



УДК 532.08; 539.216.1

© 2020 г. **И.Е. Еремин**, д-р техн. наук,  
**В.В. Еремина**, канд. физ.-мат. наук  
(Амурский государственный университет, Благовещенск)

### КИБЕРНЕТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ВОДОРОДА И ГЕЛИЯ. III

Рассматриваются фундаментальные математические модели упругой электронной поляризации и атомного строения рассматриваемых веществ. Предлагается альтернативная трактовка их электронной конфигурации. В третьей части работы представлена достаточно эффективная релятивистская формулировка линейчатых спектров водородоподобных систем.

**Ключевые слова:** линейчатый спектр, энергетические уровни, вычислительный эксперимент.

DOI: 10.22250/isu.2020.63.59-73

#### Введение

Как известно, любой из утилитарных методов современной квантовой теории базируется на гипотетическом обосновании физического существования спонтанных квантовых скачков, происходящих внутри заданного набора энергетических электронных уровней, постулированных Н. Бором [1 – 3]. При этом главное подтверждение теоретической справедливости боровской модели строения атома основано на предложенном им достаточно эффективном расчете численного значения частотной постоянной Ридберга. Однако ее наиболее уязвимое место исторически обусловлено традиционной критикой предпринятой Бором математической индукции квантовых и классических исходных предпосылок.

Таким образом, общепринятые методики квантово-механических вычислений, в том числе и формирующиеся или же совершенствующиеся на

протяжении последнего десятилетия [4 – 18], неизбежно опираются на общепринятую «копенгагенскую концепцию», включающую в себя следующие компоненты: принцип соответствия Бора; принцип неопределенности Гейзенберга; вероятностную интерпретацию волновой функции Шредингера – Борна; принцип дополнительности Бройля – Бора; коллапс волновой функции. Отметим, что Бор и его сторонники настаивали на научной полноте названной концепции, в которой сомневался А. Эйнштейн, уверенный в существовании «скрытых параметров», детерминирующих квантовые эффекты на более глубоком теоретическом уровне [19].

### Энергетические диаграммы электронного осциллятора

Принимая во внимание релятивистские эффекты, объективно возникающие в любых высокоскоростных системах, физически наблюдаемая масса  $m'$  электрона, а также экспериментально измеряемое расстояние  $r'$  между ним и атомным ядром (по крайней мере, в рамках моделирования линейчатых спектров водородоподобных систем) должны выражаться уравнениями Лоренца – Эйнштейна [20]:

$$m' = \frac{m_e}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}; \quad r' = \frac{r}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, \quad (1)$$

где  $m_e$  – масса покоя электрона;  $r$  – истинный радиус его орбиты;  $v$  – реальная скорость электрона;  $c$  – скорость света в вакууме (299 792 458 м/с).

Следовательно, нормальная составляющая кинетической энергии  $T_e$  электрона, определяемая центробежной силой  $F_{rot}$ , возникающей в результате его кругового движения, может быть представлена как:

$$F_{rot} = \frac{m' v^2}{r'} = \frac{m_e v^2}{r}; \quad (2)$$

$$T_e = F_{rot} r \Rightarrow T_e = m_e v^2. \quad (3)$$

В свою очередь потенциальная энергия  $P_e$  вращающегося электрона, обусловленная силой его кулоновского взаимодействия  $F_{kul}$  с атомным ядром, может быть выражена следующим образом:

$$F_{kul} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r'^2} = \frac{Ze^2(1 - v^2/c^2)}{4\pi\epsilon_0 r^2}; \quad (4)$$

$$P_e = F_{kul} r \Rightarrow P_e = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right), \quad (5)$$

где  $Z$  – порядковый номер атома;  $e$  – элементарный заряд, равный  $1.602189 \cdot 10^{-19}$  Кл;  $\epsilon_0$  – диэлектрическая проницаемость вакуума, равная  $8.854188 \cdot 10^{-12}$  Ф/м.

Достаточно очевидно, что типовой вид функции (5), рассматриваемой относительно расстояния между электроном и атомным ядром, является простым гиперболическим графиком (рис. 1а). С другой стороны, для повышения его общей информативности, т.е. отображения зависимости  $P_e(r)$ , характеризующейся текущей скоростью электрона, авторы считают возможным использовать теоретическую схему «планетарного преобразователя» (рис. 1б), предложенную в работе [21].

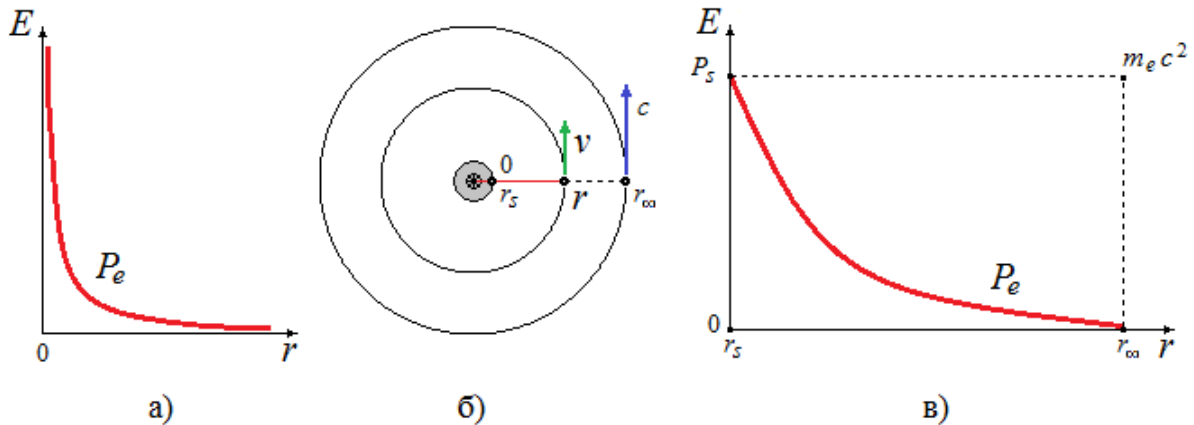


Рис. 1. Визуализация теоретических описаний потенциальной энергии электрона:  
 а) график функции  $P_e(r)$  общего вида; б) схема планетарного преобразователя;  
 в) график функции  $P_e(r)$ , модельно связанной с текущей скоростью электрона.

