



УДК 530.145.6  
ББК 22.314

## КВАНТОВЫЕ И ВОЛНОВЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПРОСТРАНСТВЕННО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

**Кораблев Григорий Андреевич**

Доктор химических наук, профессор, заведующий кафедрой физики  
Ижевской государственной сельскохозяйственной академии  
biakaa@mail.ru, korablevga@mail.ru  
ул. Студенческая, 11, 426069 г. Ижевск, Российская Федерация

**Заиков Геннадий Ефремович**

Доктор химических наук, профессор, заведующий отделом  
биологической и химической физики полимеров  
Института биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН  
chembio@sky.chph.ras.ru  
ул. Косыгина, 4, 119334 г. Москва, Российская Федерация

**Аннотация.** Показано, что для двухчастичных взаимодействий принцип сложения обратных величин энергетических характеристик подсистем выполняется для процессов, происходящих по градиенту потенциала, а принцип их алгебраического сложения – для процессов против градиента потенциала.

Получено уравнение зависимости пространственно-энергетического параметра свободных атомов от их волновых, спектральных и частотных характеристик.

**Ключевые слова:** свободные атомы, периодические процессы, энергетические характеристики, градиент потенциала, волновое уравнение.

### Введение

Квантовые представления о строении атомов и молекул составляют фундамент современных естественно-научных теорий. Так, в стационарном состоянии момент количества движения электрона равен целому кратному от постоянной Планка. Это главное квантовое число и еще три других в целом однозначно характеризуют состояние любого атома. Кратность атомных квантовых характеристик проявляется и в спектральных данных для простых и сложных структур.

Известно также, что любые сложные по форме периодические процессы могут быть представлены в виде отдельных про-

стых гармонических волн. «По теории, доказанной Фурье, колебания любой формы с периодом  $T$  можно представить как сумму гармонических колебаний с периодами  $T_1, T_2, T_3, T_4$  и т. д. Зная форму периодической функции, можно вычислить амплитуду и фазы синусоид, суммированием которых может быть данная функция» [6].

Поэтому многие закономерности межмолекулярных взаимодействий, комплексообразования и нанотермодинамики объясняются с применением функциональных кратных квантовых или волновых энергетических характеристик структурных взаимодействий.

В данном исследовании делается попытка использовать в этих целях представ-

ления о пространственно-энергетическом параметре ( $P$ -параметре).

### О двух принципах сложения энергетических характеристик взаимодействий

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

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

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

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

Уравнение (1) используется при оценке характеристик процессов диффузии, сопровождающейся безызлучательными переносами электронов в белках [9].

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

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

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

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

Такое положение вещей имеет место и в квантовой механике» [3].

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

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

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

Для движущихся термодинамических систем первое начало термодинамики имеет вид [11]:

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

где  $\delta E$  – количество энергии, сообщенное системе; член  $d\left(U + \frac{mv^2}{2}\right)$  характеризует изменения внутренней и кинетической энергий системы;  $+\delta A$  – работа, выполненная системой;  $-\delta A$  – работа, совершенная над системой.

Так как величина работы численно равна изменению потенциальной энергии, то

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

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

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

Здесь

$$\Delta U = U_2 - U_1, \quad (9)$$

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

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

Был проведен анализ характера изменения величины потенциальной энергии ( $\Delta U$ ) по ее знаку для различных потенциальных полей, приведенный в таблице 1.

Направленность процессов взаимодействий

№	Системы	Вид потенциального поля	Процесс	$U$	$r_2/r_1$ $(x_2/x_1)$	$U_2/U_1$	Знак $\Delta U$	Знак $\delta A$	Направленность процесса в потенциальном поле
1	Разноименные электрические заряды	электростатическое	притяжение	$-k \frac{q_1 q_2}{r}$	$r_2 < r_1$	$U_2 > U_1$	-	+	по градиенту
			отталкивание	$-k \frac{q_1 q_2}{r}$	$r_2 > r_1$	$U_2 < U_1$	+	-	против градиента
2	Одноименные электрические заряды	электростатическое	притяжение	$k \frac{q_1 q_2}{r}$	$r_2 < r_1$	$U_2 > U_1$	+	-	против градиента
			отталкивание	$k \frac{q_1 q_2}{r}$	$r_2 > r_1$	$U_2 < U_1$	-	+	по градиенту
3	Элементарные массы $m_1$ и $m_2$	гравитационное	притяжение	$-\gamma \frac{m_1 m_2}{r}$	$r_2 < r_1$	$U_2 > U_1$	-	+	по градиенту
			отталкивание	$-\gamma \frac{m_1 m_2}{r}$	$r_2 > r_1$	$U_2 < U_1$	+	-	против градиента
4	Деформация пружины	поле упругих сил	сжатие	$k \frac{\Delta x^2}{2}$	$x_2 < x_1$	$U_2 > U_1$	+	-	против градиента
			растяжение	$k \frac{\Delta x^2}{2}$	$x_2 > x_1$	$U_2 > U_1$	+	-	против градиента
5	Фотоэффект	электростатическое	отталкивание	$k \frac{q_1 q_2}{r}$	$r_2 > r_1$	$U_2 < U_1$	-	+	по градиенту

