

СОСТОЯНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДСИСТЕМЫ В МЕТАЛЛАХ С УЧЕТОМ СИЛЫ РЕАКЦИИ ИЗЛУЧЕНИЯ

М.П. Данилаев¹, С.А. Карандашов¹, А.В. Куклин¹, В.А. Куклин^{1,2}

¹ Казанский национальный исследовательский технический университет
им. А.Н. Туполева –КАИ
Российская федерация, 420111, г. Казань, ул. К. Маркса, 10

² Казанский (Приволжский) федеральный университет
Российская федерация, 420008, г. Казань, ул. Кремлевская, 18

Аннотация: Показано, что скорость поступательного движения электронов, по крайней мере, валентных, при переходе в основное состояние, в атомах металлов с кристаллической решеткой ГЦК (гранецентрированного кубического) и ОЦК (объемно-центрированного кубического) типов, приближается к скорости света за счет конкуренции силы притяжения к ядру с силой реакции излучения. В проводимости металлов участвует только часть валентных электронов, скорость которых превышает некоторый порог. Физический смысл данного порогового значения скорости аналогичен понятиям химического потенциала или энергии Ферми. Величина порога в адиабатическом приближении не зависит от температуры и определяется только параметрами кристаллической решетки и валентным состоянием атомов.

Ключевые слова: скорость движения электрона, классическая электродинамика, энергия Ферми, реакция излучения, самоускорение.

Введение

Металлическая связь между атомами-ионами большинства металлов подразумевает наличие двух взаимодействующих подсистем: атомно-ионного остова (кристаллической решетки) и электронного облака не локализованных у своих атомов обобществленных и свободных валентных электронов [1-3]. Квантовые состояния электронной подсистемы находятся из решения уравнения Шредингера при условии трансляционной симметрии кристаллической решетки в одноэлектронном адиабатическом приближении [3,4]. В связи с чем принимается, что каждая элементарная ячейка решетки должна быть электрически нейтральна. Они должны быть эквивалентны, включая распределение заряда, а волновая функция электрона должна затухать на расстоянии не более одного периода решетки. Важно отметить, что при определении вида выражения для потенциальной энергии взаимодействия электронов в уравнении Шредингера ранее не учитывались потери энергии, связанные с излучением электромагнитной волны за счет ускоренного движения свободных электронов. Целью работы является описание состояния электронной подсистемы металлов с кристаллической решеткой ГЦК и ОЦК типов в приближении классической электродинамики с учетом силы реакции излучения.

Основная часть

В [5] предложено выражение для силы реакции излучения (лучистого трения), позволившее устранить эффект самоускорения, описанный в [6,7]. Упрощение формулы из [5] приводит к следующему выражению

$$F_R \approx -\frac{\sqrt{2}e^2(c^2 + V^2)V'^2}{12\pi c^2 \varepsilon_0 (c^2 - V^2)^2} \quad (1)$$

где e, V, V' – заряд, скорость и ускорение движения электрона.

Данное упрощенное выражение показывает пропорциональность силы реакции излучения ускорению движения электрона, что является обязательным условием наличия электромагнитного излучения, а, следовательно, и наличия «лучистого трения». Такой вид зависимости отражает направление силы «лучистого» трения против направления перемещения электрона, что исключает возможность проявления самоускорения. Использование потенциалов Льенара-Вихерта при получении выражения (1) не накладывает каких-либо ограничений на скорость движения электрона. Наличие в знаменателе делителя $(c^2 - V^2)^2$ подчеркивает существенный рост силы лучистого трения при приближении скорости движения электрона к скорости света. Поэтому сила реакции излучения не позволит разогнаться электрону выше скорости света.

При формировании уравнения движения валентных электронов будем использовать одноэлектронное адиабатическое приближение, по аналогии с квантово-механическим описанием электронной подсистемы [3,4]. Тем более, что переход от ферми-жидкости к ферми-газу с исключением взаимодействия между валентными электронами возможен путем замены массы электрона m на ее некоторое эффективное значение m' [2]. Отличие $m' > m$ не превышает 5-20% [2], что не может существенно повлиять на характер изменения скорости электрона.

