

УДК 532.08; 539.216.1

© 2018 г. **И.Е. Еремин**, д-р техн. наук  
(Амурский государственный университет, Благовещенск)

## **КИБЕРНЕТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ВОДОРОДА И ГЕЛИЯ. I**

Рассматриваются фундаментальные математические модели упругой электронной поляризации и атомного строения рассматриваемых веществ. Предлагается альтернативная трактовка их электронной конфигурации. В первой части работы представлены результаты объединения фундаментальных положений квантовой физики и теории вынужденных гармонических колебаний.

**Ключевые слова:** линейчатый спектр, электронный резонанс, показатель поглощения, показатель преломления, вычислительный эксперимент.

DOI: 10.22250/isu.2018.57.18-32

### **Введение**

Исследования электронных характеристик самых разнообразных материалов неизбежно сталкиваются с квантовыми эффектами, многие из которых не имеют детерминированного описания. При этом нобелевский лауреат Кобаяси отмечает [1]: «Данная задача является очень сложной, поскольку существующие способы моделирования атомных и молекулярных структур несовершенны и требуют слишком много времени. Прогресс в ее решении может быть обеспечен как за счет улучшения численных методов непосредственных расчетов и повышения их достоверности, так и за счет разработки совершенно новых методик, основанных на принципиально иных принципах вычислений».

Однако, несмотря на активное совершенствование теоретической базы современных нанотехнологий, в основу наиболее распространенных математических методов описания электронной конфигурации вещества закладываются положения фундаментальной для квантовой физики «копенгагенской интерпретации» [2 – 19]. С другой стороны, в 1990 г. была опубликована статья Отта, Гребоджи и Йорке [20], констатирующая, что даже малое управление, приложенное к нелинейной системе в виде обратной связи, может коренным образом изменить

ее динамику и свойства. Кроме того, в настоящее время весьма активно развивается кибернетическая физика [21], бесспорная результативность которой связана с мультидисциплинарностью исследований, проводимых на стыке классической теории автоматического управления и квантовой физики [22 – 26] или же теории бифуркаций и классической физики [27 – 40].

### Кинетическая и потенциальная энергии электрона

Из принципа относительности Эйнштейна, утверждающего инвариантность всех законов природы при переходе от одной инерциальной системы отсчета к другой, следует условие инвариантности уравнений основных физических законов, описываемое преобразованиями Лоренца. Таким образом, функциональное выражение кинетической энергии  $T_e(v)$  отдельного электрона (рис. 1а), рассматриваемого в качестве релятивистской частицы, имеет вид [41]:

$$T_e(v) = m_e c^2 \left( \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} - 1 \right), \quad (1)$$

где  $m_e$  – масса покоя электрона;  $c$  – скорость света в вакууме;  $v$  – текущая линейная скорость электрона.

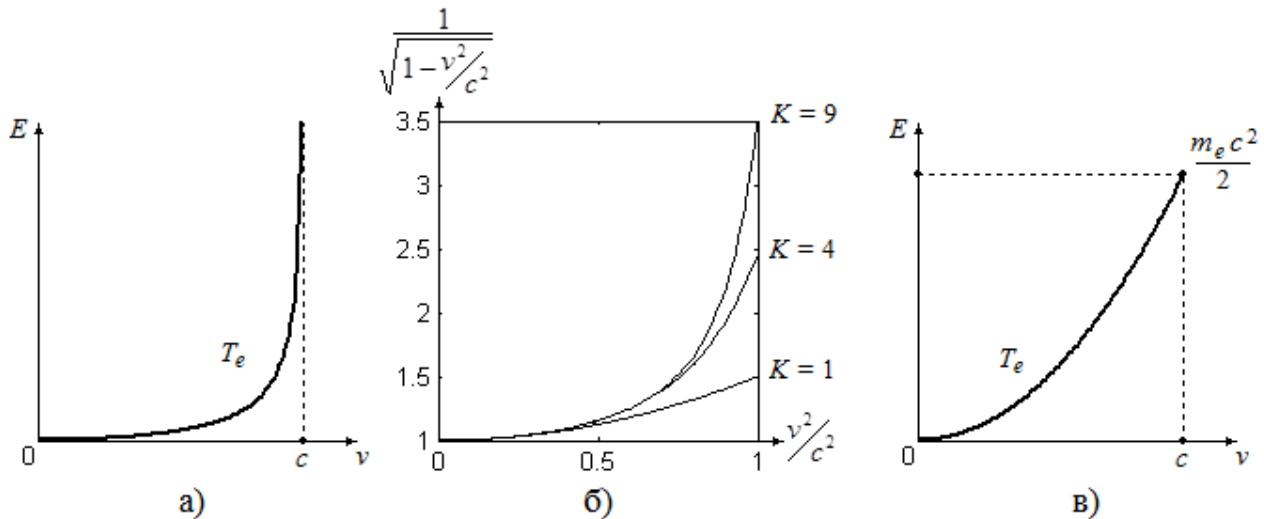


Рис. 1. Графики кинетической энергии электрона: а) функция общего вида; б) биномиальный преобразователь; в) модельно закрепленный вид.

В свою очередь, с целью упрощения непосредственной процедуры практических расчетов кинетической энергии произвольно движущегося электрона используется формула разложения в биномиальный ряд Ньютона [42]:

$$\frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} = \left( 1 - \frac{v^2}{c^2} \right)^{-\frac{1}{2}} = 1 + \sum_{i=1}^K \left( \frac{v^2}{2c^2} \right)^i \frac{\prod_{i=1}^K (2i - 1)}{i!}, \quad (2)$$

где  $K$  – общее число слагаемых конечного биномиального разложения.

