

Виктор Ганкин

## Краткий исторический анализ эволюции теоретической физики

### *лирическое отступление*

Основной движущей силой теоретической физики в XX-веке 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 связь осуществляли гравитационные и электрические взаимодействия. После того как было выяснено, что эти силы имеют аналогичную зависимость от расстояния (обе силы обратно пропорциональны квадрату расстояния), появились гипотезы предполагающие, что гравитационное взаимодействие обусловлено электростатикой.

С открытием электрона выяснилось, что он имеет заряд и инерциальную массу. Когда же Лоренц обнаружил, что заряд, движущийся с ускорением, излучает электромагнитную энергию, то выдвинул гипотезу, что инерционная масса электрона обусловлена его зарядом. По аналогии, в результате 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 диапазонах действия. Обе силы являлись короткодействующими, но расстояния, на которых они действовали, были для молекулярных сил порядка  $\text{Å}$ , а в случае ядерных -  $0,0001\text{Å}$ .

Это объяснение появилось в 30-х годах XX-го века в годы, когда квантово-механические объяснения представлялись новым философским камнем. Представлялось, что, наконец-то, теоретический философский *камень* в сочетании с компьютерными возможностями ответит на все вопросы, возникшие в физике и химии.

С появлением 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 старых вопросов. Они пришли к выводу (не без помощи философов от квантовой механики), что микромир - это *зазеркалье* этого мира. Закономерности нашего мира они изучали всю жизнь в рамках традиционного естествознания. Зазеркальный микромир - это 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 явления заключается в выяснении причинно-следственных связей между изучаемыми явлениями или явлением и принятыми исходными сущностями. Они привыкли к тому, что если предлагаемая теория содержит понятия, физический смысл которых не известен (функция  $\Psi$ , спин, правило Паули и т.д.), то это объяснение не может быть объяснением физического механизма (причинно-следственных связей) явления. Они привыкли к тому, что если конечной целью решения уравнения является количественный результат, то в ходе решения этого уравнения, даже в самых благородных целях, нельзя вводить количественно не оцениваемые дополнительные предположения.

Почему же ученые естественных наук 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 вера в неограниченные возможности квантово-механического подхода. За первые 2 - 3 года в рамках в рамках квантовой механики удалось ответить практически на все вопросы, что не смогли получить решения в рамках классического подхода за последние 20 лет. Шредингер предложил уравнение, описывающее динамику частиц, в 1926 году, а уже в 1929 году Дирак писал: «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., Quantum mechanics of many electron systems, Proceedings of the Royal Society of London, Series A, Vol. CXXIII (123), April 1929].

Удивительно, но высказывания ведущего специалиста квантовой механики оказалось достаточно, чтобы научное сообщество потеряло интерес к этому направлению.

Данное заявление кардинально отличается по форме и содержанию от заявлений великих ученых классического толка. Так Ньютон говорил, что единственно, что он точно знает, это то, что он ничего не знает: «великий океан истины расстилается передо мной неисследованным». Однако, согласно Дираку, за три года квантово-механической эйфории были открыты, не просто новые законы, а все физические законы, описывающую всю химию, т. е. было сделано то, что в принципе невозможно.

Ну, что вы привязались к высказыванию Дирака?- подумает сейчас читатель. Мало ли, что может сказать или написать человек в 27 лет в состоянии эйфории, которая возникает у значительной части ученых при их погружении в квантово-механический мир; в тот мир, где в отличие от классического подхода Вы не получите углубление понимания.

Мы остановились на этом высказывании Дирака только потому, что здесь впервые сформулирована одна из основных научных парадигм XX-го века, так легко принятая научным сообществом. Она практически без изменения продолжает звучать в публикациях по настоящее время. Цитата из книги Г.Пименталя и Р. Спратли, отражает отношение к уравнениям Шредингера и квантово-химическим объяснениям химических явлений начала XX века: «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 введённые 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 нами выделены фразы и слова, которые выражают эмоциональное состояние – состояние эйфории, которое продолжает владеть научным сообществом).

