



FAKULTA ELEKTROTECHNIKY
A KOMUNIKAČNÍCH **ústav teoretické**
TECHNOLOGIÍ **a experimentální elektrotechniky**

Modelování prstencové struktury elementárních částic hmoty

Vazebná energie jednoduchých vazeb
homonukleárních molekul H, C, N, O

Ing. Pavel Werner

Práce vznikla jako navazující podpůrný text (skripta) předchozích publikací v oblasti modelování struktury hmoty pro doktorský stupeň studia pro předměty numerického modelování UTEE FEKT VUT v Brně.

© Pavel Werner 2020

ISBN 978-80-87342-25-1

Obsah

1. Úvod.....	4
2. Ionizační energie atomu vodíku H.....	5
3. Vazebná energie iontu vodíku H_2^+	8
4. Vazebná energie molekuly para-vodíku H_2	11
5. Vazebná energie molekuly ortho-vodíku H_2	15
6. Ionizační energie atomu uhlíku C.....	18
7. Vazebná energie vazby atomů uhlíku C-C.....	20
8. Ionizační energie atomu dusíku N.....	23
9. Vazebná energie vazby atomů dusíku N-N.....	26
10. Ionizační energie atomu kyslíku O.....	28
11. Vazebná energie vazby atomů kyslíku O-O.....	31
12. Závěr.....	34
13. Poděkování.....	34
14. Literatura.....	35

1. Úvod

Práce navazuje na předchozí úvodní popisy návrhů modelů struktury hmoty s využitím toroidálního elementu [1], pokouší se snadným způsobem RT model zaměřit na popis vazeb atomů a iontů.

Můžeme vyslovit předpoklad, že chemická vazba je silová interakce tvořená elektrickým a magnetickým polem elementárních částic. Tato silová interakce poutá navzájem sloučené atomy, energeticky je stabilizuje a vede ke vzniku molekuly [1]. Vzniklá molekula má potom nižší energii, než měly původní atomy před sloučením. Základ všech vazeb spočívá ve společném sdílení nebo předávání vazebných elektronů příslušnými částicemi [2]. Je paradoxní, že kovalentní vazba, které chemici připisují konkrétní délku a energii, je v kvantové mechanice vyjádřena poměrně abstraktně jako pravděpodobnost lokalizace elektrického náboje do prostoru mezi kovalentně vázanými atomy [5].

Vazebná energie W_B je energie, která se uvolní při vzniku vazby. Čím větší je její hodnota, tím pevněji (silově dynamicky) jsou atomy k sobě vázány. Vyjadřuje se v jednotkách energie, nejčastěji v elektronvoltech (eV). Z empiricky získaných důvodů se přepočítává/vztahuje na energii jednoho molu, pak se udává v jednotkách (kJ/mol).

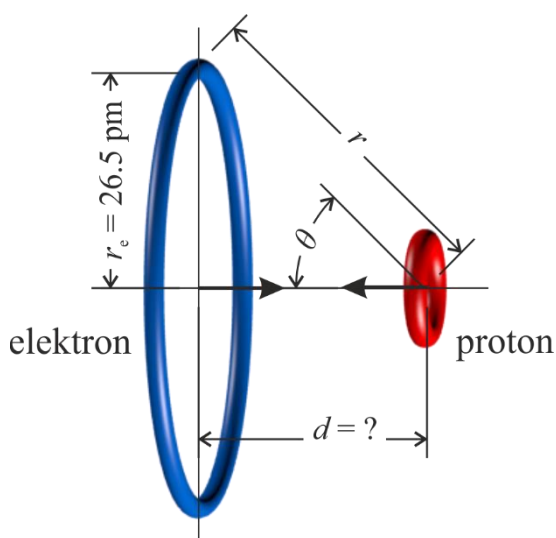
Disociační energie vazby W_{DB} je energie, kterou je nutno dodat, aby se opět vazba částic rozštěpila. Na základě zákona o zachování energie je číselně rovna energii, která se uvolnila při vzniku vazby W_B , ale má opačné znaménko [2].

$$W_{DB} = -W_B \quad (1)$$

Délka vazby L_B je mezijaderná vzdálenost (vzdálenost mezi středy atomů spojených vazbou). Zjišťuje se experimentálními metodami elektronové a neutronové difrakce, difrakce rentgenových paprsků nebo metodami spektrálními [2].

Tento příspěvek se snaží ukázat, že využitím prstencové struktury modelu elementárních částic, struktury jádra atomů a modelů molekul lze za využití základních zákonů a vlastností elektromagnetických polí a deterministického přístupu explicitního modelu poměrně jednoduchou matematikou snadno určit poloměry atomů R_a a jejich ionizační energii W_{ion} , vzdálenost atomů v jednoduché kovalentní homonukleární vazbě i jejich vazebnou energii W_B .

2. Ionizační energie atomu vodíku H



Obr. 1. RT model atomu vodíku H podle RT.

Poloměr elektronu atomu vodíku R_{aH} na základní energetické úrovni získáme podle vztahů uvedených v [1]:

$$r_e = 2.651 \cdot 10^{11} m , \quad (2)$$

$$i_e = 3.846 \cdot 10^{-6} A . \quad (3)$$

Ionizační energii W_{ion} můžeme považovat za druh vazby mezi protonem a elektronem. Pokud vyjdeme z předpokladu, že jde o silovou interakci působení elektromagnetických polí [1] protonu a elektronu, pak potřebnou elektrickou sílu působící v ose protonu F_{elz} vyjádříme vztahem

$$F_{elz} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{q_e^2}{r^2} \cdot \cos \theta , \quad (4)$$

a magnetickou sílu protonu působící na elektron v ose protonu F_{magz} vyjádříme vztahem

$$F_{magz} = \frac{i_e \cdot \mu_0 \cdot \mu_p}{4\pi \cdot r^3} \cdot \sin 2\theta . \quad (5)$$

Pro vyjádření složky síly pouze v ose prstenců z platí

$$r = \sqrt{r_e^2 + d^2} , \quad (6)$$

$$F_{el,z} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{q_e^2 \cdot d}{\sqrt{(r_e^2 + d^2)^3}}, \quad (7)$$

$$F_{mag,z} = \frac{i_e \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot 2d \cdot r_e}{4\pi \left(\sqrt{d^2 + r_e^2} \right)^5}, \quad (8)$$

kde i_e je proud způsobený pohybem elektronu, r_e je poloměr elektronu, μ_p je magnetický moment protonu a d je vzdálenost protonu a elektronu na jejich společné ose, (obr. 1).

Levitační vzdálenost protonu d_l a elektronu u atomu vodíku na základní energetické úrovni W_{bas} je dána dynamickou rovnováhou mezi elektrickou silou přitažlivou a magnetickou silou odpudivou:

$$F_{el,z} = F_{mg,z} \quad (9)$$

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{q_e^2}{r^2} \cdot \cos\theta = \frac{i_e \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot \sin 2\theta}{4\pi \cdot r^3}, \quad (10)$$

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{q_e^2 \cdot d}{\sqrt{(r_e^2 + d^2)^3}} = \frac{i_e \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot 2 \cdot r_e \cdot d}{4\pi \cdot \sqrt{(r_e^2 + d^2)^5}}. \quad (11)$$

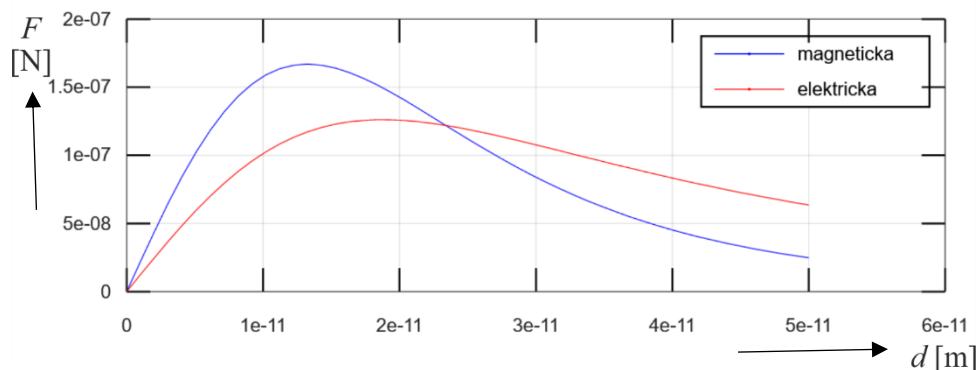
Z těchto vztahů vyjádříme levitační vzdálenost d_l :

$$d_l^2 = \frac{i_e \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot \epsilon_0 \cdot 2 \cdot r_e}{q_e^2} - r_e^2 \quad (12)$$

$$d_l = \left(\frac{3.85 \cdot 10^{-6} \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1.41 \cdot 10^{-26} \cdot 8.854 \cdot 10^{-12} \cdot 2 \cdot 2.65 \cdot 10^{-11}}{(1.6 \cdot 10^{-19})^2} - (2.65 \cdot 10^{-11})^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (13)$$

Po dosažení známých konstant a vyčíslených hodnot dostaneme rovnovážnou polohu sil a levitační vzdálenost elektronu od protonu atomu vodíku na základní úrovni (obr. 2):

$$d_l = 2.34 \cdot 10^{-11} m \quad (14)$$



Obr. 2. Graf EMG sil a levitační vzdálenosti atomu vodíku d_l na základní úrovni.

U atomu vodíku na první základní energetické úrovni se vazebná energie mezi protonem a elektronem W_v rovná ionizační energii W_{ion} , která je potřebná k odtržení elektronu od protonu a rovná se rozdílu

energií mezi energií elektrického pole $W_{v,el}$ a energií magnetického pole $W_{v,mag}$ mezi elektronem a protonem.

$$W_v = W_{v,el} - W_{v,mag} \quad (15)$$

Energii elektrického pole vyčíslíme podle vztahu

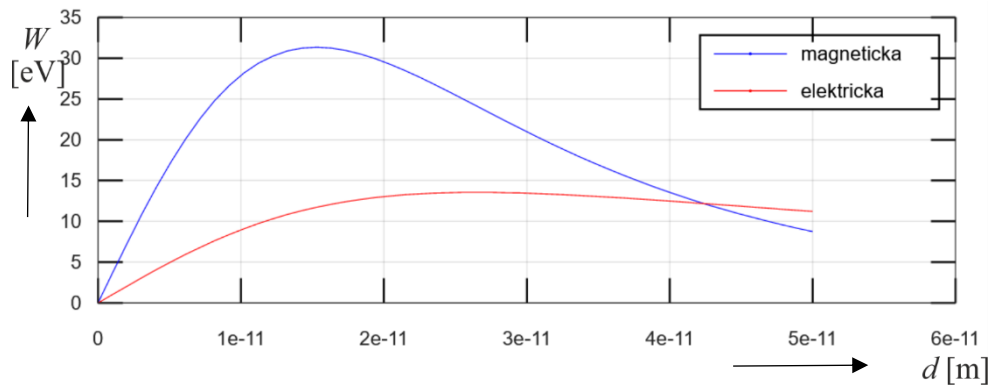
$$W_{v,el} = \frac{1}{2} \cdot \frac{q_e^2 \cdot r \cdot \cos \theta}{4\pi\epsilon_0 \cdot r^2} = \frac{1}{2} \cdot \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{d}{\sqrt{(r_e^2 + d^2)^2}}, \quad (16)$$

$$W_{v,el} = \frac{1}{2} \cdot \frac{(1.6 \cdot 10^{-19})^2}{4\pi \cdot 8.859 \cdot 10^{-12}} \cdot \frac{2.34}{(3.5352 \cdot 10^{-11})^2} = 2.1551 \cdot 10^{-18} \text{ J}. \quad (17)$$

Energii magnetického pole vypočítáme podle vztahu

$$W_{v,mag} = \frac{i_e \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot r \cdot \sin 2\theta}{4\pi \cdot r^3} = \frac{i_e \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot r_e \cdot d}{4\pi \cdot \sqrt{(r_e^2 + d^2)^4}}, \quad (18)$$

$$W_{v,mag} = \frac{3.85 \cdot 10^{-6} \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1.41 \cdot 10^{-26} \cdot 2 \cdot 2.65 \cdot 10^{-11} \cdot 2.34 \cdot 10^{-11}}{4\pi \cdot (3.5352 \cdot 10^{-11})^4} = 4.3104 \cdot 10^{-18} \text{ J}. \quad (19)$$



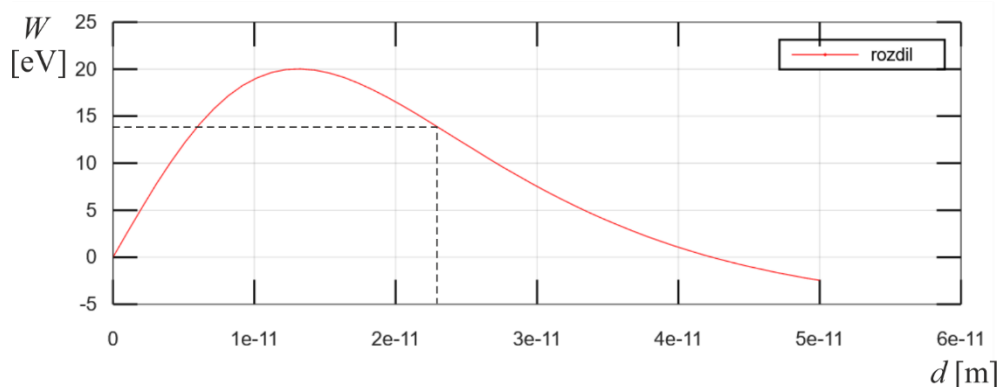
Obr. 3. Grafické znázornění funkcí elektrické a magnetické energie modelu atomu vodíku v závislosti na vzdálenosti elektron-proton.

Výsledná vazebná energie podle výrazu (15) je

$$W_v = 4.3104 - 2.1551 = 2.1553 \text{ J} = 13.4512 \text{ eV}, \quad (20)$$

jak je zobrazeno v obrázcích obr. 3 a obr.4.

Experimentálně zjištěná hodnota ionizační energie atomu vodíku H je $W_{ion-exp} = 13.59843449 \text{ eV}$ [3].