Иными словами, имеет место вполне адекватная корпускулярная модель, имеющая следующую формулировку (рис. 1в). Во-первых, электрон, находящийся на поверхности атомного ядра радиуса  $r_s$ , является неподвижным в собственной (атомной) системе отсчета и обладает наибольшей потенциальной энергией:  $P_s = Ze^2/(4\pi\epsilon_0 r_s)$ . Во-вторых, электрон, равномерно движущийся по некоторой устойчивой круговой орбите радиуса  $r$ , имеет определенную линейную скорость  $v$ . В-третьих, при удалении электронной орбиты от атомного ядра на бесконечно большое расстояние  $r_\infty$  соответствующее ей значение  $v$  становится эквивалентным скорости света, а кинетическая энергия электрона, оцениваемая в глобальной системе отсчета, оказывается предельно допустимой:  $T_\infty = m_e c^2$ .

Кроме того, электронные спектры исследуемых систем эффективно описываются квантовым соотношением планковской энергии  $E$ , которое может быть связано с вышеназванными атомными параметрами  $r$  и  $v$ , как [20]:

$$E = nhf; \quad (6)$$

$$f = \frac{v}{2\pi r} \Rightarrow E = nh \frac{v}{2\pi r}, \quad (7)$$

где  $h$  – квантовая постоянная Планка, равная  $6.625 \cdot 10^{-34}$  Дж·с;  $n$  – квантовое

число, характеризующее порядковый номер стационарной электронной орбиты;  $f$  – соответствующая ей частота электронных колебаний.

Нетрудно заметить, что уравнения (5) и (7) используют разные физические величины. Потенциальная энергия  $P_e$  выражается через соотношение скоростей  $v^2/c^2$ , а энергия Планка  $E$  учитывает главное квантовое число  $n$ . Авторы статьи считают, что данное расхождение может быть устранено с помощью параметрической замены, принципиально не противоречащей понятию квантования:

$$\frac{v}{c} \rightarrow \frac{n}{m} \Rightarrow \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} = \sqrt{1 - \frac{n^2}{m^2}}, \quad (8)$$

где  $m$  – квантовые числа, начинающиеся со значения  $n + 1$  и характеризующие все возбужденные электронные состояния  $n$ -й серии линейчатого спектра.

Отметим, что предлагаемая параметрическая замена наполняет формируемую математическую модель электронных свойств вещества более строгим физическим смыслом, так как принимает во внимание значение реальной скорости электрона, принципиально определяющей количество отвечающей ей энергии, традиционно характеризующейся порядковым номером соответствующей орбитали.

Следовательно, выражение зависимости  $P_e(r)$  преобразуется к виду:

$$P_e = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \left( 1 - \frac{n^2}{m^2} \right). \quad (9)$$

Таким образом, учитывая график (рис. 1в) и общий закон сохранения, можно построить диаграммы полной энергии электронного осциллятора (рис. 2).

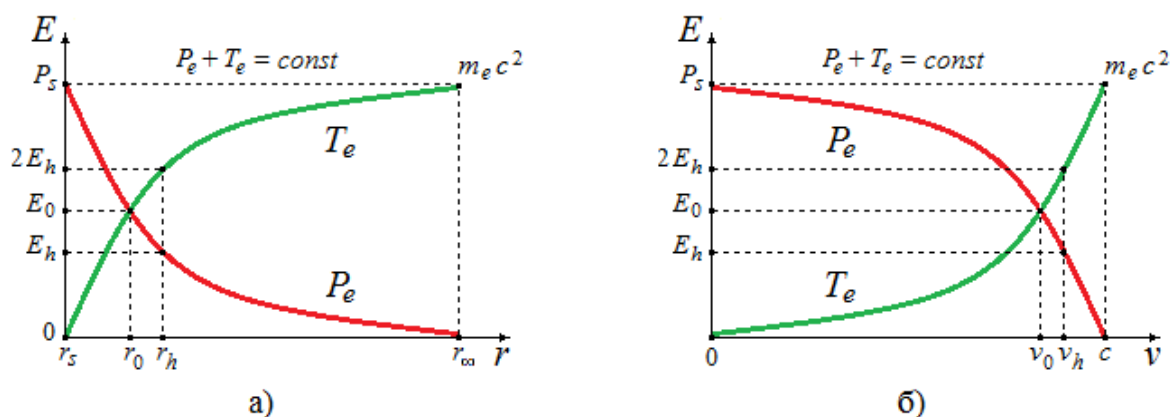


Рис. 2. Энергетические диаграммы электронного осциллятора:

- а) графики функций  $P_e(r)$  и  $T_e(r)$ ;
- б) графики функций  $P_e(v)$  и  $T_e(v)$ .