Теперь, надеемся, Вы сможете понять почему, не смотря на то, что за время прошедшее с 1926 года было показано, что все основные объяснения и расчеты, на которых базировался квантово-механический подход, не выдержали испытания временем, квантово-механические объяснения продолжают включаться в учебники по физике и химии.

История развития науки демонстрирует, что человечество не отказывается от принятых объяснений и к эйфории приводящих теорий, пока не появляются новые достойные теории и объяснения. Общественное признание новых теорий, требует времени, порой, измеряемого десятилетиями, и проходит, как правило, три стадии. На первой стадии научная общественность считает, что предложенное объяснение является чушью недостойной ни критики, ни внимания. На второй стадии некоторые положения предлагаемой теории становятся интересны или конструктивны. На третьей стадии научное сообщество приходит к выводу, что большая часть положений предлагаемой концепции давно известна.

Наше объяснение физической природы ядерных сил является одним из следствий предложенной нами в 1982 году новой теории химической связи. К началу работ мы были убеждены, что классический подход себя исчерпал, что в рамках классической науки невозможно понять и объяснить причинно-следственные связи в микромире. Микромир - область квантовой механики. Квантовая механика ответила на все текущие и парадоксальные вопросы уравнением Шредингера. Для решения его необходимо знание

высшей математики на уровне 4 – 5 курса физико-математического факультета университета, а для тех кто не стал студентом такого факультета даются только конечные 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 существенными предположениями. Практически чувство эйфории, было у нас ко всем квантово-механическим объяснениям химических явлений. Однако, за двадцать лет появились сомнения в корректности этих объяснений. За это время в рамках классического естествознания (без привлечения квантовой механики) удалось объяснить некоторые физические и химические явления: дифракцию электронов в опытах Дэвиссона и Джермера, химическую связь и химическую реакцию, отличие молекулярного электронного спектра от атомарного и получить ответы на ряд очередных вопросов, возникших в химии в ходе ее традиционного развития. Нами было выяснено, что необычные свойства сил, ответственных за образование химической связи (насыщаемость, нецентральность, короткодействие и т.д.) объясняются в рамках модели, предполагающей, что связывающие электроны вращаются в плоскости перпендикулярной оси, соединяющей ядра связываемых атомов.

Успехи подвинули нас вплотную к решению проблемы ядерных сил. Выяснение природы химической связи сыграло определяющую роль в решении проблемы ядерных сил. Значение целого ряда наших работ состояло в том, что их успешное решение - объяснение явлений микромира в рамках классического подхода, с одной стороны, доказывало несостоятельность основной парадигмы квантовой механики – объяснить явления микромира можно только в рамках квантовой механики, а с другой стороны, доказывало, что существующие квантово-механические трактовки этих явлений ничего не объясняют. Результаты квантово-механических расчетов, совпадающие с результатами, полученными экспериментально, доказывали лишь неограниченные подгоночные возможности квантово-механических методов. Надо признать, что сначала такие совпадения понижали нашу уверенность в своих силах, что обессиливало наши попытки решить фундаментальные вопросы.

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. Электростатические силы являются центральными. Первые расчеты энергии ионной связи, сделанные на основе предполагаемой нами модели, отличались от значения энергии ионной связи, определяемой экспериментально, менее чем на 10%. В 70-х годах Пиментелом и Спратли была обоснована некорректность до той поры принятой модели образования связи. Они показали ошибочность традиционного расчета и продемонстрировали расхождение его с экспериментом в 50%. Это доказывало несостоятельность этой модели образования ионной связи. Тем не менее, научное сообщество практически не отреагировало на расчеты Пиментела и Спратли. В уважаемых нами учебниках как Савельева, так и Ландау и Лившица ионная связь продолжает описываться на уровне положений, сформулированных Косселем в 1913 году. Вопрос излагается как давно однозначно решенный.

Ковалентная связь в учебнике Савельева (И. В. Савельев, Курс общей физики, 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 (Курс теоретической физики, Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Л.: Государственное издательство РСФСР, 1948 г., т.3) описание ковалентной связи ограничивается объяснением валентности в рамках теории спин-валентности. Теория спин-валентности является типичным примером квантово-химических объяснений.

