

## **Моделирование форм электронных оболочек атомов и химических соединений с помощью упрощенной модели электрона в виде замкнутого контура с током.**

Кожевников Д.Н., лаборатория проектирования средств обучения, ИОСО РАО, г. Москва, Россия, e-mail:mageom@et.ru, тел. 367-6094.

Предлагается моделировать электрон в виде замкнутого контура, в котором движется распределенный электрический заряд, суммарно равный элементарному. В атоме размер электрона переменный и на внешних оболочках определяет размер атома. Модель такого “большого” электрона демонстрирует, что в атоме он может покоиться, то есть пребывать в стационарном состоянии, уравневав взаимопритяжение с ядром с взаимоталкиванием с другими электронами, окружающими ядро атома. Геометрическая модель электрона в виде тонкого гибкого тора, или кольца, используется для моделирования форм электронных поверхностей химических соединений с ковалентными связями - молекул и кристаллов. Модели химических соединений обладают высокой наглядностью и возможностью объяснения их физических и химических свойств, связанных с наличием у электрона магнитных свойств (стремление к завершению электронной оболочки, электроотрицательность и образование ионов).

Современные модели квантовой механики сложны, создают трудности при геометрическом моделировании и не удовлетворяют критерию логической очевидности. Без наглядной, пусть и упрощенной модели, трудно работать с объектами микромира. В то же время предложить непротиворечивую модель электрона не удастся, потому что противоречия содержатся в самих представлениях об электроне. Учитывая это, преждевременно говорить о возможности создания единой непротиворечивой и простой модели электрона, применимой в теории и практике наук физико-химического цикла. Но можно предложить упрощенную модель с широкими границами применения.

Известна модель атома, предложенная Шредингером. В ней электронные заряды и токи непрерывно распределены по объему атомной системы с плотностями, выражающимися через волновую функцию.

"Квадрат -функции имеет смысл плотности электричества", [1]. Электрон рассматривается в виде непрерывного потока стационарно вращающегося электрического заряда, потоки энергии в котором замкнуты сами на себя и также стационарны. В динамической модели атома заряды электронов непрерывно распределены по всему объему атома, что приводит к новому представлению об электронах, как о частицах тех же размеров, что и сам атом. В этом случае электрон рассматривается как система с распределенными параметрами и описывается соотношением Гейзенберга. Соответственно нет необходимости возводить соотношение неопределенности В. Гейзенберга в принцип. Стационарно вращающийся электрический заряд электрона, в полном согласии с классической электродинамикой, не излучает электромагнитной энергии - потоки в нем замкнуты сами на себя и также стационарны [2, 3, 4]. Этим проясняется содержание постулата Бора об отсутствии излучения электрона в атоме на стационарной орбите. Исчезает необходимость постулирования правил Бора. Они представляются логическими следствиями использования предлагаемой модели электрона.

Кольцо, или тонкий тор - простая осесимметричная форма замкнутого на себя потока энергии. Эта форма предлагается к использованию в качестве упрощенной геометрической модели электрона. Предлагаемая модель электрона позволяет рассматривать спин, как магнитный момент, возникающий в результате циркуляции по кольцу электрического заряда, или движения фронта волны по замкнутой, близкой к кольцу траектории [2]. Движение фронта волны связано с тем, что по периметру тора, или кольца - электрона, укладывается нецелое число волн Комптона. Их число равно величине, обратной постоянной тонкой структуры  $1/\alpha = 137.03\dots$ . В простейшем одноэлектронном случае радиус электрона совпадает с первой Боровской орбитой, который связан с длиной волны Комптона соотношением:  $R_e = \lambda / (2\pi \cdot \alpha)$ .

Возможности геометрического моделирования химических соединений и методики моделирования форм электронных поверхностей молекул с помощью примитивной модели электрона в виде тонкого тора описаны в работе [5]. В статье рассматривалась только радиальная деформация тора - его сжатие, так как не рассматривались те случаи, где имеет место деформация в нормальном направлении. Используемая здесь модель электрона является ее естественным развитием. Новым в модели является возможность изгиба тора - его деформация в направлении нормальном (перпендикулярном) плоскости, которую тор задает своим положением. Деформированный таким образом тор уже не лежит в какой-либо одной плоскости.

Замкнутый контур с током, моделирующий электрон, геометрически изображается гибким кольцом, способным к деформации как в радиальном, так и в нормальном направлениях.