В условиях движения в периодическом поле кристаллической решетки наиболее вероятным будет направление движения электрона к ближайшему иону. Расстояние между ближайшими ионами для ГЦК формы кристаллической решетки определяется как $d = a\sqrt{2}/2$, а для ОЦК - $d = a\sqrt{3}/2$ [8]. Учитывая трансляционную симметрию кристаллических решеток ГЦК и ОЦК форм, можно принять незначительным (скомпенсированным) влияние других ионов в поперечном направлении. Такая упрощенная схема одномерного движения приведена на рис.1.

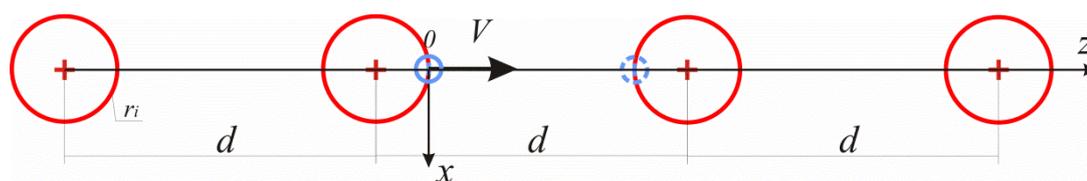


Рис. 1 Схема одномерного движения валентных электронов в кристаллической решетке ГЦК и ОЦК форм.

Будем рассматривать ядро атома, электрон и ион в виде шара с равномерно распределенной плотностью положительного и отрицательного зарядов. Тогда электрические поля, внутри шаров и за ее пределами, могут быть описаны выражениями для точечных зарядов, расположенных в центре сферы. С учетом этого, уравнение движения валентного электрона в периодическом электрическом поле между ионами кристаллической решетки со степенью окисления (валентным состоянием атома в кристаллической решетке) K в одномерном приближении тогда можно записать в следующем виде

$$mV' = F_1 + F_2 + F_R;$$

$$mV' = \frac{Ke^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{(d - r_i - z(t))^2} + \frac{1}{(2d - r_i - z(t))^2} - \frac{1}{(r_i + z(t))^2} - \frac{1}{(d + r_i + z(t))^2} \right) + F_R, \quad (2)$$

где F_1 - есть кулоновская сила притяжения к ионам, от которых происходит перемещение валентного электрона; F_2 - кулоновская сила притяжения к ближайшим двум ионам кристаллической решетки.

Уравнение движения до центра в пределах ближайшего иона можно записать в следующем виде

$$mV' = F_1 + F_2 + F_3 + F_R;$$

$$mV' = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} K \left(\frac{1}{(d - r_i - z(t))^2} + \frac{1}{(2d - r_i - z(t))^2} - \frac{1}{(d + r_i + z(t))^2} \right) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} K \left(\frac{N}{(d - r_i - z(t))^2} - \frac{(N - K)(d - r_i - z(t))}{r_i^3} \right) + F_R, \quad (2')$$

где F_3 - сила действующая на электрон при движении в пределах иона, определяемая суммарной напряженностью электрического поля ядра атома и поля равномерно распределенной электронной плотности заряда в пределах иона; N – количество электронов в нейтральном атоме. Чтобы остаться в границах применимости классической электродинамики (закона Кулона) ограничим расстояние между электроном и ядром атома выше классического радиуса электрона $> a_0 = e^2 / 4 \pi \epsilon_0 m c^2$ [6], которое оценивается величиной 10^{-15} м (0,001 пм). Поскольку нам неизвестны механизмы изменения характеристик движения валентных электронов при переходе из основного состояния в режим его свободного движения, начальными условиями являлись координата электрона и его скорость на поверхности иона. Это позволяет дать простую физическую интерпретацию в границах применимости классической электродинамики.

На рис. 2 приведены результаты решения уравнений движения (2) и (2') для параметров кристаллической решетки серебра. Расчеты показывают, что влияние поля крайних ионов не превышает 1% изменения текущей скорости как в области между ионами, так и в объеме иона. Это хорошо согласуется с утверждениями о затухании волновой функции в пределах одного периода кристаллической решетки [3,4]. На рис.2 центр системы координат привязан к поверхности иона (см. рис.1).