Из таблицы 1 видно, что значения  $-\Delta U$  и соответственно  $+\delta A$  (положительная работа) соответствуют взаимодействиям, происходящим по градиенту потенциала, а  $\Delta U$  и  $-\delta A$  (отрицательная работа) имеют место при взаимодействиях против градиента потенциала.

Решение двухчастичной задачи взаимодействий двух материальных точек с массами  $m_1$  и  $m_2$ , полученное при условии отсутствия внешних сил, соответствует взаимодействиям, которые идут по градиенту, работа положительная, совершается системой (аналогично процессу притяжения в гравитационном поле). Решением этого уравнения через приведенную массу ( $\mu$ ) является [8] уравнение Лагранжа для относительного движения изолированной системы двух взаимодействующих материальных точек с массами  $m_1$  и  $m_2$ , которое в координате  $x$  имеет вид:

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

где  $U$  – взаимная потенциальная энергия материальных точек;  $\mu$  – приведенная масса.

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

$$\frac{\partial U}{\partial x} \approx \frac{\Delta U}{\Delta x}$$

То есть

$$\mu a \Delta x = -\Delta U.$$

И тогда:

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

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

где  $\Delta U_1$  и  $\Delta U_2$  – потенциальные энергии материальных точек на элементарном участке взаимодействий,  $\Delta U$  – результирующая (взаимная) потенциальная энергия этих взаимодействий.

Таким образом, можно сделать следующие выводы:

1. В системах, в которых взаимодействие идет по градиенту потенциала (положительная работа), результирующая потенциальная энергия находится по принципу сло-

жения обратных значений соответствующих энергий подсистем [19]. Аналогично рассчитывается приведенная масса для относительного движения изолированной системы двух частиц.

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

### Исходные критерии

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

«Электрон с массой  $m$ , движущийся около протона с массой  $M$ , эквивалентен частице с массой:  $m_{np} = \frac{mM}{m+M} \gg [10, \text{с. } 12]$ .

Поэтому, модифицируя уравнение (10), можно предположить, что энергия валентных орбиталей атома (ответственная за межатомные взаимодействия) может быть рассчитана [19] по принципу сложения обратных величин некоторых исходных энергетических составляющих согласно уравнениям:

$$\frac{1}{q^2/r_i} + \frac{1}{W_i n_i} = \frac{1}{P_\ominus} \quad \text{или} \quad \frac{1}{P_0} = \frac{1}{q^2} + \frac{1}{(Wrn)_i},$$

$$P_\ominus = P_0/r_i \quad (11), (12), (13)$$

где  $W_i$  – орбитальная энергия электронов [16];  $r_i$  – орбитальный радиус  $i$ -й орбитали [20];  $q = Z^*/n^*$  – по [13; 14],  $n_i$  – число электронов данной орбитали,  $Z^*$  и  $n^*$  – эффективный заряд ядра и эффективное главное квантовое число,  $r$  – размерные характеристики связи.

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

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

Для размерности ПЭП можно записать:

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

где  $[E]$ ,  $[h]$  и  $[v]$  – размерности энергии, постоянной Планка и скорости.

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

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

или:

$$\sum P_0 = P_0' + P_0'' + P_0''' + \dots; \quad r \sum P_\ominus = \sum P_0 \quad (16), (17)$$

где  $P$ -параметры суммируются по всем валентным орбиталам атома.

