

А. Ю. СИДОРЕНКО, канд. техн. наук, доц. НТУ «ХПИ»;
А. И. ПОТАПЕНКО, студентка НТУ «ХПИ»

ПРИМЕНЕНИЕ ВОКСЕЛЬНОЙ МОДЕЛИ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ЭЛЕКТРОННОГО ОБЛАКА

Продемонстрировано строение 3D-модели электронного облака атома водорода в разрезе и в полноценном виде с помощью воксельной модели. Построены волновые функции.

Ключевые слова: волновая функция, воксельная модель, электронное облако, атом водорода, 3D-моделирование.

Введение. Наглядная модель, отражающая функцию распределения плотности вероятностей обнаружения электрона в атоме или молекуле, является электронным облаком. В первое время после появления знаменитого волнового уравнения Э. Шредингера предпринималось много попыток выяснить возможный физический смысл волновой функции [1, 2]. М. Борн показал [3], что эти волны следует толковать статистически с точки зрения теории вероятности, а сами волны описывают вероятность обнаружения электрона в той или иной точке конфигурационного пространства.

В настоящее время волновые свойства электронов широко используются при исследовании строения различных веществ. Чем с большей точностью определяют положение электрона в пространстве, тем с меньшей точностью можно определить его скорость. И наоборот, чем с большей точностью определяют скорость электрона (абсолютную величину и направление), тем с меньшей точностью можно определить его положение в пространстве. Это утверждение называется «принцип неопределенности» [3]. Действительно, если в какой-то момент точно известно положение электрона, то ничего не известно о его скорости и в следующий момент времени можно обнаружить электрон в какой-то другой точке атома, правда, с разной вероятностью. Вероятность обнаружения электрона в какой-либо точке электронной оболочки атома показывает: насколько часто «он там бывает».

В качестве наглядной модели состояния электрона в атоме в химии принят образ облака, плотность соответствующих участков которого пропорциональна вероятности обнаружения электрона [4]. Электронное облако рисуется наиболее плотным в областях наиболее вероятного обнаружения электрона (рис. 1). Из-за постоянного перемещения электрона вокруг атома создается туманность, напоминающее облако, поэтому определить положение электрона крайне затруднительно.

Для исследования особенностей поведения электрона можно воспользоваться моделью поведения электрона в атоме, в которой используется представление об электронном облаке. Но часто на практике

встречаются атомы, в которых электронные облака расположены многослойно. Это затрудняет моделирование в 3D-пространстве. Поэтому представляет интерес разработать алгоритм, который будет позволять проникать в глубину электронного облака. Это обеспечит более подробное изучение строения электронного облака атома. Итак, исследование поведения электрона в настоящее время является актуальной задачей.

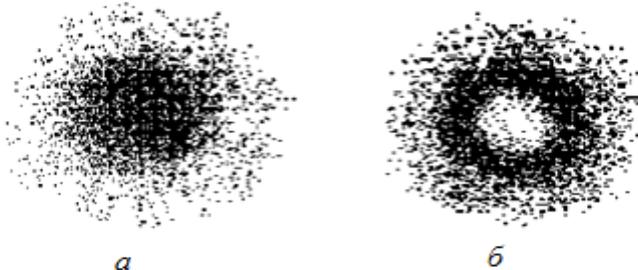


Рис. 1 – Электронное облако как набор моментальных «фотографии» электрона:
а – вид со стороны, *б* – вид в сечении

Существуют модели, которые пытаются передать состояние электронного облака, но эти модели встречаются в литературе и несут показательный характер. Для моделирования электронного облака атома водорода в разрезе и в полноценном виде в работе использовалась воксельная модель. С помощью этой модели упрощается изучение самого электронного облака, т.к. его можно представить в разрезе и покрутится вокруг него.

Целью данной статьи является построение 3D-модели электронного облака атома водорода в разрезе и в полноценном виде с помощью воксельной модели.

Основные теоретические сведения. В данной статье рассматривается атом водорода, т.к. именно для него существуют формулы описания его состояния, с помощью которых можно найти вероятность расположения электрона. Вследствие этого, уравнение Шредингера упрощается и используется, так называемая, волновая функция (1).

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{n,l} \Theta_{l,m_l} \Phi_{m_l} = [e^{-nr} r^l L_{n,l}(r)] [P_{l,m_l}(\cos \theta)] A e^{im_l \varphi}, \quad (1)$$

где $L_{n,l}(r)$ – присоединенные полиномы Лагерра, P_{l,m_l} – полиномы Лежандра.