Является очевидным, что увеличение значения  $K$  в результирующем виде формулы (2) существенным образом влияет на точность расчетов функции  $T_e(v)$  в области высоких скоростей (рис. 1, 2).

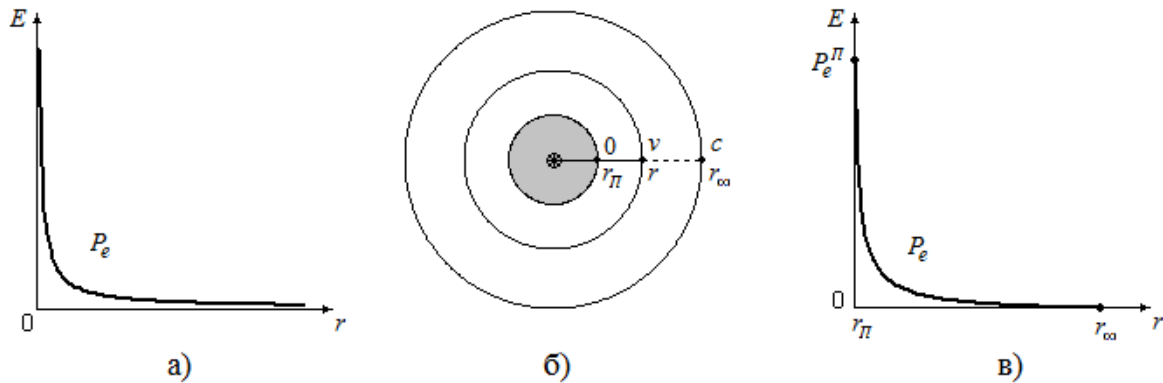


Рис. 2. Графики потенциальной энергии электрона: а) функция общего вида; б) планетарный преобразователь; в) модельно закрепленный вид.

При этом для условия  $v \ll c$ , в рамках которого правомерно пренебрежение членами биномиального разложения старших порядков, уравнение (1) принимает традиционный вид:

$$T_e(v) = \frac{m_e v^2}{2}. \quad (3)$$

Следовательно, классическая трактовка кинетической энергии  $T_e(v)$  произвольно движущегося электрона может быть представлена в форме, так сказать, «модельно закрепленного» графика, изображенного на рис. 1в.

Любое электрически заряженное тело, находящееся в потенциальном поле электромагнитных сил, обладает потенциальной энергией, за счет которого силами этого поля совершается механическая работа. Таким образом, функциональное выражение (рис. 2а) потенциальной энергии  $P_e(r)$  элементарного заряда (электрона) в поле сил другого заряда (атомного ядра) имеет вид [41]:

$$P_e(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + C,$$

где  $e$  – величина элементарного заряда;  $\epsilon_0$  – диэлектрическая проницаемость вакуума;  $r$  – расстояние между атомным ядром и электроном;  $C$  – произвольно задаваемая константа, определяющая точность интегрирования.

В свою очередь, для генерации модельно закрепленного графика функциональной зависимости  $P_e(r)$  предлагается использовать соответствующий планетарный преобразователь (рис. 2б), следуя которому электрон, лежащий на поверхности атомного ядра, является неподвижным в подобающей инерциальной системе отсчета; электрон, находящийся на орбите радиуса  $r$ , движется с некоторой линейной скоростью  $v$ ; при удалении электрона в бесконечность его скорость оказывается равной скорости света в вакууме.

Следовательно, если считать, что при удалении электрона в бесконечность его потенциальная энергия обращается в ноль (рис. 2в), то константа  $C$  также оказывается равной нулю, т.е.:

$$P_e(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}; \quad P_e^{\Pi} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{\Pi}}, \quad (4)$$

где  $r_{\Pi}$  – радиус атомного ядра, определяющий потенциальную энергию покоя.

Отметим, что описанные биномиальный и планетарный преобразователи являются аналогами общего понятия «черный ящик», широко распространенного в технической кибернетике и теории автоматического управления.

### Классическая планетарная модель атома Бора

Первая попытка выстроить квантовую модель атома была предпринята в 1913 г. Бором, заложившим в основу своей теории два базовых постулата, связывающих в единое целое следующий ряд фундаментальных предпосылок, накопившихся к тому времени. Во-первых, это эмпирические закономерности линейчатых спектров водорода, выявленные Бальмером. Во-вторых, ядерная (планетарная) модель атома, предложенная в 1911 г. Резерфордом. В-третьих, квантовый характер излучения и поглощения света, открытый в 1900 г. Планком и теоретически обоснованный в 1905 г. Эйнштейном [41].

Первый постулат Бора констатирует, что в атоме всегда существуют состояния, в которых он не излучает энергии. При этом им соответствуют стационарные электронные орбиты, двигаясь по которым, электрон должен иметь дискретные значения момента импульса, удовлетворяющие условию:

$$m_e v_n r_n = n\hbar, \quad (5)$$

где  $v_n$  – линейная скорость кругового движения электрона по  $n$ -й орбите;  $r_n$  – ее радиус;  $\hbar$  – постоянная Дирака.

Второй постулат Бора устанавливает, что при переходе электрона с одной стационарной орбиты на другую излучается или поглощается фотон с энергией, равной разности энергий соответствующих стационарных состояний атома:

$$hf = E_n - E_m; \quad \hbar = h/2\pi, \quad (6)$$

где  $E_n$  и  $E_m$  – энергии начальной и конечной орбит;  $h$  – постоянная Планка.