Представленная выше теоретическая схема делает наглядной условную ситуацию  $T_e(v_0) = E(r_0, v_0) = P_e(r_0)$ , характерную для значения  $v_0$  первой орбитальной скорости электрона в случае его равномерного кругового движения по минимально устойчивой орбите радиуса  $r_0$ . При этом фундаментальное квантовое соотношение Планка (6), рассматриваемое в форме записи (7), может быть использовано для придания аргументированной однообразности функциям (3) и (9).

Действительно, первая часть рассматриваемого условия равновесия водородоподобной системы  $T_e(v_0) = E(r_0, v_0)$ , т.е. выражение вида

$$m_e v_0^2 = nh \frac{v_0}{2\pi r_0} \quad (10)$$

дает возможность получить следующий промежуточный результат:

$$v_0 = \frac{nh}{2\pi r_0 m_e}. \quad (11)$$

В свою очередь, ключевая составляющая рассматриваемого условия, приведенная с учетом выражения (11) к виду  $T_e(r_0) = P_e(r_0)$ , т.е. соотношение вида

$$m_e \left( \frac{nh}{2\pi r_0 m_e} \right)^2 = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left( 1 - \frac{n^2}{m^2} \right) \quad (12)$$

непосредственно генерирует формулу радиальных значений всего набора стационарных состояний, аргументированных квантовыми параметрами  $n$  и  $m$ :

$$r_0(n, m) = \frac{4\pi\epsilon_0}{e^2 m_e} \left( \frac{h}{2\pi} \right)^2 \frac{1}{Z} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)^{-1}. \quad (13)$$

Сравнивая представленное оригинальное уравнение с традиционной формулой боровских радиусов [20], можно констатировать их формальную равнозначность при значении  $m$ , стремящимся к бесконечности.

В заключение данного раздела отметим, что скоростная диаграмма, изображенная на рис. 2б), отличается от ее изначального варианта, предложенного в первой части статьи [21]. Кроме того, имеет место и существенное отличие формулы (13) от ее теоретического аналога, описанного в работе [22].

### **Альтернативная модель линейчатых спектров вещества**

Бесспорно, что ранее рассмотренная ситуация, т.е. возможность существования полностью устойчивой электронной орбиты, может иметь место только при физическом отсутствии радиационного трения.

Однако хорошо известно, что электроны реальной водородоподобной системы, находящейся в гипотетическом стационарном состоянии  $r_0(1, \infty)$ , описываемом силовым соотношением Резерфорда [20] или же его энергетическим аналогом вида (12), должны замедляться и притягиваться атомным ядром. При этом потенциальный энергетический переход электронов в какое-либо возбужденное состояние  $r_h(n, m)$  объективно обусловлен их ускорением до минимального значения  $v_h$  второй орбитальной скорости.

Принимая во внимание изложенные теоретические соображения, рассмотрим соответствующую им вариацию непрерывно-детерминированного вывода параметрической формулы радиусов стационарных электронных орбит, основанную на величине второй орбитальной скорости  $\frac{1}{2}T_e(v_h) = E(r_h, v_h) = P_e(r_h)$ .

Первая часть названного условия, т.е. выражение вида

$$\frac{m_e v_h^2}{2} = nh \frac{v_h}{2\pi r_h} \quad (14)$$

дает соответствующий промежуточный результат:

$$v_h = \frac{nh}{\pi r_h m_e}. \quad (15)$$

В свою очередь, базовая составляющая условия существования устойчивой орбиты радиуса  $r_h$ , характерного для значения второй орбитальной скорости электрона, описываемого соотношением (24), генерирует уравнение:

$$\frac{m_e}{2} \left( \frac{nh}{\pi r_h m_e} \right)^2 = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_h} \left( 1 - \frac{n^2}{m^2} \right). \quad (16)$$

Таким образом, формула радиусов набора стационарных электронных орбит, аргументированных квантовыми параметрами  $n$  и  $m$ , принимает вид:

$$r_h(n, m) = \frac{2r_B}{Z} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)^{-1}, \quad (17)$$

$$r_B = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2},$$

где  $r_B$  – величина первого боровского радиуса, гипотетически отображающая электронную орбиту атома водорода и равная  $0.529177 \cdot 10^{-10}$  м;  $\hbar$  – постоянная Дирака, равная  $1.054572 \cdot 10^{-34}$  Дж·с.

Подставив в выражение (17) значения  $n$  и  $m$ , соответствующие спектральным сериям Лаймана ( $n = 1$ ;  $m(1) = 2, 3, 4, 5, 6$ ), Бальмера ( $n = 2$ ;  $m(2) = 3, 4, 5, 6$ ) и Пашена ( $n = 3$ ;  $m(3) = 4, 5, 6$ ), получаем возможность

иметь альтернативную визуализацию энергетических электронных уровней водорода (рис. 3).

