дипирамидальному классу гексагональной сингонии (рис. 7.11). Плотность $2,23$ г/см³, $T_{пл} = 3850 \pm 50^\circ\text{C}$. Кислотоупорен (окисляется только при высоких температурах), жаропрочен, легко обрабатывается, хорошо проводит электрический ток. Обладает малым сечением захвата тепловых нейтронов, малым коэффициентом трения, резкой анизотропией свойств; твердость вдоль оси 6 по шкале Мооса – 1, перпендикулярно этой оси – 5,5 и выше; коэффициент теплового расширения α вдоль оси 6 равен $28,2 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$, перпендикулярно этой оси – $1,5 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$. При облучении нейтронами увеличивается твердость, электросопротивление, модуль упругости, а теплопроводность уменьшается (в 20 раз).

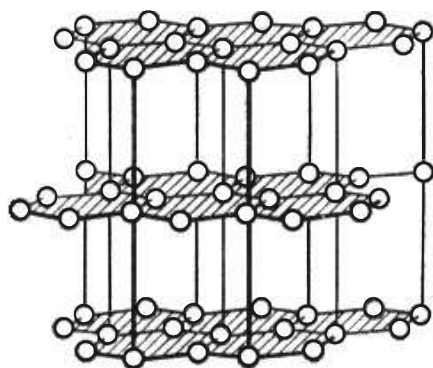


Рис. 7.11. Кристаллическая структура графита

Весьма показательными являются результаты анализа анизотропии удельного электрического сопротивления графита и металлических кристаллов, представленные в таблице 7.5, заимствованной из [15]. Как видно, отношения параметра $\rho_{\perp}/\rho_{\parallel}$ для ряда металлов изменяются в пределах от 0,31 до 1,46. Однако наименьшей величиной этого параметра характеризуется не металл, а графит, помещенный в единую с металлами таблицу и относящийся, по мнению авторов [15], к металлическим кристаллам. Как видно из таблицы 7.5, электрическое сопротивление как природных, так и искусственных кристаллов графита по разным направлениям отличаются на четыре порядка. То есть по величине ρ_{\perp} графит попадает в группу металлов, а по величине параметра ρ_{\parallel} в группу полупроводников. Такую большую разницу в электропроводности в разных направлениях кристалла можно объяснить только особенностями кристаллической структуры графита, а величина ρ_{\perp} графита, численно характерная для металлов, свидетельствует, что не наличие свободного электронного газа в металлах является причиной их низкого электрического сопротивления, а особенности расположения атомов в узлах кристаллической решетки позволяет электронам достаточно свободно перемещаться между ними и, следовательно, нет никакой особой ионной структуры металла.

Таблица 7.5

Удельное электрическое сопротивление для анизотропных металлических кристаллов [15]

Металл	$t, ^\circ\text{C}$	Кристаллическая структура	$\rho_{\parallel}, 10^{-6} \text{ Ом}\cdot\text{см}$	$\rho_{\perp}, 10^{-6} \text{ Ом}\cdot\text{см}$	$\frac{\rho_{\perp}}{\rho_{\parallel}}$
Бериллий	0	гексагон.	3,58	3,12	0,88
Висмут	0	ромбич.	127	99	0,78
Вольфрам	-183	кубич.	0,892	0,843	0,945
Галлий	20	ромбич.	55,5	17,3	0,31
Гафний	0	гексаг.	32,7	32,0	0,98
Графит 1*	20	гексаг.	5400	41	$7,6 \cdot 10^{-3}$
Графит 1*	-195	гексаг.	2300	20	$8,7 \cdot 10^{-3}$

Металл	$t, ^\circ\text{C}$	Кристаллическая структура	$\rho_{\parallel}, 10^{-6} \text{ Ом}\cdot\text{см}$	$\rho_{\perp}, 10^{-6} \text{ Ом}\cdot\text{см}$	$\frac{\rho_{\perp}}{\rho_{\parallel}}$
Графит 2*	20	гексаг.	$1,7 \cdot 10^5$	44,3	$2,6 \cdot 10^{-4}$
Графит 2*	-195	гексаг.	$3 \cdot 10^5$	25,9	$8,6 \cdot 10^{-5}$
Кадмий	0	гексаг.	7,73	6,35	0,87
Магний	0	гексаг.	3,58	4,22	1,21
Мышьяк	0	гексаг.	26	23,8	0,92
Олово	0	тетраг.	9,09	13,08	1,46
Ртуть	-45,5	ромбич.	17,8	23,5	1,32
Сурьма	0	ромбич.	26,3	36,0	1,37
Цинк	0	гексаг.	5,59	5,39	0,96

* Графит1 и графит2 – природный и искусственный пиролитический.

Таким образом, из анализа особенностей структуры алмаза и графита, двух минералов, состоящих из одного и того же химического элемента – углерода, следует, что на удельное электрическое сопротивление вещества существенное влияние оказывает структура кристаллической решетки. В связи с этим целесообразно более подробно рассмотреть особенности кристаллического строения различных веществ.

Кристаллы – твердые тела, обладающие трехмерной периодической атомной структурой и при равновесных условиях образования имеющие естественную форму правильных симметричных многогранников. Каждому химическому веществу, находящемуся при данных термодинамических условиях (температуре, давлении) в кристаллическом состоянии, соответствует определенная атомно-кристаллическая структура. Кристалл, выросший в неравновесных условиях и не имеющий правильной огранки (или потерявший ее в результате обработки), сохраняет основной признак кристаллического состояния – решетчатую атомную структуру (кристаллическую решетку) и все определяемые ею свойства. Большинство твердых материалов являются поликристаллическими; они состоят из множества отдельных беспорядочно ориентированных мелких кристаллических зерен (кристаллитов). Таковы, например, многие горные породы, технические металлы и сплавы.

Кристаллы образуются и растут чаще всего из жидкой фазы – раствора или расплава. Выросшие в равновесных условиях кристаллы имеют форму правильных многогранников той или иной симметрии, грани кристаллов – плоские, ребра между гранями – прямолинейные, углы между соответствующими гранями кристалла одного и того же вещества постоянны. Измерение межгранных углов позволяет идентифицировать кристаллы. Атомная структура кристаллов описывается как совокупность повторяющихся в пространстве одинаковых элементарных ячеек, имеющих форму параллелепипеда с ребрами a , b , c (периодами кристаллической решетки). Всякая атомная плоскость кристаллической решетки, которой может соответствовать грань кристалла, отсекает на осях координат целые числа периодов решетки (закон Гаюи). Обратные им

числа (h, k, l) называются индексами кристаллографическими граней и атомных плоскостей. Как правило, кристаллы имеют грани с малыми значениями индексов, например (100), (110), (311). Длина ребер a, b, c и углы α , β , γ между ними измеряются рентгенографически.

По характеру симметрии любой кристаллический многогранник принадлежит к одному из 32 классов (или точечных групп симметрии), которые группируются в семь сингоний: триклинную, моноклинную, ромбическую (низшие сингонии), тетрагональную, гексагональную, тригональную (средние) и кубическую (высшая) (табл.7.6). Совокупность кристаллографически одинаковых граней (т. е. совмещающихся друг с другом при операциях симметрии данной группы) образует так называемую простую форму кристалла. Всего существует 47 простых форм кристаллов, но в каждом классе могут реализоваться лишь некоторые из них.

Таблица 7.6

Сингонии кристаллических многогранников

Сингония	Обозначения	Название класса
Триклинная $a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	$\bar{1}$	моноклинный пинакоидальный
Моноклинная $a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ$ $\beta \neq 90^\circ$	2 m 2/m	диэдрический осевой диэдрический бесосный призматический
Ромбическая $a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	222 m m m m m	ромбо-тетраэдрический ромбо-пирамидальный ромбо-дипирамидальный
Тетрагональная $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	4 422 4/m 4/mm 4/mmm $\bar{4}$ $\bar{4}2m$	тетрагонально-пирамидальный тетрагонально-трапецоэдрический тетрагонально-дипирамидальный дитетрагонально-пирамидальный дитетрагонально-дипирамидальный тетрагонально-тетраэдрический тетрагонально-скеленоэдрический
Тригональная $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	3 32 3m $\bar{3}$ $\bar{3}m$	тригонально-пирамидальный тригонально-трапецоэдрический дитригонально-пирамидальный ромбоэдрический дитригонально-скеленоэдрический
Гексагональная $a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$	$\bar{6}$ $\bar{6}m2$ 6 622 6/m 6/mm 6/mmm	тригонально-дипирамидальный дитригонально-дипирамидальный гексагонально-пирамидальный гексагонально-трапецоэдрический гексагонально-дипирамидальный дигексагонально-пирамидальный дигексагонально-дипирамидальный

Сингония	Обозначения	Название класса
Кубическая $a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	23 $m\bar{3}$ $\bar{4}3m$ 432 $m\bar{3}m$	тритетраэдрический дидодекаэдрический гексатетраэдрический триоктаэдрический гексоктаэдрический

Кристалл может быть огранен гранями одной простой формы, но чаще комбинацией этих форм. Неравновесные условия кристаллизации приводят к различным отклонениям формы кристалла от правильного многогранника – к округлости граней и ребер, возникновению пластинчатых, игольчатых, нитевидных, ветвистых кристаллов типа снежинок. При изменении температуры или давления структура кристаллов может изменяться. Некоторые кристаллические структуры (фазы) являются метастабильными. Существование у данного вещества нескольких кристаллических фаз называется полиморфизмом. Наоборот, разные соединения могут иметь одинаковую кристаллическую структуру.

Распределение кристаллов по пространственным группам симметрии – соответственно по точечным группам (классам) и сингониям – неравномерно. Как правило, чем проще химическая формула вещества, тем выше симметрия его кристалла. Так, почти все металлы имеют кубическую или гексагональную структуру, основанную на так называемой плотной упаковке атомов, то же относится к простым химическим соединениям, например к галогенидам щелочных металлов. Усложнение химической формулы вещества ведет к понижению симметрии его кристалла [33]. Органические (молекулярные) кристаллы почти всегда относятся к низшим сингониям. Более низкую атомную упорядоченность, чем у кристаллов, имеют жидкие кристаллы и аморфные тела.

При плавлении электрическое сопротивление большинства металлов увеличивается, при этом, вероятно, можно предположить, что нарушается строгая упорядоченность расположения атомов при их удалении друг от друга, так как отмечается увеличение объема. У металлов, объем которых уменьшается при плавлении (висмут, сурьма, галлий) электрическое сопротивление уменьшается [31] (таблица 7.7).

Таблица 7.7

Изменение сопротивления и объема некоторых металлов при плавлении [31]

Металл	$t_{пл}, ^\circ\text{C}$	$\rho_{ж}, 10^{-6} \text{ Ом}\cdot\text{см}$	$\rho_{ж}/\rho_{тв}$	$\Delta V/V_{ж}$
Алюминий	660	20,1	1,64	+0,048
Висмут	271	123	0,43	-0,033
Галлий	29,9	25,9	0,58	-0,03
Железо	1535	139	1,09	+0,03
Золото	1063	30,8	2,28	+0,051
Индий	156	–	2,12	–
Кадмий	321	–	1,89	+0,05
Калий	62,5	–	1,56	+0,026

Металл	$t_{пл}, ^\circ\text{C}$	$\rho_{ж}, 10^{-6} \text{ Ом}\cdot\text{см}$	$\rho_{ж}/\rho_{тв}$	$\Delta V/V_{ж}$
Литий	180	—	1,68	+0,017
Магний	651	27,9	1,63	+0,041
Медь	1083	21,5	2,07	+0,042
Натрий	97,6	—	1,45	+0,027
Олово	327,4	99,3	2,07	+0,035
Ртуть	-38,9	90	3,36	+0,037
Рубидий	38,7	—	1,61	+0,028
Серебро	961	16,4	1,9	+0,038
Сурьма	630	108	0,71	-0,09
Таллий	302	—	2,0	+0,03
Цинк	420	32,6	2,11	+0,042
Цезий	29,7	—	1,66	+0,026

Уменьшение объема вещества при плавлении невозможно объяснить только проявлением фазового перехода твердое – жидкое состояние, вероятно, при переходе от твердокристаллического состояния вещества к жидкокристаллическому происходит изменение сингонии кристаллов, т. е. расположение атомов за счет их сближения в кристаллической решетке жидких кристаллов.

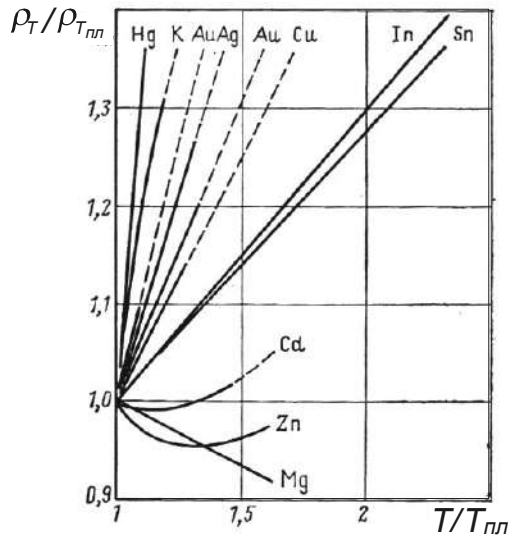


Рис. 7.12. Зависимость относительного удельного сопротивления различных жидких металлов $\rho_t/\rho_{T_{пл}}$ от $T/T_{пл}$ [31]

Не менее интересными являются зависимости относительного удельного сопротивления различных жидких металлов $\rho_m/\rho_{m,пл}$ от $T/T_{пл}$ (рис. 7.12) [31]. Как видно, для металлов Hg, K, Au, Ag, Cu, In, Sn характерно увеличение $\rho_m/\rho_{m,пл}$ от $T/T_{пл}$, а для металлов Cd, Zn и Mg, наоборот, понижение. Анализ структуры металлов в твердом состоянии показывает [19], что последние три элемента в кри-

сталлическом состоянии кристаллизуются в гексагональной плотнейшей упаковке шаров и ни один из первого перечня металлов не имеет таких структур.

Как видим, даже в жидком состоянии металлов структура их жидкокристаллической решетки оказывает существенное влияние на величину электрического сопротивления. Вследствие нарушения равновесных условий роста и захвата примесей при кристаллизации, а также при влиянии различного рода внешних воздействий идеальная структура кристалла всегда имеет те или иные нарушения.

К ним относятся точечные дефекты и вакансии, замещения атомов основной решетки атомами примесей, внедрение в решетку инородных атомов, дислокации и др. Дозирующее введение небольшого числа атомов примеси, замещающих атомы основной решетки, широко используется в технике для изменения свойств кристаллов, например, введение в кристаллы Ge и Si атомов III и V групп периодической системы элементов позволяет получать кристаллические полупроводники с так называемой дырочной и электронной электропроводностями.

При росте кристаллов их грани по-разному захватывают атомы примесей. Это приводит к секториальному строению кристалла. Может происходить и периодическое изменение концентрации захватываемой примеси, что дает зонарную структуру. Кроме того, в процессе роста кристалла почти неизбежно образуются микроскопические дефекты – включения, напряженные области и т. п.

Все реальные кристаллы имеют мозаичное строение: они разбиты на блоки мозаики – небольшие (10^{-4} см) области, в которых порядок почти идеален, но которые разориентированы по отношению друг к другу на малые углы (приблизительно несколько минут).

Принято считать [33], что все свойства кристалла связаны между собой и обусловлены атомно-кристаллической структурой, силами связи между атомами и энергетическим спектром электронов. Некоторые свойства, например тепловые, упругие, акустические, зависят непосредственно от межатомных взаимодействий.

В то же время считается [33], что электрические, магнитные и оптические свойства существенно зависят от распределения электронов по уровням энергии. В некоторых кристаллах ионы, образующие решетку, располагаются так, что кристалл оказывается самопроизвольно поляризованным (пирозлектрики). Большая величина такой поляризации характерна для сегнетоэлектриков. Многие свойства кристаллов решающим образом зависят не только от симметрии, но и от количества и типов дефектов (прочность и пластичность, окраска, люминесцентные свойства и др.). В бездислокационных кристаллах прочность в 10–100 раз больше, чем в обычных.

Таким образом, анализ различных факторов, влияющих на электропроводность веществ показывает, что существенное влияние на величину удельного электрического сопротивления оказывает структура кристаллической решетки, наличие непрерывных каналов, по которым возможно перемещение электронов.

Особый интерес среди сверхпроводников представляют высокотемпературные сверхпроводники на основе керамики. Если проанализировать технологию изготовления образцов высокотемпературной керамики на основе различных компонентов, включающую растирание твердых исходных компонентов, их смешение и обжиг, то полученные образцы представляют что-то среднее между горными породами, образовавшимися в результате охлаждения излившийся горячей магмы и уплотненного пепла, извергаемого из жерла вулкана.

Высокотемпературные сверхпроводники характеризуются достаточно высокой общей пористостью, наличием пустот повышенного размера или линейной цепочки пустот разного размера. В связи с этим для изучения факторов, влияющих на электропроводность таких образцов, можно воспользоваться большим опытом, накопленным при изучении коллекторских свойств горных пород промыслово-геофизическими методами [1, 11, 12, 17].

Электрическое удельное сопротивление – физическое свойство горных пород, на изучении которого основаны способы исследования геологических разрезов скважин методами кажущегося и эффективного сопротивлений, сопротивления заземления, регистрации тока и индукции. Числовое значение электрического удельного сопротивления породы определяется удельными сопротивлениями и объемными содержаниями минералов, составляющих породу, и ее структурой.

Электропроводность минералов, входящих в состав твердой фазы горных пород, разнообразна как по природе, так и по величине. По характеру электропроводности минералы относятся к группам проводников, полупроводников и диэлектриков. Преобладающее большинство минералов, образующих скелет горных пород, – полупроводники и диэлектрики. Они обладают как электронной, так и ионной электропроводностями. Электронная электропроводность доминирует у минералов-полупроводников (сульфиды и их аналоги, некоторые окислы и др.). Чисто ионную электропроводность имеют водные растворы солей, насыщающие поровые пространства горных пород. Их удельное сопротивление:

$$\rho = \frac{10}{(c_a \cdot l_a \cdot f_{ca} + c_k \cdot l_k \cdot f_{ck})} [\text{Ом} \cdot \text{м}], \quad (7.43)$$

где c_a и c_k – концентрации анионов и катионов в растворе; l_a и l_k – их подвижности; f_{ca} и f_{ck} – коэффициенты электропроводности.

По величине удельного электрического сопротивления минералы разделяют [11] на следующие классы:

1. минералы сверхнизкого удельного сопротивления (ниже 10^{-6} Ом·м) – самородные металлы – золото, платина, серебро и другие, и природные твердые растворы металлов;
2. минералы очень низкого сопротивления (от 10^{-6} до 10^{-2} Ом·м) – борнит, графит, кобальтин, ковеллин, никелин, пирит, пирротин, халькопирит, халькозин и др.;
3. минералы низкого сопротивления (от 10^{-2} до 10^2 Ом·м) – браунит, магнетит, ильменит, марказит и др.;

4. минералы среднего сопротивления (от 10^2 до 10^6 Ом·м) – боксит, галлуазит, гематит, железная слюдка, монтмориллонит, серпентин, хромит и др.;
5. минералы высокого сопротивления (от 10^6 до 10^{10} Ом·м) – ангидрит, киноварь, монацит, шеелит и др.;
6. минералы очень высокого сопротивления (от 10^{10} до 10^{14} Ом·м) – кальцит, кварц, полевые шпаты, сера, флюорит и др.;
7. минералы сверхвысокого сопротивления (свыше 10^{14} Ом·м) – галит, сильвин, слюды, нефть.

Удельное сопротивление минералов и горных пород зависит от их температуры t и частоты f тока, с которым измеряется сопротивление. При этом

$$\rho_t = P_t \cdot \rho_0, \quad (7.44)$$

где ρ_t и ρ_0 – удельное сопротивление проводника при температуре t и t_0 ; P_t – параметр температуры, определяемый характером электропроводности. Для электронных проводников принимается [11]:

$$P_{t,э} = 1 + a(t - t_0) + b(t - t_0)^2, \quad (7.45)$$

где a и b – постоянные.

Зависимость $P_{t,э}$ от температуры t приведена на рис. 7.13 (кривая 1). При $t < 100^\circ\text{C}$ эта зависимость близка к линейной.

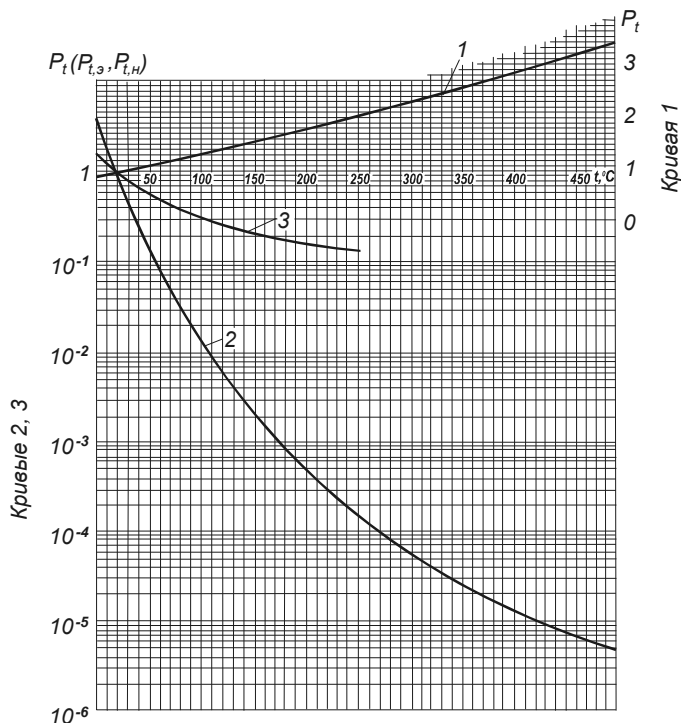


Рис. 7.13. Зависимость $P_t = f(t)$: 1 – электронные проводники (металлы); 2 – электронные полупроводники; 3 – ионные проводники (электролиты)

Для минералов – электронных полупроводников

$$P_{t,э} = e^{-\frac{\Delta E}{2kT_0} \left(\frac{t}{T_0 + t} \right)}, \quad (7.46)$$

здесь ΔE – ширина запрещенного участка между энергетическими зонами в эВ; k – постоянная Больцмана ($k = 1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/град); T_0 – абсолютная температура нуля стогоградусной шкалы.

Параметр $P_{t,э}$, а следовательно, и удельное сопротивление минералов- электронных полупроводников резко убывает с увеличением температуры, как это видно из рис. 7.13 (кривая 2).

Уменьшение удельного сопротивления с температурой также характерно для минералов и растворов с ионной электропроводностью, для которых

$$\rho_t = \frac{\rho_0}{1 + \alpha_t(t - t_0)} = P_{t,и} \cdot \rho_0, \quad (7.47)$$

где α_t – температурный коэффициент электропроводности. Зависимость

$$P_{t,и} = \frac{1}{1 + \alpha_t(t - t_0)} = f(t) \text{ приведена на рис. 7.13 (кривая 3).}$$

Удельное сопротивление горных пород и полезных ископаемых, имеющих различные минеральный (химический) состав и структуру, изменяется от тысячных долей Ом·м до многих десятков, сотен тысяч и даже миллионов Ом·м (таблица 7.8).

Таблица 7.8

Удельное электрическое сопротивление горных пород

Породы и полезные ископаемые	Плотность $\delta \cdot 10^{-3}$, кг/м ³	Электрическое удельное сопротивление ρ , Ом·м
Ангидриды	2,4–2,9	10^4 – 10^6
Базальты	1,7–3,0	10^2 – 10^5
Глина	1,2–2,5	0,8–30
Гнейсы	2,6–3,1	10^2 – 10^4
Граниты	2,5–2,8	$5 \cdot 10^2$ – 10^5
Доломиты	1,5–3,1	1 – $5 \cdot 10^3$
Железные руды	2,5–4,5	$0,5$ – 10^4
Известняки	1,4–2,9	2 – $5 \cdot 10^3$
Конгломераты	1,5–2,8	10 – $2 \cdot 10^3$
Мергели	1,5–2,8	3–500
Нефть	0,7–1,0	10^9 – 10^{16}
Пески, рыхлые песчаники	1,2–2,2	$0,3$ – 10^2
Песчаники плотные	1,4–3,0	20 – $5 \cdot 10^3$
Сланцы глинистые	1,5–2,7	20 – $5 \cdot 10^2$
Соль каменная	2,1–2,2	10^4 – 10^8
Сульфидные руды	3,0–5,0	10^{-3} – 10^2
Уголь каменный	1,25–1,75	10^{-3} – 10^4

Характер электропроводности горных пород обычно смешанный с преобладанием ионной электропроводности в осадочных и залегающих близ поверхно-

сти магматических пород и электронной проводимости полупроводников для плотных пород, находящихся на больших глубинах. Как следствие этого, зависимость удельного сопротивления горных пород от температуры и осадочных влажных пород определяется равенством (7.47) с тем различием, что в случае тонкодисперсных пород значение P_t может быть несколько меньшим. Большинство горных пород по удельному сопротивлению сводится к двухкомпонентным системам следующих типов:

1. порода, состоящая из породообразующих минералов высокого удельного сопротивления и проводящих рудных включений;
2. порода, состоящая из породообразующих минералов высокого удельного сопротивления и проводящих жидкостей, насыщающих ее поровое пространство.

В первом случае удельное сопротивление породы:

$$\rho_n = \Pi_m \cdot P_t \cdot \rho_{nm}, \quad (7.48)$$

где ρ_{nm} – удельное сопротивление породообразующих минералов высокого удельного сопротивления; P_t – параметр температуры; $\Pi_m = f(K_m, \rho_m)$ – параметр проводимости (рис. 7.14), обусловленный включением минералов низкого сопротивления.