Для вычисления значения  $P_\ominus$ -параметра на данном расстоянии от ядра в зависимости от вида связи вместо  $r$  может использоваться или атомный радиус ( $R$ ), или ионный радиус ( $r_{и}$ ).

Кратко о достоверности такого подхода. Как показали расчеты, величины  $P_\ominus$ -параметров численно равны (в пределах 2 %) полной энергии валентных электронов ( $U$ ) по статистической модели атома. Используя известное соотношение между электронной плотностью ( $\beta$ ) и внутриатомным потенциалом по статистической модели атома [5], можно получить прямую зависимость  $P_\ominus$ -параметра от электронной плотности на расстоянии  $r_i$  от ядра.

Рациональность данной методики была подтверждена путем расчета электронной плотности с использованием волновых функций по Клементи [15] и сопоставлением ее с величиной электронной плотности, вычисленной через значение  $P_\ominus$ -параметра.

**Волновое уравнение  
P-параметра**

Для характеристики пространственно-энергетических свойств атома введены два вида P-параметров, связь между которыми простая:  $P_{\vartheta} = \frac{P_0}{R}$ , где R – размерная характеристика атома.

Учитывая дополнительные квантовые характеристики подуровней в атоме, это уравнение в координате x можно записать как  $\Delta P_{\vartheta} \approx \frac{\Delta P_0}{\Delta x}$  или  $\partial P_{\vartheta} = \frac{\partial P_0}{\partial x}$ , где величина  $\Delta P$  равна разности между  $P_0$ -параметром i-й орбитали и  $P_{от}$  – параметром отсчета (параметром основного состояния при данном наборе квантовых чисел).

Согласно установленному [19] правилу сложения P-параметров одноименно-заряженных или однородных систем для двух орбиталей в данном атоме с разными квантовыми характеристиками и в соответствии с законом сохранения энергии получаем:

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

где  $P_{\vartheta, \lambda}$  – пространственно-энергетический параметр квантового перехода.

Приняв за размерную характеристику взаимодействия  $\Delta\lambda = \Delta x$ , имеем:

$$\frac{\Delta P''_0}{\Delta\lambda} - \frac{\Delta P'_0}{\Delta\lambda} = \frac{P_0}{\Delta\lambda} \quad \text{или} \quad \frac{\Delta P'_0}{\Delta\lambda} - \frac{\Delta P''_0}{\Delta\lambda} = -\frac{P_0 \lambda}{\Delta\lambda}$$

Разделим еще раз почленно на  $\Delta\lambda$ :

$$\left( \frac{\Delta P'_0}{\Delta\lambda} - \frac{\Delta P''_0}{\Delta\lambda} \right) / \Delta\lambda = -\frac{P_0}{\Delta\lambda^2},$$

где  $\left( \frac{\Delta P'_0}{\Delta\lambda} - \frac{\Delta P''_0}{\Delta\lambda} \right) / \Delta\lambda \sim \frac{d^2 P_0}{d\lambda^2}$ , то есть  $\frac{d^2 P_0}{d\lambda^2} + \frac{P_0}{\Delta\lambda^2} \approx 0$ .

Учитывая только те взаимодействия, при которых  $2\pi\Delta x = \Delta\lambda$  (замкнутый осциллятор), получаем уравнение:

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

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

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

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

Уравнение Шредингера для стационарного состояния в координате x:

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

Из сравнения этих двух уравнений следует, что  $P_0$ -параметр численно коррелирует с величиной  $\Psi$ -функции:  $P_0 \approx \Psi$ , а в общем случае ей пропорционален:  $P_0 \sim \Psi$ . Учитывая широкие практические возможности применения методологии P-параметра, можно считать этот критерий материализованным аналогом  $\Psi$ -функции [17; 18].

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

**Квантовые свойства P-параметра**

Согласно Планку энергия осциллятора (E) может принимать только дискретные значения, равные целому числу элементарных порций – квантов энергии:

$$nE = hv = hc/\lambda, \quad (19)$$

где h – постоянная Планка, v – частота электромагнитной волны, c – ее скорость,  $\lambda$  – длина волны,  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$

Уравнение Планка также дает строго определенную связь между двумя способами описания явлений природы – корпускулярными и волновыми.