Подразумевается, что размер электрона внешней оболочки, определяет размер атома и величину ковалентного радиуса. Радиус электрона-тора зависит от величины напряженности поля ядра - его электрического потенциала на расстоянии от ядра, на котором находится кольцо - электрон, а в общем случае еще и от напряженности поля всех электронов. Поэтому точный расчет радиуса локализации электрона - задача весьма сложная и здесь не рассматривается. Поскольку моделируются только стационарные состояния электронных поверхностей, то для выполнения условия отсутствия излучения замкнутые контуры (кольца) должны лежать на эквипотенциальной поверхности, создаваемой одним, или несколькими ядрами взаимодействующих атомов. Величина электрического потенциала электронной поверхности определяется как результат взаимодействия каждого "электронного контура" с ядром и другими электронами, в том числе и находящимися на внутренних оболочках. Эта величина характеризует энергию связи электрона в атоме. При изменении числа электронов, входящих в оболочку, изменяется геометрия электронной оболочки. Как следствие, изменяется величина потенциала, создаваемого ядром, или системой ядер в оболочке. Это объясняет различие энергии связи электронов в атомах элементов соседних групп периодической таблицы.

Нормальная деформация, или изгиб кольца, моделирующего электрон в атоме или молекуле, определяются не столько величиной, сколько формой электростатического поля ядра атома или системы ядер в молекулах.

В молекуле этана ( $C_2H_6$ ) в случае шахматной конформации имеет место деформация колец по нормали, их изгиб (рис. 1.1). Для сравнения приводится модель молекулы этана ( $C_2H_6$ ) в затененной конформации (рис. 1.2).

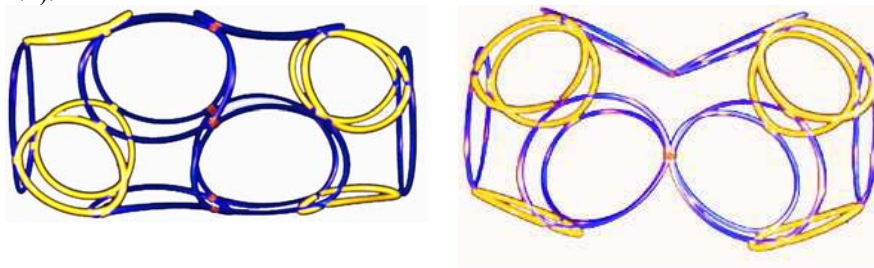


рис. 1.1. Модель молекулы этана  $C_2H_6$  в шахматной конформации.      рис. 1.2. Модель молекулы этана  $C_2H_6$  в затененной конформации.

Такого же типа связь, моделирование которой требует использование в модели электрона свойства нормальной деформации - изгиба тора с выходом из плоскости, реализуется в соединении циклогексана ( $C_6H_{12}$ ) в кресельной конформации (рис. 2.1, 2.2), и в соединении с ковалентной химической связью - в алмазе (рис. 3.1).

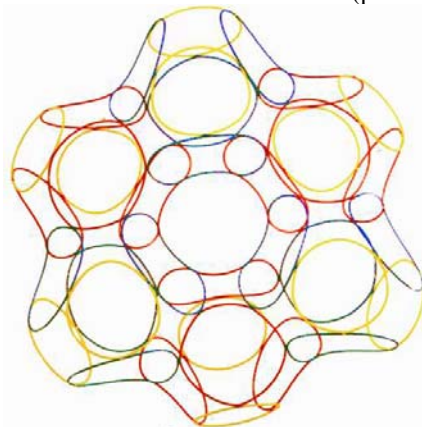


рис. 2.1. Молекулы циклогексана ( $C_6H_{12}$ ) в кресельной конформации.

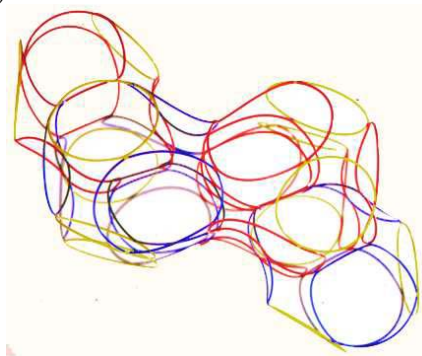


рис. 2.2.  $C_6H_{12}$ . Модель молекулы циклогексана в профиль.

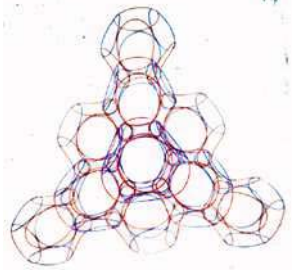


рис. 3.1 Форма электронной оболочки фрагмента алмаза.