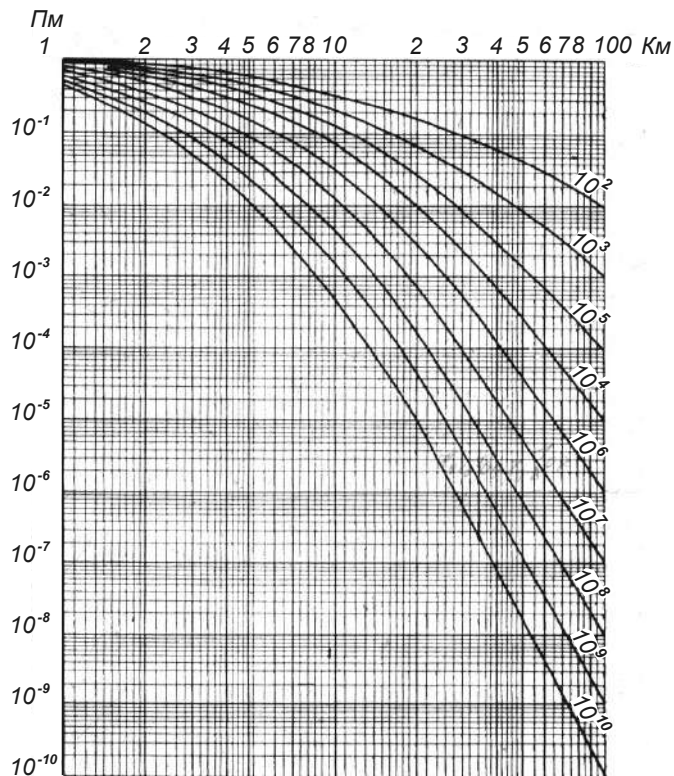


Рис. 7.14. Зависимость параметра Π_m от содержания проводящих минералов в породе K_m . Шифр кривых – ρ_{nm}/ρ_m .

Во втором случае:

$$\rho_n = P_n \cdot P_n \cdot P_t \cdot \Pi_n \cdot \rho_e, \quad (7.49)$$

где $P_n = \frac{\rho_{en}}{\rho_e}$ – параметр пористости; $P_n = \frac{\rho_{nn}}{\rho_{en}}$ – параметр насыщения; ρ_{en} – удельное сопротивление водонасыщенной неглинистой породы; ρ_{nn} – удельное сопротивление породы, частично насыщенной водой; P_t – параметр температуры; Π_n – параметр поверхностной проводимости; ρ_e – удельное сопротивление пластовой воды.

Параметры пористости $P_n = f(K_n)$ и насыщения $P_n = f(K_n)$ изучены достаточно глубоко теоретически и экспериментально [1, 8, 11, 12, 13, 17, 18, 21, 25, 27, 28, 35].

Зависимость $P_n = f(K_n)$ удовлетворяет уравнению

$$P_n = \frac{\rho_{en}}{\rho_e} = \frac{1}{K_n^{m_0 - (m_0 - 1)K_n}}, \quad (7.50)$$

графически представленному на рис. 7.15.

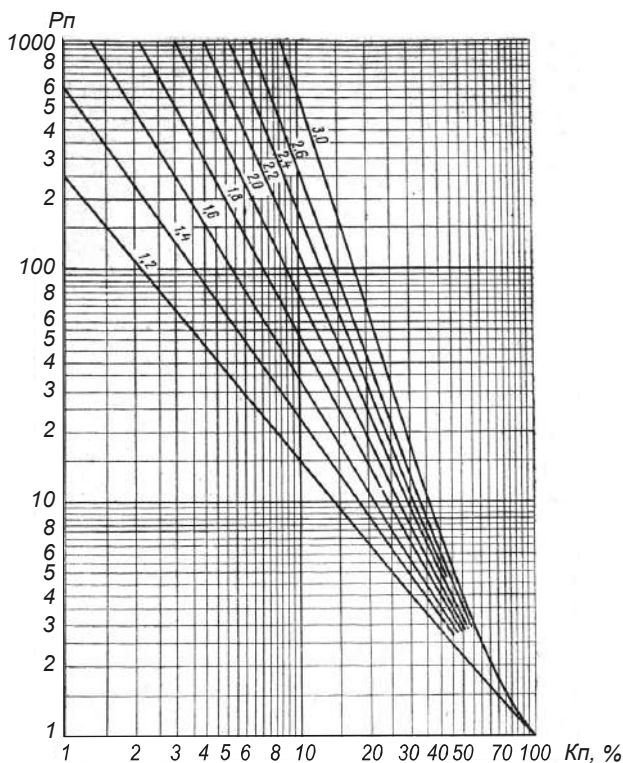


Рис. 7.15. Зависимость параметра пористости P_n от коэффициента пористости K_n для различных значений структурного показателя m_0

Здесь m_0 – предельное значение структурного показателя m при коэффициенте пористости $K_n \rightarrow 0$. В средних диапазонах изменения K_n зависимость (7.50) приводится к более распространенному на практике равенству

$$P_n = \frac{a_n}{K_n^m} \quad (7.51)$$

где a_n – постоянный коэффициент для конкретного типа осадков, обычно варьирующий в пределах от 0,4 до 1,6 (последняя цифра характерна для глинистых коллекторов). Чем более сцементированная порода, тем выше значения m и m_0 .

Параметр насыщения P_n для средних и низких значений K_e ($K_e < 40 \div 50\%$) удовлетворяет следующей зависимости:

$$P_n = \frac{\rho_{nn}}{\rho_{en}} = \frac{a_n}{K_e^n}, \quad (7.52)$$

где a_n – постоянный коэффициент, близкий к единице; n – показатель смачиваемости породы, обычно заключающийся в пределах от 1,8 до 3,5 (рис. 7.16).

Чем более гидрофобен коллектор, тем выше n .

Увеличение параметра пористости P_n с возрастанием неоднородности и степени цементации породы физически объясняется увеличением длины токопроводящих путей. Количественно это оценивается величиной извилистости T_z , равной отношению средней статистической длины l_z токопроводящих путей в образце породы к его длине l .

Так, например, для цилиндрического образца породы с площадью основания S и высотой l полное сопротивление:

$$R_{en} = \rho_e \cdot \frac{l_z}{S_z} = \rho_{en} \cdot \frac{l}{S}, \quad (7.53)$$

поэтому

$$P_n = \frac{\rho_{en}}{\rho_e} = \frac{\frac{l_z}{S_z}}{\frac{l}{S}} = \frac{T_z}{S_z} = \frac{T_z}{\Psi_z}, \quad (7.54)$$

где $\Psi_z = \frac{S_z}{S}$ – «просветность» породы для электрического тока; S_z – среднестатистическое суммарное сечение поровых каналов для электрического тока.

Но, как показано В. Н. Дахновым [11], коэффициент пористости:

$$K_n = \frac{l_k \cdot S_k}{l \cdot S} = \frac{S_k}{S} T_k, \quad (7.55)$$

где l_k , S_k и T_k – среднестатистические длина, сечение и извилистость поровых каналов.

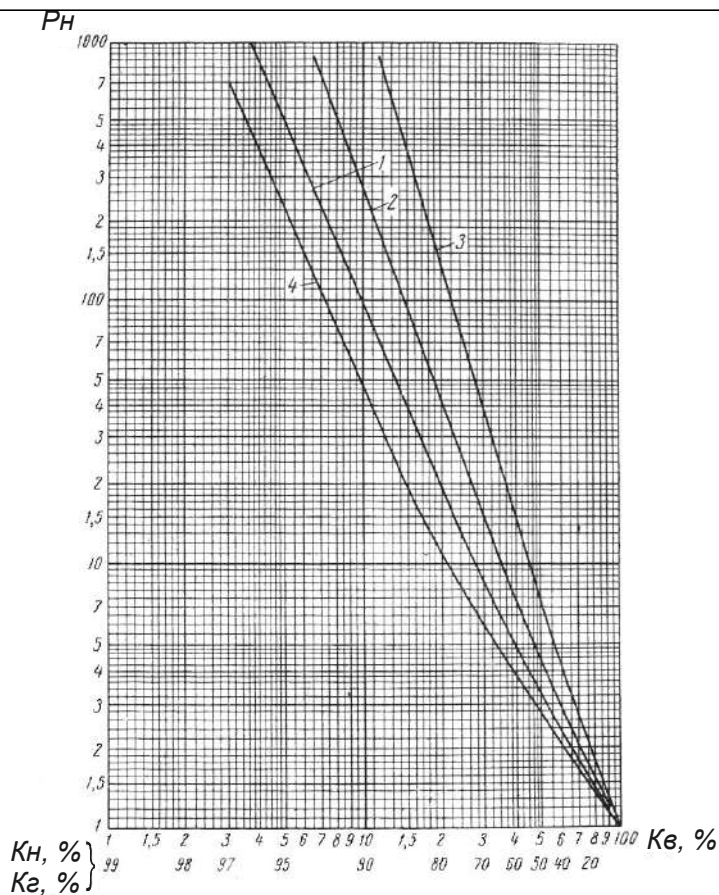


Рис. 7.16. Зависимость параметра насыщения P_n от коэффициента водонасыщения K_w (нефтенасыщения K_n , газонасыщения K_g) породы. 1, 2 и 3 – песчано-глинистые, соответственно гидрофильные, слабогидрофобные и гидрофобные породы, 4 – карбонатные породы (по Г. Е. Арчи)

Поэтому в породах, не содержащих твердых проводящих включений, где среднестатистическая длина поровых каналов $l_k \approx l_g$ и, следовательно, извилистость поровых каналов $T_k \approx T_g$, параметр пористости:

$$P_n = \frac{T_g}{S_g} \approx \frac{T_g \cdot T_k}{K_n} \approx \frac{T_g^2}{K_n} \approx \frac{T_k^2}{K_n}. \quad (7.56)$$

Таким образом, извилистость T_g поровых каналов зависит от K_n как:

$$T_g = \sqrt{P_n \cdot K_n} = \left(\frac{1}{K_n^{(m_0-1)(1-K_n)}} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (7.57)$$

В среднем диапазоне изменения коэффициента пористости:

$$T_g = \sqrt{P_n \cdot K_n} = \left(\frac{a_n}{K_n^{m-1}} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (7.58)$$

Для этого диапазона, согласно формулам (7.51), (7.54) и (7.56), структурный показатель

$$m = \frac{\lg a_n + \lg \Psi_s - \lg T_s}{\lg \Psi_s + \lg T_s} = \frac{2 + 2 \lg T_s - \lg K_n \% - \lg a_n}{2 - \lg K_n \%} = 1 + \frac{2 \lg T_s - \lg a_n}{2 - \lg K_n \%}, \quad (7.59)$$

где $K_n\%$ – коэффициент пористости, выраженный в %.

Последняя формула раскрывает физическую сущность структурного показателя, величина которого в основном определяется извилистостью T_s .

Для газо- и нефтенасыщенной породы коэффициент K_6 водонасыщения порового пространства связан с коэффициентом нефтенасыщения K_n и газонасыщения K_z при атмосферном давлении простыми соотношениями: $K_6 = 1 - K_n$ (нефтеносная порода) и $K_6 = 1 - K_z$ (газонасная порода). Поэтому по величине параметра P_n , зная вид зависимости $P_n = f(K_6)[(K_n, K_z)]$, возможно определить K_n и K_z .

Зависимость поверхностной проводимости Π_n от ее определяющих факторов изучена недостаточно. Поверхностная проводимость убывает с увеличением относительной глинистости η_{gl} и величины отношения удельного сопротивления вод ρ_6 к удельному сопротивлению глин ρ_{gl} . Зависимость ρ_n от Π_n определяет связь удельного сопротивления горных пород с их дисперсностью.

Характерной особенностью большинства горных пород и особенно осадочного комплекса является электрическая анизотропия. Это свойство пород характеризуется величиной коэффициента анизотропии.

$$\lambda = \sqrt{\frac{\rho_n}{\rho_t}} > 1, \quad (7.60)$$

где ρ_n и ρ_t – соответственно удельное сопротивление породы, измеренное перпендикулярно и вдоль напластования.

Для двухкомпонентной слоистой среды, состоящей из слоев удельного сопротивления ρ_a и прослоев удельного сопротивления ρ_c :

$$\lambda = \sqrt{1 + \frac{\nu}{(1 + \nu)^2} \cdot \frac{(\rho_a - \rho_c)^2}{\rho_a \cdot \rho_c}}, \quad (7.61)$$

где ν – соотношение суммарных мощностей слоев и пропластков. Некоторые данные о величине λ приведены в нижеследующей таблице 7.9.

Таблица 7.9

Коэффициент анизотропии λ и отношение ρ_n/ρ_t для некоторых осадочных пород

Горные породы	λ	ρ_n/ρ_t
Глины слабослоистые	1,02–1,05	1,04–1,10
Глины с прослоями песков	1,05–1,15	1,10–1,32
Песчаники слоистые	1,10–1,35	1,20–1,65
Сланцевые глины	1,10–1,60	1,20–2,55
Глинистые сланцы	1,40–2,25	2,00–5,00
Каменные угли	1,73–2,55	3,00–6,50
Антрациты	2,00–2,55	4,00–6,50
Графитовые и углистые сланцы	2,00–2,75	4,00–7,50

Вследствие анизотропии большинства горных пород существенное влияние оказывает наличие глинистого материала в породе и трещинной пористости [1]. Для горной породы, в которой глинистый материал находится в виде прослоек (глинистый тонкослоистый коллектор):

$$\frac{1}{\rho_{\text{нлс}}} = \frac{C_{\text{гл.о}}}{\rho_{\text{гл.с}}} + \frac{1 - C_{\text{гл.о}}}{P_{\text{ч}} \cdot \rho_{\text{в}}} \cdot K_{\text{в.ч}}^n, \quad (7.62)$$

для пород с рассеянным глинистым материалом (диспергированный глинистый коллектор):

$$\frac{1}{\rho_{\text{нл.о}}} = \frac{C_{\text{гл.ч}}^2}{\rho_{\text{гл.о}}} + \frac{1 - C_{\text{гл.ч}}}{P_{\text{ск}} \cdot \rho_{\text{в}}} \cdot K_{\text{в.ч}}^n, \quad (7.63)$$

здесь $C_{\text{гл.о}}$ и $C_{\text{гл.ч}}$ – объемное содержание глинистого материала, представляющее отношение объема глин или глинистых частиц к объему породы (в дальнейшем будем выражать через $C_{\text{гл}}$ независимо от характера распределения глинистого материала); $\rho_{\text{гл.с}}$ и $\rho_{\text{гл.о}}$ – удельное сопротивление глинистых прослоев и диспергированных глин; при одинаковом $C_{\text{гл}}$ могут различаться, однако в практике принимаются равными сопротивлению вмещающих глин, поэтому в дальнейшем $\rho_{\text{гл.с}}$ и $\rho_{\text{гл.о}}$ будем выражать через $\rho_{\text{гл}}$ независимо от распределения глинистого материала; $P_{\text{ч}}$ – относительное сопротивление прослоев чистой породы; $P_{\text{ск}}$ – относительное сопротивление, соответствующее пористости скелета породы ($K_{\text{п.ск}}$); $\rho_{\text{нл.с}}$ – удельное сопротивление нефтегазонасыщенного порового коллектора со слоистым распределением глинистого материала; $\rho_{\text{нл.о}}$ – удельное сопротивление нефтегазонасыщенного порового коллектора с диспергированным распределением глинистого материала; $K_{\text{в.ч}}$ – коэффициент водонасыщенности чистой компоненты.

Для коллекторов трещинного или порово-трещинного типов удельное сопротивление породы зависит не только от соотношения между блоковой и трещинной пористостью, но и от расположения трещин, которые обычно объединяются в системы параллельно ориентированными в определенном направлении. При этом трещиноватость рассматривается как своеобразная пористость, при которой относительную роль зерен играют блоки (нетрещиноватые участки вещества), а роль пор – трещины или сквозные каналы проводимости.

Трещиновидные поры применительно к горным породам Е.М. Смехов [24] подразделяет на микротрещины с раскрытостью от 0,01 до 0,1 мм и макротрещины с раскрытостью более 0,1 мм. Поэтому породы с открытой трещиноватостью можно рассматривать как системы кубов конечного сопротивления, причем промежутки между ними заполнены пластовой водой или другим флюидом. При расчетах принимается, что трещины всех систем имеют одинаковую густоту и раскрытие, а удельное сопротивление для породы с хаотическим распределением трещин ($\rho_{\text{т}}$), на основании экспериментов принимается таким же, как и в случае трех взаимно перпендикулярных систем трещин, т. е.

$$\frac{1}{\rho_{\text{т}}} = \frac{2K_{\text{пт}}}{3\rho_{\text{ж}}} + \frac{3 - 2K_{\text{пт}}}{\rho_{\text{б}}(3 - K_{\text{пт}})}. \quad (7.64)$$

При малых значениях K_{nm} , принимая, что $(3-2K_{nm}) \approx (3-K_{nm})$, выражение упрощается, и для расчета удельного сопротивления трещинной породы А. М. Нечаем [14] была предложена формула

$$\rho_T = \frac{A \cdot \rho_{\bar{o}}}{A \cdot K_{n\bar{o}}^m + \frac{\rho_{\bar{o}}}{\rho_{жс}} \cdot K_{ПТ}}, \quad (7.65)$$

где $K_{n\bar{o}}$ – коэффициент блоковой (межзерновой) пористости; A – постоянный коэффициент, зависящий от ориентировки систем трещин в породе (для хаотического расположения трещин $A = 1,5$; для двух систем вертикальных трещин $A = 2$); $\rho_{\bar{o}}$, $\rho_{жс}$ – удельное сопротивление воды в межзерновых порах и флюида в трещинах.

И.И. Горюнов [7, 24] для такой же среды, но рассеченной произвольными системами трещин, получил выражение

$$\frac{1}{\rho_T} = \frac{1}{\rho_{\bar{o}}} + \frac{0,5K_{ПТ}}{\rho_{жс}}. \quad (7.66)$$

При выводе этого уравнения И. И. Горюнов применил специальный математический аппарат и исходил из того, что трещиноватая порода в общем случае анизотропна, а ее удельное электрическое сопротивление характеризуется тензором сопротивлений. Последние формулы (7.64) и (7.66), хотя и выведены разными способами, очень близки. Удельное сопротивление трещиноватой породы в значительной степени зависит от трещинной пористости и соотношения сопротивления флюида в порах и трещинах. Причем трещинная пористость оказывает значительно большее влияние на сопротивление породы, чем блоковая (межзерновая), если в порах и трещинах один и тот же флюид низкого сопротивления. Из формул (7.65) и (7.66) следует, что при насыщенности трещин нефтью (т. е. при $\rho_{жс} \rightarrow \infty$) удельное сопротивление нефтенасыщенной породы

$$\rho_{TH} = \frac{\rho_{\bar{o}}}{K_{n\bar{o}}^m} = \rho_{\bar{o}}. \quad (7.67)$$

Поэтому принято считать, что в случае заполнения трещин нефтью трещинная пористость практически не оказывает влияния на сопротивление породы. Существенно разное влияние на удельное сопротивление породы оказывают трещины, расположенные вдоль и поперек линиям тока, если они заполнены флюидами разного удельного сопротивления. Уравнение проводимости такой породы имеет вид

$$\frac{1}{\rho_T} = \frac{2}{3} \cdot \frac{K_{ПТ}}{\rho_{ж||}} + \frac{3-2K_{ПТ}}{(3-K_{ПТ})\rho_{\bar{o}} + K_{ПТ}\rho_{ж\perp}}, \quad (7.68)$$

где $\rho_{ж\perp}$ и $\rho_{ж||}$ – удельное сопротивление флюидов в трещинах, расположенных перпендикулярно и параллельно к направлению токовых линий.

Для выяснения влияния глинистости на удельное сопротивление трещиноватой породы можно воспользоваться уравнением (7.65), в котором не учитываются поперечные к направлению тока трещины. В связи с тем, что $\frac{\rho_{\bar{o}}}{K_{n\bar{o}}^m} = \rho_{\bar{o}}$, уравнение (7.65) преобразуется к виду

$$\rho_T = \frac{A\rho_{ж}}{K_{ПТ} + A\rho_{ж} \frac{1}{\rho_{\delta}}}. \quad (7.69)$$

Величина $\frac{1}{\rho_{\delta}}$ соответствует электропроводности блока породы. Блок породы, например, глинистого известняка можно представить как известняк со слоистым или диспергированным распределением глинистого материала. После подстановки уравнений (7.62) и (7.63) в (7.69) выражение для сопротивления глинистого водонасыщенного порово-трещинного известняка соответственно будет иметь вид:

– при слоистом распределении глинистого материала

$$\rho_{ПТ}^{зл.с} = \frac{A\rho_{ж}}{K_{ПТ} + A\rho_{ж} \left(\frac{C_{зл}}{\rho_{зл}} + \frac{1 - C_{зл}}{P_{ч} \cdot \rho_{\delta}} \cdot K_{\delta}^n \right)}; \quad (7.70)$$

– при дисперсном распределении

$$\rho_{ПТ}^{зл.д} = \frac{A\rho_{ж}}{K_{ПТ} + A\rho_{ж} \left(\frac{C_{зл}^2}{\rho_{зл}} + \frac{1 - C_{зл}}{P_{ск} \cdot \rho_{\delta}} \cdot K_{\delta}^n \right)}. \quad (7.71)$$

Аналитическое решение этих уравнений показывает, что глинистость, особенно слоистая, оказывает занижающее влияние на сопротивление породы.

Горные породы, кроме первичной (блоковой или межзерновой) пористости и трещинной пористости могут иметь вторичные пустоты кавернозного типа. Для оценки удельного сопротивления коллектора кавернозного типа А. М. Нечай [14] применил формулу Максвелла, характеризующую удельное сопротивление среды с шаровыми включениями, и получил следующее уравнение:

$$\rho_{кав} = \frac{2\rho_{ж} + \rho_{\delta} + K_{нк}(\rho_{ж} - \rho_{\delta})}{2\rho_{ж} + \rho_{\delta} - 2K_{нк}(\rho_{ж} - \rho_{\delta})} \rho_{\delta}. \quad (7.72)$$

При насыщении каверн пластовой водой ($\rho_{ж} = \rho_{\delta} \rightarrow 0$) уравнение (7.72) преобразуется в выражение

$$\rho_{к.в} = \frac{1 - K_{нк}}{1 + 2K_{нк}} \cdot \rho_{\delta} \quad (7.73)$$

При насыщении каверн нефтью ($\rho_{ж} \rightarrow \infty$) – в выражение

$$\rho_{к.н} = \frac{2 + K_{нк}}{2 - 2K_{нк}} \cdot \rho_{\delta} = \frac{2 + K_{нк}}{2 - 2K_{нк}} \cdot \frac{\rho_{\delta}}{K_{н\delta}^m}, \quad (7.74)$$

а при насыщении нефтью как каверн, так и первичных пор – в выражение:

$$\rho_{нк.н} = \frac{2 + K_{нк}}{2 - 2K_{нк}} \cdot \frac{\rho_{\delta}}{K_{н\delta}^m \cdot K_{\delta}^n}. \quad (7.75)$$

Последние формулы справедливы в том случае, если каверны имеют форму шаров одного диаметра и если расстояние между шарами настолько больше их радиусов, что эффект возмущения внешнего электрического поля, создаваемого

каждым шаром, не затрагивает соседнего шара. Несоблюдение указанного условия, как было показано И. И. Горюновым [7], может привести к значительным погрешностям при определении удельного сопротивления порово-кавернозной породы.

Наиболее общий и сложный случай описания проводимости породы, когда последняя, кроме основной породы, содержит глинистый материал, обладающий повышенной проводимостью по сравнению с блоком породы, и различные виды пористости – блоковой (межзерновой), трещинной и кавернозной. Для такого коллектора проводимость породы определяется следующими выражениями [1]:

Для водонасыщенных пород:

– со слоистым распределением глинистого материала

$$\frac{1}{\rho_{КТ.В}^{ГЛ.С}} = \frac{1 + 2K_{ПК}}{1 - K_{ПК}} \left[\frac{2K_{ПТ}}{3\rho_{Ж}} + \frac{3 - 2K_{ПТ}}{3 - K_{ПТ}} \left(\frac{C_{ГЛ}}{\rho_{ГЛ}} + \frac{1 - C_{ГЛ}}{\rho_{\epsilon}} \cdot K_{нб}^m \right) \right]; \quad (7.76)$$

– с диспергированным распределением глинистого материала

$$\frac{1}{\rho_{КТ.В}^{ГЛ.Д}} = \frac{1 + 2K_{ПК}}{1 - K_{ПК}} \left[\frac{2K_{ПТ}}{3\rho_{Ж}} + \frac{3 - 2K_{ПТ}}{3 - K_{ПТ}} \left(\frac{C_{ГЛ}^2}{\rho_{ГЛ}} + \frac{1 - C_{ГЛ}}{\rho_{\epsilon}} \cdot K_{нб}^m \right) \right]. \quad (7.77)$$

Для нефтенасыщенных во вторичных пустотах пород:

$$\frac{1}{\rho_{КТ.Н}^{ГЛ.С}} = \frac{2 - 2K_{ПК}}{2 + K_{ПК}} \left\{ \frac{2K_{ПТ}}{3\rho_{ж\parallel}} + \frac{3 - 2K_{ПТ}}{\left[(3 - K_{ПТ}) / \left(\frac{C_{ГЛ}}{\rho_{ГЛ}} + \frac{1 - C_{ГЛ}}{\rho_{\epsilon}} K_{нб}^m \right) + \rho_{ж\perp} K_{ПТ} \right]} \right\}; \quad (7.78)$$

$$\frac{1}{\rho_{КТ.Н}^{ГЛ.Д}} = \frac{2 - 2K_{ПК}}{2 + K_{ПК}} \left\{ \frac{2K_{ПТ}}{3\rho_{ж\parallel}} + \frac{3 - 2K_{ПТ}}{\left[(3 - K_{ПТ}) / \left(\frac{C_{ГЛ}^2}{\rho_{ГЛ}} + \frac{1 - C_{ГЛ}}{\rho_{\epsilon}} K_{нб}^m \right) + \rho_{ж\perp} K_{ПТ} \right]} \right\}. \quad (7.79)$$

Для порово-кавернозно-трещинного коллектора с нефтенасыщением вторичных и первичных пор:

$$\frac{1}{\rho_{ПКТ.Н}^{ГЛ.С}} = \frac{2 - 2K_{ПК}}{2 + K_{ПК}} \left\{ \frac{2K_{ПТ}}{3\rho_{ж\parallel}} + \frac{3 - 2K_{ПТ}}{\left[(3 - K_{ПТ}) / \left(\frac{C_{ГЛ}}{\rho_{ГЛ}} + \frac{1 - C_{ГЛ}}{\rho_{\epsilon}} K_{нб}^m \cdot K_{\epsilon}^n \right) + \rho_{ж\perp} K_{ПТ} \right]} \right\}; \quad (7.80)$$

$$\frac{1}{\rho_{ПКТ.Н}^{ГЛ.Д}} = \frac{2 - 2K_{ПК}}{2 + K_{ПК}} \left\{ \frac{2K_{ПТ}}{3\rho_{ж\parallel}} + \frac{3 - 2K_{ПТ}}{\left[(3 - K_{ПТ}) / \left(\frac{C_{ГЛ}^2}{\rho_{ГЛ}} + \frac{1 - C_{ГЛ}}{\rho_{\epsilon}} K_{нб}^m \cdot K_{\epsilon}^n \right) + \rho_{ж\perp} K_{ПТ} \right]} \right\}. \quad (7.81)$$

Таким образом, анализ состояния изученности электропроводимости горных пород электрическими методами промысловой геофизики показывает, что на ее величину оказывает влияние электропроводность порового раствора, зависящая

от концентрации солей и температуры, коэффициент общей пористости, структура порового пространства, извилистость поровых каналов, наличие не только межгранулярной, но и вторичной – трещинной и кавернозной пористости, характер распределения трещин и степень изолированности каверн, наличие углеводородов (нефть, газ) и степень заполнения ими порового пространства, наличие электропроводящих минералов типа пирит и другие, а также тонкодисперсного глинистого материала в рассеянном виде или в виде отдельных прослоев параллельно напластованию горных пород. Причем на величину электропроводности горных пород наибольшее влияние оказывает минерализация порового раствора, величина первичной пористости и размер пор, трещинная пористость вдоль распространения электрического тока. В связи с этим, используя большой теоретический и практический опыт, накопленный в области промысловой геофизики по изучению электропроводности горных пород, попытаемся провести аналогию в факторах, влияющих на электропроводность горных пород и электропроводность металлов и металлизированной сверхпроводящей керамики и дать общее уравнение электропроводности всего класса веществ (проводники, полупроводники и диэлектрики) с переходом их в сверхпроводящее состояние.