Решая уравнение (1), можно найти состояние электрона не только в атоме, но и в молекуле. Эти состояния называются орбиталями. В соответствии с уравнением (1) каждая атомная орбиталь однозначно характеризуется набором из трех целых чисел, называемых квантовыми числами. Эти числа получили особые названия и обозначения:

- главное квантовое число – n ,

- орбитальное квантовое число – l
- магнитное квантовое число – m .

Для исследования электронного облака атома водорода рассмотрим основные особенности поведения электронов в атоме. Энергия свободного электрона, так же как и энергия тела, может изменяться непрерывно. Но энергия связанного электрона, в частности электрона в атоме, может принимать только вполне определенные значения. Таким образом, электрон в атоме может находиться только во вполне определенных состояниях. Так как не все состояния электрона в атоме возможны, то и сочетание этих чисел могут быть, отнюдь, не любые, а только те, которые удовлетворяют следующим трем правилам:

- Главное квантовое число n может быть любым положительным целочисленным числом: $n = 1, 2, 3, \dots$
- Орбитальное квантовое число l может принимать любые целые значения от нуля до $n-1$: $l = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$.
- Магнитное квантовое число m может принимать любые целые значения от $-l$ до $+l$, включая ноль: $m = -l, \dots, -1, 0, 1, \dots, +l$.

При переходе электрона из одного состояния в другое энергия поглощается или выделяется порциями – квантами энергии. Поэтому первая особенность поведения электрона часто называется принципом квантования его энергии [1]. Электрон в одних случаях проявляет свойства частицы вещества, а в других – волновые свойства. Волновые свойства электрона проявляются, например, при прохождении потока электронов через тонкую кристаллическую пленку.

Моделирование электронного облака атома водорода. Для отображения электронного облака в данной статье применялась воксельная модель. Модель представлена как трехмерный массив, в котором каждая ячейка описывает один воксель [5, 6].

Идея воксельной графики базируется на понятии трёхмерного пикселя – кубического единичного объема, из которого составлено всё отображаемое пространство, при этом воксели могут быть прозрачными, залитыми одним цветом или градиентом цвета по цветам вершин куба.

Рассматривать воксельную графику без специально разработанных алгоритмов оптимизации использования памяти, нет смысла, потому как объем воксельного пространства представленный всеми вокселями столь огромный, что для небольшой сцены требуются гигабайты памяти. Например, при дискретности пространства 1см и размера сцены $100 \times 100 \times 100$, количество вертексов составляет $10000 \times 10000 \times 10000 = 10^{12}$ шт., если для одного вокселя требуется хранить только один цвет, то есть 24бита, то получается, что такая сцена займёт $3 \cdot 10^{12}$ байт (373Гбайт).

Для возможности использования модели воксельной графики было разработано множество алгоритмов, которые нашли большое применение для работы с двухмерной графикой [6]. Основа этих алгоритмов – использование древовидных структур, позволяющих описывать состояние не для одного конкретно вокселя, а для некоторой их совокупности. В данном случае в основе лежит регулярная трёхмерная сетка. Первый узел дерева – корень, является кубом, содержащим весь объект целиком. Каждый узел имеет 8 потомков или не имеет никаких потомков. Эти 8 потомков формируют куб $2 \times 2 \times 2$ (см. рис. 2). При таком подходе, область пространства, имеющая одинаковые характеристики всех вокселей, из которых она состоит, может быть описана одним большим вокселем, уменьшая, таким образом, объём необходимой памяти для хранения воксельного пространства.

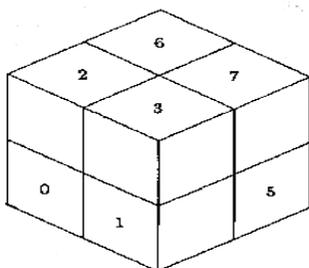


Рис. 2 – Рекурсивное разбиение пространства на восемь потомков

В данной статье для 3D-моделирования электронного облака атома водорода использовался следующий алгоритм:

- Вычисление значения волновой функции при заданных параметрах: n, l, m .
- Расчет вероятности нахождения электрона в электронном облаке.
- Моделирование, с учетом вводимых параметров, электронного облака атома водорода с помощью воксельной модели.
- Закрашивание всего пространства электронного облака с учетом вероятности нахождения электрона: чем ближе вероятность к нулю, тем темнее цвет.