Согласно подобной теоретической модели, сила кулоновского взаимодействия заряженных частиц сообщает каждому электрону атома определенное центростремительное ускорение, а второй закон Ньютона, описывающий движение электрона по круговой траектории вокруг атомного ядра, имеет вид:

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_n^2} = \frac{m_e v_n^2}{r_n}. \quad (7)$$

Используя соотношение Резерфорда вида (7), Бор, во-первых, объединив его со своим выражением вида (5), вывел уравнение теоретических радиусов стационарных электронных орбит водородоподобной системы:

$$r_n = r_0 n^2; \quad r_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{e^2 m_e}, \quad (8)$$

где  $r_0$  – величина первого боровского радиуса, теоретически описывающая размер электронной орбиты атома водорода.

Во-вторых, принимая во внимание, что полная энергия  $E_n$  электрона, вращающегося вокруг ядра водородоподобной системы по  $n$ -й орбите, складывается из его кинетической энергии (3), а также потенциальной энергии кулоновского взаимодействия (4), Бор сформировал достаточно очевидное выражение:

$$E_n = \frac{m_e v_n^2}{2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_n}. \quad (9)$$

В свою очередь, объединение уравнений (7) – (9) дало результат:

$$E_n = -\frac{1}{2n^2} \frac{m_e e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2}.$$

Кроме того, по второму постулату Бора при переходе атома водорода из некоторого возбужденного состояния  $m$  в основное состояние с меньшей энергией  $n$  испускается световой квант

$$hf = E_m - E_n = -\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right) \frac{1}{2} \frac{m_e e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2},$$

следовательно, частота соответствующего атомного излучения составляет:

$$f = \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right) \frac{1}{2} \frac{m_e e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 h}. \quad (10)$$

Таким образом, сопоставив обобщенную формулу Бальмера – Ридберга со своим уравнением (10), Бор получил теоретическое выражение, эквивалентное эмпирическому значению частотной постоянной Ридберга:

$$R = \frac{1}{4\pi} \frac{m_e e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^3} = \frac{m_e e^4}{8h^3 \epsilon_0^2}. \quad (11)$$

Необходимо отметить, что соотношение вида (11), детерминировано описывающее численное значение константы  $R$ , имевшей ранее 1913 г. только экспериментальное подтверждение, до сих пор считается доказательством правомочности боровской модели электронной конфигурации атома.

### Альтернативный вывод константы Ридберга

Используя ранее рассмотренные модельно закрепленные графики кинетической (рис. 1в) и потенциальной (рис. 2в) энергии электрона, а также закон со-

хранения энергии движущейся частицы, построим диаграмму полной энергии элементарного осциллятора (рис. 3).

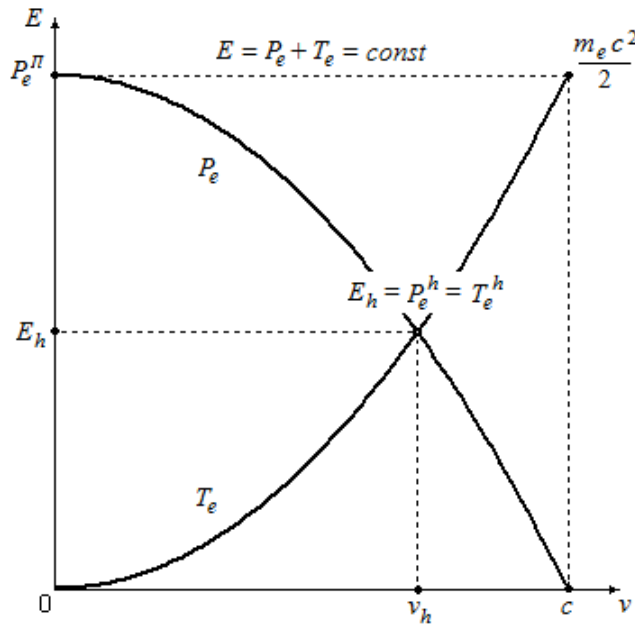


Рис. 3. Диаграмма полной энергии элементарного осциллятора.

В свою очередь, полученная подобным образом схема взаимосвязи зависимостей вида (3) и (4) дает возможность выделить точку, соответствующую условию равенства потенциальной  $P_e(v_h)$  и кинетической  $T_e(v_h)$  энергий электрона для его линейной скорости  $v_h$  при движении по круговой орбите радиуса  $r_h$ :

$$P_e(v_h) = P_e^h = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_h}; \quad T_e(v_h) = T_e^h = \frac{m_e v_h^2}{2}.$$

Кроме того, следуя квантовой теории, любой атомный осциллятор излучает энергию квантами, пропорционально определенной частоте колебаний:

$$E_h(v_h) = E_h = hf_h; \quad f_h = \frac{v_h}{2\pi r_h}.$$

Таким образом, учитывая, что  $E_h = T_e^h = P_e^h$ , имеют место соотношения:

$$\frac{hv_h}{2\pi r_h} = \frac{m_e v_h^2}{2} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_h} = hf_h. \quad (12)$$

Выражение вида (12) дает возможность провести следующие выкладки:

$$\begin{aligned} \frac{hv_h}{2\pi r_h} = \frac{m_e v_h^2}{2} &\Rightarrow v_h = \frac{2h}{2\pi m_e r_h}; \\ \frac{m_e (2h)^2}{2(2\pi m_e r_h)^2} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_h} &\Rightarrow r_h = 2 \frac{4\pi\epsilon_0}{e^2 m_e} \left( \frac{h}{2\pi} \right)^2 = 2r_0; \\ \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (2r_0)} = hf_h &\Rightarrow f_h = \frac{1}{h} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (2r_0)} = R. \end{aligned} \quad (13)$$

Ключевым преимуществом представленного «альтернативного» вывода постоянной Ридберга является объективное исключение из процедуры непрерывных математических преобразований обоих постулатов Бора (5) и (6), изначально регламентирующих основные принципы современной квантовой механики.