Следует учесть, что при изучении кристаллического строения вещества принято считать [20], что для каждого атома химического элемента характерен свой радиус, определяющий его размер, например, радиус атома углерода $R_C = 1,8\text{\AA}$, радиус атома водорода $R_H = 1,17\text{\AA}$, радиус атома кислорода $1,59\text{\AA}$, радиус атома хлора $R_{Cl} = 1,8\text{\AA}$ и т. д.

Для большой группы соединений можно использовать одни и те же межмолекулярные радиусы. С их помощью можно вычислить собственный объем молекулы. По результатам рентгеновских исследований можно определить объем, приходящийся на одну молекулу в кристалле. Частное от деления первого объема на второй называют коэффициентом молекулярной упаковки [20]. При этом коэффициент молекулярной упаковки для подавляющего большинства кристаллов лежит в пределах от 0,65 до 0,77, т. е. близок к коэффициенту плотной упаковки шаров и эллипсоидов. Экспериментальными исследованиями бензола, нафталина и антрацена установлено [20], что эти вещества при значении коэффициента упаковки K больше 0,68 находятся в твердом состоянии; при переходе их твердой фазы в жидкую величина K скачком уменьшается до 0,58. При дальнейшем увеличении температуры жидкости до точки кипения величина K уменьшается, например, для нафталина до 0,51. При $K \leq 0,5$ эти вещества находятся в газообразном состоянии. Здесь следует сделать замечание, что для однородного кристаллического состояния вещества особенно металлов правильно говорить не о коэффициенте молекулярной упаковки, а о коэффициенте атомной упаковки. Поэтому в дальнейшем будем употреблять термин – коэффициент атомной упаковки. Для вычисления коэффициента упаковки атомов в кристалле необходимо знать объем самих атомов. Расчет собственного объема атома возможен, если известны значения длин связей, валентных углов и межатомных расстояний. Вокруг каждого атома описывается участок сферы

соответствующим радиусом. Как правило, реальные структуры кристалла принадлежат к числу наиболее плотных упаковок из всех мыслимых. Однако это справедливо при конкретной температуре вещества, так как с изменением температуры возможны фазовые превращения с изменением кристаллической решетки, которая в новом температурном диапазоне соответствует новой наиболее плотной упаковке атомов. Коэффициент межатомной упаковки (K) непосредственно связан с межатомной пористостью кристалла ($K_{п.м}$), т. е.

$$1 - K = K_{п.м}. \quad (7.82)$$

Причем по аналогии с горными породами можно утверждать, что для разных веществ в кристаллическом состоянии при одинаковой величине параметров K или $K_{п.м}$, но разном размере атомов, будут отличаться и размеры межатомных пор, особенно при разной кристаллической структуре. Это существенным образом будет сказываться на проницаемости этих пор для электронов, т. е. на величине электропроводности кристаллов.

Таким образом, для любого вещества в твердом состоянии можно выделить следующие виды пористости.

1. Межатомная пористость или пористость кристаллической решетки

$$K_{п.м.} = \frac{V_{п.м.}}{V}, \quad (7.83)$$

где V – объем вещества; $V_{п.м}$ – суммарный объем всех межатомных пустот.

2. Межзерновая или блоковая пористость $K_{нб}$ – отношение объема межзерновых пор $V_{нб}$ к общему объему вещества V :

$$K_{нб} = \frac{V_{нб}}{V}. \quad (7.84)$$

3. Вторичная пористость ($K_{см}$) выражает отношение объема вторичных пустот ($V_{см}$) к общему объему вещества:

$$K_{см} = \frac{V_{см}}{V}. \quad (7.85)$$

Вторичная пористость включает кавернозную и трещинную пористость.

4. Кавернозная пористость $K_{н.к}$ – есть отношение объема каверн (V_k) к общему объему вещества:

$$K_{н.к.} = \frac{V_k}{V}. \quad (7.86)$$

Кавернозная пористость может быть подразделена на открытую $K_{н.к.о}$ и изолированную $K_{н.к.и}$ кавернозные пористости, которые представляют соответственно отношение объема каверн, сообщающихся $V_{к.с}$ или изолированных $V_{к.и}$, к общему объему вещества.

$$K_{н.к.о} = \frac{V_{к.с.}}{V}, \quad (7.87)$$

$$K_{н.к.и} = \frac{V_{к.и}}{V}. \quad (7.88)$$

5. Трещинная пористость $K_{n.m}$ есть отношение объема трещин или сквозных каналов проводимости V_m к общему объему вещества.

$$K_{n.m.} = \frac{V_m}{V}. \quad (7.89)$$

6. Общая пористость

$$K_n = \frac{V_n}{V} = \frac{V_{n.m.} + V_{n.б} + U_{\kappa} + V_m}{V}. \quad (7.90)$$

Общая пористость обусловлена абсолютно всеми порами вещества – меж-атомными и надмолекулярной структуры (межзерновой, кавернозной, трещинной, открытыми и закрытыми, независимо от их форм, величины и взаимного расположения).

7. Открытая или динамическая пористость $K_{n.o}$ представлена сообщающимися между собой различными порами, пустотами, но по которым в принципе при определенных условиях может происходить движение электронов или ионов порового раствора, и представляет собой отношение объема сообщающихся между собой пор V_0 к общему объему вещества.

$$K_{n.o} = \frac{V_0}{V}. \quad (7.91)$$

Открытая или динамическая пористость отражает электронную и ионную проводимость водонасыщенной породы.

8. Эффективная электронная пористость ($K_{n.э}$) представляет отношение эффективного объема сообщающихся между собой различных пустот $V_{эф}$ вещества, по которым возможно свободное движение электронов проводимости при температуре или градиентах напряжения (напряженности электрического поля), соответствующих естественным условиям измерения электропроводности, т. е. при значениях E ниже пробивных, к общему объему вещества.

$$K_{n.э} = \frac{V_{эф}}{V}. \quad (7.92)$$

Эффективная электронная пористость ($K_{n.э}$), т. е. не водо-, нефте- и газонасыщенная пористость. Она представляет часть открытой или динамической пористости и включает поры вещества, заполненные «вакуумом», «эфиром» или «электронным газом». К ней в первую очередь относятся межатомная, межмолекулярная пористость и часть других сообщающихся пор, которые не заполнены ни водой, ни нефтью, ни газом. Понятие «эффективная электронная пористость» предполагает наличие в веществе таких сообщающихся пор, но заполненных водой, нефтью или газом, в которых движение электронов под действием электрического поля не происходит либо происходит очень ограничено, вызывая процессы ионизации, рекомбинации и другие атомов и ионов флюидов с электронами.

Пористость вещества может быть одинакова по величине, но неравноценна в отношении подвижности электронов проводимости. Следовательно, для направленного движения электронов в веществе имеет значение не только относительное количество различных типов пор, но и их абсолютные размеры в сравнении с размерами электронов при соответствующей температуре веще-

ства, определяющие проницаемость порового пространства вещества для электронов. Под проницаемостью пористой среды вещества подразумевается способность ее пропускать электроны при наличии перепада напряжения. Проницаемость является свойством пористой среды и мерой проводимости ее для электронов. Установившаяся скорость движения электронов связана с особенностями геометрии открытого порового пространства (размеры поперечного сечения и форма поровых каналов, их распределение в поровом объеме), степенью заполнения пор водной или углеводородной жидкой или газообразной средой, включая воздух, в которых движение электронов существенно ограничено и преобладает ионная электропроводимость. Все это с учетом соотношения размеров пустот и электронов при разных температурах определяет пропускную способность пористой среды вещества для электронов, т. е. проницаемость для электронов или электропроводность вещества. Так, соединения между порами, имеющие относительно удлинненную форму (длина в десять раз и более превышает ширину) называют каналами, менее протяженные – узким проходом или горловинами.

Наличие жидкой среды даже в виде растворов солей в открытых порах может существенно повлиять на величину проницаемости электронов, т. е. электропроводность. Коэффициент водонасыщенности вещества выражает отношение содержащейся в нем воды V_e к суммарному объему пор V_n , или количество воды, содержащейся в единице объема пор.

$$K_e = \frac{V_e}{V_n}. \quad (7.93)$$

В водонасыщенных веществах (породах), не содержащих свободной воды и углеводов, коэффициент водонасыщенности определяется только количеством связанной, остаточной воды, оставшейся в застойных областях и на поверхности частиц вещества, и зависит от физико-химических свойств системы «вещество – вода» и избирательно адсорбционных свойств частиц вещества к молекулам воды. Разность объемов, занимаемых открытыми порами и остаточной водой, характеризует эффективную пористость. Поэтому эффективная пористость для проницаемости электронов водонасыщенного вещества, не содержащего в порах свободной воды и углеводов, определяется выражением

$$K_{н.эф.э} = K_n(1 - K_e). \quad (7.94)$$

Можно провести аналогию между проницаемостью порового пространства вещества для электронов и проницаемостью порового пространства горных пород для газа или абсолютной проницаемостью породы. При полном удалении жидкой и газообразной фазы из вещества и в связи с меньшим размером электронов по сравнению с размерами молекул газа проницаемость порового пространства вещества для электронов (или электропроводность) должна быть существенно выше, чем абсолютная проницаемость этого порового пространства вещества для газа, например, для молекул воздуха. В связи с этим, для получения реальных условий сверхпроводимости необходимо создать сквозные каналы электронной проводимости таких размеров, чтобы по ним свободно двигались электроны со своими фотонными оболочками, но не могли проникнуть

молекулы жидкостей или газов, наличие которых будет препятствовать движению электронов так же, как и атомы или ионы в узлах кристаллической решетки. Если из образца откачивать воздух и создавать вакуум в порах повышенного размера, то они будут эффективными для движения электронов, и, следовательно, возможно существенное повышение критической температуры T_c перехода вещества в сверхпроводящее состояние. Таким образом, реально свободное движение электронов возможно, если площадь их фотонных оболочек станет меньше просветлости каналов в сообщающихся порах.

Для оценки предельных значений удельного сопротивления вещества в крайних состояниях – «сверхпроводимости» и наилучшего диэлектрика можно предложить выражение, связывающее скорость движения электронов проводимости в веществе с его удельным электрическим сопротивлением:

$$v_s = c - \frac{\rho(v) \cdot \sigma T^4 r_e^2 \cdot e}{h \cdot U}, \quad (7.95)$$

где v_s – скорость направленного движения электронов в проводнике; c – скорость света; $\rho(v)$ – удельное электрическое сопротивление проводника как функция скорости электронов; $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ Вт/м}^2 \cdot \text{К}^4$ – постоянная Стефана – Больцмана; T – абсолютная температура; r_e – радиус электрона ($r_e = 2,817 \cdot 10^{-15} \text{ м}$); e – заряд электрона; h – постоянная Планка; U – напряжение на концах проводника (В). Предельными значениями удельного сопротивления можно принять случаи:

I – $\rho \rightarrow 0$ при $v_s \rightarrow c$;

II – $\rho \rightarrow \infty$ при $v_s \rightarrow 0$.

Из анализа уравнения (7.95) следует, что условие I соблюдается, так как при $v_s = c$, $\rho = 0$. Из условия II вытекает, что при $v_s = 0$

$$c - \frac{\rho(v) \sigma T^4 r_e^2 e}{h U} = 0; \quad (7.96)$$

$$\rho_{\infty}^{(v=0)} = \frac{chU}{\sigma T^4 r_e^2 e}. \quad (7.97)$$

Для реального случая нормальных условий, например, при $U = 100 \text{ В}$ и $T = 300 \text{ К}$.

$$\rho_{\infty} = \frac{3 \cdot 10^8 \cdot 6,62 \cdot 10^{-34} \cdot 10^2}{5,67 \cdot 10^{-8} \cdot 3^4 \cdot 10^8 \cdot 2,817^2 \cdot 10^{-30} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}} = 3,4 \cdot 10^{22} \text{ Ом} \cdot \text{м}$$

Эта величина как предельная согласуется со значениями удельного сопротивления веществ-диэлектриков (табл. 7.1).

Однако можно ли считать, что электрическое сопротивление вещества в условиях сверхпроводимости действительно снижается до нуля? Это принципиальный вопрос, от которого зависит физическое обоснование математического уравнения проводимости различных веществ при переходе в сверхпроводящее состояние. Считается, что сверхпроводимость возникает скачком при понижении температуры. Температура T_c , при достижении которой происходит скачок, называется критической. Внимательное исследование показывает, что такой переход происходит в некотором интервале температур. Считается, что трение движущихся электронов исчезает независимо от «чистоты» образца, но

чем образец «чище», тем скачок сопротивления резче, его ширина в самых «чистых» образцах меньше сотой доли градуса. В этом случае говорят о «хороших» образцах или сверхпроводниках; в «плохих» образцах ширина скачка может достигать десятков градусов.

Как убедиться в том, что сопротивление сверхпроводника действительно равно нулю? Как отмечается в работе [6], легко нарисовать график, на котором кривая «уперлась» в ось абсцисс, труднее обрести уверенность в том, что сопротивление действительно равно нулю, а не просто очень маленькое. При этом рассуждают так [6]. Измеряя сопротивление, физик использует прибор, обладающий определенной чувствительностью, рассчитанной на ту величину, которую он предполагает получить. Если измеряемая величина вдруг уменьшается в 10, а то и в 100 раз, стрелка прибора перестает двигаться. Именно поэтому так не гладко выглядит зависимость сопротивления от температуры, которую впервые получил Камерлинг Оннес. Ему понадобилось около года, чтобы убедиться, что сопротивление сверхпроводящего вещества меньше чувствительности самого точного на то время прибора. Однако и это не доказывает, что сопротивление строго равно нулю. Считается [6], что такого чисто экспериментального доказательства и не может быть. Физическую величину можно считать равной нулю, если ее возможное отклонение от математического значения «ноль» так мало, что его невозможно установить никакими измерениями. В свое время еще Камерлинг Оннес поставил такой опыт: поместил в сосуд с жидким гелием, который служил охладителем, кольцо из сверхпроводника, в котором циркулировал ток. Если бы сверхпроводник имел отличное от нуля сопротивление, то ток в кольце уменьшался бы, и тогда изменялось бы магнитное поле, которое создает такой кольцевой ток.

Магнитное поле можно регистрировать вне сосуда с жидким гелием. За его изменением следили просто с помощью стрелки компаса. За те несколько часов, пока не испарился жидкий гелий, никакого изменения магнитного поля обнаружено не было. Впоследствии этот опыт повторялся. В 1950-е гг. за магнитным полем подобного кольца следили около полутора лет и также не обнаружили никакого изменения. Таким образом, точность утверждения о нуле сопротивления стала поистине фантастической. Если даже считать, что в пределах этой точности у сверхпроводника есть какое-то небольшое сопротивление, то и тогда уменьшение тока в небольшой катушке можно будет заметить лишь через миллионы лет. И в связи с этим физики принимают, что сопротивление сверхпроводника постоянному электрическому току равно нулю [6]. На этом основывают вывод, что сверхпроводник принципиально отличается от самого хорошего нормального проводника с очень маленьким сопротивлением и это два разных состояния вещества. В физике об этом говорят так: металл может существовать в нормальном состоянии (при температуре, большей T_c) и в сверхпроводящем состоянии (при температуре, меньшей T_c). Оба эти состояния называются в физике фазами. Причем одновременно при переходе в сверхпроводящее состояние происходит изменение и ряда других физических свойств.

При сверхпроводящем фазовом переходе электрическое сопротивление меняется скачком, а энергия – непрерывно. Скачком меняется также одна из самых важных тепловых величин – теплоемкость. Обычно при охлаждении вещества его теплоемкость уменьшается, в момент сверхпроводящего перехода, однако, она скачком уменьшается приблизительно в $2,5 \div 3$ раза (рис. 7.17). И все-таки все эти рассуждения не являются убедительным доказательством того, что удельное сопротивление сверхпроводника равно именно нулю. Логичнее предположить, что оно равно очень маленькой величине, соответствующей движению со скоростью света всех свободных электронов в веществе, т. е. удельному сопротивлению электронного газа или электронной жидкости ($\rho_{эж, \min}$) по Ландау. Для оценки $\rho_{эж, \min}$ примем радиус атома $r_{ат} = 1,3 \text{ \AA} = 1,3 \cdot 10^{-10} \text{ м}$, тогда общее количество (N) атомов в 1 м^3 при наиболее плотной упаковке будет равно:

$$n_0 = \frac{1}{(2r)^3} = \frac{1}{8 \cdot 1,3^3 \cdot 10^{-30}} = 5,69 \cdot 10^{28} \frac{\text{атом}}{\text{м}^3}. \quad (7.98)$$

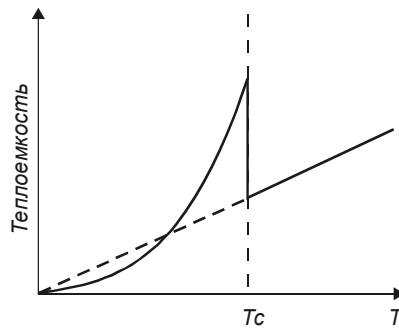


Рис. 7.17. Зависимость теплоемкости металла от температуры вблизи сверхпроводящего перехода по данным [6]. Пунктирной линией (---) обозначен ход теплоемкости нормального металла – если бы не было сверхпроводящего перехода

Предположим предельный случай, что все атомы имеют по одному валентному электрону и все валентные электроны являются электронами проводимости, т. е. в 1 м^3 находится $5,69 \cdot 10^{28}$ электронов проводимости. Примем, что к проводнику длиной $l = 1 \text{ м}$ приложено напряжение $U = 1 \text{ В}$ и скорость движения электронов под действием приложенного напряжения $v = C$, тогда минимальное сопротивление определим из условия

$$R = \rho \frac{l}{s} = \frac{U}{J}, \quad (7.99)$$

т. е.

$$\rho = \frac{U \cdot s}{J \cdot l}, \quad (7.100)$$

где R , ρ – общее и удельное сопротивление проводника; l , s – его длина и площадь поперечного сечения; U , J – напряжение и сила тока.

Сила тока

$$J = e \cdot n_e \cdot v \cdot s. \quad (7.101)$$

При скорости движения (v) электронов, равной скорости света (c), уравнение (7.100) преобразуется к виду

$$\rho_{\text{э.ж. min}} = \frac{U}{e \cdot n_0 \cdot c \cdot l} = \frac{1}{1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 5,69 \cdot 10^{28} \cdot 3 \cdot 10^8 \cdot 1} = 3,66 \cdot 10^{-19} \text{ Ом} \cdot \text{м}. \quad (7.102)$$

Таким образом, наиболее вероятный предельный диапазон изменения удельного электрического сопротивления веществ составляет $(3,4 \cdot 10^{22} \div 3,66 \cdot 10^{-19})$ Ом·м, т. е. изменяется на 41 порядок (в 10^{41} раз). Фактически в каждом конкретном случае $\rho_{\text{э.ж.}}$ должно соответствовать тем условиям, при которых происходит измерение сопротивления для данного вещества, т. е. эта величина переменная так же, как и $\rho_{\text{с}}$ зависит от концентрации солей и температуры, и, следовательно, в каждом случае, для каждого элемента надо оценить величину $\rho_{\text{э.ж.}}$. Концентрация подвижных (свободных) электронов может меняться в пределах от $5,69 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$ до нуля, а скорость их направленного поступательного движения – от нуля до скорости света ($3 \cdot 10^8 \text{ м/с}$).

Скорость направленного движения электронов зависит от соотношения площадей сечения фотонных оболочек электронов к площади сечения пор $\left(\frac{S_{\text{э.фот}}}{S_{\text{пор}}} \right)$ и силы, действующей со стороны электрического поля (E) на свободные электроны, т. е.

$$F_E = eE, \quad (7.103)$$

здесь e – заряд электрона.

Количество же оторванных от атомов электронов зависит от соотношения сил теплового воздействия:

$$F_T = \frac{kT}{r}, \quad (7.104)$$

где k – постоянная Больцмана; T – абсолютная температура, °K; r – радиус вращения электрона вокруг атома, т. е. радиус атома.

Им противодействует кулоновская сила притяжения электрона к ядру:

$$F_{\kappa} = \frac{Ze^2}{4\pi \cdot \epsilon_0 \cdot r^2}, \quad (7.105)$$

здесь Z – заряд ядра атома; ϵ_0 – электрическая постоянная.

Таким образом, количество электронов проводимости приближенно можно оценить по формуле

$$n_e = n_0 \frac{(\kappa T + eEr)4\pi\epsilon_0 r}{Ze^2}, \quad (7.106)$$

где n_0 – концентрация валентных электронов.

Причем величина n_0 может меняться от элемента к элементу и определяется плотностью вещества и его молекулярной (атомной) массой. Например, ниже в таблице 7.10 приведен расчет параметра n_0 для некоторых элементов – металлов.

Таблица 7.10

Элемент	Заряд ядра элемента	Радиус атома 10^{-10} , м	Атомная масса, а.е.м.	Масса атома в кг, 10^{-27}	Плотность вещества элемента, кг/м ³	Концентрация валентных электронов м ⁻³ , 10^{28}
Al	13	1,43	26,98	44,79	2,6889	6,0
Cu	29	1,28	63,55	105,49	8,96	8,49
Ag	47	1,44	107,87	179,06	10,50	5,86
Hg	80	1,57	200,59	332,98	14,193	4,26

Анализ уравнения (7.106) показывает, что концентрация электронов проводимости существенно зависит от температуры, а также параметров E , r , Z , причем наибольшее влияние оказывает параметр T . Например, для меди со средней величиной радиуса атома $r = 1,28 \cdot 10^{-10}$ м, $Z = 29$, при постоянном $E = 100$ В/м параметр n_e равен:

$$\text{при } T = 1^\circ\text{К} \quad n_e = 2,69 \cdot 10^{-7}, n_0 = 2,28 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-3};$$

$$\text{при } T = 300^\circ\text{К} \quad n_e = 8,07 \cdot 10^{-5}, n_0 = 6,85 \cdot 10^{24} \text{ м}^{-3};$$

$$\text{при } T = 10^3 \text{ К} \quad n_e = 2,69 \cdot 10^{-4}, n_0 = 2,28 \cdot 10^{25} \text{ м}^{-3};$$

$$\text{при } T = 10^4 \text{ К} \quad n_e = 2,69 \cdot 10^{-3}, n_0 = 2,28 \cdot 10^{26} \text{ м}^{-3};$$

$$\text{при } T = 10^5 \text{ К} \quad n_e = 2,69 \cdot 10^{-2}, n_0 = 2,28 \cdot 10^{27} \text{ м}^{-3}.$$

При постоянстве $T=300^\circ\text{К}$ и изменении напряженности электрического поля параметр n_e изменяется следующим образом:

$$\text{при } E = 100 \text{ В/м} \quad n_e = 8,07 \cdot 10^{-5}, n_0 = 6,85 \cdot 10^{24} \text{ м}^{-3};$$

$$\text{при } E = 10^5 \text{ В/м} \quad n_e = 8,07 \cdot 10^{-5}, n_0 = 6,85 \cdot 10^{24} \text{ м}^{-3};$$

$$\text{при } E = 10^8 \text{ В/м} \quad n_e = 1,21 \cdot 10^{-4}, n_0 = 1,03 \cdot 10^{25} \text{ м}^{-3};$$

$$\text{при } E = 10^{10} \text{ В/м} \quad n_e = 4,14 \cdot 10^{-3}, n_0 = 3,51 \cdot 10^{26} \text{ м}^{-3}.$$

Как видно, концентрация электронов проводимости при разных ситуациях существенно ниже концентрации валентных электронов, но все равно очень велика, чтобы обеспечить электропроводность вещества.

