

16+

ПРОСТРАНСТВЕННО- ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

МОНОГРАФИЯ

Научно-образовательный центр химической физики
Уральского отделения Российской академии наук
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Ижевская государственная сельскохозяйственная академия»

Г.А. КОРАБЛЕВ

**ПРОСТРАНСТВЕННО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ
ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ**

монография

2017

УДК 539.2
ББК 22.37
К 66

Рецензенты:

В.И. Кодолов
Ижевский государственный технический университет
имени М.Т. Калашникова,
заведующий кафедрой химии и химических технологий
доктор химических наук, профессор

С.Д. Соловьев
Доктор технических наук, профессор
кафедры «Машины технология обработки металлов
давлением и сварочное производство»
Ижевского государственного технического
университета имени М.Т. Калашникова (г. Ижевск)

Автор: Кораблев Г.А.

Пространственно-энергетические взаимодействия [Электронный ресурс]: монография. – Эл. изд. - Электрон. текстовые дан. (1 файл pdf: 104 с.). – Кораблев Г.А.. 2017. – Режим доступа: http://scipro.ru/conf/monograph_Korablyev.pdf. Сист. требования: Adobe Reader; экран 10'.

ISBN 978-1-370-91319-0

В книге излагается методология оценки процессов фазообразования в системах, основанная на представлении о пространственно-энергетическом параметре (Р-параметре). Такой критерий вводится путем анализа ряда физических и химических закономерностей, в том числе – уравнения Лагранжа и учета важнейших атомных характеристик. Дано конкретное применение такого подхода для оценки степени и направления структурных взаимодействий, в многочисленных простых и сложных системах, в том числе – в молекулярных. В частности рассчитана энергетика фотосинтеза и свободных радикалов, дается расчет интенсивности фундаментальных взаимодействий, предлагается метод оценки корпускулярно-волнового механизма через направление градиента потенциала систем.

Монография содержит большой методологический, расчетный и информативный материал, который можно использовать в практическом материаловедении при теоретических и экспериментальных исследованиях структурных взаимодействий в конденсированных системах.

© Коллектив авторов, 2017

© НОО Профессиональная наука, 2017

Оглавление

ПРЕДИСЛОВИЕ	7
ВВЕДЕНИЕ	8
БЛАГОДАРНОСТИ	10
ГЛАВА 1. РАВНОВЕСНО-ОБМЕННЫЕ ПРОСТРАНСТВЕННО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ.....	11
Введение	11
1.1. О двух принципах сложения энергетических характеристик взаимодействий	12
1.2. Пространственно-энергетический параметр (Р-параметр)	15
1.3. Волновое уравнение Р-параметра	16
1.4. Аналоговые сопоставления функций Лагранжа и Гамильтона с пространственно-энергетическим параметром	17
1.5. Структурные обменные пространственно-энергетические взаимодействия	19
Выводы	20
ГЛАВА 2. S-ЛИНИИ И ЭНТРОПИЯ В ТЕХНИКЕ, ЭКОНОМИКЕ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЯХ	22
Введение	22
2.1. Энтропийная номограмма степени пространственно-энергетических взаимодействий	23
2.2. Энтропийная номограмма поверхностно-диффузионных процессов	24
2.3. Номограммы биофизических процессов	24
2.4. Кривая Лоренца пространственно-временной зависимости.....	27
2.5. Энтропийные критерии в бизнесе	27
2.6. S-кривые («линии жизни»)	28
2.7. Энтропийные переходы и самоорганизация в физиологических системах	29
Заключение.....	31
ГЛАВА 3. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ КРИТЕРИИ КОНФОРМАЦИОННЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В БИОСИСТЕМАХ	32
Введение	32

3.1. Формирование полипептидной цепи	32
3.2. О конформациях гексагональных структур в клеточных системах	36
3.3. О конформации фрагментов молекул ДНК	38
Вывод	40
ГЛАВА 4. ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ	41
4.1. Интенсивности фундаментальных взаимодействий	41
4.2. Винтовая модель кварков	44
4.3. Расчёт энергии свободного нуклида (на примере нейтрона).....	45
Выводы	46
ГЛАВА 5. ПРОБЛЕМЫ КОРПУСКУЛЯРНО-ВОЛНОВОГО ДУАЛИЗМА.....	49
Введение	49
5.1. Акт квантового действия	49
5.2. Угол электронной намотки	51
Выводы	53
ГЛАВА 6. РАСЧЕТЫ СРОДСТВА К ЭЛЕКТРОНУ ЧЕРЕЗ ЗНАЧЕНИЯ ПРОСТРАНСТВЕННО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ.....	55
Введение	55
6.1. Расчёты и сопоставления	55
Выводы	57
ГЛАВА 7. СРОДСТВО К ЭЛЕКТРОНУ И ЭЛЕКТРООТРИЦАТЕЛЬНОСТЬ КАК ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ КРИТЕРИИ ФОТОЭФФЕКТА	64
Введение	64
7.1. Сродство к электрону как энергетический критерий валентной зоны при фотоэффекте	64
7.2. Электроотрицательность как энергетический критерий зоны проводимости при фотоэффекте.....	66
Выводы	69
ГЛАВА 8. ПРОСТРАНСТВЕННО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ФОТОСИНТЕЗА.....	73
Введение	73
8.1. Фотосинтез. Начальная стадия	75
8.2. Фосфорилирование	76

8.3.Ассимиляция CO ₂	81
Вывод.....	84
ГЛАВА 9. НАНОСТРУКТУРНЫЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ УГЛЕВОДОРОДНОГО ВОДОСОДЕРЖАЩЕГО ТОПЛИВА	85
Введение	85
9.1. Образование высокоэнергетических связей в топливной смеси	85
9.2. Методика исследований.....	86
9.3. Расчеты и сопоставления	87
Выводы	90
ГЛАВА 10. О ДИНАМИКЕ ВРАЩАТЕЛЬНОГО ДВИЖЕНИЯ В МАКРО- И В МИКРОСИСТЕМАХ	91
Введение	91
10.1. Исходные критерии.....	91
10.2. Уравнение зависимости вращательного и орбитального движения планет	92
10.3. Углы вращения планет.....	95
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	98
БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК	100

ПРЕДИСЛОВИЕ

Данная работа посвящена применению пространственно-энергетических представлений для оценки равновесно-обменных структурных процессов. Для этого используется комплексная энергетическая характеристика свободных атомов и молекул – Р-параметр.

При этом вероятность конформационных взаимодействий оценивалась через относительную разность Р-параметров. Такой подход дает возможность определять направление конформационных процессов и степень формирования стабильных структур даже для сравнительно сложных систем.

Трудности прогноза свойств таких сложных структур обусловлены в основном отсутствием реалистических моделей растворов. До настоящего времени практически единственным критерием адекватности модели служит сравнение с опытом. В то же время становится все более ясной важность роли электронной подсистемы в растворах. Здесь возникает проблема выбора параметров, характеризующих электронную подсистему.

Г.А. Кораблевым разработан и применен пространственно-энергетический параметр (Р-параметр), характеризующий электронную подсистему и определяющий не только энергию электрона, но и область локализации его волновой функции.

Книга содержит методы расчета и многочисленные применения Р-параметра к прогнозу различных характеристик структурных взаимодействий.

Интересные результаты приводятся по статистическому гексагональному распределению клеточных структур, как основой их стабильного формирования. Приведены примеры, подтверждающие исходные принципы данной модели, в том числе – условие примерного равенства эффективных энергий взаимодействий по всем линиям связи.

Работа имеет значительный научный интерес и по другим направлениям пространственно-энергетических взаимодействий, в особенности при анализе корпускулярно-волнового механизма в этих процессах. Однако некоторые проблемные вопросы в работе приведены в сокращенном варианте, что может являться материалом для дальнейших исследований в этой области. В целом данная монография может быть полезной для многих исследователей работающих в области материаловедения и в физико-химии и рекомендуется для опубликования в научных изданиях.

Директор Института прикладной механики Уральского
Отделения Российской Академии Наук, профессор, доктор
технических наук

В.Б. Деменьтьев

Доктор технических наук, старший научный сотрудник
Института прикладной механики Уральского отделения
Российской Академии Наук

С.Д. Соловьев

ВВЕДЕНИЕ

Решение основной проблемы материаловедения – получение материалов с заранее заданными свойствами – может быть сделано лишь на основе фундаментальных принципов, определяющих совокупность физико-химических критериев данного вещества. Несомненно, таким базисом являются квантово-механические представления физики и химии твердого тела. С другой стороны, можно констатировать, что к настоящему времени накоплен значительный объем экспериментального материала по физико-химическим свойствам многих соединений. Хотя и имеется ряд полуэмпирических моделей по обработке этой информации, тем не менее, еще отсутствует теоретическое обоснование направления научных поисков для решения таких проблем физико-химии. Да и сами такие поиски часто ведутся интуитивно, методом "проб и ошибок". Одной из возможных причин такого несоответствия, по нашему мнению, является большая трудность проведения численных расчетов с применением сложного квантово-механического аппарата для решения конкретных задач фазообразования и структурных взаимодействий. Аналогичные трудности возникают и при практическом использовании (в тех же целях) статистической модели атома Томаса-Ферми-Дирака.

Поэтому для получения зависимости между энергетическими параметрами свободных атомов и степенью структурных взаимодействий в простых и сложных системах классическая физика и квантовая механика широко используют кулоновские взаимодействия и их разновидности.

Но биологические и многие кластерные системы в структурной основе электронейтральные. И для них основное значение имеют равновесно-обменные пространственно-энергетические взаимодействия не кулоновского типа.

Идут структурные взаимодействия суммарных электронных плотностей валентных орбиталей соответствующих конформационных центров - процессы равновесного перетекания электронных плотностей за счет перекрывания их волновых функций.

В данной работе развит метод, основанный на применении нового пространственно-энергетического критерия (Р-параметра), являющегося производной и полуколичественной характеристикой электронной плотности в атоме. Этот критерий найден и обоснован, исходя из суммирования обратных величин составляющих энергий разноименно заряженных систем. Р-параметр, рассчитанный по этим правилам для атома, приобретает физический смысл эффективной энергии валентных электронов в атоме, т.е. энергии, ответственной за межатомные взаимодействия.

Поскольку Р-параметр включает в себя основные факторы, характеризующие состояние валентных электронов в атоме, то с его помощью удастся скоррелировать, а, следовательно, и предсказать многие физико-химические свойства соединений и установить энергетические критерии структурных взаимодействий, взаимной растворимости систем, образования стабильных фаз и т.д.

Такой подход позволяет с единых представлений анализировать перераспределение энергии в разнообразных по своей природе процессах. Книга состоит из десяти глав. В первой главе вводится представление о пространственно-энергетическом параметре (Р-параметре), дается его волновое уравнение и устанавливается прямая зависимость от волновой функции.

Во второй главе аналогично представлениям термодинамики о статистической энтропии использовано понятие энтропии для пространственно-энергетических взаимодействий. Получена номограмма для оценки энтропии различных процессов. Обсуждается многоплановость проявлений энтропии, в том числе – в биофизических процессах, в экономике и в технических системах.

В третьей главе данная методика используется для оценки энергетических критериев конформационных взаимодействий в биоструктурах. Показана рациональность применения ее при исследовании процессов конформации полипептидных цепей и фрагментов молекул ДНК.

В четвертой главе на основе первичных принципов дается оценка интенсивности фундаментальных взаимодействий. Приведены конкретные примеры расчётов электромагнитных, сильных, слабых и гравитационных взаимодействий.

В пятой главе трансформируя два правила сложения энергий подсистем на корпускулярно-волновой дуализм сделано предположение, что корпускулярные взаимодействия имеют место по градиенту потенциала (принцип сложения обратных величин энергий), а волновые процессы идут против градиента потенциала (принцип алгебраического сложения энергий).

В шестой главе показана возможность использования Р-параметра для оценки сродства к электрону у свободных атомов и для бинарных систем.

В седьмой главе получена корреляционная зависимость сродства к электрону и электроотрицательности от энергетических критериев фотоэффекта.

В восьмой главе дано применение такого подхода к оценке энергетики основных этапов фотосинтеза.

В девятой главе проведены согласующиеся расчеты энергии связи в водных наноструктурах в процессе приготовления углеводородного водосодержащего топлива.

В десятой главе получены уравнения зависимости вращательного и орбитального движений планет, рассчитаны углы их вращения. Установлены волновые принципы прямого и обратного вращения планет.

Простота и многоплановость предложенной методологии позволяют надеяться на практическое и теоретическое применение ее для решения насущных задач физико-химии и материаловедения.

БЛАГОДАРНОСТИ

Автор благодарит за участие и консультацию в обсуждениях первых трех разделов монографии профессора Кодолова В.И. (Ижевский государственный технический университет), профессора Заикова Г.Е. (ИБХФ РАН), профессора Васильева Ю.Г., профессора Максимова П.Л., профессора Осипова А.К., доцента Хохрякова Н.В., доцента Стрелькова С.М. (Ижевская государственная сельскохозяйственная академия), а также благодарит за консультацию и техническую помощь Петрову Н.Г. (Агентство информатизации УР).

Аннотация. Показано, что в системах, в которых взаимодействие идет по градиенту потенциала результирующая энергия находится по принципу сложения обратных величин энергии подсистем. Понятие энтропии имеет многоплановое проявление в физико-химических, экономических, технических и других природных процессах, что подтверждается их номограммами. Применение методики пространственно-энергетического параметра позволяет оценивать вероятность протекания процессов конформации различных биосистем исходя из энергетических характеристик свободных атомов.

Ключевые слова: пространственно-энергетический параметр, волновые функции, структурные взаимодействия, энтропийные номограммы, биофизические процессы, экономические и технологические системы.

ГЛАВА 1. РАВНОВЕСНО-ОБМЕННЫЕ ПРОСТРАНСТВЕННО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Аннотация. На основе модифицированного уравнения Лагранжа для относительного движения двух взаимодействующих материальных точек введено представление о пространственно-энергетическом параметре (P -параметре), который является комплексной характеристикой важнейших атомных величин. Установлены волновые свойства P -параметра, дано его волновое уравнение, имеющее формальную аналогию с уравнением Ψ -функции. Получены некоторые корреляции значений P -параметра с функциями Лагранжа и Гамильтона. Используя методологию P -параметра, проведены многочисленные расчеты равновесно-обменных структурных взаимодействий (в том числе и для наносистем), показана применимость этой модели к оценке их интенсивности.

Введение

Получение зависимости между энергетическими параметрами свободных атомов и степенью структурных взаимодействий в простых и сложных системах является одной из стратегических задач физико-химии. Классическая физика и квантовая механика широко используют с этой целью кулоновские взаимодействия и их разновидности.

Так в [1] к электронно-конформационным взаимодействиям в биосистемах относят взаимодействия Ван-дер-ваальса, ориентационные и заряд-дипольные взаимодействия. И как частный случай - обменно-резонансный перенос энергии. Но биологические и многие кластерные системы в структурной основе электронейтральные. И для них основное значение имеют равновесно-обменные пространственно-энергетические взаимодействия не кулоновского типа, то есть это не зарядные электростатические процессы.

Идут структурные взаимодействия суммарных электронных плотностей валентных орбиталей соответствующих конформационных центров - процессы равновесного перетекания электронных плотностей за счет перекрывания их волновых функций.

Еще Гайзенберг и Дирак [2] предложили обменный гамильтониан, выведенный в предположении о прямом перекрывании волновых функций взаимодействующих центров:

$$\bar{H} = -I_0 S_1 S_2 ,$$

где: \bar{H} – спиновый оператор изотропного обменного взаимодействия для пары атомов, I_0 – постоянная обмена, S_1 и S_2 – интегралы перекрывания волновых функций.

В этой модели электростатические взаимодействия моделируются эффективным обменным гамильтонианом, действующим в пространстве спиновых функций.

Такой подход нашел в частности применение к анализу структурных взаимодействий в кластерных системах. В работах Андерсона [3] показано, что в соединениях переходных элементов, когда расстояние между парамагнитными ионами значительно превышает сумму их ковалентных радиусов идут

«сверхобменные» процессы перекрывания орбиталей катионов через анион находящийся между ними.

В данной работе аналогичные равновесно-обменные процессы оцениваются через представление о пространственно-энергетическом параметре – Р-параметре.

1.1. О двух принципах сложения энергетических характеристик взаимодействий

Анализ кинетики разнообразных физико-химических процессов показывает, что во многих случаях складываются обратные величины скоростей, кинетических или энергетических характеристик соответствующих взаимодействий.

Некоторые примеры: амбиполярная диффузия, суммарная скорость топохимической реакции, изменение скорости света при переходе из вакуума в данную среду, эффективная проницаемость биомембран.

В частности, такое предположение подтверждается формулой вероятности процесса переноса электрона (W_∞) за счет перекрывания волновых функций 1 и 2 (в стационарном состоянии) при электронно-конформационных взаимодействиях:

$$W_\infty = \frac{1}{2} \frac{W_1 W_2}{W_1 + W_2} \quad (1)$$

Уравнение (1) используется при оценке характеристик процессов диффузии, сопровождающейся безизлучательными переносами электронов в белках [1].

А так же: «Из классической механики известно, что относительное движение двух частиц с энергией взаимодействия $U(r)$ происходит как движение материальной точки с приведенной массой μ :

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \quad (2)$$

в поле центральной силы $U(r)$, а общее поступательное движение – как свободное движение материальной точки с массой:

$$m = m_1 + m_2 \quad (3)$$

Такое положение вещей имеет место и в квантовой механике» [4].

Задача двухчастичных взаимодействий, происходящих по линии связи, была решена еще во времена Ньютона и Лагранжа:

$$E = \frac{m_1 v_1^2}{2} + \frac{m_2 v_2^2}{2} + U(\bar{r}_2 - \bar{r}_1), \quad (4)$$

где E – полная энергия системы, первый и второй члены – кинетические энергии частиц, третий член – потенциальная энергия между частицами 1 и 2, вектора \bar{r}_2 и \bar{r}_1 – характеризуют расстояния между частицами в конечном и начальном состояниях.

Для движущихся термодинамических систем первое начало термодинамики имеет вид:

$$\delta E = d\left(U + \frac{mv^2}{2}\right) \pm \delta A, \quad (5)$$

где: δE – количество энергии, сообщенное системе;

член $d\left(U + \frac{mv^2}{2}\right)$ – характеризует изменения внутренней и кинетической

энергий системы;

+ δA – работа, выполненная системой;

– δA – работа, совершенная над системой.

Так как величина работы численно равна изменению потенциальной энергии, то:

$$+ \delta A = -\Delta U \quad \text{и} \quad -\delta A = +\Delta U \quad (6,7)$$

Вероятно, не только в термодинамических, но и во многих других процессах в динамике взаимодействия движущихся частиц важно не только значение потенциальной энергии, а ее изменение. Поэтому по аналогии с уравнением (4) должно выполняться для двухчастичных взаимодействий:

$$\delta E = d\left(\frac{m_1 v_1^2}{2} + \frac{m_2 v_2^2}{2}\right) \pm \Delta U \quad (8)$$

$$\text{Здесь} \quad \Delta U = U_2 - U_1, \quad (9)$$

где U_2 и U_1 – потенциальные энергии системы в конечном и начальном состояниях.

При этом отсчет полной энергии (E) и кинетической энергии $\left(\frac{mv^2}{2}\right)$ может идти с их нулевого значения и тогда в уравнении (4) модифицируется только последний член.

Был проведен анализ характера изменения величины потенциальной энергии (ΔU) по ее знаку для различных потенциальных полей, приведенный в табл. 1.

Из таблицы видно, что значения $-\Delta U$ и соответственно $+\delta A$ (положительная работа) соответствуют взаимодействиям, происходящим по градиенту потенциала, а ΔU и $-\delta A$ (отрицательная работа) имеют место при взаимодействиях против градиента потенциала.

Решение двухчастичной задачи взаимодействий двух материальных точек с массами m_1 и m_2 , полученное при условии отсутствия внешних сил, соответствует взаимодействиям, которые идут по градиенту, работа положительная, совершается системой (аналогично процессу притяжения в гравитационном поле).

Решением этого уравнения через приведенную массу (μ) является уравнение Лагранжа для относительного движения изолированной системы двух взаимодействующих материальных точек с массами m_1 и m_2 , которое в координате x имеет вид:

$$\mu \cdot x'' = -\frac{\partial U}{\partial x}; \quad \frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}.$$

Здесь U – взаимная потенциальная энергия материальных точек; μ – приведенная масса.

Таблица 1

Направленность процессов взаимодействий

№	Системы	Вид потенциального поля	Процесс	U	$\frac{r_2}{r_1}$ $\left(\frac{x_2}{x_1}\right)$	U_2/U_1	Знак ΔU	Знак δA	Направление процесса в потенциальном поле
1	разноименные эл. заряды	электростатическое	притяжение	$-k \frac{q_1 q_2}{r}$	$r_2 < r_1$	$U_2 > U_1$	-	+	по градиенту
			отталкивание	$-k \frac{q_1 q_2}{r}$	$r_2 > r_1$	$U_2 < U_1$	+	-	против градиента
2	одноименные эл. заряды	электростатическое	притяжение	$k \frac{q_1 q_2}{r}$	$r_2 < r_1$	$U_2 > U_1$	+	-	против градиента
			отталкивание	$k \frac{q_1 q_2}{r}$	$r_2 > r_1$	$U_2 < U_1$	-	+	по градиенту
3	элементарные массы m_1 и m_2	гравитационное	притяжение	$-\gamma \frac{m_1 m_2}{r}$	$r_2 < r_1$	$U_2 > U_1$	-	+	по градиенту
			отталкивание	$-\gamma \frac{m_1 m_2}{r}$	$r_2 > r_1$	$U_2 < U_1$	+	-	против градиента
4	деформация пружины	поле упругих сил	сжатие	$k \frac{\Delta x^2}{2}$	$x_2 < x_1$	$U_2 > U_1$	+	-	против градиента
			растяжение	$k \frac{\Delta x^2}{2}$	$x_2 > x_1$	$U_2 > U_1$	+	-	против градиента
5	фотоэффект	электростатическое	отталкивание	$k \frac{q_1 q_2}{r}$	$r_2 > r_1$	$U_2 < U_1$	-	+	по градиенту

При этом $x'' = a$ (характеристика ускорения системы). Для элементарных участков взаимодействий Δx можно принять:

$$\frac{\partial U}{\partial x} \approx \frac{\Delta U}{\Delta x} \quad \text{То есть: } \mu a \Delta x = -\Delta U. \quad \text{И тогда:}$$

$$\frac{1}{1/(a\Delta x) (1/m_1 + 1/m_2)} \approx -\Delta U; \quad \frac{1}{1/(m_1 a \Delta x) + 1/(m_2 a \Delta x)} \approx -\Delta U$$

Или:

$$\frac{1}{\Delta U} \approx \frac{1}{\Delta U_1} + \frac{1}{\Delta U_2} \quad (10)$$

где ΔU_1 и ΔU_2 – потенциальные энергии материальных точек на элементарном участке взаимодействий, ΔU – результирующая (взаимная) потенциальная энергия этих взаимодействий.

Таким образом:

1. В системах, в которых взаимодействие идет по градиенту потенциала (положительная работа) результирующая потенциальная энергия находится по принципу сложения обратных значений соответствующих энергий подсистем [5]. Аналогично рассчитывается приведенная масса для относительного движения изолированной системы двух частиц.

2. В системах, в которых взаимодействие идет против градиента потенциала (отрицательная работа) выполняется алгебраическое сложение их масс и также – соответствующих энергий подсистем (аналогично гамильтониану).

1.2. Пространственно-энергетический параметр (Р-параметр)

Из уравнения (10) следует, что результирующая энергетическая характеристика системы взаимодействия двух материальных точек находится по принципу сложения обратных величин исходных энергий взаимодействующих подсистем.

«Электрон с массой m , движущийся около протона с массой M , эквивалентен частице с массой: $m_{np} = \frac{mM}{m+M}$ ». [6] – стр. 12.

Поэтому, модифицируя уравнение (10), можно предположить, что энергия валентных орбиталей атома (ответственная за межатомные взаимодействия) может быть рассчитана [5] по принципу сложения обратных величин некоторых исходных энергетических составляющих, согласно уравнений:

$$\frac{1}{q^2/r_i} + \frac{1}{W_i n_i} = \frac{1}{P_\varepsilon} \quad \text{или} \quad \frac{1}{P_0} = \frac{1}{q^2} + \frac{1}{(Wm)_i} ; \quad P_\varepsilon = P_0/r_i \quad (11),(12),(13)$$

здесь: W_i – орбитальная энергия электронов [7]; r_i – орбитальный радиус i -ой орбитали [8]; $q=Z^*/n^*$ - по [9], n_i – число электронов данной орбитали, Z^* и n^* – эффективный заряд ядра и эффективное главное квантовое число, r – размерные характеристики связи.

Величина P_0 названа пространственно-энергетическим параметром (ПЭП), а величина P_ε – эффективным Р-параметром (эффективный ПЭП). Эффективный ПЭП имеет физический смысл некоторой усредненной энергии валентных электронов в атоме и измеряется в единицах энергии, например, в электрон-вольтах (эВ).

Значения P_0 -параметра являются табулированными постоянными величинами для электронов данной орбитали атома.

Для размерности ПЭП можно записать:

$$[P_0] = [q^2] = [E] \cdot [r] = [h] \cdot [v] = \frac{\kappa \mathcal{M}^3}{c^2} = \text{Дж м},$$

где $[E]$, $[h]$ и $[v]$ – размерности энергии, постоянной Планка и скорости. Таким образом, такой Р-параметр соответствует процессам, идущим по градиенту потенциала.

Введение Р-параметра следует рассматривать как последующее развитие квазиклассических представлений с использованием квантовомеханических данных по строению атома для получения критериев энергетических условий фазообразования. При этом для систем одноименно-заряженных (например, – орбитали в данном атоме), однородных систем сохраняется принцип алгебраического сложения таких параметров (аналогично гамильтониану):

$$\sum P_{\vartheta} = \sum (P_0/r_i) ; \quad \sum P_{\vartheta} = \frac{\sum P_0}{r} \quad (14),(15)$$

или:
$$\sum P_0 = P_0' + P_0'' + P_0''' + \dots ; \quad r \sum P_{\vartheta} = \sum P_0 \quad (16),(17)$$

Здесь Р-параметры суммируются по всем валентным орбиталям атома.

Для вычисления значения Р_ϑ-параметра на данном расстоянии от ядра в зависимости от вида связи вместо *r* может использоваться или атомный радиус (*R*) или ионный радиус (*r_и*).

Кратко о достоверности такого подхода. Как показали расчеты, величины Р_ϑ-параметров численно равны (в пределах 2%) полной энергии валентных электронов (*U*) по статистической модели атома. Используя известное соотношение между электронной плотностью (*β*) и внутриатомным потенциалом по статистической модели атома [10], можно получить прямую зависимость Р_ϑ-параметра от электронной плотности на расстоянии *r_i* от ядра.

Рациональность данной методики была подтверждена путем расчета электронной плотности с использованием волновых функций по Клементи [9] и сопоставлением ее с величиной электронной плотности, вычисленной через значение Р_ϑ-параметра.

