

В. Ю. Ганкин, Ю.В. Ганкин

## **Как образуется химическая связь и протекают химические реакции**

### ***4.13.4 Строение элементарных частиц***

Согласно электронной энциклопедии Кругосвет: «Главная задача фундаментального изучения материи состоит в том, чтобы как можно больше узнать о всех возможных ее формах, т.е. установить, какие бывают элементарные частицы и каковы их свойства, объяснить, почему наша Вселенная содержит именно эти, а не другие разновидности частиц. В 1970-х годах возникла теория, в которой элементарные частицы считались состоящими из еще более фундаментальных «кирпичиков» материи – кварков. Сначала кварков было всего три, затем их стало 12, а чуть позже – 15. Как это часто бывало в прошлом с другими теориями материи, с каждым таким расширением списка частиц усиливалось подозрение, что теория кварков при всей ее привлекательности все же не является подлинно фундаментальной».

Нам кажется логичным предположить, что если способы организации материи одинаковы в интервале 25 порядков ( $10^{12}$  —  $10^{-13}$  см), то этот же способ организации материи наиболее вероятен и для частиц с радиусом меньше чем  $10^{-13}$  см, т.е. логично предположить, что все материальные частицы являются комбинациями положительно и отрицательно заряженных частиц, которые сами являются сложными, т.е. состоят из зарядов. Т.е. степень дробления материи и, соответственно, зарядов определяется только энергией, которую мы можем сообщить частицам. Так, например, для разрыва молекул на атомы требуется энергия  $\approx 5$  эВ, для отрыва электрона от атома водорода 13,6 эВ, а для разрыва связи между нуклонами  $\approx 10$  МэВ. Эффективный заряд (заряд, определяющий гравитационные и инерциальные свойства) систем, состоящих из зарядов, зависит от величины зарядов и от их композиции (расстояний между зарядами и

геометрии их расположения) и определяется согласно электростатическим законам величиной зарядов и их суперпозицией. «Напряженность поля системы зарядов равна векторной сумме напряженностей полей, которые создавал бы каждый из зарядов системы в отдельности» (И.В Савельев, Общий курс физики, т.2, стр.19). Как было показано при объяснении электронных спектров молекулы водорода, при сообщении энергии системам, состоящим из зарядов, меняется расстояние между зарядами и геометрия их расположения и, соответственно, меняется эффективный заряд системы (или частицы, состоящей из зарядов). Изменение эффективного заряда в свою очередь приводит к изменению инерциальных и гравитационных свойств частицы, которые определяются ее эффективным зарядом. Обобщение данных по реакции электронной изомеризации, исключение нейтральной и неструктурированной нейтральной массы, как независимой сущности, выяснение наличия электромагнитной массы и ее зависимости от внутреннего строения систем, выяснение физической природы химической связи, нуклон – нуклонной и связи между космическими объектами – главное сравнительно пологого энергетического минимума в системах, обеспечивающее свободное движение кольца связывающих электронов вдоль связи без существенного изменения энергии молекулы, и изменения радиуса орбиты вращения связывающих электронов при возбуждении, как молекул, так и нуклон – нуклонных образований, предполагает при исследовании микрочастиц обнаружение огромного числа изомеров состоящих из одинаковых зарядов, но различающихся между собой по эффективному заряду микрочастиц. Так, например, при возбуждении атома водорода на 10 эВ, расстояние между электроном и ядром увеличивается примерно в три раза. Время жизни этого электронного изомера составляет  $10^{-13}$  сек., в то время как атом водорода в основном (невозбужденном состоянии) является устойчивой частицей. Энергетические спектры нуклонов, атомных ядер и молекул близки между собой. Т.е при возбуждении нуклонов, соответственно, на  $10^6$  эВ, электрон также будет удаляться от ядра, что по полной аналогии должно приводить к появлению короткоживущих изомеров, отличающихся от нуклонов в основном состоянии, не только по устойчивости, но и по эффективному заряду и, соответственно, по

инерциальным свойствам, на основании которых рассчитывается масса частицы и придумываются квантовые числа.

В космических лучах, и фазотронах устойчивые в невозбужденном состоянии частицы являются возбужденными. В этих условиях возможно появление практически бесчисленного числа электронных, электрон – позитронных и электрон – ядерных изомеров различающихся по всем измеряемым параметрам: заряду, электромагнитной массе, времени жизни и т.д. Увеличения количества обнаруживаемых новых частиц следует ожидать по мере роста мощности ускорителей и повышения чувствительности приборов регистрирующих появление новых частиц. Это можно считать предсказанием, сделанным на основе экстраполяции теории, единообразно объясняющей силы (силы F и S) и строение веществ (комбинацией зарядов) в интервале размеров  $10^{23}$  –  $10^{-13}$  см и энергий 5 эВ – 10 ГэВ, за пределами нижних границ по длинам и верхних границ по энергиям. В хорошем согласии с ожидаемым (в согласии с предсказанием), до настоящего времени количество новых частиц, обнаруживаемых в ускорителях и в космических лучах, непрерывно возрастает с ростом мощности строящихся ускорителей, увеличения чувствительности приборов, их регистрирующих. Обнаруживаемые частицы называются новыми элементарными частицами т.к. они отличаются от ранее известных по массе, времени жизни и заряду. Согласно Савельеву (И.В Савельев, Общий курс физики, т.5, стр.340) для объяснения строения этих частиц и сил, между ними действующих, придумываются новые сущности, не имеющие физического содержания: спин, изотопический спин, странность, цвет, очарование; новые квантовые числа: Q, Y, S; «новые **законы** сохранения, часть которых являются **не точными**, а лишь приближенными (выделено авторами как новое научное понятие). Так, например, закон сохранения гиперзаряда Y (или странности S) выполняется в случае сильных и электромагнитных взаимодействий и нарушаются в слабых взаимодействиях» (И.В Савельев, Общий курс физики, т.5, стр.352). Казалось бы, более чем достаточно, или как говорят в Америке enough is enough, можно вроде бы остановиться и, наконец, понять бесперспективность

этих математических квантово-механических подходов, бесперспективность этой математической ярмарки тщеславия, но этому направлению не видно конца. С периодом около 10 – 15 лет уже в течении более 70 лет на смену одним объяснениям (без критического обсуждения последних) приходят другие, основанные на следующих выдуманных сущностях. Общим между новыми и старыми сущностями является то, что и те и другие не имеют физического содержания.

Новый подход к объяснению строения материи и теории элементарных частиц является еще одной иллюстрацией применения и эффективности электродинамического подхода для объяснения физических и химических явлений. Ничем неограниченное деление положительных и отрицательных зарядов с сохранением при этом сложного строения получающихся при делении более мелких частиц и ничем неограниченное сближение этих более мелких частиц в пространстве при образовании более сложных частиц позволяет ответить на ряд не решенных фундаментальных вопросов.

Одним из основных вопросов при описании строения материи на основе массы является вопрос о коллапсе объектов, состоящих из массы, т.к. между массами существуют только силы притяжения, увеличивающиеся без ограничения при сближении масс. С другой стороны, поиски элементарного (неделимого), заряда сталкивались с необходимостью объяснения возможности (строения), существования положительных и отрицательных неделимых зарядов т.к. никаких других сил, кроме сил отталкивания между одноименными зарядами и, соответственно, безграничного роста сил отталкивания при уменьшении до нуля расстояния между одноименными зарядами, в исходных сущностях не оговаривалось. Эффективность нашего подхода выражается в данном случае в том, что в рамках предлагаемой модели строения материи удастся не только объяснить физические явления с использованием меньшего количества старых сущностей, но и ответить на ряд вопросов, на которые не удалось ответить не только в рамках старых сущностей, но и после введения огромного количества новых. Предложенная модель строения материи предполагает, что *все*

*материальные частицы являются комбинациями положительных и отрицательных зарядов.*

На первый вопрос о коллапсе масс объяснение в рамках нового подхода легко понимаемо. В новом подходе нейтральная масса и ее свойства (гравитация и инерция) не используются как исходные сущности и поэтому этого парадоксального вопроса не существует. Более того, исключение этого вопроса является одним из конкретных примеров преимуществ нового подхода.

Электромагнитной массе посвящена целая глава в знаменитых Фейнмановских лекциях (Р. Фейнман, Р. Лейтер, М. Сэндс Фейнмановские лекции по физике, глава 28). В модели электрона в виде шара, на основе законов электродинамики было показано, что электромагнитная масса пропорциональна квадрату заряда частицы и обратно пропорциональна радиусу электрона – шара. Найденные зависимости позволяют рассчитать радиус электрона, при котором электромагнитная масса электрона будет равна его инерциальной массе. Рассчитанный радиус электрона составляет  $2,82 \cdot 10^{-18}$  см и называется классическим радиусом электрона. Это объяснение является лишь иллюстрацией того, что в физике, электродинамическое объяснение инерциальных свойств массы лежит на магистральном направлении. Основным недостатком этого объяснения явилось то, что в нем не объяснялось, почему шарообразный электрон не разлетается под действием кулоновских сил. В отличие от этого предположения нами предполагается, что электрон состоит из положительных и отрицательных частиц. Например, из двух отрицательно заряженных, вращающихся вокруг одной положительно заряженной. Т.е. его строение подобно гидрид иону. Объединение двух отрицательно заряженных частиц одной положительной снимает вопрос о кулоновском отталкивании между одноименно заряженными частицами. Совпадение большинства простых электростатических расчетов, в которых электрон рассматривался как отрицательно заряженная точка (например, расчет атома водорода) с экспериментальными данными обусловлено тем, что влияние на результаты расчетов отличий предлагаемой модели электрона от его точечной модели, принимаемой в расчете, определяется соотношением расстояний между отрицательно

заряженными и положительно заряженной частицей в предлагаемой модели электрона и расстоянием до положительно заряженной частицы, вокруг которой этот сложный электрон вращается. Чем меньше это соотношение, тем меньше будет отличаться рассчитанное значение, например, энергий водородоподобных атомов, от их энергий, определяемых экспериментально. В водородоподобном атоме по аналогии с соотношением между расстояниями, измеряемыми в атоме в ангстремах и расстояниями в ядрах, измеряемыми величинами в  $10^4$  раз меньшими, отклонение экспериментальных данных от расчетных составляет менее 0,1%, что соответствует полуколичественно сделанным выше предположениям. Независимым доказательством сложного строения электрона является наличие у него магнитного момента и само его (электрона) существование.