Безусловно, необходимо иметь в виду, что на валентный электрон будут действовать не только все протоны ядра, но и проявлять экранирующее (отталкивающее) влияние другие электроны, расположенные ближе к ядру. Кроме того, изменение радиуса вращения валентных электронов носит вероятностный характер, однако учет всех этих факторов сложен и в данной работе не проводится.

Подставив выражение (7.106) вместо n_0 в (7.102), получим уравнение, описывающее приближенно величину удельного сопротивления электронной жидкости в веществе конкретного элемента с учетом концентрации свободных электронов проводимости и условий измерения.

$$\rho_{\text{э.ж.}} = \frac{U}{e \cdot n_e \cdot c \cdot l} = \frac{U \cdot Z \cdot e}{n_0 (eEr + kT) 4\pi\epsilon_0 r \cdot c \cdot l}. \quad (7.107)$$

Расчет величин $\rho_{\text{э.ж.}}$ по формуле (7.107) для ряда металлов при условии $T = 273^\circ\text{К}$, $U = 1 \text{ В}$ и $E = 1 \text{ В/м}$ дает следующие результаты:

$$\rho_{\text{э.ж.}}^{\text{Al}} = 1,93 \cdot 10^{-15} \text{ Ом}\cdot\text{м};$$

$$\rho_{\text{э.ж.}}^{\text{Cu}} = 3,4 \cdot 10^{-15} \text{ Ом}\cdot\text{м};$$

$$\rho_{\text{э.ж.}}^{\text{Ag}} = 7,1 \cdot 10^{-15} \text{ Ом}\cdot\text{м};$$

$$\rho_{\text{э.ж.}}^{\text{Hg}} = 1,52 \cdot 10^{-14} \text{ Ом}\cdot\text{м}.$$

Теперь, умея оценивать для конкретных условий $\rho_{\text{э.ж.}}$ и учитывая опыт изучения сложных коллекторов, содержащих нефть, газ и воду, методами промысловой геофизики, можно представить общее уравнение электропроводности, которое учитывает наличие всех возможных каналов для движения электронов проводимости и ионов солей.

$$\sigma = \frac{1}{\rho} = \frac{2-2K_{\text{нк}}}{2+K_{\text{нк}}} \left\{ \frac{2K_{\text{нт}}}{3} \left[\frac{K_{\text{э.ж.м}}^2}{\rho_{\text{э.ж.}} \cdot \xi_m \cdot \eta_m} + \frac{K_{\text{вт}}^2}{\rho_{\text{ж.л}}} + \frac{K_{\text{н.з.м}}^2}{\rho_{\text{н.з.}}} \right] + \right. \\ \left. + \frac{3-2K_{\text{н.м}}}{3-K_{\text{н.м}}} \right. \\ \left. C_{\text{пр}}^2 \left(\frac{1}{\rho_{\text{э.ж.}} \cdot \xi_{\text{мп}} \cdot \eta_{\text{мп}} \cdot \beta_{\text{пр}}} + \frac{1}{\rho_{\text{пр}}} \right) + (1-C_{\text{пр}}) K_{\text{нб}}^2 \left(\frac{K_{\text{э.ж.л}}^2}{\rho_{\text{э.ж.}} \cdot \xi_{\text{л}} \cdot \eta_{\text{л}}} + \frac{K_{\text{в.л}}^2}{\rho_{\text{в}}} + \frac{K_{\text{н.з.}}^2}{\rho_{\text{н.з.}}} \right) + \right. \\ \left. + \frac{(1-C_{\text{пр}} - K_{\text{нб}}) K_{\text{нм}}^2 \cdot K_{\text{э.ж.м}}^2}{\rho_{\text{э.ж.}} \cdot \xi_{\text{м}} \cdot \eta_{\text{м}} \cdot \beta_{\text{м}}} + K_{\text{нт}} (\rho_{\text{э.ж.}} \cdot K_{\text{э.ж.м}}^2 \cdot \xi_{\text{м}} \cdot \eta_{\text{м}} + \rho_{\text{ж.л}} \cdot K_{\text{вт}}^2 + \rho_{\text{н.з.}} \cdot K_{\text{н.з.м}}^2) \right\}, \quad (7.108)$$

где $\beta_{\text{м}}$, $\beta_{\text{пр}}$ – структурный параметр кристаллической решетки основного минерала и минерала примесей; $K_{\text{нк}}$ – кавернозная пористость (пористость изолированных в блоке пор); $K_{\text{нт}}$ – трещинная пористость; $K_{\text{нб}}$ – пористость блока вещества или межзерновая пористость; $K_{\text{нм}}$ – межмолекулярная пористость; $C_{\text{пр}}$ – содержание примесей в веществе в долях от общего объема; $K_{\text{вн}}$, $K_{\text{вт}}$ – коэффициент водонасыщения пор, трещин; $K_{\text{нз}}$, $K_{\text{нзм}}$ – коэффициент нефтегазонасыщения пор, трещин; $K_{\text{э.ж.л}}$, $K_{\text{э.ж.м}}$, $K_{\text{э.ж.т}}$ – коэффициент насыщения электронной жидкостью межгранулярных пор, межмолекулярных пор и трещин; $\rho_{\text{пр}}$, $\rho_{\text{э.ж.}}$ – удельное электрическое сопротивление примесей вещества и электронной жидкости; $\rho_{\text{в}}$ – удельное электрическое сопротивление воды в порах блока

породы; $\rho_{не}$ – удельное электрическое сопротивление нефтегазовой смеси; $\rho_{ж||}$, $\rho_{ж\perp}$ – удельное электрическое сопротивление электропроводящей жидкости в трещинах параллельных и перпендикулярных току; ξ_m , $\xi_{м.л.}$, ξ_n – степень извилистости или пережатости каналов межмолекулярных пор основного элемента, межмолекулярных пор примесей и межгранулярных пор; η_m , $\eta_{мл}$, η_n , η_t – соотношение площади фотонных оболочек электрона S_ϕ и сечений межмолекулярных пор в блоке (S_m), в примесях ($S_{м.л.}$), межгранулярных пор (S_n) и трещин (S_t) или просветлость соответствующих пор для электронов:

$$\eta_m = \frac{S_\phi}{S_m}; \eta_{мл} = \frac{S_\phi}{S_{мл}}; \eta_n = \frac{S_\phi}{S_n}; \eta_t = \frac{S_\phi}{S_t}.$$

Анализ уравнения (7.108) показывает, что на электропроводность вещества наибольшее влияние оказывает наличие свободных каналов для движения электронов проводимости, так как $\rho_{э.ж} \ll \rho_{в}, \rho_{ж||}, \rho_{ж\perp}, \rho_{пр}$, степень извилистости или непрерывности (пережатости) (ξ) каналов, заполненных электронной жидкостью, параметр η , характеризующий просветлость каналов для электронов, и структурный параметр β кристаллической решетки основного вещества и примесей.

В каких диапазонах изменяются параметры ξ , η и β ?

Извилистость каналов разной категории проводимости обусловлена размерами атомов основного вещества и примесей, зерен скелета и длиной трещин.

Так, параметр $\xi_m = \frac{1}{d_{ат.в}}, \xi_{м.л.} = \frac{1}{d_{ат.лр}}; \xi_n = \frac{1}{d_{зер.}}$ и $\xi_t = \frac{1}{l_{тр.}}$.

Если принять, что диаметры атомов основного вещества и примесей ($d_{ат.в}; d_{ат.лр}$) в среднем равны $\sim 3 \cdot 10^{-10}$ м, то

$$\xi_m = \xi_{м.л.} = \frac{1}{3 \cdot 10^{-10}} = 3,3 \cdot 10^9.$$

Если вещество представлено отдельными зёрнами, то, по аналогии с горными породами, можно принять диапазон изменения диаметра зёрен $d_{зер} = (10^{-6} \div 10^{-3})$ м, и, следовательно, $\xi_n = \frac{1}{d_{зер}} = 10^6 \div 10^3$.

Длину трещин можно принять от 1 мм до 1 м и тогда $\xi_t = \frac{1}{l_{тр}} = 10^3 \div 1$.

С понижением температуры будет более упорядоченное и устойчивое состояние атомов в кристаллической решетке, так как снижаются их колебания около состояния равновесия, поэтому извилистость межмолекулярных каналов кристаллической решетки будет уменьшаться наиболее вероятно по формуле

$$\xi_m = \delta_m \cdot T, \quad (7.109)$$

где δ – коэффициент пропорциональности.

Из формулы (7.109) следует, что для межмолекулярных пор

$$\delta_m = \frac{\xi_m}{T} = \frac{3,3 \cdot 10^9}{273} = 1,208 \cdot 10^7 \frac{1}{\text{м} \cdot \text{К}}. \quad (7.110)$$

Таким образом, за счет упорядоченности колебания атомов в кристаллической решетке основного элемента и примесей, извилистость межмолекулярных каналов снижается с $3,3 \cdot 10^9$ при $T = 273^\circ\text{K}$ до $1,208 \cdot 10^7$ при $T = 1^\circ\text{K}$.

Для межзерновой и трещинной пористости фактор влияния температуры на величину извилистости каналов оказывает существенно меньшее влияние и параметры δ_n и δ_m соответственно будут равны:

$$\delta_n = \frac{\xi_n}{T} = \frac{10^6}{273} \div \frac{10^3}{273} = 3,66 \cdot 10^3 \div 3,66,$$

$$\delta_n = \frac{\xi_n}{T} = \frac{10^3}{273} \div \frac{1}{273} = 3,66 \div 3,66 \cdot 10^{-3}.$$

Для расчета параметров η_m , $\eta_{m\pi}$, η_n , η_t необходимо оценить вероятный диапазон изменения сечения межмолекулярных пор и трещин, а также диапазон изменения площади фотонных оболочек вокруг электрона проводимости, т. е. размера электрона с учетом влияния внешних условий.

В зависимости от характера упаковки атомов в кристаллической структуре вещества радиус межмолекулярных пор, по которым возможно перемещение электронов проводимости, может изменяться в широком диапазоне от $0,41r_{am}$ практически до нуля. При благоприятных условиях кубической упаковки атомов $r_{m\pi\max} = 0,41r_{am}$. Можно принять, что в нормальных условиях ($T = 273^\circ\text{K}$) радиус электронов проводимости близок к минимальному размеру межмолекулярных пор, т. е. $\eta_m = 1$, а зависимость параметра η_m от температуры описывается функцией

$$\eta_m = \alpha_m T^5, \quad (7.111)$$

что в общем согласуется с формулой (7.37) Блоха – Грюнайзера для электрического сопротивления идеальной решетки металла. Здесь α_m – коэффициент пропорциональности, характеризующий величину параметра η_m при температуре 1°K , при этом:

$$\alpha_m = \frac{\eta_m}{T^5} = \frac{1}{273^5} = \frac{1}{1,516 \cdot 10^{12}} = 6,6 \cdot 10^{-13} \frac{1}{K^5},$$

В температурных условиях, близких к абсолютному нулю ($T = 1^\circ\text{K}$), межмолекулярные поры будут практически освобождены от фотонных оболочек электронов ионов кристаллической решетки и их максимальный размер можно принять $0,41r_{am}$, а радиус электрона практически без фотонных оболочек на один-два порядка меньше радиуса ядра, т. е. $r_e = (10^{-17} \div 10^{-16})$ м. Тогда

$$\eta_{m\min} = \frac{(10^{-17})^2}{0,41^2 (10^{-10})^2} = 5,95 \cdot 10^{-14}; \quad \eta_{m\max} = \frac{(10^{-16})^2}{0,41 (10^{-10})^2} = 5,95 \cdot 10^{-12};$$

Среднее значение из этих величин дает $\eta_m = 5,95 \cdot 10^{-13} = \alpha_m$, что хорошо согласуется с величиной α_m , рассчитанной первым способом. При дальнейших расчетах примем значение $\alpha_m = 6,6 \cdot 10^{-13}$.

В чем физический смысл активного влияния температуры на параметр η_m ? Он определяется с одной стороны существенным уменьшением диаметров

электронов проводимости при снижении температуры за счет излучения вращающихся вокруг электронов проводимости фотонов и с другой стороны – изменением размеров межмолекулярных пор, каналов проводимости электрического тока так же за счет излучения фотонов с электронов, вращающихся вокруг ядер атомов и ионов кристалла. Таким образом, можно однозначно утверждать, что размер электрона не является постоянным, а зависит от температуры, причем, чем выше температура, тем больше диаметр электрона за счет увеличивающегося количества вращающихся вокруг электрона фотонов. Если исходить из условия, что радиус электрона при $T = 1^\circ\text{K}$ составляет $5 \cdot 10^{-17}$ м, а радиус межгранулярных пор изменяется в пределах $0,41r_{\text{зерен}}$, т. е. $r_{\text{пор}} = 0,41(10^{-6} \div 10^{-3})$ м, то для межгранулярных пор величина

$$\alpha_n = \frac{5^2(10^{-17})^2}{0,41^2(10^{-6})^2} \div \frac{5^2(10^{-17})^2}{0,41^2(10^{-3})^2} = 1,49 \cdot 10^{-20} \div 1,49 \cdot 10^{-26}.$$

Как видно, параметр α_n существенно меньше параметра α_m и это свидетельствует о том, что при наличии вакуума в межгранулярных порах электросопротивление вещества будет резко снижаться и обуславливаться в основном электропроводностью межгранулярных пор, так как размер их значительно больше, чем межмолекулярных пор в веществе.

Для трещин, раскрытость которых обычно сопоставила с величиной межгранулярных пор, можно принять $\alpha_m \cong 1,49 \cdot 10^{-24}$. Таким образом, используя зависимость (7.111) и для межгранулярных, и для трещинных пор, можно оценить величины η_n , η_m для $T = 273^\circ\text{K}$, т. е.

$$\eta_n = (1,49 \cdot 10^{-20} \div 1,49 \cdot 10^{-26}) 273^5 = 2,26 \cdot 10^{-8} \div 2,26 \cdot 10^{-14}$$

$$\eta_m = 1,49 \cdot 10^{-24} \cdot 273^5 = 2,26 \cdot 10^{-12}.$$

Как отмечено выше, на электропроводность определенное влияние оказывает структура кристаллической решетки, т. е. параметр β . Это наглядно подтверждается сдвигом кривой зависимости электрического сопротивления от температуры металлов при температурах фазовых переходов (рис. 7.18) по данным [31]. Анализ величин средних значений электрических сопротивлений металлов, кристаллизующихся в различных сингониях, по данным [31], показывает, что минимальное среднее значение электросопротивления ($\rho \approx 5 \cdot 10^{-4}$ Ом·м) характерно для гранецентрированной кубической сингонии (ГЦК), для которой при $T = 273^\circ\text{K}$ предлагается принять $\beta = 1$. Относительно ГЦК сингонии в соответствии со средними значениями электросопротивлений можно принять для:

- тетрагональной сингонии (ТЕТ) – $\beta = 2$;
- объемноцентрированной кубической сингонии (ОЦК) – $\beta = 3$;
- кубической сингонии (КУБ), простой кубической сингонии (ПК), гексагональной (ГЕК) – $\beta = 10$;
- ромбоэдрической (РМЭ) – $\beta = 15$.

Для обоснования параметра β для полупроводников необходимо сопоставить удельное электрическое сопротивление алмаза ($\rho = 10^{12} \div 10^{14}$ Ом·м, для расче-

тов можно принять среднее значение $\rho = 10^{13}$ Ом·м) и среднее значение удельного электрического сопротивления металлов гранецентрированной кубической сингонии $\rho = 5 \cdot 10^{-4}$ Ом·м. Таким образом, параметр β для полупроводников равен:

$$\beta_{n,n} = \frac{10^{13}}{5 \cdot 10^{-4}} = 2 \cdot 10^{16} \text{ при } T = 273 \text{ °K.}$$

На величину структурного показателя полупроводников существенное влияние оказывает температура. По аналогии с формулой (7.37) Блоха – Грюнайзена для полупроводников примем зависимость:

$$\beta_{n,n} = \frac{\gamma_{n,n}}{T^6}. \quad (7.112)$$

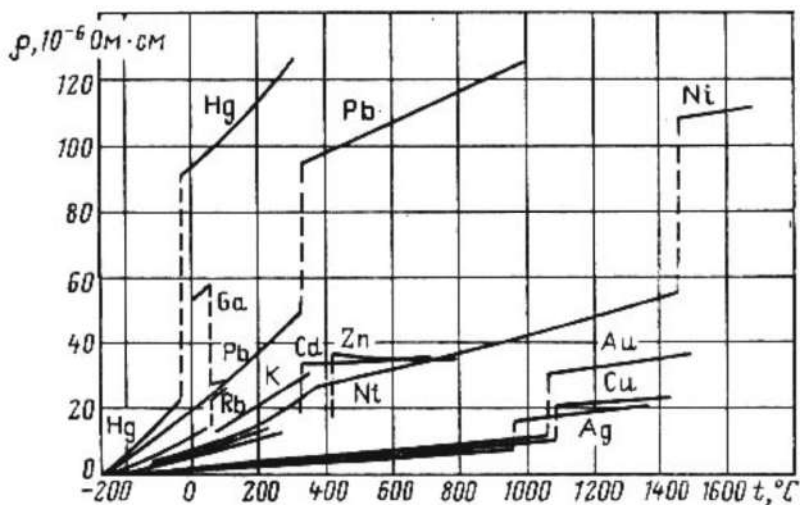


Рис. 7.18. Изменение сопротивления с температурой некоторых металлов в твердом и жидком состояниях

Таким образом, для полупроводников коэффициент $\gamma_{n,n}$, характеризующий величину структурного параметра $\beta_{n,n}$ при $T = 1^\circ\text{K}$, будет равен

$$\gamma_{n,n} = 2 \cdot 10^{16} \cdot T^6 = 2 \cdot 10^{16} \cdot 273^6 = 8,28 \cdot 10^{30} \text{ K}^6.$$

Для металлов параметр кристаллической решетки β для разных сингоний изменяется в небольших пределах. Для основных кристаллических структур (ГЦК, ОЦК, ТЕТ, ГЕК) параметр $\beta = 1 \div 10$, а при фазовых переходах сохраняется параллельность кривых $\rho = f(T)$ (рис. 7.18). Все это дает основание считать, что для металлов зависимость параметра β от температуры незначительна и влияние температуры на параметр β в первом приближении можно не учитывать.

При изучении различных материалов на предмет сверхпроводимости, как правило, их образцы не характеризуются явно выраженной кавернозной и трещинной пористостью (т. е. можно принять $K_{нк} = K_{нт} = 0$), поэтому выражение (7.108) для этого случая преобразуется к виду

$$\sigma = C_{np}^2 \left[\frac{1}{\rho_{\text{э.жс.}} \cdot \xi_{\text{мп}} \cdot \eta_{\text{мп}} \cdot \beta_{\text{np}}} + \frac{1}{\rho_{\text{np}}} \right] + (1 - C_{np}) \cdot K_{\text{пб}}^2 \left[\frac{K_{\text{э.жс.п.}}^2}{\rho_{\text{э.жс.}} \cdot \xi_{\text{п}} \cdot \eta_{\text{п}}} + \frac{K_{\text{вп}}^2}{\rho_{\text{в}}} + \frac{K_{\text{пс}}^2}{\rho_{\text{пс}}} \right] + \frac{(1 - C_{np} - K_{\text{пб}}) K_{\text{пм}}^2 \cdot K_{\text{эжс.м}}^2}{\rho_{\text{эжс.}} \cdot \xi_{\text{м}} \cdot \eta_{\text{м}} \cdot \beta_{\text{м}}}, \quad (7.113)$$

Более того, исследуемые образцы, как правило, являются сухими и поры их не насыщены водным раствором ($K_{\text{вп}} = 0$) или углеводородами ($K_{\text{пс}} = 0$), поэтому последнее уравнение упрощается к виду

$$\sigma = C_{np}^2 \left[\frac{1}{\rho_{\text{э.жс.}} \cdot \xi_{\text{мп}} \cdot \eta_{\text{мп}} \cdot \beta_{\text{np}}} + \frac{1}{\rho_{\text{np}}} \right] + (1 - C_{np}) \cdot K_{\text{пб}}^2 \left[\frac{K_{\text{э.жс.п.}}^2}{\rho_{\text{э.жс.}} \cdot \xi_{\text{п}} \cdot \eta_{\text{п}}} \right] + \frac{(1 - C_{np} - K_{\text{пб}}) K_{\text{пм}}^2 \cdot K_{\text{эжс.м}}^2}{\rho_{\text{эжс.}} \cdot \xi_{\text{м}} \cdot \eta_{\text{м}} \cdot \beta_{\text{м}}}, \quad (7.114)$$

Если вещество однородное, т. е. не содержит примесей ($C_{np} = 0$), то:

$$\sigma = \frac{K_{\text{пб}}^2 \cdot K_{\text{э.жс.п.}}^2}{\rho_{\text{э.жс.}} \cdot \xi_{\text{п}} \cdot \eta_{\text{п}}} + \frac{(1 - K_{\text{пб}}) K_{\text{пм}}^2 \cdot K_{\text{эжс.м}}^2}{\rho_{\text{э.жс.}} \cdot \xi_{\text{м}} \cdot \eta_{\text{м}} \cdot \beta_{\text{м}}}. \quad (7.115)$$

Последнее уравнение будет справедливо только в том случае, если не только в межмолекулярных, но и в межгранулярных порах будет «электронная жидкость» с сопротивлением $\rho_{\text{э.жс.}}$. Однако это возможно только в условиях глубокого вакуума, когда из межгранулярных пор полностью удалены не только жидкие компоненты – поровая вода и углеводы – нефть и газ, но и воздух. Наличие даже молекул воздуха в межгранулярных порах будет существенно сдерживать движение электронов, и они будут двигаться преимущественно по межмолекулярным порам. Если же создать глубокий вакуум и откачать из межгранулярных пор образца (вещества) воздух, то резко увеличится его проводимость и он при значительно более высоких температурах проявит состояние сверхпроводимости. В обычных условиях, когда межгранулярные поры заполнены воздухом ($K_{\text{эжс.п}} = 0$), а межмолекулярные полностью «электронной жидкостью» ($K_{\text{эжс.м}} = 1$) электропроводность образца обусловлена только межмолекулярными порами и описывается простым выражением:

$$\sigma = \frac{(1 - K_{\text{пб}}) K_{\text{пм}}^2}{\rho_{\text{э.жс.}} \cdot \xi_{\text{м}} \cdot \eta_{\text{м}} \cdot \beta_{\text{м}}}. \quad (7.116)$$

С использованием зависимостей параметров $\rho_{\text{э.жс.}}$, $\xi_{\text{м}}$, $\eta_{\text{м}}$ и $\beta_{\text{м}}$ от температуры уравнение (7.116) для кристаллических структур металлов принимает вид

$$\sigma = \frac{(1 - K_{\text{пб}}) K_{\text{пм}}^2 \cdot n_0 (eEr + \kappa T) 4\pi \epsilon_0 r \cdot c \cdot l}{U \cdot Z \cdot e \cdot \alpha_{\text{м}} \cdot \delta_{\text{м}} \cdot \beta_{\text{мет}} \cdot T^6}. \quad (7.117)$$

После подстановки исходных данных $\epsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12}$ ф/м; $c = 3 \cdot 10^8$ м/с; $e = 1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл; $\alpha_{\text{м}} = 6,6 \cdot 10^{-13}$ °K⁻⁵; $\delta_{\text{м}} = 1,208 \cdot 10^7$ м⁻¹ °K⁻¹, уравнение (7.117) для электропроводности металлов преобразуется к виду

$$\sigma = \frac{(1 - K_{n\bar{o}})K_{nm}^2 \cdot n_0 (eEr + \kappa T)r \cdot l}{U \cdot Z \cdot T^6 \cdot \beta_{мет}} \cdot 2,61 \cdot 10^{22}. \quad (7.118)$$

Таким образом, расчеты по формуле (7.118), например, для металла серебра ($Z = 47$, $n_0 = 5,86 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$, $r = 1,44 \cdot 10^{-10} \text{ м}$, $\beta_{мет} = 1$ (с учетом того, что кристаллическая структура серебра имеет ГЦК сингонию), принимая $K_{n\bar{o}} = 0$; $K_{nm} = 0,4$; $l = 1 \text{ м}$; $U = 1 \text{ В}$; $E = 1 \text{ В/м}$, дают следующие результаты.

Как видно, рассчитанное значение удельного электрического сопротивления при температуре $T = 273^\circ \text{К}$, $\rho = 1,46 \cdot 10^{-4} \text{ Ом}\cdot\text{м}$, а по табличным данным [31] удельное электрическое сопротивление серебра при этой температуре $\rho = 1,49 \cdot 10^{-4} \text{ Ом}\cdot\text{м}$, т. е. величины практически идеально совпадают. С понижением температуры рассчитанные значения удельного электрического сопротивления существенно снижаются, что соответствует экспериментальным данным.

