

И.В. Васильев 

ТОО «СКТБ «Гранит», Казахстан, г. Алматы

e-mail: iv@granit.kz

ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКАЯ ПРИРОДА КОВАЛЕНТНОЙ СВЯЗИ

Аннотация. Основываясь на тороидальной структуре электронных оболочек некоторых атомов, открытой методами сканирующей зондовой микроскопии, предложена классическая модель образования ковалентной связи гомоядерных молекул, таких, как H_2 , O_2 , и аналогичных. Когда в атоме отсутствует сферическая симметрия в распределении заряда на электронной оболочке, то за её пределами, в некоторых пространственных направлениях, образуется электрическое поле, приводящее к появлению кулоновских сил отталкивания. Ранее развитая Гиллеспи модель отталкивания электронных пар относительно точно описывала взаимодействия атомов только в соединениях непереходных элементов, так как силы отталкивания должны расти с уменьшением расстояния между атомами в степени большей, чем вторая, характерной для кулоновских сил. Структуры атома гомогенной молекулы рассмотрена в виде планетарной модели, в которой электронная оболочка представлена в виде равномерно заряженного кольца, а ядро – в виде точечного заряда в центре кольца. Произведён расчёт кулоновских полей между двумя гомогенными атомами. Приведены результаты расчёта разностей полей ядра и электронной оболочки, полученные при дискретном разбиении кольцевого заряда на 16 элементов. Точечный заряд при моделировании был задан положительным, а кольцевой – отрицательным. На расстояниях, соизмеримых с радиусом кольца (от 2 до 4 радиусов), напряжённость разностного поля вдоль оси растёт в степени 2,3, а в плоскости кольца – в степени 1,7. При ориентации в пространстве двух систем «точка-кольцо» под 90 градусов друг к другу они должны притягиваться под действием не только гравитационных, но и кулоновских сил. Однако, при приближении таких систем друг к другу взаимодействие двух систем становится более сложным и силы притяжения уравниваются силами отталкивания одноимённых зарядов, образуя потенциальную яму и создавая устойчивую пространственную конструкцию. Расстояния между точечными зарядами (ядрами) в такой системе немного превышают радиусы колец (электронных оболочек), что соответствует экспериментальным данным о расстояниях между атомами в двухатомных молекулах газа.

Ключевые слова: атом, гравитация, ковалентная связь, кулоновские силы, напряжённость электрического поля, электронная оболочка.

I.V. Vasiliev

LLP "SKTB "Granit", Kazakhstan, Almaty

e-mail: iv@granit.kz

Electrostatic nature of covalent bond

Abstract. Based on the toroidal structure of the electron shells of some atoms, discovered by scanning probe microscopy, a classical model for the formation of a covalent bond of homonuclear molecules, such as H_2 , O_2 and similar, is proposed. When there is no spherical symmetry in the charge distribution on the electron shell in an atom, then outside it, in some spatial directions, an electric field is formed, leading to the appearance of Coulomb repulsive forces. Previously developed by Gillespie, the electron pair repulsion model relatively accurately described the interactions of atoms only in compounds of non-transitional elements, since the repulsive forces should increase with decreasing distance between atoms to a degree greater than the second, characteristic of the Coulomb forces. The structure of an atom of a homogeneous molecule is considered in the form of a planetary model, in which the electron

shell is presented in the form of a uniformly charged ring, and the nucleus - in the form of a point charge in the center of the ring. Calculation of Coulomb fields between two homogeneous atoms is made. The results of calculating the differences between the fields of the nucleus and the electron shell, obtained by discrete division of the ring charge into 16 elements, are presented. The point charge in the simulation was set positive, and the ring charge was negative. At distances commensurate with the radius of the ring (from 2 to 4 radii), the intensity of the difference field along the axis increases by a factor of 2.3, and in the plane of the ring - by a factor of 1.7. When two "point-ring" systems are oriented in space at 90 degrees to each other, they must be attracted under the influence of not only gravitational, but also Coulomb forces. However, when such systems approach each other, the interaction of the two systems becomes more complex, and the attractive forces are balanced by the repulsive forces of like charges, forming a potential well and creating a stable spatial structure. The distances between point charges (nuclei) in such a system slightly exceed the radii of rings (electron shells), which corresponds to experimental data on the distances between atoms in two-atomic gas molecules.