При низких начальных скоростях, электрон покинувший поверхность иона возвращается обратно, не достигнув середины расстояния до ближайшего иона. При обратном движении скорость движения электрона, в пределах иона, приближается к скорости света c . При увеличении начальной скорости, задаваемой при решении уравнения (2), начиная с некоторой величины, электрон преодолевает силу кулоновского притяжения и продолжает движение в направлении ближайшего иона. На середине расстояния между ионами наблюдается минимум скорости.

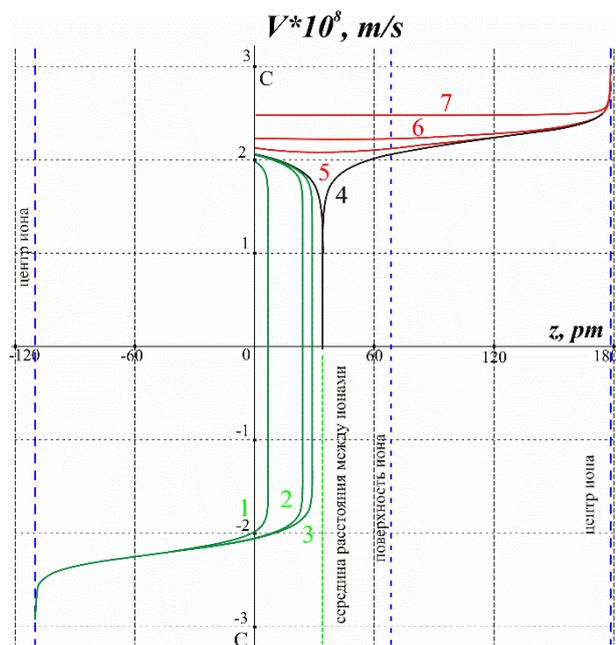


Рис. 2 Характер изменения скорости движения электрона при различных начальных скоростях на поверхности иона: 1 – $4 \cdot 10^5$; 2 – $6.3 \cdot 10^5$; 3 – $6.5 \cdot 10^6$; 4 – $6.575 \cdot 10^5$; 5 – $1 \cdot 10^6$ м/сек; 6 – $2 \cdot 10^6$ м/сек; 7 – $1 \cdot 10^7$ м/сек.

При достижении поверхности ближайшего иона расчетная скорость становится равной заданной начальной скорости и далее наблюдается ее рост под действием кулоновской силы притяжения. Степень ее роста определяется уровнем заданной начальной скорости. Характер изменения скорости движения вблизи центра ближайшего иона приведен на рис.3. В границах применимости классической электродинамики [6] уровень скорости электрона приближается к скорости света c не зависимо от заданной начальной скорости, что можно объяснить торможением электрона за счет силы реакции излучения [5].

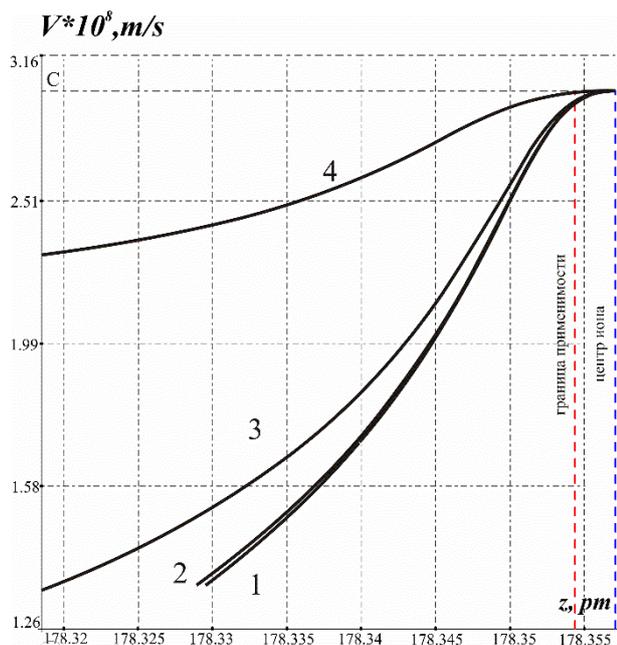


Рис.3 Характер изменения скорости движения электрона при приближении к центру ближайшего иона: 1 – $1 \cdot 10^6$; 2 – $1 \cdot 10^6$; 3 – $1 \cdot 10^7$; 4 – $1 \cdot 10^8$ м/сек.