Таблица 7.11

$T, ^\circ\text{К}$	$\sigma, \frac{1}{\text{Ом} \cdot \text{м}}$	$\rho, \text{Ом}\cdot\text{м}$
300	$4,26 \cdot 10^3$	$2,35 \cdot 10^{-4}$
273	$6,82 \cdot 10^3$	$1,46 \cdot 10^{-4}$
200	$3,23 \cdot 10^4$	$3,09 \cdot 10^{-5}$
100	$1,035 \cdot 10^6$	$9,66 \cdot 10^{-7}$
50	$3,312 \cdot 10^7$	$3,02 \cdot 10^{-8}$
25	$1,06 \cdot 10^9$	$9,44 \cdot 10^{-10}$
10	$1,035 \cdot 10^{11}$	$9,66 \cdot 10^{-12}$
5	$3,31 \cdot 10^{12}$	$3,02 \cdot 10^{-13}$
1	$1,035 \cdot 10^{16}$	$9,66 \cdot 10^{-17}$
0,5	$3,31 \cdot 10^{17}$	$3,02 \cdot 10^{-18}$
0,1	$1,035 \cdot 10^{21}$	$9,66 \cdot 10^{-22}$

Для полупроводников уравнение электропроводности принимает вид

$$\sigma_{nn} = \frac{(1 - K_{n\bar{o}})K_{nm}^2}{\rho_{э.ж.} \cdot \xi_m \cdot \eta_m \cdot \beta_{n.l}} = \frac{(1 - K_{n\bar{o}})K_{nm}^2 \cdot n_0 (eEr + \kappa T)4\pi\epsilon_0 r \cdot cl}{U \cdot Z \cdot e \cdot \alpha_m \cdot \delta_m \cdot \gamma_{n.l}}. \quad (7.119)$$

После подстановки исходных параметров, в том числе $\alpha_m = 6,6 \cdot 10^{-13} \text{ К}^{-5}$; $\delta_m = 1,208 \cdot 10^7$; $\gamma_{nn} = 8,28 \cdot 10^{30} \text{ К}^6$.

$$\sigma_{nn} = 3,157 \cdot 10^{-9} \cdot \frac{(1 - K_{n\bar{o}})K_{nm}^2 \cdot n_0 (eEr + \kappa T)r \cdot l}{U \cdot Z}. \quad (7.120)$$

Расчеты по формуле (7.120) для полупроводников, например для кремния ($Z = 14$, $n_0 = 5,79 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$, $r = 1,18 \cdot 10^{-10} \text{ м}$), принимая те же условия, что и для металлов, т. е. $K_{n\bar{o}} = 0$; $K_{nm} = 0,4$; $l = 1 \text{ м}$; $U = 1 \text{ В}$; $E = 1 \text{ В/м}$, дают следующие результаты:

Таблица 7.12

$T, ^\circ\text{K}$	$\sigma, \frac{1}{\text{Ом} \cdot \text{м}}$	$\rho, \text{Ом} \cdot \text{м}$
300	$1,02 \cdot 10^{-12}$	$9,8 \cdot 10^{11}$
273	$9,28 \cdot 10^{-13}$	$1,077 \cdot 10^{12}$
200	$6,8 \cdot 10^{-13}$	$1,47 \cdot 10^{12}$
100	$3,4 \cdot 10^{-13}$	$2,94 \cdot 10^{12}$
50	$1,7 \cdot 10^{-13}$	$5,88 \cdot 10^{12}$
25	$8,5 \cdot 10^{-14}$	$1,176 \cdot 10^{13}$
10	$3,4 \cdot 10^{-14}$	$2,94 \cdot 10^{13}$
5	$1,7 \cdot 10^{-14}$	$5,88 \cdot 10^{13}$
1	$3,4 \cdot 10^{-15}$	$2,94 \cdot 10^{14}$
0,5	$1,7 \cdot 10^{-15}$	$5,88 \cdot 10^{14}$
0,1	$3,4 \cdot 10^{-16}$	$2,94 \cdot 10^{15}$

Как видно, расчетные данные удельного электрического сопротивления соответствуют как по величинам, так и по характеру зависимости удельного электрического сопротивления от температуры экспериментальным данным для полупроводников.

Если изготовить методом спекания из металлического порошка в виде гранул по технологии порошковой металлургии образцы, которые будут содержать как межмолекулярные поры в гранулах, так и межгранулярные поры, и предположить, что по части межгранулярных пор возможно движение электронов проводимости, то уравнение электропроводности такого образца в соответствии с формулой (7.108) будет иметь вид

$$\sigma = \frac{K_{нб}^2 \cdot K_{э.ж.п.}^2}{\rho_{э.ж.} \cdot \xi_n \cdot \eta_n} + \frac{(1 - K_{нб})K_{нм}^2 \cdot K_{э.ж.м}^2}{\rho_{э.ж.} \cdot \xi_m \cdot \eta_m \cdot \beta_{мет}} = \frac{1}{\rho_{э.ж.}} \left[\frac{K_{нб}^2 \cdot K_{э.ж.п.}^2}{\xi_n \cdot \eta_n} + \frac{(1 - K_{нб})K_{нм}^2 \cdot K_{э.ж.м}^2}{\xi_m \cdot \eta_m \cdot \beta_{мет}} \right]. \quad (7.121)$$

Если подставить выражение (7.107) для $\rho_{э.ж.}$, то уравнение (7.121) преобразуется к виду:

$$\sigma = \frac{n_0 (eEr + \kappa T) 4\pi \epsilon_0 r \cdot c \cdot l}{U \cdot Z \cdot e} \left[\frac{K_{нб}^2 \cdot K_{э.ж.п.}^2}{\xi_n \cdot \eta_n} + \frac{(1 - K_{нб})K_{нм}^2 \cdot K_{э.ж.м}^2}{\xi_m \cdot \eta_m \cdot \beta_{мет}} \right]. \quad (7.122)$$

При расчетах по формуле (7.122) принимаем $K_{нб} = 0,3$; $K_{нм} = 0,4$; $K_{э.ж.м} = 1$ (коэффициент заполнения электронной жидкостью межмолекулярных пор), $K_{э.ж.п.} = 1 \cdot 10^{-6} \div 5 \cdot 10^{-1}$ (коэффициент заполнения электронной жидкостью межгранулярных пор); $\xi_n = \delta_n \cdot T = 3,66 \cdot 10^2 T \left(\frac{1}{\text{м} \cdot \text{К}} \right)$; $\xi_m = \delta_m \cdot T = 1,208 \cdot 10^7 T \left(\frac{1}{\text{м} \cdot \text{К}} \right)$; $\eta_n = \alpha_n \cdot T^5 = 1,49 \cdot 10^{-20} T^5$; $\eta_m = \alpha_m \cdot T^5 = 6,6 \cdot 10^{-13} T^5$; $\beta_{мет} = 5$ (среднее значение для всех сингоний кристаллических структур металлов); $n_0 = 6 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$;

$U = 1$ В; $l = 1$ м; $E = 1$ В/м; $Z = 30$; $T = (300 \div 0,1)^\circ\text{К}$. После подстановки исходных данных в уравнение (7.122)

$$\sigma = \frac{6 \cdot 10^{28} (1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 1,3 \cdot 10^{-10} + 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot T) 4 \cdot 3,14 \cdot 8,85 \cdot 10^{-12} \cdot 1,3 \cdot 10^{-10} \cdot 3 \cdot 10^8 \cdot 1}{1 \cdot 30 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}} \times$$

$$\times \left(\frac{0,3^2 \cdot K_{\text{э.ж.п}}^2}{3,66 \cdot 10^2 \cdot T \cdot 1,49 \cdot 10^{-20} \cdot T^5} + \frac{0,7 \cdot 0,4^2 \cdot 1^2}{1,208 \cdot 10^7 \cdot T \cdot 6,6 \cdot 10^{-13} \cdot T^5 \cdot 5} \right) = \frac{7,478 \cdot 10^{11}}{T^5} \times$$

$$\times (1,65 \cdot 10^{16} \cdot K_{\text{э.ж.п.}}^2 + 2,805 \cdot 10^3) \quad (7.123)$$

Как видно, первое слагаемое в скобках, даже при высоких температурах $T = 300$ К и низких $K_{\text{э.ж.п}} \geq 1 \cdot 10^{-5}$, существенно превалирует над вторым, т. е. при небольшой доле заполнения межгранулярных пор электронной жидкостью ее роль в электропроводности вещества становится главенствующей и только лишь в условиях очень низкого процента ($< 0,001\%$) заполнения межгранулярных пор электронной жидкостью, т. е. при $K_{\text{э.ж.п}} < 10^{-5}$ первое слагаемое становится сопоставимо со вторым. По расчетным данным получены следующие результаты (табл. 7.13).

Высокотемпературные сверхпроводники в своем составе имеют элементы металлов и керамику и кроме межмолекулярной пористости характеризуются также межгранулярной пористостью. Причем для высокотемпературных сверхпроводников на основе керамики многими исследователями отмечается связь между наличием межгранулярных пор повышенного размера и повышением температуры перехода в сверхпроводящее состояние. Вероятно, это объясняется тем, что некоторая доля межгранулярных пор доступна для свободного движения электронов проводимости. В связи с этим рассмотрим уравнение проводимости вещества при наличии элементов металлов и элементов полупроводников с одной стороны и наличии межмолекулярных и межгранулярных пор с другой стороны, причем межгранулярные поры в основном насыщены воздухом и частично электронной жидкостью. В соответствии с уравнением (7.108) получим

$$\sigma = C_{np}^2 \left(\frac{1}{\rho_{\text{э.ж}} \cdot \xi_{\text{мп}} \cdot \eta_{\text{мп}} \cdot \beta_{np}} + \frac{1}{\rho_{np}} \right) + \frac{(1 - C_{np}) K_{\text{пб}}^2 \cdot K_{\text{э.ж.п.}}^2}{\rho_{\text{э.ж}} \cdot \xi_n \cdot \eta_n} +$$

$$+ \frac{(1 - C_{np} - K_{\text{пб}}) K_{\text{пм}}^2 \cdot K_{\text{э.ж.м}}^2}{\rho_{\text{э.ж}} \cdot \xi_m \cdot \eta_m \cdot \beta_{\text{мет}}} = \frac{n_0 (eEr + kT) 4\pi \varepsilon_0 r \cdot c \cdot l}{U \cdot Z \cdot e} \left[C_{np}^2 \left(\frac{1}{\xi_{\text{мп}} \cdot \eta_{\text{мп}} \cdot \beta_{np}} + \frac{1}{\rho_{np}} \right) + \right.$$

$$\left. + \frac{(1 - C_{np}) K_{\text{пб}}^2 \cdot K_{\text{э.ж.п.}}^2}{\xi_n \cdot \eta_n} + \frac{(1 - C_{np} - K_{\text{пб}}) K_{\text{пм}}^2 \cdot K_{\text{э.ж.м}}^2}{\xi_m \cdot \eta_m \cdot \beta_{\text{мет}}} \right] \quad (7.124)$$

При расчетах по формуле (7.124) принимаем, что межгранулярная пористость блока вещества ($K_{\text{пб}}$) как в металлическом веществе ($K_{\text{пб.м.}}$), так и в веществе полупроводника ($K_{\text{пб.п.п.}}$), а также пористость межмолекулярных пустот ($K_{\text{п.м}}$) в металлическом веществе ($K_{\text{п.м.м}}$) и в веществе полупроводника ($K_{\text{п.м.п.п.}}$) соответственно одинаковы, т. е. $K_{\text{пб.м}} = K_{\text{пб.п.п.}} = K_{\text{пб}}$; $K_{\text{п.м.п.п.}} = K_{\text{п.м}}$, при этом $K_{\text{пб}} = 0,3$; $K_{\text{п.м}} = 0,4$; $K_{\text{э.ж.м}} = 1$; $K_{\text{э.ж.п}} = (1 \cdot 10^{-6} \div 5 \cdot 10^{-1})$; $C_{np} = 0,4$; $\xi_n =$

$$\begin{aligned}
&= \delta_n \cdot T = 3,66 \cdot 10^2 T \left(\frac{1}{\text{М} \cdot \text{К}} \right); \quad \xi_m = 1,208 \cdot 10^7 T \left(\frac{1}{\text{М} \cdot \text{К}} \right); \quad \xi_{m.n.} = \xi_m; \quad \eta_n = \alpha_n \cdot T^5 = \\
&= 1,49 \cdot 10^{-20} \cdot T^5; \quad \eta_m = \eta_{mn} = \alpha_n \cdot T^5 = 6,6 \cdot 10^{-13} \cdot T^5; \quad \beta_{мет} = 5; \quad \beta_{np} = \beta_{nn} = \\
&= \frac{\gamma_{n.n.}}{T^6} = \frac{8,28 \cdot 10^{30}}{T^6} \cdot (\text{°К}^6); \quad \beta_{np} = 10^{13} \text{ Ом} \cdot \text{м}; \quad r = 1,3 \cdot 10^{-10} \text{ м}; \quad n_0 = 6 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}; \quad Z = 30; \\
&U = 1 \text{ В}; \quad l = 1 \text{ м}; \quad E = 1 \text{ В/м}; \quad T = (300 \div 0,1)^\circ \text{К}.
\end{aligned}$$

После подстановки исходных данных в уравнение (7.124) получили

$$\begin{aligned}
\sigma &= \frac{6 \cdot 10^{28} \cdot (1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 1 \cdot 1,13 \cdot 10^{-10} + 1,38 \cdot 10^{-23} T) \cdot 4 \cdot 3,14 \cdot 8,85 \cdot 10^{-12} \cdot 1,3 \cdot 10^{-12} \cdot 3 \cdot 10^8}{1 \cdot 30 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}} \times \\
&\times \left[0,4^2 \left(\frac{1 \cdot T^6}{1,208 \cdot 10^7 \cdot T \cdot 6,6 \cdot 10^{-13} \cdot T^5 \cdot 8,28 \cdot 10^{30}} + \frac{1}{10^{13}} \right) + \frac{0,6 \cdot 0,3^2 K_{\text{э.ж.н.}}^2}{3,66 \cdot 10^2 T \cdot 1,49 \cdot 10^{-20} \cdot T^5} + \right. \\
&\quad \left. + \frac{0,3 \cdot 0,4^2 \cdot 1}{1,208 \cdot 10^7 \cdot T \cdot 6,6 \cdot 10^{-13} \cdot T^5 \cdot 5} \right] = \quad (7.125) \\
&= 7,478 \cdot 10^{11} \cdot T \left(2,42 \cdot 10^{-27} + 1,6 \cdot 10^{-14} + \frac{9,9 \cdot 10^{15} \cdot K_{\text{э.ж.н.}}^2}{T^6} + \frac{1,2 \cdot 10^3}{T^6} \right) = \\
&= 1,8 \cdot 10^{-15} T + 1,2 \cdot 10^{-2} T + \frac{7,4 \cdot 10^{27} \cdot K_{\text{э.ж.н.}}^2}{T^5} + \frac{8,97 \cdot 10^{14}}{T^5}
\end{aligned}$$

После подстановки параметров $T = (300 \div 0,1)^\circ \text{К}$. и $K_{\text{э.ж.н.}} = (1 \cdot 10^{-6} \div 5 \cdot 10^{-1})$ получены следующие результаты (табл. 7.14). Сравнение данных таблиц 7.14 и 7.13 показывает, что замена 40% металла на керамику (полупроводник) с высоким электрическим сопротивлением несущественно (менее, чем в 2 раза) увеличивает электрическое сопротивление образца при тех же параметрах T и $K_{\text{э.ж.н.}}$ и именно частичное заполнение межгранулярных пор электронной жидкостью приводит к снижению электрического сопротивления. Так, например, при $T = 100^\circ \text{К}$ результаты расчета электросопротивления свидетельствуют о явлении сверхпроводимости при $K_{\text{э.ж.н.}} > 1 \cdot 10^{-1}$, т. е. всего-навсего при более чем 10% заполнении межгранулярных пор электронной жидкостью.

Наличие трещинной пористости вдоль распространения электрического тока, при условии, что трещины частично заполнены электронной жидкостью, по аналогии с исследованиями горных пород методами промысловой геофизики, будет еще более интенсивно снижать электрическое сопротивление вещества, так как в трещинах еще более снижается степень извилистости канала проводимости электрического тока. Общее уравнение проводимости при наличии межмолекулярной, межгранулярной и трещинной пористости вдоль распространения тока и частичном заполнении трещин и межгранулярных пор электронной жидкостью в соответствии с (7.108) принимает вид

$$\sigma = \frac{2K_{nm} \cdot K_{\text{э.ж.н.}}^2}{3\rho_{\text{э.ж.}} \cdot \xi_m \cdot \eta_m} + \frac{3 - 2K_{nm}}{3 - K_{nm}}, \quad (7.126)$$

$$\frac{1}{\rho_{\text{э.ж.}}} \left[\frac{C_{np}^2 \left(\frac{1}{\xi_{mn} \cdot \eta_{mn} \cdot \beta_{np}} + \frac{1}{\rho_{np}} \right) + (1 - C_{np}) \frac{K_{пб}^2 \cdot K_{\text{э.ж.н.}}^2}{\xi_n \cdot \eta_n}}{1 - C_{np} - K_{пб}} \cdot \frac{K_{nm}^2 \cdot K_{\text{э.ж.н.}}^2}{\xi_m \cdot \eta_m \cdot \beta_{мет}} \right]$$

Таблица 7.13

T, K	$K_{элет} = 1 \cdot 10^{-6}$		$K_{элет} = 1 \cdot 10^{-5}$		$K_{элет} = 1 \cdot 10^{-4}$		$K_{элет} = 1 \cdot 10^{-3}$		$K_{элет} = 1 \cdot 10^{-2}$		$K_{элет} = 1 \cdot 10^{-1}$		$K_{элет} = 5 \cdot 10^{-1}$	
	σ , 1/Ом·м	ρ , Ом · м	σ , 1/Ом·м	ρ , Ом · м	σ , 1/Ом·м	ρ , Ом · м	σ , 1/Ом·м	ρ , Ом · м	σ , 1/Ом·м	ρ , Ом · м	σ , 1/Ом·м	ρ , Ом · м	σ , 1/Ом·м	ρ , Ом · м
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
300	$5,94 \cdot 10^3$	$1,68 \cdot 10^{-4}$	$5,087 \cdot 10^5$	$1,96 \cdot 10^{-6}$	$5,077 \cdot 10^7$	$1,97 \cdot 10^{-8}$	$5,077 \cdot 10^9$	$1,97 \cdot 10^{-10}$	$5,077 \cdot 10^{11}$	$1,97 \cdot 10^{-12}$	$5,077 \cdot 10^{13}$	$1,97 \cdot 10^{-14}$	$1,27 \cdot 10^{15}$	$7,87 \cdot 10^{-16}$
273	$9,52 \cdot 10^3$	$1,05 \cdot 10^{-4}$	$8,15 \cdot 10^5$	$1,22 \cdot 10^{-6}$	$8,14 \cdot 10^7$	$1,23 \cdot 10^{-8}$	$8,14 \cdot 10^9$	$1,23 \cdot 10^{-10}$	$8,14 \cdot 10^{11}$	$1,23 \cdot 10^{-12}$	$8,14 \cdot 10^{13}$	$1,23 \cdot 10^{-14}$	$2,035 \cdot 10^{15}$	$4,91 \cdot 10^{-16}$
200	$4,51 \cdot 10^4$	$2,21 \cdot 10^{-5}$	$3,86 \cdot 10^6$	$2,59 \cdot 10^{-7}$	$3,85 \cdot 10^8$	$2,6 \cdot 10^{-9}$	$3,85 \cdot 10^{10}$	$2,6 \cdot 10^{-11}$	$3,85 \cdot 10^{12}$	$2,6 \cdot 10^{-13}$	$3,85 \cdot 10^{14}$	$2,6 \cdot 10^{-15}$	$9,62 \cdot 10^{15}$	$1,27 \cdot 10^{-16}$
100	$1,44 \cdot 10^6$	$6,94 \cdot 0^{-7}$	$1,24 \cdot 10^8$	$8,09 \cdot 10^{-9}$	$1,23 \cdot 10^{10}$	$8,13 \cdot 10^{-11}$	$1,23 \cdot 10^{12}$	$8,13 \cdot 10^{-13}$	$1,23 \cdot 10^{14}$	$8,13 \cdot 10^{-15}$	$1,23 \cdot 10^{16}$	$8,13 \cdot 10^{-17}$	$3,07 \cdot 10^{17}$	$3,25 \cdot 10^{-18}$
50	$4,62 \cdot 10^7$	$2,16 \cdot 10^{-8}$	$3,95 \cdot 10^9$	$2,53 \cdot 10^{-10}$	$3,95 \cdot 10^{11}$	$2,53 \cdot 10^{-12}$	$3,95 \cdot 10^{13}$	$2,53 \cdot 10^{-14}$	$3,95 \cdot 10^{15}$	$2,53 \cdot 10^{-16}$	$3,95 \cdot 10^{17}$	$2,53 \cdot 10^{-18}$	$9,87 \cdot 10^{18}$	$1,01 \cdot 10^{-19}$
25	$1,48 \cdot 10^9$	$6,76 \cdot 10^{-10}$	$1,26 \cdot 10^{11}$	$7,94 \cdot 10^{-12}$	$1,26 \cdot 10^{13}$	$7,94 \cdot 10^{-14}$	$1,26 \cdot 10^{15}$	$7,94 \cdot 10^{-16}$	$1,26 \cdot 10^{17}$	$7,94 \cdot 10^{-18}$	$1,26 \cdot 10^{19}$	$7,94 \cdot 10^{-20}$	$3,15 \cdot 10^{20}$	$3,17 \cdot 10^{-21}$
10	$1,44 \cdot 10^{11}$	$6,94 \cdot 10^{-12}$	$1,24 \cdot 10^{13}$	$8,09 \cdot 10^{-14}$	$1,23 \cdot 10^{14}$	$8,13 \cdot 10^{-15}$	$1,23 \cdot 10^{16}$	$8,13 \cdot 10^{-17}$	$1,23 \cdot 10^{19}$	$8,13 \cdot 10^{-20}$	$1,23 \cdot 10^{21}$	$8,13 \cdot 10^{-22}$	$3,07 \cdot 10^{22}$	$3,25 \cdot 10^{-23}$
5	$4,62 \cdot 10^{12}$	$2,16 \cdot 10^{-13}$	$3,95 \cdot 10^{14}$	$2,53 \cdot 10^{-15}$	$3,95 \cdot 10^{16}$	$2,53 \cdot 10^{-17}$	$3,95 \cdot 10^{18}$	$2,53 \cdot 10^{-19}$	$3,95 \cdot 10^{20}$	$2,53 \cdot 10^{-21}$	$3,95 \cdot 10^{22}$	$2,53 \cdot 10^{-23}$	$9,87 \cdot 10^{23}$	$1,01 \cdot 10^{-24}$
1	$1,44 \cdot 10^{16}$	$6,94 \cdot 10^{-17}$	$1,24 \cdot 10^{18}$	$8,09 \cdot 10^{-19}$	$1,23 \cdot 10^{19}$	$8,13 \cdot 10^{-20}$	$1,23 \cdot 10^{21}$	$8,13 \cdot 10^{-22}$	$1,23 \cdot 10^{24}$	$8,13 \cdot 10^{-25}$	$1,23 \cdot 10^{26}$	$8,13 \cdot 10^{-27}$	$3,07 \cdot 10^{27}$	$3,25 \cdot 10^{-28}$
0,5	$4,62 \cdot 10^{17}$	$2,16 \cdot 10^{-18}$	$3,95 \cdot 10^{19}$	$2,53 \cdot 10^{-20}$	$3,95 \cdot 10^{21}$	$2,53 \cdot 10^{-22}$	$3,95 \cdot 10^{23}$	$2,53 \cdot 10^{-24}$	$3,95 \cdot 10^{25}$	$2,53 \cdot 10^{-26}$	$3,95 \cdot 10^{27}$	$2,53 \cdot 10^{-28}$	$6,32 \cdot 10^{28}$	$1,58 \cdot 10^{-29}$
0,1	$1,44 \cdot 10^{21}$	$6,94 \cdot 10^{-22}$	$1,24 \cdot 10^{23}$	$8,09 \cdot 10^{-24}$	$1,23 \cdot 10^{24}$	$8,13 \cdot 10^{-25}$	$1,23 \cdot 10^{26}$	$8,13 \cdot 10^{-27}$	$1,23 \cdot 10^{29}$	$8,13 \cdot 10^{-30}$	$1,23 \cdot 10^{31}$	$8,13 \cdot 10^{-32}$	$3,07 \cdot 10^{32}$	$3,25 \cdot 10^{-33}$