1.3. Волновое уравнение Р-параметра

Для характеристики пространственно-энергетических свойств атома введены два вида Р-параметров, связь между которыми простая: $P_{\vartheta} = \frac{P_0}{R}$

где *R* – размерная характеристика атома. Учитывая дополнительные квантовые характеристики подуровней в атоме, это уравнение в координате *x* можно записать:

$$\Delta P_{\vartheta} \approx \frac{\Delta P_0}{\Delta x} \quad \text{или} \quad \partial P_{\vartheta} = \frac{\partial P_0}{\partial x}$$

где величина ΔР₀ равна разности между Р₀-параметром *i*-ой орбитали и Р_{0т}-параметром отсчета (параметром основного состояния при данном наборе квантовых чисел).

Согласно установленному [5] правилу сложения Р-параметров одноименно-заряженных или однородных систем для двух орбиталей в данном атоме с разными квантовыми характеристиками и в соответствии с законом сохранения энергии получаем:

$$\Delta P_{\vartheta}'' - \Delta P_{\vartheta}' = P_{\vartheta, \lambda}$$

где Р_{ϑ,λ} – пространственно-энергетический параметр квантового перехода.

Приняв за размерную характеристику взаимодействия Δλ=Δ*x*, имеем:

$$\frac{\Delta P_0''}{\Delta \lambda} - \frac{\Delta P_0'}{\Delta \lambda} = \frac{P_0}{\Delta \lambda} \quad \text{или:} \quad \frac{\Delta P_0'}{\Delta \lambda} - \frac{\Delta P_0''}{\Delta \lambda} = -\frac{P_0 \lambda}{\Delta \lambda}$$

Разделим еще раз почленно на Δλ:
$$\left(\frac{\Delta P_0'}{\Delta \lambda} - \frac{\Delta P_0''}{\Delta \lambda} \right) / \Delta \lambda = -\frac{P_0}{\Delta \lambda^2}, \quad \text{где:}$$

$$\left(\frac{\Delta P_0'}{\Delta \lambda} - \frac{\Delta P_0''}{\Delta \lambda} \right) / \Delta \lambda \sim \frac{d^2 P_0}{d\lambda^2}, \quad \text{то есть:} \quad \frac{d^2 P_0}{d\lambda^2} + \frac{P_0}{\Delta \lambda^2} \approx 0$$

Учитывая только те взаимодействия, при которых $2\pi\Delta x = \Delta \lambda$ (замкнутый осциллятор), получаем уравнение: $\frac{d^2 P_0}{4\pi^2 dx^2} + \frac{P_0}{\Delta \lambda^2} = 0$ или

$$\frac{d^2 P_0}{dx^2} + 4\pi^2 \frac{P_0}{\Delta \lambda^2} \approx 0$$

Так как $\Delta \lambda = \frac{h}{mv}$, то: $\frac{d^2 P_0}{dx^2} + 4\pi^2 \frac{P_0}{h^2} m^2 v^2 \approx 0$

или
$$\frac{d^2 P_0}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} P_0 E_k = 0 \quad (18)$$

где $E_k = \frac{mV^2}{2}$ - кинетическая энергия электрона.

Уравнение Шредингера для стационарного состояния в координате x :

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \psi E_k = 0$$

Из сравнения этих двух уравнений следует, что P_0 - параметр численно коррелирует с величиной Ψ -функции: $P_0 \approx \Psi$, а в общем случае ей пропорционален: $P_0 \sim \Psi$. Учитывая широкие практические возможности применения методологии Р-параметра, можно считать, этот критерий материализованным аналогом Ψ -функции [11].

Так как, P_0 -параметры, как и Ψ -функция обладают волновыми свойствами, то для них должны выполняться принципы суперпозиции, что определяет линейный характер уравнений сложения и изменения Р-параметров.

1.4. Аналоговые сопоставления функций Лагранжа и Гамильтона с пространственно-энергетическим параметром

Основными положениями аналитической механики являются функции Лагранжа (L) и Гамильтона (H).

Функцией Лагранжа называется разность между кинетической (T) и потенциальной (U) энергиями системы:

$$L = T - U.$$

Для однородных функций второй степени функцию Гамильтона можно рассматривать как сумму потенциальной и кинетической энергий, то есть как полную механическую энергию системы:

$$H = T + U.$$

Из этих уравнений и в соответствии с законом сохранения энергии следует, что:

$$H + L = 2T, \quad (19)$$

$$H - L = 2U. \quad (20)$$

Сделаем попытку оценить движение изолированной системы свободного атома как относительное движение двух его подсистем: ядро и орбиталь.

Структуру атома образуют разноименно-заряженные массы ядра и электронов. В этой системе энергетическими характеристиками подсистем являются орбитальная энергия электронов (W_i) и эффективная энергия ядра атома, учитывающая экранирующие эффекты.

В свободном атоме его электроны двигаются в кулоновском поле ядерного заряда. Эффективный заряд ядра, характеризующий потенциальную энергию такой подсистемы с учетом экранирующих эффектов, равен $\frac{q^2}{r_i}$,

где
$$q = \frac{Z^*}{n^*} .$$

Здесь: Z^* и n^* - эффективный заряд ядра и эффективное главное квантовое число; r_i – орбитальный радиус.

Можно считать, что орбитальная энергия электронов при их движении в кулоновском поле ядра атома определяется в основном величиной кинетической энергии такого движения.

Таким образом, предполагается, что:

$$T \sim W \quad \text{и} \quad U \sim \frac{q^2}{r_i} .$$

В таком подходе сумма величин W и $\frac{q^2}{r_i}$ аналогична функции Гамильтона (H):

$$W + \frac{q^2}{r_i} \sim H . \tag{21}$$

Аналоговое сопоставление P -параметра с функцией Лагранжа можно провести, используя модифицированное уравнение Лагранжа для относительного движения изолированной системы двух взаимодействующих материальных точек с массами m_1 и m_2 в координате x . Принцип сложения обратных значений энергетических величин моделирует их алгебраическую разность по гамильтониану.

То есть предполагается, что: $P_{\mathcal{E}} \sim L$.

Тогда уравнение (19) получает вид:

$$\left(W + \frac{q^2}{r_i} \right) + P_{\mathcal{E}} \approx 2W . \tag{22}$$

Используя в качестве орбитальной энергии электронов величины их энергии связи, были вычислены величины $P_{\mathcal{E}}$ -параметров свободных атомов (табл. 2) по уравнениям (11-13). При расчетах значений эффективного $P_{\mathcal{E}}$ -параметра в качестве размерных характеристик атома (R) использовались в

основном величины их радиусов по Белову-Бокию или ковалентные радиусы (для неметаллов).

При этом использовались усредненные значения полной энергии, валентных орбиталей путем деления их значений на число учитываемых валентных электронов (N):

$$\left(\frac{q^2}{r_i} + W\right) \frac{1}{N} + P_{\text{Э}} \approx 2W \cdot \quad (22a)$$

Эта энергия в пересчете на один валентный электрон является в данном подходе аналогом функции Гамильтона – H.

Для электронов 1a и 2a групп периодической Системы единственно валентной орбиталью является S-орбиталь, что учитывалось через введение коэффициента $K = \frac{n}{n^*}$, где n – главное квантовое число, n^* – эффективное главное квантовое число по уравнению:

$$\left(\frac{q^2}{r_i} + W\right) \frac{1}{KN} + P_{\text{Э}} \approx 2W \cdot \quad (23)$$

Так в 1a и 2 подгруппах в малых периодах $K=1$ и далее $K = \frac{4}{3,7}; \frac{5}{4}; \frac{6}{4,2}$ - для 4,5 и 6 – периодов Системы только этих подгрупп. Для всех остальных случаев $K=1$.

Кроме того, применительно только к 1a – группе периодической Системы в качестве размерной характеристики в первом члене уравнения (23) использовалась величина $2r_i$ (то есть орбитальный диаметр i -ой орбитали).

С учетом указанных замечаний по исходному уравнению (23) для 65 элементов был проведен расчет и сопоставления величин $\left(\frac{q^2}{r_i} + W\right) \frac{1}{KN} + P_{\text{Э}}$ и $2W$, результаты только некоторых из них приведены в табл. 2.

Анализ данных табл. 2 показывает, что близость значений сопоставляемых исследуемых величин находится в большинстве случаев в пределах 5%. Таким образом, выявляется определенное соответствие уравнений (19) и (23), и величину $P_{\text{Э}}$ -параметра можно считать аналогом функции Лагранжа, а значение $\left(\frac{q^2}{r_i} + W\right) \frac{1}{KN}$ - аналогом функции Гамильтона [11].

1.5. Структурные обменные пространственно-энергетические взаимодействия

При образовании твёрдого раствора и других структурных равновесно-обменных взаимодействиях в местах соприкосновения атомов-компонентов должна устанавливаться единая электронная плотность. Этот процесс сопровождается перераспределением электронной плотности между валентными зонами обеих частиц и переходом части электронов из одних

внешних сфер в соседние. Остовные электроны атомов, по-видимому, в таком обмене не участвуют.

Очевидно, что при близости электронных плотностей в свободных атомах-компонентах, процессы переноса между граничными атомами частиц окажутся минимальными, что будет благоприятствовать образованию новой структуры. Таким образом, задача оценки степени таких структурных взаимодействий во многих случаях сводится к сравнительной оценке электронной плотности валентных электронов в свободных атомах (на усредненных орбиталях), участвующих в процессе, что можно коррелировать с помощью модели Р-параметра.

Чем меньше разность $(P'_0/r'_i - P''_0/r''_i)$, тем энергетически более благоприятно образование новой структуры или твердого раствора.

В связи с этим максимальная суммарная растворимость, оцениваемая через коэффициент структурного взаимодействия α , определяется условием минимального значения α , которая представляет собой относительную разность эффективных энергий внешних орбиталей взаимодействующих подсистем:

$$\alpha = \frac{P'_0/r'_i - P''_0/r''_i}{(P'_0/r'_i + P''_0/r''_i)/2} 100\% \quad \alpha = \frac{P'_c - P''_c}{P'_c + P''_c} 200\% \quad (24, 25)$$

где P_c – структурный параметр, находится по уравнению:

$$\frac{1}{P_c} = \frac{1}{N_1 P'_c} + \frac{1}{N_2 P''_c} + \dots \quad (26)$$

здесь N_1 и N_2 – число однородных атомов в подсистемах.

Была проведена оценка степени изоморфизма и взаимной растворимости атомов-компонентов во многих (более тысячи) простых и сложных системах (в том числе и для наносистем). Результаты расчетов находятся в согласии с литературными и экспериментальными данными.

Выводы

1. Введенный пространственно-энергетический параметр (Р-параметр) можно считать материализованным аналогом Ψ -функции.

2. Применение такой методологии позволяет моделировать физико-химические процессы, исходя из энергетических характеристик свободного атома.

Таблица 2

Сопоставления основных энергетических атомных характеристик

Элемент	Валентные электроны	W (эВ)	r_i (Å)	q^2 (эВÅ)	P_0 (эВÅ)	R (Å)	$P_{\Sigma}=P_0/R$ (эВ)	N	$\left(\frac{2}{ri} + W\right) \frac{1}{NK} + P_{\Sigma}$	2W (эВ)
Li	2S ¹	5,3416	1,586·2	5,8892	3,475	1,55	2,2419	1	9,440	10,683
Be	2S ²	8,4157	1,040	13,159	7,512	1,13	6,6478	2	17,182	16,831
B	2P ¹	8,4315	0,776	21,105	4,9945	0,91	5,4885	3	17,365	16,863
	2S ²	13,462	0,769	23,890	11,092	0,91	12,189	3	27,032	26,924
C	2P ²	11,792	0,596	35,395	10,061	0,86	11,699/2	4	23,645	23,584
	2S ²	19,201	0,620	37,240	14,524	0,77	18,862	4	38,824	38,402
N	2P ³	15,445	0,4875	52,912	15,830	0,71	22,296/3	5	32,228	30,890
	2S ²	25,724	0,521	53,283	17,833	0,71	19,788/3	5	31,392	51,448
O	2P ¹	17,195	0,4135	71,383	6,4663	0,66	9,7979/4	6	34,087	34,390
	2S ²	33,859	0,450	72,620	21,466	0,66	32,524	6	65,064	67,718
F	2P ¹	19,864	0,3595	93,625	6,6350	0,64	10,367/5	7	42,115	39,728
	2S ²	42,792	0,396	94,641	24,961	0,64	39,002	7	79,257	85,584
Na	3S ¹	4,9552	1,713·2	10,058	4,6034	1,89	2,4357	1	10,327	9,9104
Mg	3S ¹	6,8859	1,279	17,501	5,8588	1,60	3,6618	2	13,946	13,772
Al	3P ¹	5,713	1,312	26,443	5,840	1,43	4,084	3	12,707	11,426
	3S ²	10,706	1,044	27,119	12,253	1,43	8,5685	3	20,796	21,412
Si	3P ¹	8,0848	1,068	29,377	6,6732	1,17	5,7036	4	14,600	16,170
	3S ²	14,690	0,904	38,462	15,711	1,17	13,428	4	17,737	29,380
P	3P ³	10,659	0,9175	38,199	16,594	1,30	12,765/3	3	21,686	21,318
	3S ¹	18,951	0,803	50,922	11,716	1,10	10,651	3	38,106	37,902
S	3P ¹	11,901	0,808	48,108	8,0143	1,04	7,7061	4	25,566	23,802
	3P ²	11,901	0,808	48,108	13,740	1,04	13,215/2	4	24,468	23,802
	3P ⁴	11,904	0,808	48,108	21,375	1,04	20,553/4	4	22,998	23,808

ГЛАВА 2. S-ЛИНИИ И ЭНТРОПИЯ В ТЕХНИКЕ, ЭКОНОМИКЕ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЯХ

Аннотация. Аналогично представлениям термодинамики о статистической энтропии использовано понятие энтропии для пространственно-энергетических взаимодействий. Это понятие возникло на основе второго закона термодинамики и представлениях о приведенном количестве теплоты. Такие положения являются общими утверждениями, не зависящими от микроскопических моделей. Поэтому их применение и рассмотрение может иметь большое число следствий, которые наиболее плодотворно используются так же статистической термодинамикой. В данном исследовании делается попытка применения таких закономерностей к оценке степени пространственно-энергетических взаимодействий с использованием их графической зависимости и в других областях. Получена номограмма для оценки энтропии различных процессов. Обсуждается многоплановость проявлений энтропии, в том числе – в биофизических процессах, в экономике и в технических системах.

Введение

В статистической термодинамике энтропия (S) изолированной и находящейся в равновесии системы равна логарифму вероятности нахождения ее в определенном макросостоянии:

$$S = k \ln W, \quad (27)$$

где W – число доступных состояний системы или степень вырождения микросостояний; k – постоянная Больцмана.

Или:
$$W = e^{S/k} \quad (27 \text{ а})$$

Эти соотношения являются общими утверждениями, имеющими макроскопический характер, не содержат никаких ссылок на элементы структур рассматриваемых систем и полностью не зависят от микроскопических моделей.

Поэтому применение и рассмотрение этих законов может иметь большое число следствий.

При этом основной характеристикой процесса является термодинамическая вероятность – W . В реальных процессах в изолированной системе рост энтропии неизбежен – в системе нарастает беспорядок, хаос, идет понижение качества внутренней энергии.

Термодинамическая вероятность равна числу микросостояний, отвечающих данному макросостоянию.

Поскольку степень вырождения системы никак не связана с физическими особенностями систем, статистическое понятие энтропии может иметь и другие применения и проявления (кроме статистической термодинамики).

«Ясно, что из двух совершенно разных по своему физическому содержанию систем энтропия может быть одинаковой, если у них число возможных микросостояний, отвечающих одному макропараметру (неважно,

какой это параметр) совпадают. Именно поэтому понятие энтропии можно использовать в самых разнообразных областях. Возрастающая самоорганизация человеческого общества ... приводит к возрастанию энтропии и беспорядка в окружающей среде, что выражается в частности к появлению громадного числа рассеянных по Земле свалок» [12].

В данном исследовании делается попытка применения понятия энтропии к оценке степени пространственно-энергетических взаимодействий с использованием их графической зависимости и в других областях.

2.1. Энтропийная номограмма степени пространственно-энергетических взаимодействий

Применяя надёжные экспериментальные данные, была получена номограмма зависимости степени структурных взаимодействий (ρ) от коэффициента α , единая для широкого класса структур (рис.1). Данный подход дал возможность оценить степень и направление структурных взаимодействий процессов фазообразования, изоморфизма и растворимости в многочисленных системах, в том числе в молекулярных.

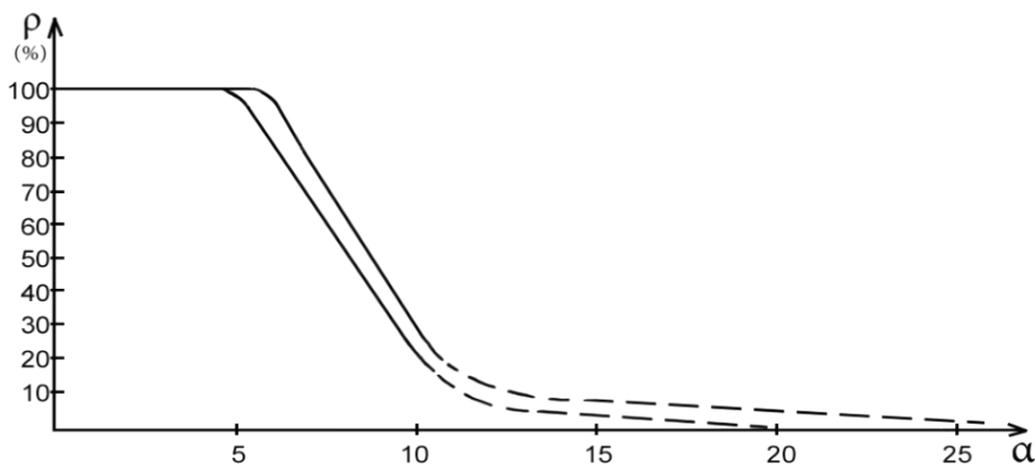


Рисунок 1. Номограмма зависимости степени структурных взаимодействий (ρ) от коэффициента α

Такая номограмма может быть представлена [5] и в виде логарифмической зависимости:

$$\alpha = \beta (\ln \rho)^{-1}, \quad (28)$$

где коэффициент β – постоянная величина для данного класса структур. От среднего значения величина β структурно может изменяться в основном только в пределах $\pm 5\%$. Таким образом, величина α обратно пропорциональна логарифму степени структурных взаимодействий и поэтому может

характеризоваться как энтропия пространственно-энергетических взаимодействий атомно-молекулярных структур.

Действительно, чем больше ρ , тем более вероятно образование стабильных упорядоченных структур (например, образование твердых растворов), то есть тем меньше энтропия процесса. Но тем меньше и коэффициент α .

Уравнение (28) не имеет полной аналогии с уравнением (27) Больцмана, так как в данном случае сравниваются не абсолютные, а только относительные значения соответствующих характеристик взаимодействующих структур, которые могут выражаться в процентах. И это касается не только коэффициента α , но и сравнительной оценки степени структурных взаимодействий (ρ), например – процент содержания атомов данного элемента в твердом растворе относительно общего числа атомов. Поэтому в уравнении (28) коэффициент $k = 1$.

Вывод: относительная разность пространственно-энергетических параметров взаимодействующих структур может быть количественной характеристикой энтропии взаимодействия: $\alpha \equiv S$.

2.2. Энтропийная номограмма поверхностно-диффузионных процессов

В качестве примера рассмотрен процесс карбонизации и формирования наноструктур при взаимодействиях в гелях поливинилового спирта и металлической фазы в виде оксидов или хлоридов меди.

Были вычислены значения зависимости степени структурных взаимодействий от коэффициента α , то есть $\rho_2 = f\left(\frac{1}{\alpha_2}\right)$ - кривая 2, представленная на рис. 2. Здесь приведена так же графическая зависимость степени образования нанопленок (ω) от времени процесса по данным [13] – кривая №1 и ранее полученная номограмма энтропии, но в обратной зависимости в виде $\rho_1 = f\left(\frac{1}{\alpha_1}\right)$ - кривая 3.

Анализ всех полученных графических зависимостей показывает почти полное графическое совпадение всех трех графиков: $\omega = f(t)$, $\rho_1 = f\left(\frac{1}{\alpha_1}\right)$, $\rho_2 = f\left(\frac{1}{\alpha_2}\right)$ с небольшими отклонениями в начале и в конце процесса. Таким образом, скорость карбонизации, как и функции многих других физико-химических структурных взаимодействий, могут непосредственно оцениваться через значения рассчитанных величин коэффициента α и энтропийную номограмму.

2.3. Номограммы биофизических процессов

1) О кинетике ферментативных процессов

«Необходимым этапом ферментативного катализа является образование фермент-субстратного комплекса ... При этом, к молекуле фермента может присоединиться n молекул субстрата» [1, стр. 58].

Для ферментов со стехиометрическим коэффициентом n , отличным от единицы вид графической зависимости скорости наработки продукта реакции (μ) в зависимости от концентрации субстрата (c) имеет [1] сигмоидный характер с характерной точкой перегиба (рис. 3)

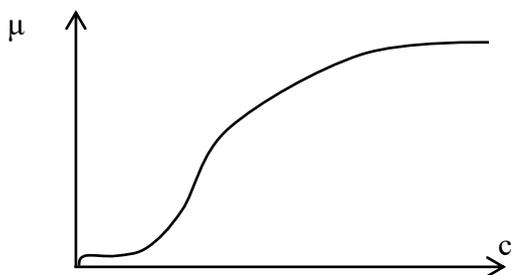


Рисунок 3. Зависимость скорости ферментативной реакции (μ) от концентрации субстрата (c)

Из рисунка 3 видно, что эта кривая повторяет в целом характер энтропийной номограммы на рис. 2.

Аналогичный вид имеет график зависимости скорости электронного транспорта в биоструктурах от времени диффузии ионов [1, стр. 278].

И в методике оценки ферментативных взаимодействий применяется эффективное число взаимодействующих молекул, которое больше 1.

В методологии Р-параметра фермент имеет ограниченное изоморфное сходство с молекулами субстрата и не образует с ним стабильного соединения, но при этом возможна такая ограниченная перестройка химических связей, которая будет «настроена» на получение конечного продукта.

2) Зависимость биофизических критериев от их частотных характеристик

а) Прохождение переменного тока через живые ткани характеризуется дисперсионной кривой электропроводности – это графическая зависимость полного сопротивления ткани (z -импеданс) от логарифма частоты переменного тока ($\log \omega$). В норме такая кривая, на которой по оси ординат откладывается импеданс, а по оси абсцисс - $\log \omega$, формально полностью соответствует энтропийной номограмме (рис. 1).

б) Флуктуации проводимости биомембран (обусловленные случайными процессами) «имеют вид кривой Лоренца». В этом графике спектральная плотность флуктуаций (ρ) откладывается на оси ординат, а функция логарифма частоты ($\log \omega$) – на оси абсцисс.

Вид такой кривой так же соответствует энтропийной номограмме на рисунке 1.

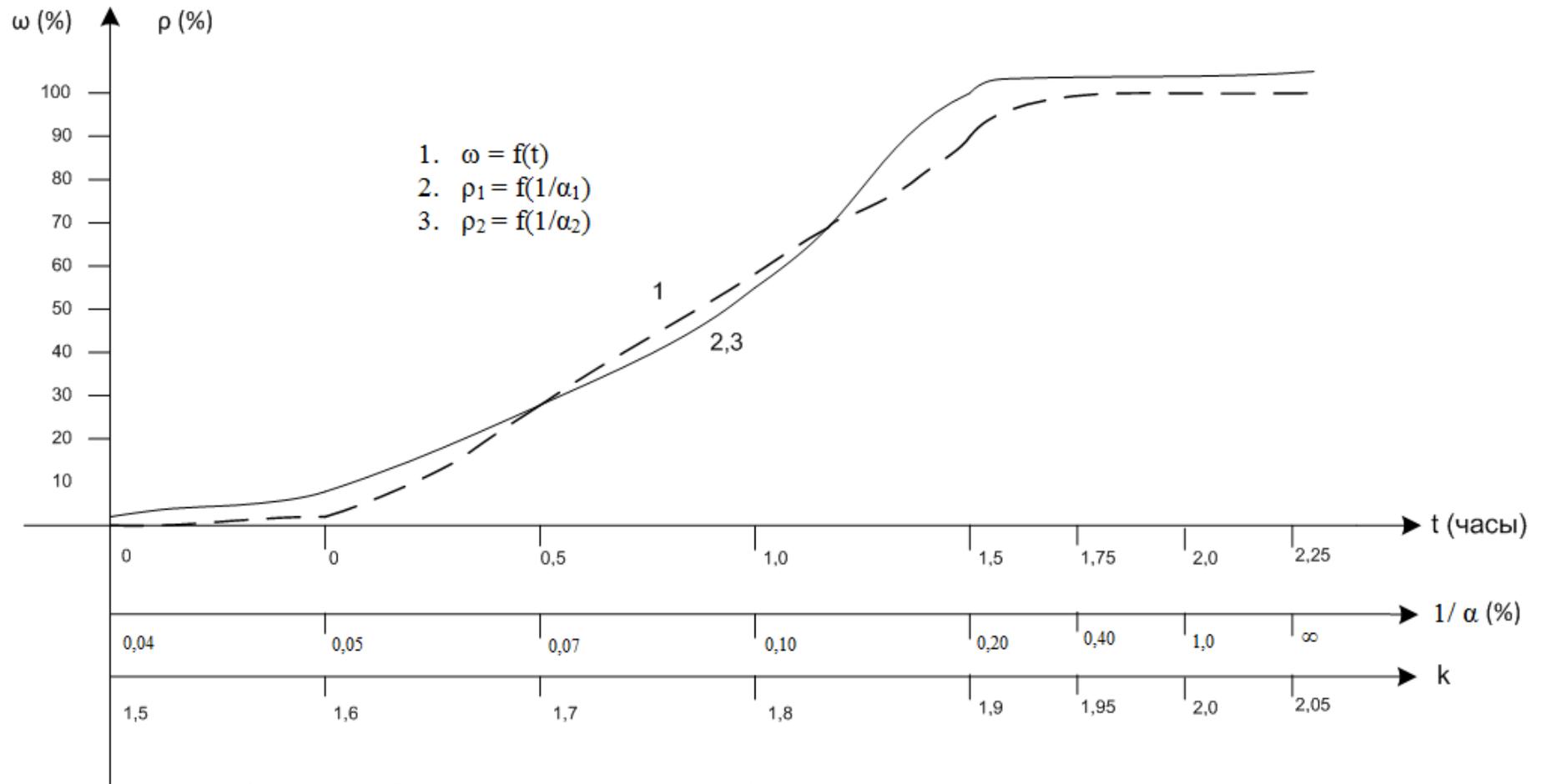


Рисунок 2. Зависимость скорости карбонизации от коэффициента α

2.4. Кривая Лоренца пространственно-временной зависимости

В кривой Лоренца [14] дана пространственно-временная графическая зависимость (рис. 4) параметра скорости (θ) от самой скорости (β), которая полностью аналогична энтропийной номограмме на рис. 2.