Анализ расчетного характера движения валентных электронов под действием кулоновского взаимодействия с ионами сферической формы позволяют сделать несколько предположений:

- часть валентных электронов остается в поле действия исходного иона, формируя наблюдаемую электронную плотность в узлах кристаллической решетки;
- часть валентных электронов способно достигнуть ближайшего иона, что создает возможность переноса заряда в кристаллической решетке, участвуя в проводимости;
- скорость движения валентных электронов при возврате и при движении к ближайшему иону в поле действия кулоновских сил асимптотически приближается к скорости света.

Чтобы валентный электрон смог покинуть ион кристаллической решетки его скорость (энергия E_{min}) должна превышать некоторое пороговое значение V_{min} . Если рассматривать систему валентных электронов как термодинамическую систему с распределением Ферми-Дирака, то физический смысл этой величины энергии тождественен по определению химическому потенциалу системы с переменным числом частиц. Аналогичную тождественность можно наблюдать и при сравнении E_{min} с энергией Ферми, поскольку этот уровень энергии валентных электронов также определяет границу их перехода в зону проводимости. При этом важно отметить, что определение границы раздела по величине E_{min} между основным состоянием электронов и зоной проводимости в адиабатическом приближении не зависит от температуры и определяется только параметрами кристаллической решетки и валентным состоянием ее атомов.

В таблице 1 приведены исходные данные и результаты расчетов V_{min} и E_{min} для ряда основных проводников с кристаллическими решетками ГЦК и ОЦК форм.

Таблица 1.

Результаты расчетов для некоторых проводников с кристаллическими решетками ГЦК и ОЦК форм

Материал	Постоянная решетки, пм [10]	Кратчайшее расстояние между узлами решетки, пм	Наиболее устойчивая степень окисления (валентное состояние)	Ионный радиус, пм [8]	Расстояние между поверхностями ионов, пм	V_{min} , м/сек	E_{min} , эВ
Серебро	408,6 (ГЦК)	288,92	+1	110	68,92	$6,57 \cdot 10^5$	1,23
Медь	361,479 (ГЦК)	255,6	+2	75	105,6	$1,83 \cdot 10^6$	9,51
Золото	407,82 (ГЦК)	288,37	+3	85	118,37	$2,09 \cdot 10^6$	12,41
Алюминий	404,959 (ГЦК)	286,35	+3	52	182,35	$3,84 \cdot 10^6$	41,88
Вольфрам	316,524 (ОЦК)	274,12	+6	59	156	$4,66 \cdot 10^6$	61,67

Рост минимальной скорости для материалов, указанных в таблице, хорошо коррелирует с ростом удельного сопротивления данных материалов. Вероятно, это можно объяснить уменьшением доли валентных электронов способных к переносу заряда. При этом перенос заряда осуществляется между ближайшими ионами не за счет столкновительных процессов, а за счет кулоновского взаимодействия валентных электронов с периодическим полем кристаллической решетки. В связи с этим

использование понятия средняя длина пробега, характерного для приближения свободного электронного газа, в условиях кристаллической решетки (по крайней мере, ГЦК и ОЦК форм) некорректно.

В [2] отмечается, что «внутри иона в поле сильного притягивающего потенциала ядра, электрон ускоряется и приобретает значительную кинетическую энергию». Рассматриваемая модель позволяет количественно описать такой характер изменения скорости движения электронов, не нарушая границ применимости классической электродинамики. Изменение соотношения силы притяжения к ядру и силы «лучистого трения» приводит к резкому ускорению валентных электронов при входе в объем иона и установлению стационарного уровня скорости их движения. Это позволяет сделать предположение, что, по крайней мере, валентные электроны перед возвратом в основное состояние имеют стабильную скорость поступательного движения близкую к скорости света. Такая стабильность скорости поступательного движения электронов до восстановления основного состояния атома поддерживается за счет конкуренции сил притяжения и «лучистого трения». Очевидно, что мы не можем указать скорость и координаты электрона, при которых происходит его возврат в основное состояние атома. Причины здесь две. Во-первых, это происходит на малых расстояниях, когда применимость классической электродинамики нарушается. Во-вторых, механизм захвата свободного электрона и переход его в основное состояние неизвестен. Однако на основании результатов расчетов можно утверждать, что перед захватом свободного электрона и переходом в основное состояние его движение имеет характер ускоренного поступательного движения до величин скорости света. Исходя из симметрии физических процессов возможно также предположить, что при переходе из основного состояния электрон приобретает характер поступательного движения, но с торможением за счет кулоновской силы притяжения к ядру атома, который он покидает.

