

О ДИМЕРЕ ГЕЛИЯ

А.М. Павлов

Восточно-Казахстанский государственный университет им. С. Аманжолова
(Усть-Каменогорск)
Казахстан

Поступила в редакцию 30.01.2009

Статья посвящена расчету энергии связи и равновесного расстояния димера гелия. С использованием идеи резонансного взаимодействия, показано, что энергия связи должна быть больше, чем указано в литературных источниках. Равновесное расстояние совпадает с данными эксперимента, а равновесная энергия более чем на порядок больше.

Комплексы гелия постоянно привлекают внимание исследователей. В [1] рассматривался численный расчет гелия-2, где получены значения энергии диссоциации между 11,2 К и 13,02 К. Подобные расчеты повторялись неоднократно, но экспериментально димеры гелия обнаружены не были. Поэтому считалось, что они не существуют. Однако недавно попала статья, где описан эксперимент по обнаружению с помощью масс-спектропии не только димеров, но и тримеров гелия [2]. Авторами определена длина связей этих кластеров и энергия связи He_2 . Однако, энергия связи He_2 , на наш взгляд, слишком занижена:

$$E = 1,38 \cdot 10^{-3} \text{ К}$$

Авторы ионизировали поток частиц электронами с энергией 130 эВ; энергия ионизации гелия 24,50 эВ. При этих условиях при отрыве электрона ядру сообщается энергия порядка 3 К. Следовательно, при ионизации димера они должны были распасться. А поскольку они фиксируются, то энергия связи должна быть гораздо больше, чем указывают авторы.

В данной статье сделана попытка объяснить образование димера гелия с помощью резонансного взаимодействия, при котором атомы гелия обмениваются фотонами.

Обмен фотоном смоделирован стоячей электромагнитной волной. Если один атом излучает волну

$$y_1 = A \cos(\omega t - kx), \quad (1)$$

а другой

$$y_2 = A \cos(\omega t + kx), \quad (2)$$

то результирующая волна будет

$$y_1 = y_1 + y_2 = 2A \cos kx \cdot \cos \omega t. \quad (3)$$

Тогда колебания электронов обоих атомов будут происходить не только под действием дипольного поля друг друга, но и под действием электрического поля стоячей волны.

Если на электроны первого атома, находящегося в начале координат действует волна

$$y_1 = E_0 \cos \omega t, \quad (4)$$

то на электроны второго атома, находящегося на расстоянии R , будет действовать волна согласно (3):

$$y_2 = E_0 \cos kR \cdot \cos \omega t. \quad (5)$$

Уравнения движения электронов в первом и втором атомах будут:

$$\ddot{x}_1 + \gamma \dot{x}_1 + \omega_0^2 x_1 = \frac{\alpha E_0 e}{m} \cos \omega t + \lambda x_2; \quad (6)$$

$$\ddot{x}_2 + \gamma \dot{x}_2 + \omega_0^2 x_2 = \frac{\alpha E_0 e}{m} \cos \omega t + \lambda x_1, \quad (7)$$

где m – масса электрона, e – заряд электрона,

$$\lambda = \frac{e^2}{2\pi \epsilon_0 m R^3}; \quad \omega_0^2 = \frac{k}{m} = \frac{e^2}{2\epsilon_0 m}; \quad \alpha - \text{коэффициент атомной поляризации}; \quad \gamma = \frac{e^2 \omega_0^2}{6\pi \epsilon_0 m c^3} -$$

согласно [3].

Если ввести новые переменные $z_1 = x_1 + x_2$ и $z_2 = x_1 - x_2$, то решение системы (6) – (7) легко находится:

$$x_1 = \frac{f_0 \lambda}{\lambda^2 + \gamma^2 \omega^2} \cos \omega t - \frac{f_0 \gamma \omega \cos kR}{\lambda^2 + \gamma^2 \omega^2} \sin \omega t, \quad (8)$$

$$x_2 = \frac{f_0 \lambda \cos kR}{\lambda^2 + \gamma^2 \omega^2} \cos \omega t - \frac{f_0 \gamma \omega}{\lambda^2 + \gamma^2 \omega^2} \sin \omega t, \quad (9)$$

где $f_0 = \frac{E_0 e}{m}$. Выражения (8) и (9) получаются при условии, что $\omega = \omega_0$. Расчеты по определению ω показали, что ω близка к ω_0 вследствие малости $\gamma \omega$ по сравнению с λ , а λ по сравнению с ω_0^2 .

Энергия взаимодействия осцилляторов будет

$$W = -\frac{e^2 x_1 x_2}{2\pi\epsilon_0 R^3}. \quad (10)$$

Подставляя сюда x_1 и x_2 , и усредняя по времени, получим:

$$\langle W \rangle = -\frac{E_0^2 e^4}{2\pi\epsilon_0 m^2} \cdot \frac{\cos kR}{R^3 (\lambda^2 + \gamma^2 \omega^2)}. \quad (11)$$

Учитывая неравенство $\gamma\omega \ll \lambda$, окончательно будем иметь

$$\langle W \rangle = -\pi\epsilon_0 R^3 E_0^2 \cos kR. \quad (12)$$

Нас интересует минимум энергии. Взяв производную по R , и приравняв ее к нулю, получим:

$$kR \cdot \operatorname{tg} kR = 3. \quad (13)$$

Уравнение (13) имеет два корня: $x_1 = 1,1925$ и $x_2 = 3,806$. Второй корень находится в третьей четверти, где $\cos kR$ отрицательный, тогда энергия будет положительной. Нас интересует отрицательная энергия взаимодействия. Поэтому остается $kR = 1,1925$.