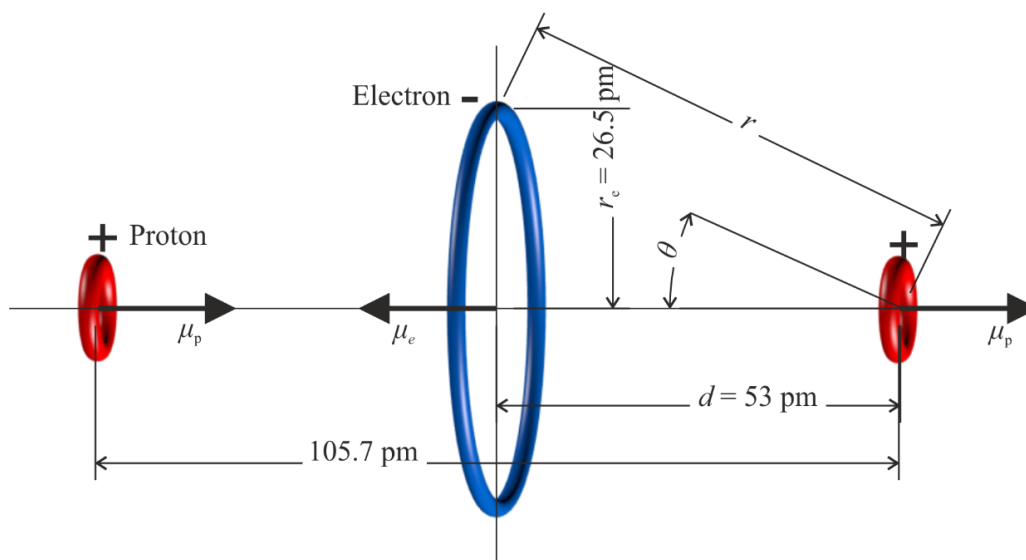


Obr. 4. Grafické znázornění rozdílu energií v modelu atomu vodíku v závislosti na vzdálenosti d elektron-proton a znázornění velikosti vazebné energie ve vzdálenosti d_l dynamické rovnováhy EMG sil.

3. Vazebná energie iontu vodíku H_2^+

U modelu molekuly iontu vodíku H_2^+ můžeme vyjádřit předpoklad, že vzdálenosti d_1 a d_2 obou protonů od elektronu jsou na obě strany shodné (obr. 5)

$$d_1 = d_2 = d \quad (21)$$



Obr. 5. RT model a geometrické uspořádání iontu vodíku H_2^+ .

Na elektron působí z obou stran dvě síly elektrické přitažlivé F_{el+-} a dvě síly magnetické odpudivé F_{mg+-} . Mezi protony působí další elektrická odpudivá síla F_{pp++} .

Rovnice pro nastavení dynamického rovnovážného stavu sil bude mít tvar

$$2 \cdot F_{el+-} - F_{pp++} = 2 \cdot \frac{1}{4} F_{mg+-}. \quad (22)$$

Protože na elektron (osamocený) atomu vodíku H působí EMG síly, pak pro iont H_2^+ přispějí síly dalšího protonu. Tyto složky sil působící do středu prstence elektronu způsobí zmenšení jeho poloměru.

$$r_e = 2.3 \cdot 10^{-11} m \quad (23)$$

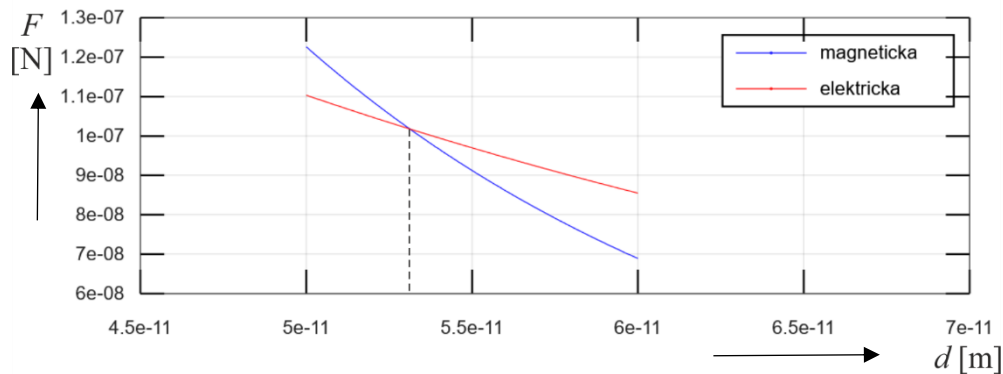
Vypočítaná vzdálenost pro dynamický rovnovážný stav středů elementů modelů elektronu od protonu u iontu vodíku H_2^+ je vyjádřena a vyčíslena podle (22) jako

$$2 \cdot \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{q_e^2}{r^2} \cdot \cos\theta - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{q_e^2}{2 \cdot d^2} = 2 \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{i_e \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot \sin 2\theta}{4\pi \cdot r^3} \quad (24)$$

$$\frac{2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{q_e^2 \cdot d}{\sqrt{(r_e^2 + d^2)^3}} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{q_e^2}{2 \cdot d^2} = \frac{i_e \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot r_e \cdot d}{4\pi \cdot \sqrt{(r_e^2 + d^2)^5}} \quad (25)$$

$$d = 5.3 \cdot 10^{-11} m \quad (26)$$

Grafické zobrazení EMG sil v závislosti na vzdálenosti d elementů modelujících části iontu je znázorněno na obr. 6.



Obr. 6. Zobrazení průběhu funkcí modulů vektorů sil a vzdálenosti pro dynamickou rovnováhu modelu v molekule iontu vodíku H_2^+ .

Rovnice pro vyčíslení energie molekuly H_2^+ bude mít tvar

$$W_{mol} = 2 \cdot W_{el} + \frac{2}{3} W_{p-p} - 2 \cdot W_{mag} \quad (27)$$

Energii elektrického pole vyčíslíme podle vztahu

$$2 \cdot W_{el} = \frac{1}{2} \frac{q_e^2 \cdot d^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot r^3}, \quad (28)$$

$$2 \cdot W_{el} = \frac{(1.6 \cdot 10^{-19})^2 \cdot (5.3 \cdot 10^{-11})^2}{2 \cdot 4\pi \cdot 8.859 \cdot 10^{-12} \cdot (5.778 \cdot 10^{-11})^3} = 3.3503 \cdot 10^{-18} J. \quad (29)$$

Energii elektrického pole mezi protony vyčíslíme podle vztahu

$$\frac{2}{3} W_{p-p} = \frac{2}{3} \cdot \frac{(1.6 \cdot 10^{-19})^2}{2 \cdot 4\pi \cdot 8.854 \cdot 10^{-12} \cdot 10.6 \cdot 10^{-11}} = 0.7239 \cdot 10^{-18} J. \quad (30)$$

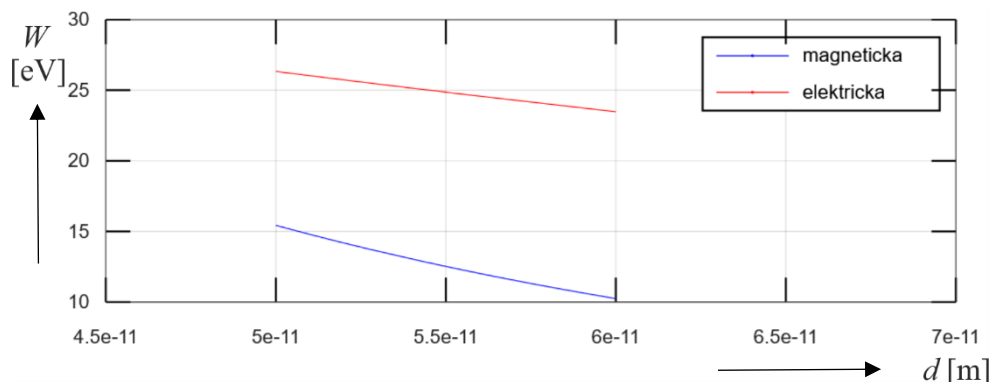
Energii magnetického pole vyčíslíme podle vztahu

$$2 \cdot W_{mag} = \frac{2 \cdot i_e \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot 2 \cdot r_e \cdot d^2}{4\pi \cdot r^5}, \quad (31)$$

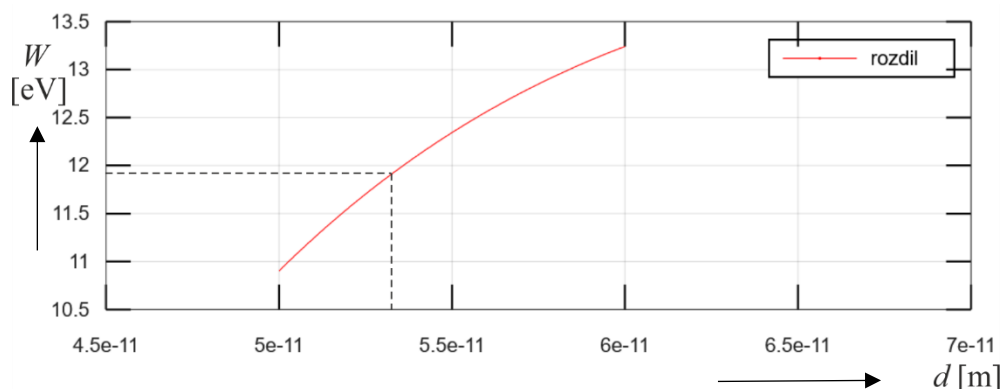
$$2 \cdot W_{\text{mag}} = \frac{2 \cdot 3.85 \cdot 10^{-6} \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1.41 \cdot 10^{-26} \cdot 2 \cdot 2.3 \cdot 10^{-11} \cdot (5.3 \cdot 10^{-11})^2}{4\pi \cdot (5.778 \cdot 10^{-11})^5} = 2.1783 \cdot 10^{-18} \text{ J}. \quad (32)$$

Výsledná energie iontu podle výrazu (27) je

$$W_{\text{mol}} = (3.3503 + 0.7239 - 2.1783) \cdot 10^{-18} \text{ J} = 1.8959 \cdot 10^{-18} \text{ J} = 11.8323 \text{ eV} \quad (33)$$



Obr. 7. Zobrazení průběhu funkcí energií a vzdálenosti pro dynamickou rovnováhu modelu iontu vodíku.



Obr. 8. Zobrazení průběhu funkce rozdílu energií na vzdálenosti d .

Rozdíl energie iontu vodíku H_2^+ proti součtu energií samostatného atomu vodíku H a protonu iontu H^+ je nazýván energií vazby a je vyčíslen

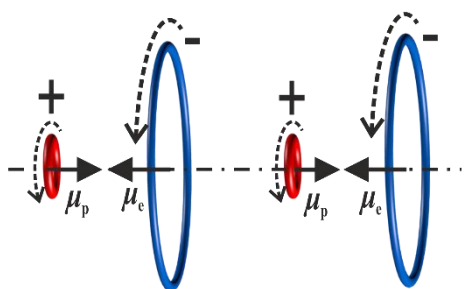
$$W_v = 13.6 + 1 - 11.8323 = 2.7677 \text{ eV} = 267.04 \text{ kJ/mol}. \quad (34)$$

Experimentálně naměřená hodnota vzdáleností protonů je $d = 10.6 \cdot 10^{-11} \text{ m}$ a hodnota vazebné energie je $W_v = 2.77 \text{ eV} = 267 \text{ kJ/mol}$. [2]

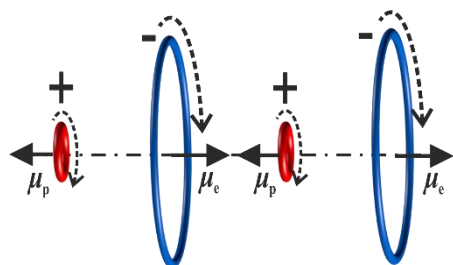
Vypočítaná hodnota podle kvantové mechaniky metodou LCAO [5] je pro vzdálenosti protonů $d = 13.0 \cdot 10^{-11} \text{ m}$ a hodnota vazebné energie $W_v = 1.76 \text{ eV} = 170 \text{ kJ/mol}$ [2].

4. Vazebná energie molekuly para-vodíku H₂

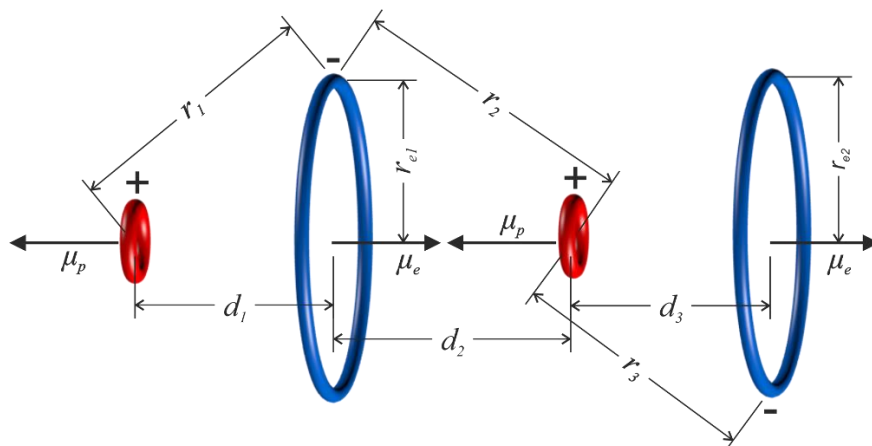
Vodík tvoří dvouatomové molekuly [2]. Jelikož má atom vodíku podle RT [1] dva izomery s vektory magnetických momentů μ orientovaných k sobě („in“, obr. 9) nebo od sebe („out“, obr. 10) [8], může vytvářet molekulu s atomy stejného typu řazenými za sebou s názvem „para-vodík“, nebo může vytvářet kovalentní vazbu tvořenou oběma typy atomů s názvem „ortho-vodík“ [8]. Za normální teploty se vodík chová tak, jako by byl směsí tří objemů ortho a jednoho objemu para H₂ [9]. Při teplotách blízkých 0°K však molekula para-vodíku H₂ získá 100 % převahu, proto můžeme tuto molekulu považovat za základ pro určení vazebné energie [8]. Oba atomy vodíku jsou podle RT v modelu molekuly para-vodíku k sobě vázány vodíkovou vazbou [8], která se při vyšší teplotě snadněji rozpadá než kovalentní vazba molekuly „ortho-vodíku“. Oba izomery typu „in“ i „out“ můžeme považovat za energeticky ekvivalentní.



Obr. 9. Model struktury molekuly para-vodíku tvořené atomy typu „in“ podle RT.



Obr. 10. Model struktury molekuly para-vodíku tvořené atomy typu „out“ podle RT.

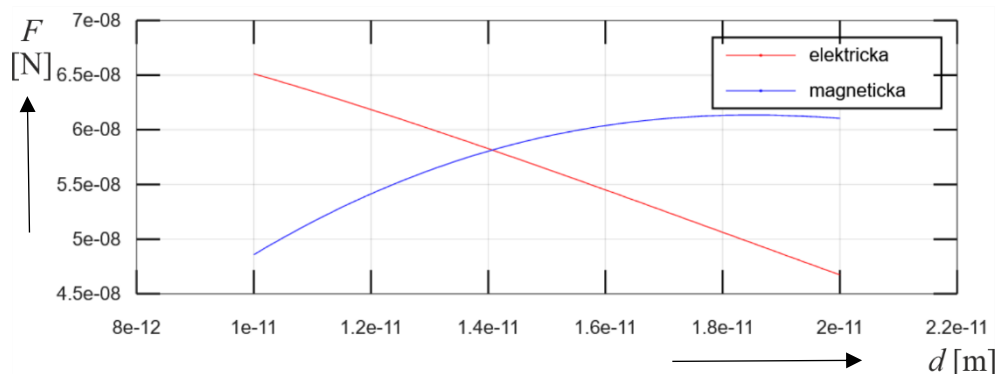


Obr. 11. Model molekuly para-vodíku H₂ podle RT.