Заключение

Таким образом, модель, описывающая движение электронов в рамках приближения классической электродинамики с учетом силы реакции излучения, позволяет оценить состояние электронной подсистемы металлов. Для кристаллических решеток ГЦК и ОЦК, в приближении сферичности ионов и электронов, показано, что при движении к ядру атомов происходит ускорение электронов, с асимптотическим приближением к скорости света. В переносе заряда, или в проводимости металлов с кристаллической решеткой ГЦК и ОЦК форм, может участвовать только часть валентных электронов, энергия которых превышает некоторый порог. По физическому смыслу этот порог идентичен определению химического потенциала или энергии Ферми. Величина этой пороговой энергии не зависит от температуры и определяется только параметрами кристаллической решетки, с учетом валентного состояния атомов в узлах.

Источники финансирования, благодарности

Научные исследования проведены при финансовой поддержке Минобрнауки России Рег. номер НИОКТР АААА-А20-120102190039-6.

Список литературы

1. Дорфман Я. Г., Кикоин И. К. Физика металлов. – Ленинград. – 1933. – 551с.
2. Брандт Н. Б., Чудинов С. М. Электроны и фононы в металлах. – М.: Изд-во МГУ. – 1990. – 350 с.
3. Епифанов Г.И. Физика твердого тела. – СПб.: Лань, 2011 – 288с.

4. Василевский А.С. Физика твердого тела. – М.: Дрофа, 2010 – 206с.
5. Данилаев М.П., Куклин А.В., Куклин В.А. Моделирование реакции излучения при ускоренном одномерном движении свободных электронов в приближении классической электродинамики //Научно-технический вестник Поволжья. – №. 6. – С. 24-27.
6. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика. Том II. Теория поля. – М.: «Наука». – 1988. – 512с.
7. Терлицкий Я.П., Рыбаков Ю.П. Электродинамика. – М.: «Высшая школа». – 1990. – 352с.
8. Герасимова Н.С. Кристаллические решетки и их дефекты. Калуга. Издательство МГТУ им. Н.Э. Баумана. – 2016. – 72 с.
9. Бугаенко Л. Т., Рябых С. М., Бугаенко А. Л. Почти полная система средних ионных кристаллографических радиусов и ее использование для определения потенциалов ионизации //Вестник Московского университета. Серия 2. Химия. – 2008. – Т. 49. – №. 6. – С. 363-385.
10. Свойства элементов. Ч. 1. Физические свойства. Справочник. – М.: «Металлургия». –1976. – 600 с.

ELECTRONIC SUBSYSTEM STATE IN METALS WITH RADIATION REACTION FORCE TAKING INTO ACCOUNT

M.P. Danilaev¹, S.A. Karandashov¹, A.V. Kuklin¹, V.A. Kuklin^{1,2}

¹ Kazan National Research Technical University named after A.N. Tupolev - KAI
10, st. K. Marx, Kazan, 420111, Russian Federation

² Kazan (Volga region) Federal University
18, st. Kremlyovskaya, Kazan, 420008, Russian Federation

Abstract: It is shown that the electrons translational motion rate during the transition to the ground state is maintained to the light rate due to the competition between the nucleus attraction force and the reaction radiation force in atoms in metals with face-centered cubic and body-centered cubic lattice. The metal conductivity is determined by valence electrons, which rate is exceeds a certain threshold. The physical meaning of this threshold rate is similar to the chemical potential or Fermi energy. The threshold rate in the adiabatic approximation is depending on the metal crystal lattice parameters and atoms valence state.

Ключевые слова: electron velocity, classical electrodynamics, Fermi energy, radiation reaction, self-acceleration.

Дата отправки статьи: 29.08.2022