Основные результаты. На рис. 3 изображена воксельная модель электронного облака атома водорода с параметрами: $n=5, m=4, l=0$ в полном размере.

Из рис. 3 можно увидеть, как модель разбита на небольшие кубики – воксели. На этой модели белым цветом обозначается наибольшая вероятность нахождения электрона в атоме, а темным – наименьшая. Вероятность нахождения электрона мала, так как белый цвет тусклый, а не яркий. Из рис. 3 видно, что вероятность нахождения электрона находится на краях электронного облака.

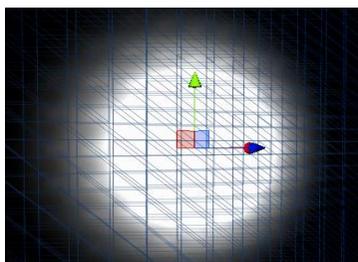


Рис. 3 – Воксельная модель электронного облака с параметрами: $n = 5$, $m = 4$, $l = 0$

На рис. 4 изображена волновая функция нахождения электрона в атоме водорода с параметрами $n = 1$, $m = 0$, $l = 0$.

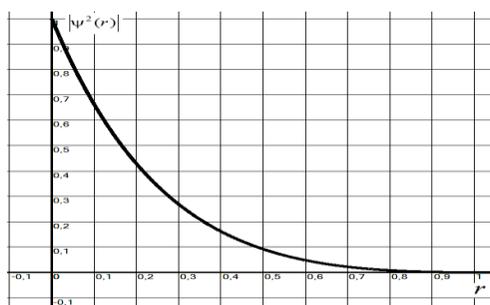


Рис. 4 – Волновая функция нахождения электрона в атоме с параметрами: $n = 1$, $m = 0$, $l = 0$

Из рис. 4 можно сделать вывод, что чем ближе к центру облака, тем вероятность нахождения электрона больше.

Моделирование электронного облака атома водорода в сечении и в полноценном размере с теми же параметрами изображено на рис. 5.

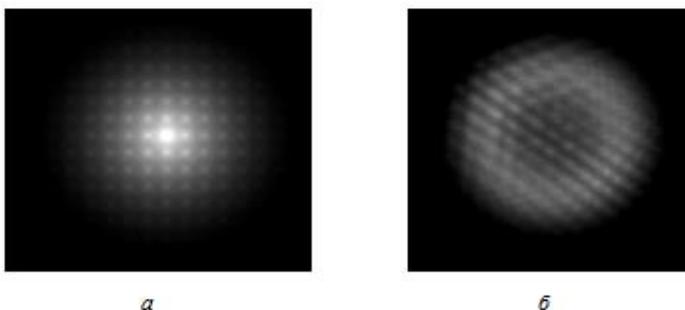


Рис. 5 – Модель электронного облака с параметрами: $n = 1$, $m = 0$, $l = 0$
 a – в сечении, b – в полноценном размере

Анализируя рис. 5 можно провести аналогию с рис. 4. Максимум волновой функции находится при $r=0$, значит, в соответствии с алгоритмом, расстояние между центром облака и начальным радиусом закрашивается белым. Чем меньше вероятность нахождения электрона, тем темнее закрашивается клетка.

На рис. 6 изображена волновая функция нахождения электрона в атоме водорода с параметрами $n = 5$, $m = 0$, $l = 1$.

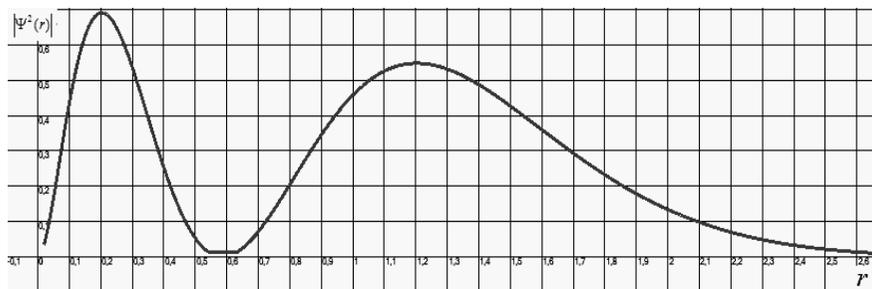


Рис. 6 – Волновая функция нахождения электрона в атоме с параметрами: $n = 5$, $m = 0$, $l = 1$

На рис. 6 можно увидеть два максимума волновой функции для нахождения электрона в атоме водорода. Поскольку орбитальное квантовое число не равно нулю, то на графике наблюдается несколько максимумов.