Таблица 7.14

T, K	$K_{\text{элет}} = 1 \cdot 10^{-6}$		$K_{\text{элет}} = 1 \cdot 10^{-5}$		$K_{\text{элет}} = 1 \cdot 10^{-4}$		$K_{\text{элет}} = 1 \cdot 10^{-3}$		$K_{\text{элет}} = 1 \cdot 10^{-2}$		$K_{\text{элет}} = 1 \cdot 10^{-1}$		$K_{\text{элет}} = 5 \cdot 10^{-1}$	
	σ 1/Ом·м	$\rho, \text{Ом} \cdot \text{м}$	σ 1/Ом·м	$\rho, \text{Ом} \cdot \text{м}$	σ 1/Ом·м	$\rho, \text{Ом} \cdot \text{м}$	σ 1/Ом·м	$\rho, \text{Ом} \cdot \text{м}$	σ 1/Ом·м	$\rho, \text{Ом} \cdot \text{м}$	σ 1/Ом·м	$\rho, \text{Ом} \cdot \text{м}$	σ 1/Ом·м	$\rho, \text{Ом} \cdot \text{м}$
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
300	$3,42 \cdot 10^3$	$2,92 \cdot 10^{-4}$	$3,049 \cdot 10^5$	$3,28 \cdot 10^{-6}$	$3,045 \cdot 10^7$	$3,28 \cdot 10^{-8}$	$3,045 \cdot 10^9$	$3,28 \cdot 10^{-10}$	$3,045 \cdot 10^{11}$	$3,28 \cdot 10^{-12}$	$3,045 \cdot 10^{13}$	$3,28 \cdot 10^{-14}$	$3,045 \cdot 10^{15}$	$3,28 \cdot 10^{-16}$
273	$5,47 \cdot 10^3$	$1,83 \cdot 10^{-4}$	$4,89 \cdot 10^5$	$2,05 \cdot 10^{-6}$	$4,88 \cdot 10^7$	$2,05 \cdot 10^{-8}$	$4,88 \cdot 10^9$	$2,05 \cdot 10^{-10}$	$4,88 \cdot 10^{11}$	$2,05 \cdot 10^{-12}$	$4,88 \cdot 10^{13}$	$2,05 \cdot 10^{-14}$	$4,88 \cdot 10^{15}$	$2,05 \cdot 10^{-16}$
200	$2,59 \cdot 10^4$	$3,86 \cdot 10^{-5}$	$2,31 \cdot 10^6$	$4,32 \cdot 10^{-7}$	$2,31 \cdot 10^8$	$4,32 \cdot 10^{-9}$	$2,31 \cdot 10^{10}$	$4,32 \cdot 10^{-11}$	$2,31 \cdot 10^{12}$	$4,32 \cdot 10^{-13}$	$2,31 \cdot 10^{14}$	$4,32 \cdot 10^{-15}$	$2,31 \cdot 10^{16}$	$4,32 \cdot 10^{-17}$
100	$8,3 \cdot 10^5$	$1,2 \cdot 10^{-6}$	$7,4 \cdot 10^7$	$1,35 \cdot 10^{-8}$	$7,4 \cdot 10^9$	$1,35 \cdot 10^{-10}$	$7,4 \cdot 10^{11}$	$1,35 \cdot 10^{-12}$	$7,4 \cdot 10^{13}$	$1,35 \cdot 10^{-14}$	$7,4 \cdot 10^{15}$	$1,35 \cdot 10^{-16}$	$7,4 \cdot 10^{17}$	$1,35 \cdot 10^{-18}$
50	$2,66 \cdot 10^7$	$3,76 \cdot 10^{-8}$	$2,37 \cdot 10^9$	$4,22 \cdot 10^{-10}$	$2,37 \cdot 10^{11}$	$4,22 \cdot 10^{-12}$	$2,37 \cdot 10^{13}$	$4,22 \cdot 10^{-14}$	$2,37 \cdot 10^{15}$	$4,22 \cdot 10^{-16}$	$2,37 \cdot 10^{17}$	$4,22 \cdot 10^{-18}$	$2,37 \cdot 10^{19}$	$4,22 \cdot 10^{-20}$
25	$8,5 \cdot 10^8$	$1,18 \cdot 10^{-9}$	$7,58 \cdot 10^{10}$	$1,32 \cdot 10^{-11}$	$7,58 \cdot 10^{12}$	$1,32 \cdot 10^{-13}$	$7,58 \cdot 10^{14}$	$1,32 \cdot 10^{-15}$	$7,58 \cdot 10^{16}$	$1,32 \cdot 10^{-17}$	$7,58 \cdot 10^{18}$	$1,32 \cdot 10^{-19}$	$7,58 \cdot 10^{20}$	$1,32 \cdot 10^{-22}$
10	$8,30 \cdot 10^{10}$	$1,2 \cdot 10^{-11}$	$7,4 \cdot 10^{12}$	$1,35 \cdot 10^{-13}$	$7,4 \cdot 10^{14}$	$1,35 \cdot 10^{-15}$	$7,4 \cdot 10^{16}$	$1,35 \cdot 10^{-17}$	$7,4 \cdot 10^{18}$	$1,35 \cdot 10^{-19}$	$7,4 \cdot 10^{20}$	$1,35 \cdot 10^{-21}$	$7,4 \cdot 10^{22}$	$1,35 \cdot 10^{-23}$
5	$2,65 \cdot 10^{12}$	$3,78 \cdot 10^{-13}$	$2,36 \cdot 10^{14}$	$4,24 \cdot 10^{-15}$	$2,36 \cdot 10^{16}$	$4,24 \cdot 10^{-17}$	$2,36 \cdot 10^{18}$	$4,24 \cdot 10^{-19}$	$2,36 \cdot 10^{20}$	$4,24 \cdot 10^{-21}$	$2,36 \cdot 10^{22}$	$4,24 \cdot 10^{-23}$	$2,36 \cdot 10^{24}$	$4,24 \cdot 10^{-25}$
1	$8,3 \cdot 10^{15}$	$1,2 \cdot 10^{-16}$	$7,4 \cdot 10^{17}$	$1,35 \cdot 10^{-18}$	$7,4 \cdot 10^{19}$	$1,35 \cdot 10^{-20}$	$7,4 \cdot 10^{21}$	$1,35 \cdot 10^{-22}$	$7,4 \cdot 10^{23}$	$1,35 \cdot 10^{-24}$	$7,4 \cdot 10^{25}$	$1,35 \cdot 10^{-26}$	$7,4 \cdot 10^{27}$	$1,35 \cdot 10^{-28}$
0,5	$2,65 \cdot 10^{17}$	$3,76 \cdot 10^{-18}$	$2,37 \cdot 10^{19}$	$4,22 \cdot 10^{-20}$	$2,37 \cdot 10^{21}$	$4,22 \cdot 10^{-22}$	$2,37 \cdot 10^{23}$	$4,22 \cdot 10^{-24}$	$2,37 \cdot 10^{25}$	$4,22 \cdot 10^{-26}$	$2,37 \cdot 10^{27}$	$4,22 \cdot 10^{-28}$	$2,37 \cdot 10^{29}$	$4,22 \cdot 10^{-30}$
0,1	$8,3 \cdot 10^{20}$	$1,2 \cdot 10^{-21}$	$7,4 \cdot 10^{22}$	$1,35 \cdot 10^{-23}$	$7,4 \cdot 10^{24}$	$1,35 \cdot 10^{-25}$	$7,4 \cdot 10^{26}$	$1,35 \cdot 10^{-27}$	$7,4 \cdot 10^{28}$	$1,35 \cdot 10^{-29}$	$7,4 \cdot 10^{30}$	$1,35 \cdot 10^{-31}$	$7,4 \cdot 10^{32}$	$1,35 \cdot 10^{-33}$

С учетом того, что величина K_{nm} обычно мала и $(3 - 2 K_{nm}) \cong (3 - K_{nm})$, а $\rho_{эж}$ описывается выражением (7.107), уравнение (7.126) преобразуется к виду

$$\sigma = \frac{n_0(eEr + \kappa T)4\pi\epsilon_0 r \cdot c \cdot l}{U \cdot Z \cdot e} \left[\frac{2K_{nm} \cdot K_{эж.т.}^2}{3 \cdot \xi_m \cdot \eta_m} + C_{np}^2 \left(\frac{1}{\xi_{mn} \cdot \eta_{mn} \cdot \beta_{np}} + \frac{1}{\rho_{np}} \right) + \right. \\ \left. + \frac{(1 - C_{np})K_{пб}^2 \cdot K_{эж.п.}^2}{\xi_n \cdot \eta_n} + \frac{(1 - C_{np} - K_{пб}) \cdot K_{nm}^2 \cdot K_{эж.м.}^2}{\xi_m \cdot \eta_m \cdot \beta_{мет}} \right]. \quad (7.127)$$

В расчетах по формуле (7.127) принимаем: $K_{nm} = 1 \cdot 10^{-2} \div 1 \cdot 10^{-4}$; $K_{эжт} = 1 \cdot 10^{-4} \div 1$; $\xi_m = \delta \cdot T = 3,66 T$; $\eta_m = \alpha_m \cdot T^5 = 1,49 \cdot 10^{-24} T^5$.

Остальные исходные данные те же, что и при расчетах по формуле (7.124). После подстановки исходных данных в уравнение (7.127) получили

$$\sigma = \frac{6,0 \cdot 10^{28} (1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 1 \cdot 1,3 \cdot 10^{-10} + 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot T) 4 \cdot 3,14 \cdot 8,85 \cdot 10^{-12} \cdot 1,3 \cdot 10^{-10} \cdot 3 \cdot 10^8 \cdot 1}{1 \cdot 30 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}} \times \\ \times \left[\frac{2 \cdot K_{nm} \cdot K_{эжт}^2}{3 \cdot 3,66 T \cdot 1,49 \cdot 10^{-24} T^5} + 0,4^2 \left(\frac{1 \cdot T^6}{1,208 \cdot 10^7 T \cdot 6,6 \cdot 10^{-13} T^5 \cdot 8,28 \cdot 10^{30}} + \frac{1}{10^{13}} \right) + \right. \\ \left. + \frac{0,6 \cdot 0,3^2 \cdot K_{эжп}^2}{3,66 \cdot 10^2 \cdot T \cdot 1,49 \cdot 10^{-20} T^5} + \frac{0,3 \cdot 0,4^2 \cdot 1^2}{1,208 \cdot 10^7 T \cdot 6,6 \cdot 10^{-13} T^5 \cdot 5} \right] = \\ = 7,478 \cdot 10^{11} T \left(\frac{1,22 \cdot 10^{23} \cdot K_{nm} \cdot K_{эжт}^2}{T^6} + 2,42 \cdot 10^{-27} + 1,6 \cdot 10^{-14} + \frac{9,9 \cdot 10^{15} \cdot K_{эжп}^2}{T^6} + \frac{1,2 \cdot 10^3}{T^6} \right) = \\ = \frac{9,123 \cdot 10^{34} \cdot K_{nm} \cdot K_{эжт}^2}{T^5} + 1,8 \cdot 10^{-15} T + 1,2 \cdot 10^{-2} T + \frac{7,4 \cdot 10^{27} K_{эжп}^2}{T^5} + \frac{8,97 \cdot 10^{14}}{T^5} \dots\dots\dots (7.128)$$

После подстановки исходных данных T , K_{nm} , $K_{эжт}$, $K_{эжп}$ получили следующие результаты (табл. 7.15-7.18).

Анализ таблиц 7.15-7.18 и таблицы 7.14 показывает, что наибольшее влияние на электросопротивление оказывает электронная жидкость, находящаяся в трещинных порах. Даже при величине трещинной пористости $K_{nm} = 1 \cdot 10^{-4}$, т. е. 0,01% от объема вещества, и заполнении этих трещин только на одну сотую процента ($K_{эжт} = 1 \div 10^{-4}$) электронной жидкостью электрическое сопротивление вещества снижается на семь порядков, а при полном заполнении этих трещин электронной жидкостью вещество становится сверхпроводящим даже при температуре $T = (200 \div 300)^\circ K$ (табл. 7.15, 7.16). С увеличением трещинной пористости до 1% ($K_{nm} = 1 \cdot 10^{-2}$) и полном заполнении трещин электронной жидкостью удельное электрическое сопротивление снижается при этих температурах до $10^{-22} \div 10^{-21}$ Ом·м.

$$K_{nm} = 1 \cdot 10^{-4}; K_{\text{элет}} = 1 \cdot 10^{-6}$$

$T, ^\circ\text{K}$	$K_{\text{элет}} = 1 \cdot 10^{-4}$		$K_{\text{элет}} = 1 \cdot 10^{-3}$		$K_{\text{элет}} = 1 \cdot 10^{-2}$		$K_{\text{элет}} = 1 \cdot 10^{-1}$		$K_{\text{элет}} = 1$	
	$\sigma, 1/\text{Ом} \cdot \text{м}$	$\rho, \text{Ом} \cdot \text{м}$	$\sigma, 1/\text{Ом} \cdot \text{м}$	$\rho, \text{Ом} \cdot \text{м}$	$\sigma, 1/\text{Ом} \cdot \text{м}$	$\rho, \text{Ом} \cdot \text{м}$	$\sigma, 1/\text{Ом} \cdot \text{м}$	$\rho, \text{Ом} \cdot \text{м}$	$\sigma, 1/\text{Ом} \cdot \text{м}$	$\rho, \text{Ом} \cdot \text{м}$
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
300	$3,75 \cdot 10^{10}$	$2,67 \cdot 10^{-11}$	$3,75 \cdot 10^{12}$	$2,67 \cdot 10^{-13}$	$3,75 \cdot 10^{14}$	$2,67 \cdot 10^{-15}$	$3,75 \cdot 10^{16}$	$2,67 \cdot 10^{-17}$	$3,75 \cdot 10^{18}$	$2,67 \cdot 10^{-19}$
273	$6,02 \cdot 10^{10}$	$1,66 \cdot 10^{-11}$	$6,02 \cdot 10^{12}$	$1,66 \cdot 10^{-13}$	$6,02 \cdot 10^{14}$	$1,66 \cdot 10^{-15}$	$6,02 \cdot 10^{16}$	$1,66 \cdot 10^{-17}$	$6,02 \cdot 10^{18}$	$1,66 \cdot 10^{-19}$
200	$2,85 \cdot 10^{11}$	$3,5 \cdot 10^{-12}$	$2,85 \cdot 10^{13}$	$3,5 \cdot 10^{-14}$	$2,85 \cdot 10^{15}$	$3,5 \cdot 10^{-16}$	$2,85 \cdot 10^{17}$	$3,5 \cdot 10^{-18}$	$2,85 \cdot 10^{19}$	$3,5 \cdot 10^{-20}$
100	$9,12 \cdot 10^{12}$	$1,1 \cdot 10^{-13}$	$9,12 \cdot 10^{14}$	$1,1 \cdot 10^{-15}$	$9,12 \cdot 10^{16}$	$1,1 \cdot 10^{-17}$	$9,12 \cdot 10^{18}$	$1,1 \cdot 10^{-19}$	$9,12 \cdot 10^{20}$	$1,1 \cdot 10^{-21}$
50	$2,92 \cdot 10^{14}$	$3,42 \cdot 10^{-15}$	$2,92 \cdot 10^{16}$	$3,42 \cdot 10^{-17}$	$2,92 \cdot 10^{18}$	$3,42 \cdot 10^{-19}$	$2,92 \cdot 10^{20}$	$3,42 \cdot 10^{-21}$	$2,92 \cdot 10^{22}$	$3,42 \cdot 10^{-23}$
25	$9,34 \cdot 10^{15}$	$1,07 \cdot 10^{-16}$	$9,34 \cdot 10^{17}$	$1,07 \cdot 10^{-18}$	$9,34 \cdot 10^{19}$	$1,07 \cdot 10^{-20}$	$9,34 \cdot 10^{21}$	$1,07 \cdot 10^{-22}$	$9,34 \cdot 10^{23}$	$1,07 \cdot 10^{-24}$
10	$9,12 \cdot 10^{17}$	$1,1 \cdot 10^{-18}$	$9,12 \cdot 10^{19}$	$1,1 \cdot 10^{-20}$	$9,12 \cdot 10^{21}$	$1,1 \cdot 10^{-22}$	$9,12 \cdot 10^{23}$	$1,1 \cdot 10^{-24}$	$9,12 \cdot 10^{25}$	$1,1 \cdot 10^{-26}$
5	$2,92 \cdot 10^{19}$	$3,42 \cdot 10^{-20}$	$2,92 \cdot 10^{21}$	$3,42 \cdot 10^{-22}$	$2,92 \cdot 10^{23}$	$3,42 \cdot 10^{-24}$	$2,92 \cdot 10^{25}$	$3,42 \cdot 10^{-26}$	$2,92 \cdot 10^{27}$	$3,42 \cdot 10^{-28}$
1	$9,12 \cdot 10^{22}$	$1,1 \cdot 10^{-23}$	$9,12 \cdot 10^{24}$	$1,1 \cdot 10^{-25}$	$9,12 \cdot 10^{26}$	$1,1 \cdot 10^{-27}$	$9,12 \cdot 10^{28}$	$1,1 \cdot 10^{-29}$	$9,12 \cdot 10^{30}$	$1,1 \cdot 10^{-31}$
0,5	$2,92 \cdot 10^{24}$	$3,42 \cdot 10^{-25}$	$2,92 \cdot 10^{26}$	$3,42 \cdot 10^{-27}$	$2,92 \cdot 10^{28}$	$3,42 \cdot 10^{-29}$	$2,92 \cdot 10^{30}$	$3,42 \cdot 10^{-31}$	$2,92 \cdot 10^{32}$	$3,42 \cdot 10^{-33}$
0,1	$9,12 \cdot 10^{27}$	$1,1 \cdot 10^{-28}$	$9,12 \cdot 10^{29}$	$1,1 \cdot 10^{-30}$	$9,12 \cdot 10^{31}$	$1,1 \cdot 10^{-32}$	$9,12 \cdot 10^{33}$	$1,1 \cdot 10^{-34}$	$9,12 \cdot 10^{35}$	$1,1 \cdot 10^{-36}$

Таблица 7.16

$$K_{\text{пр}} = 1 \cdot 10^{-4}; K_{\text{эжп}} = 1 \cdot 10^{-3}$$

$T, ^\circ\text{K}$	$K_{\text{эжп}} = 1 \cdot 10^{-4}$		$K_{\text{эжп}} = 1 \cdot 10^{-3}$		$K_{\text{эжп}} = 1 \cdot 10^{-2}$		$K_{\text{эжп}} = 1 \cdot 10^{-1}$		$K_{\text{эжп}} = 1$	
	$\sigma, 1/\text{Ом} \cdot \text{м}$	$\rho, \text{Ом} \cdot \text{м}$	$\sigma, 1/\text{Ом} \cdot \text{м}$	$\rho, \text{Ом} \cdot \text{м}$	$\sigma, 1/\text{Ом} \cdot \text{м}$	$\rho, \text{Ом} \cdot \text{м}$	$\sigma, 1/\text{Ом} \cdot \text{м}$	$\rho, \text{Ом} \cdot \text{м}$	$\sigma, 1/\text{Ом} \cdot \text{м}$	$\rho, \text{Ом} \cdot \text{м}$
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
300	$4,05 \cdot 10^{10}$	$2,47 \cdot 10^{-11}$	$3,75 \cdot 10^{12}$	$2,67 \cdot 10^{-13}$	$3,75 \cdot 10^{14}$	$2,67 \cdot 10^{-15}$	$3,75 \cdot 10^{16}$	$2,67 \cdot 10^{-17}$	$3,75 \cdot 10^{18}$	$2,67 \cdot 10^{-19}$
273	$6,5 \cdot 10^{10}$	$1,54 \cdot 10^{-11}$	$6,02 \cdot 10^{12}$	$1,66 \cdot 10^{-13}$	$6,02 \cdot 10^{14}$	$1,66 \cdot 10^{-15}$	$6,02 \cdot 10^{16}$	$1,66 \cdot 10^{-17}$	$6,02 \cdot 10^{18}$	$1,66 \cdot 10^{-19}$
200	$3,08 \cdot 10^{11}$	$3,25 \cdot 10^{-12}$	$2,85 \cdot 10^{13}$	$3,5 \cdot 10^{-14}$	$2,85 \cdot 10^{15}$	$3,5 \cdot 10^{-16}$	$2,85 \cdot 10^{17}$	$3,5 \cdot 10^{-18}$	$2,85 \cdot 10^{19}$	$3,5 \cdot 10^{-20}$
100	$9,86 \cdot 10^{12}$	$1,01 \cdot 10^{-13}$	$9,12 \cdot 10^{14}$	$1,1 \cdot 10^{-15}$	$9,12 \cdot 10^{16}$	$1,1 \cdot 10^{-17}$	$9,12 \cdot 10^{18}$	$1,1 \cdot 10^{-19}$	$9,12 \cdot 10^{20}$	$1,1 \cdot 10^{-21}$
50	$3,16 \cdot 10^{14}$	$3,16 \cdot 10^{-15}$	$2,92 \cdot 10^{16}$	$3,42 \cdot 10^{-17}$	$2,92 \cdot 10^{18}$	$3,42 \cdot 10^{-19}$	$2,92 \cdot 10^{20}$	$3,42 \cdot 10^{-21}$	$2,92 \cdot 10^{22}$	$3,42 \cdot 10^{-23}$
25	$1,01 \cdot 10^{14}$	$9,9 \cdot 10^{-15}$	$9,34 \cdot 10^{17}$	$1,07 \cdot 10^{-18}$	$9,34 \cdot 10^{19}$	$1,07 \cdot 10^{-20}$	$9,34 \cdot 10^{21}$	$1,07 \cdot 10^{-22}$	$9,34 \cdot 10^{23}$	$1,07 \cdot 10^{-24}$
10	$9,86 \cdot 10^{17}$	$1,01 \cdot 10^{-18}$	$9,12 \cdot 10^{19}$	$1,1 \cdot 10^{-20}$	$9,12 \cdot 10^{21}$	$1,1 \cdot 10^{-22}$	$9,12 \cdot 10^{23}$	$1,1 \cdot 10^{-24}$	$9,12 \cdot 10^{25}$	$1,1 \cdot 10^{-26}$
5	$3,16 \cdot 10^{19}$	$3,16 \cdot 10^{-20}$	$2,92 \cdot 10^{21}$	$3,42 \cdot 10^{-22}$	$2,92 \cdot 10^{23}$	$3,42 \cdot 10^{-24}$	$2,92 \cdot 10^{25}$	$3,42 \cdot 10^{-26}$	$2,92 \cdot 10^{27}$	$3,42 \cdot 10^{-28}$
1	$9,86 \cdot 10^{22}$	$1,01 \cdot 10^{-23}$	$9,12 \cdot 10^{24}$	$1,1 \cdot 10^{-25}$	$9,12 \cdot 10^{26}$	$1,1 \cdot 10^{-27}$	$9,12 \cdot 10^{28}$	$1,1 \cdot 10^{-29}$	$9,12 \cdot 10^{30}$	$1,1 \cdot 10^{-31}$
0,5	$3,16 \cdot 10^{24}$	$3,16 \cdot 10^{-25}$	$2,92 \cdot 10^{26}$	$3,42 \cdot 10^{-27}$	$2,92 \cdot 10^{28}$	$3,42 \cdot 10^{-29}$	$2,92 \cdot 10^{30}$	$3,42 \cdot 10^{-31}$	$2,92 \cdot 10^{32}$	$3,42 \cdot 10^{-33}$
0,1	$9,86 \cdot 10^{27}$	$1,01 \cdot 10^{-28}$	$9,12 \cdot 10^{29}$	$1,1 \cdot 10^{-30}$	$9,12 \cdot 10^{31}$	$1,1 \cdot 10^{-32}$	$9,12 \cdot 10^{33}$	$1,1 \cdot 10^{-34}$	$9,12 \cdot 10^{35}$	$1,1 \cdot 10^{-36}$

$$K_{nm} = 1 \cdot 10^{-2}; K_{эжст} = 1 \cdot 10^{-6}$$

$T, ^\circ K$	$K_{эжст} = 1 \cdot 10^{-4}$		$K_{эжст} = 1 \cdot 10^{-3}$		$K_{эжст} = 1 \cdot 10^{-2}$		$K_{эжст} = 1 \cdot 10^{-1}$		$K_{эжст} = 1$	
	$\sigma, 1/OM \cdot M$	$\rho, OM \cdot M$	$\sigma, 1/OM \cdot M$	$\rho, OM \cdot M$	$\sigma, 1/OM \cdot M$	$\rho, OM \cdot M$	$\sigma, 1/OM \cdot M$	$\rho, OM \cdot M$	$\sigma, 1/OM \cdot M$	$\rho, OM \cdot M$
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
300	$3,75 \cdot 10^{12}$	$2,67 \cdot 10^{-13}$	$3,75 \cdot 10^{14}$	$2,67 \cdot 10^{-15}$	$3,75 \cdot 10^{16}$	$2,67 \cdot 10^{-17}$	$3,75 \cdot 10^{18}$	$2,67 \cdot 10^{-19}$	$3,75 \cdot 10^{20}$	$2,67 \cdot 10^{-21}$
273	$6,02 \cdot 10^{12}$	$1,66 \cdot 10^{-13}$	$6,02 \cdot 10^{14}$	$1,66 \cdot 10^{-15}$	$6,02 \cdot 10^{16}$	$1,66 \cdot 10^{-17}$	$6,02 \cdot 10^{18}$	$1,66 \cdot 10^{-19}$	$6,02 \cdot 10^{20}$	$1,66 \cdot 10^{-21}$
200	$2,85 \cdot 10^{13}$	$3,5 \cdot 10^{-14}$	$2,85 \cdot 10^{15}$	$3,5 \cdot 10^{-16}$	$2,85 \cdot 10^{17}$	$3,5 \cdot 10^{-18}$	$2,85 \cdot 10^{19}$	$3,5 \cdot 10^{-20}$	$2,85 \cdot 10^{21}$	$3,5 \cdot 10^{-22}$
100	$9,12 \cdot 10^{14}$	$1,1 \cdot 10^{-15}$	$9,12 \cdot 10^{16}$	$1,1 \cdot 10^{-17}$	$9,12 \cdot 10^{18}$	$1,1 \cdot 10^{-19}$	$9,12 \cdot 10^{20}$	$1,1 \cdot 10^{-21}$	$9,12 \cdot 10^{22}$	$1,1 \cdot 10^{-23}$
50	$2,92 \cdot 10^{16}$	$3,42 \cdot 10^{-17}$	$2,92 \cdot 10^{18}$	$3,42 \cdot 10^{-19}$	$2,92 \cdot 10^{20}$	$3,42 \cdot 10^{-21}$	$2,92 \cdot 10^{22}$	$3,42 \cdot 10^{-23}$	$2,92 \cdot 10^{24}$	$3,42 \cdot 10^{-25}$
25	$9,34 \cdot 10^{17}$	$1,07 \cdot 10^{-18}$	$9,34 \cdot 10^{19}$	$1,07 \cdot 10^{-20}$	$9,34 \cdot 10^{21}$	$1,07 \cdot 10^{-22}$	$9,34 \cdot 10^{23}$	$1,07 \cdot 10^{-24}$	$9,34 \cdot 10^{25}$	$1,07 \cdot 10^{-26}$
10	$9,12 \cdot 10^{19}$	$1,1 \cdot 10^{-20}$	$9,12 \cdot 10^{21}$	$1,1 \cdot 10^{-22}$	$9,12 \cdot 10^{23}$	$1,1 \cdot 10^{-24}$	$9,12 \cdot 10^{25}$	$1,1 \cdot 10^{-26}$	$9,12 \cdot 10^{27}$	$1,1 \cdot 10^{-28}$
5	$2,92 \cdot 10^{21}$	$3,42 \cdot 10^{-22}$	$2,92 \cdot 10^{23}$	$3,42 \cdot 10^{-24}$	$2,92 \cdot 10^{25}$	$3,42 \cdot 10^{-26}$	$2,92 \cdot 10^{27}$	$3,42 \cdot 10^{-28}$	$2,92 \cdot 10^{29}$	$3,42 \cdot 10^{-30}$
1	$9,12 \cdot 10^{24}$	$1,1 \cdot 10^{-25}$	$9,12 \cdot 10^{26}$	$1,1 \cdot 10^{-27}$	$9,12 \cdot 10^{28}$	$1,1 \cdot 10^{-29}$	$9,12 \cdot 10^{30}$	$1,1 \cdot 10^{-31}$	$9,12 \cdot 10^{32}$	$1,1 \cdot 10^{-33}$
0,5	$2,92 \cdot 10^{26}$	$3,42 \cdot 10^{-27}$	$2,92 \cdot 10^{28}$	$3,42 \cdot 10^{-29}$	$2,92 \cdot 10^{30}$	$3,42 \cdot 10^{-31}$	$2,92 \cdot 10^{32}$	$3,42 \cdot 10^{-33}$	$2,92 \cdot 10^{34}$	$3,42 \cdot 10^{-35}$
0,1	$9,12 \cdot 10^{29}$	$1,1 \cdot 10^{-30}$	$9,12 \cdot 10^{31}$	$1,1 \cdot 10^{-32}$	$9,12 \cdot 10^{33}$	$1,1 \cdot 10^{-34}$	$9,12 \cdot 10^{35}$	$1,1 \cdot 10^{-36}$	$9,12 \cdot 10^{37}$	$1,1 \cdot 10^{-38}$