Key words: atom, gravitation, covalent bond, Coulomb forces, electric field strength, electron shell.

И.В. Васильев

«СКТБ «Гранит» ЖШС, Қазақстан, Алматы қ.

e-mail: iv@granit.kz

Коваленттік байланыстың электростатикалық табиғаты

Аңдатпа. Бұл жұмыста сканирлеуші зонд микроскопиясы арқылы ашылған кейбір атомдардың электронды қабықшаларының тороидтық құрылымы негізінде H_2 , O_2 және соған ұқсас гомонуклеарлы молекулалардың коваленттік байланысын құрудың классикалық моделі ұсынылған. Атомдағы электронды қабықшадағы зарядтың таралуында сфералық симметрия болмаған кезде, оның сыртында кейбір кеңістіктік бағыттарда кулондық тебілу күштерінің пайда болуына әкелетін электр өрісі пайда болады. Бұрын Гиллеспи әзірлеген электрон жұбының итерілу моделі атомдардың өзара әрекеттесуін тек өтпелі емес элементтер қосылыстарында салыстырмалы түрде дәл сипаттады, өйткені итеруші күштер атомдар арасындағы қашықтықтың азаюымен екіншіден үлкен дәрежеге дейін өсуі керек, бұл Кулон күштеріне тән. Біртекті молекула атомының құрылымы планетарлық модель түрінде қарастырылады, онда электронды қабат біркелкі зарядталған сақина түрінде, ал ядро сақинаның ортасында нүктелік заряд түрінде беріледі. Екі біртекті атомдар арасындағы кулондық өрістерді есептеу жүргізіледі. Сақина зарядын 16 элементке дискретті бөлу арқылы алынған ядро мен электронды қабық өрістерінің арасындағы айырмашылықтарды есептеу нәтижелері берілген. Модельдеудегі нүктелік заряд оң, ал сақина заряды теріс болды. Сақина радиусына сәйкес келетін қашықтықта (2-ден 4 радиусқа дейін) ось бойымен айырмашылық өрісінің қарқындылығы 2,3 есе, ал сақина жазықтығында 1,7 есе артады. Екі «нүкте-сақина» жүйесі кеңістікте бір-біріне 90 градусқа бағытталған кезде, олар тек гравитациялық емес, сонымен қатар кулондық күштердің әсерінен тартылуы керек. Бірақ мұндай жүйелер бір-біріне жақындаған уақытта екі жүйенің әрекеттесуі күрделеніп, тартымды күштер ұқсас зарядтардың итеруші күштері арқылы теңестіріліп, потенциалдық ұңғыманы қалыптастырады және тұрақты кеңістіктік құрылымды жасайды. Мұндай жүйедегі нүктелік зарядтар (ядролар) арасындағы қашықтық сақиналардың (электрондық қабықтардың) радиустарынан сәл асып түседі, бұл газдың екі атомды газ молекулаларындағы атомдар арасындағы қашықтық туралы тәжірибелік деректерге сәйкес келеді.

Түйін сөздер: атом, гравитация, коваленттік байланыс, кулондық күштер, электр өрісінің кернеулігі, электронды қабат.

Физические эффекты, к которым может приводить неравномерное распределение электрических зарядов в телах, являющихся в целом электрически нейтральными, продолжают оставаться предметом внимания учёных. Так, неравномерное распределение зарядов в молекулах за счёт ионных связей между атомами, структурированных под действием силы гравитации, позволило сформулировать гипотезу о природе возникновения магнитного поля Земли и планет [1]. Эта гипотеза позволила объяснить большинство «загадок» земного магнитного поля и вычислить его величину, очень близко совпавшую с результатами измерений.