На рис. 7 изображена 3D модель атома водорода с параметрами: $n = 5$, $m = 0$, $l = 1$. Анализируя рис. 7, можно провести аналогию с рис. 6. Поскольку на рис. 6 наблюдается два максимума волновой функции, следовательно, согласно используемому алгоритму, электронное облако водорода будет иметь две области, закрашенные белым цветом. Чем меньше вероятность нахождения электрона, тем темнее цветом закрашивается ячейка.

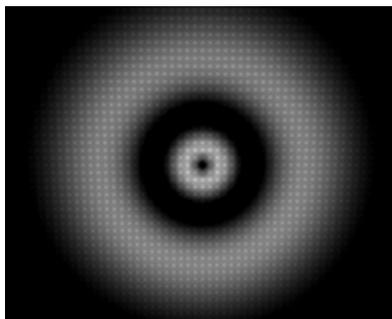


Рис. 7 – Модель электронного облака с параметрами: $n = 5$, $m = 0$, $l = 1$

Главное квантовое число характеризует энергию электронов, занимающих данный энергетический уровень. Оно является первым в ряду квантовых чисел, который включает в себя главное, орбитальное и магнитное квантовые числа, а также спин. В данной работе используется только главное квантовое число n , которое равно номеру периода элемента. При увеличении главного квантового числа возрастает энергия электрона. Также волновая функция становится более пологой, когда уменьшается главное квантовое число, значит, площадь электронного облака уменьшается.

Выводы. В данной работе была рассмотрена реализация отображения в 3D-пространстве модели электронного облака атома водорода с одним слоем с помощью воксельной модели. Данные 3D-модели позволяют определить точное положение электрона.

Данная статья позволяет наглядно посмотреть поведение электрона без всяких раздражителей в 3D-пространстве. Модель электронного облака представляется в разрезе, что позволяет подробно увидеть поведение электрона в самом облаке, и в полноценном виде, благодаря этому видно само электронное облако атома водорода.

Список литературы: 1. *Акоста В.* Основы современной физики / *В. Акоста, К. Кован, Б. Грэм.* Пер. с англ. *В. В. Толмачева, В. Ф. Трифонова* / ред. *А. Н. Матвеева.* – М. : Просвещение, 1981. – 495 с. 2. *Сивухин Д. В.* Спектр водорода / *Д. В. Сивухин* // Общий курс физики. Т V. Атомная и ядерная физика. Часть 1: Атомная физика. – М. : Наука, 1986. – 416 с. 3. Физическая энциклопедия / ред. *А. М. Прохорова.* – М. : Большая российская энциклопедия, 1994. 4. *С. Т. Жуков.* Химия. 8–9 класс / *С. Т. Жуков.* – М. : , 2002. 5. *Чеканов Д.* Рендеринг с помощью вокселей: новый уровень графики в играх [Электронный ресурс] // THG. URL: http://www.thg.ru/graphic/voxel_ray_casting/ (Дата обращения: 30.10.2009) 6. *Ягель Р.* Рендеринг объемов в реальном времени // Открытые системы. 1996. № 5. URL: <http://www.osp.ru/os/1996/05/178971>. (Дата обращения: 18.02.2012).

Надійшла до редколегії 18.11.2013

УДК 51-72

Применение воксельной модели при моделировании электронного облака / А. Ю. Сидоренко, А. И. Потапенко // Вісник НТУ «ХПІ». Серія: Системний аналіз, управління та інформаційні технології. – Х. : НТУ «ХПІ», 2013. – № 62 (1035). – С. 136–142. – Бібліогр.: 6 назв.

Продемонстрована будова 3D-моделі електронної хмари атома водню в розрізі і в повноцінному вигляді за допомогою воксельної моделі. Побудовані хвилеві функції.

Ключові слова: хвилева функція, воксельна модель, електронна хмара, атом водню, 3D-моделювання.

The structure of 3D model of electronic cloud of atom of hydrogen is shown in a cut and in a valuable kind by means of voxel model. Wave functions are built.

Keywords: wave function, voxel model, electronic cloud, atom of hydrogen, 3D model.