Следует отметить, что уравнение (13) может быть напрямую сопоставлено с обобщенной формулой Бальмера – Ридберга, весьма эффективно описывающей частотную зависимость линейчатого спектра водорода:

$$f_r = R \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) = \frac{1}{h} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(2r_0)} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right), \quad (14)$$

где  $n$  – натуральные числа, определяющие номер отдельной серии;  $m$  – натуральные числа, характеризующие спектральные линии  $n$ -й серии.

Особенность выражения (14) заключается в том, что на его основе может быть сформировано очевидное уравнение линейчатого спектра сложного атома:

$$f_r = \frac{1}{h} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0(2r_0)} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) = ZR \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right), \quad (15)$$

где  $Z$  – номер атомного ядра в периодической системе химических элементов.

### Кибернетическое моделирование частотных спектров

Наряду с ранее изложенными обстоятельствами, математическая модель упругой электронной поляризации, возникающей под действием слабого электромагнитного поля и физически обуславливающей спектральные серии атомов или ионов, вполне адекватно описывается классическим уравнением затухающих колебаний линейного гармонического осциллятора [43]:

$$\frac{d^2 \mu(t)}{dt^2} + 2\beta \frac{d\mu(t)}{dt} + \omega_0^2 \mu(t) = \frac{(ze)^2}{zm_e} E(t), \quad (16)$$

где  $\mu(t)$  – временная функция наведенного дипольного момента;  $\beta$  и  $\omega_0$  – коэффициент затухания и частота собственных колебаний электронного облака;  $z$  – число составляющих его электронов;  $E(t)$  – напряженность эффективного электрического поля, действующего внутри поляризованного образца.

Кроме того, с помощью типичной для технической кибернетики серии преобразований обыкновенного дифференциального уравнения (16) можно получить частотную передаточную функцию  $W(j\omega)$  электронных колебаний частицы, эквивалентную комплексному выражению ее электронной поляризуемости  $\alpha(j\omega)$ :

$$W(j\omega) = \frac{\mu(j\omega)}{E(j\omega)} = \frac{ze^2}{m_e} \cdot \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 + j2\beta\omega} = \alpha(j\omega) = \alpha_{\text{Re}}(\omega) - j\alpha_{\text{Im}}(\omega),$$

где  $\alpha_{\text{Re}}(\omega)$  и  $\alpha_{\text{Im}}(\omega)$  – вещественная и мнимая частотные характеристики вида:

$$\alpha_{\text{Re}}(\omega) = \frac{ze^2}{m_e} \cdot \frac{\omega_0^2 - \omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 - (2\beta\omega)^2}; \quad (17)$$

$$\alpha_{\text{Im}}(\omega) = \frac{ze^2}{m_e} \cdot \frac{2\beta\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 - (2\beta\omega)^2}. \quad (18)$$

В свою очередь, наиболее эффективным выражением комплексной диэлектрической проницаемости конкретных физических веществ, находящихся в различных агрегатных состояниях, оказывается ее кибернетическая модель [27, 35]

$$\varepsilon(j\omega) = 1 + \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K \alpha_i(j\omega)N_i = \varepsilon_{\text{Re}}(\omega) + j\varepsilon_{\text{Im}}(\omega),$$

где  $K$  – общее число разновидностей электронных орбиталей частиц вещества;  $N_i$  – их объемные концентрации;  $\varepsilon_{\text{Re}}(\omega)$  и  $\varepsilon_{\text{Im}}(\omega)$  – вещественная и мнимая частотные характеристики комплексной диэлектрической проницаемости вида:

$$\varepsilon_{\text{Re}}(\omega) = 1 + \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K \alpha_{\text{Re}i}(\omega)N_i; \quad (19)$$

$$\varepsilon_{\text{Im}}(\omega) = \frac{2}{3\varepsilon_0} \sum_{i=1}^K \alpha_{\text{Im}i}(\omega)N_i. \quad (20)$$

Объемные концентрации отдельных частиц вещества могут быть найдены по классической формуле:

$$N = k \rho / M, \quad (21)$$

где  $\rho$  – физическая плотность образца;  $M$  – молекулярная масса его формульной единицы;  $k$  – количество одинаковых частиц в ее составе.

И наконец, частотные зависимости показателей оптического преломления  $n(\omega)$  и оптического поглощения  $\chi(\omega)$  светового потока исследуемым материалом описываются известными соотношениями [44]:

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{\sqrt{\varepsilon_{\text{Re}}^2(\omega) + \varepsilon_{\text{Im}}^2(\omega)} + \varepsilon_{\text{Re}}(\omega)}{2}}; \quad (22)$$

$$\chi(\omega) = \sqrt{\frac{\sqrt{\varepsilon_{\text{Re}}^2(\omega) + \varepsilon_{\text{Im}}^2(\omega)} - \varepsilon_{\text{Re}}(\omega)}{2}}. \quad (23)$$

Таким образом, совокупность уравнений (17) – (23) может оцениваться в качестве конечного результата структурного синтеза общего решения задачи непрерывно-детерминированного моделирования частотных и других аналогичных им, – например, длинноволновых электронных спектров конкретных веществ, физически измеряемых в области видимого и ультрафиолетового диапазонов.