Pro vyjádření a vyčíslení sil pro nalezení rovnovážného stavu konfigurace můžeme vyslovit předpoklad, že vzdálenosti d_1 , d_2 a d_3 mezi protonem a elektronem jsou shodné.

$$d_1 = d_2 = d_3 = d . \quad (35)$$

I když model molekuly „para“ vodíku je složen ze dvou „stejných“ za sebou vázaných atomů pomocí vodíkové vazby [2], bude se velikost poloměrů elektronů lišit [2]. Důvodem je skutečnost, že na elektron e_1 bude působit větší síla elektrická i magnetická od obou protonů p_1 a p_2 . pro rozdílnou konfiguraci „in-out“ Složky těchto sil mířící do středu elektronu budou mít za následek zmenšení jeho poloměru r_{e1} podobně, jako u iontu vodíku H_2^+ , (obr. 11).



Obr. 12. Grafické zobrazení velikosti poloměru elektronu r_{e1} při rovnováze sil při vzdálenosti protonů $2d$.

Velikost poloměru r_{e1} můžeme vyčíslit na základě působení sil v rovině prstence elektronu a předpokládané experimentálně naměřené vzdálenosti obou protonů $7.643 \cdot 10^{-11} m$ (obr. 12). Poloměry elektronů pro model molekuly para vodíku H_2 budou:

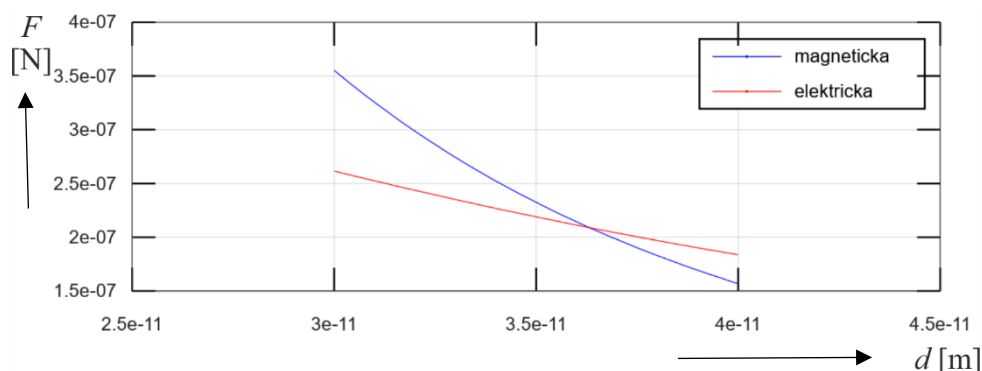
$$r_{e1} = 1.4 \cdot 10^{-11} m , \quad (36)$$

$$r_{e2} = 2.65 \cdot 10^{-11} m . \quad (37)$$

Rovnici dynamických rovnovážných sil pro určení rovnovážného stavu vzdálenosti d para vodíku bude mít tvar

$$2 \cdot \frac{2}{3} F_{el1+-} + F_{el2+-} - F_{pp++} - \frac{1}{2} F_{el2--} = 2 \cdot F_{mg1+-} + \frac{3}{4} F_{mg2+-} . \quad (38)$$

Vyčíslená vzdálenost podle vztahů (36) je $d = 3.7 \cdot 10^{-11} m$, (obr. 13). (39)



Obr. 13. Grafické vyjádření průběhu funkcí modulů vektorů sil a vzdálenosti pro dynamickou rovnováhu modelu molekuly para-vodíku H_2 .

Vazebnou energii molekuly „para“ vodíku H_2 vypočítáme jako rozdíl mezi energií molekuly a součtu energií dvou samostatných atomů vodíku H.

$$W_{\text{vaz}} = 2 \cdot W_H - W_{H2} \quad (40)$$

Rovnice pro určení energie molekuly „para“ vodíku H₂ bude mít tvar

$$W_{H2} = 2 \cdot \frac{2}{3} W_{el1+-} + W_{el2+-} + W_{pp++} + \frac{1}{2} W_{el12--} - 2 \cdot \frac{1}{2} W_{mg1+-} - \frac{3}{4} W_{mg2+-} \quad (41)$$

Energii elektrického pole mezi prvním elektronem a oběma protony vyčíslíme podle vztahu:

$$W_{el1+-} = \frac{q_e^2}{2 \cdot 4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{d^2}{\left(\sqrt{d^2 + r_{e1}^2}\right)^3}, \quad (42)$$

$$2 \cdot W_{el1+-} = \frac{2}{3} \cdot \frac{(1.6 \cdot 10^{-19})^2}{2 \cdot 4 \cdot 3.14 \cdot 8.854 \cdot 10^{-12}} \cdot \frac{(3.7 \cdot 10^{-11})^2}{\left(\sqrt{(3.7 \cdot 10^{-11})^2 + (1.4 \cdot 10^{-11})^2}\right)^3} = 3.3934 \cdot 10^{-18} J. \quad (43)$$

Vyčíslení energie elektrického pole mezi druhým protonem a druhým elektronem

$$W_{el2+-} = \frac{(1.6 \cdot 10^{-19})^2}{2 \cdot 4 \cdot 3.14 \cdot 8.854 \cdot 10^{-12}} \cdot \frac{(3.7 \cdot 10^{-11})^2}{\left(\sqrt{(3.7 \cdot 10^{-11})^2 + (2.65 \cdot 10^{-11})^2}\right)^3} = 1.6716 \cdot 10^{-18} J. \quad (44)$$

Vyčíslení energie elektrického pole mezi oběma protony

$$W_{pp++} = \frac{q_e^2}{2 \cdot 4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{2d}, \quad (45)$$

$$W_{pp++} = \frac{(1.6 \cdot 10^{-19})^2}{2 \cdot 4 \cdot 3.14 \cdot 8.854 \cdot 10^{-12}} \cdot \frac{1}{2 \cdot 3.7 \cdot 10^{-11}} = 1.5554 \cdot 10^{-18} J. \quad (46)$$

Vyčíslení energie elektrického pole mezi oběma elektrony

$$\frac{1}{2} W_{el12--} = \frac{1}{2} \cdot \frac{q_e^2}{2 \cdot 4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{2\left(\sqrt{d^2 + r_{e1}^2} + \sqrt{d^2 + r_{e2}^2}\right)}, \quad (47)$$

$$\frac{1}{2} W_{el12--} = \frac{1}{2} \cdot \frac{(1.6 \cdot 10^{-19})^2}{2 \cdot 4 \cdot 3.14 \cdot 8.854 \cdot 10^{-12}} \cdot \frac{1}{2 \cdot (3.9560 + 4.5511) \cdot 10^{-11}} = 0.6765 \cdot 10^{-18} J, \quad (48)$$

Vyčíslení energie magnetického pole mezi prvním elektronem a oběma protony podle vztahu

$$W_{mag1+-} = \frac{i_e \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot r_{e1} \cdot 2d^2}{4\pi\left(\sqrt{d^2 + r_{e1}^2}\right)^5}, \quad (49)$$

$$2 \cdot W_{mag1+-} = 2 \cdot \frac{3.85 \cdot 10^{-6} \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1.41 \cdot 10^{-26}}{4\pi} \cdot \frac{1.4 \cdot 10^{-11} \cdot 2 \cdot (3.7 \cdot 10^{-11})^2}{2 \cdot \left(\sqrt{(3.7 \cdot 10^{-11})^2 + (1.4 \cdot 10^{-11})^2}\right)^5} = 2.1476 \cdot 10^{-18} J, \quad (50)$$

Vyčíslení energie magnetického pole mezi druhým elektronem a protonem podle (47)

$$\frac{3}{4}W_{mag^{2+-}} = \frac{3}{4} \cdot \frac{3.85 \cdot 10^{-6} \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1.41 \cdot 10^{-26}}{4\pi} \cdot \frac{2.65 \cdot 10^{-11} \cdot 2 \cdot (3.7 \cdot 10^{-11})^2}{\left(\sqrt{(3.7 \cdot 10^{-11})^2 + (2.65 \cdot 10^{-11})^2}\right)^5} = 1.5130 \cdot 10^{-18} J, \quad (51)$$

Celková energie modelu molekuly para-vodíku H₂ (41) je vyčíslena

$$W_{H_2} = (3.3934 + 1.6716 + 1.5554 + 0.6765 - 2.1476 - 1.5130) \cdot 10^{-18} J, \quad (\text{obr. 14}). \quad (52)$$

$$W_{H_2} = 3.6363 \cdot 10^{-18} J, \quad (53)$$

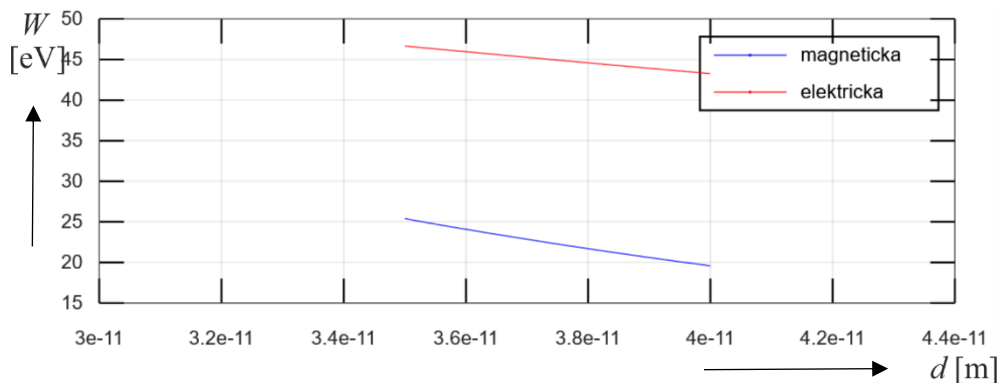
$$W_{H_2} = 3.6363 \cdot 10^{-18} \cdot 6.241 \cdot 10^{18} = 22.694 eV, \quad (\text{obr. 15}), \quad (54)$$

Velikost vazebné energie je dána rozdílem energií dvou samostatných atomů vodíku H, které vstupovaly do reakce, a vyčíslenou energií molekuly „para“ vodíku H₂ (54)

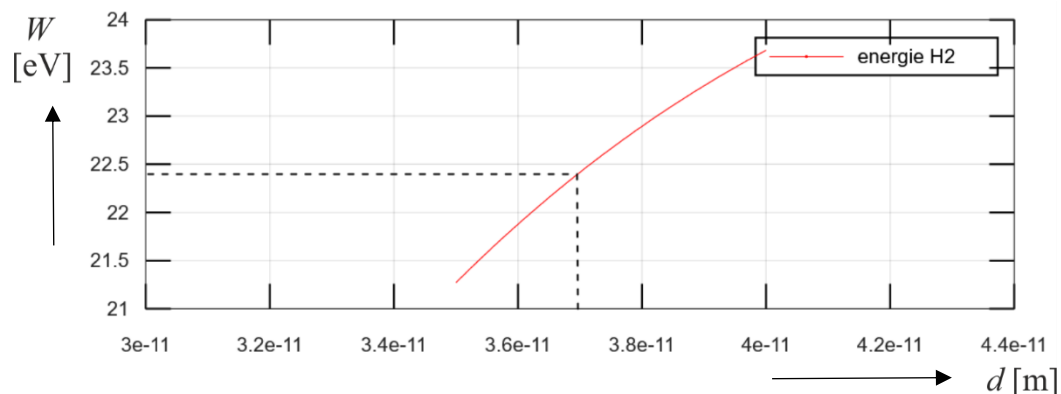
$$W_{vaz} = 2 \cdot W_H - W_{H_2} = 2 \cdot 13.6 - 22.694 = 4.506 eV, \quad (55)$$

$$W_{vaz} = 4.506 \cdot 96.485 = 434.7591 kJ/mol. \quad (56)$$

Experimentálně zjištěná hodnota vazebné energie molekuly vodíku H₂ při teplotě 298°K je 4.516 eV, [6] to je 435.7799 kJ/mol .



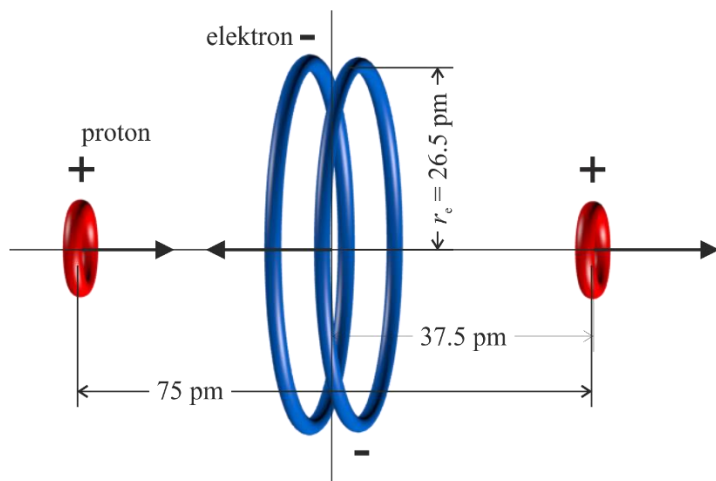
Obr. 14. Grafické vyjádření průběhu funkcí energií a vzdálenosti modelu molekuly „para“ vodíku.



Obr. 15. Grafické vyjádření průběhu funkce rozdílu energií a vzdálenosti modelu molekuly para-vodíku.