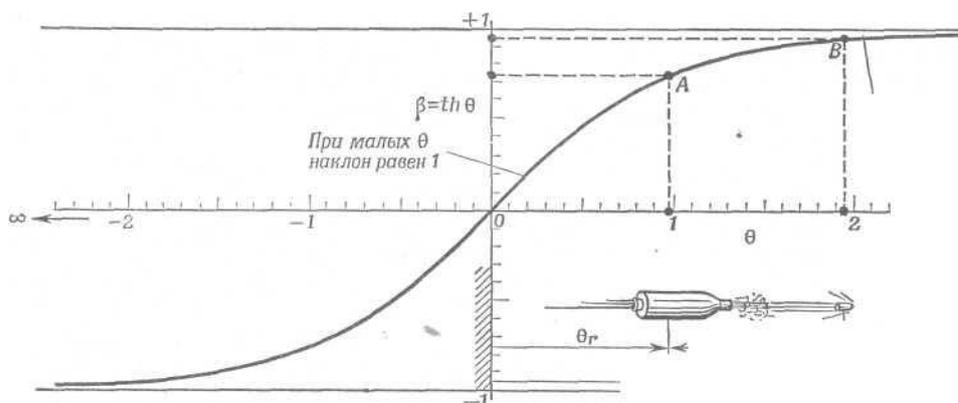


Рисунок 4. Связь между параметром скорости θ и самой скоростью $\beta = th\theta$

2.5. Энтропийные критерии в бизнесе

Понятие термодинамической вероятности как числа микросостояний, отвечающих данному макросостоянию можно модифицировать применительно к процессам экономических взаимоотношений, которые напрямую зависят от параметров бизнес-структур.

За макросостояние системы можно принять данную отдельную бизнес-структуру, а за число микросостояний – число ее сотрудников (N), которое есть число доступных наиболее вероятных состояний данной бизнес-структуры. Таким образом, предполагается, что такое число сотрудников бизнес-структуры является аналогом термодинамической вероятности применительно к процессам экономических взаимоотношений в бизнесе.

Поэтому можно принять, что общая энтропия качества бизнеса состоит из двух энтропий, характеризующих: 1) уменьшение эффективности конкуренции (S_1) и

2) уменьшение личной заинтересованности каждого сотрудника (S_2), то есть: $S = S_1 + S_2$. Величина S_1 пропорциональна числу работников предприятия: $S \sim N$, а величина S_2 имеет сложную зависимость не только от числа работников предприятия, но и от эффективности самого управления им. Она обратно пропорциональна персональной заинтересованности каждого сотрудника. Поэтому можно принять, что $S_2 = 1/\gamma$, где γ – коэффициент личной заинтересованности каждого сотрудника.

По аналогии с уравнением Больцмана (27) получаем:

$$S = \ln \left(\frac{N}{\gamma} \right) \quad (29)$$

В табл. 3 приведены примерные расчеты бизнес-энтропии по уравнению (29) для трех основных уровней бизнеса: малого, среднего и крупного. При этом предполагалось, что число N соответствует некоторому среднему значению из наиболее вероятных величин.

При расчете коэффициента личной заинтересованности γ учитывалось, что он может меняться от 1 (один сотрудник работает только сам на себя) до нуля (0), если такой работник как бесправный раб, и для наиболее крупных предприятий принималось $\gamma = 0,1 - 0,01$.

Несмотря на приближенную точность таких усредненных расчетов, можно сделать достаточно достоверный вывод о том, что энтропия бизнеса с укрупнением его структур резко возрастает при переходе именно от среднего к крупному бизнесу, так как снижается качество бизнес-процессов.

Таблица 3

Рост энтропии по мере укрупнения бизнеса

Параметры структур	Бизнес		
	Малый	Средний	Крупный
$N_1 - N_2$	10 – 50	100 – 1000	10000 – 100000
γ	0,9 – 0,8	0,6 – 0,4	0,1 – 0,01
S	2,408 – 4,135	5,116 – 7,824	11,513 – 16,118
$\langle S \rangle$	3,271	6,470	13,816

Сравнение номограммы (рис. 1) с данными таблицы 3 показывает аддитивность численных величин энтропии бизнеса (S) со значениями коэффициента пространственно-энергетических взаимодействий (α), то есть $S = \alpha$.

Известно так же, что максимально приемлемое для стабильной атомно-молекулярной системы число атомов в полимерной цепи составляет около 100 единиц, что в кубическом объеме дает 10^6 . И тогда снова получаем $\lg 10^6 = 6$.

2.6. S-кривые («линии жизни»)

Еще в прошлом веке были установлены [15] общие закономерности развития некоторых биологических систем в зависимости от времени (рост численности колоний бактерий, популяция насекомых, массы развивающегося плода и т.п.). Кривые, отражающие этот рост, были похожи в первую очередь тем, что на каждой из них можно было довольно четко выделить три последовательных этапа: медленное нарастание, быстрый лавинообразный рост и стабилизация (иногда убывание) численности (или другой характеристики). Позже было показано, что аналогичные этапы проходят в своем развитии и различные технические системы. Кривые, построенные в системе координат, где по вертикали откладывали численные значения одной из главных

эксплуатационных характеристик системы (например, скорость самолета, мощность электрогенератора и т.п.), а по горизонтали – «возраст» технической системы или затраты на ее развитие, получили название S-образных (по внешнему виду кривой) или также иногда называют «линии жизни».

В качестве примера приведен [15] график изменения удельной прочности стали во времени (по годам) (рис. 5).



Рисунок 5. Зависимость удельной прочности сталей от времени

Таким образом, очевидна аналогия S-кривых с энтропийной номограммой на рис. 2.

И в данном случае, как и ранее, временная зависимость (t) пропорциональна обратной величине энтропии ($1/\alpha$). Применительно к бизнесу такие кривые характеризуют интенсивность процесса, например продажи данной продукции. В то же время энтропийные номограммы в соответствии с рис. 1 оценивают качество бизнеса (ордината на таких графиках).

2.7. Энтропийные переходы и самоорганизация в физиологических системах

В реальных процессах, ресурсы часто заканчиваются не от того что система их израсходовала, а от того, что появилась новая система которая начинает более эффективно выполнять аналогичную функцию и утягивает ресурсы на себя [16] – рис 6.

Это характерно не только для кратковременно действующих процессов, но и для общего развития межструктурных и клеточных взаимодействий.

Существенно сложнее рассмотреть и математически проанализировать гетероморфные и весьма динамичные внутриклеточные и клеточно-клеточные взаимодействия.

Примером таких структурных преобразований организации биологической системы может служить нейрогенез. У половозрелого животного к 9 мес. проявляются процессы стагнации при внешне высоком разнообразии нейронов внутри ядра. Эта тенденция роста антиэнтропии идет в соответствии с рис. 2 и отражена в таблице 4 по [17]. Сравнение показателей проводится с половозрелой крысой. При этом внутри каждой популяции имеются ясно выраженные моды, с кривой распределения близкой к нормальной.



Рисунок 6. Энтропийные переходы по времени t

Таблица 4

Соотношение типов клеток нейробластического ряда в двигательном ядре тройничного нерва для средних крыс ($M \pm m$)

Сроки развития	Процент соотношения типов клеток
Новорожденные	$59,0 \pm 2,6^{***}$
1 неделя	$67,4 \pm 3,2^{***}$
1 месяц	$40,8 \pm 3,2^{***}$
Половозрелые	$26,6 \pm 2,3$

Именно повышение структурного разнообразия, и таким образом, управляемое, транзиторное усиление хаотичности систем вполне может быть основой, запускающей переход на новые состояния самоорганизации, на развитие отдельных клеток, клеточных популяций в целом (в соответствии с рис. б).

Очевидно, в общем плане процессы самоорганизации идут по тому же принципу: медленное нарастание из структурного разнообразия, быстрый рост и стабилизация обновленной биосистемы. Таким путем природа борется с

нарастание энтропии в организме, поддерживая ее на постоянном уровне как основное условие стационарного состояния.

Заключение

Как известно, энтропия изолированных систем не убывает. В открытых системах рост энтропии компенсируется отрицательной энтропией за счет взаимодействия с внешней средой.

Все рассмотренные выше системы можно рассматривать как системы открытые. Это относится и к пространственно-энергетическим процессам, при которых всякое изменение размерных энергетических характеристик обусловлено взаимодействием с внешними системами.

Очевидно это же наблюдается по отношению к техническим и технологическим системам, в динамике развития которых идут дополнительные инновации, модификации и финансовые инвестиции.

Энтропия в термодинамике рассматривается как мера необратимого рассеивания энергии. С позиции технологических и экономических принципов, энтропия, по существу, является мерой не рационального расходования энергетических ресурсов. С увеличением временной зависимости, такие процессы стабилизируются в соответствии с номограммами до наиболее оптимальных значений – вместе с ростом антиэнтропии, то есть величины $1/\alpha = 1/s$.

Аналогичный рост по времени рациональности технологических, экономических и физико-химических параметров свидетельствует о том, что их номограммы имеют универсальный характер для большинства основных процессов в природе, в технологии и в экономике.

Таким образом, понятие энтропии имеет многоплановое проявление в физико-химических, экономических, технических и других природных процессах, что подтверждается их номограммами в виде S-кривых.

ГЛАВА 3. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ КРИТЕРИИ КОНФОРМАЦИОННЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В БИОСИСТЕМАХ

Аннотация. Для оценки энергетических критериев конформационных взаимодействий в биоструктурах используется представление о пространственно-энергетическом параметре. Показана рациональность применения такой методологии при исследовании процессов конформации полипептидных цепей и фрагментов молекул ДНК. Приведенные принципы формирования и стабилизации биосистем имеют определенную аналогию с условиями протекания волновых процессов. Проведен анализ некоторых принципов формирования кластерных биосистем. Дано несколько примеров гексагонального образования клеточных структур в частности в ходе морфогенеза и при формировании комплексов коннексинов. Полученные результаты не противоречат экспериментальным данным.

Введение

В данном исследовании равновесно-обменные процессы структур оцениваются через представление о пространственно-энергетическом параметре – Р-параметре [5]. В таблице 4 приведены результаты расчетов по этой методике для ряда свободных атомов, в которой: W – энергия связи электронов по Fisher С.Ф. r_i – орбитальный радиус по Waber J.T, q – эффективный заряд по Clementi E., R – размерная характеристика атома.

3.1. Формирование полипептидной цепи

Главные компоненты органических соединений, составляющие 98 % элементного состава клетки, это: углерод, кислород, водород и азот. Связующую основу белковых биополимеров клетки составляет полипептидная связь, образованная группой COOH и группой NH_2 аминокислоты CONH . При этом в узлах полипептидной цепи находятся чаще атомы углерода, а иногда атомы азота.

Фрагменты узлов полипептидной цепи составлены из групп атомов CH , OH , CO , NH , NH_2 , CO-OH и некоторых радикалов (таблица 5).

В соответствии с энергетическими критериями исходной методологии [17] при конформации такой цепи должно соблюдаться примерное равенство Р-параметров, как для всех фрагментов в отдельности, так и атомных узлов цепи. Вероятность такого процесса оценивается через относительную разность Р-параметров (коэффициента α). Расчеты возможных вариантов таких значений приведены в таблице 6, анализ которой приводит к выводу о возможности существования трех серий этих соотношений. Такая цикличность функциональных соотношений может оцениваться с позиции квантово-волновых свойств Р-параметра [18].

Минимум интерференции, ослабление колебаний (в противофазе) происходит, если разность хода волн (Δ) равна нечетному числу полувольт:

$$\Delta = (2n + 1) \frac{\lambda}{2} = \lambda(n + \frac{1}{2}), \quad \text{где } n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (30)$$

Таблица 5

Р-параметры атомов, рассчитанные через энергию связи электронов

Атом	Валентные электроны	W (эВ)	r_i (Å)	q^2_0 (эВÅ)	P_0 (эВÅ)	R (Å)	$P_3 = P_0/R$ (эВ)		
1	2	3	4	5	6	7	8		
H	1S ¹	13,595	0,5292	14,394	4,7969	0,5292	9,0644		
						0,375	12,792		
						0,28	17,132		
C	2P ¹	11,792	0,596	35,395	5,8680	0,77	7,6208		
						0,67	8,7582		
						0,60	9,780		
	2P ²	11,792	0,596	35,395	10,061	0,77	13,066		
						0,67	15,016		
						0,60	16,769		
	2P ^{3_r}	19,201	0,620	37,240	13,213	0,77	17,160		
						2S ¹	9,0209	0,77	11,715
						2S ²	14,524	0,77	18,862
						2S ¹ +2P ^{3_r}	22,234	0,77	28,875
						2S ¹ +2P ^{1_r}	13,425	0,77	17,435
						2S ² +2P ²	24,585	0,77	31,929
N	2P ¹	15,445	0,4875	52,912	6,5916	0,70	9,4166		
						0,55	11,985		
						0,63	18,608		
	2P ²	11,723	0,521	53,283	17,833	0,70	16,747		
						0,63	18,608		
						0,55	28,782		
2P ³	15,830	0,521	53,283	17,833	0,70	22,614			
					0,55	28,782			
					0,70	25,476			
O	2S ²	25,724	0,521	53,283	17,833	0,70	25,476		
						0,70	48,090		
						0,70	48,090		
	2S ² +2P ³	33,859	0,450	72,620	21,466	0,66	9,7979		
						0,66	11,757		
						0,59	20,048		
2P ¹	17,195	0,4135	71,383	71,383	6,4663	0,66	30,815		
					11,858	0,66	34,471		
					20,338	0,66	32,524		
2P ²	17,195	0,4135	71,383	71,383	21,466	0,66	63,339		
					41,804	0,66	70,854		
					0,59	0,59	0,59		

Это означает, что минимум взаимодействия происходит, если Р-параметры взаимодействующих структур тоже находятся "в противофазе" – идет взаимодействие или разноименно-заряженных систем или разнородных атомов (например, при образовании валентно-активных радикалов СН, СН₂, ОН, NO₂ ... и других).

Суммирование Р-параметров в этом случае идет по принципу сложения обратных величин Р-параметров (табл. 6).

Разность хода волн (Δ) для Р-параметров может оцениваться через их относительную величину ($\gamma = \frac{P_2}{P_1}$) или через относительную разность Р-параметров (коэффициент α), которые при минимуме взаимодействий дают нечётное число:

$$\gamma = \frac{P_2}{P_1} = \left(n + \frac{1}{2}\right) = \frac{3}{2}; \frac{5}{2} \dots \dots \quad \text{При } n=0 \text{ (основное состояние)} \quad \frac{P_2}{P_1} = \frac{1}{2} \quad (31)$$

Максимум интерференции, усиление колебаний (в фазе) происходит, если разность хода волн равна чётному числу полуволен:

$$\Delta = 2n \frac{\lambda}{2} = \lambda n \quad \text{или} \quad \Delta = \lambda(n+1) \quad (32)$$

Применительно к Р-параметрам максимальное усиление взаимодействия в фазе соответствует взаимодействиям одноименно-заряженных систем или систем однородных

по своим свойствам и функциям (например, между фрагментами или блоками сложных органических структур, таких как СН₂ и ННО₂).

И тогда:
$$\gamma = \frac{P_2}{P_1} = (n+1) \quad (33)$$

По данной модели максимуму взаимодействий соответствует принцип алгебраического сложения Р-параметров. При $n=0$ (основное состояние) получаем $P_2=P_1$, или: максимум взаимодействия структур происходит при условии равенства их Р-параметров подсистем.

Это положение и уравнение (33) были использованы как основные условия формирования стабильных структур и процессов конформации фрагментов сложных систем.

Атом водорода, элемент №1 с орбиталью 1S¹ определяет основные энергетические критерии структурных взаимодействий (их «праотец»). В таблице 5 приведены три его значения его Р₃-параметров, соответствующие трём различным характеристикам атома.

$R_1 = 0,5292 \text{ \AA}^0$ – это орбитальный радиус (квантово-механическая характеристика) даёт первичное основное значение Р₃-параметра, равное 9,0644 эВ;

$R_2 = 0,375 \text{ \AA}$ – расстояние, равное половине длины связи в молекуле H_2 . Но, если атом водорода связан с другими атомами, то его ковалентный радиус становится $R_3 \approx 0,28 \text{ \AA}$.

В соответствии с уравнением (33) $P_2 = P_1 (n+1)$, и поэтому

$$P_1 \approx 9,0644 \text{ эВ}, \quad P_3 \approx 18,129 \text{ эВ};$$

Это значения возможных энергетических критериев стабильных (стационарных) структур. Им не удовлетворяет размерная характеристика $0,375 \text{ \AA}$, поэтому идёт переход на ковалентный радиус $R_3 \approx 0,28 \text{ \AA}$, который дает значение P -параметра примерно равное P_2 .

Таблица 6

Структурные P_C -параметры, рассчитанные через энергию связи электронов

Радикалы, фрагменты молекул	P_3' (эВ)	P_3'' (эВ)	P_C (эВ)	Орбитали
ОН	9,7979	9,0644	4,7084	O ($2P^1$)
	30,815	17,132	11,011	O ($2P^4$)
	17,967	17,132	8,7710	O ($2P^2$)
H_2O	$2 \cdot 9,0644$	17,967	9,0237	O ($2P^2$)
	$2 \cdot 17,132$	17,967	11,786	O ($2P^2$)
CH_2	17,160	$2 \cdot 9,0644$	8,8156	C ($2S^1 2P^3_r$)
	31,929	$2 \cdot 17,132$	16,528	C ($2S^2 2P^2$)
	36,694	$2 \cdot 9,0644$	12,134	C ($2S^1 2P^3_r$)
CH_3	31,929	$3 \cdot 17,132$	19,694	C ($2S^2 2P^2$)
	15,016	$3 \cdot 9,0644$	9,6740	C ($2P^2$)
СН	36,694	17,132	11,679	C ($2S^2 2P^2$)
	17,435	17,132	8,6423	C ($2S^2 2P^2$)
NH	16,747	17,132	8,4687	N ($2P^2$)
	48,090	17,132	12,632	N ($2S^2 2P^3$)
NH_2	18,608	$2 \cdot 9,0644$	9,1827	N ($2P^2$)
	16,747	$2 \cdot 17,132$	12,631	N ($2P^2$)
	28,782	$2 \cdot 17,132$	18,450	N ($2P^3$)
C_2H_5	$2 \cdot 31,929$	$5 \cdot 17,132$	36,585	C ($2S^2 2P^2$)
NO	18,608	17,967	9,1410	N ($2P^2$)
	28,782	20,048	11,817	N ($2P^3$)
CH_2	31,929	$2 \cdot 9,0644$	11,563	C ($2S^2 2P^2$)
CH_3	16,769	$3 \cdot 17,132$	12,640	C ($2P^2$)
CH_3	17,160	$3 \cdot 17,132$	12,865	C ($2P^3_r$)
CO–OH	8,4405	8,7710	4,3013	C ($2P^2$)

Радикалы, фрагменты молекул	P_3' (эВ)	P_3'' (эВ)	P_C (эВ)	Орбитали
CO	31,929	20,048	12,315	C ($2S^22P^2$)
C=O	15,016	20,048	8,4405	C ($2P^2$)
C=O	31,929	34,471	16,576	O ($2P^4$)
CO=O	36,694	34,471	17,775	O ($2P^4$)
C-CH ₃	31,929	19,694	12,181	C ($2S^22P^2$)
C-CH ₃	17,435	19,694	9,2479	C ($2S^12P^1$)
C-NH ₂	31,929	18,450	11,693	C ($2S^22P^2$)
C-NH ₂	17,435	18,450	8,8844	C ($2S^12P^1$)

В таблице 7 приведены три серии с примерно одинаковыми значениями Р-параметров атомов или радикалов при $\alpha < 7,5\%$.

Первая серия для $P_3 = 9,0644$ эВ – основная, первичная, где атомы Н, С, О, N имеют P_3 -параметры только первого электрона и взаимодействия идут в фазе.

Вторая серия для $P_3'' = 12,792$ эВ является не рациональной, возможно патологической, так как более соответствует взаимодействиям в противофазе: по уравнению (31) $P_3'' = 13,596$ эВ.

Третья серия – для $P_3''' = 17,132$ эВ – стационарная, так как взаимодействия идут в фазе: по уравнению (32) $P_3''' = 18,129$ эВ ($\alpha = 5,5\%$).

При специфических локальных энергетических воздействиях (электромагнитные поля, радиоактивное излучение и т.д.), структурные процессы формирования могут с нарастанием идти по патологической серии II, что может привести к деструкции основной конформационной цепи.

Поэтому при трансплантации и использовании стволовых клеток должно соблюдаться условие примерного равенства Р-параметров соответствующих структур (и не по II серии). В частности, эта общность выражается в аналогичной организации гликопротеиновых рецепторно-мембранных комплексов гликокаликсов трансплантируемых клеточных популяций и в структурной близости активных и сигнальных поверхностных зон образующих их белков [19], что позволяет донорским клеткам с высокой степенью вероятности сформировать адгезивные межклеточные коммуникационные взаимодействия [20].

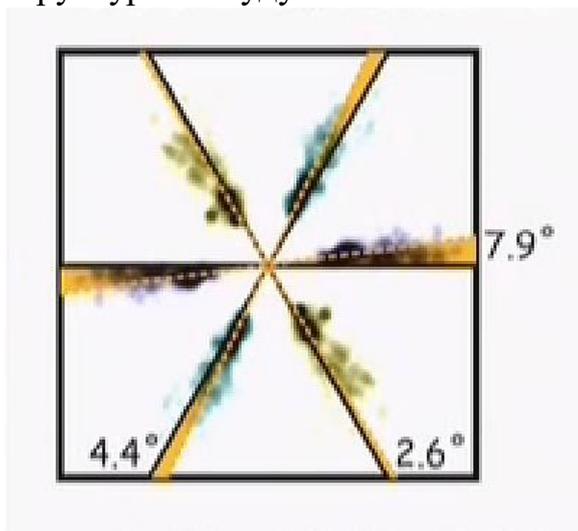
3.2. О конформациях гексагональных структур в клеточных системах

В нобелевской лекции Эдуарда Мозера [21] можно в частности выделить следующие проблемные результаты.

1. Кластерные структуры клеток образуют геометрически симметричные гексагональные системы.

2. Сами клетки статистически концентрируются вдоль координатных осей симметрии с отклонениями не более 7,5% (рис.7).

В работе [17] показано, что главным условием формирования стабильных биосистем является примерное равенство эффективных энергий взаимодействия по всем направлениям связи, которые оцениваются через значения пространственно-энергетического параметра (Р-параметра). В соответствии с этим преобладающими структурами будут шестичленные циклы и в меньшей



степени пятичленные.

Рисунок 7. Статистическое распределение числа клеток вдоль координатных осей [21]

Можно привести еще ряд фактов гексагонального образования биологических систем. Примером может служить взаиморасположение тонких и толстых миофиламентов в скелетных мышечных волокнах и кардиомиоцитах. При этом вокруг каждого толстого выявляется по 6 тонких миофиламентов. Эта система функционально связанных макромолекулярных комплексов, составленная кальций-зависимыми транзитными связями между миозинами и актинами.

Еще одним примером формирования гексагонально организованных линий натяжения в межклеточных коммуникациях являются апикальные конструкции промежуточных контактов в ходе морфогенеза [22].

Известна правильная гексагональная конструкция белков коннексинов в ходе формирования комплексов коннексинов щелевидных контактах [23].

3.3. О конформации фрагментов молекул ДНК

Каноническими основаниями в молекуле ДНК являются пиримидины – цитозин (Ц) и тимин (Т) а также пурины – аденин (А) и гуанин (Г). В их состав входят атомы азота и углерода, а также молекулярные группы СН, ОН, NH, NH₂, СН₃. Основное свойство пиримидинов и пуринов – атомы азота могут присоединять к себе протоны [24]. Значения Р-параметров всех этих составляющих фрагментов приведены в таблицах 5, 6, 7.

Такие данные то же систематизируются в рабочие серии, численные значения которых квантуются от исходного значения атома водорода (9,0644 эВ) примерно в 2 раза больше. Очевидно, возможно также серия структур со значением параметра в 2 раза меньше от исходного (около 4,533 эВ). Если взять величину 9,0644 эВ за единицу энергетического содержания (X=1) тогда в первой серии почти для всех структур X=1 с отклонениями коэффициента α до $\pm 0,82$ %. И для радикала ОН значение X могут быть как 0,5 так и 1.

Таблица 7

Биоструктурные пространственно-энергетические параметры (эВ)

серия	H	C	N	O	CH	CO	NH	NH ₂	OH	C-NH ₂	C-CH ₃	<P _э >	<α>
I	9,0644 (1S ¹)	8,7582 (2P ¹) 9,780 (2P ¹)	9,4166 (2P ¹)	9,7979 (2P ¹)	8,6423 (2S ² 2P ² - 1S ¹)	8,4405 (2P ² - 2P ²)	8,4687 (2P ² -1S ¹)	9,1827	8,7710	8,8844 2S ¹ 2P ¹ _{r-} (2P ³ -1S ¹)	9,2479 2S ¹ 2P ¹ _{r-} (2S ² 2P ² - 1S ¹)	8,9905	0,82
II	12,792 (1S ¹)	13,066 (2P ²) 11,715 (1S ¹)	11,985 (2P ¹)	11,757 (2P ¹)	11,679 (2S ² 2P ² - 1S ¹) 12,081 (2S ² 2P ² - 1S ¹)	12,315 (2S ² 2P ² -2P ²)	12,632 (2S ² 2P ³ - 1S ¹)	12,631	11,011	11,693 2S ² 2P ² - (2P ³ -1S ¹)	12,181 2S ² 2P ² - (2S ² 2P ² - 1S ¹)	12,138	5,25
III	17,132 (1S ¹)	16,769 (2P ²) 17,435 (2S ¹ 2P ¹)	16,747 (2P ²)	17,967 (2P ²)	Блоки C и H	16,576 (2S ² 2P ² -2P ⁴)	Блоки N и H	18,450	Блоки CO и OH	Блоки C и NH ₂	Блоки C и NH ₂	17,104	0,16-4,92

Примечание: В скобках указаны наименования взаимодействующих орбиталей.

В таблице 8 приведен количественный состав пуринов и пиримидинов, а также значения их энергетических содержаний. Из двух значений X для группы ОН одно ($X=1$) соответствует возможности формирования фрагментов ДНК. Другое ($X=0,5$), полученное с учетом взаимодействия наиболее валентно-активных орбиталей атомов водорода и кислорода, по-видимому характеризует возможность структурных взаимодействий в уже образовавшихся формациях, что и учтено в таблице 8.

Несмотря на весьма упрощенный подход в данной модели полученные результаты находятся в соответствии с экспериментальными данными. Так из таблицы 8 следует $X_A + X_T$ равно сумме $X_{Ц} + X_{Г}$, что свидетельствует о вертикальной стабильности ветвей ДНК. Известно также, что горизонтальная стабильность такой структуры определяется в частности тем, что молекулы А и Т соединены двумя водородными связями, а Г и Ц – тремя.

Таблица 8

Количественный и энергетический состав фрагментов ДНК

	X	A	T	Ц	Г	$X_A + X_T$	$X_{Ц} + X_{Г}$
C	1	3	3	2	4		
N	1	3	2	2	3		
CH	1	2	1	2	1		
NH	1	1	-	-	1		
NH ₂	1	1	-	1	1		
CH ₃	1	-	1	-	-		
ОН	0,5	-	2	1	1		
$\Sigma \langle x \rangle$		10	8	7,5	10,5	18	18

Такое соотношение определяет равенство их энергетических содержаний. Из таблицы 8 получаем $X_T + 2 = X_A$ (добавляются две водородные связи), а также $X_{Ц} + 3 = X_{Г}$ (добавляются три водородные связи).