Остановливаясь на рассмотрении возможности эффективного параметрического синтеза вышеуказанных уравнений, необходимо отметить, что основную трудность вызывает определение численных значений динамических параметров



изучаемых процессов – коэффициентов затухания и частот собственных колебаний электронных орбиталей частиц, так как их собственные параметры – заряды, массы и объемные концентрации – находятся вполне однозначно.

Для устранения выявленного затруднения можно констатировать, что уравнение (23), описывающее частотный спектр поглощения электромагнитного излучения светового потока, является теоретическим аналогом физически наблюдаемых линейчатых спектров. Типовое условие существования экстремума структурно входящей в него функции (18), определяемое резонансной круговой частотой  $\omega_r$ , соответствующей полосы электронного поглощения, имеет вид:

$$\omega_r = 2\pi f_r = \sqrt{\omega_0^2 - 2\beta^2}.$$

Кроме того, на основании имеющихся достоверных экспериментальных данных [45] можно смело утверждать, что  $\beta \ll \omega_0$ , следовательно, учитывая формулу (15), значения частот собственных колебаний конкретных электронных орбиталей отдельных веществ могут быть выражены как:

$$\omega_{0i} = \omega_{ri} = 2\pi ZR \left( \frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{m_i^2} \right), \quad i = \overline{1, K}. \quad (24)$$

Несмотря на относительную простоту уравнений (17) – (24), их общий вычислительный потенциал обуславливает принципиальную возможность детерминированного моделирования непрерывных частотных спектров электронных свойств самых разнообразных веществ, а его достоверность достаточно просто проверяется путем сопоставления расчетных характеристик с их соответствующими экспериментальными аналогами. При этом точность совпадения теоретических и физических спектров может рассматриваться в качестве прямого доказательства используемых математических моделей.

### Расчетные электронные спектры водорода и гелия

Теория Бора была крупным шагом в развитии атомной физики и создании квантовой механики. Однако, основываясь, с одной стороны, на законах классической физики, с другой, – на квантовых постулатах, она не может объяснить интенсивность полос поглощения, а также физические условия осуществления тех или иных квантовых переходов. Помимо всего прочего, весьма серьезным изъяном теории Бора является невозможность описания атомного спектра гелия – простейшего из инертных газов, располагающегося непосредственно за водородом в периодической таблице свойств химических элементов.

В свою очередь, предлагаемая автором методика практического расчета оптических спектров вещества должна устранить, по крайней мере, второй из указанных недостатков. Для проверки данного утверждения был проведен ряд пред-

варительных вычислительных экспериментов, направленных на кибернетическое моделирование типичного ряда электронных характеристик водорода, обобщенные результаты которого приведены на рис. 4.

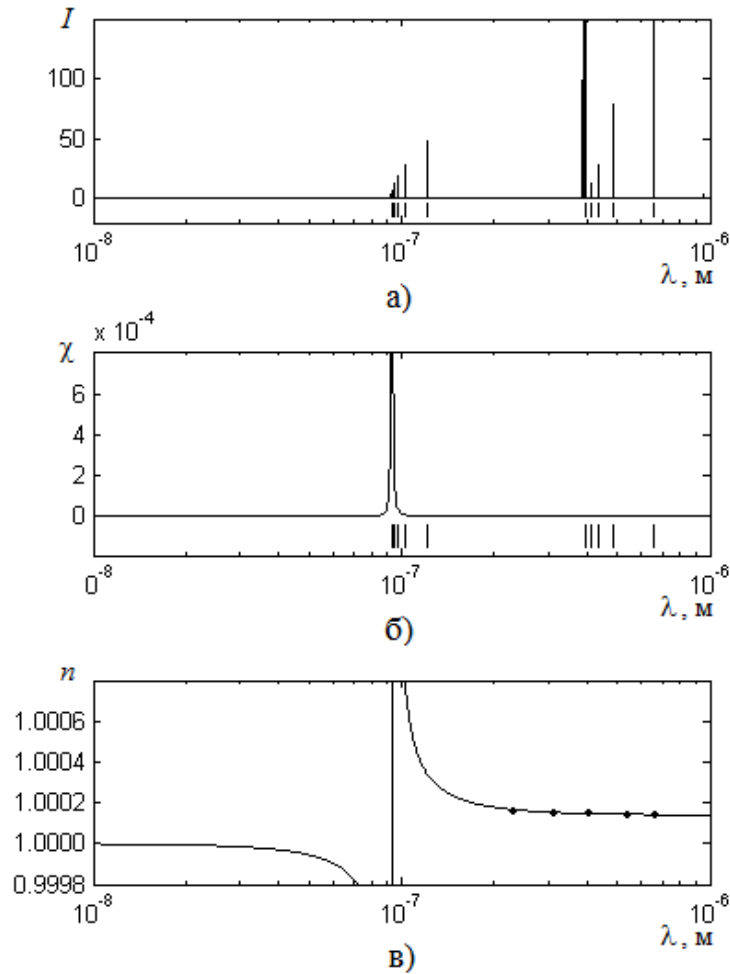


Рис. 4. Электронные характеристики водорода: а) линейчатый спектр; б) спектр показателя поглощения; в) спектр показателя преломления.

Комментируя представленные графики, необходимо отметить.

График на рис. 4а воспроизводит экспериментальную длинноволновую зависимость интенсивности полос поглощения водорода, т.е. его линейчатый атомный спектр [45], изображенный над горизонтальной линией, под которой изображены вертикальные отрезки, соответствующие значениям частот поглощения, рассчитанным по формуле (15). График на рис. 4б изображает теоретическую зависимость показателя оптического поглощения водорода, рассчитанную с помощью уравнений (17) – (23). При этом структурный параметр молекулы  $H_2$  имел значение  $k = 1$ , конфигурация электронной оболочки описывалась как  $z = 2$ , а частота ее собственных колебаний определялась по формуле (24) для  $n = 1$  и  $m = 7$ .

