ДвижениЕ электрона в молекулярном ионе Н2+

В.В. Вихрев

НИЦ Курчатовский Институт, г.Москва, Россия, vikhrev@mail.ru

Моделирование движения электрона в основном состоянии атома водорода методом Монте-Карло с учетом множественных переворотов спина электрона привело к описанию такой возможности такого электрона, при которой движение электрона оказывается энергетически устойчивым при непрерывных возмущениях его траектории хаотическими электромагнитными полями. Энергия связи электрона с протоном в этом случае оказывается 13,6 эВ. Это в работе [1] трактуется как основное состояние атома водорода. Возбужденные состояния атома водорода при этом не удалось пока таким способом описать. Аналогично невозможно было описать и системы с несколькими электронами. Невозможность описания многоэлектронных систем связана с необходимостью описания энергии спинового взаимодействия электронов между собой [2]. Тем не менее, движение оного электрона в поле двух протонов с учетом возможных переворотов спина электрона методами физики плазмы (т.е. движения электронов по траекториям в заданных электромагнитных полях) можно определить с достаточно хорошей точностью. Такая система и была промоделирована для молекулярного иона Н2+.

 В качестве начальных условий бралось положение электрона на стационарной орбите с угловым моментом h/2 в точке наиболее близкого к протону с противоположной стороны от второго протона, т.е. на расстоянии а0= 0.185аБ, где аБ — Боровский радиус орбиты электрона. Начальная скорость при этом составляла v0=h/2a0 [1]. Для различных расстояний между протонами вычислялась суммарная сила притяжения (или отталкивания) этих протонов с учетом быстрого движения электронов в пространстве вблизи этих протонов.

Траектории электрона получались трех видов. При достаточно близком расстоянии между протонами (примерно 2аБ) электрон вращается по траектории вокруг обоих протонов, при этом сила кулоновского отталкивания протонов положительна. При увеличении расстояния между протонами электрон большую часть времени находится между протонами и суммарная сила отталкивания между электронами в этом случае отрицательна. В этом случае он движется по траектории в виде восьмерки вокруг обоих протонов. При дальнейшем увеличении расстояния между протонами электрон двигаться по эллипсу только вокруг одного из протонов, а сила взаимодействия между протонами резко уменьшается. Это связано с тем, что один из протонов превращается в нейтральный атом водорода.

В этом рассмотрении существует только одно энергетически устойчивое состояние трех заряженных тел (при расстоянии 2аБ между протонами) и энергия связи в этом состоянии с точностью 20% совпадает с экспериментально наблюдаемой энергией для молекулярного иона Н2+.

Литература

1. Вихрев В.В. XLII Международная (Звенигородская) конференция по физике плазмы и УТС, Сборник тезисов докладов 2015, С. 216.
2. Шолин Г.В., Тренин Е.А. ЖЭТФ, 1911. Т.139, №6, С.1043.