В классических рамках 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. Они позволили сформулировать очередные вопросы, решение которых необходимо для построения теории химической связи. Главный вопрос - о физической природе связи. До правил Льюиса предполагалось, что электростатические силы соединяют атомы в молекулы. В правилах Льюиса причина образования химической связи имела метафизический (даже антропофизический) смысл. Решение этого вопроса возможно только после разрешения другого: 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) создание структурных формул для соединений, которые в рамках правил Льюиса могут быть описаны более одной структурной формулы.

Квантово-химические объяснения прошли 3 этапа:

- 1) восхищение. Эйфория. Неограниченные надежды.(1926 – 1970 г.г.);
- 2) трезвые оценки (1960 – 2000 г.г.);
- 3) разочарование (1970 – 2005 г.г.).

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.

За первый период надежды квантовая химия получила решение многих задач. Ответы можно разделить на две группы: ответы для математиков и ответы для химиков.

Математики продемонстрировали на практике, что использование разрешённых квантово-механических математических манипуляций позволяет подогнать теоретический расчёт для любой модели химического или физического явления под экспериментальный результат. Быстродействие вычислительных машин определяет лишь время, которое нужно затратить на подгонку результата расчёта под эксперимент. В период трезвых

оценок доказал, что зачастую исходные положения для расчета (модели) были не корректны даже в канонических случаях: расчет энергии связи в молекуле водорода и в реакции атома водорода с молекулой водорода. В 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. При этом возможность электронной изомеризации в системе, в результате которой устанавливается динамическое равновесие между возможными Льюисовскими структурами, отвергалась. Расчет на основе этих положений, разумеется, совпадал с экспериментом, что, конечно, являлось доказательством корректности квантово-химических расчетов.

В 90-х годах экспериментальные данные ряда ученых помогли нам доказать, что если соединение можно описать несколькими формулами Льюиса, то в системе устанавливается динамическое равновесие между этими реальными структурами. Таким образом, в течение периода трезвой оценки достижений квантовой механики возникли обоснованные сомнения в корректности основных ранее возникших парадигм.

Третий период показал, что ранее найденные квантово-химические решения оказались некорректными. Некорректными и тупиковыми оказались: 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 Питера Эдвардса (Peter P. Edwards *The New Chemistry*, Editor-in-chief Nina Hall Cambridge university press, 2000, p. 85), доказывається, что также не удалось ответить на основные вопросы, связанные с электропроводностью металлов. А именно: почему металл проводит электрический ток, а не металл является изолятором? Что такое металл? Почему все свойства металлов так резко отличаются от свойств не металлов? Эдвардс остановился, в первую очередь, на теории Блоха–Вильсона, в которой авторы пытались, но не смогли ответить на эти вопросы.

Одним из основных критериев корректности теорий является возможность ее



дальнейшего развития. Квантово-механические решения никуда не вели, т.е. оказались неверными. Доказательство несостоятельности практически всех квантово-механических объяснений и расчетов является доказательством некорректности самого квантово-механического подхода. Квантово-механический метод яркий пример широко используемого в науке подхода, когда вместо поиска причинно-следственных связей, выяснения физической природы явления в рамках уже известных сущностей, решается обратная задача, необходимость разрешения которой требует новые дополнительные сущности и гипотезы.

Практически, все ответы данные квантовой химией, являлись решением обратных задач. Однако, мы ни разу не встретили честного признания, что описываемая теория или предложенное объяснение появились в результате решения обратной задачи. Решение обратной задачи называется подгонкой, а не теорией. Конечной целью решения такой 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 решения обратной задачи наука ничего не получает, никакой новой информации. Решение обратной задачи не имеет к науке отношения. Более того, составление и решение уравнений, осуществляемое в ходе решения обратных задач, сопровождается введением дополнительных гипотез новых сущностей и правил *ad hoc*, которые затуманивают физический смысл явления.

Классический научный подход предполагает следующей задачей после открытия нового явления–закона–правила 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 коэффициенты, и очередной задачей науки объявляется выяснение физического смысла этих коэффициентов или физического смысла всего уравнения (уравнения Аррениуса и Больцмана).