#### ***4.14. Внутрядерные силы и переход массы в энергию***

Согласно Савельеву (И.В.Савельев Курс общей физики книга 5 стр.286)

1) Ядерные силы являются коротко действующими. Их радиус действия имеет порядок  $10^{-13}$  см. На расстояниях существенно меньших  $10^{-13}$  см притяжение нуклонов сменяется отталкиванием.

2) Сильное взаимодействие не зависит от заряда нуклонов. Ядерные силы, действующие между двумя протонами, протоном и нейтроном и двумя нейтронами, имеют одинаковую величину. Это свойство называется зарядовой независимостью ядерных сил.

3) Ядерные силы зависят от взаимной ориентации спинов нуклонов. Так, например, нейтрон и протон удерживаются вместе, образуя ядро тяжелого водорода дейтрон только в том случае, если спины их параллельны друг другу.

4) Ядерные силы не являются центральными. Их нельзя представить направленными вдоль прямой, соединяющей центры взаимодействующих нуклонов. Не центральность ядерных сил вытекает, в частности, из того факта, что они зависят от ориентации спинов нуклонов.

5) Ядерные силы обладают свойством насыщения. (Это означает, что

каждый нуклон в ядре взаимодействует с ограниченным числом нуклонов). Насыщение проявляется в том, что удельная энергия связи нуклонов в ядре при увеличении числа нуклонов в ядре не растет, а остается примерно постоянной. Кроме того, на насыщение ядерных сил указывает также пропорциональность объема ядра числу образующих его нуклонов.

6) Согласно Л.Д.Ландау, Е.М.Лившиц (см выше стр.588)при изучении свойств атомов было обнаружено, «что электронные состояния в них можно разбить на группы такие, что при заполнении каждой из них и переходе к следующей энергия связи электрона падает. Аналогичная ситуация имеет место для ядер, причем нуклонные состояния распределяются по группам». «Для каждой группы имеется полное число протонных или нейтронных вакансий. Соответственно этим числам заполнение какой-либо из групп заканчивается, когда полное число протонов или нейтронов в ядре равно одному из следующих чисел:2,8,20,50,82,126. Эти числа принято называть магическими»

Согласно <http://www.krugosvet.ru/articles/22/1002271/1002271a4.htm>: «Изучение ядерных реакций убедительно продемонстрировало существование энергетических уровней ядер. Эти уровни представляют собой состояния ядра с определенной энергией, которым приписаны определенные квантовые числа, как и энергетическим уровням атома. По аналогии с оптической спектроскопией исследование излучений, испускаемых ядром при переходах между энергетическими уровнями, называется ядерной спектроскопией. Однако расстояние между энергетическими уровнями ядер значительно больше, чем между электронными уровнями атомов, а к ядерным излучениям, кроме электромагнитного, относятся также излучения электронов, протонов, альфа-частиц и частиц других типов»

7) Согласно Савельеву (стр.281) «Масса ядра всегда меньше суммы масс входящих в него нуклонов. Это обусловлено тем, что при объединении нуклонов в ядро выделяется энергия связи нуклонов друг с другом». «Энергия связи, приходящаяся на один нуклон, называется удельной энергией связи нуклонов в ядре. Изменение массы при образовании ядер из нуклонов отнесенное к одному нуклону называется дефектом массы ( $\Delta$ ). Дефект массы связан с энергией связи

( $E_{св}$ ) соотношением  $\Delta = E_{св}/c^2$ , где  $c$  - скорость света».

8) Взаимодействие нуклонов с ядром (например, нейтрона с ядром) протекает по цепному механизму. (Там же стр.308)

9) Для термического разрыва связи между нуклонами необходима температура выше  $10^{10}$ . При взаимодействии нуклона с ядром связь между нуклонами разрывается при температурах менее  $10^3$ .

10) Ядерные силы являются новой сущностью введенной в науку в 20-м веке. Все приведенные выше их особенности, отличающие их от ранее известных сил (короткодействие - экспоненциальная зависимость силы притяжения от расстояния на расстояниях  $10^{-13}$  см, притяжение между идентичными частицами на расстояниях  $10^{-13}$  см сменяющееся на отталкивание при уменьшении расстояния, насыщенность, независимость сил от заряда и, наконец, возникновение этих сил за счет частичного превращения массы связываемых нуклонов в энергию) рассматривается до настоящего времени (2006г.) ведущими физиками и математиками, работающими в этой области как неоспоримое доказательство того, что ядерные силы не могут быть объяснены в рамках ранее известных (гравитационных, электрических и электромагнитных) взаимодействий и, соответственно, являются новой сущностью.

Несмотря на то, что на выяснение физической природы ядерных сил было потрачено больше сил и средств чем на все физические проблемы вместе взятые, согласно (Л.Д.Ландау, Е.М.Лившиц Теоретическая физика т.3 «Квантовая механика» стр.572 Москва Физматлит 2002) « В настоящее время еще не существует законченной теории так называемых ядерных сил – сил, действующих между ядерными частицами (нуклонами) и удерживающих их вместе в составе атомного ядра. В связи с этим при описании ядерных сил приходится пока в значительной степени апеллировать к опыту, чем это было бы необходимо при наличии последовательной теории».

Из дальнейшего содержания, как данной книги, так и других книг, описывающих ядерные силы, становится понятным, что скрывается под словами «не существует законченной теории так называемых ядерных сил». Оказывается что «незаконченность теории ядерных сил» заключается в том, что она (теория) не



смогла до настоящего времени ответить ни на одно «почему?», относящееся к определяемым в ходе эксперимента и перечисленным выше (см. п. 1-8) особенностям этих сил - их отличиям от известных сил (гравитационных, электрических, электромагнитных).

В 30-х годах XX-го века предлагались в рамках квантовой электродинамики объяснение причин короткодействия ядерных сил (работы И.Е.Тамма, Юкавы).

До 70-х годов в рамках квантовой электродинамики предполагалось, что процесс взаимодействия между двумя заряженными частицами, например электронами, заключается в обмене фотонами, обменные силы притяжения между атомами в молекуле (расстояние между ядрами атомами водорода в молекуле водорода  $0,74\text{Å}$ ) обусловлены обменом электронами.

Необычные свойства сил связывающих нуклоны в ядрах, перечисленные выше, практически идентичны необычным свойствам сил связывающих атомы в молекулы.

Согласно основным исходным положениям квантовой электродинамики, чем больше масса частицы, которой обмениваются взаимодействующие частицы, тем на более коротком расстоянии действуют обменные силы.

Согласно Соловьеву (см. выше стр.288) «В 1934г. И.Е.Тамм высказал предположение, что взаимодействие между нуклонами также передается посредством каких-то виртуальных частиц»

«В 1935г. Юкава высказал смелую гипотезу о том, что в природе существуют пока не обнаруженные частицы с массой, в 200-300 раз большей массы электрона, и что эти-то частицы и выполняют роль переносчиков ядерного взаимодействия...»

В 1936г. Андерсен и Неддермейер обнаружили в космических лучах частицы с массой, равной  $207m_e$ . Вначале полагали, что эти частицы, получившие название  $\mu$ -мезонов, или мюонов, и есть переносчики взаимодействия, предсказанные Юкавой. Однако впоследствии выяснилось, что мюоны очень слабо взаимодействуют с нуклонами, так что не могут быть ответственными за ядерные взаимодействия.

Только в 1947г. Пауэлл и Оккиалини открыли в космическом излучении еще один тип мезонов – так называемые  $\pi$ -мезоны, или пионы, которые оказались носителями ядерных сил, предсказанными за 12 лет до того Юкавой». В 1949 Юкава был удостоен [Нобелевской премии](#) «за предсказание существования мезонов на основе теоретических исследований ядерных сил».

Согласно

<http://www.krugosvet.ru/articles/22/1002271/1002271a4.htm>: «Пи-мезон подходил на роль частицы Юкавы, и его свойства были во всех деталях изучены физиками, использовавшими для этих целей космические лучи и современные ускорители.

Хотя существование пи-мезонов и ободрило сторонников теории Юкавы, на ее основе оказалось весьма трудно правильно предсказать такие детальные свойства ядерных сил, как их насыщение, энергии связи и энергии ядерных уровней. Трудности математического характера не позволили точно установить, что именно предсказывает эта теория. Ситуация еще более усложнилась после открытия новых типов мезонов, которые, как считается, имеют отношение к ядерным силам».