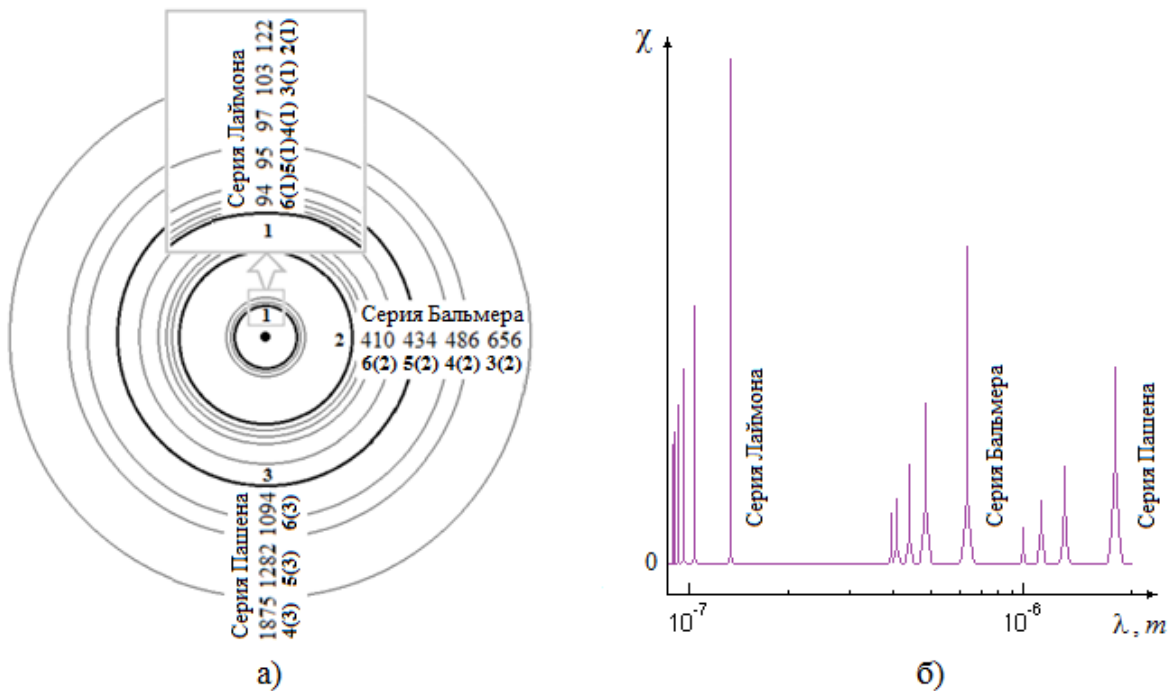


Рис. 3. Альтернативная формулировка электронных уровней атома водорода:

- а) схема последовательного формирования возбужденных орбиталей;
- б) график длинноволновой зависимости оптического поглощения.

Физическая интерпретация предлагаемой релятивистской модели энергетических уровней спектральных линий водорода может быть сформулирована следующим образом. Опорные стационарные уровни электронов имеют место для их круговых орбит (рис, 3а), отвечающих дискретным значениям квантового числа  $n$  при  $m \rightarrow \infty$ , а серии возбужденных орбиталей размещаются внутри соседних опорных уровней. При этом минимальное значение  $m(n) = (n + 1)$  соответствует электронной орбите  $n$ -й серии с наибольшим радиусом.

Принимая во внимание вышеописанную альтернативную модель, нормальное энергетическое состояние электронов водорода, характеризуемое квантовыми параметрами  $n = 1$  и  $m \rightarrow \infty$ , может быть представлено соотношениями, непосредственно вытекающими на основании выражений (6) и (9):

$$E_{h \text{ norm}} = nhf_{h \text{ norm}} = hf_{h \text{ norm}};$$

$$P_{h \text{ norm}} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_h} \left( 1 - \frac{1^2}{\lim_{m \rightarrow \infty} m^2} \right) = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_h}. \quad (18)$$

Следовательно, потенциально-частотное условие  $P_{h \text{ norm}} = E_{h \text{ norm}}$ , регламентирующее существование возбужденных электронных уровней водородоподобной системы, находящейся в нормальном энергетическом состоя-

нии, учитывая формулу их орбитальных радиусов (17), может быть представлено как:

$$\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{Z}{2r_B} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) = hf_{h\text{ norm}}. \quad (19)$$

Таким образом, результирующее частотное уравнение исследуемых линейчатых спектров, сгенерированное путем непрерывных математических преобразований, выполненных в рамках предлагаемого подхода, имеет вид:

$$f_{h\text{ norm}} = Z^2 R \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right), \quad (20)$$

$$R = \frac{1}{h} \cdot \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 2r_B} = \frac{e^4 m_e}{8\epsilon_0^2 h^3},$$

где  $R$  – частотная постоянная Ридберга, равная  $3.289842 \cdot 10^{15} \text{ c}^{-1}$ .

Сравнение полученной формулировки  $f_{h\text{ norm}}$  с ее традиционными аналогами показывает, что она полностью тождественна обобщенной спектральной формуле Ридберга – Бальмера при  $Z = 1$ :

$$f = R \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right); \quad (21)$$

а также структурно подобна рентгеновскому закону Г. Мозли, эмпирически открытому в 1913 г. [20]:

$$f_r = (Z - \sigma)^2 R \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right), \quad (22)$$

где  $\sigma$  – теоретическая постоянная экранирования атомного ядра электронными оболочками, определяемая с помощью методики Д. Слейтера [23].

Однако приходится констатировать, что выявленное авторами теоретическое обоснование частотной постоянной Ридберга несколько отличается от ее трактовки, найденной в 1913 г. Н. Бором. А именно: предлагаемая формулировка  $R$  более четко связывает обратную величину квантовой константы Планка и нормализованную потенциальную энергию электронов.

В свою очередь, физически наблюдаемые энергетические выбросы квантовых переходов могут быть связаны с частотными резонансами затухающих гармонических колебаний с помощью известного соотношения [24]:

$$\omega_r = 2\pi f_{h\text{ norm}} = \sqrt{\omega_0^2 - 2\beta^2}, \quad (23)$$

где  $\beta$  и  $\omega_0$  – коэффициент затухания и частота собственных гармонических колебаний электронной оболочки.