Заменяя k через длину волны, получим

$$(2\pi R)/l = 1,1925. \quad (14)$$

Таким образом, для нахождения длины связи димера необходимо определить длину волны или частоту ω_0 .

Частоту ω_0 находим по энергии ионизации. Нижний уровень энергии колебаний равен энергии ионизации, т.е.

$$\frac{1}{2} \hbar \omega_0 = 24,56 \text{ эВ}. \quad (15)$$

Отсюда $\omega_0 = 74,4948 \cdot 10^{15}$ ($S = 1,186 \cdot 10^{16}$) и $l = 253 \cdot 10^{-10}$ м.

Следовательно, длина связи в димере гелия равна

$$R = \frac{l \cdot 1,1925}{2\pi} = 48 \text{ \AA},$$

что совпадает с данными [2].

Интересно получается: излучение электромагнитных волн происходит не только при переходах электрона с одного уровня на другой, но и при нулевых колебаниях на нижнем уровне энергии с частотой, определяемой равенством (15).

Определим энергию связи атомов гелия в рассматриваемой системе. Потенциальную

энергию взаимодействия диполей (12) разложим в ряд по малым отклонениям атомов от положения равновесия:

$$W = -\pi\epsilon_0 E_0^2 R_0^3 \cos kR_0 \left[1 - \left(\frac{12}{R_0^2} + \frac{4\pi^2}{l^2} \right) x^2 \right], \quad (16)$$

где $x = R - R_0$, и запишем уравнение Шредингера для относительного движения атомов в димере.

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} [E - U] \psi = 0. \quad (17)$$

Если за уровень отсчета потенциальной энергии взять минимум, т.е.

$$\epsilon = -\pi\epsilon_0 E_0 R_0^2 \cos kR_0,$$

то
$$U = \epsilon \left(\frac{12}{R_0^2} + \frac{4\pi^2}{l^2} \right) x^2 = \frac{13,422}{R_0^2} \epsilon x^2. \quad (18)$$

Тогда уравнение (17) сведется к уравнению гармонического осциллятора с потенциальной энергией (18). Следовательно $E = \frac{1}{2} \hbar \omega_m$,

где
$$\omega_m = \sqrt{\frac{26,844\epsilon}{R_0^2 \mu}}. \quad (19)$$

Для нахождения E_0^2 воспользуемся сообщениями, заимствованными из [4] где утверждается, что плотность энергии электромагнитного поля, умноженная на объем равна $\hbar\omega_0$, умноженная на вероятность нахождения фотона в данном объеме. В нашем случае объемом, занятым электромагнитным полем, является объем сферы радиуса R , а вероятность попадания фотона на второй атом будет

$$\frac{4\pi R^3}{3} \cdot \frac{4\pi a^2}{4\pi R^2} = \frac{4\pi a^2 R}{3}, \quad (20)$$

где a – радиус атома гелия.

Следовательно,

$$\epsilon_0 E^2 = \frac{1}{2} \epsilon_0 E_0^2 \frac{4\pi}{3} R^3 = \hbar \omega \frac{a^2}{4R^2}.$$

Отсюда
$$\pi\epsilon_0 E_0^2 R^3 = \frac{3}{8} \hbar \omega_0 \frac{a^2}{R^2}. \quad (21)$$

Тогда
$$\epsilon = \frac{3}{8} \hbar \omega_0 \frac{a^2}{R^2} \cos kR, \quad (22)$$

что дает $\varepsilon = 0,0033\text{эВ}$; или $\varepsilon = 37,84\text{ К}$.

Подсчитав по (19) ω_m , найдем энергию нулевых колебаний атомов: $\omega_m = 0,183 \cdot 10^{12}$

$$\text{и } E_{0,m} = \frac{1}{2} \hbar \omega_m = 0,7\text{ К}.$$

Таким образом, энергия связи атомов гелия в димере равна

$$U_{cv} = 37,84\text{ К} - 0,7\text{ К} = 37,14\text{ К}.$$

Итак, энергия связи димера гелия в нашей модели оказалась больше, чем в [2]. На наш взгляд это более правдоподобный результат, чем у авторов [2]. Скорее всего, там где-то закралась ошибка.

ЛИТЕРАТУРА

1. Lin B., Melan D. // J. Chem. phys. – 1989. – Vol. 91, № 4.
2. Сб. Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2006 – www.chemphys.edu.ru/pdf/2006-10-30-001.pdf А.В. Калинин, Л.Ю. Русин, О.А. Корнилов, Я.П. Тоениес, Г.К. Хегерфельдт.
3. Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М. Фейнмановские лекции по физике. Т. 3. – М.: Мир, 1976. – 496 с.
4. Вихман Э. Квантовая физика. – М.: Наука, 1974 – 416 с.

ПРО ДІМЕР ГЕЛІЮ

А.М. Павлова

Стаття присвячена розрахунку енергії зв'язку й рівноважної відстані димеру гелію. З використанням ідеї резонансної взаємодії, показано, що енергія зв'язку повинна бути більшою ніж зазначено в літературних джерелах. Рівноважна відстань збігається з даними експерименту, а рівноважна енергія більш ніж на порядок вища.

ABOUT THE DIMER HELIUM

A.M. Pavlov

Article is devoted to account of energy of communication and equilibrium distance the dimer helium. With use of idea of resonant interaction, is shown, that the energy of communication should be more, than is specified in the references. Equilibrium distance coincides also by data of experiment, and the equilibrium energy more than on the order is higher.