В Теоретической физике Л.Д.Ландау и Е.М.Лившица изданной в 2002 году (см. выше стр.578-582, раздел Ядерные силы.) описанная увлекательная история предсказания и открытия пионов даже не упоминается.

Согласно материалу, описанному в предыдущих главах

1)Молекулярные силы обусловлены притяжением ядер к электронам, вращающимся в плоскости перпендикулярной оси соединяющей ядра. В случае молекулы водорода при расстоянии ( $R$ ) между ядрами  $0,74\text{Å}$  молекулярные силы притяжения достигают максимума. При увеличении или уменьшении расстояния между ядрами силы притяжения резко падают. При уменьшении расстояния между ядрами до величины менее  $0,5\text{Å}$  притяжение ядер сменяется отталкиванием. При увеличении расстояния между ядрами сила притяжения падает пропорционально  $R^4$ . Т.е. молекулярные силы притяжения являются коротко действующими (действуют в интервале  $0,8-0,7\text{Å}$ ).

2)Молекулярные силы не зависят существенно от зарядов связываемых

атомов. Сила притяжения между атомами лития (Li) в молекуле  $\text{Li}_2$  и атомом и ионом лития ( $\text{Li}^+$ ) в молекуле  $\text{Li}_2^+$  близки между собой.

3) В принятом до 80-х годов квантовомеханических объяснениях валентности предполагалось, что связь между атомами образуется, если спины электронов в объединяемых атомах антипараллельны.

4) Молекулярные силы не являются центральными. Более того, равнодействующая всех сил притяжения перпендикулярна оси соединяющей ядра.

5) Молекулярные силы обладают свойством насыщения. Количество атомов водорода или хлора, которое может быть присоединено к атомам второго и третьего периода, ограничено снизу количеством электронов, которое находится в верхнем слое атома (элементы I-IV группы) и сверху максимальным количеством электронов, которое может находиться в верхнем слое атомов второго и третьего периодов т.е. числом 8.

Согласно теории химической связи при образовании каждой химической связи количество электронов во внешней оболочке центрального атома увеличивается на один электрон. Соответственно элементы V-VI-VII и VIII групп могут присоединять не более 3-х, 2-х, 1-го атомов водорода или хлора.

6) Взаимодействие радикала с молекулой протекает по цепному механизму.

7) Для термического разрыва связи между атомами необходима температура выше  $5 \times 10^3 \text{K}$ . При взаимодействии радикала с молекулой связь между атомами разрывается при температурах менее 280K.

Для удобства сравнения особенностей молекулярных и ядерных сил часть из перечисленных особенностей сведены в таблицу:

### **Сравнение особенностей ядерных и молекулярных сил**

1) Ядерные силы являются коротко действующими. Их радиус действия имеет порядок  $10^{-13}$  см. На расстояниях существенно меньших  $10^{-13}$  см притяжение нуклонов сменяется отталкиванием.

1) Внутримолекулярные (далее, молекулярные) силы обусловлены притяжением ядер к электронам вращающимся, в плоскости перпендикулярной оси соединяющей ядра. В случае молекулы водорода при расстоянии (R) между ядрами  $0,74 \text{ \AA}$  молекулярные силы притяжения достигают максимума. При увеличении или уменьшении расстояния между ядрами силы притяжения резко падают. При уменьшении расстояния между ядрами до величины менее  $0,5 \text{ \AA}$  притяжение ядер сменяется отталкиванием. При увеличении расстояния между ядрами сила притяжения падает пропорционально  $R^4$ . Т.е. молекулярные силы притяжения являются коротко действующими (действуют в интервале  $0,8-0,7 \text{ \AA}$ ).

2) Сильное взаимодействие не зависит от заряда нуклонов. Ядерные силы, действующие между протоном и нейтроном и двумя нейтронами, имеют одинаковую величину. Это свойство называется зарядовой независимостью ядерных сил.

2) Молекулярные силы не зависят существенно от зарядов связываемых атомов. Сила притяжения между атомами лития (Li) в молекуле  $\text{Li}_2$  и атомом и ионом лития ( $\text{Li}^+$ ) в молекуле  $\text{Li}_2^+$  и аналогично у всех других щелочных металлов согласно экспериментальным данным (см. например О.С.Зайцев Общая химия стр.234 М. Высш. шк., 1983) близки между собой.

3) Ядерные силы обладают свойством насыщения. (Это означает, что каждый нуклон в ядре взаимодействует с ограниченным числом нуклонов). Насыщение проявляется в том, что удельная энергия связи нуклонов в ядре при увеличении числа нуклонов в ядре не растет, а остается примерно постоянной. Кроме того, на насыщение ядерных сил указывает также пропорциональность объема ядра числу образующих его нуклонов. (И.В.Савельев. Курс общей физики, книга 5, стр. 286) Согласно Л.Д.Ландау, Е.М.Лившиц (см. выше стр. 588) при изучении свойств атомов было обнаружено,» что электронные состояния в них можно разбить на группы такие, что при заполнении каждой из них и переходе к следующей энергия связи электрона падает. Аналогичная ситуация имеет место для ядер, причем нуклонные состояния распределяются по группам».» Для каждой группы имеется полное число протонных или нейтронных вакансий. Соответственно этим числам заполнение какой-либо из групп заканчивается, когда полное число протонов или нейтронов в ядре равно одному из

3) Молекулярные силы обладают свойством насыщения. Количество атомов водорода или хлора, которое может быть присоединено к атомам второго и третьего периода, ограничено снизу количеством электронов, которое находится в верхнем слое атома (элементы I-IV группы ) и сверху максимальным количеством электронов, которое может находиться в верхнем слое атомов первого, (второго и третьего) и четвертого периодов числами 2, 8 и 18, соответственно. Эти числа принято называть магическими.

Согласно теории химической связи при образовании каждой химической связи количество электронов во внешней оболочке центрального атома увеличивается на один электрон. Соответственно элементы V-VI-VII и VIII групп могут присоединять не более 3-х, 2-х, 1-го атомов водорода или хлора.

следующих чисел: 2, 8, 20, 50, 82, 126. Эти числа принято называть магическими»

4) О наличии в ядрах электронов свидетельствуют реакции бета - распада ядер и реакция распада нейтрона на протон и электрон.

3) Ядерные силы обладают свойством насыщения. (Это означает, что каждый нуклон в ядре взаимодействует с ограниченным числом нуклонов). Насыщение проявляется в том, что удельная энергия связи нуклонов в ядре при увеличении числа нуклонов в ядре не растет, а остается примерно постоянной. Кроме того, на насыщение ядерных сил указывает также пропорциональность объема ядра числу образующих его нуклонов. (И.В.Савельев. Курс общей физики, книга 5, стр. 286) Согласно Л.Д.Ландау, Е.М.Лившиц (см. выше стр. 588) при изучении свойств атомов было обнаружено,» что электронные состояния в них можно разбить на группы такие, что при заполнении каждой из них и переходе к следующей энергия связи электрона падает. Аналогичная ситуация имеет место для ядер, причем нуклонные состояния

4) О наличии в атомах и молекулах электронов и ядер широко известно

3) Молекулярные силы обладают свойством насыщения. Количество атомов водорода или хлора, которое может быть присоединено к атомам второго и третьего периода, ограничено снизу количеством электронов, которое находится в верхнем слое атома (элементы I-IV группы ) и сверху максимальным количеством электронов, которое может находиться в верхнем слое атомов первого, (второго и третьего) и четвертого периодов числами 2, 8 и 18, соответственно. Эти числа принято называть магическими.

Согласно теории химической связи при образовании каждой химической связи количество электронов во внешней оболочке центрального атома увеличивается на один электрон. Соответственно элементы V-VI-VII и VIII групп могут присоединять не более 3-х, 2-х, 1-го атомов водорода или хлора.

распределяются по группам».» Для каждой группы имеется полное число протонных или нейтронных вакансий. Соответственно этим числам заполнение какой-либо из групп заканчивается, когда полное число протонов или нейтронов в ядре равно одному из следующих чисел: 2, 8, 20, 50, 82, 126. Эти числа принято называть магическими»

4) О наличии в ядрах электронов свидетельствуют реакции бета - распада ядер и реакция распада нейтрона на протон и электрон.

4) О наличии в атомах и молекулах электронов и ядер широко известно

5) Для термического разрыва связи между нуклонами необходима температура выше  $10^{10}$ . При взаимодействии нуклона с ядром связь между нуклонами разрывается при температурах менее  $10^3$ .

5) Для термического разрыва связи между атомами необходима температура выше  $5 \times 10^3$  К. При взаимодействии радикала с молекулой связь между атомами разрывается при температурах менее 280 К.

6) Взаимодействие нейтрона с ядром протекает по цепному механизму.

6) Взаимодействие радикалов с молекулами протекает по цепному механизму.

Экспериментальное доказательство тождественности всех основных особенностей ядерных и молекулярных сил и отсутствие различий в их особенностях является по нашему мнению необходимым и достаточным доказательством на

феноменологическом уровне того, что физическая природа обеих сил является одинаковой.

Это наше мнение является далеко не оригинальным. К этому мнению приходили практически все исследователи, занимавшиеся этим вопросом. Более того, все гипотезы и теории, объяснявшие ядерные или молекулярные силы, практически во всех случаях объясняли идентично физическую природу и особенности, как ядерных, так и молекулярных сил.