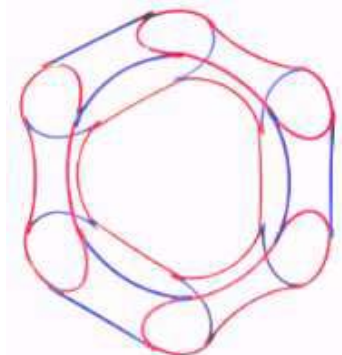


рис. 3.2 Форма электронной оболочки одного атома С в алмазе.

Отличие предлагаемой модели электрона в виде замкнутого контура с током от примитивной кольцевой в том, что она позволяет расширить возможности моделирования и отразить в модели не только ряд геометрических особенностей молекул и кристаллов, но и некоторые физические свойства электрона и электронных оболочек. Например, неоднозначность принадлежности электронов в кристалле определенному

атому, или неопределенность месторасположения электронов на электронных поверхностях даже при использовании модели "локализованного электрона".

В структуре алмаза каждый электронный контур изображен регулярно изогнутым кольцом, в котором видны три полных волны (рис. 3.2). Для наглядности модель сделана двухцветной. Во-первых это позволяет отличать "где чьи электроны", а во-вторых цвета обозначают различия знаков спин электронов. Но главная возможность этой расцветки - наглядность образования "областей повышенной электронной плотности" вдоль "линии связи". Так как три кольца одного атома (одного цвета) имеют с тремя кольцами соседнего атома (другого цвета) шесть точек касания, то на линии связи образуется замкнутое волновое кольцо из трех длин волн двух цветов (рис. 3.3). В его образовании участвуют фрагменты шести электронов - по три с каждой из сторон взаимодействующих атомов (рис. 3.4).



рис. 3.3. Форма электронов в оболочка атома углерода в алмазе.

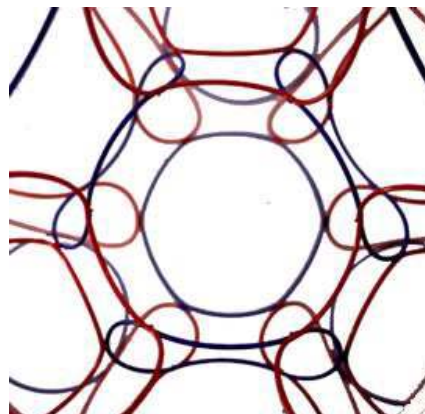


рис. 3.4. Вид электронной оболочки одного атома С в алмазе.

Если учесть, что направления "электронных токов" в соприкасающихся кольцах совпадают, то это кольцо вполне может соответствовать электрону. Этот электрон изображен двухцветным, то есть имеющим двойственную характеристику спин: - по отношению к одному атому "+", по отношению к другому "--". Существование этого "виртуального электрона связи" не нарушает законов сохранения заряда и энергии, и не входит в противоречие с принципом Паули, так как "виртуальный электрон связи" не может быть локализован, то есть стать самостоятельной частицей, без предварительного обобществления всех валентных электронов, участвующих в образовании валентной оболочки всего соединения - кристалла алмаза. На рисунках 3.1-3.4 показано, что часть электронов, составляющих завершённую оболочку из восьми

“волновых колец”, являются “виртуальными”, то есть состоящими из обобществленных фрагментов электронных колец соседних атомов. С помощью этой модели возможна демонстрация образования общей оболочки химического соединения, в которой электроны теряют свою самостоятельность, становясь подчиненной частью общего процесса. Таким образом модель "локализованного электрона", имеющего определенную форму и размеры, позволяет демонстрировать неопределенность его положения в общей оболочке и возможность его обнаружения в различных состояниях и положениях.

Предполагая движение электрического заряда в закольцованных проводниках, можно предполагать также и вихревое магнитное поле вокруг движущегося заряда. В этом случае спин электрона моделируется как вектор результирующего направления магнитных силовых линий. Этим объясняется требование различной ориентации вектора спин у соприкасающихся колец: - их магнитные силовые линии и направления движения электрических зарядов в точках контакта должны совпадать (рис. 4). А они совпадают лишь в том случае, если у соприкасающихся колец знаки спин различны. Демонстрируя устойчивость электронной оболочки, можно символически выделить даже одну магнитную линию, проходящую через всю фигуру (рис. 5). Это требование предъявляется ко всем моделям молекулярных электронных поверхностей.