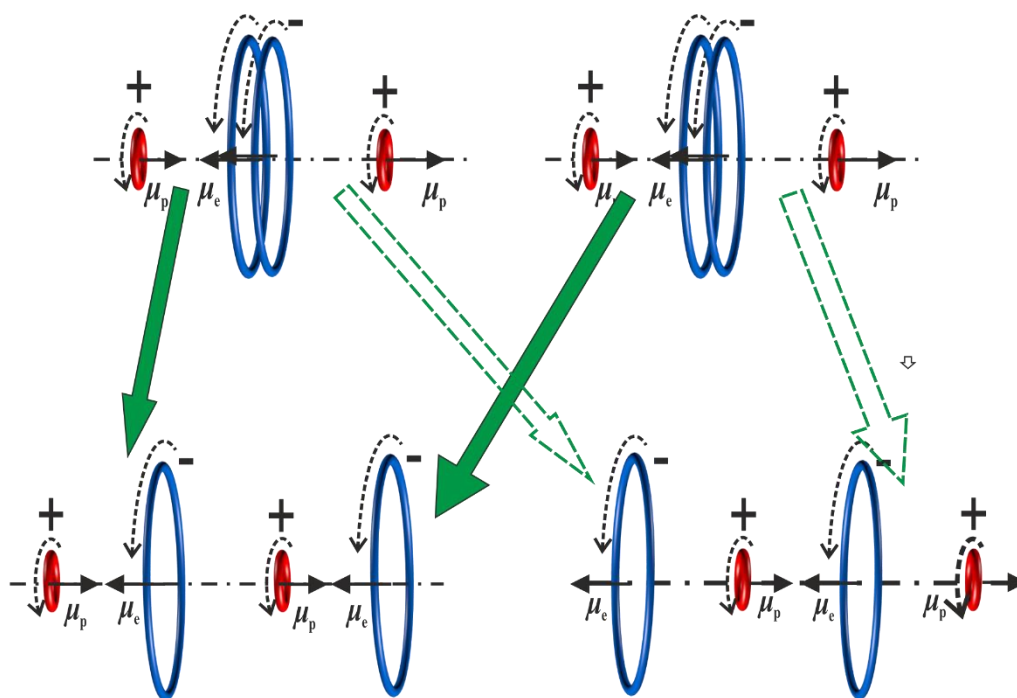
5. Vazebná energie molekuly ortho-vodíku H₂

Jak bylo zmíněno, má podle RT [1] atom vodíku dva izomery s vektory magnetických momentů μ orientovaných k sobě („in“ obr. 9) nebo od sebe („out“ obr. 10) [8], a může vytvářet nejen molekulu s atomy stejného typu řazenými za sebou s názvem „para-vodík“, ale také může vytvářet kovalentní vazbu tvořenou oběma typy atomů s názvem „ortho-vodík“ H₂, (obr. 16).



Obr. 16. Modelovaná molekula „ortho-vodíku“ H₂ podle navržené RT

Za normální teploty se vodík chová tak, jako by byl směsí tří objemů „ortho“ a jednoho objemu „para“ H₂. Stejný poměr vytváří i molekula „ortho-vody“ H₂O ku molekule „para-vody“ H₂O a ani při vyšší teplotě není tento poměr překročen [10]. Můžeme tedy vyslovit hypotézu, že pro tvorbu „ortho“ molekul vodíku a vody se nedostává potřebné množství volných atomů vodíku H jednoho typu, protože i atomy vodíku „in“ a „out“ se nacházejí při normální teplotě 298°K v poměru 3:1. Z toho také vyplývá, že i u molekul „para-vodíku“ H₂ při teplotě 0°K převládají molekuly vytvářené stejným typem atomů.



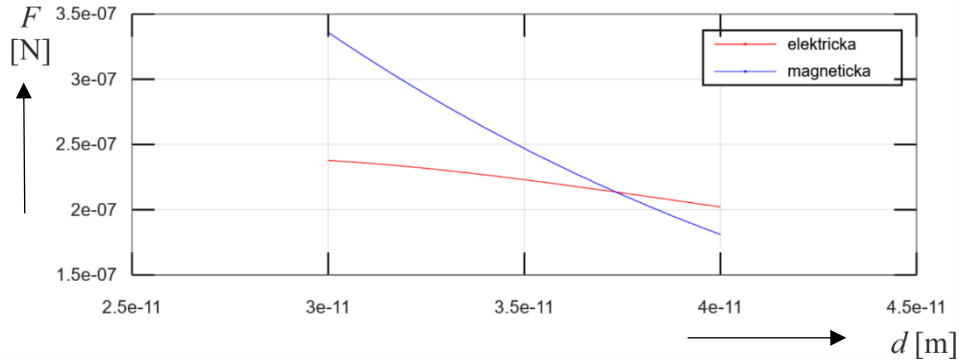
Obr. 17. Rozpad dvou modelů molekul „ortho-vodíku“ za vzniku dvou modelů molekul „para-vodíku“.

Rovnice pro rovnováhu sil je použita k vyjádření levitační vzdálenosti:

$$2 \cdot F_{el1+-} + 2 \cdot \frac{1}{2} F_{el2+-} - \frac{2}{3} F_{pp++} = 4 \cdot F_{mg12+-} \quad (57)$$

Vyčíslená vzdálenost d pro dynamickou rovnováhu sil modelu molekuly „ortho-vodíku“ H_2 je

$$d = 3.75 \cdot 10^{-11} \text{ m} . \text{ (obr.18)} \quad (58)$$



Obr. 18. Grafické vyjádření průběhu modulů vektorů sil v závislosti na vzdálenosti pro dynamickou rovnováhu modelu molekuly „ortho-vodíku“.

Experimentálně zjištěná průměrná délka vazby d pro H-H v kapalně fázi [9] je $d_{exp}=0,7643 \text{ \AA}$ je delší než délka vazby d_H izolované volné molekuly [4].

Vazebnou energii molekuly „ortho-vodíku“ H_2 vyjádříme jako rozdíl mezi energií molekuly W_M a součtu energií W_{H2} dvou samostatných atomů vodíku H.

$$W_{vaz} = 2 \cdot W_H - W_{H2} \quad (59)$$

Rovnice pro určení energie molekuly ortho vodíku H_2 bude mít tvar

$$W_{H2} = 2 \cdot W_{el1+-} + 2 \cdot \frac{2}{3} W_{el2+-} + W_{pp++} - 4 \cdot \frac{1}{2} W_{mg12+-} \quad (60)$$

Energii elektrického pole W_{el} mezi prvním elektronem a oběma protony vyhodnotíme podle vztahu:

$$2 \cdot W_{el1+-} = \frac{2}{2} \cdot \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{d^2}{\left(\sqrt{d^2 + r_{el}^2}\right)^3}, \quad (61)$$

$$2 \cdot W_{el1+-} = 2 \cdot \frac{(1.6 \cdot 10^{-19})^2}{2 \cdot 4 \cdot 3.14 \cdot 8.854 \cdot 10^{-12}} \cdot \frac{(3.75 \cdot 10^{-11})^2}{\left(\sqrt{(3.75 \cdot 10^{-11})^2 + (2.65 \cdot 10^{-11})^2}\right)^3} = 3.3436 \cdot 10^{-18} \text{ J}, \quad (62)$$

$$2 \cdot \frac{2}{3} W_{el2+-} = \frac{2}{3} \cdot \frac{(1.6 \cdot 10^{-19})^2}{2 \cdot 4 \cdot 3.14 \cdot 8.854 \cdot 10^{-12}} \cdot \frac{(3.75 \cdot 10^{-11})^2}{\left(\sqrt{(3.75 \cdot 10^{-11})^2 + (2.65 \cdot 10^{-11})^2}\right)^3} = 2.2291 \cdot 10^{-18} \text{ J}, \quad (63)$$

Energie elektrického pole mezi oběma protony je zapsána

$$W_{pp++} = \frac{q_e^2}{2 \cdot 4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{2d}, \quad (64)$$

$$W_{pp^{++}} = \frac{(1.6 \cdot 10^{-19})^2}{2 \cdot 4 \cdot 3.14 \cdot 8.854 \cdot 10^{-12}} \cdot \frac{1}{2 \cdot 3.75 \cdot 10^{-11}} = 1.5347 \cdot 10^{-18} J. \quad (65)$$

Vyčíslení energie magnetického pole mezi prvním elektronem a oběma protony

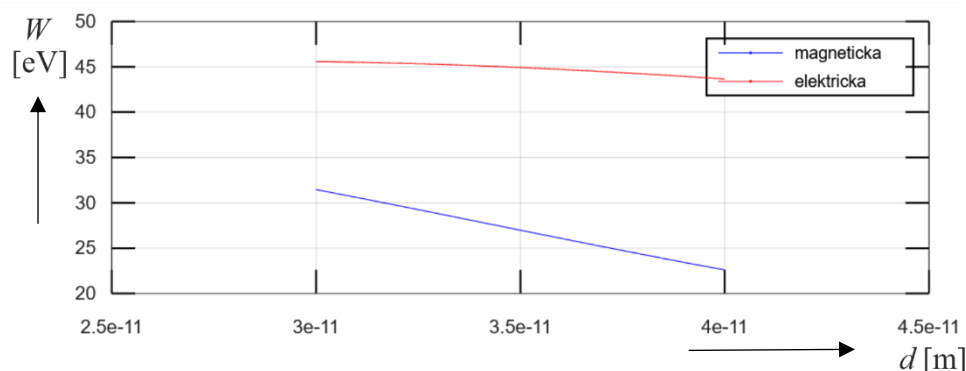
$$4 \cdot \frac{1}{2} W_{mag1+-} = \frac{1}{2} \cdot \frac{4 \cdot i_e \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot r_{e1} \cdot 2 \cdot d^2}{4\pi (\sqrt{d^2 + r_{e1}^2})^5}, \quad (66)$$

$$\frac{4}{2} \cdot W_{mag1+-} = \frac{4}{2} \cdot \frac{3.85 \cdot 10^{-6} \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1.41 \cdot 10^{-26}}{4\pi} \cdot \frac{2.65 \cdot 10^{-11} \cdot 2 \cdot (3.75 \cdot 10^{-11})^2}{\left(\sqrt{(3.75 \cdot 10^{-11})^2 + (2.65 \cdot 10^{-11})^2}\right)^5} = 3.9638 \cdot 10^{-18} J, \quad (67)$$

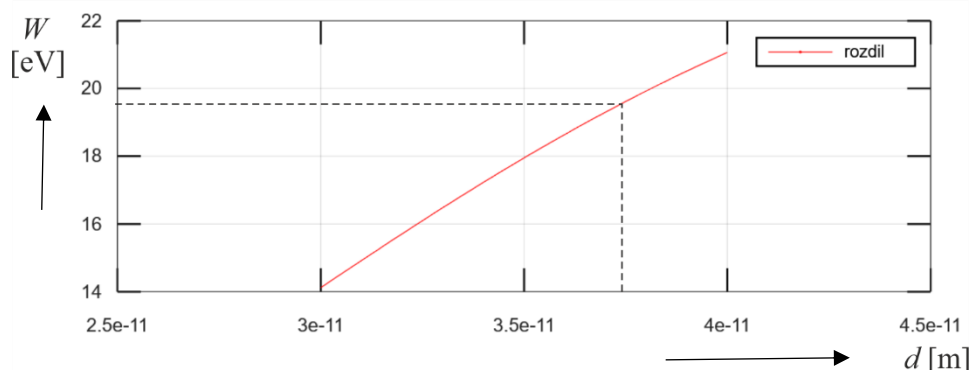
Celková energie modelu molekuly „ortho-vodíku“ H₂ je vyčíslena jako

$$W_{H_2} = (3.3436 + 2.2291 + 1.5347 - 3.9638) \cdot 10^{-18} J = 3.1436 \cdot 10^{-18} J, \text{ (obr. 19).} \quad (68)$$

$$W_{H_2} = 3.1436 \cdot 10^{-18} \cdot 6.241 \cdot 10^{+18} = 19.6192 eV, \text{ (obr. 20),} \quad (69)$$



Obr. 19. Grafické vyjádření průběhu energií v závislosti na vzdálenosti v modelu molekuly „ortho-vodíku“ H₂.



Obr. 20. Grafické vyjádření průběhu funkce rozdílu energií v závislosti na vzdálenosti v modelu molekuly „ortho-vodíku“ H₂.

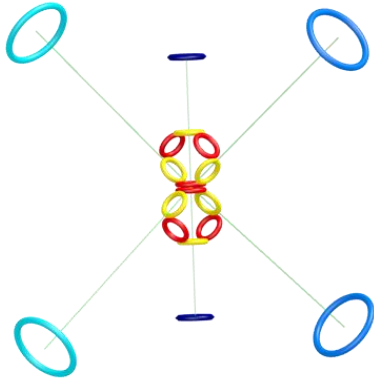
Velikost vazebné energie je dána rozdílem energií W_H dvou samostatných atomů vodíku H, které vstupovaly do reakce. Potom energii molekuly „ortho-vodíku“ H₂ z (59) získáme

$$W_{\text{vaz}} = 2 \cdot W_H - W_{H_2} = 2 \cdot 13.6 - 19.6192 = 7.5808 \text{ eV}, \quad (70)$$

$$W_{\text{vaz}} = 7.5808 \cdot 96.485 = 731.43 \text{ kJ/mol}. \quad (71)$$

Experimentální hodnoty u takto prezentované verze molekuly „ortho-vodíku“ H_2 zatím nebyly publikovány.

6. Ionizační energie atomu uhlíku C



Obr. 21. Model atomu uhlíku C podle RT.

Podle RT publikované [1] [8], jsou rozměry modelu atomu uhlíku

$$r_e = 2.1343 \cdot 10^{11} \text{ m} \text{ podle [1]}, \quad (72)$$

$$i_e = 4 \cdot 3.184 \cdot 10^{-6} \text{ A} \text{ podle [1]}. \quad (73)$$

Levitační vzdálenost elektronu $2p$ u atomu uhlíku C na základní energetické úrovni je dána rovnováhou mezi elektrickou silou přitažlivou a magnetickou silou odpudivou mezi protonem jádra a elektronem [1]:

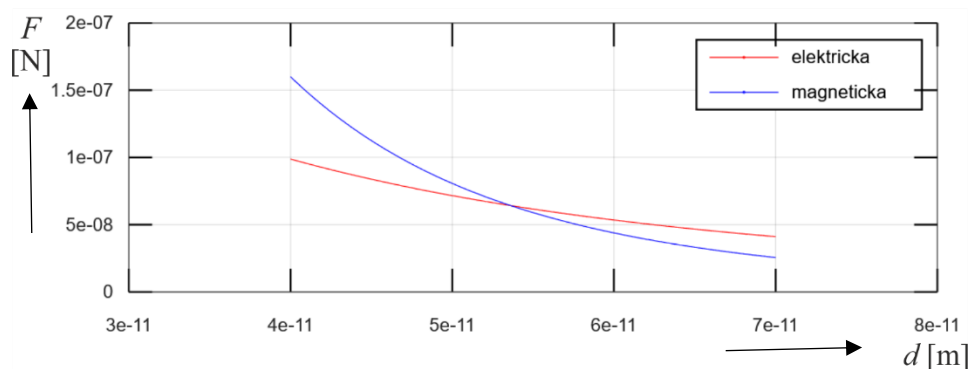
$$F_{el,z} = F_{mg,z} \quad (74)$$

Podle vztahu (9-12) vyčíslíme levitační vzdálenost d_l :

$$d_l = \left(\frac{4 \cdot 3.184 \cdot 10^{-6} \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1.41 \cdot 10^{-26} \cdot 8.854 \cdot 10^{-12} \cdot 2 \cdot 2.1343 \cdot 10^{-11}}{(1.6 \cdot 10^{-19})^2} - (2.1343 \cdot 10^{-11})^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (75)$$

Potom vypočtenou hodnotu pro rovnovážnou polohu elektronu od protonu atomu uhlíku C na základní úrovni získáme:

$$d_l = 5.3 \cdot 10^{-11} \text{ m}, \text{ jak je vidět v obr. 22.} \quad (76)$$



Obr. 22. Grafické znázornění sil v závislosti na vzdálenosti d atomu uhlíku C.

