

Боровская модель атома, дефект массы и химическая связь.

Безверхний Владимир Дмитриевич.

Украина, e-mail: bezvold@ukr.net

Резюме: Анализируя боровскую модель атома водорода, обнаружено, что энергия потенциала ионизации точно равна дефекту массы электрона (релятивистской). Учитывая, что при образовании химической связи всегда выделяется энергия, а значит, существует дефект массы, удалось получить физическое обоснование химической связи. Вычисленные “расстояния” между электронами, подтверждают, что электроны химической связи уже нельзя считать слабо взаимодействующими частицами. Следовательно, принцип Паули к химической связи неприменим.

Ключевые слова: Дефект массы, химическая связь, боровская модель атома, потенциал ионизации, “поперечная масса”, “продольная масса”.

ВВЕДЕНИЕ.

При образовании химической связи в окружающее пространство всегда выделяется определенная энергия. Следовательно, неизбежно должен возникнуть и дефект массы, так как энергия связи это разность между энергией отдельных атомов (бесконечно удаленных друг от друга) и энергией атомов, связанных химической связью.

Пускай атомы a и b образуют двухатомную молекулу $a-b$. Учитывая формулу Эйнштейна, из энергии химической связи легко определить дефект массы:

$$E(a-b) = \Delta m * c^2$$

$$\Delta m = E(a-b) / c^2$$

где $E(a-b)$ – энергия химической связи между атомами a и b ,

Δm – дефект массы данной химической связи, c – скорость света в вакууме.

Необходимо напомнить, что теоретически строго сумма масс объектов, составляющих систему, не равна массе системы. Поэтому, при теоретическом определении дефекта массы химической связи, нельзя сравнивать массу двухатомной молекулы и сумму масс ядер и электронов.

В изолированной физической системе сохраняются только энергия и импульс в соответствии с теоремой Нётер. Причем, энергия и импульс связаны формулой Эйнштейна, из которой уже можно определить массу системы:

$$E^2 = (p * c)^2 + (m * c^2)^2$$

“...Исторически принцип эквивалентности массы и энергии был впервые сформулирован в своей окончательной форме при построении специальной теории относительности Альбертом Эйнштейном.

Им было показано, что для свободно движущейся частицы, а также свободного тела и вообще любой замкнутой системы частиц, выполняются следующие соотношения:

$$E^2 = (p \cdot c)^2 + (m \cdot c^2)^2$$

$$p = (E \cdot v) / c^2$$

где E , p , v , m - энергия, импульс, скорость и инвариантная масса системы или частицы, соответственно, c - скорость света в вакууме.

Из этих выражений видно, что в релятивистской механике, даже когда в нуль обращаются скорость и импульс тела (массивного объекта), его энергия в нуль не обращается, оставаясь равной некоторой величине, определяемой массой тела:

$$E = m \cdot c^2$$

Эта величина носит название энергии покоя, и данное выражение устанавливает эквивалентность массы тела этой энергии. На основании этого факта Эйнштейном был сделан вывод, что масса тела является одной из форм энергии и что тем самым законы сохранения массы и энергии объединены в один закон сохранения...” [1].

Закон сохранения массы (масса замкнутой физической системы равна сумме масс ее компонентов) используемый в химии, является приближением. Это очень хорошо видно на примере протона и нейтрона: протон и нейтрон состоят из трех кварков, сумма масс этих кварков составляет всего 1 % от фактической массы протона и 1.3 % от реальной массы нейтрона.

Понимание, что при образовании химической связи существует определенный дефект массы очень важно, так как является сутью физического обоснования химической связи. Для дальнейших рассуждений рассмотрим сначала боровскую модель атома, затем молекулярный ион водорода и молекулу водорода.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЯ.

Атом водорода образуется из протона и электрона, причем, энергия связи, то есть, энергия ионизации равна 13.6 эВ [2].

Согласно Бору, электрон в атоме водорода движется по орбите со скоростью $v = 2.187691 \cdot 10^6$ м/с.

Причем, v равна:

$$v = c * \alpha = 2.187691264 * 10^6 \text{ м/с}$$

где v - скорость электрона на боровской орбите,

c – скорость света в вакууме,

α – постоянная тонкой структуры, $\alpha = 7.2973525693 * 10^{-3}$.