$P_0$ -параметр, как первичная энергетическая характеристика структурных взаимодействий, аналогично уравнению (19) может иметь простую зависимость от частоты квантовых переходов:

$$P_0 \sim \hbar(\lambda v_0), \quad (20)$$

где  $\lambda$  – длина волны квантового перехода [1];  $\hbar = h/(2\pi)$ ;  $\nu_0$  – кайзер, единица волнового числа, равная  $2,9979 \cdot 10^{10}$  Гц.

Согласно уравнению Ридберга произведение правой части этого уравнения на величину  $(1/n^2 - 1/m^2)$ , где  $n$  и  $m$  – главные квантовые числа, должно дать постоянную величину. Поэтому может выполняться уравнение:

$$P_0(1/n^2 - 1/m^2) = N\hbar(\lambda\nu_0)(1/n^2 - 1/m^2), \quad (21)$$

в котором постоянная величина  $N$  имеет физический смысл волнового числа и является равной для атома водорода:  $2 \cdot 10^2 \text{ \AA}^{-1}$ .

Соответствующие расчеты приведены в таблице 2, где  $r_i' = 0,5292 \text{ \AA}$  – орбитальный радиус 1S-орбитали и  $r_i'' = 2^2 \cdot 0,5292 = 2,118 \text{ \AA}$  – это значение примерно равно орбитальному радиусу 2S-орбитали.

Величина  $P_0$ -параметра получена по уравнению (12), например, для 1S-2P перехода:

$$1/P_0 = 1/(13,595 \cdot 0,5292) + 1/14,394 \rightarrow P_0 = 4,7985 \text{ \AA}.$$

Значение  $q^2$  взято по [13; 14], для электрона в атоме водорода оно численно равно произведению энергии покоя на классический радиус.

Точность полученных соотношений находится в пределах относительной погрешности 0,06 (%), то есть формула (21) работает в пределах точности самих исходных данных.

В уравнении (21) тоже есть связь между квантовыми характеристиками структурных взаимодействий частиц и частотами соответствующих электромагнитных волн.

Но в данном случае имеется зависимость между пространственными, распространенными

по координате параметрами. Так, у  $P_0$ -параметра эффективная энергия умножается на размерную характеристику взаимодействий, а в правой части уравнения (21) величина кайзера умножается на длину волны квантового перехода.

В таблице 2 показана возможность применения уравнения (21) и для комптоновской длины волны электрона ( $\lambda_k = 2,4261 \cdot 10^{-12} \text{ м}$ ), которое в этом случае принимает вид:

$$P_0 = 10^7 \hbar(\lambda_k \nu_0) \quad (22)$$

(с относительной погрешностью 0,25 %).

Целочисленные десятичные значения выявляются и при анализе соотношений в системе «протон – электрон» (см. табл. 3).

1. **Протон в ядре**, энергии трех кварков:  $5 + 5 + 7 \approx 17$  (МэВ)  $\rightarrow P_p \approx 17 \text{ МэВ} \cdot 0,856 \cdot 10^{-15} \text{ (м)} \approx 14,552 \cdot 10^{-9} \text{ \AA}$ . Аналогично для электрона  $P_e = 0,511 \text{ (МэВ)} \cdot 2,8179 \cdot 10^{-15} \text{ (м)} = 1,440 \cdot 10^{-9} \text{ \AA}$ .

$$\text{Поэтому } P_p \approx 10 P_e. \quad (23)$$

2. **Свободный протон**  $P_n = 938,3 \text{ (МэВ)} \cdot 0,856 \cdot 10^{-15} \text{ (м)} = 8,0318 \cdot 10^{-7} \text{ \AA}$ . Для электрона в атоме:  $P_a = 0,511 \text{ (МэВ)} \cdot 0,5292 \cdot 10^{-5} \text{ (м)} = 2,7057 \cdot 10^{-5} \text{ \AA}$ .

$$\text{И тогда } 3P_a \approx 10^2 P_n. \quad (24)$$

Относительная погрешность расчетов по этим уравнениям находится в пределах точности исходных данных для протона ( $\delta \approx 1 \%$ ).

Из таблиц 2 и 3 следует, что волновое число  $N$  квантуется по десятичному принципу:

$$N = n10^Z,$$

где  $n$  и  $Z$  – целые числа.