Вначале квантовомеханического подхода при изучения природы ядерных и молекулярных сил исследовались возможности объяснения этих явлений в рамках обменных взаимодействий. После неудачных попыток объяснения более одной особенности (короткодействия) ядерных сил обменными взаимодействиями эти попытки были оставлены и теоретическое научное сообщество увлеклось теорией струн, оставив в покое разработку теории, как ядерных так и молекулярных сил. По умолчанию, наверно, предполагалось, что теория струн, являющаяся более общей теорией строения мира, в будущем (после ее построения) даст возможность ответить на такие частные вопросы, как теории ядерных и молекулярных сил.

### ***Краткий исторический анализ эволюции теоретической физики (полулирическое отступление)***

Основной движущей силой теоретической физики являлось желание ученых объяснить как можно больше физических явлений наименьшим количеством исходных сущностей. Эта цель могла быть достигнута как за счет уменьшения исходных сущностей, так и за счет объяснения большего количества явлений в рамках принятых сущностей.

Так, например, до открытия закона Кулона основными исходными сущностями в физике являлись гравитационные и электрические силы (взаимодействия). После того как было выяснено, что зависимость величины обеих сил от расстояния идентичны (обе силы обратно пропорциональны квадрату расстояния) появились гипотезы предполагавшие, что гравитационное взаимодействие обусловлено электростатикой.



Аналогично после открытия электрона, выяснения, что электрон имеет заряд и инерциальную массу и что заряд, движущийся с ускорением, излучает электромагнитную энергию, Лоренцем была выдвинута гипотеза, что инерционная масса электрона обусловлена зарядом электрона. По полной аналогии после выяснения необычных идентичных особенностей сил, связывающих атомы в молекулы (молекулярные силы) и нуклоны в ядрах атомов (ядерные силы) появились гипотезы, предполагавшие качественно единую природу этих сил (обменные взаимодействия) и объяснявшие количественную разницу в расстоянии их действия, наблюдавшуюся в эксперименте. Обе силы являлись короткодействующими, но расстояния, на которых они действовали, измерялись в случае молекулярных сил в Å, а в случае ядерных в  $0,0001\text{Å}$ .

Это объяснение появилось в 30-х годах 20-го века в годы, когда квантовомеханические объяснения представлялись наконец то найденным теоретическим философским камнем, сочетание которого с компьютерной техникой позволяет ответить на все очередные вопросы, возникшие в ходе традиционного развития физики и химии.

После появления уравнения Шредингера и его решения применительно к атому водорода и молекулам  $\text{H}_2^+$  и  $\text{H}_2$  физики и химики почувствовали себя свободными от необходимости решения очередных вопросов, которые измучили их в течение предыдущих 30 лет. Они пришли к выводу (не без помощи философов от квантовой механики), что микромир это зазеркалье по отношению к тому миру, законы и закономерности которого они изучали всю жизнь в рамках традиционного естествознания и зазеркальный микромир это, соответственно, не их ума дело, это не по их департаменту- они этому не обучены, они привыкли к другому. Они привыкли к тому что не бывает следствия без причины и, что познание физического смысла явлений заключается в выяснении причинно – следственных связей между изучаемым явлением и другими явлениями и (или) принятыми исходными сущностями. Они привыкли к тому, что если предлагаемое объяснение (теория) содержит понятия, физический смысл которых не известен (функция  $\Psi$ ,

спин, правило Паули и т.д.), то это объяснение не может являться в принципе объяснением физического смысла (причинно – следственных связей) явлений. Они привыкли к тому, что если конечной целью решения уравнения является количественный результат, то в ходе решения этого уравнения, ни при каких обстоятельствах (даже с самыми благородными целями), нельзя вводить количественно не оцениваемых дополнительных предположений.

Почему же физики и химики сравнительно легко отказались от этих полезных привычек и поверили математикам? По-видимому основной причиной явилось разочарование в неограниченных познавательных и объяснительных возможностях традиционной (классической) науки и очарование неограниченными объяснительными и познавательными возможностями квантовомеханического подхода. За первые 2 - 3 года в рамках нового подхода (в рамках квантовой механики) удалось ответить практически на все основные вопросы, на которые физики и химики не могли найти ответа в рамках классического подхода в течение более 20 лет. Шредингер предложил свое уравнение в 1926 году, а уже в 1929 году Дирак писал, что в настоящее время уже известны все (подчеркнуто авторами) физические законы необходимые для математической теории описывающей всю химию и трудности состоят только в том, что точное математическое описание химических явлений в рамках известных физических законов приводит к математическим уравнениям, для решения которых нужны более быстродействующие компьютеры, чем те, которые имеются в настоящее время [Dirac P.A.M., Proc. Roy. Soc. (London), **123** , 714 (1929).] .

В рамках классической химии одного такого заявления ведущего специалиста в квантовой механике было бы достаточно, чтобы научное сообщество потеряло интерес к этому научному направлению. Данное заявление отличалось кардинально, как по форме, так и по существу от заявлений, которые делали великие ученые классики. Так Ньютон говорил, что единственно, что он точно знает, это то, что он ничего не знает; или менее скромно, то, что ему удалось узнать это узкая полоска прибрежного песка в океане еще непознанных явлений.

Согласно высказыванию Дирака, за три года использования квантовомеханического подхода были открыты, не просто новые законы или новый

закон, а все физические законы, описывающую всю химию, т. е. было сделано то, что не может быть сделано никогда.

Ну, что вы привязались к высказыванию Дирака, подумает в этом месте читатель. Мало ли, что может сказать или написать человек в 27 лет, находящийся в состоянии эйфории, которая возникает у значительной части ученых при их погружении в квантовомеханический мир, где все наоборот по сравнению с классическим подходом и результатами его применения, где углубление познания – (уточнение расчета) приводит к углублению непонимания.

Мы акцентировали внимание читателя на этом высказывании Дирака потому, что в этом высказывании была впервые сформулирована одна из основных научных парадигм 20 – го века, сравнительно быстро и глубоко запавшая в сознание научного сообщества. Эта парадигма, практически без изменения, повторяется до настоящего времени во всех публикуемых статьях, книгах и энциклопедиях. Ранее в этой книге в историческом обзоре мы приводили цитату из книги Г.Пименталья и Р. Спратли, в которой они описали свое отношение к появлению уравнения Шредингера и квантовохимическим объяснениям химических явлений. «Наконец, в 1926 г. **все** стало на свои места, когда Эрвин Шредингер нашел связь между стационарными состояниями Бора и наличием у электрона волновых свойств, по де Бройлю. Этот шаг в развитии квантовой механики следует рассматривать как одно из самых крупных научных достижений – достижение, **которое стоит в одном ряду с вкладами Галилея, Ньютона и Максвелла.** Для того чтобы понять эту связь, рассмотрим волновые свойства двух других физических систем - **колеблющейся струны и вибрирующего барабана. Их тона гармонируют с музыкой атома!**».

«...Это достижение было лишь началом ряда **ошеломляющих успехов** новой квантовой механики. **Без каких – либо модификаций** квантовая механика в состоянии объяснить энергетические уровни многоэлектронных атомов. Еще важнее то, что **полученные с её помощью данные количественно согласуются с известными свойствами молекул. Вычисленные значения энергий и длин связей, частот молекулярных колебаний и уровней энергии согласуются с экспериментом настолько насколько это возможно, если учесть введенные в**

**расчет приближения и погрешности эксперимента.** Прошло несколько лет после открытия уравнения Шредингера, когда выяснилось, что оно применимо к простейшим молекулам:  $H_2$  и  $H_2^+$ . Однако, расчет более сложных молекул был невозможен из-за математических трудностей. Понадобилось вводить **различные приближения**, но постепенно стало очевидно, что квантовая механика в состоянии объяснить **всю химию**. С появлением вычислительных машин стали возможны и были проведены расчеты таких молекул, как окись углерода, метан, вода и аммиак. В принципе, если бы математические трудности не были столь велики, можно было бы предсказать **любые** химические изменения. Тем не менее, после появления квантовой механики теория химической связи перестала быть **чисто** эмпирической. Сейчас мы располагаем **прочной теоретической основой, которая даёт возможность понимать и предсказывать химические явления...**» (здесь Ганкиными выделены фразы и слова, которые выражают эмоциональное состояние – состояние эйфории, которое продолжает владеть научным сообществом с 1929 – го года).

Приведенные выше высказывания позволяют частично понять почему, не смотря на то, что за время прошедшее с 1926 года было показано, что все основные объяснения и расчеты, которые вошли в обоснование корректности и плодотворности квантовомеханического подхода не выдержали испытания временем, квантовомеханические объяснения продолжают включаться в учебники по физике и химии.

История науки доказывает, что человечество не отказывается от принятых объяснений или теорий (тем более введивших научное сообщество в состояние эйфории) пока не появляется общепризнанных новых теорий и объяснений. Общественное признание новых теорий, требует времени измеряемого многими годами и десятилетиями и проходит, как правило, 3 стадии. На первой стадии научная общественность считает, что предложенное объяснение является чушью недостойной не только критики, но даже внимания. На второй стадии говорится, что некоторые положения предлагаемой теории интересны или конструктивны. На третьей стадии научное сообщество приходит к выводу, что большая часть основных положений предлагаемой концепции давно известна.