Сплошная линия на рис. 4в отображает теоретическую зависимость показателя оптического преломления водорода, рассчитанную с помощью уравнений (17) – (23) для тех же самых собственных параметров его электронной конфигу-

рации, что и предыдущая характеристика. Кроме того, на рассматриваемом графике выведен точечный массив, воспроизводящий экспериментальную длинноволновую зависимость моделируемого спектра [45], который хорошо коррелирует с результатами его теоретических расчетов как по численным значениям, так и по общей поведенческой страте моделируемой кривой.

Комплексный анализ общей совокупности представленных результатов позволяет достаточно обоснованно констатировать, что предлагаемая методика описания оптических спектров вещества является, во-первых, такой же эффективной, как и существующие в настоящее время общепризнанные способы квантово-механических вычислений. Во-вторых, она оказывается гораздо менее затратной с точки зрения привлекаемых вычислительных ресурсов, так как целиком и полностью опирается на простые непрерывно-детерминированные математические модели. В-третьих, данная методика предоставляет дополнительную возможность достоверного подтверждения адекватности используемых моделей в области эффективного моделирования основных физических свойств вещества, к которым однозначно относится частотная зависимость оптического спектра преломления исследуемым материалом видимого света.

Для проверки универсальности предлагаемой методики был проведен ряд дополнительных вычислительных экспериментов, направленных на кибернетическое моделирование рассматриваемого ряда электронных характеристик гелия, обобщенные результаты которого приведены на рис. 5.

Комментируя текущую группу графиков, отметим следующее.

График на рис. 5а воспроизводит экспериментальную длинноволновую зависимость интенсивности полос поглощения гелия [45]. При этом результаты теоретических расчетов соответствующих значений частот поглощения, рассчитанных по формуле (15) и показанных вертикальными отрезками под горизонтальной линией, несколько хуже соответствуют их физически наблюдаемым аналогам, однако серия линий Лаймана оказывается локализованной в требуемой области частот.

График на рис. 5б изображает теоретическую зависимость показателя оптического поглощения гелия, рассчитанную с помощью уравнений (17) – (23). При этом  $k = 1$ ,  $z = 2$ , а  $\omega_0$  определялась по формуле (24) для  $n = 1$  и  $m = 7$ .

Сплошная линия на рис. 5в отображает теоретическую зависимость показателя оптического преломления гелия, рассчитанную с помощью уравнений (17) – (23) для тех же самых собственных параметров его электронной конфигурации, что и предыдущая характеристика. Кроме того, на графике выведен точечный массив, воспроизводящий экспериментальную длинноволновую зависимость моделируемого спектра [45], хорошо коррелирующий с результатами расчетов.

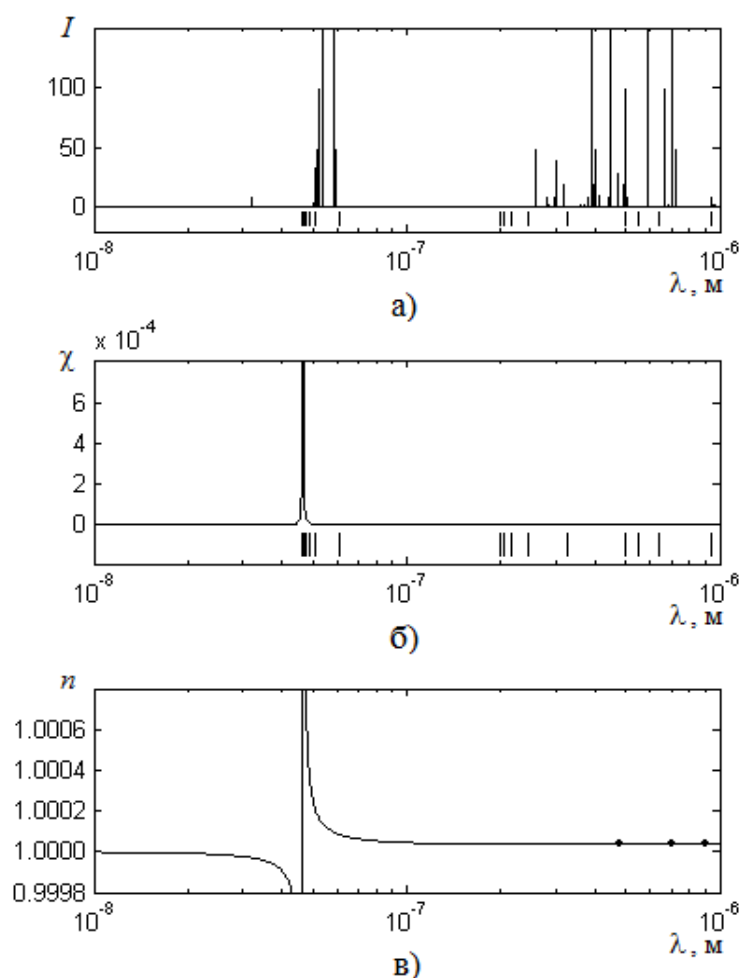


Рис. 5. Электронные характеристики гелия: а) линейчатый спектр; б) спектр показателя поглощения; в) спектр показателя преломления.