В 2015 году, исследуя атомы меди и железа методами сканирующей зондовой микроскопии, учёные из Германии обнаружили, что полученные изображения этих атомов (Рис. 1) напоминают тороиды [2].

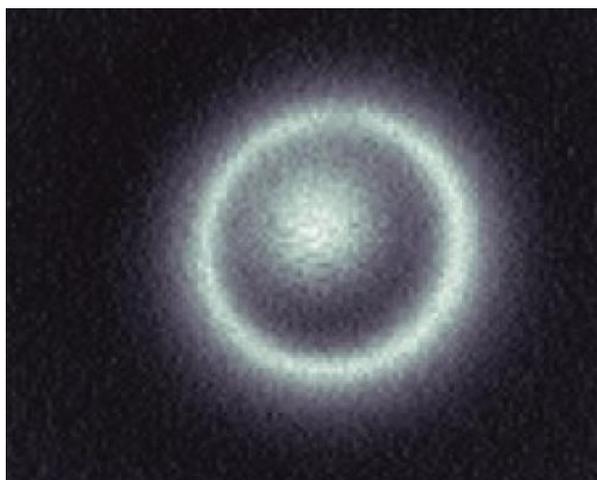


Рисунок 1 - Изображение атома Cu на поверхности Cu [2]

Данные результаты позволяют по новому взглянуть на природу межатомных связей в веществе и, в частности, на природу ковалентной связи. Ведь, если в атоме отсутствует сферическая симметрия в распределении заряда на электронной оболочке, то за её пределами, в некоторых пространственных направлениях, должно наблюдаться электрическое поле, приводящее к появлению кулоновских сил отталкивания.

Идея о том, что при взаимодействии атомов участвуют кулоновские силы отталкивания, далеко не нова. Ещё в 1940 г. была предложена модель отталкивания электронных пар, развитая в последующем Р. Гиллеспи [3]. Однако эта модель позволяла относительно точно описывать взаимодействия атомов только в соединениях непереходных элементов. В соответствии с данной моделью, ориентация облаков электронных пар валентных орбиталей определяется максимальным взаимным отталкиванием заполняющих их электронов, располагая их по сфере электронной оболочки. А конфигурация связей многовалентного атома определялась числом электронных пар в его валентной оболочке.

Основная проблема при объяснении сил межатомного отталкивания кулоновскими силами заключалась в том, что силы отталкивания должны расти с уменьшением расстояния между атомами в степени большей, чем вторая, характерная для кулоновских сил. Так, например, Кудрявцев [4] в своём курсе физики приводит приближённое выражение для результирующей силы взаимодействия двух атомов, избегая описания природы этих сил

$$F = \frac{a}{R^n} - \frac{b}{R^m}, \quad (1)$$

где n и m , a и b – константы, R – расстояние между атомами, и $n > m$.

Такой формулой можно оперировать в практических целях при моделировании поведения атомов кристаллической решётки в ограниченном диапазоне расстояний между атомами и с индивидуальным подбором констант для каждого вещества.

Представление же структуры атома в виде планетарной модели, в которой электронную оболочку можно представить в виде равномерно заряженного кольца, а ядро – в виде точечного заряда в его середине, существенно упрощает понимание природы взаимодействия соседних атомов, особенно в случае неполярной ковалентной связи (разность электроотрицательностей равна нулю) у гомоядерных молекул: Н–Н, О–О, N–N. В своей работе [5] Сомников обосновывает необходимость учёта

взаимодействий между собой всех элементов тел, обладающих структурой.

Для проверки этой гипотезы произведём расчёт кулоновских полей между двумя атомами. Электрические заряды ядра и электронной оболочки Q будут равны и компенсируют друг друга. Однако на оси и в плоскости электронной оболочки напряжённость электрического поля ядра и электронной оболочки будут несколько различны. В общем виде результирующее поле, которое создаст атом на расстоянии R , будет представлять сумму полей, создаваемых его ядром и электронной оболочкой.