Согласно правилу Чаргаффа [24] в целом для молекулы ДНК число фрагментов А равно Т и число фрагментов Ц равно Г, что так же соответствует принципу равенства суммарных Р-параметров для всех фрагментов структуры ДНК.

Вывод

Применение методики пространственно-энергетического параметра позволяет оценивать вероятность протекания процессов конформации различных биосистем исходя из энергетических характеристик свободных атомов.

ГЛАВА 4. ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Аннотация. На основе первичных принципов дано применение методологии к оценке интенсивности фундаментальных взаимодействий. Приведены конкретные примеры расчётов электромагнитных, сильных, слабых и гравитационных взаимодействий.

4.1. Интенсивности фундаментальных взаимодействий

Согласно современным теориям, основные виды взаимодействий элементарных частиц, их свойства и специфика во многом объясняются наличием особых комплексных «токов» - электромагнитных, протонных, лептонных и т. д. По изложенной выше модели пространственно-энергетического параметра обменные структурные взаимодействия в конечном счёте сводятся к перетеканию и выравниванию электронных плотностей соответствующих атомно-молекулярных компонентов. Очевидно, аналогичный процесс присущ и для элементарных частиц. Можно предположить, что в общем случае межчастичные обменные взаимодействия сводятся к перераспределению их энергетических масс – $M = \frac{E}{c^2}$,

где E – энергия частицы (МэВ).

Константой электромагнитного взаимодействия является элементарный электрический заряд, носитель которого электрон.

Поэтому для электромагнитного взаимодействия будем рассчитывать систему протон-электрон.

Для сильного, межнуклонного взаимодействия, которое сводится к обмену π -мезонами, рассмотрим системы нуклиды- π -мезоны. Очевидно более точно вести расчёт взаимодействия среднестатистического нуклида со среднестатистическим π -мезоном через их усредненные массы. При таких расчётах рассматривались два возможных варианта:

- 1) Без учёта электростатического отталкивания, то есть без π^+ мезонов в системах:
 - a) P - (π^0 , π^- , π^0);
 - b) (P-n) - (π^0 , π^- , π^0);
 - c) (n-P-n) - (π^0 , π^- , π^0), где для π мезонов $\langle E \rangle = 136,497$ МэВ
- 2) С учётом электростатического отталкивания в системе:
 - a) P - (π^+ , π^0 , π^-), где для π мезонов $\langle E \rangle = 138,034$ МэВ

Основным представителем слабого взаимодействия рассматривалась элементарная частица – нейтрино (электронное, мюонное) и его античастицы.

Размерные характеристики элементарных частиц (r) оценивались в единицах фемтометра (1 фм = 10^{-15} м.) – по данным [25].

При этом для электрона использовался классический радиус: $r_e = e^2/m_e c^2$, где e – элементарный заряд, m_e – масса электрона.

Для нейтрино в качестве размерной характеристики слабого взаимодействия использована Фундаментальная длина Гейзенберга ($6,690 \cdot 10^{-4}$ фм) – по [25].

Гравитационное взаимодействие оценивалось через P -параметр протона на расстоянии гравитационного радиуса ($1,242 \cdot 10^{-39}$ фм).

Для свободного атома в исходном уравнении (12) P_0 -параметр находится по принципу сложения обратных величин q^2 и wr , где q – эффективный электрический заряд ядра, w – энергия связи валентного электрона.

Модифицируя уравнение (12), применительно к взаимодействию свободных элементарных частиц, получаем сложение обратных величин параметров $P=Er$ для каждой частицы по уравнению:

$$1/P_0 = 1/(Er)_1 + 1/(Er)_2 + \dots \quad (34),$$

где E – энергия частицы (МэВ).

По уравнению (34), с использованием исходных данных [25] были рассчитаны P_0 -параметры парных сильных и электромагнитных взаимодействий в системах:

1. нуклиды - π -мезоны – (P_n -параметры);
2. протон – электрон – (P_e -параметр).

Для слабых и гравитационных взаимодействий рассчитывались только параметры $P_v=Er$ и $P_r=Er$ так как согласно уравнению (34), аналогичный параметр нуклида при его значительно большей величине не влияет на результаты расчета.

Относительная интенсивность взаимодействий находилась (таблица 9) по уравнениям для взаимодействий:

$$1. \text{ Сильные} \quad \alpha_B = \frac{\langle P_n \rangle}{\langle P_n \rangle} = \frac{P_n}{P_n} = 1 \quad (35)$$

$$2. \text{ Электромагнитные} \quad \alpha_B = \frac{P_e}{\langle P_n \rangle} = \frac{1}{136,983} \quad (36)$$

$$3. \text{ Слабые} \quad \alpha_B = \frac{P_g}{\langle P_n \rangle} ; \quad \alpha_B = 2,04 \cdot 10^{-10}; 4,2 \cdot 10^{-6} \quad (37)$$

$$4. \text{ Гравитационные} \quad \alpha_B = \frac{P_r}{\langle P_n \rangle} = 5,9 \cdot 10^{-39} \quad (38)$$

В расчётах α_B величина P_n -параметра умножалась на величину равную $2\pi/3$, то есть $\langle P_n \rangle = (2\pi/3)P_n$. Число 3 для нуклидов, состоящих из трех разных кварков, является «магическим» числом. Число 2π как известно имеет особое значение в квантовой механике и в физике элементарных частиц. В частности, только значение величины 2π коррелирует теоретические и экспериментальные данные при оценке сечений взаимодействия нуклидов между собой [26].

По литературным данным, электростатическая энергия отталкивания двух протонов на расстоянии 1,5 фм составляет около 1 МэВ, то есть величина этого Р-параметра равна 1,5 МэВфм. Тогда с определённым приближением для величины уменьшения общей энергии нуклида можно получить значения $\langle P_n \rangle$ – параметра: $\langle P_n \rangle \approx 198,842 - 1,5 = 197,303$ МэВфм, что даёт $\alpha_B = 1/137,26$ – для электромагнитных взаимодействий (таблица 9).

Как известно, различают «очень сильное», «сильное» и «умеренно сильное» ядерные взаимодействия. Для всех частиц, входящих в большую группу с относительно близкими значениями масс – унитарных мультиплетов или супермультиплетов – очень сильное взаимодействие одинаково [27]. В рамках данной модели очень сильное взаимодействие между частицами соответствует максимальной величине Р-параметра $P = Er$ (парное взаимодействие нуклидов). Учитывая примерное равенство размерных характеристик протона и нейтрона, по уравнению (34), получаем значения – Р-параметра, равные 401,61; 401,88 и 402,16 (МэВфм) для парных взаимодействий р-р, р-п и п-п соответственно, что даёт среднее значение $\alpha_B = 4,25$. Это очень сильное взаимодействие. Для восьми взаимодействующих нуклидов $\alpha_B \approx 1,06$ – сильное взаимодействие.

При увеличении числа взаимодействующих нуклидов α_B уменьшится – умеренно сильное взаимодействие. Поскольку ядерные силы действуют только между соседними нуклонами, то величина α_B не может быть очень малой.

Итак, установлено что интенсивность фундаментальных взаимодействий может оцениваться через Р-параметр, вычисленный по принципу обратного сложения в системе нуклиды- π -мезоны. Поэтому он имеет прямую связь с планковскими константами:

$$(2\pi/3)P_n \approx Er = 197,3 \text{ МэВфм} \quad (39)$$

$$(2\pi/3)P_n \approx E_n \lambda_k = 197,3 \text{ МэВфм} \quad (40),$$

где E и r – планковская энергия и планковский радиус, рассчитанные через гравитационную постоянную; E_n , λ_k – энергия и комптоновская длина волны нуклида.

В уравнении (34) оцениваются обменные взаимодействия через исходные Р-параметры частиц, равные произведению энергии на размерную характеристику: $P = Er$.

Поскольку эти Р-параметры могут относиться к частицам, характеризующим фундаментальные взаимодействия, то их прямое соотношение определит степень интенсивности процесса (α_B):

$$\alpha_B = \frac{P_i}{P_n} = \frac{(Er)_i}{(Er)_n} \quad (41)$$

Расчёты, проведённые по уравнению (41) с использованием известных планковских величин и методик, приведены в таблице 10.

Полученные результаты согласуются с литературными и экспериментальными данными [28,29].

4.2. Винтовая модель кварков

Будем исходить из следующих положений и предположений:

- 1) Макро- и микромир по структурному составу подобны сложной матрёшке. Одна часть имеет некоторую аналогию с другой: солнечная система – атом – ядро атома – кварки.
- 2) Все части этой «матрёшки» есть структурные образования.
- 3) Основное свойство всех систем - движение: поступательное, вращательное, колебательное.
- 4) Описание этих движений можно вести в евклидовом трёхмерном пространстве с координатами x, y, z .
- 5) Обменные энергетические взаимодействия элементарных частиц совершаются путём перераспределения их энергетической массы.

Исходя из данных положений, предлагается обсудить следующую винтовую модель кварка.

- 1) Структура кварка представляется в частном случае сферической, а в общем случае кварк – это сплюснутый (или вытянутый) эллипсоид вращения. Вращение происходит вокруг оси (x), совпадающей с направлением вектора угловой скорости, перпендикулярной направлению деформации эллипсоида.
- 2) Электрический заряд кварка (q) не дробный, а целочисленный, но перераспределённый в трёхмерном пространстве с виртуальной концентрацией его в направлениях трёх осей координат: $q/3$.
- 3) Сферическая или деформированная структура кварка имеет все три вида движения. Два из них – вращательное и поступательное согласуются с моделью винта, который кроме этих двух движений совершает ещё колебательное в одной из трёх взаимно перпендикулярных плоскостях xoy , xoz , yoz (рис. 8):

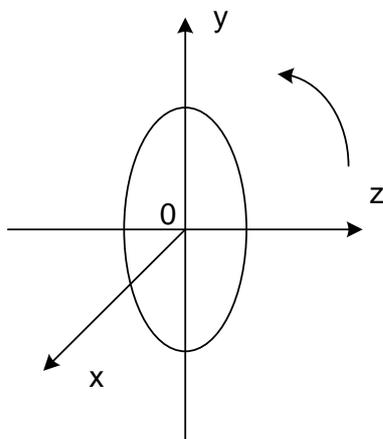


Рисунок 8. Структурная схема кварка в сечении yoz .

4) Каждая из этих плоскостей колебаний соответствует символу цвет кварка, например, $хоу$ – красный цвет, $хоз$ – синий, $уоз$ – зеленый цвет.

5) Винт может быть «правый» или «левый». Эта направленность вращения винта определяет знак электрического заряда кварка, допустим, левый винт соответствует положительному, а правый – отрицательному электрическому заряду кварка.

6) Общее число кварков определяется по схеме: для каждой оси (x, y, z) поступательного движения два винта (правый и левый) с тремя возможными плоскостями колебаний. Получаем $3 \cdot 2 \cdot 3 = 18$. Кроме того, есть 18 антикварков с противоположными характеристиками движений винта. Итого 36 видов кварков.

7) Эти числа кварков можно рассматривать, как реализованные степени свободы всех трёх движений. (3 поступательных, 2 вращательных, 3 колебательных)

8) Предпочтительным по направлению движения является поступательное движение, совпадающее с направлением вектора угловой скорости. Такие элементарные частицы составляют наш Мир. А менее предпочтителен обратный путь это – «Антимир».

9) Движение вдоль оси x по направлению вектора угловой скорости, перпендикулярное направлению деформации эллипсоида, является, по-видимому, менее энергетически затратным и соответствует кваркам U и d , формирующим нуклиды. Такое предположение согласуется со значениями энергетических масс кварков в составе адронов: 0.33; 0.33; 0.51; 1.8; 5; (?) в ГэВ для d, u, s, c, b, t – типов кварков соответственно.

Винтовую модель кварка можно подтвердить другими расчетами и сопоставлениями.

4.3. Расчёт энергии свободного нуклида (на примере нейтрона)

Нейтрон имеет 3 кварка d_1-u-d_2 с электрическими зарядами $-1, +2, -1$, распределенными в трех пространственных направлениях - соответственно. Кварк u – электростатически цементирует систему. Поступательные движения винтов d_1-u-d_2 идут вдоль оси x , но колебательные происходят в трех разных взаимно перпендикулярных плоскостях (выполняется принцип Паули).

По-видимому, первую половину периода колебаний u -кварк колеблется в фазе с d_1 - кварком, но противоположен по фазе с кварком d_2 . Во вторую половину периода всё наоборот. В целом такие взаимодействия определяют геометрическое равенство противоположно направленных пространственно-энергетических векторов, что даёт так называемое обесцвечивание цветов кварка.

Ранее сформулированные правила сложения P -параметров, распространяются на оба вида P -параметра (P_0 и P_3). В данном случае идёт сложение энергетических P_3 -параметров, поскольку подсистемы

взаимодействий обладают близкими размерными характеристиками. Так как оба взаимодействия реализуются внутри общей системы, то P_3 -параметры складываются алгебраически, а более точно в данном случае – геометрически по формуле:

$$\frac{E}{2} = (E_1^2 + E_2^2)^{\frac{1}{2}}$$

где E – энергия свободного нейтрона, $E_1=E_2=330$ МэВ – энергия кварков ud (в составе адронов).

Вычисление даёт $E = 933,38$ МэВ. Это для сильных взаимодействий. Учитывая роль кварков в электромагнитных взаимодействиях, получаем энергии свободного нейтрона: $E = 933,38 + 933,38/137 = 940,19$ МэВ. С экспериментальным значением $E = 939,57$ МэВ относительная ошибка расчетов составляет 0,06%.

Модифицируя основные положения винтовой модели кварков, ее можно применить и к другим элементарным частицам (для протона, электрона, нейтрона и т.д.). Например, электронейтральную частицу нейтрон можно рассматривать, как миниатом, аналог атома водорода.

Выводы

1. Рассчитаны интенсивности фундаментальных взаимодействий.
2. Предложен вариант винтовой модели кварков.

Таблица 8

Типы фундаментальных взаимодействий

Тип взаимодействия		E, <E> (МэВ)	R (фм)	Элементарные частицы	E, <E> (МэВ)	r (фм)	P _n , P _e , P _v , P _г (МэВфм)	$\frac{2\pi}{3} P_n$ = $\langle P_n \rangle$	$\alpha_B, \langle \alpha_B \rangle$ (расчет) – по ур. (36)	α_B (эксперимент)
электромагнитное	P	938,28	0,856	e ⁻	0,5110	2,8179	P _e =1,4374	-	1/136,983 1/137,26	1/137,04
сильное	P	938,28	0,856	π^0, π^-, π^+	136,497	0,78	P _n =94,0071	196,89	1	1
	P-n	938,92	0,856	π^0, π^-, π^+	136,497	0,78	P _n =94,015	196,90	1	1
	n-P-n	939,14	0,856	π^0, π^-, π^+	136,497	0,78	P _n =94,018	196,91	1	1
	P	938,28	0,856	π^+, π^0, π^-	138,034	0,78	P _n =94,941	198,843- -1,54=197,30	1	1
слабое				$\nu_e, \bar{\nu}_e$	<6·10 ⁻⁵	6,69·10 ⁻⁴	P _v =4,014·10 ⁻⁸		<2,04·10 ⁻¹⁰	10 ⁻¹⁰ - 10 ⁻¹⁴
				$\nu_\mu, \bar{\nu}_\mu$	<1,2	6,69·10 ⁻⁴	P _v =8,028·10 ⁻⁴		<4,2·10 ⁻⁶	10 ⁻⁵ - 10 ⁻⁶
гравитационное	P	938,28	1,242·10 ⁻³⁹				P _г =1,17·10 ⁻³⁶		5,9·10 ⁻³⁹	10 ⁻³⁸ - 10 ⁻³⁹

Таблица 9

Оценка интенсивности фундаментальных взаимодействий с использованием планковских констант и параметра $P=Mr$

Тип взаимодействия	Частицы, константы	E (МэВ)	r (фм)	Er (МэВфм)	$\alpha_B=Er/(Er)_n$ (расчет)	α_B (эксперимент)
сильное	протон	938,28	$\lambda=0,2103$	197,3	1	1
	планковские величины	$1,221 \cdot 10^{22}$	$1,616 \cdot 10^{-20}$	197,3		
электромагнитное	электрон	0,5110	2,8179	1,43995	1/137,02	1/137,036
слабое	$\nu_e \bar{\nu}_e$	$<6 \cdot 10^{-5}$	$6,69 \cdot 10^{-4}$	$<4,014 \cdot 10^{-8}$	$<2,03 \cdot 10^{-10}$	$10^{-10} - 10^{-14}$
	$\nu_\mu \bar{\nu}_\mu$	$<1,2$	$6,69 \cdot 10^{-4}$	$<8,028 \cdot 10^{-4}$	$<4,07 \cdot 10^{-6}$	$10^{-5} - 10^{-6}$
гравитационное	протон	938,28	$1,242 \cdot 10^{-39}$ гравитационный радиус	$1,165 \cdot 10^{-36}$	$5,91 \cdot 10^{-39}$	$10^{-38} - 10^{-39}$

ГЛАВА 5. ПРОБЛЕМЫ КОРПУСКУЛЯРНО-ВОЛНОВОГО ДУАЛИЗМА

Аннотация. Два принципа сложения энергетических характеристик структурных взаимодействий выполняются, если процесс идет или по градиенту потенциала или против него. Трансформируя эти правила на корпускулярно-волной дуализм можно предположить, что корпускулярные взаимодействия имеют место по градиенту потенциала (принцип сложения обратных величин энергий), а волновые процессы идут против градиента потенциала (принцип алгебраического сложения энергий). Такой подход подтверждается эмпирическим уравнением, в котором акт квантового действия сводится к перераспределению энергий в системе частица-волна.

Показано, что угловой вектор вращательно-поступательного движения электронов при квантовых переходах меняется в соответствии с квантовым числом квадрата тангенса этого угла.

Введение

Проблема квантово-волнового дуализма была в основном решена в период создания квантовой механики. Так, применение уравнения де-Бройля позволяет определить границы проявления таких явлений. Но какое свойство при этом доминирует зависит от условий процесса. И определить заранее какая часть из них будет работать в каждом конкретном случае достаточно сложно, хотя известно, что волновая картина чаще имеет место при низких энергиях, а корпускулярная – при высоких.

Один из основоположников квантовой механики Макс Борн по этому поводу сказал: «Каждый процесс может быть интерпретирован или с корпускулярной или с волновой точки зрения. Однако доказательство того, что мы имеем дело действительно с частицами или с волнами лежит за пределами наших возможностей, поскольку мы не в состоянии определить все характерные свойства процесса. Поэтому можно только сказать, что волновые и корпускулярные описания следует считать лишь как два дополняющих друг друга способа рассмотрения одного и того же объективного процесса». [30]

Таким образом, эти проблемные вопросы квантово-волнового дуализма нуждаются в дальнейшем исследовании и обсуждении. В данной работе делается попытка пояснения их с позиции представлений о пространственно-энергетических взаимодействиях.

5.1. Акт квантового действия

Для свободного электрона $P=P_e=Wv$, где $W = 0,510034 \text{ МэВ} = 0,81872 \times 10^{-13} \text{ Дж}$.

В качестве размерной характеристики была использована величина классического радиуса электрона $r = 2,81794 \times 10^{-15} \text{ м}$ и поэтому $P_e = 2,30712 \times 10^{-28} \text{ Дж} \cdot \text{м}$.

Формализм уравнений (11,12) не является принципиально новым. Еще в 1924 году по эффекту Комптона было получено уравнение:

$$\frac{1}{h\nu'} = \frac{1}{h\nu} + \frac{1 - \cos\theta}{mc^2} \quad (42)$$

Здесь: $h\nu'$ – энергия рассеянного фотона, $h\nu$ – энергия падающего фотона, mc^2 – собственная энергия электрона, θ – угол рассеяния. При этом энергия фотонов уменьшается на величину, которую получил дополнительно электрон. Так происходит акт квантового действия, результатом которого является перераспределение энергии между корпускулярными и волновыми свойствами взаимодействующих систем.

Еще проще, если акт действия имеет место при взаимодействии пары одноименных частиц. При взаимодействии по градиенту потенциала (корпускулярный механизм) результирующая энергия в этом варианте $W_k = \frac{W}{2}$. Если процесс идет против градиента (волновое движение), то суммарная энергия $W_b = 2W$. Соотношение между ними $\frac{W_b}{W_k} = 4$.

Электрический ток – это движение электронов по градиенту потенциала. Если предположить, что создаваемое им магнитное поле – это волновой процесс, то соотношение электрической и магнитной постоянных должно содержать эту цифру 4, что подтверждается в следующем эмпирическом уравнении:

$$h = \left(\frac{4+2\alpha}{2\pi} \right)^2 P_e \frac{\varepsilon}{\mu} \quad (43)$$

здесь: ε – электрическая постоянная, μ – магнитная постоянная, h – постоянная Планка, α – постоянная тонкой структуры – параметр характеризующий взаимодействия квантованных электронно-позитронного и электромагнитного полей. Число π определяется соотношением между вращательным движением (длина окружности) и поступательным движением (длина диаметра).

Относительная погрешность расчетов по этому уравнению составляет около 0,06%.

Коэффициент пропорциональности в уравнении (43) имеет размерность скорости (м/с) для соотношения (Ф/Гн), т.е. таким образом характеризуется скорость перераспределения энергий в системе частица – волна.

Поэтому акт квантового действия, выраженный через постоянную Планка, сводится к равновесно-обменному перераспределению энергии между корпускулярными и волновыми процессами.

Обобщая формализм уравнений (11,43) на все другие взаимодействия происходящие по градиенту потенциала можно сделать вывод, что в этих

случаях идут корпускулярные процессы, а волновой дуализм соответствует взаимодействиям против градиента потенциала.

5.2. Угол электронной намотки

Известно, что частица может иметь три основные виды движений: поступательное, вращательное и колебательное. Но квантовая механика вопрос о траектории электрона не рассматривает, т.к. можно говорить лишь о вероятности нахождения его в данной точке пространства.

Но электрон движется и если это поступательное движение идет по градиенту потенциала, то оно может соответствовать корпускулярному процессу, а вращательное движение – волновому. Соотношение их актов перераспределения энергии зависит от величин исходных энергетических критериев подсистем. При квантовых переходах это могут быть орбитальные энергии связи электронов соответствующих уровней.

Таким образом, основными параметрами квантовых переходов являются:

1. Энергия электромагнитной волны квантового перехода согласно уравнения Планка $E = h\nu$, где ν – частота электромагнитной волны [34]. Так в квантовых переходах проявляет себя колебательное движение, поскольку сама электромагнитная волна есть процесс распространения соответствующих колебаний.

2. Разность энергий связи электронов на разных энергетических уровнях перехода: $\Delta W = W_2 - W_1$.

3. Результирующая энергия их корпускулярного взаимодействия:

$$\frac{1}{W_k} = \frac{1}{W_1} + \frac{1}{W_2} \quad (44)$$

Рассмотрим некоторые важные в данном случае макропроцессы. Тутовый шелкопряд наматывает естественную (органическую) шелковую нить только под определенным углом вращения. В космонавтике на металлический цилиндр космического корабля наматывают целлюлозно-вискозную нить по специальной технологии и что важно под тем же углом намотки что и у тутового шелкопряда. Получается наиболее прочный, технологически более качественный и более легкий аппарат [31,32,33]. Можно говорить и о других примерах такого явления.

Этот угол (в основном – применительно к органическим системам) получил название геодезического угла: $\varphi_r = 54,73^\circ = 54^\circ 44'$.

В общем случае угол намотки (Θ) – это угол между геодезической линией и вектором вращательного движения. Геодезическая линия – это кратчайшее расстояние между двумя точками в геометрической фигуре вращения. Кстати, планеты вращаются вокруг солнца тоже по геодезической линии. Для пяти планет солнечной системы угол между осью вращения и орбитой равен от 62° до

66,5°. Земное Θ , учитывающее видимо, и влияние Луны составляет 66°33'. Такая же величина Θ имеется у Солнца. В астрономических терминах: наклонение эклиптики Солнца и наклонение экватора Земли к орбите численно одинаковы и равны 22°27'. Не в этом ли причина особой эффективности солнечного воздействия именно на земные биофизические процессы.

Основными элементами органических материалов являются азот, кислород, водород и главное углерод. Углерод специфический элемент, способный к более легкой гибридизации атомных орбиталей с квантовым переходом 2s-2p. Поэтому при повышении температуры и давления в органических материалах создаются условия для такой гибридизации атомов углерода, что, по-видимому, и происходит при технологии намотки в космических аппаратах. А в тутовом шелкопряде, как и во многих других природных процессах, идут соответствующие ферментативные реакции, на которых мы еще учимся, как надо работать.

Для расчета Θ и φ_r используем формализм комптоновского уравнения (42), модифицируя его применительно к квантовым переходам:

$$\frac{1}{h\nu} - \frac{1}{W_k K} = \frac{1 - \cos\theta}{\Delta W} \quad (45)$$

По этому уравнению разность энергий волнового и корпускулярного процессов численно равна разности энергий связи электронов на соответствующих орбиталях, но при выполнении принципов сложения (в данном случае – вычитания) обратных величин этих параметров и с учетом квантовой геометрии переходов. Это и есть в соответствии с законом сохранения энергии процесс перераспределения ее при акте квантового действия. Угол Θ – это угловой вектор движения электрона, который квантуется целым числом (K) через квадрат тангенса этого угла: $\text{tg}^2\varphi_r = 2$; $\text{tg}^2 60^\circ = 3$; $\text{tg}^2 45^\circ = 1$.

Расчеты по уравнению (45) приведены в таблицах 11 и 12. При этом значения угла Θ в основном коррелируют с величиной $\varphi = \frac{h\nu}{W_k}$ по табл. 12.

В работах [31,32,33] используются понятия разрушающего напряжения при растяжении пластика на шаг его намотки: σ_α – осевое, σ_β – окружное напряжения, которые заменяются пропорциональной им величиной N_α – осевое «усилие» и N_β – окружное «усилие». При этом выполняется уравнение

$$\frac{\sigma_\beta}{\sigma_\alpha} = \frac{N_\beta}{N_\alpha} = \text{tg}^2\varphi_r = 2 \quad (46)$$

«Это условие позволяет получать равнонапряженную систему нитей с минимальной массой изделия» [31,32].

Квантовые функции квадрата тангенса $k = 1, 2, 3$ численно определяют соотношения двух катетов треугольника, значения которых через осевые и

окружные напряжения характеризуют энергетические зависимости в системе с квантовыми и волновыми процессами.

Из таблицы 12 видно, что квантовые переходы типа $2s-2p$ для атома углерода в отличие от всех других элементов не сопровождаются изменением геодезического угла и коэффициента k . Очевидно, это свойство предопределяет уникальные особенности влияния геодезического угла намотки на стабильность биосистем. Кроме того, во всех переходах (кроме $2s-2p$) выполняется соотношение $\varphi \approx \frac{4}{3} \Theta$, что свидетельствует о том, что такой коэффициент в основном компенсирует структурные особенности более сложных переходов.

Некоторая разница между значениями углов φ и Θ или φ и $\frac{4}{3}\Theta$ очевидно определяется эффектом рассеяния частиц вокруг основных координатных осей. Аналогично, при конформации клеточных структур частицы статистически концентрируются вдоль координатных осей гексагонов с отклонениями на $2,6^\circ$; $4,4^\circ$ и $7,9^\circ$ (рис. 7 по [21]).