Таблица 7.18

 $K_{nm} = 1 \cdot 10^{-2}; K_{эжст} = 1 \cdot 10^{-3}$

$T, ^\circ K$	$K_{эжст} = 1 \cdot 10^{-4}$		$K_{эжст} = 1 \cdot 10^{-3}$		$K_{эжст} = 1 \cdot 10^{-2}$		$K_{эжст} = 1 \cdot 10^{-1}$		$K_{эжст} = 1$	
	$\sigma, 1/Ом \cdot м$	$\rho, Ом \cdot м$	$\sigma, 1/Ом \cdot м$	$\rho, Ом \cdot м$	$\sigma, 1/Ом \cdot м$	$\rho, Ом \cdot м$	$\sigma, 1/Ом \cdot м$	$\rho, Ом \cdot м$	$\sigma, 1/Ом \cdot м$	$\rho, Ом \cdot м$
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
300	$3,75 \cdot 10^{12}$	$2,67 \cdot 10^{-13}$	$3,75 \cdot 10^{14}$	$2,67 \cdot 10^{-15}$	$3,75 \cdot 10^{16}$	$2,67 \cdot 10^{-17}$	$3,75 \cdot 10^{18}$	$2,67 \cdot 10^{-19}$	$3,75 \cdot 10^{20}$	$2,67 \cdot 10^{-21}$
273	$6,02 \cdot 10^{12}$	$1,66 \cdot 10^{-13}$	$6,02 \cdot 10^{14}$	$1,66 \cdot 10^{-5}$	$6,02 \cdot 10^{16}$	$1,66 \cdot 10^{-17}$	$6,02 \cdot 10^{18}$	$1,66 \cdot 10^{-19}$	$6,02 \cdot 10^{20}$	$1,66 \cdot 10^{-21}$
200	$2,85 \cdot 10^{13}$	$3,5 \cdot 10^{-14}$	$2,85 \cdot 10^{15}$	$3,5 \cdot 10^{-16}$	$2,85 \cdot 10^{17}$	$3,5 \cdot 10^{-18}$	$2,85 \cdot 10^{19}$	$3,5 \cdot 10^{-20}$	$2,85 \cdot 10^{21}$	$3,5 \cdot 10^{-22}$
100	$9,12 \cdot 10^{14}$	$1,1 \cdot 10^{-15}$	$9,12 \cdot 10^{16}$	$1,1 \cdot 10^{-17}$	$9,12 \cdot 10^{18}$	$1,1 \cdot 10^{-19}$	$9,12 \cdot 10^{20}$	$1,1 \cdot 10^{-21}$	$9,12 \cdot 10^{22}$	$1,1 \cdot 10^{-23}$
50	$2,92 \cdot 10^{16}$	$3,42 \cdot 10^{-17}$	$2,92 \cdot 10^{18}$	$3,42 \cdot 10^{-19}$	$2,92 \cdot 10^{20}$	$3,42 \cdot 10^{-21}$	$2,92 \cdot 10^{22}$	$3,42 \cdot 10^{-23}$	$2,92 \cdot 10^{24}$	$3,42 \cdot 10^{-25}$
25	$9,34 \cdot 10^{17}$	$1,07 \cdot 10^{-18}$	$9,34 \cdot 10^{19}$	$1,07 \cdot 10^{-20}$	$9,34 \cdot 10^{21}$	$1,07 \cdot 10^{-22}$	$9,34 \cdot 10^{23}$	$1,07 \cdot 10^{-24}$	$9,34 \cdot 10^{25}$	$1,07 \cdot 10^{-26}$
10	$9,12 \cdot 10^{19}$	$1,1 \cdot 10^{-20}$	$9,12 \cdot 10^{21}$	$1,1 \cdot 10^{-22}$	$9,12 \cdot 10^{23}$	$1,1 \cdot 10^{-24}$	$9,12 \cdot 10^{25}$	$1,1 \cdot 10^{-26}$	$9,12 \cdot 10^{27}$	$1,1 \cdot 10^{-28}$
5	$2,92 \cdot 10^{21}$	$3,42 \cdot 10^{-22}$	$2,92 \cdot 10^{23}$	$3,42 \cdot 10^{-24}$	$2,92 \cdot 10^{25}$	$3,42 \cdot 10^{-26}$	$2,92 \cdot 10^{27}$	$3,42 \cdot 10^{-28}$	$2,92 \cdot 10^{29}$	$3,42 \cdot 10^{-30}$
1	$9,12 \cdot 10^{24}$	$1,1 \cdot 10^{-25}$	$9,12 \cdot 10^{26}$	$1,1 \cdot 10^{-27}$	$9,12 \cdot 10^{28}$	$1,1 \cdot 10^{-29}$	$9,12 \cdot 10^{30}$	$1,1 \cdot 10^{-31}$	$9,12 \cdot 10^{32}$	$1,1 \cdot 10^{-33}$
0,5	$2,92 \cdot 10^{26}$	$3,42 \cdot 10^{-27}$	$2,92 \cdot 10^{28}$	$3,42 \cdot 10^{-29}$	$2,92 \cdot 10^{30}$	$3,42 \cdot 10^{-31}$	$2,92 \cdot 10^{32}$	$3,42 \cdot 10^{-33}$	$2,92 \cdot 10^{34}$	$3,42 \cdot 10^{-35}$
0,1	$9,12 \cdot 10^{29}$	$1,1 \cdot 10^{-30}$	$9,12 \cdot 10^{31}$	$1,1 \cdot 10^{-32}$	$9,12 \cdot 10^{33}$	$1,1 \cdot 10^{-34}$	$9,12 \cdot 10^{35}$	$1,1 \cdot 10^{-36}$	$9,12 \cdot 10^{37}$	$1,1 \cdot 10^{-38}$

На основании этих расчетов становится понятным, почему электрический пробой диэлектрика или полупроводника, создающий единственный канал размером в диаметр электрона, приводит к резкому (примерно на один порядок) снижению электрического сопротивления вещества. Таким образом, для существенного снижения электрического сопротивления вещества, имеющего кроме межмолекулярных пор также межгранулярные и трещинные поры, необходимо создать условия для возможности движения электронов проводимости. Это можно достичь методом вакуумирования образцов и удаления из пор и трещин молекул воздуха.

Существенного снижения электрического сопротивления вещества можно также достичь, создавая необходимое количество сквозных каналов малого диаметра методом электрического пробоя. В этом случае диаметр каналов соответствует диаметру электронов проводимости при той температуре, при которой создается электрический пробой. Такой диаметр каналов не позволяет молекулам воздуха проникать в эти каналы, и они доступны только для движения электронов.

Однако интересно рассмотреть, есть ли эффект положительного взаимодействия электронов проводимости между собой в сверхпроводящем состоянии.

Для понимания этого явления рассмотрим магнитное и электрическое взаимодействие движущихся в проводнике электронов.

Сила, действующая на движущийся заряд q_2 со стороны движущегося заряда q_1 , называется силой их магнитного взаимодействия или магнитной силой. Для частного случая движущихся в вакууме одноименных зарядов q_1 и q_2 при $v_1 = v_2 = v \ll c$ и направленных вдоль оси x сила магнитного взаимодействия зарядов является силой притяжения и равна

$$F_m = \frac{\mu_0}{4\pi} \cdot \frac{q_1 \cdot q_2}{r^2} v^2, \quad (7.129)$$

где r – расстояние между зарядами; μ_0 – магнитная постоянная.

Силу F_m можно представить в виде

$$F_m = q_2 \cdot v \frac{\mu_0 \cdot q_1 \cdot v}{4\pi \cdot r^2} = q_2 \cdot v \cdot B_1, \quad (7.130)$$

где

$$B_1 = \frac{\mu_0 \cdot q_1 \cdot v}{4\pi \cdot r^2}. \quad (7.131)$$

В таком виде сила F_m совпадает с силой Лоренца (F_L) при $\sin \alpha = 1$, если считать, что B есть индукция магнитного поля, созданного движущимся зарядом q_1 .

$$F_L = q \cdot B \cdot v \cdot \sin \alpha, \quad (7.132)$$

здесь α – угол между направлением движения заряда (\vec{v}) и вектором индукции магнитного поля.

Так как в проводнике заряды движется параллельно, то между вектором индукции магнитного поля заряда q_1 и вектором скорости заряда q_2 угол $\alpha = \frac{\pi}{2}$, т. е.

$$F_m = F_l = q_2 \cdot v \cdot B_l. \quad (7.133)$$

Сила электрического отталкивания между взаимно неподвижными рядами q_1 и q_2 , находящихся в вакууме ($\varepsilon = 1$) на том же расстоянии,

$$F_e = \frac{1}{4\pi \cdot \varepsilon_0} \cdot \frac{q_1 \cdot q_2}{r^2}, \quad (7.134)$$

где ε_0 – электрическая постоянная.

Тогда отношение силы магнитного притяжения к силе электрического отталкивания будет равно:

$$\frac{F_m}{F_e} = \frac{\mu_0 \cdot q_1 \cdot q_2 \cdot v^2 \cdot 4\pi \varepsilon_0 r^2}{4\pi \cdot r^2 \cdot q_1 \cdot q_2} = \mu_0 \cdot \varepsilon_0 v^2 = \frac{v^2}{c^2}, \quad (7.135)$$

так как

$$\varepsilon_0 \cdot \mu_0 = \frac{1}{c^2}, \quad (7.136)$$

где c – скорость света.

$$\varepsilon_0 = \frac{1}{4\pi \cdot 10^{-7} \cdot c^2}, \quad \mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7}.$$

При малой скорости движения зарядов ($v \ll c$) магнитное взаимодействие между движущимися зарядами значительно меньше их электрического взаимодействия. Однако принято считать, что в случае, когда электрические заряды движутся в проводнике, который электрически нейтрален и электрические силы оказываются частично скомпенсированы, появляется некоторое магнитное взаимодействие. Этим объясняется магнитное притяжение проводников с токами.

Если рассмотреть эту задачу применительно к движению электронов в проводнике и сверхпроводнике, то можно констатировать, что в обычном проводнике силы электрического отталкивания между параллельно движущимися электронами при наличии электрического тока существенно уменьшены за счет компенсирующего влияния положительно заряженных ионов в узлах кристаллической решетки, а скорости направленного движения электронов в обычном проводнике значительно ниже скорости света, т. е. $v \ll c$ и, следовательно, сила магнитного притяжения между зарядами мала.

Следовательно, электроны испытывают одновременно действие трех сил: F_1 – притяжения со стороны ионов решетки; F_2 – кулоновского отталкивания между собой и F_3 – магнитного притяжения между собой. Результирующая этих трех сил в обычных условиях приводит к удалению электронов друг от друга при их направленном движении. Удаление электронов друг от друга способствует увеличению общей площади не перекрывающихся их фотонных оболочек и тормозящему эффекту их одновременного движения внутри системы межмолекулярных пор.

Но так как электроны взаимодействуют с ионами решетки и электрическое отталкивание их частично скомпенсировано, то равновесие сил магнитного притяжения и электрического отталкивания зарядов при их параллельном дви-

жении наступает значительно раньше, чем равенство скорости движения электронов в проводнике скорости света, т. е. при $v < c$.

В условиях сверхпроводимости, когда сечение каналов проводимости больше или равно площади фотонных орбит вокруг электронов и они не испытывают сопротивления при своем движении, то их скорости приближаются к скорости света ($v \rightarrow c$). В этих условиях с учетом компенсации кулоновских сил отталкивания магнитными силами притяжения электроны притягиваются друг к другу и сжимают свои фотонные оболочки, в результате чего резко увеличивается пропускная способность каналов для электронов и плотность тока и, как следствие, резко снижается электрическое сопротивление вещества.

Таким образом, можно утверждать, что сверхпроводимость объясняется появлением для электронов сквозных путей движения, эквивалентных трещинной пористости, и в них возможно лавинное формирование не просто куперовских пар электронов в каналах проводимости в начальный момент перехода вещества в сверхпроводящее состояние, а формирование ассоциативных групп электронов, но не удаленных друг от друга, как это предлагает Купер, а непосредственно находящихся рядом. Этим можно объяснить резкое снижение практически до нуля электрического сопротивления вещества при температуре T_c и повышения плотности тока. Подтверждением этого являются результаты расчетов по формуле (7.127), когда рассчитанные удельные электрические сопротивления при $T < 100^\circ\text{K}$, $K_{nm} = 1 \cdot 10^{-2}$, $K_{э,ж,м} > 1 \cdot 10^{-2}$ и $K_{э,ж,л} > 1 \cdot 10^{-3}$ оказалось ниже, чем $\rho_{э,ж,min} = 3,66 \cdot 10^{-19}$ Ом·м, рассчитанное по формуле (7.102) для условия свободного движения всех электронов проводимости.

Выводы по главе 7

1. Показано, что зависимость температурного коэффициента α для электрического сопротивления является общей для проводников, полупроводников и диэлектриков и, следовательно, природа их электропроводности является единой и нецелесообразно ставить вопрос о «дырочной» проводимости в полупроводниках и тем более об «электронно-дырочной жидкости».

2. На величину электрического сопротивления вещества большое влияние оказывает тип кристаллической структуры решетки, величина и характер распределения межмолекулярных, межгранулярных и трещинных пор. В связи с существенно большим размером межгранулярных и трещинных пор по сравнению с межмолекулярными порами их влияние является преобладающим при возможности частичного их заполнения электронами проводимости.

3. В соответствии с выдвинутой концепцией о наличии вокруг заряженных частиц фотонного электромагнитного поля, показана значительная роль фотонов в электропроводности вещества, так как на ее величину существенное влияние оказывает соотношение площади сечения канала проводимости и площади сечения фотонного электромагнитного поля вокруг единичного электрона проводимости. С понижением температуры вещества снижается концентрация фотонов вокруг электронов и уменьшается размер фотонного электромагнитного поля вокруг них. Одновременно уменьшается фотонное поле вокруг ионов (атомов) кристаллической решетки вещества, что приво-

дит к увеличению размеров пор и каналов проводимости и, следовательно, к уменьшению соотношения площади сечения фотонного поля вокруг электронов (S_ϕ) и площади сечения пор и каналов проводимости (S_n). Это способствует более свободному движению электронов проводимости по межмолекулярным, межгранулярным и трещинным каналам проводимости и способствует снижению электрического сопротивления.

4. При отношении $\frac{S_\phi}{S_n} \leq 1$ электроны могут свободно перемещаться по кана-

лам проводимости под воздействием электрического поля, не испытывая сопротивления, что и отражается в явлении сверхпроводимости. В состоянии сверхпроводимости скорость движения электронов может достигать скорости света. В этих условиях силы магнитного притяжения между параллельно движущимися электронами сопоставимы по величине с силами электрического отталкивания, а с учетом компенсирующего электрического влияния ионов кристаллической решетки магнитные силы притяжения начинают доминировать над электрическими. Это приводит к сжатию фотонных электромагнитных полей вокруг электронов проводимости и способствует их более свободному беспрепятственному движению по каналам проводимости, что отмечается резким снижением электрического сопротивления и переходом вещества в состояние сверхпроводимости.

5. С учетом параллельности каналов проводимости в веществе в состоянии сверхпроводимости удельное электрическое сопротивление вещества становится ниже, чем минимальное значение электрического сопротивления «электронной жидкости», т. е. при условии свободного движения общей массы электронов проводимости.

6. Предложено выражение, описывающее зависимость электропроводности (удельного электрического сопротивления) вещества от влияния различных факторов и типов каналов проводимости. Решение этого уравнения с учетом конкурентных условий позволило показать роль и влияние каждого фактора на величину электрического сопротивления. Расчетами подтверждено, что в условиях перехода вещества в сверхпроводящее состояние его удельное электрическое сопротивление может быть существенно ниже, чем минимальное значение удельного электрического сопротивления электронной жидкости.

7. Показаны условия перехода вещества в сверхпроводящее состояние и пути получения высокотемпературных сверхпроводников. Чтобы добиться состояния сверхпроводимости при высоких температурах и, учитывая, что размер электронов возрастает с ростом температуры, необходимо создать им благоприятные условия как путем увеличения размеров сквозных пор, так и путем вакуумирования каналов проводимости для беспрепятственного движения электронов. Увеличить размеры межмолекулярных пор возможно только при соответствующих фазовых переходах, но это не гарантирует, что размеры межмолекулярных пор будут достаточны для перехода вещества в сверхпроводящее состояние. В связи с этим, необходимо идти по пути создания

условий движения электронов в межгранулярных порах и сквозных отверстиях, размеры которых можно искусственно регулировать в широких пределах.

Литература к главе 7

1. Александров, Б. Л. Изучение карбонатных коллекторов геофизическими методами. – М. : Недра, 1979. – 200 с.
2. Байков, Ю. М. Водород в керамике. $\text{Ba}_2\text{YCu}_3\text{O}_{7-y}$ / Ю. М. Байков, Е. А. Егоров [и др.] // СФХТ. – 1990. – № 1. – Т. 3. – С. 104-113.
3. Балбашов, А. М. Направленная кристаллизация и свойства соединения $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_x$. / А. М. Балбашов, Е. А. Антонова, А. С. Нигматуллин [и др.] // СФХТ. – 1989. – № 1. – Т. 2 – С. 57-63.
4. Вонсовский, С. В. Сверхпроводимость переходных металлов, их сплавов и соединений / С. В. Вонсовский, Ю. А. Изюмов, Э. З. Курмаев. – М. : Наука, 1977. – 383 с.
5. Генпе, А. П. Диэлектрики // Физические величины. Справочник. – М. : Энергоатомиздат, 1991. – С. 543-559.
6. Гинзбург, В. Л. Сверхпроводимость / В. Л. Гинзбург, Е. А. Андрюшин. – М. : Педагогика, 1990. – 112 с.
7. Горюнов, И. И. Геофизические исследования трещиноватости горных пород // Проблемы трещинных коллекторов нефти и газа и методы их изучения. – Л. : Недра, 1968. – С. 134-150.
8. Гречухин, В. В. Геофизические методы исследования угольных скважин. – 2-е изд. – М. : Недра, 1970. – 510 с.
9. Гуртовой, В. Л. Визуализация областей пленок $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ с различными T_c в растровом электронном микроскопе / В. Л. Гуртовой, А. В. Черных, А. В. Ермолаев // СФХТ. – 1990. – № 1. – Т. 3. – С. 43-46.
10. Гуфан, Ю. М. Структурные фазовые переходы. – М. : Наука, 1982. – 304 с.
11. Дахнов, В. Н. Интерпретация результатов геофизических исследований разрезов скважин. – М. : Недра, 1972. – 365 с.
12. Дахнов, В. Н. Геофизические методы изучения нефтегазоносных коллекторов / В. Н. Дахнов, Л. П. Долина. – М. : Гостоптехиздат, 1959.
13. Добрынин, В. М. Физические свойства нефтегазоносных коллекторов в глубоких скважинах. – М. : Недра, 1965.
14. Доклады по проблеме трещинных коллекторов нефти и газа. (к III Всесоюзному совещанию по коллекторам нефти и газа). – М. : ВНИГНИ – ВНИГРИ, 1956. – 263 с.
15. Егоров, В. С. Электрические свойства металлов и сплавов / В. С. Егоров, И. Н. Хлюстюнов // Физические величины. Справочник. – М. : Энергоатомиздат, 1991. – С. 437-454.
16. Епохович, А. Н. Справочник по физике. – М. : Изд-во физ.-мат. лит., 1990.
17. Интенберг, С. С. Промысловая геофизика. – М. : Гостоптехиздат, 1961. – 388 с.

-
18. *Интенберг, С. С.* Интерпретация результатов каротажа сложных коллекторов / С. С. Интенберг, Г. А. Шнурман. – М. : Недра, 1984. – 256 с.
 19. *Капустинский, А. Ф.* Физическая химия металлургических процессов. – Т. 1. – М. ; Л. : ОНТИ «Госметаллургиздат», 1933. – 222 с.
 20. *Китайгородский, А. И.* Молекулярные кристаллы. – М. : Наука, 1971. – 424 с.
 21. *Кобранова, В. Н.* Физические свойства горных пород. – М. : Гостоптехиздат, 1962.
 22. *Котов, М. А.* Верхнее критическое магнитное поле тонкой пленки $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-y}$. / М. А. Котов, В. В. Огурцов, А. А. Филиппов [и др.] // СФХТ. – 1989. – № 1. – Т. 2. – С. 12-15.
 23. *Лазарев, С. Д., Мейлихов, Е. З.* Электрофизические свойства полупроводников / С. Д. Лазарев, Е. З. Мейлихов // Физические величины. Справочник. – М. : Энергоатомиздат, 1991. – С. 454-542.
 24. Методика изучения трещиноватости горных пород и трещинных коллекторов нефти и газа / под ред. Е. М. Смехова. – Л. : Недра, 1969. – 125 с.
 25. *Пирсон, С. Д.* Справочник по интерпретации данных каротажа. – М. : Недра, 1966.
 26. Пособие для поступающих в вузы. – 2-е изд., перераб. и доп. – М. : Изд-во МГУ, 1975. – 382 с.
 27. Применение методов промысловой геофизики при изучении газоносных коллекторов : сб. статей. – М. : Гостоптехиздат, 1962.
 28. Промысловая геофизика : пер. с англ. – Вып. 4. – М. : Гостоптехиздат, 1962.
 29. *Райс, Т.* Электронно-дырочная жидкость в полупроводниках / Т. Райс, Дж. Хенсел, Т. Филлипс [и др.]. – М. : Мир, 1980. – 347 с.
 30. *Трофимова, Т. И.* Курс физики. – М. : Высш. шк., 2000. – 542 с.
 31. Физические величины. Справочник / под ред. И. С. Григорьева, Е. З. Мейлихова. – М. : Энергоатомиздат, 1991. – 1235 с.
 32. Физическая энциклопедия. – Т. 1 / гл. ред. А. М. Прохоров. – М. : Сов. энциклопедия, 1988. – 704 с.
 33. Физический энциклопедический словарь / гл. ред. А. М. Прохоров. – М. : Советская энциклопедия, 1984. – 944 с.
 34. *Хомченко, Г. П.* Неорганическая химия / Г. П. Хомченко, И. К. Цитович. – М. : Высш. шк., 1978. – 447 с.
 35. *Desbrandes, R.* Theorie et interpretation des diagraphies. – Paris : Editions Technip, 1968.
 36. Phys. Rew. Bd. – 1923. – P. 529; 1926. – P. 791.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Подводя итоги вышесказанного, можно отметить, что в работе решены следующие вопросы.

Предложена модель фотона в виде двух разноименно заряженных полумасс, совершающих поступательно-вращательно-колебательные движения и формирующих фотонную стоячую волну. Расчетами показано, что одновременное воздействие и изменение соотношения электрической, магнитной и гравитационной сил при удалении и сближении двух разноименно заряженных полумасс фотона сохраняет их в состоянии поступательно-вращательно-колебательного движения, представляющего сущность волнового процесса, а амплитуда колебательного процесса при свободном полете фотона связана с его длиной волны соотношением вида $A = \frac{\lambda}{4\pi}$. При движении фотона вокруг поступательно дви-

жущейся заряженной частицы, например, электрона, образуется стоячая фотонная волна, описываемая уравнением, аналогичным стационарному волновому уравнению Шредингера в квантовой механике. Делается вывод, что постоянная Планка h характеризует энергию фотона единичной частоты с массой $7,37 \cdot 10^{-49}$ кг, содержащего в себе по $6,666 \cdot 10^{-40}$ Кл положительного и отрицательного зарядов.

Развиваются и дополняются современные представления о строении атома, как его внешней оболочки, так и ядра, в которых важная роль отводится фотонам. Утверждается, что вокруг электронов атома вращаются фотоны в виде фотонных орбиталей, каждая из которых может включать фотоны определенной последовательности частот, составляющих «волновой пакет». Эти фотонные орбитали создают вокруг электронов атома электромагнитное поле, не позволяющее электронам упасть на ядро. Излучение фотона электроном атома или его поглощение приводит к переходу электрона на новую стационарную орбиту.

Показано, что волновое уравнение Шредингера применительно к атому водорода описывает не плотность вероятности нахождения электрона вокруг ядра, а волновые свойства фотонного электромагнитного поля вокруг электрона. В связи с этим предлагается другая интерпретация решения уравнения Шредингера для электрона в атоме водорода и иной физический смысл s-, p-, d-, ... состояний электрона, заключающийся в количестве стоячих фотонных волн (n_λ), укладывающихся на длине орбиты электрона, в том числе: s-состояние – $\frac{1}{2} n_\lambda$; p-состояние – $1 \cdot n_\lambda$; d-состояние – $2 n_\lambda$; f-состояние – $4 n_\lambda$; g-состояние – $8 n_\lambda$ и т. д.