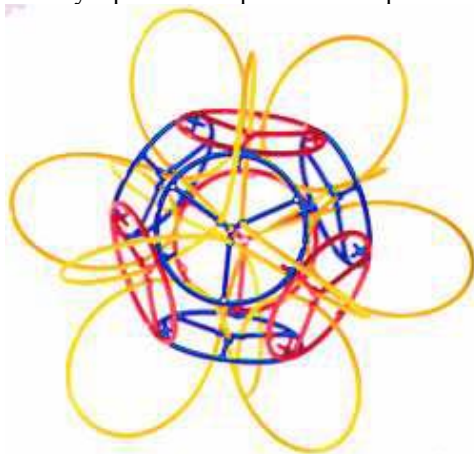


рис. 4. Символическое изображение магнитных силовых линий устойчивой электронной оболочки.

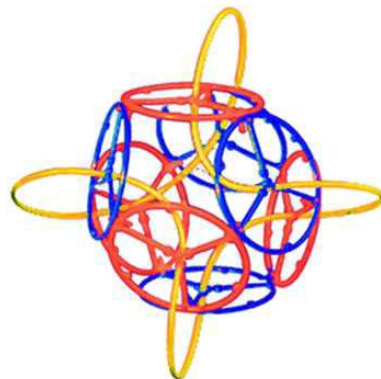


рис. 5. Символическое выделение одной магнитной линии, обвивающей электронную оболочку.

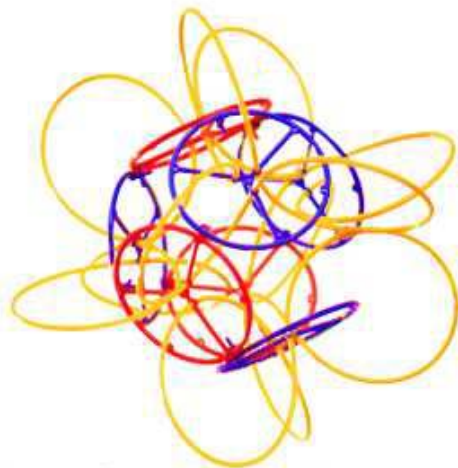


рис. 6. Магнитные силовые линии создают вокруг вакантного места магнитную ловушку для электрона.

Используя такой способ моделирования можно демонстрировать свойства "электроотрицательности" или "средства к электрону". Рассмотрим в общем виде процесс захвата нейтральным атомом галогена одного электрона, которого не хватает до завершения оболочки. На рисунке 6 видно как магнитные силовые линии соседних колец - электронов создают вокруг вакантного места конфигурацию магнитного поля, в которую "улавливается" свободный или слабосвязанный электрон из окружения. Аналогичным способом могут демонстрироваться процессы образования ионов и соединений с различными типами ковалентных связей.

Показанный метод моделирования имеет свои недостатки. Изображаемые структуры являются идеальными, то есть пока не разработаны методики учета дислокаций и дефектов роста кристаллов и других многоатомных структур. Но в перспективе имеется возможность их учета с помощью построений точно отражающих разницу ковалентных радиусов атомов, участвующих в соединении. В представленном виде модель не объясняет расщепление спектральных линий, то есть различий величин энергий связи разных электронов в пределах одной электронной оболочки.

Использование модели электрона в виде кольцевого сверхпроводящего контура открывает нам новые возможности наглядной демонстрации соотношения неопределенности Гейзенберга, принципа Паули, постулатов Бора. Простыми геометрическими построениями демонстрируется устойчивость электронных оболочек из 2, 8, 18, 32 электронов, определяющими вид таблицы Менделеева. Формулируются

простые правила моделирования форм электронных поверхностей молекул, являющихся дополнением к шаростержневым ядерным моделям, демонстрируются закономерности их формообразования от простейших соединений до сложных белковых структур. А это уже новое качество знания, связанное не только со статистическим накоплением информации и ее систематизацией, но и ее системным объяснением при выявлении общих закономерностей. Новые модели не только просты и наглядны, они содержат больше информации о электронной микроструктуре вещества.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Шредингер Э., Избранные труды по квантовой механике, Москва, Наука, 1976.
2. Okanian H.C., American Association of Physics Teachers, 1986, Amer. J.Phys., June 1986, v 54, n 6, p 500, пер. ст. в сб. Физика за рубежом, изд. Мир, 1988.
3. Власов А.Д., Атом Шредингера, УФН, N 2, 1993, т.163, с.97-103.
4. Власов А.Д., Классическое направление в квантовой механике, Москва, РАН МРИ, 1993, 229с.
5. Кожевников Д.Н., Кольцевые модели молекул, ЖФХ 1996г., т.70, N6, с.1134-1137
6. В. Гейзенберг, Физика и философия, Москва, Наука, 1989, 400с.