Таким образом, принимая во внимание, что обе серии вычислительных экспериментов проводились в рамках единой математической модели, можно достаточно обоснованно констатировать наибольшую результативность предлагаемой методики практического расчета электронных спектров вещества по сравнению со всеми существующими на текущий момент способами теоретического описания исследуемых физических характеристик.

### Заключение

К основным недостаткам существующих методик практических расчетов электронных свойств вещества, реализуемых в рамках квантовой теории, можно с достаточной степенью уверенности отнести следующие ключевые моменты. Во-первых, чрезвычайную громоздкость непосредственно производимых вычислений, связанных с необходимостью учета внутренних состояний каждого отдельного элемента сложной физической системы. Во-вторых, дискретность линейчатых спектров энергетических уровней электронных орбиталей, обусловленную сущностью дискретно-стохастического подхода.

Первое из названных обстоятельств является хорошо известным, второе же представляется более злободневным, поскольку в качестве экспериментальных данных, используемых для выяснения электронной конфигурации атомов или ионов, обычно выступают их спектральные линии, отображающие максимумы полос поглощения электромагнитного поля света частицами конкретного вещества в рентгеновском диапазоне частот электромагнитного спектра. С другой стороны, активное развитие колебательной спектроскопии привело к возможности привлечения для решения рассматриваемых задач электронно-оптических спектров материалов, представляющих собой плавные кривые, которые могут быть легко сопоставленными с результатами теоретических расчетов.

Учитывая сложившуюся ситуацию, особую актуальность приобретает проблема критического пересмотра и современного развития фундаментальных положений классической электронной теории, обладающей несомненными преимуществами, обусловленными в первую очередь применением в качестве основной математической схемы обыкновенных дифференциальных уравнений, т.е. непрерывно-детерминированных моделей изучаемых систем. Следует отметить, что непосредственный вычислительный потенциал названного подхода позволяет одновременно устранить оба недостатка традиционных квантовых расчетов, а также существенно упростить решение задачи структурного синтеза математических выражений искомых характеристик.

В свою очередь непрерывно-детерминированное моделирование электронно-оптических спектров вещества никоим образом не подразумевает отказа от дискретной трактовки электронного строения атома, которая в рассматриваемом случае может использоваться для определения динамических параметров классических уравнений электронной поляризации конкретных материалов.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. *Кобаяси Н.* Введение в нанотехнологию. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2007.
2. *Roldan-Charria J.* Indivisibility, Complementarity and Ontology: A Bohrian Interpretation of Quantum Mechanics // *Foundations of Physics.* – 2014. – V. 44, № 12. – P. 1336-1356.
3. *Chun Miao, Shu-Dong Fang, Ping Dong, Zhuo-Liang Cao.* Remote Preparation of Quantum Entangled State in a Non-Markovian Environment // *International Journal of Theoretical Physics.* – 2014. – V. 53, № 12. – P. 4098-4106.
4. *Cenatiempo S., Giuliani A.* Renormalization Theory of a Two Dimensional Bose Gas: Quantum Critical Point and Quasi-Condensed State // *Journal of Statistical Physics.* – 2014. – V. 157, № 4-5. – P. 755-829.
5. *Cattaneo A.S, Mnev P.* Wave Relations // *Communications in Mathematical Physics.* – 2014. – V. 332, № 3. – P. 1083-1111.
6. *Sych D., Leuchs G.* Quantum Uniqueness // *Foundations of Physics.* – 2015. – V. 45, № 12. – P. 1613-1619.

7. *Robinson T.R., Haven E.* Quantization and Quantum-Like Phenomena: A Number Amplitude Approach Environment // International Journal of Theoretical Physics. – 2015. – V. 54, № 12. – P. 4576-4590.
8. *Dodson C.T.J.* A Model for Gaussian Perturbations of Graphene // Journal of Statistical Physics. – 2015. – V. 161, № 4. – P. 933-941.
9. *Daniela Cadamuro, Yoh Tanimoto.* Wedge-Local Fields in Integrable Models with Bound States // Communications in Mathematical Physics. – 2015. – V. 340, № 2. – P. 661-697.
10. *Hamid Reza Naeij, Afshin Shafiee.* Double-Slit Interference Pattern for a Macroscopic Quantum System // Foundations of Physics. – 2016. – V. 46, № 12. – P. 1634-1648.
11. *Qing-bin Luo, Guo-wu Yang, Kun She, Xiaoyu Li.* Quantum Private Comparison Protocol with Linear Optics // International Journal of Theoretical Physics. – 2016. – V. 55, № 12. – P. 5336-5343.
12. *Hansen F.* Quantum Entropy Derived from First Principles // Journal of Statistical Physics. – 2016. – V. 165, № 5. – P. 799-808.
13. *Yoshiko Ogata.* A Class of Asymmetric Gapped Hamiltonians on Quantum Spin Chains and its Characterization. I // Communications in Mathematical Physics. – 2016. – V. 348, № 3. – P. 847-895.
14. *Santamoto E., De Martini F.* Proof of the Spin Statistics Connection II: Relativistic Theory // Foundations of Physics. – 2016. – V. 47, № 12. – P. 1609-1625.
15. *Moreira C., Wichert A.* Are Quantum Models for Order Effects Quantum // International Journal of Theoretical Physics. – 2017. – V. 56, № 12. – P. 4029-4046.
16. *Satoshi Nakajima, Yasuhiro Tokura.* Excess Entropy Production in Quantum System: Quantum Master Equation Approach // Journal of Statistical Physics. – 2017. – V. 169, № 5. – P. 902-928.
17. *Berry D.W., Childs A.M., Ostrander A., Guoming Wang.* Quantum Algorithm for Linear Differential Equations with Exponentially Improved Dependence on Precision // Communications in Mathematical Physics. – 2017. – V. 356, № 3. – P. 1057-1081.
18. *Shengwei Han, Xiaoting Xu, Feng Qin.* The Unitality of Quantum B-algebras // International Journal of Theoretical Physics. – 2018. – V. 57, № 5. – P. 1582-1590.
19. *Barletti L., Negulescu C.* Quantum Transmission Conditions for Diffusive Transport in Graphene with Steep Potentials // Journal of Statistical Physics. – 2018. – V. 171, № 4. – P. 696-726.
20. *Ott T., Grebogi C., Yorke G.* Controlling chaos // Physical Review Letters. – 1990. – V. 64, № 11. – P. 1196-1199.
21. *Фрадков А.Л.* Кибернетическая физика. Принципы и примеры. – СПб.: Наука, 2003.
22. *Costa de Beauregard O.* Relativistic Quantum Mechanics as a Telegraph // Foundations of Physics. – 2001. – V. 31, № 5. – P. 837-848.
23. *Rossi A.* Energy – Information Coupling From Classical to Quantum Physics // International Journal of Theoretical Physics. – 2005. – V. 44, № 7. – P. 821-826.
24. *Ellis G.F.R.* Physics and the Real World // Foundations of Physics. – 2006. – V. 36, № 2. – P. 227-262.
25. *Barbarani V.* New Quantum Statistics and the Theory of Bose-Einstein Condensation // International Journal of Theoretical Physics. – 2007. – V. 46, № 10. – P. 2401-2448.
26. *Rapoport D.L.* Surmounting the Cartesian Cut Through Philosophy, Physics, Logic, Cybernetics, and Geometry: Self-reference, Torsion, the Klein Bottle, the Time Operator, Multivalued Logics and Quantum Mechanics // Foundations of Physics. – 2011. – V. 41, № 1. – P. 33-76.
27. *Еремин И.Е., Костюков Н.С.* Построение модели процесса поляризации диэлектриков с по-