Таблица 2

Квантовые свойства параметров атома водорода

Орбитали	$W_i$ (эВ)	$r_i$ (А)	$q_i^2$ (эВА)	$P_0$ (эВА)	$P_0(1/n_1^2 - 1/m_1^2)$ (эВА)	$N$ (А <sup>-1</sup> )	$\lambda$ (А)	Квантовый переход	$N\hbar\nu_0$ (эВА)	$N\hbar\nu_0(1/n^2 - 1/m^2)$ (эВА)
1S	13,595	0,5292	14,394	4,7985	3,5989	$2 \cdot 10^2$	1 215	1S-2P	4,7951	3,5963
1S						$2 \cdot 10^2$	1 025	1S-3P	4,0452	3,5954
1S						$2 \cdot 10^2$	912	1S-nP	3,5990	3,5990
2S	3,3988	2,118	14,394	4,7985	3,5990	$2 \cdot 10^2$	6 562	2S-3P		3,5967
2S						$2 \cdot 10^2$	4 861	2S-4P		3,5971
2S						$2 \cdot 10^2$	3 646	2S-nP		3,5973
1S	13,595	0,5292	14,394	4,7985		$10^7$	$2,4263 \cdot 10^2$	–	4,7878	

Квантовые соотношения параметров протона и электрона

Частица	$E$ (эВ)	$r$ (Å)	$P = Er$ (эВÅ)	Соотношения
Протон свободный	$938,3 \cdot 10^6$	$0,856 \cdot 10^{-5}$	$8,038 \cdot 10^3 = P_n$	$3P_n/P_n \approx 10^2$
Электрон в атоме	$0,511 \cdot 10^6$	0,5292	$2,7042 \cdot 10^5 = P_a$	
Протон в ядре атомов	$(5 + 5 + 7) \cdot 10^6 = 17 \cdot 10^6$	$0,856 \cdot 10^{-5}$	$145,52 = P_p$	$P_p/P_e \approx 10$
Электрон	$0,511 \cdot 10^6$	$2,8179 \cdot 10^{-5}$	$14,399 = P_e$	

Можно отметить и другие примеры уравнений электродинамики, в которых есть целочисленные десятичные функции, например, в формуле

$$4\pi\epsilon_0 c^2 = 10^7,$$

где  $\epsilon_0$  – электрическая постоянная.

В работе [2] получено выражение зависимости постоянных величин электромагнитных взаимодействий от значения  $P_e$ -параметра электрона:

$$k\mu_0 c = k/(\epsilon_0 c) = P_e^{1/2} c^2 \approx 10/\alpha, \quad (25)$$

где  $k = 2\pi/\sqrt{3}$ ;  $\mu_0$  – магнитная постоянная;  $c$  – электромагнитная постоянная;  $\alpha$  – постоянная тонкой структуры.

Все вышеприведенные выводы основаны на применении достаточно точных формул в пределах точности самих исходных данных.

**Выводы**

1. Два принципа сложения энергетических характеристик взаимодействия функционально определяются направлением взаимодействия по градиенту потенциала (положительная работа) или против градиента потенциала (отрицательная работа).

2. Получено уравнение зависимости пространственно-энергетического параметра от спектральных и частотных характеристик в атоме водорода.

**СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Аллен, К. У. Астрофизические величины / К. У. Аллен. – М.: Мир, 1977. – 446 с.

2. Бахрачева, Ю. С. Оперативная оценка склонности материалов к хрупкому разрушению при статическом и циклическом нагружении : дис. ... канд. техн. наук / Бахрачева Юлия Сагидуллоевна. – Великий Новгород, 2004. – 126 с.

3. Блохинцев, Д. И. Основы квантовой механики / Д. И. Блохинцев. – 3-е изд. – М.: Высш. шк., 1961. – 512 с.

4. Влияние содержания азота на структуру и свойства нитроцементованной стали / В. И. Шапочкин [и др.] // *Металловедение и термическая обработка металлов*. – 2010. – № 9. – С. 12–18.

5. Гомбаш, П. Статистическая теория атома и ее применение / П. Гомбаш. – М.: Изд-во иностр. лит., 1951. – 398 с.

6. Грибов, Л. А. Основы физики / Л. А. Грибов, Н. И. Прокофьева. – М.: Высш. шк., 1992. – 430 с.

7. Кораблев, Г. А. Обменные пространственно-энергетические взаимодействия. – Ижевск: Изд-во Удмурт. ун-та, 2010. – 530 с.

8. Кристи, Р. Строение вещества: введение в современную физику / Р. Кристи, А. Питти. – М.: Наука, 1969. – 596 с.