Предлагаемое нами объяснение физической природы ядерных сил является одним из следствий предложенной нами в 1982 году новой теории химической связи. До начала работ по выяснению физической природы химической связи у нас не было сомнений в корректности основных парадигм, относящихся к этой проблеме. Мы были убеждены, что в рамках классической науки в принципе невозможно было понять и объяснить причинно - следственные связи в микромире. Понять и объяснить микромир удалось только в рамках квантовой механики. Квантовая механика ответила на все очередные и парадоксальные вопросы, возникшие в ходе классического развития химии, в результате решения уравнения Шредингера. Для решения уравнения Шредингера необходимо знание математики на уровне 4 – 5 курса математика – механического факультета университетов, поэтому в школах и институтах на химических факультетах даются только конечные результаты решения уравнения Шредингера. Согласно этим конечным результатам строение электронных оболочек атомов обусловлено принципами и правилами. В том случае, когда экспериментальные данные расходятся с принципами и правилами эти принципы и правила дополняются дополнительными предположениями. Практически точно такое же отношение, которое включало и эмоциональную компоненту – чувство эйфории, было у нас ко всем другим квантовомеханическим объяснениям химических явлений. Для появления сомнений в корректности этих объяснений потребовалось более двадцати лет, в течение которых удалось объяснить в рамках классического естествознания (без привлечения квантовой механики) ряд физических и химических явлений: дифракцию электронов в опытах Дэвиссона и Джермера, химическую связь и химическую реакцию, отличие молекулярного электронного спектра от атомарного и ответить на ряд очередных вопросов, возникших в химии в ходе ее традиционного развития. Нами было выяснено, что все необычные свойства сил, ответственных за образование химической связи (насыщаемость, нецентральность, короткодействие и т.д. см. выше) объясняются в рамках модели, предполагающей, что связывающие электроны вращаются в плоскости перпендикулярной оси соединяющей ядра связываемых атомов.

Роль и значение перечисленных удавшихся работ, предшествующих

решению проблемы ядерных сил, в решении этой проблемы сильно различались. Выяснение природы химической связи играло определяющую роль в решении проблемы ядерных сил. Значение остальных работ определялось главным образом тем, что их успешное решение - объяснение явлений микромира в рамках классического подхода, с одной стороны доказывало некорректность одной из основных парадигм квантовой механики - объяснить корректно явления микромира можно только в рамках квантовой механики, а с другой стороны доказывало, что существующие квантовомеханические объяснения этих явлений ничего не объясняют. Количественные квантовомеханических расчеты, дающие результаты, совпадающие с результатами, полученными экспериментально, доказывали лишь неограниченные подгоночные возможности квантовомеханических расчетов. Решение этих вопросов понизило нашу неуверенность в своих силах, являющейся одним из главных факторов, препятствующих попыткам решения фундаментальных вопросов.

Определяющая роль выяснения природы химической связи в решении проблемы ядерных сил состояла в следующем:

До выяснения нами природы химической связи ситуация сложившаяся в науке выглядела следующим образом:

Считалось доказанным, что химические связи бывают двух типов: ионные и ковалентные.

В ионных связях ионы, образовавшиеся в результате перехода электронов от одного атома к другому, положительные и отрицательные ионы по законам электростатики притягиваются друг к другу. Ионная связь образуется за счет электростатических сил, которые являются центральными. Первые расчеты энергии ионной связи, сделанные на основе предполагаемой модели ее образования, отличались от значения энергии ионной связи, определяемой экспериментально, менее чем на 10%. В 70 годах Пиментелом и Спратли было показано, что эти расчеты являются некорректными. Ими были внесены обоснованные изменения в теоретический расчет и было показано что в случае корректного расчета расхождение расчета с экспериментом превышает 50%, что доказывало некорректность предложенной модели образования ионной связи.

Научное сообщество практически никак не отреагировало ни на расчеты, ни на мнение Пиментела и Спратли, т.е. осталось при своем прежнем мнении, сформировавшемся до 70х годов. В много раз упомянутых в данной книге учебниках Соловьева и Ландау и Лившица ионная связь описывается на уровне положений, сформулированных Косселем в 1913 году, и этот вопрос излагается как давно решенный.

Ковалентная связь в учебнике И.В.Соловьева (том 4 стр.157) описывается несколькими предложениями. «Получающиеся из уравнения Шредингера собственные значения энергии оказываются зависящими от расстояния между ядрами, причем в случаях параллельной и антипараллельной ориентации спинов электронов характер этой зависимости существенно различен (приводится два широко известных рисунка, показывающих, что в том случае, когда электроны имеют одинаковые спины, ковалентная связь не образуется.). Образование молекулы возможно лишь при сближении атомов с антипараллельными спинами».

В учебнике Ландау и Лившица описание ковалентной связи ограничивается объяснением валентности в рамках теории спин валентности.

Теория спин валентности является хорошим примером плохих теорий и типичных квантовохимических объяснений. В рамках классического развития теория химической связи завершилась правилами Льюиса. Согласно правилам Льюиса атомы образуют химические связи в результате потери, присоединения или обобществления такого количества электронов, чтобы приобрести завершённую электронную конфигурацию атомов благородных газов, Правила, предложенные Льюисом, позволяли строить структурные формулы основной массы химических соединений и имели огромное практическое значение для химии.

Правила Льюиса позволили сформулировать основные очередные вопросы, на которые следовало искать ответы, для построения теории химической связи.

Основным общим вопросом теории химической связи являлся вопрос о её, связи, физической природе. До правил Льюиса предполагалось, что электростатические силы соединяют атомы в молекулы. В правилах Льюиса причина образования химической связи имела метафизический (даже

антропофизический) смысл и, соответственно, вопрос о физической природе химической связи снова стал самым главным очередным вопросом. Решение этого вопроса лежало на пути к ответу на вопрос: почему атомы любыми способами (в результате потери, присоединения или обобществления электронов) стремятся приобрести завершённую электронную конфигурацию атомов благородных газов. Следующими по важности стали объяснения

1) исключений из правил Льюиса: образование устойчивых химических соединений, в которых количество электронов во внешних электронных оболочках соединённых атомов было меньше, или больше, чем в оболочках благородных газов.

2) написание структурных формул для соединений, для которых в рамках правил Льюиса могло быть предложено более одной структурной формулы.

Квантовохимические объяснения, приводимые в учебниках по квантовой химии можно условно разделить на 3 периода:

- 1) Восхищение. Эйфория. Неограниченные надежды.(1926 – 1970г.г.)
- 2) Трезвые оценки.(1960 – 2000гг)
- 3) Разочарование.(1970 – 2005гг)

За 80 лет работы по выяснению физической природы химической связи в рамках квантовой химии не удалось понять, не только за счёт каких сил образуется химическая связь, но даже ответить на вопрос за счёт уменьшения какой энергии (кинетической или потенциальной) происходит выигрыш энергии при образовании химической связи.

В течение первого периода в рамках квантовой химии были предложены ответы на все перечисленные выше вопросы. Эти ответы можно разделить на две группы: ответы для математиков и ответы для химиков.

Математики доказали на практике, что использование разрешаемых квантовомеханических математических манипуляций позволяет во всех случаях подогнать теоретический расчёт предлагаемой модели химического или физического явления под результат, получаемый экспериментально. Быстродействие машин определяет лишь время, которое нужно затратить на подгонку результата расчёта под эксперимент. В период, который мы выше



назвали периодом трезвых оценок было экспериментально доказано, что модели (исходные положения для расчета) были не корректны даже в канонических случаях: расчета энергии связи в молекуле водорода и в реакции атома водорода с молекулой водорода. При расчете энергии соединений, которые в рамках правил Льюиса могли быть описаны более чем одной структурной формулой предполагалось, что рассчитываемая молекула является суперпозицией возможных Льюисовских структур. Возможность электронной изомеризации в системе, в результате которой устанавливается динамическое равновесие между возможными Льюисовскими структурами, не только ни учитывалась, но даже отвергалась. Расчет на основе этих положений, как и во всех описанных выше случаях, совпадал с экспериментом, что так же, как и во всех других случаях, являлось со всех точек зрения доказательством корректности квантовохимических расчетов.

В 90-х годах нами на основе экспериментальных данных полученных другими учеными было доказано, что в том случае когда соединение можно описать несколькими формулами Льюиса в системе устанавливается динамическое равновесие между этими реальными структурами. Таким образом, в течение периода времени, который мы условно называли периодом трезвой оценки достижений квантовой механики, возникли обоснованные сомнения в корректности основных парадигм, возникших в науке во время первого периода – периода неограниченных надежд, и которые являлись основным доказательством могущества квантовомеханического подхода.

В течение 3го периода было выяснено, что практически все объяснения химических и физических явлений, которые в период эйфории и неограниченных надежд были приняты научным сообществом как решение основных проблем, назревших в ходе традиционного (классического) периода развития физики и химии, оказались некорректными. Основными достижениями квантовомеханического подхода в течение первого и второго периодов, которые впоследствии оказались некорректными и тупиковыми, были следующие: объяснение физической природы молекулярных и ядерных сил (обменные силы), спин теория валентности, физическая природа правил резонанса (суперпозиция возможных Льюисовских структур), объяснение исключений из правил Льюиса

(использование  $d$  – орбиталей для образования дополнительных связей у серы и фосфора), теория металлической связи и теория твердого тела (теория свободных электронов в металлах ), теория электропроводности металлов (теория Вильсона – Блоха) В обзоре опубликованном Peter P. Edwards (The New Chemistry, Editor-in-chief Nina Hall Cambridge university press, 2000, p. 85) доказывається, что до 2000г не удалось ответить на основные вопросы, связанные с электропроводностью металлов такими как: Почему металл проводит электрический ток, а не металл является изолятором? Что такое металл? Почему все свойства металлов так резко отличаются от свойств не металлов?