U atomu uhlíku se vazební energie W_v mezi protonem a elektronem $2p$ rovná ionizační energii W_i , která je potřebná k odtržení elektronu $2p$ od protonu a rovná se rozdílu mezi energií elektrického pole W_{el} a magnetického pole W_{mag} mezi elektronem a protonem. Rovnice pro vyjádření energie v modelu atomu C bude mít tvar

$$W_C = W_{el} - W_{mag} \quad (77)$$

Energii elektrického pole získáme jako

$$W_{el} = \frac{1}{2} \frac{q_e^2 \cdot d^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot r^3}, \quad (78)$$

$$W_{el} = \frac{(1.6 \cdot 10^{-19})^2 \cdot (5.3 \cdot 10^{-11})^2}{2 \cdot 4\pi \cdot 8.854 \cdot 10^{-12} \cdot \left(\sqrt{(5.3 \cdot 10^{-11})^2 + (2.1343 \cdot 10^{-11})^2} \right)^3} = 1.73342 \cdot 10^{-18} \text{ J} \quad (79)$$

Energii magnetického pole vyjádříme

$$W_{mag} = \frac{i_{el} \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot 2 \cdot r_e \cdot d^2}{4\pi \cdot r^5}, \quad (80)$$

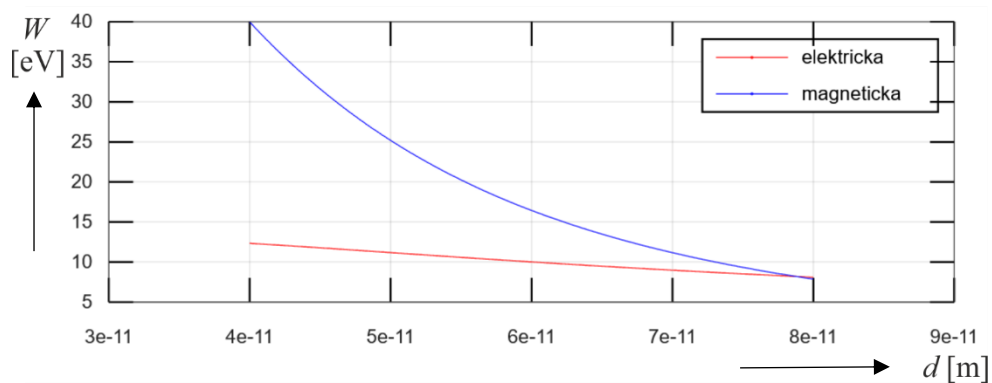
$$W_{mag} = \frac{4 \cdot 3.184 \cdot 10^{-6} \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1.41 \cdot 10^{-26} \cdot 2 \cdot 2.1343 \cdot 10^{-11} \cdot (5.3 \cdot 10^{-11})^2}{4\pi \cdot (5.7136 \cdot 10^{-11})^5} = 3.53623 \cdot 10^{-18} \text{ J} \quad (81)$$

Výsledná ionizační energie atomu uhlíku C podle výrazu (77) je

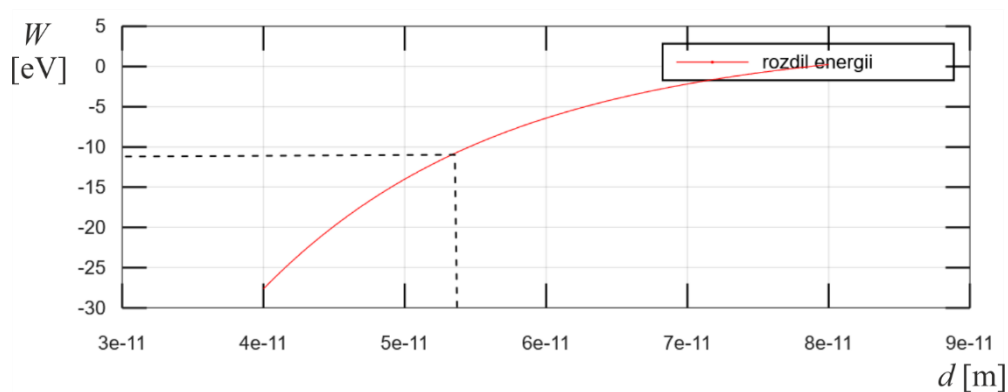
$$W_C = (1.73342 - 3.53623) \cdot 10^{-18} \text{ J} = -1.80281 \cdot 10^{-18} \text{ J} = -11.2513 \text{ eV} \quad (82)$$

Experimentálně naměřená hodnota ionizační energie atomu uhlíku C je $W_i = -11.26 \text{ eV}$. [7]

Grafické vyjádření průběhu funkcí energií EMG polí mezi protonem a prvním elektronem RT modelu atomu uhlíku v závislosti na vzdálenosti d je znázorněno na obr. 23. Rozdíl těchto energií v závislosti na vzdálenosti d podle vztahu (75) tvoří vazebnou (ionizační) energii prvního elektronu atomu uhlíku C, jak je naznačeno v obr. 24.

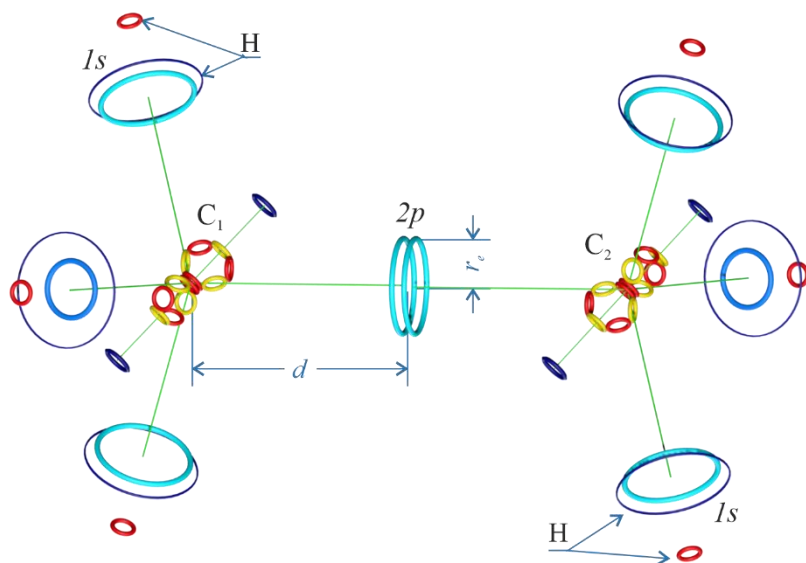


Obr. 23. Grafické vyjádření průběhu energie v závislosti na vzdálenosti v modelu atomu uhlíku C.



Obr. 24. Grafické vyjádření průběhu rozdílu energie v závislosti na vzdálenosti v RT modelu atomu uhlíku C.

7. Vazebná energie vazby atomů uhlíku C-C



Obr. 25. Schematický model molekuly ethanu C_2H_6 podle RT.

Rozměry, poloměr r_e a odpovídající elektrický proud i_e vazebných elektronů $2p$ jsou podle [1]

$$r_e = 2.1343 \cdot 10^{11} \text{ m} , \quad (83)$$

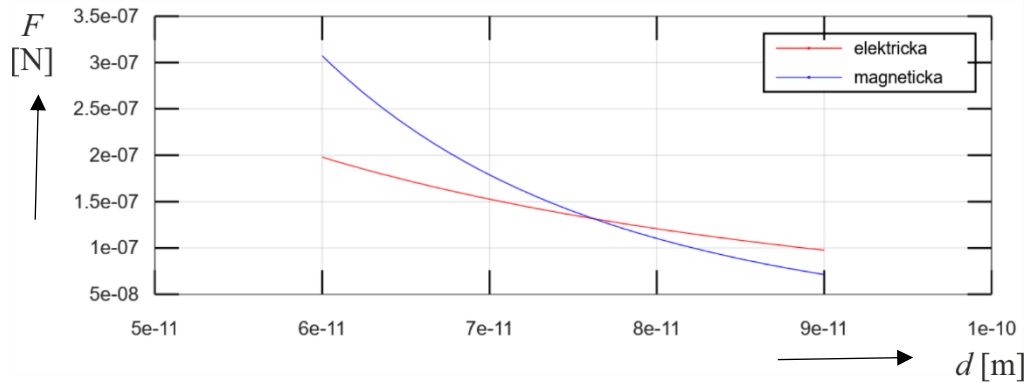
$$i_e = 4 \cdot 3.184 \cdot 10^{-6} \text{ A} . \quad (84)$$

Dynamická rovnováha vyjádřená rovností pro působící síly slouží k určení rovnovážného stavu vzdálenosti d vazby C-C, má tvar

$$4 \cdot F_{el12+-} - 2 \cdot F_{pp++} = 7 F_{mg12+-} . \quad (85)$$

Ze vztahů pro elektrickou a magnetickou sílu v ose prstenců protonů a elektronů (7 a 8) získáme s aplikací (85) levitační vzdálenost d_l , jak je doplněno v obr. 26:

$$d_{C-C} = 7.675 \cdot 10^{-11} \text{ m} . \quad (86)$$



Obr. 26. Grafické vyjádření levitační vzdálenosti modelu elektronu d při rovnováze EMG sil vazeb C-C.

Vazebnou energii vazby C-C vyhodnotíme jako rozdíl mezi energií vazby a součtu energií dvou samostatných atomů uhlíku C, obr.25.

$$W_{vaz} = 2 \cdot W_C - W_{C-C} . \quad (87)$$

Energie vazby C-C má tvar

$$W_{C-C} = 4 \cdot W_{el12+-} + 2 \cdot W_{pp++} - 7 \cdot W_{mg12+-} . \quad (88)$$

Energii elektrického pole mezi dvěma elektrony mezi oběma protony vyčíslíme jako:

$$4 \cdot W_{el1+-} = 4 \cdot \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{d^2}{\left(\sqrt{d^2 + r_{el}^2}\right)^3} , \quad (89)$$

$$4 \cdot W_{el1+-} = 4 \cdot \frac{(1.6 \cdot 10^{-19})^2}{2 \cdot 4 \cdot 3.14 \cdot 8.854 \cdot 10^{-12}} \cdot \frac{(7.675 \cdot 10^{-11})^2}{\left(\sqrt{(7.675 \cdot 10^{-11})^2 + (2.1343 \cdot 10^{-11})^2}\right)^3} = 5.3646 \cdot 10^{-18} \text{ J} . \quad (90)$$

Energie elektrického pole mezi oběma protony je

$$2 \cdot W_{pp++} = 2 \cdot \frac{q_e^2}{2 \cdot 4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{2d} , \quad (91)$$

$$2 \cdot W_{pp^{++}} = 2 \cdot \frac{(1.6 \cdot 10^{-19})^2}{2 \cdot 4 \cdot 3.14 \cdot 8.854 \cdot 10^{-12}} \cdot \frac{1}{2 \cdot 7.675 \cdot 10^{-11}} = 1.4997 \cdot 10^{-18} J . \quad (92)$$

Energie magnetického pole mezi dvěma elektrony a oběma protony je

$$7 \cdot W_{mag1+-} = \frac{7 \cdot i_e \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot r_{e1} \cdot 2 \cdot d^2}{4\pi \left(\sqrt{d^2 + r_{e1}^2} \right)^5}, \quad (93)$$

$$7 \cdot W_{mag1+-} = 7 \cdot k_{mag} \cdot \frac{2.1343 \cdot 10^{-11} \cdot 2 \cdot (7.675 \cdot 10^{-11})^2}{\left(\sqrt{(7.675 \cdot 10^{-11})^2 + (2.1343 \cdot 10^{-11})^2} \right)^5} = 9.8519 \cdot 10^{-18} J , \quad (94)$$

kde

$$k_{mag} = \frac{4 \cdot 3.184 \cdot 10^{-6} \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1.41 \cdot 10^{-26}}{4\pi} \quad (95)$$

Celková energie RT modelu vazby C-C je (88)

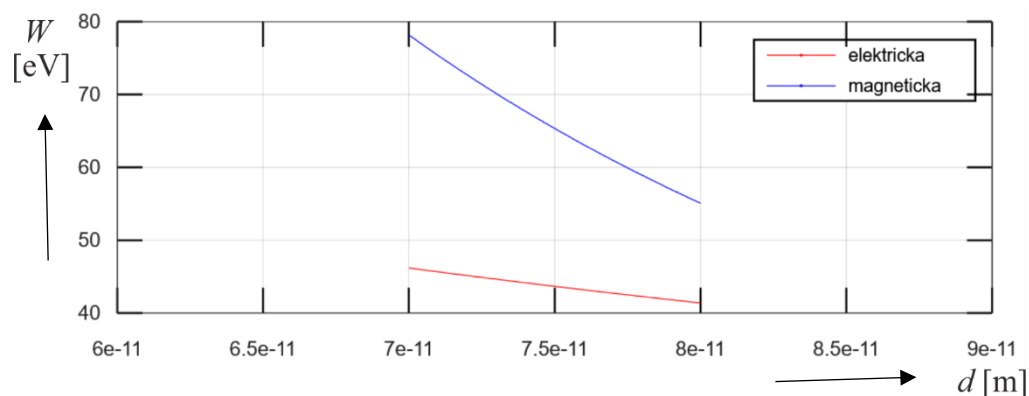
$$W_{C-C} = (5.3646 + 1.4997 - 9.8519) \cdot 10^{-18} J = 2.9876 \cdot 10^{-18} J , \text{ obr. 27.} \quad (96)$$

$$W_{C-C} = 2.9876 \cdot 10^{-18} \cdot 6.241 \cdot 10^{+18} = 18.6456 eV , \text{ obr. 28.} \quad (97)$$

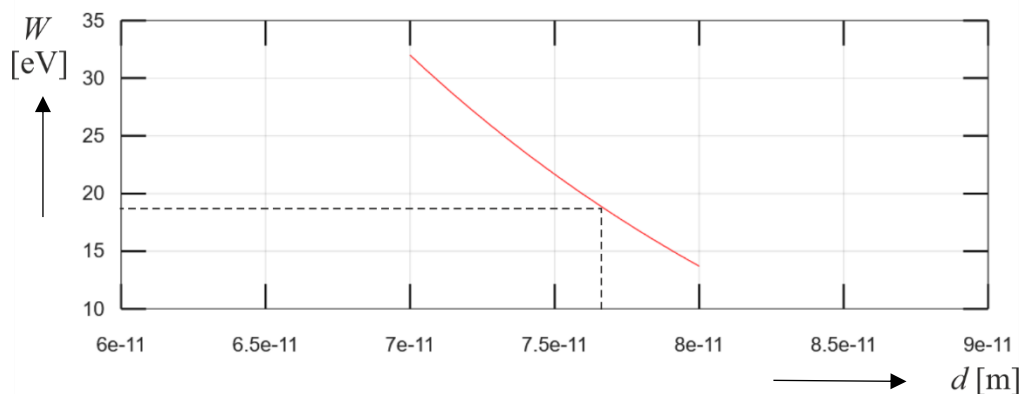
Velikost vazebné energie podle RT je dána rozdílem energií dvou samostatných atomů uhlíku C, které vstupovaly do reakce, a hodnotou energií vazby C-C ze vztahu (87) je

$$W_{vaz} = 2 \cdot W_C - W_{C-C} = 2 \cdot 11.26 - 18.6456 = 3.8744 eV , \quad (98)$$

$$W_{vaz} = 3.8744 \cdot 96.485 = 373.82 kJ/mol . \quad (99)$$



Obr. 27. Grafické vyjádření průběhu energií v závislosti na vzdálenosti v RT modelu vazby C-C.