Согласно теории относительности масса движущегося электрона увеличится, и будет составлять $m = 9.109626 * 10^{-31}$ кг.

$$m = m_0 / (1 - v^2/c^2)^{0.5}$$

m_0 – масса покоя электрона, $m_0 = 9.1093837 * 10^{-31}$ кг.

$$v = 2.187691264 * 10^6 \text{ м/с}$$

$$m = m_0 / (1 - v^2/c^2)^{0.5} = 9.10962625 * 10^{-31} \text{ кг}$$

Особо отметим, что дефект массы при образовании атома водорода точно равен релятивистскому прибавлению массы электрона:

$$\Delta m = m - m_0 = 2.425529 * 10^{-35} \text{ кг}$$

Используя дефект массы электрона, легко получить энергию ионизации атома водорода.

$$E = \Delta m * c^2 = 2.1799567 * 10^{-18} \text{ Дж} = 13.606 \text{ эВ}$$

Таким образом, энергия связи в атоме водорода образуется за счет дефекта массы (электрона), причем, релятивистская масса электрона уменьшается до массы покоя электрона.

Уменьшение массы электрона до массы покоя очень важно, так как является гарантией безостановочного движения электрона: при замедлении или остановки электрона его масса согласно СТО Эйнштейна должна уменьшиться, а это невозможно (масса электрона это уже масса покоя). Поэтому, на боровской орбите электрон всегда будет двигаться, то есть, не будет остановки, столкновений, замедления скорости и т.п.

По аналогичной причине фотон может двигаться только со скоростью света - масса покоя фотона равна нулю, следовательно, уменьшение массы невозможно (при уменьшении скорости или остановки), а значит, фотон может двигаться только со скоростью света.

За счет эффектов теории относительности произойдет также уменьшение боровского радиуса и длины стоячей волны. Подкорректируем их значение.

Боровский радиус равен:

$$r_0 = 0.52917720859 * 10^{(-10)} \text{ м} \approx 0.529177 \text{ \AA}$$

Учтем релятивистское уменьшение и получим более точное значение боровского радиуса:

$$r = r_0 * (1 - v^2/c^2)^{0.5} = 0.52916311871 * 10^{(-10)} \text{ м} \approx 0.529163 \text{ \AA}$$

Вычислим длину стоячей волны на боровской орбите:

$$\lambda_0 = 2 * \pi * r_0 = 3.32491846191 * 10^{(-10)} \text{ м} \approx 3.324919 \text{ \AA}$$

Теперь учтем релятивистское уменьшение для стоячей волны:

$$\lambda = \lambda_0 * (1 - v^2/c^2)^{0.5} = 2 * \pi * r = 3.32482993263 * 10^{(-10)} \text{ м} \approx 3.324830 \text{ \AA}$$

Далее, рассмотрим молекулу водорода.

Энергия диссоциации молекулы водорода составляет 4.477 эВ. Это значит, что когда два удаленных в бесконечность атома водорода сближаются (на межъядерное расстояние 0.7416 \AA), то образуется молекула водорода, и при этом выделяется энергия связи равная 4.477 эВ [3].

Ранее было показано, что при движении электрона на боровской орбите, скорость электрона не может принципиально измениться. Следовательно, логично допустить, что при образовании молекулы водорода скорость электрона останется прежней (как у атома водорода). Поэтому, возникает вопрос: откуда берется дополнительная энергия, которая выделяется при образовании молекулы водорода?

Ответ на данный вопрос дает СТО Эйнштейна, а точнее понятие “продольной” и “поперечной” массы [4].