В статье Peter P. Edwards обсуждаются основные направления теоретических работ, в первую очередь теория Блоха – Вильсона, в рамках которой её авторы пытались, но не смогли ответить на эти вопросы.

Одним из основных критериев корректности теорий является ее развитие. Все перечисленные выше теории никуда не вели, т.е. оказались тупиковыми и некорректными. Доказательство несостоятельности практически всех квантовомеханических объяснений и расчетов является доказательством некорректности самого квантовомеханического подхода. Квантовомеханический подход является частным примером широко используемого в науке подхода, при котором, вместо выяснения причинно - следственных связей, выяснения физической природы явлений в рамках уже известных сущностей, решается обратная задача, для решения которой вводятся новые дополнительные сущности и гипотезы.

Практически, все ответы на очередные вопросы, возникшие в ходе развития теоретической физики и теоретической химии, являлись решением обратных задач. Однако, в описываемых в литературе, посвященной истории появления новых объяснений и теорий, мы не встречали даже упоминания, что описываемая теория или объяснение появилось в результате решения обратной задачи. На научном жаргоне объяснение явления решением обратной задачи называется подгонкой, а не объяснением или теорией. Конечной целью решения обратной задачи является, как правило, составление математического уравнения, которое совпадает с законом, открытым в ходе изучения влияния параметров

осуществления процесса на его кинетику. В некоторых случаях конечной целью решения обратной задачи является составление математического уравнения, результат решения которого совпадает с результатом, полученным в ходе эксперимента. В результате даже положительного решения обратной задачи наука не получает никакой новой информации, т.е. решение обратной задачи имеет к науке косвенное (чтоб не сказать никакого) отношение. Как составление, так и решение уравнений, осуществляемое в ходе решения обратных задач, сопровождается введением дополнительных гипотез новых сущностей и правил ad hoc.

Классический научный подход предполагает после открытия нового явления, закона, правил или парадоксальных зависимостей, что очередной задачей науки является объяснение этих явлений в рамках исходных сущностей или при феноменологическом подходе на основе закономерностей, выясненных в результате исследования других явлений. При решении обратной задачи, как правило, реализуется один из ряда вариантов. В одном из них все дополнительные гипотезы вводятся на стадии составления уравнения (см. например, объяснение законов Ома и Джоуля – Ленца). В ряде случаев дополнительные правила и возможности вводятся в процессе использования предложенного уравнения или научного предположения для получения количественного результата или качественного объяснения (см. например, объяснение строения электронных оболочек атомов, теорию электропроводности металлов, спин теорию валентности и т.д.). В некоторых случаях составляется математическое уравнение, описывающее результаты эксперимента. Это уравнение содержит ряд коэффициентов и очередной задачей науки объявляется выяснение физического смысла этих коэффициентов или физического смысла всего уравнения. Уравнения Аррениуса и Больцмана.

Перечисленные подходы являются популярными среди среднего слоя людей, работающих в науке и, или являющихся преподавателями. Так, например, на одном из наших докладов в прениях преподаватель колледжа говорил, что квантовохимические объяснения валентности и исключений из правил Льюиса являются примером научного подхода и обсуждения явлений. Эти разделы приятно

преподавать, они повышают интерес учащихся к химии. Научная элита называет описываемый подход (решение обратной задачи и подгонка) плодом длительных размышлений, глубоких знаний или счастливых озарений. Как, например, в энциклопедии [кругосвет](http://www.krugosvet.ru/articles/23/1002309/1002309a1.htm) (см. сайт <http://www.krugosvet.ru/articles/23/1002309/1002309a1.htm>) описывается появление уравнения Гейзенберга, предшествовавшего уравнению Шредингера.

«К началу 1920-х годов теория Бора исчерпала себя. Пришло время признать справедливость пророческого замечания, которое Бор еще в 1914 сделал в письме другу в присущем ему замысловатом стиле: «Я склонен полагать, что проблема связана с исключительно большими трудностями, которые можно будет преодолеть, лишь гораздо дальше отойдя от обычных соображений, чем требовалось до сих пор, и что достигнутый ранее успех был обусловлен исключительно простотой рассматривавшихся систем».

**Первые шаги.** Поскольку использованная Бором комбинация существовавших ранее представлений из области электричества и механики с условиями квантования привела к неверным результатам, все это нужно было полностью или частично изменить. Основные положения теории Бора были приведены выше, а для соответствующих расчетов было достаточно не очень сложных выкладок с использованием обычной алгебры и математического анализа. В 1925 молодой немецкий физик В.Гейзенберг посетил Бора в Копенгагене, где провел с ним долгие часы в беседах, выясняя, что из теории Бора обязательно должно войти в будущую теорию, а от чего в принципе можно и отказаться.

Бор и Гейзенберг сразу же согласились, что в будущей теории обязательно должно быть представлено все непосредственно наблюдаемое, а все не поддающееся наблюдению может быть изменено или исключено из рассмотрения. С самого начала Гейзенберг считал, что следует сохранить атомы, но орбиту электрона в атоме считать абстрактной идеей, поскольку ни один эксперимент не позволяет определить электронную орбиту по результатам измерений наподобие того, как это можно сделать для орбит планет. Читатель может заметить, что тут есть определенная нелогичность: строго говоря, атом

столь же ненаблюдаем непосредственно, как и электронные орбиты, и вообще в нашем восприятии окружающего мира нет ни одного ощущения, которое не требовало бы разъяснения. В наши дни физики все чаще цитируют известный афоризм, который был впервые произнесен Эйнштейном в беседе с Гейзенбергом: «Что именно мы наблюдаем, нам говорит теория». Таким образом, различие между наблюдаемыми и ненаблюдаемыми величинами носит чисто практический характер, не имея никакого обоснования ни в строгой логике, ни в психологии, причем это различие, как бы оно ни проводилось, должно рассматриваться как часть самой теории.

Поэтому гейзенберговский идеал теории, очищенной от всего ненаблюдаемого, есть некое направление мысли, но отнюдь не последовательный научный подход. Тем не менее, он доминировал в атомной теории почти полвека после того, как был впервые сформулирован. Мы уже напоминали о составных элементах ранней модели Бора, таких, как закон Кулона для электрических сил, законы динамики Ньютона и обычные правила алгебры. Путем **тонкого анализа** Гейзенберг показал, что можно сохранить известные законы электричества и динамики, если найти надлежащее выражение для динамики Ньютона, а затем **изменить правила алгебры**. В частности, Гейзенберг высказал мысль, что, поскольку ни положение  $q$ , ни импульс  $p$  электрона не являются измеримыми величинами в том смысле, в каком ими являются, например, положение и импульс автомобиля, мы можем при желании сохранить их в теории, лишь рассматривая как математические символы, обозначаемые буквами, но не как числа. **Он принял для  $p$  и  $q$  алгебраические правила, согласно которым произведение  $pq$  не совпадает с произведением  $qp$** . Гейзенберг показал, что простые расчеты атомных систем дают приемлемые результаты, если принять, что для положения  $q$  и импульса  $p$  выполняется соотношение

$$(1) \quad qp - pq = i\hbar / 2\pi,$$

где  $\hbar$  – постоянная Планка, уже известная из квантовой теории излучения и фигурировавшая в теории Бора, а  $i = \sqrt{-1}$ .

Постоянная Планка  $\hbar$  представляет собой обычное число, но очень малое, приблизительно  $6,6 \cdot 10^{-34}$  Дж·с. Таким образом, если  $p$  и  $q$  – величины обычного

масштаба, то разность произведений  $pq$  и  $qp$  будет крайне мала по сравнению с самими этими произведениями, так что  $p$  и  $q$  можно считать обычными числами. Построенная для описания явлений микромира, теория Гейзенберга почти полностью согласуется с механикой Ньютона, когда ее применяют к макроскопическим объектам. Уже в самых ранних работах Гейзенберга было показано, что при всей неясности физического содержания новой теории она предсказывает существование дискретных энергетических состояний, характерных для квантовых явлений (например, для испускания света атомом). В более поздней работе, выполненной совместно с М.Борном и П.Йорданом в Гёттингене, Гейзенберг развил формальный математический аппарат теории. Практические вычисления остались, однако, крайне сложными. После нескольких недель напряженной работы В.Паули вывел формулу для энергетических уровней атома водорода, совпадающую с формулой Бора.

Этот пример является иллюстрацией к широко известному высказыванию Гильберта: «Если вы мне разрешите предположить, что дважды два может быть равно пяти, то я вам докажу, что из печной трубы могут вылетать ведьмы».