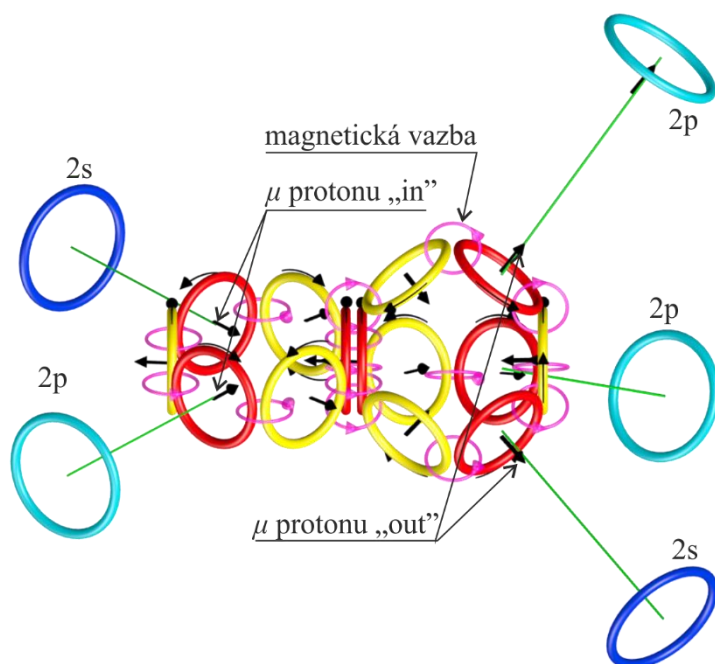


Obr. 28. Grafické vyjádření průběhu rozdílu energií v závislosti na vzdálenosti v RT modelu vazby C-C.

Experimentálně naměřená hodnota vazební energie je podle práce [6]

$$W_{\text{vaz}} = 3.9115 \text{ eV} = 377.4 \text{ kJ/mol} .$$

8. Ionizační energie atomu dusíku N



Obr. 29. Schematický model struktury atomu dusíku podle RT.

Z předchozích prací [1], [8] byly získány parametry atomu dusíku:

$$\text{Ionizační energie [7] } W_i = 14.53413 \text{ eV}, \quad (100)$$

$$\text{poloměr elektronu } r_e = 1.653558 \cdot 10^{-11} \text{ m}, \quad (101)$$

$$\text{odpovídající elektrický proud elektronu } i_e = 4 \cdot 4.109726 \cdot 10^{-6} \text{ A} .$$

Levitační vzdálenost elektronu $2p$ u atomu dusíku N na základní energetické úrovni je dána rovnováhou mezi elektrickou silou (přitažlivou) a magnetickou silou (odpudivou) mezi protonem jádra a elektronem:

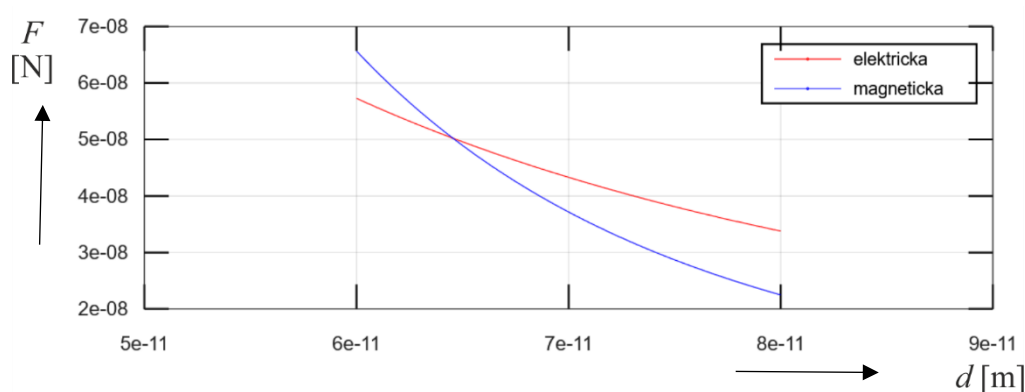
$$F_{el,z} = F_{mg,z} \quad (102)$$

Podle vztahů (10-12) je levitační vzdálenost d_l :

$$d_l = \left(\frac{4 \cdot 4 \cdot 4 \cdot 1097 \cdot 10^{-6} \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1.41 \cdot 10^{-26} \cdot 8.854 \cdot 10^{-12} \cdot 2 \cdot 1.6536 \cdot 10^{-11}}{(1.6 \cdot 10^{-19})^2} - (1.6536 \cdot 10^{-11})^2 \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (103)$$

Rovnovážnou polohu, levitační vzdálenost, elektronu $2p$ od protonu atomu dusíku N na základní úrovni, obr. 30, pak vyčíslíme:

$$d_l = 6.5 \cdot 10^{-11} m. \quad (104)$$



Obr. 30. Grafické zobrazení sil pro určení rovnovážné vzdálenosti elektronu d pomocí RT u atomu dusíku N.

Vztah pro vyjádření energie atomu dusíku N má tvar ovlivněný strukturou jádra, podle obr. 29, je

$$W_v = W_{el} - \frac{5}{3} W_{mag} \quad (105)$$

Energii elektrického pole je

$$W_{el} = \frac{1}{2} \frac{q_e^2 \cdot d^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot r^3}, \quad (106)$$

a hodnota je

$$W_{el} = \frac{(1.6 \cdot 10^{-19})^2 \cdot (6.5 \cdot 10^{-11})^2}{2 \cdot 4\pi \cdot 8.854 \cdot 10^{-12} \cdot \left(\sqrt{(6.5 \cdot 10^{-11})^2 + (1.654 \cdot 10^{-11})^2} \right)^3} = 1.612 \cdot 10^{-18} J. \quad (107)$$

Energii magnetického pole vyčíslíme podle vztahu

$$\frac{5}{3} W_{mag} = \frac{5}{3} \cdot \frac{4 \cdot i_{el} \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot 2 \cdot r_e \cdot d^2}{4\pi \cdot r^5}, \quad (108)$$

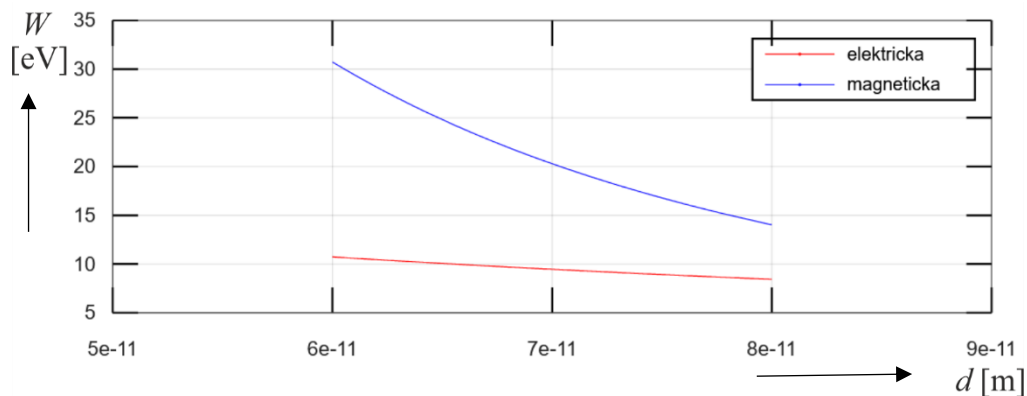
$$\frac{5}{3}W_{\text{mag}} = \frac{5}{3} \cdot \frac{4 \cdot 4.1097 \cdot 10^{-6} \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1.41 \cdot 10^{-26} \cdot 2 \cdot 1.654 \cdot 10^{-11} \cdot (6.5 \cdot 10^{-11})^2}{4\pi \cdot (6.707 \cdot 10^{-11})^5} = 3.9773 \cdot 10^{-18} \text{ J} . \quad (109)$$

Výsledná energie atomu dusíku N podle výrazu (105) je

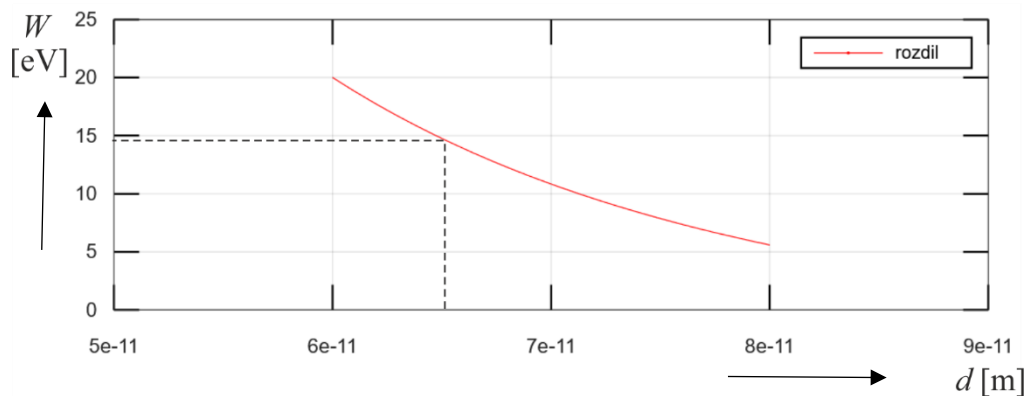
$$W_N = (3.9773 - 1.612) \cdot 10^{-18} \text{ J} = 2.3653 \cdot 10^{-18} \text{ J} = 14.76 \text{ eV} . \quad (110)$$

Experimentálně naměřená hodnota [7] ionizační energie je $W_i = 14.5341 \text{ eV}$.

Grafické vyjádření vazební energie modelu atomu dusíku je znázorněno na obr. 31 a 32.

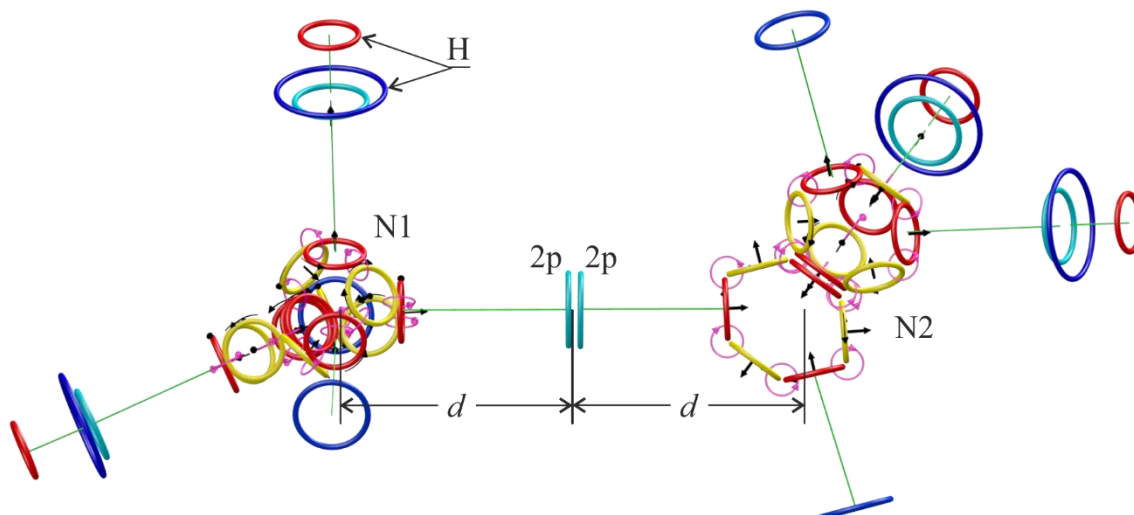


Obr. 31. Grafické vyjádření závislosti energií na vzdálenosti v RT modelu atomu dusíku N.



Obr. 32. Grafické vyjádření závislosti rozdílu energií na vzdálenosti v RT modelu atomu dusíku N.

9. Vazebná energie vazby atomů dusíku N-N



Obr. 33. Schematický model jednoduché kovalentní vazby mezi atomy dusíku molekuly hydrazinu N_2H_4 .

Parametry podle RT [1] [8] lze charakterizovat:

Velikost poloměru r_e a ekvivalentního elektrického proudu i_e vazebného elektronu $2p$ je:

$$\text{Poloměr elektronu } r_e = 1.653558 \cdot 10^{-11} \text{ m}, \quad (111)$$

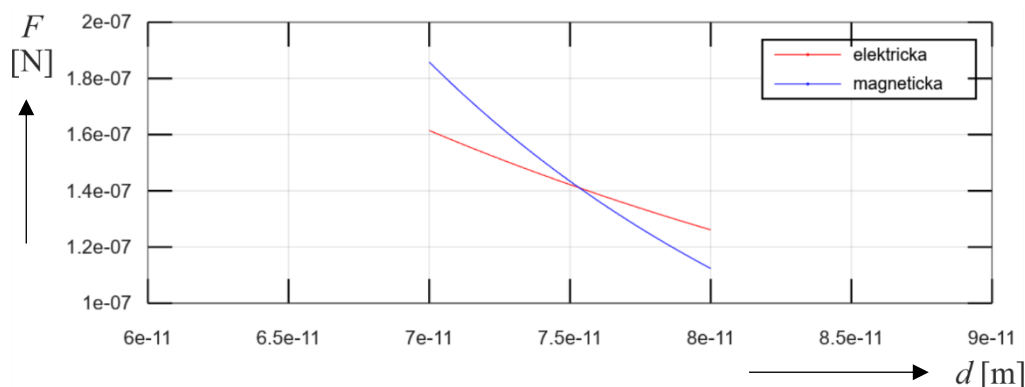
$$\text{Odpovídajícího elektrického proud elektronu } i_e = 4 \cdot 4.109726 \cdot 10^{-6} \text{ A}. \quad (112)$$

Vztah pro stav dynamických rovnovážných sil pro určení rovnovážného stavu vzdálenosti d vazby N-N je

$$4 \cdot F_{el12+-} - F_{pp++} = 4 \cdot \frac{5}{3} F_{mg12+-}. \quad (113)$$

Ze vztahů pro elektrickou a magnetickou sílu v ose prstenců protonů a elektronů (7) a (8) získáme z rovnice (113) levitační vzdálenost d_l :

$$d_l = 7.525 \cdot 10^{-11} \text{ m}. \quad (114)$$



Obr. 34. Grafické vyhodnocení rovnovážné vzdálenosti elektronu d pomocí EMG sil vazby N-N.