Электрон в атоме водорода движется по окружности, то есть, линейная скорость движения электрона всегда перпендикулярна ускорению. Поэтому, релятивистское увеличение массы электрона на боровской орбите - это увеличение “поперечной массы” ($v \uparrow, a \rightarrow$).

$$m(v \uparrow, a \rightarrow) = m_0 / (1 - v^2/c^2)^{0.5}$$

Движение электронов химической связи уже не будет простым движением по круговой орбите (как это было в атоме водорода), это будет намного более сложное движение по эллипсу, прямой линии и

т.п. В любом случае, некоторое время скорость и ускорение электрона будут направлены по одной линии, и поэтому, в релятивистских эффектах нужно учитывать также и “продольную массу” ($v \rightarrow, a \rightarrow$).

$$m(v \rightarrow, a \rightarrow) = m_0 / (1 - v^2/c^2)^{1.5}$$

Так как “продольная масса” больше чем “поперечная” (при данной скорости движения), то при образовании химической связи (из атомов) будет выделяться дополнительная энергия связи, которая обусловлена дефектом “продольной массы” электрона. Понятно, что скорость при этом не изменится, а изменится только направление движения электрона относительно силы.

Химическую связь можно рассматривать и как линейный гармонический осциллятор, то есть, когда частица совершает одномерные колебания возле положения равновесия (центр химической связи). В этом случае также будет увеличение “продольной массы”, так как частица будет колебаться между ядрами атомов.

Продемонстрируем сказанное выше на примере молекулярного иона водорода (H_2^+).

Энергия диссоциации молекулярного иона водорода составляет 2.648 эВ [3].

$$E = 2.648 \text{ эВ} = 4.24256371624 * 10^{(-19)} \text{ Дж} \approx 4.242564 * 10^{(-19)} \text{ Дж}$$

Межъядерное расстояние в H_2^+ равно 1.06 Å [3].

Допустим, что в молекулярном ионе водорода электрон совершает только одномерное движение, когда его скорость и ускорение направлены по одной линии. Тогда из дефекта “продольной массы” мы легко получим максимальную величину энергии, которая теоретически может выделиться при образовании H_2^+ .

Понятно, что в действительности выделенная энергия будет меньше, так как при движении электрона увеличивается не только “продольная масса”, но и “поперечная масса”. Поэтому, суммарный энергетический баланс от дефекта массы (продольной и поперечной) будет меньше. Подобное уменьшение будет наблюдаться во всех химических связях, так как электроны химической связи участвуют не только в образовании связи, но и еще “обслуживают” октеты отдельных атомов. Приведем вычисления.

Предположим, что скорость электрона в H_2^+ будет равна скорости электрона на боровской орбите.

$$v = 2.187691264 * 10^6 \text{ м/с}$$

Тогда “продольная масса” электрона вычисляется по формуле:

$$m = m_0 / (1 - v^2/c^2)^{1.5} = 9.11011137926 * 10^{(-31)} \text{ кг} \approx 9.1101114 * 10^{(-31)} \text{ кг}$$

Отсюда легко получить дефект “продольной массы” электрона.

$$\Delta m = m - m_0 = 7.2767925 * 10^{(-35)} \text{ кг}$$

Используя дефект массы, вычислим теоретически максимальную энергию.

$$E_{\max} = \Delta m * c^2 = 6.5400549 * 10^{(-18)} \text{ Дж}$$

Отметим, что полученное значение максимальной энергии (E_{\max}) больше суммы энергии отталкивания протонов и энергии диссоциации, так как при движении электрона в молекулярном ионе водорода, его скорость и ускорение иногда будут перпендикулярны, и поэтому дефект массы иногда будет определяться “поперечной массой”.

Энергия, которую молекулярный ион водорода “получает” от дефекта массы, будет расходоваться на преодоление энергии отталкивания протонов (расстояние 1.06 \AA), а остаток данной энергии выделится, и будет представлять собой энергию диссоциации молекулярного иона водорода.

Энергия отталкивания протонов в молекулярном ионе водорода равна:

$$E = (k * e^2) / r$$

где k – кулоновская постоянная, e – заряд электрона,

r – расстояние между протонами, то есть, 1.06 \AA .

$$E_{p-p} = (k * e^2) / r = 2.176488 * 10^{(-18)} \text{ Дж}$$

Напомним, что энергия диссоциации молекулярного иона водорода равна:

$$E_d = 4.242564 * 10^{(-19)} \text{ Дж}$$

Вычислим сумму энергии отталкивания протонов и энергии диссоциации.

$$E_s = E_{p-p} + E_d = 2.6007446 * 10^{(-18)} \text{ Дж}$$

Вычислим значение E_{\max} / E_s .

$$E_{\max} / E_s = 6.5400549 * 10^{(-18)} \text{ Дж} / 2.6007446 * 10^{(-18)} \text{ Дж}$$

$$E_{\max} / E_s = 2.514686 \approx 2.515$$

Как видим, максимальная энергия в 2.5 раза больше полученной суммы энергий, что и следовало ожидать исходя из наших предположений.