9. Рубин, А. Б. Биофизика. В 2 кн. Кн. 1. Теоретическая биофизика / А. Б. Рубин. – М.: Высш. шк., 1987. – 319 с.

10. Эйринг, Г. Квантовая химия / Г. Эйринг, Дж. Уолтер, Дж. Кимбалл. – М.: Изд-во иностр. лит., 1948. – 531 с.

11. Яворский, Б. М. Справочник по физике / Б. М. Яворский, А. А. Детлаф. – М.: Наука, 1968. – 939 с.

12. Bakhacheva, Yu. S. Fracture toughness prediction by means of indentation test / Yu. S. Bakhacheva // *International Journal for Computational Civil and Structural Engineering*. – 2013. – Vol. 9, N 3. – С. 21–24.

13. Clementi, E. Atomic Screening Constants from SCF Functions / E. Clementi, D. L. Raimondi // *J. Chem. Phys.* – 1963. – Vol. 38, N 11. – P. 2686–2689.

14. Clementi, E. Atomic Screening Constants from SCF Functions. Atoms with 37 to 86 Electrons / E. Clementi, D. L. Raimondi, W. P. Reinhardt // *J. Chem. Phys.* – 1967. – Vol. 47, N 4. – P. 1300–1307.

15. Clementi, E. Tables of Atomic Functions / E. Clementi // IBM. J. of Research and Development Spec. Suppl. – 1965. – Vol. 9, N 2. – P. 76.

16. Fischer, C. F. Average-Energy of Configuration Hartree-Fock Results for the Atoms Helium to Radon / C. F. Fischer // Atomic Data. – 1972. – N 4. – P. 301–399.

17. Korablev, G. A. Energy of Chemical Bond and Spatial Energy Principles of Hybridization of Atom Orbitals / G. A. Korablev, G. E. Zaikov // J. of Applied Polymer Science, USA. – 2006. – Vol. 101, N 3. – P. 2101–2107.

18. Korablev, G. A. Spatial Energy Parameter as a Materialized Analog of Wave Function / G. A. Korablev, G. E. Zaikov // Progress on Chemistry and Biochemistry. – N. Y. : Nova Science Publishers, Inc., 2009. – P. 355–376.

19. Korablev, G. A. Spatial Energy Principles of Complex Structures Formation / G. A. Korablev. – Netherlands : Brill Academic Publishers and VSP, 2005. – 426 p.

20. Waber, J. T. Orbital Radii of Atom and Iones / J. T. Waber, D. T. Cromer // J. Chem. Phys. – 1965. – Vol. 42, N 12. – P. 4116–4123.

#### REFERENCES

1. Allen K.U. *Astrofizicheskie velichiny* [The Astrophysical Quantities]. Moscow, Mir Publ., 1977. 446 p.

2. Bakhracheva Yu.S. *Operativnaya otsenka sklonnosti materialov k khrupkomu razrusheniyu pri staticheskom i tsiklicheskom nagruzhении. Diss. kand. tekhn. nauk* [The Operative Estimation of Materials' Tendency to Fracture Failure During Static and Cyclic Loading. Cand. techn. sci. diss.]. Velikiy Novgorod, 2004. 126 p.

3. Blokhintsev D.I. *Osnovy kvantovoy mekhaniki* [The Basics of Quantum Mechanics]. 3<sup>rd</sup> ed. Moscow, Vysshaya shkola Publ., 1961. 512 p.

4. Shapochkin V.I. et al. Vliyanie sodержaniya azota na strukturu i svoystva nitrotsementovannoy stali [The Influence of Nitrogen Content on the Structure and Features of Nitro-Case-Hardened Steel]. *Metallovedenie i termicheskaya obrabotka metallov*, 2010, no. 9, pp. 12–18.

5. Gombash P. *Statisticheskaya teoriya atoma i ee primeneniye* [The Statistical Theory of Atom and Its Application]. Moscow, Izd-vo inostr. lit., 1951. 398 p.

6. Gribov L.A., Prokofyeva N.I. *Osnovy fiziki* [The Basics of Physics]. Moscow, Vysshaya shkola Publ., 1992. 430 p.

7. Korablev G.A. *Obmennye prostranstvenno-energeticheskie vzaimodeystviya* [Exchange Spatial and Energetic Interactions]. Izhevsk, Izd-vo Udmurt. un-ta, 2010. 530 p.