Среднее число таких отклонений, равное $4,97$ примерно соответствует разности $60^\circ - \varphi_r^\circ = 5,27^\circ$.

Динамика гексагонального формирования клеточных систем находится в соответствии с установленным [17] условием примерного равенства пространственно-энергетических характеристик подсистем по всем линиям связи. Этому способствует и тот факт, что биосистемы, имеющие в своих структурах элементы второго периода дают средний угловой вектор намотки (Θ) равный 60° .

Выводы

1. Два принципа сложения энергетических характеристик структурных взаимодействий можно трансформировать на процессы корпускулярно-волнового дуализма.

2. Предполагается, что при вращательно-поступательном движении электрона происходит перераспределение энергий в системе частица-волна, что проявляется через угловой вектор такого движения (угол намотки).

Таблица 11

Энергии квантовых переходов

Атом	Переход	W ₁ (эВ)	W ₂ (эВ)	ΔW (Дж)	W _k (Дж)	λ (А ⁰) по [34]	hν (Дж)
C (IV)	2s-2p	19,201	11,792	11,871	11,705	1549	12,824
N (V)	2s-2p	25,724	15,445	16,469	15,462	1238	16,046
O (VI)	2s-2p	33,859	17,195	26,699	18,267	1031	19,267
Al (III)	3s-3p	10,706	5,7130	7,9997	5,9886	1854	10,7145
Si (IV)	3s-3p	14,690	8,0848	10,583	8,3554	1393	14,260
C (III)	2s ² -2s2p	19,201*2	19,201+11,792	11,871	27,480	977	20,332
N (IV)	2s ² -2s2p	25,724*2	25,724+15,445	16,469	36,638	765	25,967
Si (III)	3s ² -3s3p	14,690*2	14,690+8,0848	10,583	20,557	1206	16,4715
Al (II)	3s ² -3s3p	10,706*2	10,706+5,7130	7,9997	14,889	1670	11,895

Таблица 12

Квантование геометрии структурных переходов

Атом	Переход	$\varphi = \frac{h\nu}{W_k}$	$\langle\varphi\rangle$	K	Θ°	$\langle\Theta\rangle$	$\langle\frac{4}{3}\Theta\rangle$	Функции квадрата тангенса (k)
C (IV)	2s-2p	1,0956	60,9°	2	54,45°	60,02°	-	tg ² φ _r = 2
N (V)	2s-2p	1,0377		2	59,67°			
O (VI)	2s-2p	1,0547		2	65,93°			
Al (III)	3s-3p	1,7951	φ _r ° + 45,47° = 100,2°	3 = 2+1	45,45°	46,2°	61,6°	tg ² 60° = 3
Si (IV)	3s-3p	1,7067		3 = 2+1	47,02°			
C (III)	2s ² -2s2p	0,7399	43,1°	1	31,97°	31,7°	42,27°	tg ² 45° = 1
N (IV)	2s ² -2s2p	0,7087		1	35,38°			
Si (III)	3s ² -3s3p	0,8013		1	29,27°			
Al (II)	3s ² -3s3p	0,7589		1	30,17°			

ГЛАВА 6. РАСЧЕТЫ СРОДСТВА К ЭЛЕКТРОНУ ЧЕРЕЗ ЗНАЧЕНИЯ ПРОСТРАНСТВЕННО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ

Аннотация. На основе модифицированного уравнения Лагранжа для относительного движения двух взаимодействующих материальных точек введено представление о пространственно-энергетическом параметре (*P*-параметре), который является комплексной характеристикой энергии валентных электронов атома. Показаны возможности использования такого параметра для оценки сродства к электрону у свободных атомов и для бинарных систем. Учет волновых свойств *P*-параметра позволяет объяснить полученную зависимость между ковалентными и вандерваальсовыми радиусами.

Введение

Сродством к электрону (χ) называют количество энергии, которое выделяется при присоединении электрона к нейтральному атому в его основном состоянии. То есть такая энергия равна разности энергии атома (молекулы) в основном состоянии и энергии основного состояния соответствующего отрицательного иона.

Экспериментальному и теоретическому определению этой величины посвящено много исследований, результаты которых приведены, например в [35,36,37]. Анализ этих данных приводит к выводу о том, что часто имеются большие несоответствия полученных значений (нередко в пределах даже одного метода). Так для атома железа получено χ , равное 0,58 эВ и 1,06 эВ, для радикала C_2H : 2,1 эВ; 2,7 эВ и 3,73 эВ, для VO : 2,12 эВ и 3,1 эВ и т.д. Достоверность самих методик не представляет сомнений. Очевидно, в этих случаях учитываются различные структурные модификации атомов и радикалов. Поэтому представляет интерес найти зависимость энергии сродства к электрону с первичными энергетическими характеристиками атома в его разных валентных состояниях. С этой целью в данном исследовании используется представление о пространственно-энергетическом параметре (*P*-параметре).

6.1. Расчеты и сопоставления

Из уравнения (33) получаем: $P_i = \frac{P}{n+1}$ или $P_i = \frac{P}{n}$,

где $n = 0, 1, 2, \dots$ (целое число).

Это означает, что кроме исходного (основного) состояния атома с параметром *P* могут быть у каждого атома структурно-активные валентные орбитали с другим значением P_i - параметров, причём ближайшие наиболее активные валентные состояния отличаются по значениям *P* - параметров в 2 раза. Формально это соответствует увеличению расстояния межатомного (межмолекулярного) взаимодействия в 2 раза, то есть идёт переход от радиуса взаимодействия к диаметру.

Поэтому для P_0 параметра имеем:

$$P_0 = \frac{P_0}{R(n+1)}. \quad (47a)$$

Или:

$$P_0 = \frac{P_0}{R n} \quad (47b)$$

Видимо, периодичность Системы элементов так же соответствует уравнению (33), в котором, учитывая экранирующие эффекты, вместо величины n лучше использовать эффективное главное квантовое число - n^* , связь между которыми по Слэтеру [38] имеет вид:

n	1	2	3	4	5	6
n^*	1	2	3	3,7	4	4,2

Тогда:

$$P_0 = \frac{P_i}{R(n^*+1)} \quad (48)$$

где $P_i - P_0$ - параметры каждого элемента в данном периоде Системы.

Такие величины P_0 - параметров (табл. 13) в частности ранее были успешно реализованы для оценки взаимной растворимости компонентов в металлических системах [39,40].

В данном исследовании (табл.14) в качестве расчётных уравнений для оценки сродства к электрону атомов использованы формулы:

$$P_0 = \frac{P_0}{kR(n^*+1)} \quad \text{и} \quad P = \frac{P_0}{N} \approx \chi \quad (49,50)$$

Здесь N – число учитываемых валентных электронов,
 k – коэффициент расстояния, обычно $k = 1$, иногда $k = 2$.

N равно числу всех валентных электронов для второго периода Системы, а для остальных периодов учитываются только внешние валентные электроны. В целом P -параметр имеет физический смысл величины средней энергии одного валентного электрона, деленной на (n^*+1) .

Показано, что для некоторых элементов разница в литературных данных соответствует различным валентным состояниям атома.

Примеры: Fe(I , II , III), Co(I , II , III), Cu(I , II , III) и др. В табл. 15 приведены результаты расчетов χ для бинарных систем, проведенные по принципу сложения обратных величин P -параметров компонентов:

$$\frac{1}{\chi} \approx \frac{1}{P_c} = \frac{1}{P_1} + \frac{1}{P_2}. \quad (51)$$

В целом такие результаты расчетов находятся в удовлетворительном состоянии с литературными данными, приведенными в [35,36]. Но в работе Соммера А.Х. [37,41] использованы значения χ_c принципиально отличные от этих величин. Анализ значений χ_c по [41] показывает (таблица не приводится),

что эти величины могут оцениваться через исходные значения P_0 -параметров, но без учета (n^*+1) по формуле:

$$P_s = \frac{P_0}{kR} \approx \chi,$$

где P_0 – параметр внешних валентных электронов атома.

Корректность данного подхода подтверждается сопоставлением P_s -параметров, рассчитанных с использованием ковалентных и вандерваальсовых радиусов.

Известно, что энергия электрона в отсутствие на орбитали других электронов зависит только от $(Z^*/n^*)^2$, где Z^* – эффективный заряд ядра. Приравнявая уравнения (47а) и (47б) и возводя в квадрат n^* и (n^*+1) , получаем:

$$r_k(n^*+1)^2 = R_s n^{*2} \rightarrow R_s = \left(\frac{n^*+1}{n^*}\right)^2 r_k, \quad (52)$$

где r_k – ковалентные радиусы, R_s – вандерваальсовые радиусы.

Справедливость соотношения (52) подтверждается расчетами, приведенными в таблице 16.

Выводы

1. Энергия сродства к электрону (χ) численно равна среднему значению P_s -параметра для одного валентного электрона, деленному на (n^*+1) , где n^* – эффективное главное квантовое число.

2. Без учета коэффициента (n^*+1) величины P_s -параметров внешних валентных электронов соответствуют χ_c – по данным Соммера А.Х. [41].

Ковалентные и вандерваальсовые радиусы связаны простой зависимостью через коэффициент $\left(\frac{n^*+1}{n^*}\right)^2$.

Таблица 13

Р-параметры атомов, рассчитанные через энергию связи электронов

Атом	Валентные электроны	W (эВ)	r_i (Å)	q^2_0 (эВÅ)	P_0 (эВÅ)	R (Å)	P_0/R (эВ)	$\frac{P_0}{R(n^*+1)}$	r_H (Å)	P_0/r_H (эВ)	$\frac{P_0}{r_u(n^*+1)}$
H	1S ¹	13,595	0,5295	14,394	4,7985	0,5295 0,28	9,0624 17,137	4,5312 8,5685	1,36	3,525	1,7625
Li	2S ¹	5,3416	1,506	5,86902	3,475	1,55	2,2419	0,7473	0,68	5,1103	1,7034
Be	2S ¹	6,4157	1,040	13,159	5,256	1,13	4,6513	1,5504	0,34	15,459	5,153
	2S ²	8,4157	1,040	13,159	7,512	1,13	6,6478	2,2159	0,34	22,094	7,3647
B	2P ¹	8,4315	0,776	21,105	4,9945	0,91	5,4885	1,8295	0,20	24,973	8,3242
	2S ¹	13,462	0,769	23,890	6,9013	0,91	7,5838	2,5279			
	2S ²	13,462	0,769	23,890	11,092	0,91	12,189	4,0630			
	2P ¹ +2S ²				16,086	0,91	17,677	5,892	0,20	80,43	26,81
C	2P ¹	11,792	0,596	35,395	5,6680	0,77	7,6208	2,5403	2,60	2,2569	0,75231
	2P ²	11,792	0,596	35,395	10,061	0,77	13,066	4,3554	4,3554	3,8696	1,2899
	2S ¹	19,201	0,620	37,240	9,0209	0,77	11,715	3,9052	2,60	3,4696	1,1565
	2S ²	19,201	0,620	37,240	14,524	0,77	18,862	6,2874	2,60	5,5862	1,8621
	2P ² +2P ²				24,585	0,77	31,929	10,643	2,60	9,4558	3,1519
N	2P ¹	15,445	0,4875	52,912	6,5916	0,71	9,2839	3,0946			
	2P ³	15,445	0,4875	52,912	15,830	0,71	22,296	7,4319	1,48	10,696	3,5653
	2S ¹	25,724	0,521	53,283	40,709		15,083				
	2S ²	25,724	0,521	53,283	17,833		25,117				
	2S ² +2P ³				33,663	0,71	47,413	15,804	1,48	22,745	7,5818

Таблица 14

Расчеты сродства к электрону для атомов (Эв)

Атом	Орбиталь	$P_0 = \frac{P_0}{Rk(n^* + 1)}$	N	$P = \frac{P_0}{N}$ (эВ)	χ [35,36]
1	2	3	4	5	6
Li	2S ¹	0,7473 P _и = 1,7034	1 3	0,7473 0,5678	0,65 – 1,05 0,58
Be	2S ¹	1,5504	4	0,3885	0,38
B	2P ¹	1,8295	5	0,369	0,30 (0,33)
C	2P ¹	2,5403	2	1,2702	1,27
	2P ²	4,3554	4	1,0889	1,17
N	2P ¹	3,0946/2	7	0,221	-0,21
O	2P ²	5,982/2	2	1,4955	1,407 (1,48)
F	2P ¹	3,4557	1	3,4557	3,448
F	2S ² 2P ³	2,6463	7	3,7804	3,45
Na	3S ¹	0,60892/2	1	0,3045	0,34
Na	3S ¹	0,6089	1	0,6089	0,54 ± 0,1
Mg	3S ¹	0,91544/2	2	0,2287	-0,22
Al	3P ¹	1,021/2	1	0,5105	0,5 (0,52)
Si	3P ¹	1,4259	1	<1,335>	(1,39)
		1,245	1		1,36
P	3P ¹	1,7696/2	1	0,8848	0,8
S	3P ¹	1,9265	1	1,9265	2,077
Cl	3P ⁵	6,7989/2	1	3,3995	3,614
K	4S ¹	0,4372	1	0,4372	0,55
					0,47
Ca ⁺²	4S ²	1,8097	1	1,8097	-1,93
Sc	4S ¹	0,7950	1	0,7950	-0,73
Ti	4S ¹	0,9075	1	0,4538	0,39
V(II)	4S ¹ 3d ¹	1,9447	2	0,9724	(0,94)
Cr(I)	4S ¹	1,1345	1	1,1345	0,98
Cr(III)	4S ² 3d ¹	2,6763	3	0,8921	1,2
Mn	4S ¹	1,0501	1	1,0504	(1,07)
	4S ² 3d ¹	2,7379	3	0,9126	-0,97
Fe(I)	4S ¹	1,0991	1	1,0991	1,06
Fe(I)	4S ¹	1,099/2	1	0,54955	1,06
Fe(II)	4S ¹ 3d ¹	2,1475	2	1,07375	0,58 ± 0,2
Co(I)	4S ¹	1,1282	1	1,1282	1,06
Co(II)	4S ¹ 3d ¹	2,1629	2	1,0815	1,06
Co(III)	4S ² 3d ¹	2,8502	3	0,9521	0,94 ± 0,15
Ni(I)	4S ¹	1,1363	1	1,1363	
Ni(II)	4S ²	1,6557	1	1,6557	1,62
Ni(III)	4S ² 3d ¹	3,8934	3	1,2978	1,2802
Cu(I)	4S ¹	1,1795	1	1,1795	1,226

Атом	Орбиталь	$P_s = \frac{P_0}{Rk(n^* + 1)}$	N	$P = \frac{P_s}{N}$ (эВ)	χ [35,36]
Cu(II)	4S ²	1,9023	1	1,9023	1,8 ± 0,1
Ga	4P ¹	0,90435/2	1	0,4522	0,39
Rb	5S ¹	0,4325	1	0,4325	0,42
Sr	5S ¹	0,56409	1	0,56409	-0,5
Y	5S ¹	0,71276/2	1	0,3564	-0,4
	4d ¹	0,62714/2	1	0,3136	0,3
Zr	5S ¹	0,8166/2	1	0,4083	0,45
Zr	5S ¹	0,8166	1	<1,0498>	1,0
	5S ²	1,2829			
Nb	4d ¹	1,0608	1	1,0608	1,13
Nb*	5S ²	1,4975	1	1,4975	1,3
Mo	4d ¹	1,1946	1	1,1946	1,18
Tc	5S ¹	0,99721	1	0,99721	0,99 1,00
Ru*	4d ¹	1,3501	1	1,3501	1,4
Rn	5S ²	1,7718	1	1,7718	1,68
	4d ¹	1,3795	1		
Pd*	5S ¹	1,0609	1	1,0609	1,02
Pd	4d ¹	1,3956	1	1,3956	1,4
Ag	4d ¹	1,3589	1	1,3589	1,3
Ag*	5S ²	1,8398	1	1,8398	2,0
In	5P ¹	0,75778	1	0,75778	0,72
Sn	5P ¹	1,0607	1	1,0607	1,03
Sb	5P ¹	1,1140	1	1,1140	0,94
	5S ² 5P ⁴	5,2798	5	1,056	0,94
Te	5P ²	1,9024	1	1,9024	~2
I-I	5P ¹	2 × 1,4509	1	2,9218	3,0
Cs	6S ¹	0,3992	1	0,3992	0,39
Ba	6S ²	0,8685	2	0,4343	-0,48
La	6S ²	1,1579	2	0,57895	0,55
Hg	6S ²	1,3538	2	0,6769	0,63
W	5d ¹	1,1736	1	1,1736	1,23
W	6S ¹	0,9413/2	1	0,4707	0,5 ± 0,3
Re	6S ¹	0,9613/2	1	0,4807	0,38
Os	5d ¹	1,3606	1	1,3606	1,44
Ir	6S ²	1,7079	1	1,7079	1,97
Pt	5d ²	2,7428	1	2,7428	2,56
	6S ² 5d ²	4,4522	2	2,2269	2,128
Au	5d ²	2,7339	1	2,7339	2,8 ± 0,1
	6S ¹ 5d ¹	2,3731	1	2,3731	2,3086
Te	6P ¹ 6S ²	2,9395/2	3	0,4899	0,5 ± 0,1
Pb	6P ¹	0,95235	1	0,95235	1,03
	6P ²	1,7256	1	1,7256	1,56
Po	6P ¹	1,1990	1	1,1990	1,32

Таблица 15

Сродство к электрону для бинарных систем (χ) в эВ

Структура	Первый компонент				Второй компонент				P _c (эВ)	χ [35,36]
	Орбиталь	P _x	N	$\frac{P_x}{N}$	P _x	Орбиталь	N	$\frac{P_x}{N}$		
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
CH	2P ¹	2,5403	1	2,5403	1S ¹	4,5312	1	4,5312	1,6278	1,65
CH	2P ¹	2,5403/2	1	1,27015	1S ¹	4,5312/2	1	2,2656	0,8139	0,74
C ₂	2P ¹ 2S ¹	6,8958	1	6,8958	2P ¹ 2S ¹	6,8958	1	6,8958	3,4479	3,3;3,54
CH ₂	2P ¹	2,5403	1	2,5403	2S ¹	2×8,566	1	17,192	2,2123	2,3
C ₂ H	2P ¹ 2S ¹	2×3,4479	2	3,4479	1S ¹	4,5312	1	4,5312	1,958	2,1
		2×3,4479	1	6,8958	1S ¹	4,5312	1	4,5312	2,7344	2,7
		2×3,4479	1	6,8958	1S ¹	8,566	1	8,566	3,8203	3,73
C ₂ H ₃	2P ¹	2×2,5403/2	1	2,5403	1S ¹	3×4,5312/2	1	6,7968	1,8492	2,0
CH ₃	2P ¹	2,5403/2	1	1,27015	1S ¹	3×4,5312/2	1	6,7968	1,070	1,08
C ₂ H ₅	2P ¹	2×2,5403/2	1	2,5403	1S ¹	5×4,5312	1	22,656	2,284	2,34
C ₂ H ₅	2P ¹	2×2,5403/2	1	2,5403	1S ¹	5×4,5312/2	1	5,7968	1,849	1,8
O ₂	2P ¹	3,1658	4	0,81645	2P ¹	3,1658	4	0,81645	0,4082	0,43 ± 0,05
H ₂	1S ¹	6,396(только для H ₂)	1	6,0390	2P ¹	6,396	1	6,396	3,198	3,58
F ₂	2P ¹	2×3,4557	1	6,9114	2P ¹	2×3,4557	1	6,9114	3,4557	3,08 ± 0,1
Cl ₂	3P ¹	2×2,1365	1	4,273	3P ¹	2×2,1365	1	4,273	2,1305	2,38 ± 0,1
	3P ¹	2,1365	1	2,1365	3P ¹	2,1365	1	2,1365	1,068	1,3 ± 0,4
OH	2P ¹	3,1658	1	3,1658	1S ¹	4,5312	1	4,5312	1,8979	1,83 ± 0,04
OH	2P ¹	3,1658	1	3,1658	1S ¹	8,566	1	8,566	2,3644	2,29
H ₂ O	1S ¹	2×8,566	1	17,132	2P ²	5,982	1	5,982	4,434	5,0
HO ₂	1S ¹	4,5312	1	4,5312	2P ²	2×5,982	1	2×5,982	3,287	3,04

НОО «Профессиональная наука» использует Creative Commons Attribution (CC BY 4.0): лицензию на опубликованные материалы - <https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.ru>

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
ClO	2P ¹ 2P ⁵	2,1365 6,7989	1 1	2,1365 6,7989	2P ¹ 2P ²	3,2658 5,982	1 1	3,2658 5,982	1,2915 3,182	2,2 ± 0,5 2,91
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
ClO ₂	2P ⁵	6,7989	1	6,7989	2P ¹	2 × 3,2658	1	6,1316	3,331	3,43
ClO ₃	2P ⁵	6,7989	1	6,7989	2P ¹	3 × 3,2658	1	9,7974	4,014	3,96
Br ₂	4P ⁵	5,7041	1	5,7041	4P ⁵	5,7041	1	5,7041	2,852	2,6 ± 0,3
J ₂	4P ⁵	4,8219	1	4,8219	4P ⁵	4,8219	1	4,8219	2,411	2,4 ± 0,3
BrO ₂	4P ⁵	5,7041	1	5,7041	2P ¹	2 × 3,2658	1	6,8316	3,045	3,22
JBr	5P ⁵	4,8219	1	4,8119	4P ⁵	5,7041	1	5,7041	2,613	2,7 ± 0,2
SO	3P ¹	1,9265	1	1,9265	2P ¹	3,2658	1	3,2658	1,212	1,1 ± 0,1
HS	1S ¹	8,566	1	8,566	3P ²	3,3029	1	3,3029	2,384	2,33 ± 0,01
SF	2P ²	3,3029	1	3,3029	2P ⁵	13,463	1	13,463	2,652	2,5 ± 0,5
ScH	4P ²	2,7405	1	2,7405	1S ¹	8,566	1	8,566	2,075	2,04 2,21
NS	2P ¹	3,0946	1	3,0946	3P ¹	1,9265	1	1,9265	1,187	1,3 ± 0,3
PO	3P ³	3,7713	1	3,7713	2P ¹	3,2658	1	3,2658	1,750	1,6
PH	3P ¹	1,7696	1	1,7696	1S ¹	8,566	1	8,566	1,467	1,6
PH ₂	3P ¹	1,7696	1	1,7696	1S ¹	2 × 8,566	1	2 × 8,566	1,604	1,6
PCl ₂	3P ³	3,7713	1	3,7713	3P ⁵ 3S ²	2 × 13,299	1	2 × 13,299	3,344	3,26 ± 0,45
AsH ₂	4P ¹	1,4551	1	1,4551	1S ¹	2 × 4,5312	1	2 × 4,5312	1,254	1,26
CN	2P ²	4,3554	1	4,3554	2P ³ 2S ²	15,804	1	15,804	3,419	3,21
SiH	3P ²	2,0291	1	2,0291	1S ¹	4,5312	1	4,5312	1,402	1,42
PbCl	6P ²	1,7256	1	1,7256	3P ¹	2,1365	1	2,1365	0,955	1,0 ± 0,02
PbBr	6P ²	1,7256	1	1,7256	4P ¹	1,7113	1	1,7113	0,869	0,9 ± 0,02
BO	2P ¹ 2S ²	5,982			2P ¹	3,2658			2,101	2,12
BO	2P ¹ 2S ²	5,982			2P ²	5,982			2,968	3,1 ± 0,1

Таблица 16

Зависимость между ковалентными и вандерваальсовыми радиусами

Период	$\gamma = \left(\frac{n^*+1}{n^*} \right)$	Атом	r_k (Å)	r_r (Å)	R_v (Å)
I	$\left(\frac{1+1}{1} \right)^2 = 4$	H	0,28	1,120	1,10
II	$\left(\frac{2+1}{2} \right)^2 = 2,25$	B	0,80	1,800	1,75
		C	0,77	1,733	1,70
		N	0,70	1,575	1,50
		O	0,66	1,485	1,40
		F	0,64	1,440	1,35
III	$\left(\frac{3+1}{3} \right)^2 = 1,778$	Si	1,11	1,974	1,95
		P	1,10	1,956	1,90
		S	1,04	1,849	1,85
		Cl	1,0	1,778	1,80
IV	$\left(\frac{3,7+1}{3,7} \right)^2 = 1,6136$	Ga	1,25	2,017	2,0
		Ge	1,24	2,001	2,0
		As	1,21	1,952	2,0
		Se	1,17	1,888	2,0
		Br	1,20	1,936	1,95
V	$\left(\frac{4+1}{4} \right)^2 = 1,5625$	Sn	1,40	2,188	2,20
		Sb	1,41	2,203	2,20
		Te	1,37	2,141	2,20
		I	1,35	2,109	2,15

ГЛАВА 7. СРОДСТВО К ЭЛЕКТРОНУ И ЭЛЕКТРООТРИЦАТЕЛЬНОСТЬ КАК ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ КРИТЕРИИ ФОТОЭФФЕКТА

Аннотация. Получена корреляционная зависимость сродства к электрону и электроотрицательности от энергетических критериев фотоэффекта.

Дана методология оценки энергии валентной зоны и зоны проводимости фотоэффекта на основе применения представления о пространственно-энергетическом параметре (Р-параметре). Проведены многочисленные расчеты, результаты которых согласуются с экспериментальными данными.

Введение

«Фотоэлектрическим эффектом (фотоэффектом) называют процесс взаимодействия электромагнитного излучения с веществом, в результате которого энергия фотонов передается электронам вещества» [27]. Различают внешний и внутренний фотоэффекты, фотоионизацию.

Основным уравнением внешнего фотоэффекта является уравнение Эйнштейна, из которого следует, что для каждого вещества существует минимальная граница начала фотоэффекта (красная граница): $h\nu_0 = A$

Здесь h – постоянная Планка, ν – частота, A – работа выхода электронов.

Разность энергии между нижним уровнем зоны проводимости и верхним уровнем валентной зоны называют запрещенной зоной (ΔE).

Если $h\nu_0 \geq \Delta E$, то возможен переход электронов из заполненной валентной зоны в зону проводимости. Установлено [37,41], что валентную зону можно характеризовать через энергию сродства к электрону (χ_c), например в полупроводниках:

$$\Delta E + \chi_c \approx h\nu_0 \quad (53)$$

Анализу экспериментальных данных по оценке энергетических характеристик фотоэффекта посвящено много исследований, обзор которых дан, например, в [42,43].

Проблема зависимости таких критериев фотоэффекта от первичных характеристик свободных атомов нуждается в дальнейшем обсуждении.

С этой целью в данном исследовании используется представление о пространственно-энергетическом параметре (Р-параметре).

7.1. Сродство к электрону как энергетический критерий валентной зоны при фотоэффекте

«Сродство к электрону – это способность атомов и молекул присоединять добавочный электрон и превращаться в отрицательный ион» [44].

Мерой этого процесса является энергия (χ_c), равная разности энергий атома (молекулы) в основном состоянии и энергии состояния соответствующего отрицательного иона. Как показали исследования, приведенные в работе Соммера А.Х. [41] сумма такой величины χ_c и ширины запрещенной зоны ΔE может дать значение энергии крайней границы фотоэффекта – уравнение (53).