Аналогичную ситуацию мы будем наблюдать и в молекуле водорода. Продемонстрируем это.

Предположим, что два электрона в молекуле водорода совершают только определенные одномерные движения, когда их скорость и ускорение направлены по одной линии (увеличивается только “продольная масса”). Как обычно, принимаем, что скорость электронов химической связи равна скорости электрона на первой боровской орбите. Следовательно, максимальная энергия, вычисленная из дефекта массы для одного электрона, будет равна максимальной энергии вычисленной для молекулярного иона водорода.

Напомним, что дефект “продольной массы” для одного электрона в H_2^+ равен:

$$\Delta m = m - m_0 = 7.2767925 * 10^{(-35)} \text{ кг}$$

Теоретически максимальная энергия равна (1 электрон):

$$E_{\max} = \Delta m * c^2 = 6.5400549 * 10^{(-18)} \text{ Дж}$$

Химическая связь молекулы водорода состоит из двух электронов, поэтому максимальная энергия, которую можно “получить” от дефекта массы электронов, будет в два раза больше.

$$E_{\max} (H-H) = 2 * \Delta m * c^2 = 2 * 6.5400549 * 10^{(-18)} \text{ Дж} = 1.30801098 * 10^{(-17)} \text{ Дж}$$

$$E_{\max} (H-H) \approx 1.308011 * 10^{(-17)} \text{ Дж}$$

Так как молекула водорода состоит из двух протонов (расстояние 0.7416 \AA), и двух электронов (образуют химическую связь), то общий энергетический баланс при образовании молекулы из протонов и электронов легко можно посчитать. Он будет равен удвоенному потенциалу ионизации атома водорода плюс энергия диссоциации молекулы водорода.

Потенциал ионизации атома водорода равен 13.6 эВ.

$$E_i = 13.6 \text{ эВ} = 2.17896022 * 10^{(-18)} \text{ Дж}$$

Энергия диссоциации молекулы водорода равна 4.477 эВ.

$$E(H-H) = 4.477 \text{ эВ} = 7.17294477 * 10^{(-19)} \text{ Дж}$$

Вычислим суммарный энергетический баланс.

$$E(\text{bal}) = 2 * E_i + E(H-H) = 2 * 13.6 \text{ эВ} + 4.477 \text{ эВ} = 2.89625469 * 10^{(-18)} \text{ Дж}$$

Сравним полученный баланс с максимальной энергией.

$$E_{\max}(\text{H-H}) / E(\text{bal}) = 1.30801098 * 10^{(-17)} \text{ Дж} / 2.89625469 * 10^{(-18)} \text{ Дж}$$

$$E_{\max}(\text{H-H}) / E(\text{bal}) = 4.5162153 \approx 4.516$$

То есть, максимально возможная энергия в молекуле водорода (из дефекта массы) в 4.5 раза больше, чем реальный посчитанный нами энергетический баланс. Как и в случае молекулярного иона водорода, реальный баланс в молекуле водорода меньше теоретического максимума, так как электроны часть времени движутся, когда их скорость и ускорение перпендикулярны. То есть, в дефекте массы нужно учитывать не только “продольную массу”, но и “поперечную массу”.

Энергия “полученная” из реального дефекта массы $E(\text{bal})$, будет расходоваться на преодоление энергии отталкивания протонов в молекуле водорода, на энергию отталкивание электронов, а остаток энергии - это энергия диссоциации молекулы (H-H). Вычислим энергию отталкивания электронов.