При этом на основании неоднократно подтвержденных экспериментальных данных [25] можно утверждать, что  $\beta \ll \omega_0$ , следовательно, учиты-



вая формулу (20), значения частот собственных колебаний конкретных электронных орбиталей вещества будут выражаться в виде:

$$\omega_0(n, m) \cong \omega_r = 2\pi Z^2 R \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right). \quad (24)$$

Кроме того, исследуемые линейчатые спектры, рассматриваемые в рамках предлагаемой альтернативной модели, могут быть интерпретированы в качестве соответствующих им резонансных режимов частотного спектра оптического поглощения  $\chi(\omega)$ , имеющего следующее теоретическое описание [26 – 28]:

$$\chi(\omega) = \sqrt{\frac{\sqrt{\varepsilon_{\text{Re}}^2(\omega) + \varepsilon_{\text{Im}}^2(\omega)} - \varepsilon_{\text{Re}}(\omega)}{2}}; \quad (25)$$

$$\varepsilon_{\text{Re}}(\omega) = 1 + \frac{2}{3\varepsilon_0} \alpha_{\text{Re}}(\omega) N, \quad N = \rho/M, \quad (26)$$

$$\varepsilon_{\text{Im}}(\omega) = \frac{2}{3\varepsilon_0} \alpha_{\text{Im}}(\omega) N;$$

$$\alpha_{\text{Re}}(\omega) = \frac{2e^2}{m_e} \cdot \frac{\omega_0^2 - \omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 - (2\beta\omega)^2}, \quad (27)$$

$$\alpha_{\text{Im}}(\omega) = \frac{2e^2}{m_e} \cdot \frac{2\beta\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 - (2\beta\omega)^2},$$

где  $\varepsilon_{\text{Re}}(\omega)$  и  $\varepsilon_{\text{Im}}(\omega)$  – вещественная и мнимая частотные характеристики комплексной диэлектрической проницаемости, рассчитываемые с помощью «кибернетической модели»  $\varepsilon(j\omega)$ ;  $\alpha_{\text{Re}}(\omega)$  и  $\alpha_{\text{Im}}(\omega)$  – классические частотные характеристики электронной поляризуемости частиц;  $N$  – их объемные концентрации;  $\rho$  – физическая плотность образца;  $M$  – молекулярная масса его формульной единицы.

Практические результаты имитационного моделирования длинноволновой электронной характеристики водорода, пребывающего в своем нормальном энергетическом состоянии, реализованные с использованием уравнений (23) – (26), показаны на рис. 3б). При этом теоретический анализ внешнего вида названного графика предоставляет возможность следующего физического толкования интенсивности серийных линий его спектра.

Во-первых, расчетный аналог частотной характеристики коэффициента поглощения вида  $\chi(\lambda)$ , отвечающий ультрафиолетовой серии Лаймана и непосредственно полученный для значения  $\beta(1, m) = 0,001\omega_0(1, m)$ , оказывается адекватным поведенческой страте реальных интенсивностей ее отдельно взятых линий. Во-вторых, каскадное снижение интенсивности полос по-

глощения линейчатых серий Бальмера и Пашена может быть смоделировано с учетом относительного увеличения коэффициента затухания соответствующих колебательных процессов, обусловленного расширением внутреннего пространства частиц, вызванного их потенциальными переходами на возбужденные электронные уровни.

### Детерминированное моделирование электронных свойств

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

На рис. 4 представлены результаты вычислительного эксперимента, направленного на детерминированное моделирование электронных свойств водорода, практически реализованное с помощью уравнений вида (17), (20), (24), (26) и (27).

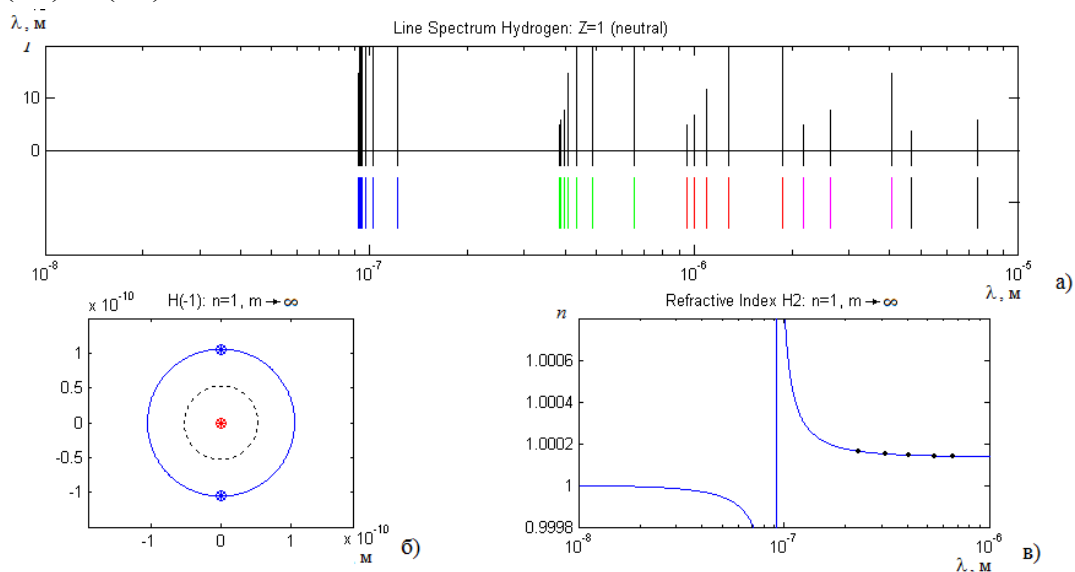


Рис. 4. Результаты детерминированного моделирования электронных свойств водорода: а) линейчатый спектр излучения; б) визуализация размеров стационарной орбиты; в) график длинноволновой зависимости коэффициента оптического преломления.