Как указывалось основным наболевшим вопросом являлся вопрос: почему микромир не подчиняется законам установленным при изучении макромира. Постулаты и уравнения Бора, законы и объяснения Льюиса, Лангмюра, Гейнзейберга и Дирака являлись объяснениями и уравнениями *ad hoc*, т.е. в них в открытом или скрытом виде постулировалось, что микромиром управляют законы, качественно отличающиеся от законов макромира. Для микромира даже алгебраические законы не писаны. Эти объяснения не отвечали на основной вопрос: почему в макромире не наблюдаются предлагаемые постулаты или законы? На этом фоне гипотеза Де Бройля подтвержденная экспериментально представлялась светом в конце туннеля, т.к. позволяла предполагать, что предлагаемые для микромира постулаты и законы, не проявляются в макромире также как и волновые свойства макрочастиц.

Как писали в ранее цитируемой нами книге Пиментел и Спратли (стр.29): «Теперь очередь дошла и до Эрвина Шредингера, который занимался математической физикой и мог за завтраком на салфетке записать и решить

волновое уравнение для осцилятора. Он сопоставил уже известные факты – то, что атом водорода дает линейчатый спектр (подобно колеблющейся струне) и что электрон способен к дифракции, подобно волне (это было предсказано де Бройлем). «Дважды два – четыре, - сказал Шредингер, - а линейчатый спектр атома водорода показывает, что уравнение движения электрона в атоме должно быть уравнением волнового типа с граничными условиями, определяющими возможные значения энергии». На основе этих или подобных рассуждений Шредингер сформулировал перед собой задачу - придумать решаемое аналитически (т.е. без каких либо дополнительных, количественно не оцениваемых дополнительных предположений) уравнение волнового типа, решением которого бы были уравнения Бора, описывающие основное и возбужденные состояния атома водорода, т.е. его линейчатый спектр. Можно было бы конечно предположить, что на Шредингера снизошло божественное откровение, но простое ознакомление с ходом решения этого уравнения для атома водорода, занимающее без промежуточных преобразований более 17 страниц в учебниках по квантовой химии позволяет исключить это предположение (ни одна религия не предполагает, что бог окончил матмех) и еще раз убедиться в высочайшей математической квалификации Э. Шредингера в составлении и решении волнового уравнения не только в прямом, но и обратном порядке, т.е. как обратную задачу, исходными данными в которой, применительно к уравнению Шредингера, являются уравнения Бора, обобщающие экспериментальные данные, а конечной целью получение волнового уравнения, результатом решения которого являются уравнения Бора.

В ситуации сложившейся в физике и химии к 1926 году уравнение, предложенное Шредингером было обречено на успех. Несмотря на то, что принципы научной работы известны тысячи лет, признание научных работ определяется не научно, а стереотипно. Признание уравнения Шредингера было обусловлено, прежде всего стереотипами: «в науке столько науки, сколько в ней математики» и «простота нужнее людям, но сложное понятней им». За 10 лет предшествующих появлению уравнения Шредингера физики измучились от головной боли связанной с попытками объяснения устойчивости атома водорода.

По подходу к решению проблемы предложение Шредингера совпадало с предложениями Бора, Льюиса и Лангмюра. Все предлагаемые подходы являлись решением обратной задачи – математического описания экспериментальных результатов. В результате аналитического решения уравнений предложенных Шредингером и Лангмюром применительно к атому водорода получались уравнения Бора.

Уравнения Бора являлись математическим описанием экспериментальных результатов, которые находились в противоречии с законами классической электродинамики, т.е. уравнение Шредингера не отвечало а снимало измучивший всех вопрос.

В книге (См. К.В. Яцимирский и В.К. Яцимирский *Химическая связь*, 1975, стр. 43) написано «...результаты, полученные при решении уравнения Шредингера применительно к атому водорода, служат основой для изучения многоэлектронных атомов. Решить уравнение Шредингера для многоэлектронных атомов можно лишь *приближенными методами* (точное решение нельзя получить из-за того, что не разделяются переменные)».

Можно предполагать, что доказательство неограниченных подгоночных возможностей квантово-химических расчетов было широко известно. В этой же книге (См. стр. 21) написано: «Главное действующее лицо в уравнение Шредингера  $\hat{H}\Psi = E\Psi$  - это **волновая функция**  $\Psi$ . Сама  $\Psi$  наглядного физического смысла не имеет. (Согласно Фоку: ненаглядного тоже – примечание Ганкиных) ...Конкретный вид волновой функции, также как и оператора  $\hat{H}$  зависит от специфики решаемой задачи. Далее (на стр. 45.) прямо указывается, что «Сделать волновые функции более подходящими для данной задачи можно на основе физической интуиции (что это такое? – примечание Ганкиных), однако обычно в качестве руководящего начала выбирают **вариационный принцип**. Этот принцип утверждает следующее: если в волновую функцию ввести ряд параметров (а, в, с и т.д.) и, варьируя эти параметры, вычислять с помощью данной волновой функции  $\Psi$  (а, б, с...) энергию системы, то ближе всего к истинному значению энергии  $E_{ист.}$  расположено минимальное из всех полученных значений энергии  $E_{мин.} = E_{ист.}$



Какие же выводы следуют из перечисленных двух положений.

1) Если основное уравнение, описывающее поведение микрочастиц в качестве главного действующего лица содержит волновую функцию  $\Psi$ , не имеющего физического смысла, то следовало ожидать, что, ни количественное решение, ни использование этого уравнения для объяснения закономерностей физических и химических явлений не позволит понять физический смысл этих явлений.

2) Выбор подходящей для данной задачи функции определяется не на основе физических закономерностей, выявленных в ходе исследования данного явления, а на основе интуиции (на основе советов внутреннего голоса).

В рамках квантовой механики разрешено для описания поведения системы использовать ничем неограниченное количество функций и различные их комбинации. Выбранные на основании советов внутреннего голоса функции содержат ничем неограниченное количество коэффициентов, варьирование которых также ни чем не ограничено. Решением уравнения является самое минимальное значение энергии  $E$ . В этих условиях внутренний голос, как правило, советует не прислушиваться к нему, а для выбора подходящей функции решать обратную задачу. При количественном решении уравнения внутренний голос советует прекращать варьирование вида, количества функций, комбинаций этих функций и коэффициентов, когда значение рассчитанной энергии становится равной экспериментальной, т.к. с одной стороны устойчивому состоянию системы соответствует минимальная энергия, которая и определяется экспериментально, а с другой стороны, совпадение рассчитанной величины с экспериментом является традиционно главным доказательством корректности теории и всех принятых в ходе расчета дополнительных предположений. Основным техническим ограничением при расчете является необходимое машинное время, которое резко возрастает при увеличении количества частиц в рассчитываемой системе, количества учитываемых функций и количества учитываемых коэффициентов. Необходимое для расчета машинное время уменьшается по мере увеличения скорости работы вычислительной техники.

История попыток построения теорий молекулярных и ядерных сил является одним из примеров рассмотренного выше подхода к решению научных задач.

Кулуарные обсуждения некорректных подходов к решению научных задач

(в первую очередь решением обратной задачи) показало, что основная масса ученых согласна с нашим мнением. Более того, мы убедились, что некорректность этого подхода является общенаучным знанием.

Оправданием использования этого подхода является ожидание обществом объяснения наблюдаемых явлений. Основным недостатком этого подхода является то, что предлагаемые объяснения таковыми не являются, не создают новой информации и некорректно закрывают очередные научные вопросы, являющиеся основной движущей силой науки.

Как уже указывалось выше в период разочарования, объективно обусловленного тем, что все квантовохимические объяснения оказались некорректными, их исключение из системы объяснений тормозилось отсутствием традиционных объяснений, субъективными обстоятельствами (напрасно прожитая жизнь, другую работу я делать не могу, инерция мышления и системы образования, конформизм, личный опыт – не все так просто, что кажется простым с первого взгляда, вера в авторитеты, сомнения в собственных знаниях и т.д. и т.п.) и существованием двух основных научных парадигм XX го века. Согласно одной из них проблемы микромира могут быть решены в рамках квантовой механики. Становление этой парадигмы было обусловлено принятием квантовомеханических объяснений в период восхищения и очарования. Их сохранение в период разочарования обусловлено, по-видимому, в основном, сложившейся легендой, согласно которой расчеты, необходимые для разработки ядерного оружия и атомных электростанций являются квантовомеханическими. Эмоциональный ответ человечества на появление оружия массового уничтожения более чем на век укрепил его (человечества) уверенность в величии и общей корректности, как квантовомеханического подхода, так и квантовомеханических расчетов.

В XX – м веке легенда, приписывающая главную роль квантовомеханическим расчетам при технологической разработке атомного оружия, овладела массовым сознанием, т.е. стала материальной силой. Не легендарная роль, а реальная роль квантовой механики, может быть выяснена только после опубликования информации по разработке технологии ядерного оружия, которая обоснованно являлась и является одним из основных

государственных секретов.

На фоне взрывов атомных и термоядерных бомб, при отсутствии корректной информации, различные критические замечания в адрес величайшего научного достижения человечества - квантовой механики не выглядят прилично. Критические замечания обычно, либо не воспринимаются научным сообществом вообще, либо воспринимаются, как мелкие придирки завистников, графоманов, шизофреников, страдающих манией величия и т.д. Справедливости ради, следует сказать, что в общем случае, это отношение справедливо. Критика квантовой механики является их (завистников, графоманов, шизофреников и т.д.) любимым занятием.

Практически тождественная ситуация сложилась с другим общепризнанным величайшим научным достижением человечества - теорией относительности.