То есть значение сродства к электрону (χ_c) в этих случаях характеризует валентную зону структуры. Но величина χ_c , как показали расчеты, имеет простую и прямую зависимость от Р-параметра, например, для парных взаимодействий и для бинарных систем по уравнению:

$$\frac{1}{\chi_c} \approx \frac{1}{P_c} = \frac{1}{P'_9} + \frac{1}{P''_9} \quad (54)$$

Где P'_9 и P''_9 - P_9 - параметры внешних валентных орбиталей компонентов:

$$\text{где:} \quad P_9 = \frac{P_0}{kR} \quad (54a)$$

Здесь: k - коэффициент расстояния межструктурного взаимодействия, обычно равный 1, иногда - 2.

Результаты расчетов по уравнению (54) приведены в таблице 17.

Сопоставление величин электронного сродства по данным Соммера А.Х. (χ_c) и в сравнении с другими литературными данными (χ) например по [35,36] показывает принципиальное численное различие χ от χ_c .

Из уравнения (33) формально следует, что:

$$P_i = \frac{P}{n+1} \quad (33a)$$

Применимо к каждому элементу Системы, учитывая экранирующие эффекты, при переходе от одного периода к другому можно предположить, что:

$$P_i = \frac{P}{(n^x + 1)} \rightarrow P_9 = \frac{P_0}{kR(n^x + 1)} \quad (55)$$

где n^x - эффективное главное квантовое число.

Расчеты показали (таблица не приводится), что величина χ по [35,36] соответствует среднему значению P_9 -параметра одного валентного электрона данного атома по уравнению:

$$\chi \approx P = \frac{P_0}{NkR(n^x + 1)} \quad (55a)$$

где N - число учитываемых валентных электронов. Тип валентного состояния структуры и число его валентно активных электронов при каждом методе исследования могут отличаться. Отсюда – различия в литературных данных по [35, 36] и тем более нет прямой связи таких величин χ с величиной χ_c по [37].

Таким образом, для оценки энергии валентной зоны можно реально использовать только те значения P_c - и P_v -параметров, которые используются в уравнениях (54) и (54а).

7.2. Электроотрицательность как энергетический критерий зоны проводимости при фотоэффекте

Понятие электроотрицательности (X) ввёл Полинг в 1932 году как количественную характеристику способности атомов и молекул притягивать к себе электроны. В настоящее время для расчета электроотрицательности существует много методов (термохимический, геометрический, спектроскопический и т.д.), дающих согласующиеся результаты. Само понятие электроотрицательности нашло широкое практическое применение в химических и кристаллохимических исследованиях.

Учитывая идею Сандерсэна о том, что X изменяется симбатно электронной плотности атома и исходя из физического смысла P -параметра, как прямой характеристики электронной плотности в атоме на расстоянии r_i от ядра, полагаем, что электроотрицательность для низшей устойчивой степени окисления элемента равна эффективной усредненной энергии одного валентного электрона:

$$X \approx \frac{\sum P_0}{3NR} \quad (56)$$

Здесь: $\sum P_0$ – сумма P_0 -параметров для N -валентных электронов, R - радиус атома (в зависимости от типа связи – металлический, кристаллический или ковалентный), а величина P_0 -параметра рассчитывается через энергию связи электронов по [5]. Цифра 3 в знаменателе уравнений (56) отражает тот факт, что вероятное межатомное взаимодействие рассматривается только по линии связи, то есть на одном из трех пространственных направлений.

Для оценки энергии зоны проводимости элементов, равной $h\nu_0$, использовали соотношения:

$$\frac{\sum P_0}{NR} = P \approx h\nu_0 \approx 3X \quad (57)$$

Результаты расчетов, приведенные в таблице 18, свидетельствуют о том, что имеется удовлетворительное совпадение всех трех энергетических критериев фотоэффекта: P , $3X$ и $h\nu_0$.

Энергетические характеристики валентной зоны и зоны проводимости

Структура	Системы	Орбиталь	$P'_s(\text{эВ})$	Орбиталь	$P''_s(\text{эВ})$	$P_c(\text{эВ})$	$\chi(\text{эВ})$ [37,41]	$\Delta E(\text{эВ})$ [37,41]	$P_c + \Delta E$ (эВ)	$h\nu_0(\text{эВ})$ [37,41]
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
Si	Si-Si	3P ²	8,1164	3P ²	8,1164	4,058	4	1,10	5,158	5,10
Ge	Ge-Ge	4P ²	8,6849	4P ²	8,6849	4,3424	4,2	0,7	5,032	4,9
Se	Se-Se	4P ¹	7,3343	4P ¹	7,3343	3,667	3,7	2,3	5,967	6,0
Te	Te-Te	5P ²	9,5118	5P ²	9,5118	4,756	4,6	0,3	5,056	4,9
LiF	Li-F ⁻	2S ¹	2,2419	2P ¹	4,9887	1,5468	1	12	13,547	13
LiI	Li-I ⁻	2S ¹	2,2419	5P ¹	4,4516	1,491	1,4	5,9	7,4304	7,3
NaI	Na-I ⁻	3S ¹	2,4357	5P ¹	4,4516	1,5743	1,5	5,8	7,374	7,3
KI	K-I ⁻	4S ¹	2,0547	5P ¹	4,4516	1,4058	1,1	6,2	7,6058	7,3
RbI	Rb-I ⁻	5S ¹	2,1625	5P ¹	4,4516	1,455	1,2	6,1	7,355	7,3
CuI	Cu-I	4S ¹	5,5438	5P ¹	7,2545	3,1424	3	3	6,1424	6
AgCl	Ag-Cl	5S ¹	4,6889	3P ¹	8,5461	3,028	3	3	6,028	6
AgBr	Ag-Br	4d ¹	6,7946	5P ¹	8,0430	3,683	3,5	2,5	6,183	6
BaNiO ₃	Ba-Ti	6S ²	4,5164	4S ²	6,8108	2,6767				
	(BaTi)-O ₃	6S ² 4S ²	2,6767	2P ²	3 × 17,967	2,5501	2,6	2,7	5,250	5,30
BaO	Ba=O	6S ¹	2,8854/2	2P ¹	9,7979/2	1,114	1,3	3,7	4,814	5
Bi ₂ Te ₃	Bi-Te	6P ³	12,043	5P ²	9,5118	5,3145	5,2	0,10	5,4145	5,3
GaSb	Ga-Sb	4P ¹ 4S ²	14,935	5P ¹	5,5699	4,057	4,1	0,7	4,757	4,8
GaAs	Ga-As	4P ¹ 4S ²	14,935	4P ¹	5,5918	4,068	4,1	1,4	5,468	5,5
InSb	In-Sb	5S ² 5P ¹	15,028	5P ¹	6,5519	4,563	4,6	0,2	4,763	4,8
InAs	In-As	5S ² 5P ¹	15,028	4P ¹	6,8388	4,7001	4,9	0,4	5,100	5,3
InP	In-P	5S ² 5P ¹	13,157	3P ¹	7,0785	4,602	4,4	1/3	5,902	5,7
CdSe	Cd-Se	5S ²	7,5891	4P ¹	7,3343	3,7297	4	3	6,7297	7
CdS	Cd-S	5S ²	7,5891	3P ¹	7,7061	3,8235	3,8	2,4	6,2235	6,2
	Cd-S	5S ²	7,5891	3P ²	13,215	4,8206	4,8	2,4	7,2206	7,2
CdTe	Cd-Te	5S ²	7,5891	5P ²	9,5118	4,2212	4,4	1,5	5,7212	5,9

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
MgO	Mg=O	3S ¹	3,6616/2	2P ¹	9,7979/2	1,3327	1	8,7	9,2462	<10
SiC	Si-C	3P ²	8,1164	2P ²	13,066	5,0064	4,8	2,2	7,2064	7
SiC	Si-C	3P ¹	5,7036	2P ²	13,066	3,9704	4,1	2,9	6,8704	7
MgSb ₂	Mg-Sb	3S ²	5,4867	5P ¹	6,5519	2,9861	3	0,8	3,7862	3,8
HgSe	Hg-Se	6S ²	7,5538	4P ¹	9,4188	4,1920	4,40	0,7	4,8920 5,1382	5,1
Rb ₂ Te	Rb-Te-Rb	5S ¹	2,1625/2	5P ¹	5,4055/4	0,6007	<0,5	3,3	3,900	3,7
PbS	Pb-S	6P ²	8,9733	3P ¹	7,7061	4,146	<4,2	0,4	4,546	4,6
PbTe	Pb-Te	6P ²	7,6914	5P ²	11,603	4,625	4,7	0,3	4,925	5
CsAu	Cs-Au	6S ¹	2,0757	6S ¹	4,9056	1,4584	1,4	2,6	4,058	4
Cs ₂ Te	Cs-Te-Cs	6S ¹	2,0757	5P ¹	5,4055/4	0,587	<0,5	3,3	3,887	3,5

При этом отклонения в расчетах от общепринятых значений электроотрицательности по Бацанову [38] и Оллреду-Рохову [45] не превышают в большинстве случаев (2-5)%.

Между понятиями сродство к электрону (χ) и электроотрицательностью (X) существенное различие сводится к следующему.

Так как сродство к электрону равно разности энергий системы атом-ион, то такой процесс можно определить как взаимодействие разноименно заряженных подсистем и рассчитывать χ в случае бинарных и более сложных структур по принципу сложения обратных значений соответствующих энергетических величин.

Для понятия электроотрицательности в общем случае рассматривается процесс взаимодействия свободных атомов, и поэтому в случае сложных систем здесь может применяться принцип алгебраического сложения соответствующих энергетических параметров по уравнению:

$$P = \left(\frac{P_0}{kNR}\right)_1 + \left(\frac{P_0}{kNR}\right)_2 + \dots \approx h\nu_0 \quad (58)$$

Или:
$$P = \sum \frac{P_s}{kN} \approx h\nu_0 \quad (59)$$

Расчеты по уравнению (59), приведенные в таблице 19, указывают на удовлетворительное совпадение расчетных и литературных данных.

Электроотрицательность (X) есть стабильная характеристика атома (или радикала), а величина P_s -параметра зависит не только от квантовых чисел валентной орбитали, но и от длины связи и вида связи. То есть P_s -параметр является объективной и наиболее дифференцированной энергетической характеристикой атомной структуры, которую можно использовать для оценки энергетических критериев фотоэффекта.

Выводы

1. Реализована методология оценки энергии валентной зоны и зоны проводимости фотоэффекта на основе применения представления о пространственно-энергетическом параметре.

2. Получена корреляционная зависимость сродства к электрону и электроотрицательности от энергетических критериев фотоэффекта.

Энергетические характеристики зоны проводимости элементов

Элемент	Орбиталь	P_z (эВ)	n	$\frac{P_z}{n}$ (эВ)	$\left\langle \frac{P_z}{n} \right\rangle$ (эВ)	3X [39]	3X [46]	λ (Å) [37]	$h\nu$ (эВ) [37]
Mg	3S ¹	3,6618	1	3,6618		3,66	3,69	3350	3,7016
Zr	5S ² 4d ²	14,684	4	3,6708		3,84	3,66	3300	3,757
Ti	4S ¹ 3d ¹	8,0719	2	4,036		3,81	3,96	3150	3,936
Ta	6S ²	7,8118	2	3,9059			3,99	3080	4,025
Cd	5S ¹	4,4806	1	4,4806	<4,1375>		4,38	2920	4,246
	5S ²	7,5891	2	3,7946					
Bi	6P ³	14,516	3	4,8387	<4,4265>		4,62	2870	4,3195
	6P ³	12,043	3	4,0143					
Mo	5S ¹	4,620	1	4,620		4,44	4,380	2850	4,3498
Cr	4S ²	8,2953	2	4,1477	<4,3269>	4,320	4,440	2840	4,3651
	4S ² 3d ¹	13,518	3	4,506					
W	6S ¹	4,8949	1	4,8949	<4,5278>	(5,04)	4,95	2700	4,5915
	6S ²	4,3214	2	4,1607					
Fe	3d ²	9,5579	2	4,7790	<4,5938>	(5,04)	4,92	2680	4,6257
	4S ² 3d ¹	13,226	3	4,4087					
Ni	3d ¹	4,9048	1	4,9048	<4,7398>		(5,25)	2550	4,8616
	4S ² 3d ²	18,299	4	4,5748					
Pt	6S ¹ 5d ¹	12,595	2	6,2975		5,73	(5,99)	2000	6,1985
Si	3P ² 3S ²	19,841	4	4,960		4,98	(5,22)		5,10
Ge	4P ²	9,7350	2	4,868		5,16	4,98		4,90
Se	4P ²	12,680	2	6,340		6,24	6,03		6,0
Te	5P ²	9,5118	2	4,756			(5,34)		4,90

Энергетические характеристики зоны проводимости бинарных систем

Структура	Первый компонент			Второй компонент			$\sum \frac{P}{n}$ (эВ)	$h\nu$ (эВ) [37]
	Орбиталь	P'_j (эВ)	n_1 (N_1)	Орбиталь	P''_j (эВ)	n_2 (N_2)		
1	2	3	4	5	6	7	8	9
LiF	2S ¹	2,2419	1	2S ² 2P ⁵	79,388	7	13,582	13
LiI	2S ¹	2,2419	1	5P ⁵	24,109	5	7,064	7,3
NaI	3S ¹	2,4357	1	5P ⁵	24,109	5	7,257	7,3
KI	4S ¹	2,3313	1	5P ⁵	24,109	5	7,153	7,3
RbI	5S ¹	2,4158	1	5P ⁵	24,109	5	7,2376	7,3
CsI ⁻	6S ¹	2,0757	1	5P ¹	4,4516	1	6,5273	6,4
Cu=I	4S ²	8,9406	2(2)	5P ¹	7,2545	1,(2)	5,862	6
Ag=Br	4d ¹	6,7946	1,(2)	4P ⁵	26,809	5,(2)	6,078	6
Ag=Cl	4d ¹	6,6150	1(2)	3P ⁵	27,196	5,(2)	6,027	6
Ba-Ti	6S ²	4,5164	2	4S ²	6,5708	2	(5,5436)	5,3
(Ba-Ti)≡O	6S ² 4S ²	5,5436/3	(3)	2P ¹	9,7979	(3)	5,112	5,3
Ba=O	6S ²	2,8854	2	2P ²	17,967	4	5,213	5
Br ₂ Te ₃	6P ³	14,516	3(2)	5P ²	11,603	2(2)	5,321	5,3
GaSb	4P ¹ 2S ²	14,935	3,(2)	5P ³	14,755	3,(2)	4,948	4,8
GaAs	4P ¹ 4S ²	14,395	3,(2)	4P ³ 4S ²	28,737	5,(2)	5,303	5,5
InSb	5S ² 5P ¹	15,028	3,(2)	5P ³	14,75	3,(2)	4,96	4,8
InAs	5S ² 5P ¹	15,028	3,(2)	4P ³ 4S ²	28,737	3,(2)	5,378	5,3
InP	5S ² 5P ¹	15,028	3(2)	3S ² 3P ³	32,403	5,(2)	5,749	5,7
CdSe	5S ²	7,5891	2	4P ²	12,880	4	7,015	7
CdS	5S ²	7,589	2	3P ²	13,215	4	7,098	7,2
CdS	4d ¹ 5S ²	10,990	3	3P ⁴	20,553	4,(2)	6,230	6,2
CdTe	4d ¹ 5S ²	10,990	3	5P ⁴	19,032	4,(2)	6,042	5,9
MgO	3S ²	5,4867	2	2P ¹	10,9598	2	8,233	<10
SiC	3S ² 3P ²	22,724	4,(2)	2S ² 2P ²	31,929	4(2)	6,832	7
HgSe	6S ²	7,5538	4	4P ²	12,680	4	5,058	5,10
HgTe	6S ²	7,5538	4	5P ²	11,603	4	4,789	4,5
Rb ₂ Te	5S ¹	2,1625	(2)	5P ¹	5,4055	(2)	3,784	3,7

1	2	3	4	5	6	7	8	9
PbS	$6P^2$	7,6914	2,(2)	$3P^4$	20,553	4,(2)	4,492	4,6
PbTe	$6P^2$	8,9733	2(2)	$5P^2$	11,603	2,(2)	5,144	5
CsAu	$6S^1$	2,0757	(2)	$6S^15d^1$	12,340	2,(2)	4,123	3,4
Cs ₂ Te	$6S^1$	2,0757	(2)	$5P^2$	9,5118	2(2)	3,414	3,5

ГЛАВА 8. ПРОСТРАНСТВЕННО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ФОТОСИНТЕЗА

Аннотация. Дано применение методологии Пространственно-энергетических взаимодействий (Р-параметра) к основным этапам фотосинтеза. Рассчитаны их энергетические характеристики.

Введение

Фотосинтез – процесс преобразования электромагнитной энергии солнечных лучей в энергию химических связей органических веществ, необходимых для жизнедеятельности ... [46].

Это – единственный процесс природы, посредством которого органический мир получает запас свободной энергии и обеспечивает химической энергией все биоорганизмы. Со времен открытия явления фотосинтеза Д.М. Пристли (1771-1850 г.г.) исследования прошли через несколько важных этапов. Первые работы, связанные с энергетикой фотосинтеза, относятся к 1850-1900 г.г. (Р. Майер, Д.Г. Стокс, Ю. Сакс). Применение физиологических концепций – в 1900-1950 г.г. (М.С. Цвет, А.А. Рихтер, У. Арнольд). Дальнейшее развитие по настоящее время биофизикохимических аспектов фотосинтеза дали его современную модель и прояснили в том числе: путь углерода при фотосинтезе (М. Калвин), концепцию двух фотосистем (Р. Эмерсон), структуру реакционного центра (И. Дайзинхофер, Х. Михель, Р. Хубер) и т.д.

Основа фотосинтеза – последовательная цепь окислительно-восстановительных реакций, в ходе которых осуществляется перенос электронов от донора-восстановителя к акцептору-окислителю с образованием восстановленных соединений (углеводов) и выделением кислорода.

Известно, что энергия возбуждения для сложных органических молекул типа хлорофилла идет в течение 10^{-8} - 10^{-9} с и может быть запасена лишь на незначительные доли секунды. Но при фотосинтезе энергия поглощенного кванта света запасается надолго (от минут и часов до миллионов лет). Запас энергии здесь происходит в молекулярной форме в виде богатых энергией химических связей в сложных органических структурах. Поэтому энергетика фотосинтеза может быть представлена на основе анализа изменений энергий химических связей молекулярных структур в динамике всех основных этапов фотосинтеза.

С этой целью в данной работе используется методика пространственно-энергетических взаимодействий (Р-параметра).

Структурные и межатомные взаимодействия, несомненно, имеют электронную природу. Так учет степени заполнения электронами валентных состояний атомов составляет основу метода валентных связей в химии и численно выражается через кулоновское электростатическое взаимодействие.

Не менее важными являются обменно-внедренческие структурные взаимодействия, определяющие изоморфизм, растворимость компонентов в твердых, жидких и молекулярных средах [18].

Значения P_0 - и P_{Σ} -параметров некоторых элементов, рассчитанные по уравнениям (11,12,20), представлены в табл.5,6,20.

Таблица 20

P -параметры атомов, рассчитанные через энергию связи электронов

Атом	Валентные электроны	W (эВ)	r_i (Å)	q^2_0 (эВÅ)	P_0 (эВÅ)	R (Å)	P_0/R (эВ)	
Ca	4S ¹	5,3212	1,690	17,406	5,929	1,97	3,0096	
	4S ²					8,8456	1,97	4,4902
	4S ²						$R^{2+}=1,00$	8,8456
	4S ²						$R^{2+}=1,26$	7,0203
S	3P ¹	11,901	0,808	48,108	6,0143	1,04	7,7061	
	3P ²	11,901	0,808	48,108	13,740	1,04	13,215	
	3P ⁴	11,904	0,808	48,108	21,375	1,04	20,553	
	3S ¹	23,933	0,723	64,852	13,659	1,04	13,134	
	3S ²	23,933	0,723	64,852	22,565			
	3S ² +3P ⁴				43,940	1,04	42,250	
Se	4P ¹	10,963	0,909	61,803	8,5811	1,17	7,3343	
	4P ²					15,070	1,17	12,880
	4P ²					15,070	1,6	9,4188
	4P ²					15,070	1,14	13,219
	4P ⁴			24,213	1,17	20,710		
	4P ⁴				1,6	15,133		
	4S ¹	22,787	0,775	85,678	14,642	1,17	12,515	
	4S ²					25,010	1,17	21,376
	4S ² +4P ⁴					49,214	1,17	42,066
4S ² +4P ⁴	49,214					1,6	30,759	
P	3P ¹	10,659	0,9175	38,199	7,7864	1,10	7,0785	
	3P ¹					$R^3=1,86$	$P_{\Sigma}=4,1862$	
	3P ³	10,659	0,9175	38,199	16,594	1,10	15,085	
	3P ³					$R^3=1,86$	8,9215	
	3S ²	18,951	0,803	50,922	19,050	1,10	17,318	
	3S ² +3P ³				35,644	1,10	32,403	
Mg	3S ¹	6,8859	1,279	17,501	5,8568	1,60	3,6618	
	3S ²					8,7787	1,60	5,4867
						$R^{2+}=1,02$	8,6066	
Mn	4S ¹	6,7451	1,278	25,118	6,4180	1,30	4,9369	
	4S ²					10,223	1,30	7,8638
	3d ¹	17,384	0,3885	177,33	6,5058	1,30	5,0043	
	4S ¹ +3d ¹					12,924	1,30	9,9414
	4S ² +3d ²					22,774	1,30	17,518
	4S ² +3d ⁵					38,590	1,30	29,684
Na	3S ¹	4,9552	1,713	10,058	4,6034	1,89	2,4357	
						$R^+_{и}=1,18$	3,901	
						$R^+_{и}=0,98$	4,6973	
Cl	3P ¹	13,780	0,7235	59,849	8,5461	1,00	8,5461	
						$R^+_{и}=1,81$	4,7216	
K	4S ¹	4,0130	2,612	10,993	4,8490	2,36	2,0547	
						$R^+_{и}=1,45$	3,344	
	4S ² (*)				7,2115	2,36	3,0557	
						$R^+_{и}=1,45$	4,9734	

Были установлены следующие пространственно-энергетические принципы, определяющие характер структурных пространственно-энергетических взаимодействий:

1. Полное (сто процентное) изоморфное взаимодействие происходит при незначительной относительной разности Р-параметров валентных орбиталей взаимозаменяющихся атомов (в пределах 4-6%)
2. Р-параметр наименьшего значения определяет ту орбиталь, которая, главным образом, ответственна за изоморфизм.
3. Качественно характер изоморфизма определяется геометрическим сходством форм орбиталей, ответственных за изоморфизм. При этом, чем более схожи протяженности, траектории и углы наклона таких орбиталей, тем более совершенен изоморфизм.

По степени изоморфного сходства взаимодействующих структур их можно классифицировать на три вида (I, II, III), представленные для некоторых случаев в табл. 21.

8.1. Фотосинтез. Начальная стадия

В составе хлорофилла в центральной полости всей структуры находится атом магния, который четырехкоординирован с атомами азота. Само порфирированное кольцо хлорофилла расположено в водной среде. Каждый центральный атом Mg, образуя хелатное соединение, имеет две связи по донорно-акцепторному механизму и две ковалентные связи. Две молекулы бактериохлорофилла расположены близко друг к другу (около 3 Å) и образуют компонентную структуру – димер хлорофилла. В динамике структурных перестановок все четыре связи каждого атома Mg становятся эквивалентными [47]. Все это позволяет предположить, что суммарный эффективный Р_э-параметр Mg будет примерно в два раза больше, чем от 2S²-орбитали (5,4867x2=10,973 эВ).

На первом этапе фотосинтеза в системе ФС-2 под действием излучения с энергией $h\nu$ в структурированных молекулах воды могут измениться размерные характеристики атомов водорода от боровского радиуса (0,529 Å) до – атомного («металлического») – 0,46 Å, что соответствует получению водородом Р_э-параметра, равного 10,432 эВ, близкого к значению Р_э-параметра 2Mg. Отметим так же, что общее изменение в шкале потенциалов фотосинтеза ФС-2 примерно равно 1,5 эВ, а разность данных Р-параметров атомов водорода равна 1,37 эВ.

Остальные атомы водорода с «боровским» Р_э-параметром, равным 9,0624 эВ, имеют близкие значения с Р_э-параметрами 2P¹-орбиталей атомов азота, окружающих магний.

Не менее важны и другие данные: исходная величина Р_э-параметра 2S²-орбитали атома магния дает с Р_э-параметра (табл. 21) радикала (O-H) $\alpha=8,24\%$ и $\rho \approx 77-82\%$. Это значение ρ может возрасти и до 100 % при воздействии светового излучения за счет небольших изменений размерных характеристик

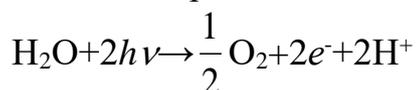
атомов-компонентов. Абсолютная разность этих Р-параметров равна 0,43 эВ, что соответствует изменениям в шкале потенциалов при синтезе АТФ.

Общее суммарное пространственно-энергетическое воздействие на связь

Н-О-Н атомов магния и азота (табл. 21) приводит к возможности разрыва этой связи с выделением свободных атомов водорода и кислорода.

Этот начальный процесс завершается участием в нем марганцесодержащей системы, связанной с белками реакционного центра ФС-2. В марганцевом кластере (двухядерном или четырехядерном) под действием излучения может происходить структурная перестройка [48,49] от одновалентного состояния (4,9369 эВ – это близко к исходным значениям Р_э-параметра Mg) к двухвалентному (9,9414 эВ) и далее – к четырехвалентному состоянию (17,518 эВ).

Все это обеспечивает ферментативное воздействие Mn на связь Н-О-Н как на атомы водорода и кислорода, так и на гидроксильную группу в целом. Это подтверждается в частности примерным равенством Р_э-параметров двух- и четырехвалентного Mn с Р_э-параметрами 2Р¹ и 2Р²-орбиталей атомов кислорода (табл. 21). Таким образом, индуцированные светом все перечисленные выше взаимодействия и структурные перегруппировки приводят к образованию окисленного хлорофилла по реакции [50]:



с выделением двух электронов и двух протонов. Эти электроны, оторванные от воды, через цепь «темновых» реакций поступают далее на ФС-1, использующую их в следующих стадиях фотосинтеза для восстановления НАДФ⁺ до НАДФН, которое осуществляется так же и с помощью системы протонных переносов.

Для двойной связи 2Р¹-орбитали атом углерода имеет Р_э-параметр – (8,5043 эВ), – близкий к Р_э-параметру атома водорода (табл. 5). Поэтому один из освободившихся атомов водорода присоединяется к двойной связи С=С, имеющейся в НАДФН, с образованием одинарной связи с атомом углерода [49].

8.2. Фосфорилирование

Считается [47,51], что направленный перенос протонов служит источником энергии при фосфорилировании. Между числами перенесенных протонов и электронов выявлены определенные стехиометрические соотношения. Так при переносе электронов (по всей системе транспорта) образуются молекулы АТФ.

Очевидно, энергия фосфорилирования АТФ может оцениваться и через систему электронных переносов.

Перенос электронов, в частности, приводит к тому, что молекулы фосфорной кислоты, входящие в АТФ, НАДФ и в НАДФН, имеют в своем

составе атомы кислорода в виде O^- . Пространственно-энергетические взаимодействия (в том числе-изоморфные) объективно проявляют себя и при одинаковой, и при противоположной электростатической зарядности атомов-компонентов. Такие взаимодействия могут быть и между двумя разнородными атомами, если только их P_3 -параметры примерно равны, а геометрические формы орбиталей – одинаковы или схожи.