Прокомментируем представленные графики.

Первый график (рис. 4а) воспроизводит экспериментальный линейчатый спектр водорода [25], находящегося в нейтральном ионизированном состоянии, изображенный над горизонтальной линией, под которой приведены

вертикальные отрезки, соответствующие значениям частот поглощения, рассчитанным по формуле (20), полностью равнозначных использованию выражения (21). Вторая схема (рис. 4б) визуализирует линейные размеры сферической электронной орбиты отрицательного иона водорода  $H^-$ , соответствующей ее стационарному энергетическому состоянию ( $n = 1$  и  $m \rightarrow \infty$ ), теоретически найденные по формуле (17) и показанные сплошной круговой линией. Кроме того, пунктирная линия отображает традиционное толкование размеров атома водорода, рассматриваемое в качестве величины первого боровского радиуса (13). График на рис. 4в имитирует спектр оптического преломления:

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{\sqrt{\varepsilon_{\text{Re}}^2(\omega) + \varepsilon_{\text{Im}}^2(\omega)} + \varepsilon_{\text{Re}}(\omega)}{2}}, \quad (28)$$

показанный сплошной линией и рассчитанный на базе уравнений (24), (26), и (27) для тех же стационарных параметров его электронной конфигурации, что и предыдущая характеристика. Кроме того, приведен точечный массив, воспроизводящий экспериментальное измерение моделируемой характеристики [25].

Анализ общей совокупности полученных результатов позволяет констатировать, что предлагаемая релятивистская методика расчета электронных спектров вещества является, с одной стороны, такой же эффективной, как и существующие в настоящее время общепризнанные методы квантово-механических вычислений. С другой стороны, она оказывается гораздо менее затратной с точки зрения привлекаемых вычислительных ресурсов, так как целиком и полностью опирается на простые непрерывно-детерминированные математические модели.

В свою очередь, с целью проверки универсальности описываемого подхода было проведено комплексное моделирование электронных свойств гелия, находящегося в нейтральном ионизированном состоянии, реализуемое посредством совместного использования уравнений (20) – (22), обобщенные результаты которого представлены на рис. 5.

Анализ фактической совокупности представленных результатов приводит к подтверждению обстоятельства общеизвестного изъяна теории Бора, упомянутого авторами в начале раздела. Однако в отличие от линейчатого спектра водорода, физически существующего только для его нейтрального ионизированного состояния, у гелия имеет место дополнительная экспериментальная характеристика, представляющая собой линейчатый спектр рассматриваемого газа, находящегося в условиях первичной ионизации [25].

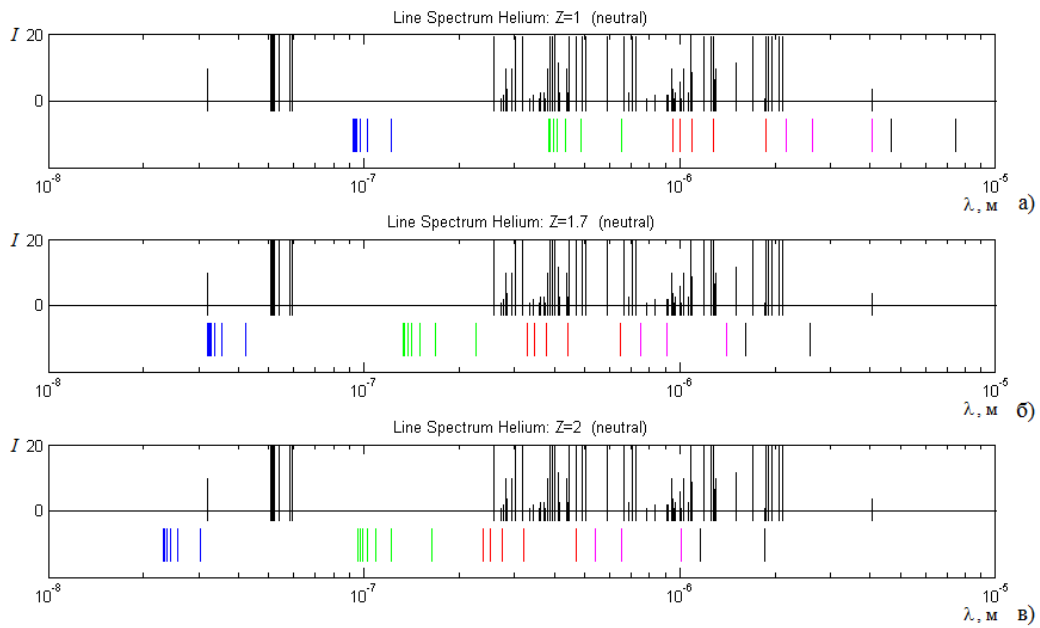


Рис. 5. Сравнительные результаты моделирования квантовых свойств нейтрального водорода: а) линейчатый спектр излучения, рассчитанный с помощью обобщенной формулы Ридберга; б) линейчатый спектр излучения, рассчитанный на основании рентгеновского закона Мозли; в) линейчатый спектр излучения, рассчитанный на базе релятивистской модели вида (20).

Результаты аналогичного подхода к детерминированному расчету линейчатых спектров однократно ионизированного гелия, представлены на рис. 6.