Основной парадигмой, подтверждающей корректность теории относительности, было утверждение, что теория относительности, точнее самое знаменитое уравнение Эйнштейна  $E = MC^2$ , являлось теоретической основой при создании атомного оружия.

Также как и в случае с квантовой механикой взрыв атомной бомбы привел к тому, что научное и ненаучное сообщество на 100 лет вперед поверило не только в корректность теории относительности, но и в могущество науки вообще и в реальность существования таких сущностей как инерционная и гравитационная масса.

В настоящее время (2006 год) в энциклопедиях, монографиях и учебниках, как правило, проблемы ядерных сил и энергии выделяющейся в ходе ядерных реакций рассматриваются отдельно и независимо друг от друга; более того даже в разных разделах энциклопедий и монографий.

Переходом массы в энергию объясняется огромное выделение энергии в результате ядерных реакций. Это свойство, присущее массе, связанное с выделением большого количества энергии, используется как в военных, так и в гражданских целях в ядерных реакторах, а также наблюдается в природе в виде излучения различных звезд, включая Солнце, которое посылает тепло на нашу Землю на протяжении миллиардов лет.

Этим свойством массы объясняется и выделение энергии в системе, где нуклоны (протоны и нейтроны) объединяются в атомные ядра. Изменение массы ядер в результате ядерных реакций качественно соответствует энергии, выделившейся в этом процессе. Природа сил, действующих внутри атомных ядер до сих пор неизвестна. Предполагается, что в ядрах имеются некие специфические (не электромагнитные) взаимодействия. Эти силы так же называют *сильными взаимодействиями*. Неизвестным является и механизм самого перехода массы в энергию или энергии в массу. Без экспериментальных доказательств принято, что этот переход осуществляется в соответствии с законом, по которому  $E = mc^2$ . Причем этот переход независим от типа энергии. В процессе ускорения тела масса его увеличивается за счет расходования кинетической (механической) энергии. В процессе аннигиляции элементарных частиц их масса переходит в энергию электромагнитных колебаний. Точно так же при образовании межнуклеарных связей масса переходит в энергию электромагнитных колебаний и тепловую энергию.

При объяснении превращения внутриядерной энергии в рамках электродинамики, мы можем принять модель ядра по аналогии с моделью молекулы водорода, в которой роль атомов играют нуклоны с положительным зарядом, равные заряду протонов, вокруг которых вращаются электроны на расстоянии, соизмеримым с размером ядра. Как известно, это расстояние составляет  $\approx 10^{-13}$  см ( $10^{-5}$  Å), а ионизационный потенциал такого нуклона должен быть равен  $\approx 10^6$  эВ. При расчете энергии связи в двухатомной молекуле, значение ионизационного потенциала подставляется в уравнение (31). Если мы теперь подставим в это уравнение значение потенциала ионизации нуклона вместо потенциала ионизации водорода  $E_n$ , мы, таким образом, найдем количество энергии, которое выделится при образовании нуклон-нуклонной связи.

Рассчитанный заряд в центре между двумя нуклонами, так же как это делалось для молекулы водорода, в этом случае равен 1.049 единиц протона, тогда как энергия всей системы составляет:

$$10^6 (1,3 - 0,25)^2 \cdot 2 = 2,2 \cdot 10^6 \text{ эВ} = 2 \cdot 10^8 \text{ кДж/моль}$$

а энтальпия этой связи будет равна соответственно

$$(2,19 - 2) \cdot 10^6 = 2 \cdot 10^5 \text{ эВ} = 2 \cdot 10^7 \text{ кДж/моль}$$

Таким образом, когда два ядра объединяются, мы вправе ожидать выделения энергии в количестве  $\approx 2 \cdot 10^7$  кДж/моль. При расчете энтальпии реакции образования трития по схеме:  $2({}^2_1\text{H}) \rightarrow {}^3_1\text{H} + {}^1_1\text{H}$ , выделившаяся энергия (в соответствии с дефектом массы) оказывается равной  $3,89 \cdot 10^8$  кДж/моль, что близко к приведенной выше оценке. Таким образом, даже такая простая электростатическая оценка дает ответ на основной вопрос: *Почему в процессе внутриядерных превращений выделяется такое большое количество энергии?*

Для оценки энергии, необходимой для разрыва межнуклонной связи, по аналогии с расчетом энергии диссоциации молекул, мы должны предположить, что происходит изменение электронной теплоемкости. Это может быть сделано с помощью уравнения (35), т.е. необходимо определить  $K$  в этом уравнении, что и дает возможность найти затем  $\Delta G$ .

$$\Delta G = \Delta H (1 + K)$$

где  $K = (-T_2 / (T_2 - T_1)) \ln (T_2 / T_1)$ .

В случае образования внутриядерной связи  $\Delta H$  в  $10^5$  раз больше, чем при образовании молекулы водорода. Следовательно, и температура диссоциации ядер (разрыва внутриядерных связей) также будет в  $10^5$  раз выше, т.е. составит  $3000 \cdot 10^5 = 3 \cdot 10^8$  К. В этом случае, как и в случае молекулярного водорода,  $T_1$  представляет собой температуру размораживания протона, т.е.  $T_1 \approx 3000$  К.

Тогда, в соответствии с уравнением (35) и с учетом того, что  $T_1 \ll T_2$ , т.е.  $T_2 / (T_2 - T_1) \approx 1$ , для  $K$  будем иметь

$$K \approx -\ln(T_2/T_1) \approx -\ln(T_1 \cdot 10^5/T_1) \approx -11$$

Таким образом, соотношение между энтропийным и энтальпийным вкладом во внутриядерную энергию близко к 10.

Теперь сравним, как это мы делали ранее, приведенное выше объяснение, с объяснением, построенным на предложении об изменении энергии за счет дефекта

массы. Напомним ещё раз, что до сих пор даже не предложено гипотезы механизма перехода массы хотя бы в один из перечисленных видов энергии. Новая сущность (сильные взаимодействия) была введена в виде гипотезы о силах, связывающих частицы в ядре. Единственным подтверждением этой теории может служить действительно большое количество энергии, выделяющейся в процессе ядерной реакции, и коррелирующие с дефектом массы, который определяется уравнением  $E = mc^2$ . Однако это уравнение описывает выделение энергии массой  $m$ , когда её скорость близка к скорости света, т.е. с физическим явлением, никогда не происходящим при ядерных реакциях, поскольку не существует масс, движущихся со скоростью, близкой к скорости света. В рамках такого несоответствия так называемое объяснение не даёт никакого представления о возможном механизме перехода массы в энергию.

Предложенное нами объяснение выделения энергии в ходе внутриядерных реакций построено на законах электродинамики и не требует введения никаких новых сущностей. Кроме того, следующие экспериментальные данные также говорят в пользу нашего подхода. Экспериментально было доказано, что для разрыва связи между нуклонами, необходимо гораздо больше энергии, чем её выделяется при образовании межнуклеарной связи. В рамках общепринятой интерпретации этот факт находится в противоречии с законом сохранения материи (масса + энергия = const). В ядерных реакциях:

$$m_1 + m_2 \rightarrow m_3 + Q_1$$

$$m_3 \rightarrow m_1^1 + m_2^1 - Q_2$$

где ( $m_1 = m_1^1$ ;  $m_2 = m_2^1$ );  $Q_1$  и  $Q_2$  достаточно различны,  $Q_2 \gg Q_1$ .

В нашем подходе это полностью вытекает из уравнения (35). Дополнительный расход энергии связан с уменьшением электронной энтропии, происходящем вследствие разрыва межнуклеарной связи. В соответствии с выполненными выше количественными оценками, соотношение между энтропийными и энтальпийными вкладами в межнуклеарную связь составляет примерно 10:1. Именно поэтому мы можем говорить, что изменение энтропии является тем фактором, который определяет основной расход энергии, необходимой для разрушения межнуклеарных связей.

Гипотеза о том, что энтропия является определяющим фактором в образовании внутриядерных связей, впервые была высказана Н.Бором. Выполненные эксперименты показали, что энергетические спектры частиц, образующихся в процессе диссоциации ядер, очень похожи на те, которые были рассчитаны на основе предположения о детерминирующей роли энтропийного вклада во внутриядерные связи.

Предложенное объяснение позволяет нам ответить и на вопрос: *Почему для разрыва внутриядерных связей необходима температура  $10^8$  К, тогда как в присутствии нейтронов эта температура на 5 порядков ниже?* Аналогия с физическими силами, удерживающими атомы в молекуле и нуклоны в атомном ядре, позволяет предположить, что механизм разрыва внутриядерных связей в присутствии нейтрона очень похож на механизм разрыва химической связи в молекулах в присутствии радикалов. Проще всего это объяснить протеканием процесса в три стадии: *ассоциация — электрон-нуклонная изомеризация — диссоциация с выделением нейтронов*, т.е. реакция протекает по нейтронному цепному механизму, включающему маршруты ассоциации, изомеризации и диссоциации. Цепной механизм ядерных превращений имеет более чем солидную экспериментальную базу. Предложенная интерпретация внутриядерных сил объясняет основной их характер – их короткое действие. Энергия взаимодействия круто обрывается, когда расстояние между нуклонами в атомном ядре выходит за  $10^{-5}$  Å. Поэтому короткодействие внутриядерных сил, которые названы сильным взаимодействием, не представляют собой некоего специфического рода сил, а определяются просто радиусом, по которому отрицательный заряд вращается вокруг положительного заряда.

**15.01.2007**