Перечисленные подходы являются популярными в определенной научной среде - среди преподавателей. Так, в ходе дискуссии на заседании американского химического общества преподаватель колледжа приводил следующие аргументы: квантово-химические 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 плодом длительных размышлений, глубоких знаний или счастливых озарений!

В энциклопедии [«Кругосвет»](#) так 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 упоминали 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

$$(1) \quad q \cdot p - p \cdot q = i\hbar/2\pi,$$

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

Постоянная Планка  $h$  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».

Почему же микромир не подчиняется законам макромира? Постулаты и уравнения Бора, законы и объяснения Льюиса, Лангмюра, Гейнзейберга и Дирака в открытом или скрытом виде постулировали, что микромиром управляют законы, качественно отличающиеся от законов макромира. Для микромира даже алгебраические законы не писаны. Эти объяснения, конечно, не могли ответить на вопрос: почему в макромире не наблюдаются предлагаемые постулаты или законы? На этом фоне гипотеза Де Бройля о корпускулярно-волновом дуализме, подтвержденная экспериментально, была палочкой-выручалочкой микромира: постулаты и законы, не проявляются в макромире также как и волновые свойства макрочастиц.

Пиментел и Спратли (Пиментел, Г.; Спратли, Р., Как квантовая механика объясняет химическую связь, М.: Мир, 1973, стр. 29) рассказывают: «Теперь очередь дошла и до Эрвина Шредингера, который занимался математической физикой и мог за завтраком на салфетке записать и решить волновое уравнение для осциллятора. 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. ...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 ничем 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 экспериментальному, 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 построения теорий молекулярных и ядерных сил является примером рассмотренного выше подхода к решению научных задач.

Кулуарные обсуждения разных подходов к решению научных задач показали, что основная масса ученых согласна с нашим мнением о некорректности квантово-механического подхода.

Только страстное желание иметь хоть какое-то объяснение наблюдаемых явлений может оправдать использование этого подхода. Главным недостатком этого подхода является то, что предлагаемые объяснения не дают новой информации и ничего не объясняют.

Во второй период - период разочарования - полный отказ от квантово-химических объяснений не произошел из-за отсутствия альтернативных объяснений и существования двух традиционных научных парадигм XX-го века. Согласно одной из них проблемы микромира могут быть решены в рамках квантовой механики. Становление этой

парадигмы было обусловлено принятием квантово-механических объяснений в период восхищения и очарования. Их сохранение в период разочарования обусловлено легендой, согласно которой расчеты по разработке ядерного оружия и строительству атомных электростанций являются квантово-механическими. Уверенность в величии квантово-химического подхода и корректность квантово-химических расчетов явились ответной реакцией на появление оружия массового уничтожения.

В XX-м веке легенда, приписывающая главную роль квантово-механическим расчетам в разработке атомного оружия, овладела массовым сознанием, т.е. стала материальной силой. Реальная роль квантовой механики, может быть выяснена только после опубликования информации по разработке технологии ядерного оружия, которая обоснованно является государственным секретом.

В отсутствии достоверной информации в условиях атомной и термоядерной угроз любые критические замечания в адрес такого достижения человечества как квантовая механика выглядят провокационно. Критика либо не воспринимается научным сообществом вообще, либо расценивается как мелкие придирки завистников, графоманов, шизофреников, страдающих манией величия. По правде говоря, в большинстве случаев такое отношение справедливо. Критика квантовой механики является любимым занятием пройдох от науки.

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

Основной парадигмой, подтверждающей корректность теории относительности, было утверждение, что знаменитое уравнение Эйнштейна  $E=MC^2$  явилось теоретической основой для создания атомного оружия.

Также как и в случае с квантовой механикой взрыв атомной бомбы на 100 лет утвердил корректность теории относительности, закрепил существование таких сущностей как инерционная и гравитационная масса и провозгласил могущество науки.

В настоящее время (2006 год) в подавляющей большинстве энциклопедий, монографий и в учебниках проблемы ядерных сил и энергии выделяющейся в ходе ядерных реакций рассматриваются отдельно и независимо друг от друга.