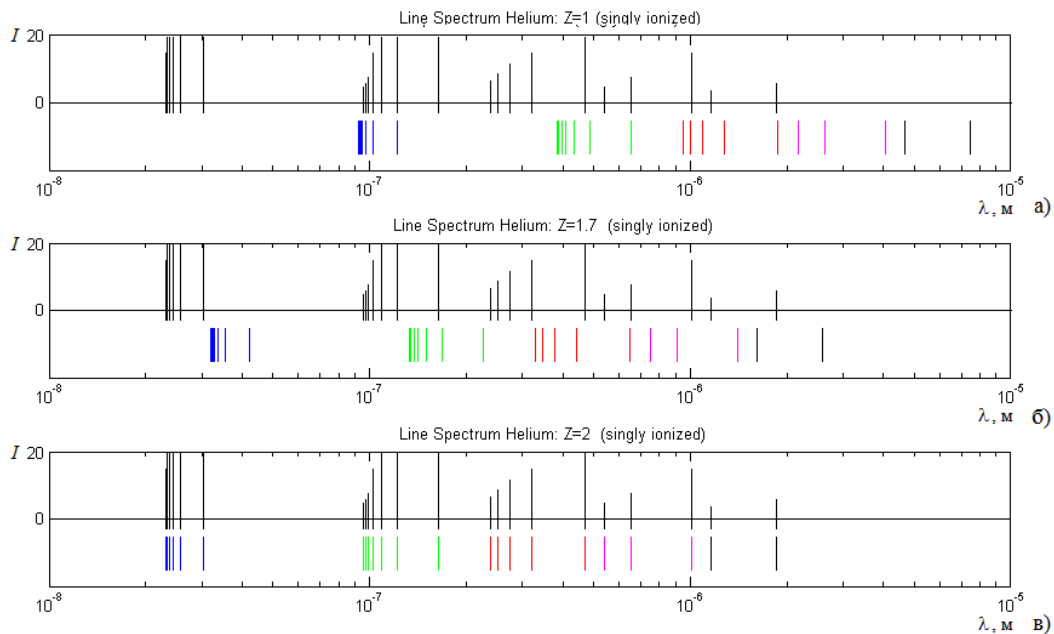


Рис. 6. Сравнительные результаты расчета квантовых свойств ионизированного водорода: а) линейчатый спектр излучения, рассчитанный с помощью обобщенной формулы Ридберга; б) – линейчатый спектр излучения, рассчитанный на основании рентгеновского закона Мозли; в) – линейчатый спектр излучения, рассчитанный на базе релятивистской модели вида (20).

Объективная оценка вытекающих изменений общего соответствия частот экспериментально наблюдаемых полос поглощения данным их теоретической дефиниции показывает, что уравнения Ридберга (21) и Мозли (22) оказываются также малоэффективными, как и в предыдущем случае. В свою очередь, предлагаемая частотная формула (20) дает полностью приемлемый результат. Следовательно, имеет место фактическое подтверждение практической возможности принципиального перехода от вероятностных методов существующих квантово-механических вычислений к детерминированным описаниям квантовых свойств вещества, основанных на общей теории относительности.

### Заключение

Резюмируя итоги проведенного исследования, сформулируем основные теоретические выводы, объективно подтверждаемые результатами аналитических выкладок и вычислительных экспериментов.

Во-первых, предлагаемый авторами релятивистский подход, основанный на критическом пересмотре полноты копенгагенской квантовой концепции, обеспечивает возможность теоретического вывода оригинальной формулы радиусов возбужденных электронных орбиталей (17), а также более строго обоснования численного значения частотной постоянной Ридберга без использования традиционных квантовых постулатов Бора.

Во-вторых, в его рамках имеет место вполне обоснованная трактовка пространственного расположения энергетических уровней водородоподобных систем, коренным образом изменяющая общепринятое толкование физического механизма квантовых скачков (рис. 3а). При этом указанная трактовка позволяет достаточно просто объяснить интенсивность линейчатых спектров водорода на базе теории гармонических колебаний (рис. 3б), т.е. без привлечения принципа дополнительности Бройля – Бора.

В-третьих, общая совокупность предлагаемых математических моделей генерирует единое детерминированное описание линейчатых спектров нейтрального водорода и однократно ионизированного гелия, исключая вероятностные методы расчета (принцип неопределенности Гейзенберга; вероятностную интерпретацию волновой функции Шредингера – Борна).

И наконец, выведенная авторами формула радиусов возбужденных электронных орбиталей однозначно связывает линейчатые спектры вещества с геометрическими размерами его электронных орбит и обеспечивает возможность эффективной визуализации внешнего вида молекулярных структур, реализуемой посредством методики, изложенной в работах [29 – 33].