8. Kristi R., Pitti A. *Stroenie veshchestva: vvedeniye v sovremennuyu fiziku* [The Structure of Substance: Introduction into Modern Physics]. Moscow, Nauka Publ., 1969. 596 p.

9. Rubin A.B. *Biofizika. V 2 kn. Kn. 1. Teoreticheskaya biofizika* [Biophysics. In 2 Books. Book 1. Theoretic Biophysics]. Moscow, Vysshaya shkola Publ., 1987. 319 p.

10. Eyring G., Uolter Dzh., Kimball Dzh. *Kvantovaya khimiya* [Quantum Chemistry]. Moscow, Izd-vo inostr. lit., 1948. 531 p.

11. Yavorskiy B.M., Detlaf A.A. *Spravochnik po fizike* [Reference Book on Physics]. Moscow, Nauka Publ., 1968. 939 p.

12. Bakhracheva Yu.S. Fracture Toughness Prediction by Means of Indentation Test. *International Journal for Computational Civil and Structural Engineering*, 2013, Vol. 9, no. 3, pp. 21–24.

13. Clementi E., Raimondi D.L. Atomic Screening Constants from SCF Functions. *J. Chem. Phys.*, 1963, Vol. 38, no. 11, pp. 2686–2689.

14. Clementi E., Raimondi D.L. Atomic Screening Constants from SCF Functions. Atoms with 37 to 86 Electrons. *J. Chem. Phys.*, 1967, Vol. 47, no. 4, pp. 1300–1307.

15. Clementi E. Tables of Atomic Functions. *IBM. J. of Research and Development. Spec. Suppl.*, 1965, Vol. 9, no. 2, p. 76.

16. Fischer C.F. Average-Energy of Configuration Hartree-Fock Results for the Atoms Helium to Radon. *Atomic Data*, 1972, no. 4, pp. 301–399.

17. Korablev G.A., Zaikov G.E. Energy of Chemical Bond and Spatial Energy Principles of Hybridization of Atom Orbitals. *J. of Applied Polymer Science, USA*, 2006, Vol. 101, no. 3, pp. 2101–2107.

18. Korablev G.A., Zaikov G.E. Spatial Energy Parameter as a Materialized Analog of Wave Function. *Progress on Chemistry and Biochemistry*. New York, Nova Science Publishers, Inc., 2009. pp. 355–376.

19. Korablev G.A. *Spatial-Energy Principles of Complex Structures Formation*. Netherlands, Brill Academic Publishers and VSP, 2005. 426 p.

20. Waber J.T., Cromer D.T. Orbital Radii of Atom and Iones. *J. Chem. Phys.*, 1965, Vol. 42, no. 12, pp. 4116–4123.



**THE QUANTUM AND WAVE CHARACTERISTICS  
OF SPATIAL AND ENERGETIC INTERACTIONS**

**Korablev Grigoriy Andreevich**

Doctor of Chemical Sciences, Professor, Head of the Department of Physics,  
Izhevsk State Agricultural Academy  
biakaa@mail.ru, korablevga@mail.ru  
Studencheskaya St., 11, 426069 Izhevsk, Russian Federation

**Zaikov Gennadiy Efremovich**

Doctor of Chemical Sciences, Professor,  
Head of the Department of Biological and Chemical Physics of Polymers,  
N. M. Emanuel Institute of Biochemical Physics, RAS  
chembio@sky.chph.ras.ru  
Kosygina St., 4, 119334 Moscow, Russian Federation

**Abstract.** The quantum ideas about the structure of atoms and molecules are the foundation of modern scientific theories. So, the steady angular momentum of the electron is an integer multiple of Planck's constant. It is the principal quantum number, and three others in general uniquely characterize the state of any atom. The multiplicity of atomic quantum characteristics is manifested in the spectral data for simple and complex structures.

The article shows that in two-particle interactions the principle of summing the inverse quantities of subsystems energetic characteristics is carried out during the processes which occur by potential gradient, and the principle of their algebraic addition – during the processes which occur against potential gradient. The authors calculated the equation of dependence of spatial and energetic parameter of free atoms from their wave, spectral and frequency characteristics.

**Key words:** free atoms, periodical processes, energy characteristics, potential gradient, wave equation.