Vazební energii vazby atomů dusíku N-N vyjádříme jako rozdíl mezi energií vazby N-N a součtu energií dvou samostatných atomů dusíku N:

$$W_v = 2 \cdot W_N - W_{N-N} \quad (115)$$

Rovnice pro vyjádření dynamické rovnovážného stavu z energie vazby N-N má tvar:

$$W_{N-N} = 4 \cdot W_{el+-} + W_{pp++} - 4 \cdot \frac{5}{3} \cdot W_{mg+-} \quad (116)$$

Jednotlivé členy rovnice rozepíšeme ve tvaru do vztahů:

$$4 \cdot W_{el} = \frac{4 \cdot q_e^2 \cdot d^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot r^3}, \quad (117)$$

$$4 \cdot W_{el1+-} = \frac{4 \cdot (1.6 \cdot 10^{-19})^2}{2 \cdot 4 \cdot 3.14 \cdot 8.854 \cdot 10^{-12}} \cdot \frac{(7.525 \cdot 10^{-11})^2}{\left(\sqrt{(7.525 \cdot 10^{-11})^2 + (1.654 \cdot 10^{-11})^2}\right)^3} = 5.7004 \cdot 10^{-18} J, \quad (118)$$

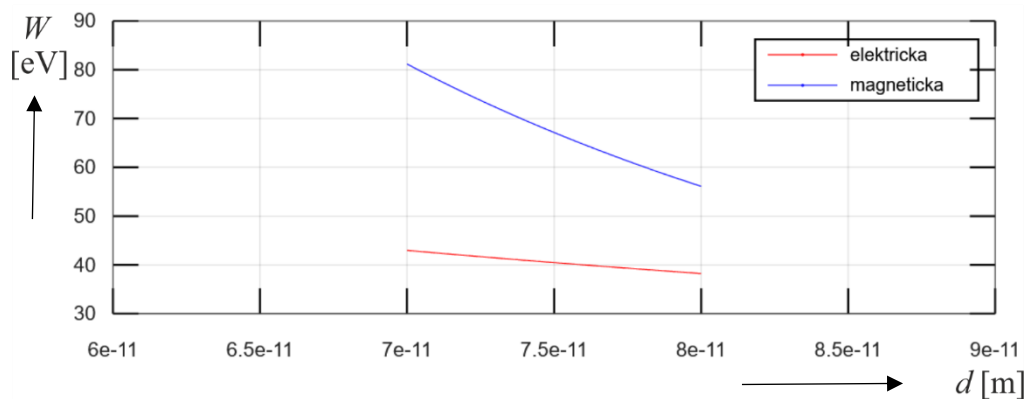
$$W_{pp++} = \frac{q_e^2}{2 \cdot 4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{2d}, \quad (119)$$

$$W_{el12--} = \frac{(1.6 \cdot 10^{-19})^2}{2 \cdot 4 \cdot 3.14 \cdot 8.854 \cdot 10^{-12}} \cdot \frac{1}{2 \cdot 7.525 \cdot 10^{-11}} = 0.7648 \cdot 10^{-18} J. \quad (120)$$

Energii magnetického pole vyčíslíme ze vztahu

$$4 \cdot \frac{5}{3} \cdot W_{mag} = \frac{5}{3} \cdot \frac{4 \cdot 4 \cdot i_{el} \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot 2 \cdot r_e \cdot d^2}{4\pi \cdot r^5}, \quad (121)$$

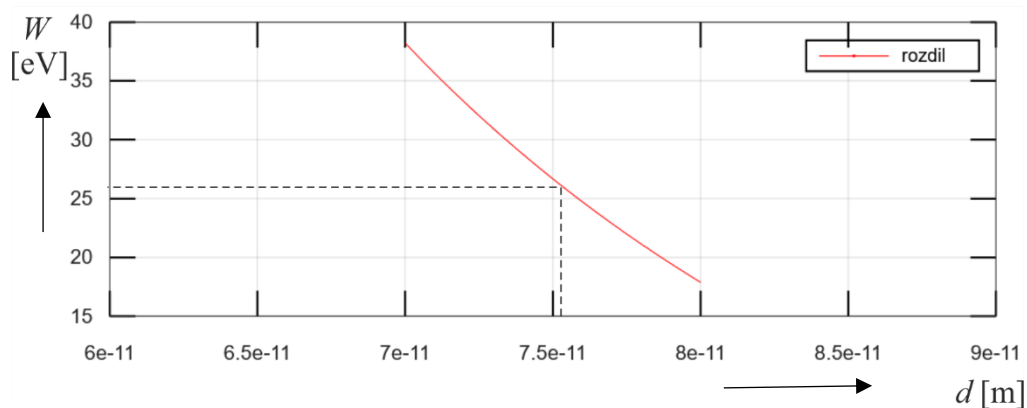
$$4 \cdot \frac{5}{3} \cdot W_{mag} = \frac{5}{3} \cdot \frac{4 \cdot 4 \cdot 4.11 \cdot 10^{-6} \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1.41 \cdot 10^{-26} \cdot 2 \cdot 1.654 \cdot 10^{-11} \cdot (7.525 \cdot 10^{-11})^2}{4\pi \cdot (7.7046 \cdot 10^{-11})^5} = 10.6625 \cdot 10^{-18} J. \quad (122)$$



Obr. 35. Grafické vyjádření průběhu funkcí energií v závislosti na vzdálenosti v RT modelu vazby N-N.

Výsledná energie vazby dusíku N-N podle výrazu (116) a obr. 36 je

$$W_{N-N} = (10.6625 - 5.7004 - 0.7648) \cdot 10^{-18} J = 4.1973 \cdot 10^{-18} J = 26.1953 eV. \quad (123)$$



Obr. 36. Grafické vyjádření průběhu funkce rozdílu energií v závislosti na vzdálenosti v RT modelu vazby N-N.

Vazební energii vazby dusíku N-N vyčíslíme jako

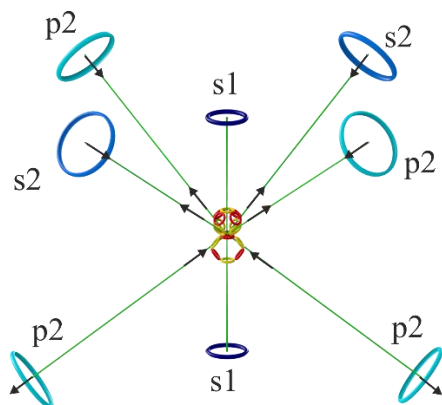
$$W_{vaz} = 2 \cdot W_N - W_{N-N}, \quad (124)$$

$$W_{vaz} = 2 \cdot 14.534 - 26.1953 = 2.8727 \text{ eV} = 277.17 \text{ kJ/mol}. \quad (125)$$

Experimentálně naměřená hodnota vazební energie pro vazbu hydrazinu $\text{H}_2\text{N}-\text{NH}_2$ je podle práce [6]

$$W_{vaz} = 2.8709 \text{ eV} = 277 \text{ kJ/mol}. \quad (126)$$

10. Ionizační energie atomu kyslíku O



Obr. 37. RT model atomu kyslíku O.

Experimentálně byla naměřená hodnota ionizační energie $W_i = 13.618055 \text{ eV}$ v práci [7].

Parametry RT modelu, jako je velikost poloměru a proudu vazebného elektronu $2p$ vyčíslené podle [1], [8]

$$r_e = 1.3236 \cdot 10^{-11} \text{ m}, \quad (127)$$

$$i_e = 3.845876 \cdot 10^{-6} \text{ A}. \quad (128)$$

Rovnovážný stav a tomu odpovídající vzdálenost d protonu a elektronu $2p$ u atomu kyslíku O na základní energetické úrovni je dána rovnováhou mezi jejich elektrickými (přitažlivou) a magnetickými (odpudivou) silami:

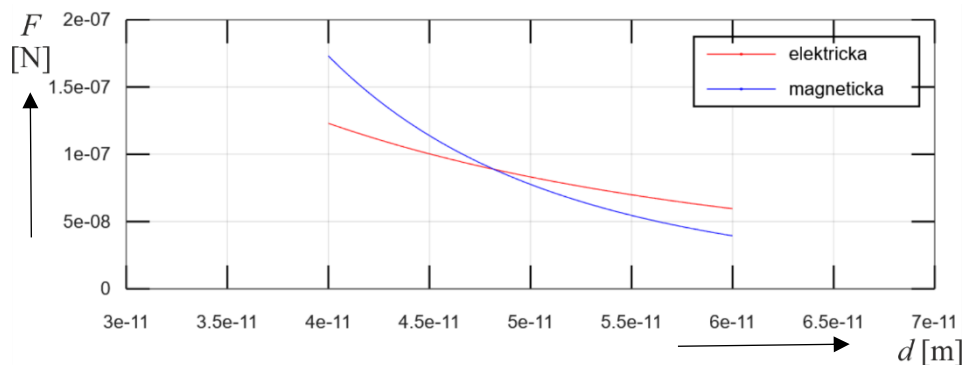
$$F_{el,z} = F_{mg,z} . \quad (129)$$

Podle vztahů (10-12) vyjádříme vzdálenost d_l jako:

$$d_l = \left(\frac{4 \cdot 3.846 \cdot 10^{-6} \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1.41 \cdot 10^{-26} \cdot 8.859 \cdot 10^{-12} \cdot 2 \cdot 1.3236 \cdot 10^{-11}}{(1.6 \cdot 10^{-19})^2} - (1.3236 \cdot 10^{-11})^2 \right)^{\frac{1}{2}} . \quad (130)$$

Vypočtené hodnoty pro rovnovážnou polohu (levitační) vzdálenost elektronu $2p$ od protonu atomu kyslíku O:

$$d_l = 4.816 \cdot 10^{-11} m . \quad (131)$$



Obr. 38. Grafické vyjádření rovnovážné vzdálenosti elektronu d pomocí rovnováhy EMG sil.

Výchozí vztah pro určení energie atomu kyslíku O má tvar

$$W_v = W_{el} - W_{mag} . \quad (132)$$

Energii elektrického pole W_{el} rozepíšeme

$$W_{el} = \frac{1}{2} \frac{q_e^2 \cdot d^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot r^3} , \quad (133)$$

$$W_{el} = \frac{(1.6 \cdot 10^{-19})^2 \cdot (4.816 \cdot 10^{-11})^2}{2 \cdot 4\pi \cdot 8.854 \cdot 10^{-12} \cdot \left(\sqrt{(4.816 \cdot 10^{-11})^2 + (1.3236 \cdot 10^{-11})^2} \right)^3} = 2.1409 \cdot 10^{-18} J . \quad (134)$$

Energii magnetického pole W_{mag} vyjádříme jako

$$W_{mag} = \frac{4 \cdot i_{el} \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot 2 \cdot r_e \cdot d^2}{4\pi \cdot r^5} , \quad (135)$$

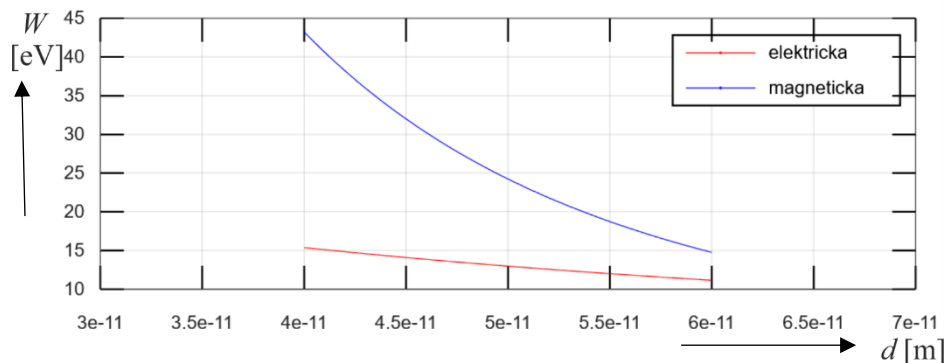
$$W_{mag} = \frac{4 \cdot 3.846 \cdot 10^{-6} \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1.41 \cdot 10^{-26} \cdot 2 \cdot 1.3236 \cdot 10^{-11} \cdot (4.816 \cdot 10^{-11})^2}{4\pi \cdot (4.995 \cdot 10^{-11})^5} = 4.2832 \cdot 10^{-18} J . \quad (136)$$

Výsledná energie atomu kyslíku O podle výrazu (132) je

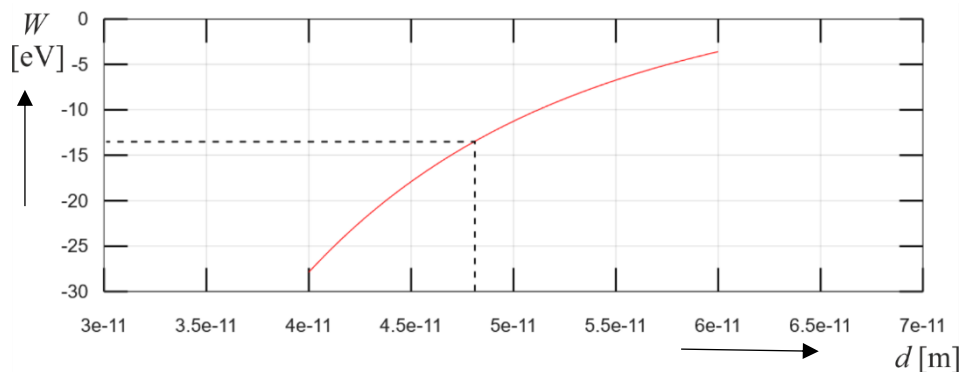
$$W_o = (4.2832 - 2.1409) \cdot 10^{-18} J = 2.1423 \cdot 10^{-18} J = 13.37 eV \quad (137)$$

Dříve experimentálně vyhodnocená hodnota ionizační energie je $W_i = 13.618 \text{ eV}$ jak bylo uvedeno v práci [7].