## ЛИТЕРАТУРА

1. *Roldan-Charria J.* Indivisibility, Complementarity and Ontology: A Bohrian Interpretation of Quantum Mechanics // *Foundations of Physics*. – 2014. – V. 44, № 12. – P. 1336-1356.
2. *Robinson T.R., Haven E.* Quantization and Quantum-Like Phenomena: A Number Amplitude Approach Environment // *International Journal of Theoretical Physics*. – 2015. – V. 54, № 12. – P. 4576-4590.
3. *Hansen F.* Quantum Entropy Derived from First Principles // *Journal of Statistical Physics*. – 2016. – V. 165, № 5. – P. 799-808.
4. *Chun Miao, Shu-Dong Fang, Ping Dong, Zhuo-Liang Cao.* Remote Preparation of Quantum Entangled State in a Non-Markovian Environment // *International Journal of Theoretical Physics*. – 2014. – V. 53, № 12. – P. 4098-4106.
5. *Cenatiempo S., Giuliani A.* Renormalization Theory of a Two Dimensional Bose Gas: Quantum Critical Point and Quasi-Condensed State // *Journal of Statistical Physics*. – 2014. – V. 157, № 4-5. – P. 755-829.
6. *Cattaneo A.S, Mnev P.* Wave Relations // *Communications in Mathematical Physics*. – 2014. – V. 332, № 3. – P. 1083-1111.
7. *Sych D., Leuchs G.* Quantum Uniqueness // *Foundations of Physics*. – 2015. – V. 45, № 12. – P. 1613-1619.
8. *Dodson C.T.J.* A Model for Gaussian Perturbations of Graphene // *Journal of Statistical Physics*. – 2015. – V. 161, № 4. – P. 933-941.
9. *Daniela Cadamuro, Yoh Tanimoto.* Wedge-Local Fields in Integrable Models with Bound States // *Communications in Mathematical Physics*. – 2015. – V. 340, № 2. – P. 661-697.
10. *Hamid Reza Naeij, Afshin Shafiee.* Double-Slit Interference Pattern for a Macroscopic Quantum System // *Foundations of Physics*. – 2016. – V. 46, № 12. – P. 1634-1648.
11. *Qing-bin Luo, Guo-wu Yang, Kun She, Xiaoyu Li.* Quantum Private Comparison Protocol with Linear Optics // *International Journal of Theoretical Physics*. – 2016. – V. 55, № 12. – P. 5336-5343.
12. *Yoshiko Ogata.* A Class of Asymmetric Gapped Hamiltonians on Quantum Spin Chains and its Characterization. I // *Communications in Mathematical Physics*. – 2016. – V. 348, № 3. – P. 847-895.
13. *Santamoto E., De Martini F.* Proof of the Spin Statistics Connection II: Relativistic Theory // *Foundations of Physics*. – 2016. – V. 47, № 12. – P. 1609-1625.
14. *Moreira C., Wichert A.* Are Quantum Models for Order Effects Quantum // *International Journal of Theoretical Physics*. – 2017. – V. 56, № 12. – P. 4029-4046.
15. *Satoshi Nakajima, Yasuhiro Tokura.* Excess Entropy Production in Quantum System: Quantum Master Equation Approach // *Journal of Statistical Physics*. – 2017. – V. 169, № 5. – P. 902-928.
16. *Berry D.W., Childs A.M., Ostrander A., Guoming Wang.* Quantum Algorithm for Linear Differential Equations with Exponentially Improved Dependence on Precision // *Communications in Mathematical Physics*. – 2017. – V. 356, № 3. – P. 1057-1081.
17. *Shengwei Han, Xiaoting Xu, Feng Qin.* The Unitality of Quantum B-algebras // *International Journal of Theoretical Physics*. – 2018. – V. 57, № 5. – P. 1582-1590.
18. *Barletti L., Negulescu C.* Quantum Transmission Conditions for Diffusive Transport in Graphene with Steep Potentials // *Journal of Statistical Physics*. – 2018. – V. 171, № 4. – P. 696-726.

19. *Кумар М.* Квант: Эйнштейн, Бор и великий спор о природе реальности. / пер. с англ. – М.: АСТ: COPRUS, 2013.
20. *Трофимова Т.И.* Курс физики. – М.: Высшая школа, 2000.
21. *Еремин И.Е.* Кибернетическое моделирование электронных характеристик водорода и гелия. I // Информатика и системы управления. – 2018. – № 3(57). – С. 18-32.
22. *Еремин И.Е., Еремина В.В.* Кибернетическое моделирование электронных характеристик водорода и гелия. II // Информатика и системы управления. – 2019. – № 2(60). – С. 57-65.
23. *Эткинс П.* Кванты. Справочник концепций. – М.: Мир, 1977.
24. *Фейман Р., Лейтон Р., Сендс М.* Фейнмановские лекции по физике. Ч. 2: Пространство. Время. Движение. – М.: Мир, 1967.
25. *Lide D.R.* Handbook of Chemistry and Physics: 9th Edition. – Boca Raton, FL: CRC Press, 2009.
26. *Еремин И.Е., Еремина В.В., Костюков Н.С., Оверчук В.А.* Элементы параметрического синтеза линейной модели процесса упругой электронной поляризации // Информатика и системы управления. – 2003. – № 1(5). – С. 26-32.
27. *Еремин И.Е., Жилиндина О.В.* Методика расчета экранирующих вкладов оптических электронов аниона кислорода // Вестник Тихоокеанского государственного университета. – 2009. – № 4(15). – С. 17-24.
28. *Еремин И.Е., Еремина В.В., Уляхина Д.А.* Метод расчета динамических параметров поляризационных процессов // Информатика и системы управления. – 2011. – № 3(29). – С. 60-69.
29. *Еремин И.Е., Еремина В.В., Костюков Н.С.* Моделирование электронно-атомной структуры конденсированных диэлектриков. – Благовещенск: АмГУ, 2006.
30. *Еремина В.В.* Систематизация математических моделей упругих видов поляризации воды. I // Информатика и системы управления. – 2007. – № 1(13). – С. 12-21.
31. *Еремина В.В.* Систематизация математических моделей упругих видов поляризации воды. II // Информатика и системы управления. – 2007. – № 2(14). – С. 78-89.
32. *Еремина В.В.* Сравнительный анализ моментов инерции свободной и закрепленной молекулы воды // Информатика и системы управления. – 2009. – № 1(19). – С. 46-54.
33. *Еремин Е.Л., Еремина В.В.* Кибернетическая модель моментов инерции закрепленных молекул воды // Информатика и системы управления. – 2010. – № 1(23). – С. 50-58.

*E-mail:*

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

*Еремина Виктория Владимировна – [banysheva@mail.ru](mailto:banysheva@mail.ru).*