Выделение огромного количества энергии в результате ядерных реакций объясняется переходом массы в энергию. Это способность массы используется в военных



и мирных целях. В природе она наблюдается в виде излучения звезд, в виде тепла, которое посылает Солнце на нашу Землю на протяжении миллиардов лет.

Этим свойством массы объясняется выделение энергии в системе, где нуклоны (протоны и нейтроны) объединяются в атомные ядра. Изменение массы ядер в результате ядерных реакций пропорционально 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  $E = mc^2$ . 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.

Объясняя внутриядерные реакции в рамках электродинамики, мы рассматриваем модель ядра аналогичную модели 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  $10^{-13}$  см ( $10^{-5}$  Å), а ионизационный потенциал такого нуклона должен быть порядка  $10^6$  эВ. При расчете энергии связи в двухатомной молекуле, значение ионизационного потенциала подставляется в уравнение (2)

$$(2) \quad E_n = 2E_H (Z_n - 0,25)^2 (0,93 + 0,0114Z)$$

где  $E_H$  – энергия ионизации атома водорода.  $E_H$  — энергия атома водорода;  $Z_n$  — заряд ядра соответствующего гелийподобного атома.

Заменим потенциал ионизации водорода  $E_H$  на потенциал ионизации нуклона и найдем количество энергии, которое выделится при образовании нуклон-нуклонной связи.

Расчетная величина заряда в центре между двумя нуклонами (по аналогии с молекулой водорода) равна 1,049 единиц протона, тогда как энергия всей системы составляет:

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

и энтальпия этой связи будет равна соответственно

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

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. Эта 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 (3), т.е. необходимо определить  $K$  в этом уравнении, что и дает возможность найти затем  $\Delta G$ .

$$(3) \quad \Delta G = \Delta H (1 + K),$$

где  $K = (-T_2/(T_2 - T_1)) \ln (T_2/T_1)$  определяет энтропийный и энтальпийный вклады.

Для внутриядерной связи  $\Delta H$  в  $10^5$  раз больше, чем при образовании молекулы водорода. Следовательно, и температура 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 (3) 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 порядка 11.

Теперь сравним, наши положения с объяснением, построенным на предложении об изменении энергии за счет дефекта массы. Напомним ещё раз, что до сих пор не предложено даже гипотетического механизма перехода массы ни в один вид энергии. Новая сущность (сильные взаимодействия) была введена в виде гипотезы о силах, связывающих частицы в ядре. Единственным обоснованием этого шага может служить действительно большое количество энергии, выделяющееся в процессе ядерной реакции, и коррелирующее с дефектом массы, который определяется уравнением  $E = mc^2$ , но оно не

дает никакого представления о реальном механизме перехода массы в энергию.

Предложенное нами объяснение внутриядерных реакций построено на законах электродинамики и не требует введения никаких новых сущностей. Кроме того, экспериментально 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 вытекает из уравнения (3). Дополнительный расход энергии связан с уменьшением электронной энтропии вследствие разрыва межнуклеарной связи. В соответствии с выполненными количественными оценками, соотношение между энтропийными и энтальпийными вкладами в межнуклеарную связь составляет примерно 11:1. Именно поэтому мы можем говорить, что изменение энтропии является тем фактором, который определяет основной расход энергии для разрушения межнуклеарных связей.

Гипотеза о том, что энтропия является определяющим фактором при образовании внутриядерных связей впервые была высказана Н. Бором. Выполненные эксперименты показали, что энергетические спектры частиц, образующихся в процессе диссоциации ядер, очень похожи на те, что 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  $10^8$  K, 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. Эффект объясняется прохождением процесса трех 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 разрыва внутриядерных сил объясняет их короткодействие. Энергия взаимодействия круто обрывается, когда расстояние между нуклонами в атомном ядре выходит за  $10^{-5}$  Å. Поэтому короткодействие внутриядерных сил, которые получили название сильного взаимодействия, не представляют собой новый вид сил, а являются электростатическими и определяются радиусом, по которому отрицательный заряд вращается вокруг положительного заряда.

2006 г