Развивая представление о строении ядра атома, возвращается в ином качестве утраченное понятие «ядерных» электронов. Утверждается, что нейтроны в ядрах атомов представляют собой не цельное монолитное образование, а состоят из протонов, вокруг которых на близком расстоянии (10^{-16} – 10^{-15} м) вращаются электроны со своими фотонными орбиталями из гамма-квантов. Вокруг

протонов в ядрах также вращаются фотоны – гамма-кванты. Наличие фотонов вокруг разноименно заряженных частиц ядра не позволяет им аннигилировать. Объединение четырех протонов и двух электронов с учетом их фотонных полей создает устойчивую конструкцию в виде α -частиц, которым отводится самостоятельная роль в структуре ядер атомов. Ядро предлагается рассматривать как кристаллическую структуру из самостоятельных и надстроенных α -частиц с некоторым количеством избыточных нейтронов между структурным каркасом из α -частиц. Избыточные нейтроны в силу предлагаемых особенностей их строения осуществляют консолидирующую функцию. «Ядерные» электроны взаимодействуют со свободными протонами и протонами нейтронов, и совместно с электромагнитными полями гамма-квантов вокруг заряженных частиц ядра формируют их электромагнитные силы взаимодействия и одновременно не позволяют им аннигилировать. Таким образом, предлагается модель атома, в которой как на внешней его оболочке, так и в ядре важная роль отводится фотонам, частота которых повышается от периферии к ядру и, следовательно, модель атома является электронно-протонно-фотонной. Расчетами показано, что спин «ядерного» электрона не более $2,73 \cdot 10^{-38}$ Дж·с, что на три порядка меньше магнетона Бора, т. е. спина орбитального электрона.

В работе уделено большое внимание роли фотонов в химической связи при образовании молекул. Выполнен большой объем расчетов по взаимодействию двух атомов водорода при формировании молекулы H_2 . Анализируется роль температуры и катализаторов на скорость химических реакций. В частности, утверждается, что наряду с образованием молекул на основе ионных связей, возможно их образование из электронейтральных атомов, причем межатомное взаимодействие электронейтральных атомов обусловлено электрическими полями атомных ядер и внешних валентных электронов. Роль магнитных сил, в том числе спинов, в формировании химических связей существенно преувеличена, так как электрические силы, действующие между протонами ядер и внешними электронами атомов по величине на порядки превышают силы магнитного взаимодействия.

В работе показано, что физическая интерпретация решения волнового уравнения Шредингера для электрона атома водорода относительно взаимосвязи отрицательных и положительных функций была выполнена ошибочно, поэтому дальнейшее развитие теории химической связи, начиная от s-, p-, d-, h-, f-состояний электрона в атоме водорода и их сущности, вопросы гидридизации, образования молекулярных орбиталей пошли по ложному пути. Это дает основание негативно отнестись к возможности применения существующих решений квантовой механики для обоснования механизма химической связи атомов и молекул.

Утверждается, что в образовании химической связи, наряду с фундаментальной ролью валентных электронов, важная роль принадлежит фотонам, создающим электромагнитные поля вокруг этих электронов. Причем наиболее благоприятные условия создания устойчивой химической связи возможны только при синхронизме вращения взаимодействующих электронов и синхро-

низме формирования фотонных волновых пакетов вокруг валентных электронов и наиболее устойчиво при сдвиге по фазе движения электронов по орбитам $0 \div 90^\circ$.

В молекулах атомы соединены друг с другом в определенной последовательности в соответствии с их валентностью. Направление связей атома с соседними атомами контролируется направлением плоскостей вращения валентных электронов и корректируется направлением вращения внешних фотонных орбиталей вокруг валентных электронов. При этом взаимодействие атомов осуществляется не просто через фотонные орбитали валентных электронов, а через пучности фотонных стоячих волн (или интерференционные максимумы фотонных волновых пакетов), за счет чего и достигается строгая направленность в расположении атомов в молекулах и формирование кристаллической решетки. Разрушение внешней фотонной орбитали при снижении температуры или формирование новой фотонной орбитали при повышении температуры приводит к изменению направления вращения внешних фотонных орбиталей и изменению направления связи между атомами и, как следствие, к фазовому переходу в твердом состоянии вещества. В работе анализируется формирование двойных связей между атомами, в которых участвуют по два валентных электрона каждого атома. Причем делается вывод, что прочная двойная связь проявляется лишь в том случае, когда наблюдается синхронизм взаимодействия всех четырех электронов с их фотонными волновыми пакетами. Атом водорода, в отличие от атомов других элементов, проявляет дополнительную водородную связь с сильно электроотрицательными атомами потому, что у атома водорода только один электрон; он свободно вращается и может взаимодействовать с другими атомами одновременно с одной и с другой стороны его полета вокруг ядра. Эта двойная связь устойчива только при соблюдении синхронизма движения валентных электронов уже у трех атомов, включая сам атом водорода.

Констатируется, что скорость одних химических реакций может возрастать при увеличении температуры, а других наоборот – при снижении температуры. В каждом конкретном случае это связано с достижением состояния синхронизма атомов по аналогии с тем, что при экзотермических реакциях для достижения синхронизма движения валентных электронов взаимодействующих атомов излучаются внешние излишние фотоны с валентных электронов одного или обоих атомов и температура среды возрастает, а при эндотермических реакциях для достижения синхронизма электронов одним или обоими валентными электронами взаимодействующих атомов поглощаются из окружающей среды или из вакуума фотоны нужной частоты.

В работе рассматриваются вопросы теории теплоты и энергии. Показано, что внутренняя энергия тела или внутренняя теплота обусловлена энергией фотонов, вращающихся вокруг электронов на внешней оболочке атома, а также вокруг заряженных частиц – протонов и электронов в ядре атома. Внутренняя энергия тела может увеличиваться не только за счет дополнительного поглощения фотонов, но и при механическом воздействии на тело, приводящем к увеличению результирующей частоты колебания фотонов вокруг заряженных ча-

стиц атомов вещества. Таким образом, теплота – это сконцентрированная энергия фотонов, которая может быть увеличена за счет механического воздействия, приводящего к повышению результирующей частоты колебания фотонов и, следовательно, концентрации энергии фотонов. При этом без наличия фотонов в веществе механически невозможно повысить количество теплоты в нем и, следовательно, температуру тела. В связи с этим под температурой вещества, регистрируемой инструментально, предлагается считать физическую величину, характеризующую объемную плотность фотонной энергии на внешней оболочке атомов (молекул) в пределах валентных электронов. Внутренние электроны атомов содержат другой спектр фотонных оболочек с частотой фотонов существенно выше, чем спектр фотонов валентных электронов, поэтому температура в пределах внутренних электронов атомов существенно выше. Вокруг заряженных частиц ядра (протонов и электронов) вращаются фотоны наиболее высоких частот – гамма-кванты, поэтому объемная плотность ядерной фотонной энергии резко возрастает, что соответствует еще более высокой температуре в ядре по сравнению с внешней оболочкой атома. Таким образом, температура на каждом срезе атома, включая ядро, изменяется скачкообразно и возрастает от периферии к ядру. Следовательно, измеряя температуру, мы фиксируем минимальную температуру атомов данного вещества, соответствующую в каждый момент объемной плотности энергии фотонных орбиталей, вращающихся вокруг валентных электронов.

С учетом этих факторов предложено уравнение, определяющее температуру вещества как меру объемной плотности фотонной (квантовой) энергии внешних валентных электронов в веществе, обусловленной не только собственной частотой колебания фотонов, но и индексом возбужденного состояния вещества. Предложенная формулировка и математическое выражение температуры вещества обосновывают объединение кинетических и квантово-механических представлений о природе температуры вещества и позволяют дать физическое объяснение различных термических эффектов и природных явлений, связанных с проявлением температуры вещества как объемной плотности фотонной энергии в пределах валентных и свободных электронов в веществе. С позиции предложенной теории температуры вещества под температурой абсолютного нуля следует понимать такое состояние вещества, при котором в нем в пределах валентных и свободных электронов отсутствует фотонная энергия. В связи с этим до тех пор, пока в околоэлектронном пространстве валентных электронов будет находиться хотя бы один фотон, температура вещества не будет равна абсолютному нулю и будет определяться как частотой этого фотона, так и индексом возбужденного состояния электрона, вокруг которого вращается этот фотон. В то же время, при отсутствии фотонов вокруг валентных электронов в веществе, независимо от величины индекса возбужденного состояния, температура будет равна нулю. Однако достичь такого состояния, при котором в веществе концентрация фотонов вокруг валентных электронов будет равна нулю, невозможно потому, что в пространстве, окружающем данное вещество, всегда имеется хотя бы минимальная концентрация фотонов, которая стремится при-

ти в равновесие с окружающей средой. Кроме того, в этом случае возможен переход фотонов от внутренних электронов к электронам внешним – валентным.

Показано, что изменение объема тела в целом или его линейных размеров можно достичь как за счет механического приложения силы, так и изменением температуры вещества. Способность тела изменять свой объем под действием всестороннего давления – сжимаемость, и способность тела изменять размеры в процессе нагревания (охлаждения) – тепловое расширение (сжатие) имеют общую физическую основу. Изменение объема тела при сжатии происходит за счет уменьшения объема, занимаемого фотонным полем вокруг валентных электронов. Это приводит к повышению температуры тела, которая при постоянном действии нагрузки постепенно снижается до состояния равновесия с окружающей средой путем излучения фотонов.

Природа термического расширения и сжатия газообразных, жидких и твердых тел – изменение объема фотонного поля вокруг валентных электронов при изменении температуры тела. Так, при снижении температуры тела происходит излучение части фотонов, вращающихся вокруг валентных электронов, т. е. удаление из вещества части фотонного поля электронов. За счет этого валентные электроны приближаются к ядрам атомов и стягивают соседние атомы между собой, объем тела уменьшается. При увеличении температуры тела за счет поглощения подводимого извне тепла, т. е. фотонов, происходит увеличение диаметров фотонных орбиталей валентных электронов. Это приводит к увеличению внутреннего распирающего давления фотонного поля валентных электронов и их удалению от ядра атомов и в целом – к увеличению объема тела.

Таким образом, при термобарическом изменении объема вещества основную роль играют фотонные орбитали вокруг валентных электронов атомов, объемная плотность энергии которых, с одной стороны, характеризует температуру тела, а с другой стороны, регулирует взаимодействие валентных электронов с ядром атома, взаимодействие между атомами и контролирует изменение объема вещества при изменении температуры и давления.

Показан физический смысл универсальной газовой постоянной $R = 8,31 \frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}}$, заключающийся в том, что это есть дополнительная фотонная энергия при нагреве на 1 градус и $p = \text{const}$, приходящаяся на все молекулы одного моля, и она сосредоточена вокруг всех молекул одного моля в дополнительном объеме $\Delta V_{\mu} = 82,033 \text{ см}^3$. Дополнительная фотонная энергия, приходящаяся на одну молекулу при его нагреве на 1 градус и $p = \text{const}$, составляет $1,38 \cdot 10^{-23} \text{ Дж}$, и она сосредоточена вокруг каждой молекулы в дополнительном объеме $\Delta V = 1,3622 \cdot 10^{-22} \text{ см}^3$. В этом заключен физический смысл постоянной Больцмана $k = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ Дж}$.

Анализ яркости спектральных линий для атома водорода показывает, что яркость линий каждой из спектральных серий увеличивается с увеличением длины волны. С увеличением же длины волны энергия фотонов уменьшается, поэтому делается вывод, что с увеличением длины волны закономерно увеличи-

вается яркость спектральных линий лишь за счет возрастания количества излучаемых фотонов с одинаковой или очень близкой и трудно различаемой частотой. Под действием же магнитного или электрического полей возникает расщепление спектральных линий излучения такого пакета фотонов с очень близкой частотой на несколько «фотонов», представляющих пакеты с еще меньшим диапазоном частот фотонов. Таким образом, на одной фотонной орбитали вокруг электрона атома водорода одновременно вращается несколько или множество фотонов с одинаковой или очень близкой частотой. В обычных условиях они излучаются одновременно и создают спектральную линию высокой яркости, а при наличии магнитного или электрического поля могут излучаться отдельными порциями, пакетами с еще меньшим диапазоном частот, и происходит расщепление всей совокупности фотонов «одной частоты» на несколько групп фотонов.

Анализируется физическая сущность понятия теплоемкости и фазового перехода. Делается вывод, что теплоемкость веществ является неоднозначным физическим параметром и существенно изменяется от температуры и при фазовых переходах как I, так и II рода. При фазовых переходах II рода теплоемкость имеет характерный λ -образный вид, являющийся аномалией собственно теплоемкости, так как теплота фазового перехода II рода равна нулю. Нельзя согласиться, что основной причиной фазового перехода является переход атомов вещества из состояния порядка в состояние беспорядка или наоборот. Необходимо признать, что как в высокотемпературной, так и в низкотемпературной фазах кристаллических решеток атомы находятся каждый раз в том порядке, который им обеспечивают их связи с соседними атомами, зависящие от характера и формы последней фотонной оболочки валентных электронов атомов. Таким образом, характер кривых интенсивного пикообразного изменения теплоемкости от температуры для многих элементов в точках температур фазовых переходов свидетельствует о том, что при температуре фазового перехода происходит разрушение одной фотонной орбитали и начинается взаимодействие атомов через следующую фотонную орбиталь.

На величину теплоемкости оказывают влияние две составляющие изменения внутренней энергии системы при изменении объемной плотности фотонной энергии – за счет количества и частоты поглощенных фотонов (их концентрации и спектра энергии) и за счет механической энергии поступательного, колебательного и вращательного движения атомов и молекул вещества. Поэтому становится понятен физический смысл особенностей изменения удельной и молярной теплоемкостей в широком диапазоне температур и агрегатных состояний. Так, с понижением температуры уменьшается объем фотонного пространства (поля) около валентных электронов атомов; в связи с этим одинаковое количество теплоты или одинаковая концентрация поглощенных фотонов приводит к большему увеличению объемной плотности фотонной энергии и, как следствие, наблюдается снижение теплоемкости с понижением температуры.

При фазовом переходе I рода, например, превращении жидкости в пар, в первую очередь процесс кипения происходит за счет накапливания на нагрева-

емой поверхности молекул газа, которые при нагревании превращаются в пузырьки. Всплытие пузырьков газа происходит под действием выталкивающей силы в соответствии с законом Архимеда, когда последняя превышает силу адсорбционного притяжения молекул к нагреваемой поверхности. Эффективный диаметр молекул газа увеличивается при поглощении некоторого количества фотонов (тепловой энергии) и, в соответствии с предлагаемой концепцией вращения фотонов вокруг электронов атомов, это приводит к увеличению объема атома и уменьшению его объемной плотности. По аналогии, молекулы, формирующие газообразную атмосферу воздуха над поверхностью Земли или другой планеты при переходе из жидкого состояния в газообразное, также могут всплывать. При этом на них может воздействовать выталкивающая сила Архимеда лишь при условии, когда средой, в которой плавают газообразные молекулы воздуха, является фотонный газ, фотонное силовое поле, действие которого по выталкиванию молекул газа воздуха эквивалентно действию жидкости или газа на тело, помещенное в эту среду. Для этого случая выполнен расчет необходимой фотонной энергии поля, которая достаточна для подъема молекул соответствующего вещества на определенную минимальную высоту над поверхностью Земли при переходе этого вещества в газообразное состояние при определенных температурных условиях испарения. Рассчитаны эффективные радиусы молекул различных газов при температуре $t = 0^\circ\text{C}$, которые оказались практически одинаковыми и равны $1,667 \cdot 10^{-7}$ см. Эффективные радиусы молекул различных газов при температуре их испарения, рассчитанные через плотности этих газов при температуре кипения, укладываются в определенную закономерность, увеличиваясь с ростом температур кипения этих газов. Расчеты показали, что эффективные радиусы молекул вещества в газообразном состоянии при температурах кипения и в жидком состоянии при температурах, близких к температурам кипения, отличаются примерно в 6,5 раза. Увеличение радиуса молекул газа при переходе из жидкого в газообразное состояние приводит к соответствующему увеличению объема молекулы, причем прирост объема молекулы хорошо коррелируется с величиной скрытой теплоты испарения, т. е. энергии, поглощаемой при переходе жидкости в пар при температуре кипения. Наличие такой связи однозначно свидетельствует о том, что поглощение тепловой энергии атомами и переход их в газообразное состояние сопровождается поглощением квантов энергии электронами и в результате увеличением размеров атомов.

Анализ взаимосвязи явления электропроводности и сверхпроводимости с концепцией вращения фотонов вокруг электронов атомов показал, что зависимость температурного коэффициента электрического сопротивления α от величины электрического сопротивления является общей для проводников, полупроводников и диэлектриков. Следовательно, природа их электропроводности является единой и нецелесообразно ставить вопрос о «дырочной» проводимости в полупроводниках и тем более о «электронно-дырочной жидкости».

Комплексный анализ кристаллической структуры и удельного электрического сопротивления различных химических элементов таблицы Д. И. Менделеева,

а также исследовательских данных показал, что на величину электрического сопротивления вещества большое влияние оказывает тип кристаллической решетки, величина и характер распределения межмолекулярных, межгранулярных и трещинных пор. В связи с весьма большим различием размеров межгранулярных и трещинных пор по сравнению с межмолекулярными порами их влияние является превалирующим при возможности частичного их заполнения электронами проводимости.

В соответствии с выдвинутой концепцией о наличии вокруг заряженных частиц фотонного электромагнитного поля, показана значительная роль фотонов в электропроводности вещества, так как на ее величину существенное влияние оказывает соотношение площади сечения канала проводимости и площади сечения фотонного электромагнитного поля вокруг единичного электрона проводимости. С понижением температуры вещества снижается концентрация фотонов вокруг электронов и уменьшается объем фотонного электромагнитного поля вокруг них. Одновременно уменьшается фотонное поле вокруг ионов (атомов) кристаллической решетки вещества, что приводит к увеличению размеров пор и каналов проводимости и, следовательно, к уменьшению соотношения площади сечения фотонного поля вокруг электронов (S_ϕ) и площади сечения пор и каналов проводимости (S_n). Это способствует более свободному движению электронов проводимости по межмолекулярным, межгранулярным и трещинным каналам проводимости и соответственно снижению электрического сопротивления. При отношении $\frac{S_\phi}{S_n} \leq 1$ электроны могут свободно перемещаться

по каналам проводимости под воздействием электрического поля, не испытывая сопротивления, что и отражается в явлении сверхпроводимости. В состоянии сверхпроводимости скорость движения электронов может достигать скорости света. В этих условиях сила магнитного притяжения между параллельно движущимися электронами сопоставима по величине с силой электрического отталкивания, а с учетом компенсирующего электрического влияния ионов кристаллической решетки магнитные силы притяжения начинают доминировать над электрическими. Это приводит к сжатию фотонных электромагнитных полей вокруг электронов проводимости и способствует их более свободному беспрепятственному движению по каналам проводимости, что и отмечается резким снижением электрического сопротивления при переходе вещества в состояние сверхпроводимости. С учетом параллельности каналов проводимости в состоянии сверхпроводимости удельное электрическое сопротивление вещества становится ниже, чем минимальное значение удельного электрического сопротивления «электронной жидкости», т. е. при условии свободного движения общей массы электронов проводимости.

Предложено математическое выражение, описывающее зависимость удельного электрического сопротивления вещества от влияния различных факторов и типов каналов проводимости. Решение этого уравнения с учетом конкретных условий позволило показать влияние каждого фактора на величину электрического сопротивления. Расчетами подтверждено, что в условиях перехода веще-

ства в сверхпроводящее состояние его удельное электрическое сопротивление может быть существенно ниже, чем минимальное значение удельного электрического сопротивления электронной жидкости.

Анализ выполненных многочисленных расчетов проводимости позволил выявить условия перехода вещества в сверхпроводящее состояние и пути получения высокотемпературных сверхпроводников. Чтобы получить образцы высокотемпературных сверхпроводников (с учетом того, что эффективный диаметр электронов проводимости возрастает с ростом температуры), необходимо создавать благоприятные условия для свободного движения электронов проводимости как путем увеличения размеров сквозных пор, так и путем вакуумирования межгранулярных и трещинных каналов проводимости для беспрепятственного движения электронов. Увеличить размеры межмолекулярных пор возможно только при соответствующих фазовых переходах, однако это не гарантирует, что размеры межмолекулярных пор будут достаточны для перехода вещества в сверхпроводящее состояние. В связи с этим необходимо идти по пути создания условий движения электронов в межгранулярных порах и сквозных отверстиях, размеры которых можно искусственно регулировать в широких пределах.

Таким образом, выдвинутая концепция о характере взаимоотношения фотонов с элементарными частицами вещества на основе предложенной модели фотона позволяет расширить существующие представления о строении атома, критически рассмотреть основы квантовой механики – результаты решения волнового уравнения Шредингера для электрона в атоме водорода и дать новую интерпретацию решения этого уравнения.

Принимая условие, что фотонное электромагнитное поле вокруг элементарных частиц является частью массы самой частицы, следует отметить, что масса элементарных частиц не остается величиной постоянной, а зависит от температуры и силы взаимосвязи элементарных частиц между собой. Это подтверждается выделением энергии в виде фотонов, эквивалентной дефекту массы при образовании ядер атомов из совокупности элементарных частиц, выделением или поглощением тепла при соответствующих экзо- и эндотермических реакциях.

Итак, выдвинутая концепция взаимодействия фотонов с элементарными частицами позволила дать единое объяснение физического смысла понятия температуры вещества в различных агрегатных состояниях, объяснить природу фазовых переходов в твердом состоянии и особенности изменения теплоемкости веществ, показать роль фотонов в электропроводности и сверхпроводимости, а также дать математическое выражение электропроводности с учетом межмолекулярной, межгранулярной, вторичной (кавернозной и трещинной) пористости и характера заполнения этих пор, предложить критерий синхронизма электронов взаимодействующих атомов при формировании химических связей и образовании молекул.

На основании предложенной концепции взаимодействия фотонов с элементарными частицами вещества можно рассмотреть механизм многих других физических явлений и процессов, например, таких как горение, взрыв и т. д.

Результаты выдвинутой концепции вполне согласуются с современными представлениями о физическом вакууме (фотонное электромагнитное поле или эфир) и вращающимся торсионным полем, чем по сути дела и являются вращающиеся вокруг элементарных частиц электромагнитные поля в виде фотонных орбиталей.

Рассматриваемый в учебном пособии определенный спектр вопросов представляет собой альтернативный подход к объяснению ряда фундаментальных физических и химических явлений и процессов. Часть из них нами подкреплена конкретными расчетами. Это дает основание надеяться, что предложенное научной общественности издание вызовет интерес не только у научных работников – физиков, химиков, но также у профессорско-преподавательского состава высшей и средней школы.

Альтернативный взгляд на рассматриваемые в учебном пособии вопросы будет особенно полезен для молодых ученых, аспирантов, которые могут критически анализировать, а при возможности развивать предложенную концепцию применительно к другим физическим и химическим явлениям и процессам и тем самым утверждать ее справедливость. Ведущим специалистам, разрабатывающим для учащихся и студентов учебники и учебные пособия, в первую очередь, по физике и химии, по нашему мнению, было бы целесообразно отразить в них основные физические и математические модели, которые достаточно обоснованно аргументированы нами в работе. Это позволит в сжатые сроки донести до подрастающего поколения будущих ученых и специалистов альтернативные решения по ряду фундаментальных физических и химических явлений.

Считаем своим долгом отметить, что предложенные нами новые физические и математические модели и альтернативные решения оказались возможны лишь в силу того, что предшествующие поколения ученых выдвигали и развивали свои идеи, экспериментировали, выявляли и обосновывали существующие в природе взаимосвязи и подготовили нам возможность сформулировать свои взгляды и решения. И если в некоторых случаях в условиях расхождения наших мнений с представлениями предшествующего поколения ученых мы позволяли выразиться несколько остро, это никак не снижает нашего глубочайшего уважения к поколениям ученых, на мощные плечи которых мы постоянно опирались в своей работе.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие к переизданию	3
Предисловие	6
Введение	8
Глава 1. Сущность концепции, объединяющей различные физические явления	12
Глава 2. Модель фотона	14
Глава 3. Роль фотонов в строении атома	41
3.1. Роль фотонов в строении внешней части атома.....	41
3.2. Роль фотонов в строении ядра атома.....	90
Глава 4. Роль фотонов в формировании химических связей и строении молекул	122
4.1. Анализ существующих представлений о природе химических связей.....	122
4.2. Расчет сил взаимодействия атомов при образовании молекулы водорода.....	141
4.3. Обоснование критериев синхронного взаимодействия двух атомов.....	189
4.4. Влияние температуры и катализаторов на скорость химических реакций.....	197
Глава 5. Теплофизические характеристики и процессы	204
5.1. Теплота, работа, энѐргия.....	204
5.2. Тепловое излучение и его спектр.....	210
5.3. Температура.....	220
5.4. Термобарическое изменение объема вещества.....	245
5.5. Физический смысл универсальной газовой постоянной и постоянной Больцмана.....	252
Глава 6. Теплоемкость и фазовые переходы	261
Глава 7. Роль фотонов в электропроводности и сверхпроводимости вещества	301
Заключение	391

*Борис Леонтьевич АЛЕКСАНДРОВ,
Мила Борисовна РОДЧЕНКО,
Алексей Борисович АЛЕКСАНДРОВ*
**РОЛЬ ФОТОНОВ В ФИЗИЧЕСКИХ
И ХИМИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЯХ**

Учебное пособие

Издание второе, исправленное
Под редакцией профессора Б. Л. Александрова

Редакция
естественнонаучной литературы
Ответственный редактор *С. В. Макаров*
Корректор *Е. В. Разенкова*
Выпускающий *Н. А. Крылова*

ЛР № 065466 от 21.10.97
Гигиенический сертификат 78.01.10.953.П.1028
от 14.04.2016 г., выдан ЦГСЭН в СПб

Издательство «ЛАНЬ»
lan@lanbook.ru; www.lanbook.com
196105, Санкт-Петербург, пр. Юрия Гагарина, д.1, лит. А.
Тел.: (812) 336-25-09, 412-92-72.
Бесплатный звонок по России: 8-800-700-40-71

Подписано в печать 17.10.19.
Бумага офсетная. Гарнитура Школьная. Формат 70×100 ¹/₁₆.
Печать офсетная. Усл. п. л. 32,83. Тираж 100 экз.

Заказ № 716-19.

Отпечатано в полном соответствии
с качеством предоставленного оригинал-макета
в АО «Т8 Издательские технологии»
109316, г. Москва, Волгоградский пр., д. 42, к. 5.