Энергия излучения $h\nu$ в ФС-1 способствует, по-видимому, изменению размерных характеристик атомов фосфора и кислорода от ковалентных до анионных. Поэтому происходит распространение P_0 -параметров свободных атомов фосфора и кислорода на расстоянии их анионных радиусов 1,86 Å и 1,40 Å соответственно. Это дает близость значений их P_3 -параметров: $\alpha=5,19\%$ для $2P^3$ -орбитали фосфора с $2P^2$ -орбиталями кислорода (табл. 21).

Такое примерное равенство P_3 -параметров и геометрическое сходство форм орбиталей атомов-компонентов свидетельствует о том, что реальная степень их взаимодействия $\rho=100\%$, что и обеспечивает энергию образования макроэргической связи Р-О. Тогда энергией фосфорилирования можно считать энергию связи атомов фосфора и кислорода от двух разных молекул фосфорной кислоты, необходимой для самого структурного образования при фосфорилировании.

Для расчета энергий связи или энергий восстановления молекул при фотосинтезе (E) была использована методика, ранее апробированная [52] на 68 бинарных и более сложных соединениях по уравнению:

$$\frac{1}{E} = \frac{1}{P_c} = \frac{1}{\left(P_3 \frac{N}{K}\right)_1} + \frac{1}{\left(P_3 \frac{N}{K}\right)_2} \quad (60)$$

где N – средняя кратность связи, K – коэффициент гибридизации, который обычно равен числу учитываемых валентных электронов атома.

В качестве размерной характеристики атомов может использоваться или половина межъядерного расстояния (для бинарной связи) одноименных атомов, или – атомный, ковалентный и ионный радиусы (в зависимости от типа связи).

Таблица 21

Структурные взаимодействия

Атомы, молекулы, радикалы	1 компонент		2 компонент		α (%)	ρ (мол%)	Вид ПЭВ
	Орбитали	Рэ, Рс (эВ)	Орбитали	Рэ, Рс (эВ)			
O-P	2P ²	8,470*	3P ³	8,9215*	5,19	100	I
O-P	2P ¹	4,6188*	3P ¹	4,1862*	9,83	60-65	I
Mg ²⁺ -H	3S ²	8,6066	1S ¹	9,0624	5,16	100	I
H ₂ O-CH ₂	1S ¹ -2P ²	11,788	2S ¹ 2P ³ _r -1S ¹	11,125	5,79	100	II
C-O	2S ¹ -2P ¹	17,435	2P ²	17,967	3,01	100	I
CO-OH	2P ² -2P ²	8,4416	2P ² -1S ¹	8,7712	7,51	90-95	II
CO-H ₂ O	2S ¹ 2P ¹ _r -2P ²	9,3252	1S ¹ -2P ²	9,0226	2,21	100	II,III
CH ₂ -CO ₂	2S ² 2P ² -1S ¹	16,531	2S ¹ 2P ³ _r -2P ²	16,785	1,53	100	III
2Mg-H	3S ² (3S ²)*	10,973	1S ¹	10,432	5,05	100	I
Mn-H	4S ¹ 3d ¹	9,9414	1S ¹	10,432	4,82	100	I
Mn-O	4S ¹ 3d ¹	9,9414	2P ¹	9,7979	1,45	100	II
Mn-O	4S ² 3d ²	17,518	2P ²	17,967	2,53	100	II
N-H	2P ¹	9,4166	1S ¹	9,0624	3,83	100	II
Mn-OH	4S ¹	4,3969	2P ¹ -2S ¹	4,7080	4,75	100	II,III
Mg-(O-H)	2S ²	5,4867	2P ² -1S ¹	5,0575	8,24	77-82	II
K ⁺ -H ⁻	4S ¹	3,344	1S ¹	3,525	5,27	100	I
Fe-S	4S ² 3d ¹	13,226	2P ²	13,215	0,08	100	II
Na ⁺ -H ⁻	3S ¹	3,901	1S ¹	3,525	10,1	55-60	I

Таблица 22

Энергии связи и восстановления молекул при фотосинтезе (эВ)

Атомы, структуры, орбитали	1 компонент		2 компонент		3 компонент		Расчет		E по [47,48,35]	Примечания
	P _э (эВ)	N/K	P _э (эВ)	N/K	P _э (эВ)	N/K	E	0,83E		
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
P-O	4,1862	1/5	4,6188	1/6	–	–	0,400	0,33	0,34-	Фосфорилирование
3P ¹ -2P ¹	4,1862	1/5	4,755	1/6	–	–	0,405	0,34	0,35	
P-O	8,9215	1/5	8,470	1/6	–	–	0,77	0,64	0,67-	ΔG АТФ
3P ² -2P ²									0,59	
P...O	32,403	1,5/5	70,854	1,5/6	–	–	6,277			Свободная молекула PO
3S ² 3P ³ -2S ² 2P ⁴			63,339	1,5/6	–	–	6,024		6,14	
							<6,15>	–		
P=O	15,085	2/3	20,042	2/2	–	–	6,697	–	6,504	В молекуле P ₄ O ₁₀
3P ³ -2P ²										
C-H	13,066	1/2	9,0624	1/1	–	–	3,797	–	3,772	
2P ² -1S ¹										
H ₂ O	2•9,0624	1/1	17,967	1/6	–	–	2,570	–	2,476	Распад одной молекулы
1S ¹ -2S ²										
-O-O-	9,7979	1/1	9,7979	1/1	–	–	4,90	–	5,11	
2P ¹ -2P ¹										
O=O	20,048	2/4	20,048	2/4	–	–	5,012	–	5,11	
2P ² -2P ²										
CO ₂	14,581	2/4	2•20,048	2/6	–	–	4,717	–	4,56	Восстановление
2P ² -2P ²										
=C=O	31,929	2/4	20,048	2/2	–	–	8,8874	–		
2S ² 2P ² -2P ²										
C-O	13,066	1/2	17,967	1/2	–	–	3,782	–	3,688	
2P ² -2P ²										
(C=O)-H	31,929	2/4	20,048	2/2	9,0624	1/1	4,487	–	4,553	
(2S ² 2P ² -2P ²)-1S ¹										

Таблица 22 (продолжение)

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
-O-H 2P ² -1S ¹	17,967 17,967	1/2 1/2	17,137 9,0624	1/1 1/1	- -	- -	5,894 4,511	- -	- 4,390	
CO-OH (2S ² 2P ² -2P ²)- (2P ² -1S ¹)	8,8874	1/1	5,894	1/1	-	-	3,544	-	-	
CH ₂ O 2S ² 2P ² -1S ¹ -2P ²	31,929	1,33/4	2,90624	1/1	20,048	2/2	5,025	-	4,96- 5,07	Свободная энергия образования одного моля

Для атомов Р и О были проведены расчеты с учетом анионных расстояний атомных орбиталей: $3P^1$ (фосфор)- $2P^1$ (кислород) и для $3P^3$ (фосфор)- $2P^2$ (кислород). Полученные значения E оказались немного выше экспериментальных, литературных данных (табл. 22). Но реальные энергетические физиологические процессы при фотосинтезе имеют эффективность ниже теоретической, составляя в некоторых случаях около 83 % [47].

Может быть таким образом и учитывается электростатическая составляющая результирующих взаимодействий на анион-анионных расстояниях. Действительно, расчетная величина $0,83E$ практически соответствует экспериментальным значениям энергии связи при фосфорилировании (первая строка табл. 22) и свободной энергии АТФ в хлоропластах (вторая строка табл. 22).

Для сравнения в табл. 22 приведены расчеты энергии связи по той же методике, но на ковалентных расстояниях атомов для свободной молекулы $P...O$ (полуторная связь) и для молекулы $P=O$ в P_4O_{10} (двойная связь).

Полуторная связь оценивалась введением коэффициента $N=1,5$ с использованием среднего значения R_3 -параметра кислорода для одинарной и двойной связей.

Интересно отметить, что расчеты E на ковалентных расстояниях соответствуют экспериментальным данным без введения коэффициента $0,83$.

8.3. Ассимиляция CO_2

Связывание CO_2 происходит в водной среде по реакции карбоксилирования рибулозодифосфата (РуБФ) с образованием 3-фосфоглицериновой кислоты (ФГК) – табл. 23. Молекула воды и радикал $C=O$ на расстояниях молекулярного взаимодействия имеют достаточно близкие значения R_3 -параметров для образования общей структурной группировки типа димерного композита. Суммарный R_3 -параметр молекулы воды и радикала $C=O$ почти равен R_3 -параметру CO_2 и поэтому происходит присоединение молекул CO_2 и H_2O к РуБФ с образованием двух радикалов $COOH$ в ФГК (табл. 23). В ферменте РуБФ-карбоксилаза активную роль выполняют атомы Mg и ионы O^- (5,4867 эВ и 4,755 эВ), R_3 -параметры которых близки к R_3 -параметру радикала $COOH$.

Большая разница в числе атомов взаимодействующих структур говорит за то, что карбоксилаза может выполнять только ферментативную роль, «настроенную» на получение данного конечного продукта ($COOH$).

Пространственно-энергетические характеристики ассимиляции CO₂ (эВ)

Блоки реакций	$\begin{array}{c} \text{РyБФ} \\ \\ \text{—C=O} \end{array} + \text{H}_2\text{O} + \text{CO}_2 \xrightarrow{\text{Mg, РyБФ-карбоксилаза}} \begin{array}{c} \text{ФГК} \\ \\ 2\text{COOH} \end{array} \xrightarrow{\text{НАДФН, АТФ, O}^-} \begin{array}{c} \text{ФГА} \\ \\ 2\text{COH} + \text{O}_2 \end{array} \xrightarrow{\text{АТФ}} \dots \xrightarrow{\text{Mg}} \text{CH}_2\text{O} + \text{O}_2 + \dots$					
P _э	8,4416 9,0226; 17,774;		2x5,1226;	2x4,3705; 17,967x2;		9,060 17,967x2
	↓ 17,464			(8,741)		(7,333)
E	8,8874 2,570 4,717		3,544 3,544	4,487 5,012	5,025 5,012	
E _с	↓ E _{с1} = 1,401		↓ E _{с2} = 1,770	↓ E _{с3} = 2,367	↓ E _{с4} = 2,509	

Расчет: E_{с2}-E_{с1} = 0,37; E_{с3}-E_{с2} ≈ 0,60 E_{с3}-E_{с1} ≈ 0,97
 1 молекула АТФ 2 молекулы АТФ 3 молекулы АТФ (1,06 эВ)

Примечания:

P_э – исходные значения P_э-параметров, для Mg (5,4867), Mg²⁺ (8,6066), для O⁻ (4,755; 4,6188)

E – энергия связи или восстановления

E_с – результирующая энергия связи или восстановления

для групп радикалов или фрагментов: 1/E_с = 1/E₁ + 1/E₂ + ...

Дальнейший сложный путь ассимиляции CO_2 до образования CH_2O идет через ряд промежуточных соединений и реакций (цикл Кальвина). Покажем некоторые результаты расчетов суммарных пространственно-энергетических процессов ассимиляции CO_2 . При восстановлении углерода от CO_2 до уровня структурного образования его в CH_2O происходит перестройка химических связей на всех этапах цикла. Поэтому необходима дополнительная энергия активации от АТФ и НАДФН.

Очевидно так же, что рациональный расчет энергетических затрат необходимо вести с учетом процессов перестройки химических связей, то есть через значения энергии связи – для бинарных структур и энергии восстановления – для более сложных молекул и радикалов (E).

С этой целью по уравнению (60) был проведен расчет величины E для ряда соединений и радикалов при фотосинтезе – табл. 22, 23. Для радикала – $\text{C}=\text{O}$ расчет проведен в двух возможных вариантах активности валентных орбиталей атома углерода. Совпадение расчетных величин E с литературными данными [44,53] получено в пределах 5 % для всех связей ковалентного типа без введения коэффициента 0,83.

Основная часть энергии света запасается растением на этапе восстановления до ФГА. При этом затрагивается 4,56 эВ (на молекулу) – [44,53]. Наши расчеты дают значение энергии восстановления радикала COH , равное 4,487 эВ. Свободная энергия образования одного моля CH_2O по литературным данным [47,44 и др.] составляет 4,96-5,07 эВ. Расчет по методу Р-параметра оценивает эту энергию, равную 5,025 эВ.

Н

В молекуле $\text{O}=\overset{\text{H}}{\text{C}}-\text{H}$ средняя кратность связи атома углерода бралась равной $(2+1+1)/3=1,33$.

Применяя апробированный подход к расчету результирующей энергии связи (или энергии восстановления) структурных подсистем каждого этапа были рассчитаны величины их энергий (табл. 23) – E_C . Известно [47], что движущая энергия цикла до ФГА может составлять 1,06 эВ за счет трех молекул АТФ (на одну молекулу CO_2), причем одна молекула АТФ расходуется в цикле до ФГК. По нашим данным движущая энергия цикла (ΔE_C) равна разности величин E_C для соответствующих этапов:

1) этап CO_2 – ФГК: $\Delta E_C=1,770-1,401=0,369$ эВ

Энергия фосфорилирования одной молекулы АТФ = 0,34-0,35 эВ

2) этап CO_2 – ФГА: $\Delta E_C=2,367-1,401=0,966$ эВ

Энергия фосфорилирования трех молекул АТФ: $0,34 \times 3=1,02$ эВ

Таким образом, метод Р-параметра дает удовлетворительную характеристику энергетики основных этапов цикла ассимиляции CO_2 . Реакция фотодыхания является как бы «конкурентной» к реакции ассимиляции CO_2 . Но и здесь можно выявить близкие значения R_E -параметров взаимодействующих радикалов $\text{C}=\text{O}$ и НСОН с R_E -параметрами атомов кислорода. Как и в реакции ассимиляции фермент РудФ-карбоксилаза «настроен» на образование конечного

продукта СООН. В процессах фотосинтеза и фотодыхания могут участвовать и другие ферменты, например, замена атомов Mg на атомы Fe приводит к образованию цитохромов, в которых P_{Σ} -параметр двухвалентного железа ($P_{\Sigma}=10,093$ эВ) является активной пространственно-энергетической составляющей структурных взаимодействий фотосинтеза.

Поэтому, в частности первичными и вторичными акцепторами электронов в системе ФСІ являются железо-серные белки – ферредоксины, выполняющие разнообразные транспортные функции, сопряженные с синтезом АТФ.

Вывод

Предложенный метод дает удовлетворительную характеристику энергетики основных этапов фотосинтеза.

Обозначения к главе 8:

W_i – энергия связи электронов на i -орбитали (эВ);

r_i – орбитальный радиус i -орбитали (Å);

n_i – число электронов на этой орбитали;

ПЭВ – пространственно-энергетические взаимодействия;

P_0 – пространственно-энергетический параметр (эВÅ);

P_{Σ} – эффективный P-параметр (эВ);

R – размерная характеристика атома (связи) (Å);

$h\nu$ – энергия кванта света (Дж, эВ);

N_1, N_2, \dots – число однородных атомов;

N – средняя кратность связи в формуле (10);

P_C – структурный P-параметр сложной структуры (эВ);

α – коэффициент структурного взаимодействия (изоморфизма) (%);

ρ – степень структурного взаимодействия (%);

ФС – фотосистема (ФСІ и ФСІІ);

АТФ – аденозинтрифосфат;

РуБФ – рибулозодифосфат;

ФГК – 3 фосфоглицериновая кислота;

НАДФ – никотинамидадениндинуклеотидфосфат;

ФГА – фосфоглицериновый альдегид;

E – энергия связи или восстановления молекул (эВ);

E_C – результирующая энергия связи или восстановления для групп радикалов (эВ).

ГЛАВА 9. НАНОСТРУКТУРНЫЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ УГЛЕВОДОРОДНОГО ВОДОСОДЕРЖАЩЕГО ТОПЛИВА

***Аннотация.** Проведены согласующиеся расчеты энергии связи в водных наноструктурах по методологии *P*-параметра и квантово-механическими методами. Дано объяснение высокоэнергетических связей в процессе приготовления углеводородного водосодержащего топлива.*

Введение

Роль воды в углеводородном топливе двигателей внутреннего сгорания не является однозначной. С одной стороны, простое разведение водой бензина или дизельного топлива может значительно ухудшить технологические качества топлива. Как только капли воды попадают в цилиндры, происходит следующее: на такте сжатия, когда оба клапана закрыты, поршень, двигаясь вверх, упирается в водную пробку. Давление внутри цилиндра возрастает многократно. А двигатель, продолжая цикл, пытается довести шатун до верхней точки. Фактически, поршни в одном или нескольких цилиндрах моментально останавливаются, а коленчатый вал, продолжая вращаться, принимает на себя огромные нагрузки. Он гнет шатуны, ломает пальцы поршней и часто ломается сам. С другой стороны – оптимальное содержание воды в углеводородном топливе определяется стандартной технологической нормой такой топливной смеси, которая готовится по специальной методике. Более того, согласно патенту на изобретение [54] водосодержащее топливо может иметь потенциальную энергию в 1/3 от единицы энергии – бензина и, тем не менее, двигатели развивают такую же мощность, что и с дополнительным количеством бензина по массе, равной массе введенной воды. И выигрыш при этом получается не только энергетический, но и по технологическим характеристикам топлива, таким как огнебезопасность, октановое число, температурные пределы применения, возможность использования более дешевых сортов топлива и т.д. Такая специфика технологических процессов в конечном счете определяется механизмом физико-химических превращений, происходящих на атомно-молекулярном уровне. В данном исследовании рассматриваются возможности оценки их на основе представления о пространственно-энергетическом параметре (*P*-параметре).

9.1. Образование высокоэнергетических связей в топливной смеси

Практическое использование водосодержащего топлива оказалось возможным только при выполнении ряда условий:

1. Введение в топливо сложных добавок, основное значение в которых имеют спирты и так называемый «катализатор водорода».

2. Перемешивание таких добавок делают по специальной методике – сначала по отдельным фракциям, а в конце идет интенсивное перемешивание всей смеси гидрорассекающим насосом (гидроножницами).

По мнению автора [54] «катализатор водорода» способствует активной диссоциации молекул воды с образованием водорода и кислорода, которые далее сгорают в камере двигателя.

Но остается неясным, как за короткое время сгорания введенного в камеру данного объема смеси может происходить вначале диссоциация воды в этом объеме, а потом и сгорание ее продуктов. Тем более – в результате диссоциации воды по реакции $\text{H}_2\text{O}=\text{H}^++\text{OH}^-$ прямого выделения кислорода не происходит. Очевидно работают другие важные механизмы физико-химического превращения энергии. Известно, например, что в результате биохимических реакций в присутствии определенных ферментов может идти синтез молекулы АТФ, потенциальная энергия которой увеличивается за счет образования особых высокоэнергетических связей.

Возможно, аналогичные процессы идут при образовании горючей смеси данного топлива, когда при определенных технологических условиях могут формироваться нанокластерные образования в виде фуллеренов. Этому способствует, во-первых, введение в топливную смесь спиртов, что ведет к образованию фуллерена, например, в виде $\text{C}_{60}(\text{OH})_{10}$. Поэтому, технологическая операция добавки спиртов (до 20%) как раз соответствует соотношению молярных масс гидроксильных групп OH^- и атомов углерода. Вторая стадия в подготовке топлива сводится к образованию высокоэнергетических связей в системах $\text{C}_{60}(\text{OH}^-) - n(\text{H}_2\text{O})$, во-первых, за счет добавления в смесь «катализатора водорода», и кроме того, при фильтровании воды через активированный уголь, что способствует выделению в смесь наноструктурных образований атомов углерода.

Аналогично гидролизу АТФ, который сопровождается освобождением энергии химических связей, в водосодержащем топливе при горении его в камере двигателя происходит разрыв, высокоэнергетических связей и выделение тепловой энергии.

Физико-химический механизм формирования энергетически насыщенных связей в этой системе ниже приводятся.

9.2. Методика исследований

В качестве основной количественной характеристики структурных взаимодействий в конденсированных средах использовалась величина относительной разности Р-параметров взаимодействующих атомов-компонентов – коэффициент структурного взаимодействия α по уравнениям (24,25):

Данный подход дал возможность оценить степень и направление структурных взаимодействий процессов фазообразования, изоморфизма и растворимости в многочисленных системах, в том числе в молекулярных. В

частности были исследованы особенности кластерообразования в системе $\text{CaSO}_4 - \text{H}_2\text{O}$ [55].

Результаты расчётов по уравнениям (11,25,26) приведены в таблицах 5,24,25. Получено в частности, что для атома водорода величины P_3 -параметров на расстояниях орбитального (r_i) и ковалентного радиусов (R) существенно отличаются. Гибридизация валентных орбиталей атома углерода оценивалась как усреднённое значение P -параметров $2S^2$ и $2P^2$ - орбиталей.

Энергия связи (E) в бинарных и более сложных структурах:

$$\frac{1}{E} \approx \frac{1}{P_E} = \frac{1}{P_1(N/\kappa)_1} + \frac{1}{P_2(N/\kappa)_2} + \dots \quad (61)$$

Здесь (применительно к кластерным системам) κ_1 и κ_2 – число подсистем, образующих кластерную систему; N_1 и N_2 – число однородных кластеров. Так для $\text{C}_{60}(\text{OH})_{10}$ $\kappa_1 = 60$, $\kappa_2 = 10$.

9.3. Расчёты и сопоставления

Предполагалось, что структурно-стабильный водный кластер (H_2O) может иметь такое же статистическое число подсистем (κ), что и число подсистем во взаимодействующей с ним системе [56]. Например, с фуллуреном $[\text{C}_6\text{OH}]_{10}$ взаимодействует водный кластер типа n (H_2O)₁₀.

Аналогично кластеру $[\text{C}_6\text{OH}]_{10}$, по-видимому, возможно образование кластера $[(\text{C}_2\text{H}_5\text{OH})_6 - \text{H}_2\text{O}]_{10}$, что соответствует системе $(\text{C}_2\text{H}_5\text{OH})_{60} - (\text{H}_2\text{O})_{10}$. Взаимодействие водных кластеров между собой рассматривалось как взаимодействие подсистем $(\text{H}_2\text{O})_{60} - N(\text{H}_2\text{O})_{60}$.

На основе таких положений были проведены расчёты энергии связи в этих системах по уравнению (61), результаты которых представлены в таблице 26.

Для сравнения приведены расчётные данные полученные Хохряковым Н.В., полученные [57] квантово-механическими методами.

Обе методики дают согласующиеся значения энергии связи (в эВ). Кроме того, методология P -параметра позволяет объяснить, почему величина энергии кластерных связей молекул воды с фуллуреном $\text{C}_{60}(\text{OH})_{10}$ оказалась в 2 раза больше, чем энергия связи между самими молекулами кластерной воды (табл. 26).

В соответствии с номограммой фазообразование структур может происходить только при относительной разности их P -параметров (α) менее 25-30%, а наиболее стабильные структуры образуются при $\alpha < 6-7\%$.

В таблице 37 приведены значения коэффициента α в системах Н-С, Н-ОН и Н- H_2O , которые находятся в пределах от 0,44 до 7,09(%).

Но в системе Н-С для атомов углерода и водорода здесь учитывались взаимодействия на расстояниях ковалентных радиусов, а для других систем на расстояниях орбитального радиуса.

Взаимодействие в системе Н-С на расстояниях ковалентного радиуса играет роль ферментативного воздействия, которое приводит к переходу

размерных характеристик в молекулах воды от орбитального радиуса к ковалентному и к образованию системы $C_{60}(OH)_{10} - N(H_2O)_{10}$, имеющей энергию связи между основными компонентами в 2 раза больше, чем между самими молекулами воды (высокоэнергетические связи).

Таблица 24

Р-параметры атомов, рассчитанные через энергию связи электронов

Атом	Валентные электроны	W (эВ)	r_i (Å)	q^2 (эВÅ)	P_0 (эВÅ)	R (Å)	$P_{\text{э}}=P_0/R$ (эВ)
H	1S ¹	13,595	0,5295	14,394	4,7985	0,5295	9,0624
H	1S ¹					0,28	17,137
C	2P ¹	11,792	0,596	35,395	5,8680	0,77	7,6208
C	2P ¹					0,69	8,5043
C	2P ²	11,792	0,596	35,395	10,061	0,77	13,066
C	2S ¹	19,201	0,620	37,240	9,0209	0,77	11,715
C	2S ²				14,524	0,77	18,862
C	2S ² +2P ²				24,585	0,77	31,929
C	1/2(2S ² +2P ²)						15,964
O	2P ¹	17,195	0,4135	71,383	4,663	0,66	9,7979
O	2P ²	17,195	0,4135	71,383	11,858	0,66	17,967
O	2P ²					0,59	20,048
O	2P ⁴	17,195	0,4135	71,383	20,338	0,66	30,815

Таблица 25

Структурные P_c-параметры

Радикалы, молекулы	P ₁ (эВ)	P ₂ (эВ)	P ₃ (эВ)	P ₄ (эВ)	P _c (эВ)	Орбитали атома кислорода
ОН	17,967	17,137			8,7712	2P ²
ОН	9,7979	9,0624			4,7080	2P ¹
H ₂ O	2×17,138	17,967			11,788	2P ²
H ₂ O	2×9,0624	17,967			9,0226	2P ²
C ₂ H ₅ ОН	2×15,964	2×9,0624	9,7979	9,0624	3,7622	2P ¹

Таблица 26

Расчёты энергии связи – E (эВ)

Система	C ₆₀	(OH) ₁₀	(H ₂ O) ₁₀		P _E (эВ)	E (эВ) (расчёт)
	P ₁ /κ ₁	P ₂ /κ ₂	P ₃ /κ ₃	n ₃	По уравнению (61)	Квантово-механический[57]
C ₆₀ (OH) ₁₀ – N(H ₂ O) ₁₀	15,964/60	8,7712/10	11,788/10	1	0,174	0,176
				2	0,188	0,209
				3	0,193	0,218
				4	0,196	0,212
				5	0,197	0,204
(H ₂ O) ₆₀ – N(H ₂ O) ₆₀	9,0226/60	9,0226/60		n ₂		
				1	0,0768	0,0863
				2	0,1020	0,1032
				3	0,1128	0,1101
				4 5	0,1203 0,1274	0,1110 0,115
(C ₂ H ₅ OH) ₆₀ – (H ₂ O) ₁₀	3,7622/60	9,0226/10			0,0586	0,0607
(C ₂ H ₅ OH) ₁₀ – (H ₂ O) ₆₀	3,7622/10	9,0226/60			0,1074	≈ 0,116

Таблица 27

Пространственно-энергетические взаимодействия в системе Н-*R*,
где *R*= С, (ОН), Н₂О

Система	P ₁ (эВ)	P ₂ (эВ)	$\alpha = \frac{\Delta P}{\langle P \rangle} 100\%$	Тип пространственной связи
Н-С	17,137	15,964	7,09	Ковалентная
Н-ОН	9,0624	8,7712	3,27	Орбитальная
Н-Н ₂ О	9,0624	9,0226	0,44	Орбитальная

Таким образом, широкие возможности водных кластеров в изменении их пространственно-энергетических характеристик объясняет, по-видимому, всё разнообразие структурных свойств воды в её различных модификациях, в том числе образование высокоэнергетических связей, в водосодержащем топливе для двигателей внутреннего сгорания.