- мощью обратных связей // Информатика и системы управления. – 2001. – № 1. – С.45-53.
28. *Еремин И.Е., Еремина В.В., Костюков Н.С., Оверчук В.А.* Элементы параметрического синтеза линейной модели процесса упругой электронной поляризации // Информатика и системы управления. – 2003. – № 1(5). – С. 26-32.
  29. *Еремина В.В., Костюков Н.С. Тюрина С.Ю.* Моделирование оптического спектра воды в области упругих видов поляризации // Информатика и системы управления. – 2003. – № 2(6). – С. 9-14.
  30. *Еремина В.В., Костюков Н.С., Тюрина С.Ю.* Моделирование оптического спектра воды в области упругой ионной поляризации // Информатика и системы управления. – 2004. – № 2(8). – С. 32-36.
  31. *Еремин И.Е., Еремина В.В., Костюков Н.С.* Моделирование электронно-атомной структуры конденсированных диэлектриков. – Благовещенск: АмГУ, 2006.
  32. *Еремина В.В.* Имитационные модели релаксационной поляризации воды. I // Информатика и системы управления. – 2008. – № 1(15). – С. 38-45.
  33. *Еремин И.Е.* Кибернетическая теория поляризации щелочно-галлоидных кристаллов. III // Информатика и системы управления. – 2009. – № 3(21). – С. 20-26.
  34. *Еремин И.Е., Жилиндина О.В.* Методика расчета экранирующих вкладов оптических электронов аниона кислорода // Вестник Тихоокеанского государственного университета. – 2009. – № 4(15). – С. 17-24.
  35. *Еремин И.Е., Еремина В.В., Ланина С.Ю.* Устранение катастрофы Мосотти с позиций системного подхода // Вестник Челябинского государственного педагогического университета. – 2010. – № 2. – С. 284-297.
  36. *Еремин И.Е., Сычева М.П.* Альтернативный способ визуализации электронной структуры ионного кристалла // Вестник Тихоокеанского государственного университета. – 2010. – № 3(18). – С. 73-80.
  37. *Еремина В.В., Уляхина Д.А.* Имитационное моделирование электронного строения трехмерных многомолекулярных кластеров воды // Информатика и системы управления. – 2010. – № 3(25). – С. 57-60.
  38. *Еремина В.В., Уляхина Д.А.* Имитационное моделирование структуры пятимолекулярных конгломератов воды // Информатика и системы управления. – 2010. – № 4(26). – С. 43-49.
  39. *Еремин И.Е., Еремина В.В., Уляхина Д.А.* Метод расчета динамических параметров поляризационных процессов // Информатика и системы управления. – 2011. – № 3(29). – С. 60-69.
  40. *Жилиндина О.В., Еремин И.Е.* Моделирование упругой электронной поляризации кордиеритовой керамики Л-24 // Стекло и керамика. – 2012. – № 7. – С. 30-32.
  41. *Трофимова Т.И.* Курс физики. – М.: Высшая школа, 2000.
  42. *Выгодский М.Я.* Справочник по элементарной математике. – М.: Наука, 1979.
  43. *Хиппель А.* Диэлектрики и волны. – М.: ИИЛ, 1960.
  44. *Золотарев В.М. и др.* Оптические постоянные природных и технических сред. Справочник. – Л.: Химия, 1984.
  45. *Lide D.R.* Handbook of Chemistry and Physics: 9th Edition. – Boca Raton, FL: CRC Press, 2009.

*E-mail:*

*Еремин Илья Евгеньевич – [ilya.eremin.70@mail.ru](mailto:ilya.eremin.70@mail.ru).*