Для начала вычислим энергию отталкивания протонов в молекуле водорода, которая равна (расстояние 0.7416 Å):

$$E_{p-p} = (k * e^2) / r = 3.11094598 * 10^{(-18)} \text{ Дж}$$

Учитывая общий энергетический баланс и энергию диссоциации молекулы, легко можно рассчитать энергию отталкивания электронов в молекуле водорода.

$$E_{e-e} = E(\text{bal}) - E_{p-p} - E(\text{H-H})$$

$$E_{e-e} = 2.89625469 * 10^{(-18)} \text{ Дж} - 3.11094598 * 10^{(-18)} \text{ Дж} - 7.17294477 * 10^{(-19)} \text{ Дж}$$

$$E_{e-e} = - 0.931985767 * 10^{(-18)} \text{ Дж}$$

Таким образом, мы получили, что суммарного энергетического баланса молекулы недостаточно для компенсации энергии отталкивания электронов. Значит, должен быть корректный физический процесс взаимодействия электронов, при котором выделится энергия достаточная для нейтрализации отталкивания между этими электронами.

Допустим, что два электрона химической связи с противоположными спинами движутся параллельно и согласованно (вдоль химической связи), то есть, они ведут себя подобно куперовской пары электронов. Тогда, мы получим два параллельных тока, которые будут между собой притягиваться по закону Ампера. Энергию взаимодействия мы знаем, поэтому легко можем вычислить расстояние между взаимодействующими электронами (расстояние между токами). Приведем расчет.

Согласно закону Ампера два проводника длины L , с токами $I(1)$ и $I(2)$, и расстоянием между проводниками r , будут притягиваться между собой с силой равной [5]:

$$F = (\mu_0 * 2 * I(1) * I(2) * L) / (4 * \pi * r)$$

где μ_0 – магнитная постоянная, $\mu_0 = 1.25663706212 * 10^{(-6)} \text{ Н/А}^2$

Сила тока по определению есть отношение количества заряда Δq , прошедшего за определенное время Δt , к величине этого интервала времени.

$$I = \Delta q / \Delta t$$

Естественно, Δq – это заряд электрона, который за время Δt на скорости v пройдет длину химической связи. Скорость электрона мы знаем (это скорость на боровской орбите), длина химической связи известна, вычислим Δt .

$$\Delta t = L / v = 0.7416 * 10^{(-10)} \text{ м} / 2.187691264 * 10^6 \text{ м/с}$$

$$\Delta t = 3.38987504 * 10^{(-17)} \text{ с}$$

Зная Δt , мы можем вычислить силу тока:

$$I = \Delta q / \Delta t = e / \Delta t = 1.60217663 * 10^{(-19)} \text{ Кл} / 3.38987504 * 10^{(-17)} \text{ с}$$

$$I = 4.72635897 * 10^{(-3)} \text{ А}$$

Учитывая, что токи у нас одинаковые, а сила Ампера будет действовать по всей длине химической связи (L), можно допустить, что энергия взаимодействия будет равна:

$$E = F * L = (\mu_0 * 2 * I^2 * L^2) / (4 * \pi * r)$$

Отсюда получим расстояние между электронами в молекуле водорода:

$$r = (\mu_0 * 2 * I^2 * L^2) / (4 * \pi * E) = 2.63641373 * 10^{(-14)} \text{ м}$$

Особо отметим, что расстояние между электронами в 92 раза меньше комптоновской длины волны электрона:

$$\lambda_{c.e.} / r = 2.4263086 * 10^{(-12)} \text{ м} / 2.63641373 * 10^{(-14)} \text{ м} = 92.031$$

Это очень важный результат, который еще раз подтвердил, что электроны химической связи уже нельзя рассматривать как точечные частицы, и поэтому, принцип Паули к таким электронам

неприменим (отдельных электронов не существует, а есть “кипящая масса” реальных электронов и виртуальных позитронов и электронов).

Напомним, что электрон в области с линейными размерами меньшими комптоновской длины волны уже нельзя рассматривать как “точечный объект”, поскольку электрон часть своего времени проводит в состоянии “электрон + пара (позитрон + электрон)”. Согласно принципу неопределенности Гейзенберга в этой области мы имеем квантово-механическую неопределенность импульса и энергии достаточные для рождения виртуальных электрон-позитронных пар.