Выводы

1. Результаты расчётов энергии связи в водных наноструктурах по методологии Р-параметра находятся в согласии с квантово-механическими методами.

2. Изменения, которые могут происходить в пространственно-энергетических характеристиках водных кластеров, объясняют образование высокоэнергетических связей в процессе приготовления углеводородного топлива.

3. В камере сгорания происходит разрыв этих связей с выделением дополнительного количества тепловой энергии.

ГЛАВА 10. О ДИНАМИКЕ ВРАЩАТЕЛЬНОГО ДВИЖЕНИЯ В МАКРО- И В МИКРОСИСТЕМАХ

***Аннотация.** Даны уравнения зависимости вращательного и орбитального движений планет, рассчитаны углы их вращения. Установлены волновые принципы прямого и обратного вращения планет. Установленные зависимости проявляются на различных масштабных уровнях структурных взаимодействий, в том числе в биосистемах. Равенство углов вращения Солнца и земли через резонанс корпускулярно-волнового механизма определяет возможность фотосинтеза на Земле. Точность расчетов соответствует точности экспериментальных данных.*

Введение

Окружающий нас материальный мир находится в непрерывном движении. Основные виды механического движения функционально связанные между собой (поступательное, вращательное и колебательное) определяют динамическую стабильность систем. К настоящему времени накоплен значительный теоретический и экспериментальный материал по физико-химическим свойствам простых и сложных соединений и по принципам их самоорганизации на различных масштабных уровнях такой конформации.

Но является актуальной проблема установления наиболее общих закономерностей этих процессов. «Однако наука пока ещё слишком далека от того, чтобы осуществить это в общем виде» [58]. Так небесная механика, используя весь арсенал аналитических и качественных методов, даёт решение многих задач о движении твердых тел, например [59,60]. Но нуждаются в дальнейшем обсуждении некоторые другие вопросы небесной механики, например функциональная зависимость вращательного и орбитального движения планет, а также исходные принципы формирования прямого и обратного движения планет. Поэтому в данной работе делается попытка исследования таких проблемных вопросов с использованием ранее предложенной [61] концепции корпускулярно-волнового дуализма.

10.1. Исходные критерии

(Получены на основе работы [61])

1. В системах, в которых взаимодействие идет по градиенту потенциала (положительная работа), результирующая потенциальная энергия находится по принципу сложения обратных значений соответствующих энергий подсистем. Аналогично рассчитывается приведенная масса для относительного движения изолированной системы двух частиц.

2. В системах, в которых взаимодействие идет против градиента потенциала (отрицательная работа) выполняется алгебраическое сложение их масс и также – соответствующих энергий подсистем (аналогично гамильтониану).

3. Два принципа сложения энергетических характеристик структурных взаимодействий можно трансформировать на процессы корпускулярно-волнового дуализма.

Во всех взаимодействиях по градиенту потенциала, идут корпускулярные процессы, а волновой дуализм соответствует взаимодействиям против градиента потенциала.

4. Акт квантового действия, выраженный через постоянную Планка, сводится к равновесно-обменному перераспределению энергии между корпускулярными и волновыми процессами.

5. Разность фаз электрических и магнитных колебаний в электромагнитной волне составляет $\frac{\pi}{2}$. Используя как коэффициент пропорциональности величину $\left(\frac{2}{\pi}\right)^2$, получаем уравнение для постоянной Планка с точностью, близкой к точности самих исходных данных:

$$h = \left(\frac{4}{\pi^2} + a_0\right) P_e \frac{\varepsilon}{\mu},$$

где $a_0 = 0,0023293$ – экспериментальная квантовая поправка к спиновому g_s – фактору электрона, ε – электрическая постоянная, μ – магнитная постоянная. Здесь $P_e = wr$, где w – энергия свободного электрона, r – его классический радиус.

6. Предполагается, что при вращательно-поступательном движении электрона происходит перераспределение энергий в системе частица-волна, что проявляется через угловой вектор такого движения (угол намотки) – Θ .

Этот угловой вектор движения электрона квантуется целым числом через квадрат тангенса угла: $tg^2\varphi_2 = 2$; $tg^260^\circ = 3$; $tg^245^\circ = 1$, где $\varphi_2 = 54,73^\circ$ – есть так называемый геодезический угол, который широко проявляется в природе и используется в технике, например при изготовлении космических аппаратов.

Квантовые функции квадрата тангенса $k = 1, 2, 3$ численно определяют соотношения двух катетов треугольника, значения которых через осевые и окружные напряжения характеризуют энергетические соотношения в системе с корпускулярными и волновыми процессами.

7. В квантовой механике отношение магнитного момента частицы к ее механическому моменту называется магнитомеханическим отношением – g . При этом $g_s = 2$, если магнитный момент электрона обусловлен только спиновой составляющей и $g = 1$, если он создается орбитальным движением электронов. Их соотношение $g_s / g = 2$, что как и $tg^2\varphi_2 = 2$ характеризует в данном подходе соответствующие корпускулярно-волновые зависимости.

10.2. Уравнение зависимости вращательного и орбитального движения планет

Выше приведенные принципы корпускулярно-волнового механизма позволяют с единых позиций рассматривать разнородные по природе и по масштабам многие структурно-динамические процессы. Например, характеристика спин-орбитального взаимодействия – постоянная тонкой структуры $\alpha = \frac{r}{\lambda}$, где r – классический радиус электрона, λ – его комптоновская длина волны.

Формально, но аналогично: сила взаимодействия двух длинных проводников с током пропорционально отношению $\frac{l}{2\pi r}$, где l – длина проводников, r – расстояние между ними.

И само число 2π , широко используемое в физических закономерностях, равно отношению длины окружности к её радиусу: $2\pi = l/R$.

В этих примерах, как и во многих других, данный подход позволяет оценивать структурные взаимодействия, исходя из соотношений корпускулярных и волновых пространственно-энергетических параметров в каждом акте действия. Очевидно, проявляются такие принципы и в третьем законе Кеплера, который может быть записан в виде [60]:

$$Gm = 4\pi^2 \frac{a^3}{T^2} \quad (62)$$

где: G – гравитационная постоянная, m – масса планеты, здесь a – расстояние до барицентра (центра масс системы), T – период обращения планеты. Введя относительную массу $m_0 = \frac{m}{m_3}$ (где m_3 – масса Земли), можно получить:

$$\frac{Gm_3}{4\pi^2} = \frac{a^3}{T^2 m_0}, \text{ поэтому } \frac{a^3}{T^2 m_0} = \text{const}$$

Или:
$$\frac{a}{(T^2)^{\frac{1}{3}} m_0^{\frac{1}{3}}} = \text{const} \quad (63)$$

Так как массы планет достаточно малы по сравнению с расстоянием их до Солнца, то в первом приближении их можно считать математическими точками применить для них уравнение периода математического маятника:

$T^2 = 4\pi^2 \frac{l}{g}$, где g – ускорение свободного падения. За длину маятника l можно принять средний радиус орбитального движения планеты – R . Тогда в числитель формулы (63) по аналогии с ранее приведенными зависимостями можно ввести радиус планеты r и получим:

$$\frac{r}{\left(\frac{4\pi^2}{g} R m_0\right)^{\frac{1}{3}}} = \gamma \quad (64)$$

Это выражение в единицах $\frac{m}{c^{2/3}}$ для космических макроструктур удовлетворяет исходному принципу корпускулярно-волнового механизма. Но в третьем законе Кеплера рассматривалось только орбитальное движение, а в данном случае два движения, каждый из которых имеет свою волновую часть. Поэтому имеет место интерференция когерентных волн.

Сама когерентность аналогично выше приведенным примерам может рассматриваться как отношение разности хода волн к длине когерентной волны $\left(\frac{\Delta}{\lambda}\right)$. Наиболее просто принцип интерференции выполняется для жидкогазовых планет (планеты системы Юпитера), что показано в таблице 28:

$$\beta_+ = 2n \frac{\gamma}{2} \quad (65)$$

– усиление колебаний при прямом вращении планет.

$$\beta_- = (2n + 1) \frac{\gamma}{2} \quad (66)$$

– ослабление колебаний при обратном вращении планет.

Таблица 28

Характеристики вращательного и орбитального движения планет

Планета	$r \cdot 10^6, \text{ м}$	$R \cdot 10^9, \text{ м}$	$\gamma, \frac{\text{м}}{\text{с}^{2/3}}$	Направление вращения	Расчетная формула для β	n	$\beta, \frac{\text{м}}{\text{с}^{2/3}}$	$\delta = \frac{\beta}{\beta_0}$	Θ_1°	Θ_2°	Θ° [60,62,34]
Меркурий	2,4397	57,9	1039,7	+	$n^{1/2} \frac{\gamma}{2}$	2	735,2	0,9735		86,6	87,0
Венера	6,0515	108,2	855,17	-	$(2n + 1)^{1/2} \frac{\gamma}{2}$	1	740,6	0,9810		87,2	87,0
Земля	6,3780	149,6	755,2	+	$2n^{1/2} \frac{\gamma}{2}$	1	755,2	1	66,56		66,556
Марс	3,3970	227,9	734,7	+	$2n^{1/2} \frac{\gamma}{2}$	1	734,7	0,9728	64,75		64,8
Юпитер	71,492	778,6	715,8	+	$2n \frac{\gamma}{2}$	1	715,8	$0,9478^{1/2}$		86,6	86,9
Сатурн	60,268	1433,7	735,9	+	$2n \frac{\gamma}{2}$	1	735,9	0,9744	64,85		64,3
Уран	25,596	2870,4	463,6	-	$(2n + 1) \frac{\gamma}{2}$	1	696,8	0,9227		82,07	82,0
Нептун	24,764	4491,1	365,49	+	$2n \frac{\gamma}{2}$	2	730,98	$0,96793^2$	62,5		61,68
Плутон	1,1510	5868,9	295,55	-	$(2n + 1) \frac{\gamma}{2}$	2	738,75	0,9782			
							$\langle \beta \rangle = 732,5$				

Здесь n – целое число.

Интенсивность распространения волны зависит от плотности среды и распределения её по объему планеты.

Величина, характеризующая нарастание плотности планеты к её центру, называется безразмерный момент инерции (Γ^*). Соотношение средних значений Γ^* для твердотельных и для жидкогазовых планет по разным данным [60,62,34] находится в пределах от 1,4 до 1,45, что приведено в таблице 29.

Таблица 29

Соотношение безразмерных моментов инерций вердотельных и жидкогазовых планет по [60,62]

Планета	Меркурий	Венера	Земля	Марс	$\langle \Gamma^* \rangle$
Γ^*_T	0,324	0,333	0,33076	0,377	0,341
Планета	Юпитер	Сатурн	Уран	Нептун	$\langle \Gamma^*_{жг} \rangle$
$\Gamma^*_{жг}$	0,20	0,22	0,23	0,29	0,235

Среднее значение $\Gamma^*_T / \Gamma^*_{жг} = 1,451$

Такое свойство для твердотельных планет учитывается в таблице 28 в уравнениях (65,66) введением величин $n^{1/2}$ и $(2n + 1)^{1/2}$. Такой же подход относится и к планете Меркурий, поскольку эта планета ближе всех находится к Солнцу, к его плазменной жидкогазовой структуре.

В целом применение корпускулярно-волнового механизма к космическим макросистемам дает объяснение специфики формирования у планет прямого или обратного вращения.

10.3. Углы вращения планет

По физическому смыслу параметр β характеризует разность хода интерферирующих волн, а величина γ – длину волны. Средняя величина $\beta = 732,5$ м/с^{2/3} с отклонением от неё для большинства планет менее 2 % (кроме Урана).

В работе [61] для оценки квантовых переходов в атомах использовалось уравнение $tg^2 \Theta = k$. В уравнении Кеплера и в других закономерностях космических макросистем используются квадраты и кубы исходных параметров. В данном подходе, как показали расчеты, выполняется полуэмпирическое уравнение:

$$\beta = (tg^2 \Theta)^4 \quad (67)$$

где Θ – угол вращения планет.

Для планеты Земля $\beta = 755,2$ и по уравнению (67) получается величина $\Theta_0 = 66,455^\circ$. Для более точного расчета, учитывая некоторую аналогию макро- и микропроцессов используем, как и ранее экспериментальную квантовую поправку в виде $a_0 = 1,0023293$ по уравнению:

$$\theta_1 = a_0 \theta_0 \quad (68)$$

Расчёт по уравнениям (67,68) даёт для Земли величину $\theta_1 = 66,560^\circ$ с отклонением от экспериментального значения на 0,007%. Это же значение угла вращения имеет и Солнце.

Применительно к остальным планетам в уравнении (68) вводится величина $\delta = \frac{\beta}{\beta_0}$, (где β_0 – значение величины β для Земли) согласно уравнений:

$$\theta_1 = a_0 \delta \theta_0 \quad \text{или} \quad \theta_1 = a_0 \frac{\beta}{\beta_0} \theta_0 \quad (69) \quad (69a)$$

$$\theta_2 = \frac{4}{3} a_0 \delta \theta_0 \quad \text{или} \quad \theta_2 = \frac{4}{3} a_0 \frac{\beta}{\beta_0} \theta_0 \quad (70) \quad (70a)$$

Формулы (69,69a) выполняются для тех планет, у которых угол вращения меньше земного. Для остальных планет выполняется формулы (70,70a). Это те планеты, с которых начинается планетная подсистема по значению безразмерного момента инерции (Меркурий и Юпитер), а также планеты с обратным ходом вращения (Венера и Уран). Результаты расчетом представлены в таблице 28.

Коэффициент $\frac{4}{3}$ применялся и ранее для сравнительной оценки квантовых переходов различного вида сложности [61]. В данном исследовании среднее соотношение углов вращения планет по экспериментальным данным [60,62,34] приведенное в таблице 30, также имеет величину $1,336 \approx \frac{4}{3}$.

Таблица 30

Соотношение углов вращения планет по [60,62,34]

Планета	Меркурий	Венера	Юпитер	Уран	$\langle \Theta_2 \rangle$
Θ_2	87,00	87,00	86,90	82,00	85,73
Планета	Земля	Марс	Сатурн	Нептун	$\langle \Theta_1 \rangle$
Θ_1	66,556	64,80	64,30	61,00	64,16

Среднее значение $\Theta_2/\Theta_1 = 1,336 \approx \frac{4}{3}$

Для величины δ влияние распределения плотности среды у планет учтено через фактор перехода от одного уровня распределения плотности к другому. Так для Юпитера по таблице 29 величина I^* меньше по сравнению с земным I^* в 1,45 раза и поэтому в расчетах $\delta = 0,9478^{1/2}$. Для Нептуна наоборот по сравнению с Юпитером I^* возрастает в 1,45 раза и поэтому в расчетах взята величина $\delta = 0,96793^2$.

Все результаты расчетов находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными.

Выводы

1. Получены полуэмпирические уравнения зависимости вращательного и орбитального движения планет.

2. На основе ранее предложенной методики оценки корпускулярно-волнового механизма объясняются многие структурно-динамические процессы

в макро- и микросистемах, в том числе специфика формирования у планет прямого или обратного вращения.

3. Приведенные расчеты углов вращения планет находятся в пределах точности экспериментальных данных.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Введенный пространственно-энергетический параметр (Р-параметр) можно считать материализованным аналогом Ψ -функции.

2. Применяя такую методологию можно моделировать различные физико-химические процессы, исходя из энергетических характеристик свободного атома.

3. Использование в этих целях пространственно-энергетического параметра позволяет: 1) оценивать вероятность протекания процессов конформации различных биосистем, исходя из энергетических характеристик свободных атомов, 2) рассчитывать интенсивность фундаментальных взаимодействий, 3) использовать предложенный вариант винтовой модели кварков для анализа структурных взаимодействий в этих системах, 4) рассчитывать энергетические характеристики основных этапов фотосинтеза.

4. Понятие энтропии имеет многоплановое проявление в физико-химических, экономических, технических и других природных процессах, что подтверждается их номограммами в виде S-кривых.

5. Два принципа сложения энергетических характеристик структурных взаимодействий можно трансформировать на процессы корпускулярно-волнового дуализма. Предполагается, что при вращательно-поступательном движении электрона происходит перераспределение энергий в системе частица-волна, что проявляется через угловой вектор такого движения (угол намотки).

6. Энергия сродства к электрону (χ) численно равна среднему значению P_r -параметра для одного валентного электрона, деленному на (n^*+1) , где n^* – эффективное главное квантовое число.

7. Реализована методология оценки энергии валентной зоны и зоны проводимости фотоэффекта на основе применения представления о пространственно-энергетическом параметре.

Получена корреляционная зависимость сродства к электрону и электроотрицательности от энергетических критериев фотоэффекта.

8. Дано объяснение формирования высокоэнергетических связей в процессе приготовления углеводородного водосодержащего топлива.

9. Получены полуэмпирические уравнения зависимости вращательного и орбитального движения планет. Равенство углов вращения Солнца и Земли через резонанс корпускулярно-волнового механизма определяет возможность фотосинтеза на Земле.

10. Вышеприведенные закономерности позволяют рассматривать некоторые различные структурно-динамические процессы с единых позиций. Например, для постоянной тонкой структуры по уравнению $\alpha = \frac{r}{\lambda}$,

где r - классический радиус электрона, λ - комптоновская длина волны. Аналогичное соотношение $\frac{l}{2\pi r}$ получается и в уравнении Ампера для силы взаимодействия двух длинных проводников с током.

11. Разность фаз электрических и магнитных колебаний в электромагнитной волне составляет $\frac{\pi}{2}$. Используя как коэффициент пропорциональности величину $\left(\frac{2}{\pi}\right)^2$, получаем уравнение для постоянной Планка с точностью, близкой к точности самих исходных данных:

$$h = \left(\frac{4}{\pi^2} + a_0\right) P_e \frac{\varepsilon}{\mu},$$

где $a_0 = 0,0023293$ – экспериментальная квантовая поправка к спиновому g_s – фактору электрона, ε – электрическая постоянная, μ – магнитная постоянная. Здесь $P_e = wr$, где w – энергия свободного электрона, r – его классический радиус.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Рубин А.Б. Биофизика. Кн.1. Теоретическая биофизика. М.:В.ш., 1987, 319 с.
2. P.A. Dirac, Quantum Mechanics, London, Oxford Univ., Press, 1935
3. P.W. Anderson. In "Magnetism", v.1, Acad. Press, 1963, p. 25/
4. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики. Изд. В.ш. 1961, 512 с.
5. Korablev G.A. Spatial-Energy Principles of Complex Structures Formation, Netherlands, Brill Academic Publishers and VSP, 2005,426p. (Monograph).
6. Эйринг Г., Уолтер Дж., Кимбал Дж. Квантовая химия // М., и. л., 1948, 528 стр.
7. Fischer C.F. // Atomic Data, 1972, № 4, 301-399.
8. Waber J.T., Cromer D.T. // J.Chem. Phys, 1965, V 42,-№ 12, 4116-4123.
9. Clementi E., Raimondi D.L. J.Chem. Phys., 1963, v.38, №11, 2686-2689, J. Chem. Phys., 1967, V.47, № 4, 1300-1307.
10. Гомбаш П. Статистическая теория атома и ее применения // М.: И. Л., 1951, 398 стр.
11. Кораблев Г.А., Кодолов В.И., Липанов А.М. Аналоговые сопоставления функций Лагранжа и Гамильтона с пространственно-энергетическим параметром // Химическая физика и мезоскопия, 2004, т.6, №1, с. 5-18
12. Л.А. Грибов, Н.И. Прокофьева. Основы физики. М.: Высшая школа, 1992, 430 с.
13. Кодолов В.И., Хохряков Н.В., Тринеева В.В., Благодатских И.И. Активность наноструктур и проявление ее в нанореакторах полимерных матриц и в активных средах//Химическая физика и мезоскопия, 2008. Т. 10. №4. с. 448-460.
14. Тэйлор, Э. Ф., Уилер, Дж. А. Физика пространства-времени — М.: Мир, 1987. — 320 с.
15. А.Т. Кынин, В.А. Лентяшин. Оценка параметров технических систем с использованием кривых роста / <http://www.metodolog.ru/01428/01428.html>
16. Любомирский А., Литвин С. Законы развития технических систем / <http://www.metodolog.ru/00767/00767.html>
17. Г.А. Кораблев, Ю.Г. Васильев, Г.Е. Заиков. Гексагональные структуры в наносистемах. Химическая физика и мезоскопия. 2015. Т. 17. №3. С. 424-429.
18. Кораблев Г.А., Заиков Г.Е. Биоструктурные энергетические критерии функциональных состояний в норме и патологии // Известия вузов. Прикладная химия и биотехнология, 2012, №1(2), С. 118-124.

19. Forrest L.R., Woolf T.B. Discrimination of native loop conformations in membrane proteins: decoy library design and evaluation of effective energy scoring functions// *Proteins*. 2003, V. 52, N 4, 492-509.

20. Joseph M. S., Bilousova T. et al. Transgenic Mice With Enhanced Neuronal Major Histocompatibility Complex Class I Expression Recover Locomotor Function Better After Spinal Cord Injury// *J Neurosci Res.*, 2011, V. 89, N 3, 365–372.

21. Эдвард Мозер. Нобелевская лекция по физиологии: 11.03.2015 г. по телеканалу «Наука».

22. Lecuit T., Yap A.S. E-cadherin junctions as active mechanical integrators in tissue dynamics// *Nature Cell Biology*, 2015, V. 17, 533–539.

23. Zonta F., Buratto D. et al. Molecular dynamics simulations highlight structural and functional alterations in deafness-related M34T mutation of connexin// *Front. Physiol.*, 2014, V. 26, 5 – 85.

24. Волькенштейн М.В. Биофизика. М.: Наука, 1988, 592 с.

25. Муродян Р.М. Физические и астрофизические константы и их размерные и безразмерные комбинации// ФЭЧАЯ. М.. Атомиздат. 1977. Т.8. В.1. С.175-192.

26. Барашенков В.С. Сечения взаимодействия элементарных частиц. М.. Наука 1966. 532 с.

27. Яворский Б.М., Детлав А.А. Справочник по физике. М.. Наука. 1968. 940 с.

28. Бухбиндер И.Л. Фундаментальные взаимодействия. Сорский образовательный журнал №5. 1997. <http://nuclphys.sinp.msu.ru/mirrors/fi.htm>.

29. Окунь Л.Б. Слабые взаимодействия

<http://www.booksite.ru/fulltext/1/001/008/103/116.htm>.

30. Мэрисон Дж. Б. Общая физика с биологическими примерами. М.: Высш. школа, 1986, 623 с.

31. Пидгайный Ю.М., Морозова В.М., Дудко В.А. Механика полимеров. – 1967.– № 6. – С. 1096-1104.

32. Аюшеев Т.Ю. Геометрические вопросы адаптивной технологии изготовления конструкций намоткой из волокнистых композиционных материалов. – Улан-Удэ: Изд-во БНЦ СО РАН, 2005. – 212с.

33. Кодолов В.И. Полимерные композиции и технология изготовления из них двигателей летательных аппаратов. Ижевский механический институт, 1992, – 200 с.

34. Аллен К.У. Астрофизические величины. М.: Изд. «МИР», 1977, 446 с.

35. Энергии разрыва химических связей. Потенциалы ионизации и сродство к электрону/Под ред. Кондратьева В.И. М.:Наука.1974,351с.

36. Свойства неорганических соединений – Справочник. Ефимов А.И., Белорукова Л.И. и др. – Л.: Химия, 1983, 392с.
37. Таблицы физических величин. – Справочник под редакцией Кикоина И.К. М.:Атомиздат, 1976, 1068 с.
38. *Бацанов С.С., Звягина Р.А.* Интегралы перекрывания и проблема эффективных зарядов. – Новосибирск: Наука, 1966, - 386с.
39. Кораблев Г.А., Соловьев С.Д., Дементьев В.Б. Растворимость компонентов в металлической системе Co-W-Ni-Cr-Fe (статья). Химическая физика и мезоскопия, 2004, Т. 6, № 1, с.28-40.
40. Кораблев Г.А., Воробьев Ю.П. Оценка взаимной растворимости компонентов двойных металлических систем / Изв. АН СССР – Металлы, 1986, №3, с. 212-215.
41. Соммер А.Х. Фотоэмиссионные материалы, Пер. с англ. М.: Мир, 1972 г.
42. *Пайнес Э.Д.* Элементарные возбуждения в твердых телах, пер. с англ.// М.:Наука, 1965
43. *Смирнов Л.С.* Физические процессы в облученных полупроводниках. Новосибирск,: Наука, 1977, 256 с.
44. Физический энциклопедический словарь, т.5. М.:Советская энциклопедия. 1966, 576с.
45. *Бацанов С.С.* Структурная рефрактометрия, М.: Высшая школа, 1976, 304с.
46. Большая медицинская энциклопедия. М.Т.26,1985,560 с.
47. . Фотосинтез/Под ред. Говинджи. М.:Мир,т.1-1987,728с;Т.2-1987,460с.
48. Клейтон Р. Фотосинтез. Физические механизмы и химические модели. М.:Мир-1984,350с.
49. Щукарев С.А. Неорганическая химия,Т.2-1974,382с.
50. Холл Д., Рао К. Фотосинтез. М.:Мир,1983.
51. Эдвардс Дж., Уокер Д. Фотосинтез С3 и С4-растений:Механизмы и регуляция. М.:1986.
52. Korablev G.A., Zaikov G.E. Energy of chemical bond and spatial-energy principles of hybridization of atom orbitalls.//J. of Applied Polymer Science. USA, 2006, V.101,n3,P.2101-2107.
53. Kamen M.D. Primary processes in photosynthesis,L.,1963.
54. Рудольф В. Гупперман. Патент №5156114; US 1995.03.29
55. Кораблёв Г.А., Яковлев Г.И., Кодолов В.И. Некоторые особенности кластерообразования в системе CaSO₄- H₂O. Химическая физика и мезоскопия, т. 4. №2, 2002, с.188-196.

56. Hodges M.P., Wales D.J. Global minima of protonated Water clusters. *Chemical Physics Letters*, 324, (2000), p.279-288.

57. Хохряков Н.В. Melchor Ferrers. Электронные свойства контактов идеальных углеродных нанотрубок. // *Химическая физика и мезоскопия*. т. 4. №2, 2002, с. 261-263.

58. Т. Эрден-Груз. Основы строения материи. М.: Мир, 1976, 438 с.

59. Г.Н. Дубошин. Небесная механика. М.: Наука, 1978, 456 с.

60. В.Л. Пантелеев. Физика Земли и планет. Курс лекций. МГУ. Москва, 2001. <http://www.astronet.ru/db/msg/1169697/node17.html>

61. G.A Korablev. On dynamics of rotational motions in macro- and microsystems. *European Chemical Bulletin*, Budapest, 2017, 6(2), pp. 79-82.

62. Физическая энциклопедия. М.: «Советская энциклопедия». Т.1, 1988, 704 с.; Т.2, 1990, 704 с.; Т.3, М.: «Большая Российская энциклопедия». 1992, 672 с.

ISBN 978-1-370-91319-0



9 781370 913190

Формат 60x84/16. Усл. печ. л. 4,1. Тираж 100 экз.
Издательство НОО Профессиональная наука
Нижний Новгород, ул. Ломоносова 9, офис 309
Издательство Smashwords, Inc. 15951 Los Gatos
Blvd., Ste 16, USA