Grafické vyjádření vazební energie modelu atomu kyslíku O je znázorněno na obr. 40.



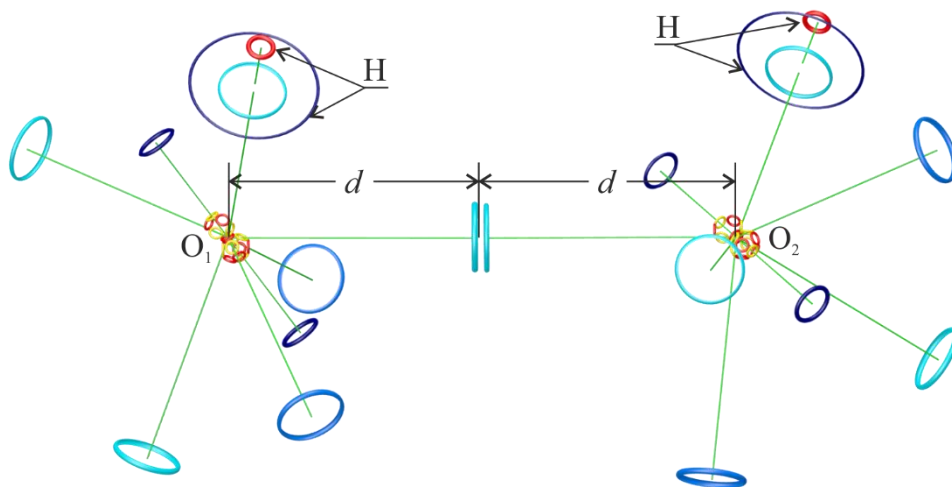
Obr. 39. Grafické vyjádření průběhu funkcí energií v závislosti na vzdálenosti v RT modelu atomu kyslíku O.



Obr. 40. Grafické vyjádření průběhu funkce rozdílu energií v závislosti na vzdálenosti v RT modelu atomu kyslíku O.

11. Vazebná energie vazby atomů kyslíku O-O

Pro ukázkou přístupu k vyhodnocení jednoduché vazby mezi atomy kyslíku O-O zvolíme molekulu peroxidu vodíku O₂H₂ (HO-OH).



Obr. 41. Model symbolického zobrazení jednoduché kovalentní vazby mezi atomy kyslíku u modelu molekuly peroxidu vodíku O₂H₂ podle RT.

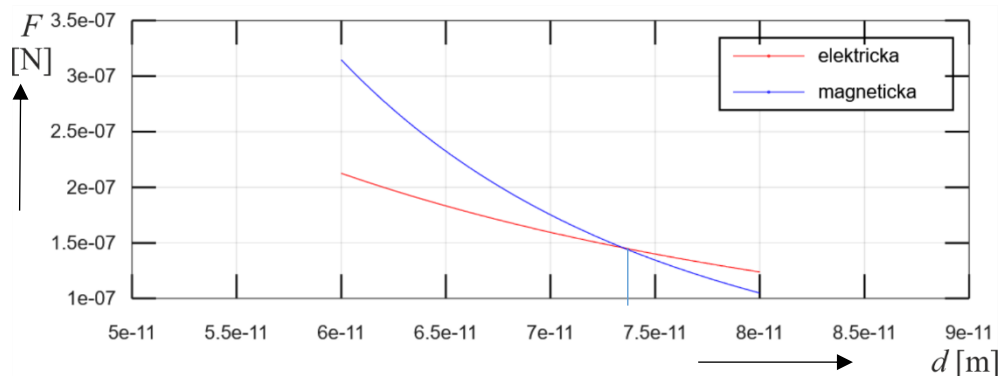
Velikost poloměru elektronů r_e podle RT můžeme vyčíslit z hodnoty ionizační energie prvního elektronu atomu kyslíku [7] a řešení podle práce [1]. Poloměry obou elektronů $2p$ pro model jednoduché kovalentní vazby atomů O-O budou $r_e = 1.3236 \cdot 10^{-11} m$.

Pro dynamickou rovnováhu sil ve vzdálenosti d vazby O-O platí tvar

$$4 \cdot F_{el12+-} - \frac{3}{2} \cdot F_{pp++} = 8 \cdot F_{mg12+-} . \quad (138)$$

Ze vztahů pro elektrickou a magnetickou sílu RT modelů v ose prstenců protonů a elektronů (7 a 9) vyčíslíme podle rovnice (138) levitační vzdálenost d_l , jak je naznačeno v obr. 42.

$$d_l = 7.375 \cdot 10^{-11} m \quad (139)$$



Obr. 42. Grafické vyjádření rovnovážné vzdálenosti elektronů d pro RT model z EMG sil.

Vazebnou energii atomů kyslíku O-O z modelu v obr.41 vyjádříme jako rozdíl mezi energií vazby O-O a součtu energií dvou samostatných atomů kyslíku O:

$$W_v = 2 \cdot W_O - W_{O-O}. \quad (140)$$

Rovnice dynamických rovnovážných sil pro určení energie vazby O-O má tvar:

$$W_{O-O} = 4 \cdot W_{el+-} + \frac{3}{4} W_{pp++} - 8 \cdot W_{mg+-}. \quad (141)$$

Jednotlivé členy rovnice vyčíslíme:

$$4 \cdot W_{el} = \frac{4 \cdot q_e^2 \cdot d^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot r^3}, \quad (142)$$

$$4 \cdot W_{el1+-} = \frac{4 \cdot (1.6 \cdot 10^{-19})^2}{4 \cdot 3.14 \cdot 8.854 \cdot 10^{-12}} \cdot \frac{(7.375 \cdot 10^{-11})^2}{\left(\sqrt{(7.375 \cdot 10^{-11})^2 + (1.3236 \cdot 10^{-11})^2}\right)^3} = 5.9529 \cdot 10^{-18} J, \quad (143)$$

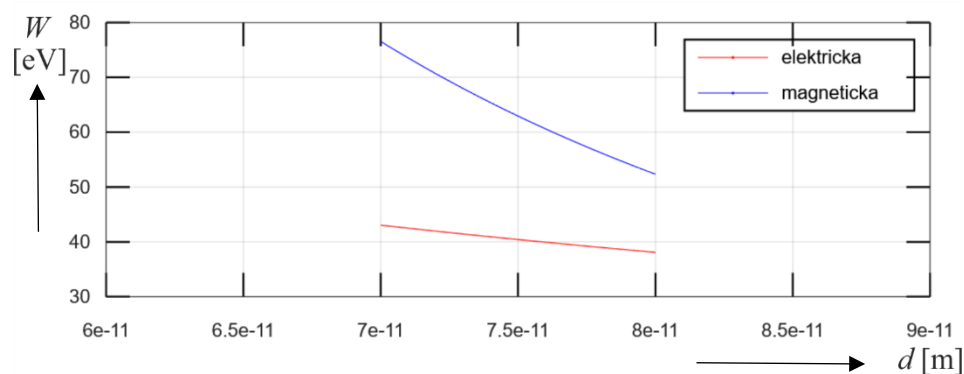
$$\frac{3}{4} W_{el--} = \frac{3}{4} \cdot \frac{q_e^2}{2 \cdot 4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{2d}, \quad (144)$$

$$\frac{3}{4} W_{el12--} = \frac{3}{4} \cdot \frac{(1.6 \cdot 10^{-19})^2}{2 \cdot 4 \cdot 3.14 \cdot 8.854 \cdot 10^{-12}} \cdot \frac{1}{2 \cdot 7.375 \cdot 10^{-11}} = 0.5853 \cdot 10^{-18} J. \quad (145)$$

Energii magnetického pole vyčíslíme

$$8 \cdot W_{mag} = \frac{8 \cdot 4 \cdot i_{el} \cdot \mu_0 \cdot \mu_p \cdot 2 \cdot r_e \cdot d^2}{4\pi \cdot r^5}, \quad (146)$$

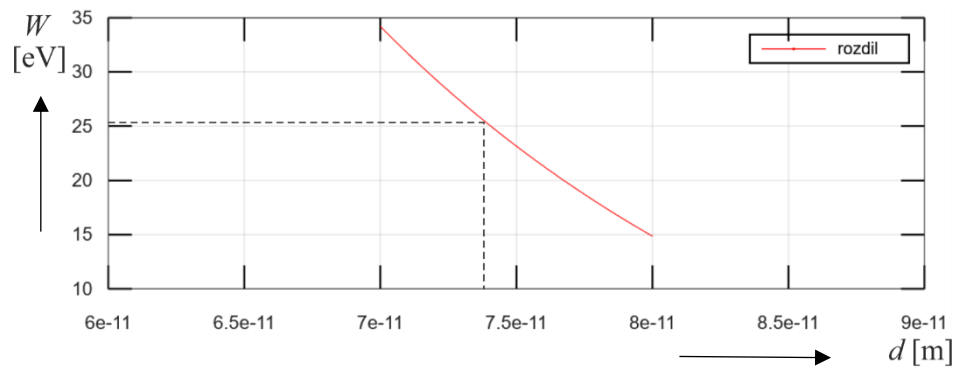
$$8 \cdot W_{mag} = \frac{8 \cdot 4 \cdot 3.846 \cdot 10^{-6} \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 1.41 \cdot 10^{-26} \cdot 2 \cdot 1.3236 \cdot 10^{-11} \cdot (7.375 \cdot 10^{-11})^2}{4\pi \cdot \left(\sqrt{(7.375 \cdot 10^{-11})^2 + (1.3236 \cdot 10^{-11})^2}\right)^5} = 10.5794 \cdot 10^{-18} J. \quad (147)$$



Obr. 43. Grafické vyjádření průběhu funkcí energií v závislosti na vzdálenosti v RT modelu u vazby O-O.

Výsledná energie vazby kyslíku O-O podle výrazu (141) je zobrazena na obr. 44.

$$W_{O-O} = (10.5794 - 5.9529 - 0.5853) \cdot 10^{-18} J = 4.0412 \cdot 10^{-18} J = 25.2211 eV \quad (148)$$



Obr. 44. Grafické vyjádření průběhu funkce rozdílu energií v závislosti na vzdálenosti v RT modelu u vazby O-O.

Vazebnou energii vazby kyslíku O-O určíme ze vztahu

$$W_{\text{vaz}} = 2 \cdot W_{\text{O}} - W_{\text{O-O}}, \quad (149)$$

$$W_{\text{vaz}} = 27.2362 - 25.2211 = 2.0151 \text{ eV} = 194.4 \text{ kJ/mol}. \quad (150)$$

Experimentálně naměřená hodnota vazebné energie molekuly peroxidu vodíku je uvedena v práci [6]

$$W_{\text{vaz}} = 195.8 \text{ kJ/mol}. \quad (151)$$

12. Závěr

Tento text a následující tabulka Tab.1 ukazují, že využitím prstencové struktury modelu [1], [8] elementárních částic, struktury jádra atomů a modelů molekul podle RT lze, za předpokladu využití základních zákonů a vlastností elektromagnetických polí, deterministicky a poměrně jednoduchým matematickým aparátem využít a určit poloměry atomů a jejich ionizační energii, vzdálenost atomů v jednoduché kovalentní homonukleární vazbě i jejich vazebnou energii.

Tabulka 1: Výpočet vzdálenosti d a srovnání vypočtené vazebné energie s experimentálně zjištěnou hodnotou.

Prvek, vazba	Vzdálenost d	Vazebná energie W_{vaz}			
		Vyčíslení podle RT		Experiment	
		[eV]	[kJ/mol]	[eV]	[kJ/mol]
	[10 ⁻¹¹ m]				
H	2.34	13.4512		13.5984 [7]	
C	5.3	11.2513		11.2603 [7]	
N	6.5	14,76		14.5341 [7]	
O	4.816	13.37		13.6181 [7]	
H ₂ ⁺	2 x 5.3	2.7677	267.04	2.77	267 [6]
H ₂ -para	2 x 3.7	4.506	434.76	4.519	435.8 [6]
H ₂ -ortho	2 x 3.75	7.58	731.43		
C-C	2 x 7.675	3.8744	373.82	3.9115	377.4 [6]
N-N	2 x 7,525	2.8727	277.17	2.8709	277 [6]
O-O	2 x 7.375	2.0151	194.4	2.0293	195.8 [6]

13. Poděkování

Poděkování patří panu prof. Ing. Pavlu Fialovi, PhD., za metodické vedení při zpracování textů.

Výzkum byl prováděn na základě dílčích cílů grantu BD 2020-2020 FEKT-S-20-6360. Analýzy a zázemí nezbytných výzkumných aktivit bylo podpořeno infrastrukturou centra excellence SIX UTEE.

14. Literatura

- [1] Werner, P. (2017), *Základy modelování prstencové struktury elementárních částic*. VUT ISBN 978-80-214-5620-4. <https://www.ringtheory.eu>
- [2] Daniš, S., (2019), *Atomová fyzika a elektronová struktura látek*. MFF UK Praha.
- [3] NIST Atomic Spectra Database Lines Form: <https://www.nist.gov/pml/atomic-spectra-database>
- [4] P. Loubeyre, M. Jean-Louis, and I. F. Silvera, *Phys. Rev. B* **43**, 10191 (1991).
- [5] Klíma, J., Velický, B., (2018), *Kvantová mechanika II*. Charles University in Prague, Karolinum Press, 1. 2. 2018.
- [6] Luo, Yu-Ran, (2007), *Comprehensive Handbook of Chemical Bond Energies*, Hoboken, NJ : CRC Press, 2007. - 1687 p.
- [7] NIST Atomic Spectra Database Ionization Energies Form: <https://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/ionEnergy.html>
- [8] Werner, P. (2019), *Aplikace modelování prstencové struktury elementárních částic*. VUT ISBN 978-80-87342-21-3. <https://www.ringtheory.eu>
- [9] Stewart R.B., Roder H. M., (1964), *Properties of Normal and Parahydrogen*. p. 379-404 in *Technology and Uses of Liquid Hydrogen*, Pergamon Press, New York (1964)
- [10] B. Meier, K. Kouril, C. Bengs, H. Kourilová, T. J. Barker, S. J. Elliott, S. Alom, R. J. Whitby and M. H. Levitt, (2018), *Spin-isomer conversion of water at room temperature, and quantum-rotor-induced nuclear polarization, in the water-endofullerene $H_2O@C_{60}$* , arXiv:1802.00676v1 [physics.chem-ph] 2 Feb 2018.
- [11] <https://www.ringtheory.eu>

Autor Pavel Werner
UTEF FEKT VUT v Brně

Název Modelování prstencové struktury elementárních částic hmoty
Vazebná energie jednoduchých vazeb homonukleárních molekul H, C, N, O

Rok vydání 2021

Náklad 100

Tisk NOVAPRESS s.r.o.
nám. Republiky 15
614 00 Brno

ISBN 978-80-87342-25-1



9788087342251