Поле точечного заряда на расстоянии R от его центра

(2)

Поле на оси кольцевого заряда с радиусом r на расстоянии R от его центра

(3)

Поле в плоскости кольцевого заряда с радиусом r на расстоянии R от его центра

Удельный заряд точки на кольце

$q=Q/2\pi$

(4)

где α – угол между радиус-вектором точки на кольце и осью ординат

Введём коэффициент $\psi=R/r$, позволяющий выразить расстояние R через радиусы кольца r . Подставим этот коэффициент в выражения (2-4), заменив эллиптический интеграл в выражении (4), который аналитически не решается, на сумму конечных элементов, удобную для программирования методом моментов. Получится

Поле точечного заряда

(5)

Поле на оси кольцевого заряда

(6)

Поле в плоскости кольцевого заряда

(7)

где N – число элементов, на которое разбивается кольцо.

Разность полей точечного и кольцевого заряда на его оси в процентах

(8)

Разность полей точечного и кольцевого заряда на плоскости в процентах

(9)

Результаты расчёта разностей полей полученные при разбиении кольцевого заряда на 16 элементов приведены в таблице. Точечный заряд принимался положительным, а кольцевой – отрицательным.

ψ	2	4	8	16	32	64
ΔE_o	24,4	4,9	1,2	0,3	0,07	0,017
ΔE_n	-28,4	-8,7	-2,3	-0,6	-0,15	-
						0,037

Как видно из таблицы, результирующее поле, как на оси системы «точка-кольцо», так и в её плоскости не является нулевым и снижается на большом удалении от неё приблизительно пропорционально второй степени от расстояния. На расстояниях, соизмеримых с радиусом кольца (от 2 до 4 радиусов) напряжённость разностного поля вдоль оси растёт в степени 2,3, а в плоскости – в степени 1,7.

Таким образом, если 2 системы «точка-кольцо» ориентированы в пространстве под 90 градусов друг к другу, то они должны притягиваться под действием не только гравитационных, но и кулоновских сил. При этом величина этих сил во много раз превосходит действие гравитационных. Однако, при приближении таких систем друг к другу, взаимодействие двух систем становится более сложным, и силы притяжения должны уравниваться силами отталкивания одноимённых зарядов,

создавая устойчивую пространственную конструкцию. Расстояния между точечными зарядами в такой системе будет не намного превышать радиусы колец, что соответствует экспериментальным данным о расстояниях между атомами в двухатомных молекулах газа. Такая конструкция позволяет, в рамках классической физики, объяснить природу возникновения ковалентной связи атомов газа, не прибегая к модели объединения электронных облаков вокруг двух ядер.

Список литературы:

1 Васильев И.В. Влияние гравитации на формирование магнитного поля Земли // Журнал проблем эволюции открытых систем. – Алматы, 2014. Т. 1 (16). – С. 48-55.

2 Matthias Emmrich, Ferdinand Huber, Florian Pielmeier, Joachim Welker, Thomas Hofmann, Maximilian Schneiderbauer, Daniel Meuer, Svitlana Polesya, Sergiy Mankovsky, Diemo Ködderitzsch, Hubert Ebert, Franz J. Giessibl. Supplementary Materials for Subatomic resolution force microscopy reveals internal structure and adsorption sites of small iron clusters // Published 19 March 2015 on Science Express DOI: 10.1126/science.aaa5329

3 Гиллеспи Р. Геометрия молекул / Пер. с англ. Е. З. Засорина и В. С. Мастрюкова, под ред. Ю. А. Пентина. – М.: Мир, 1975. – 278 с.

4 Кудрявцев Б.Б. Курс физики. Теплота и молекулярная физика: Учебное пособие. – 2-е изд. – М.: Просвещение, 1965. – 224 с.

5 Сомсиков В.М. К основам физики эволюции: Монография. – Алматы, 2016. – 356 с.

Принято в печать 20.09.2022