“...Такой подход позволяет объяснить, как в случае многоэлектронных химических связей (двухэлектронных, трёхэлектронных и т. д.) преодолевается отталкивание между электронами: поскольку химическая связь фактически представляет собой “кипящую массу” электронов и позитронов, виртуальные позитроны “помогают” преодолеть отталкивание между электронами. Этот подход предполагает, что химическая связь фактически является замкнутым пространственным мешком (потенциальной ямой в энергетическом смысле), в котором происходит “кипение” реальных электронов, а также виртуальных позитронов и электронов, причем “объем” этого потенциального мешка равен реальному “объему” химической связи, а также пространственной мере квантово-механической неопределенности положения электрона.

Строго говоря, при таком рассмотрении электрон уже не имеет определенной энергии, импульса, координат и уже не является “точечной частицей”, а фактически занимает “весь объем” химической связи. Можно утверждать, что в химической связи отдельный электрон обезличивается и теряет свою индивидуальность, фактически его не существует, а есть “кипящая масса” реальных электронов и виртуальных позитронов и электронов, которые флуктуациями сменяют друг друга...” [6].

Вычисленное расстояние между электронами ($2.636 \cdot 10^{-14}$ м) в молекуле водорода еще раз независимо показало, что отдельных электронов в химической связи уже нет, так как расстояние между ними меньше комптоновской длины волны.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ.

При расчете мы допустили, что электроны движутся все время вдоль химической связи. Исходя из дефекта массы и значений реальных энергий, мы точно знаем, что движение электронов в молекуле водорода является более сложным. Учитывая то, что полученное расстояние между электронами в 92 раза меньше комптоновской длины волны, совершенно очевидно, что точные расчеты также неизбежно приведут нас в область комптоновской длины волны.

А это значит, что приведенное выше физическое обоснование химической связи является корректным и применимо ко всем химическим связям (одноэлектронным, двухэлектронным,

трехэлектронным и т. д.). Просто необходимо уточнить, что в данном рассмотрении мы представляем электрон как точечную частицу.

Таким образом, используя тот факт, что при образовании химической связи неизбежно должен быть дефект массы (так как выделяется энергия), удалось получить физическое обоснование механизма образования химической связи. Отправной точкой в обосновании было то, что в атоме водорода энергия потенциала ионизации точно равна дефекту релятивистской массы электрона.

Также вычисленным расстоянием между электронами подтверждено, что в химической связи уже нет точечных отдельных электронов, так как “расстояние” между электронами меньше комптоновской длины волны. То есть, электроны в химической связи уже нельзя считать слабо взаимодействующими частицами, а это значит, что принцип Паули к химической связи неприменим. “...Конечно, в такой формулировке принцип запрета Паули применим только к системам слабо взаимодействующих частиц, когда можно говорить (хотя бы приблизительно о состояниях отдельных частиц)” [7].

REFERENCES.

1. Mass–energy equivalence. Wikipedia (ru). https://en.wikipedia.org/wiki/Mass%E2%80%93energy_equivalence
2. Bohr model. Wikipedia (ru). https://en.wikipedia.org/wiki/Bohr_model
3. Hydrogen. Wikipedia (ru, Hydrogen molecule). <https://en.wikipedia.org/wiki/Hydrogen#Combustion>
4. Matveev A. N. Mechanics and Theory of Relativity. Textbook for students 3rd edition. Moscow, “ONIKS 21 Century” Publishing House, “Mir and Education” Publishing House, 2003. P. 137 – 140. ISBN 5-329-00742-9, ISBN 5-94666-074-8.
5. Savelyev I. V. Course of General Physics. Volume 2. Electricity and magnetism. Waves. Optics. Second edition. Publishing house “Science”. Moscow, 1982. § 44. Ampère's law. P. 125-127.
6. Bezverkhniy V. D., Bezverkhniy V. V. Review. Benzene on the Basis of the Three-Electron Bond. (The Pauli Exclusion Principle, Heisenberg's Uncertainty Principle and Chemical Bond). P. 102. <https://dx.doi.org/10.2139/ssrn.3065288>
7. Davydov A. S. Quantum mechanics. Second edition. Publishing house “Science”. Moscow, 1973, p. 334.