



УДК 536.7-631.152  
ББК 65.01

## ЭНТРОПИЯ ПРОСТРАНСТВЕННО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

**Кораблев Григорий Андреевич**

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

**Петрова Наталья Григорьевна**

Специалист-эксперт отдела информационной безопасности и связи  
министерства информатизации и связи Удмуртской Республики  
biakaa@mail.ru  
ул. В. Сивкова, 186, 426057 г. Ижевск, Российская Федерация

**Кораблев Роман Григорьевич**

Аспирант Ижевской государственной сельскохозяйственной академии  
korablevga@mail.ru  
ул. Студенческая, 11, 426069 г. Ижевск, Российская Федерация

**Зайков 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.** Аналогично представлениям термодинамики о статистической энтропии используется понятие энтропии пространственно-энергетических взаимодействий. Обсуждается многоплановость проявлений энтропии.

**Ключевые слова:** термодинамическая вероятность, энтропия, статистическая термодинамика, пространственно-энергетический параметр.

### Введение

Понятие энтропии возникло на основе второго закона термодинамики и представлений о приведенном количестве теплоты.

В статистической термодинамике энтропия изолированной и находящейся в равновесии системы равна логарифму вероятности нахождения ее в определенном макросостоянии:

$$S = k \ln W, \quad (1)$$

где  $W$  – число доступных состояний системы или степень вырождения микросостояний;  $k$  – постоянная Больцмана.

Или:

$$W = e^{S/k},$$

Эти соотношения являются общими утверждениями, имеющими макроскопический харак-

тер, не содержат никаких ссылок на элементы структур рассматриваемых систем и полностью не зависят от микроскопических моделей [1].

Поэтому применение и рассмотрение этих законов могут иметь большое число следствий, которые наиболее плодотворно используются статистической термодинамикой.

При любых самопроизвольных изменениях в изолированной системе энтропия всегда возрастает:  $\Delta S > 0$ .

Смысл второго закона термодинамики сводится к следующему:

Природа стремится от состояний менее вероятных к состояниям более вероятным. Так, наиболее вероятным является равномерное распределение молекул по всему объему. С макрофизической точки зрения эти процессы заключаются в выравнивании плотности, температуры, давления и химических потенциалов, а основной характеристикой процесса является термодинамическая вероятность –  $W$ .

В реальных процессах в изолированной системе рост энтропии неизбежен – в системе нарастает беспорядок, хаос, идет понижение качества внутренней энергии.

Термодинамическая вероятность равна числу микросостояний, отвечающих данному макросостоянию.

Поскольку степень вырождения системы никак не связана с физическими особенностями систем, статистическое понятие энтропии может иметь и другие применения и проявления (кроме статистической термодинамики).

«Ясно, что из двух совершенно разных по своему физическому содержанию систем энтропия может быть одинаковой, если у них число возможных микросостояний, отвечающих одному макропараметру (неважно, какой это параметр) совпадают. Именно поэтому понятие энтропии можно использовать в самых разнообразных областях. Возрастающая самоорганизация человеческого общества ... приводит к возрастанию энтропии и беспорядка в окружающей среде, что выражается в частности к появлению громадного числа рассеянных по Земле свалок» [1].

В данном исследовании делается попытка применения понятия энтропии ко ценке степени пространственно-энергетических взаимодействий.

### Пространственно-энергетический параметр

Сопоставление многочисленных закономерностей физических, химических и биологических процессов позволяет предположить, что во многих случаях выполняется принцип сложения обратных величин, объемных энергий или кинетических параметров взаимодействующих структур.

Уравнение Лагранжа для относительно движения системы двух взаимодействующих материальных точек с массами  $m_1$  и  $m_2$  в координате  $x$  имеет вид:

$$m_r x'' = \frac{\partial U}{\partial x}, \quad \text{где } \frac{1}{m_r} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \quad (2), (2a),$$

где  $U$  – взаимная потенциальная энергия материальных точек;  $m_{пр}$  – приведенная масса.

Это уравнение можно привести к виду:

$$\frac{1}{\Delta U} \approx \frac{1}{\Delta U_1} + \frac{1}{\Delta U_2}, \quad (3)$$

в котором 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:  $m_r = \frac{mM}{m+M}$ » [3, с. 12].

Поэтому, модифицируя уравнение (3), можно предположить, что энергия валентных орбиталей атома (ответственная за межатомные взаимодействия) может быть рассчитана [4] по принципу сложения обратных величин некоторых исходных энергетических составляющих, согласно уравнениям:

$$\frac{1}{q^2 I r_i} + \frac{1}{W_i n_i} = \frac{1}{P_E} \quad \text{или} \quad \frac{1}{P_0} + \frac{1}{(Wrn)_i} \quad (4)(5)$$

$$P_E = \frac{P_0}{r_i}, \quad (6)$$

где  $W_i$  – орбитальная энергия электронов [5];  $r_i$  – орбитальный радиус  $i$ -ной орбитали [6];  $q = Z^*/n^*$  – по [7, 8],  $n_i$  – 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 (далее – ПЭП), а величина  $P_Э$  – эффективным  $P$ -параметром (эффективный ПЭП). Эффективный ПЭП имеет физический смысл некоторой усредненной энергии валентных электронов в атоме и является прямой характеристикой электронной плотности в атоме на данном расстоянии от ядра ( $r_i$ ).

При образовании твердого раствора и в других структурных равновесно-обменных взаимодействиях в местах соприкосновения атомов-компонентов должна устанавливаться единая электронная плотность. Этот процесс сопровождается перераспределением электронной плотности между валентными зонами обеих частиц и переходом части электронов из одних внешних сфер в соседние.

Очевидно, что при близости электронных плотностей в свободных атомах-компонентах процессы переноса между граничными атомами частиц окажутся минимальными, что будет благоприятствовать образованию новой структуры. Таким образом, задача оценки степени таких структурных взаимодействий во многих случаях сводится к сравнительной оценке электронной плотности валентных электронов в свободных атомах (на усредненных орбиталях), участвующих в процессе по уравнениям:

$$\alpha = \frac{P_0' / r_i' - P_0'' / r_i''}{(P_0' / r_i' + P_0'' / r_i'') / 2} \times 100 \% \quad (7)$$

или

$$\alpha = \frac{P_S' - P_S''}{P_S' + P_S''} \times 200 \% \quad (8)$$

где  $P_c$  – структурный параметр, находится по уравнению:

$$\frac{1}{P_S} = \frac{1}{N_1 P_E'} + \frac{1}{N_2 P_E''} + \dots \quad (9)$$

где  $N_1$  и  $N_2$  – число однородных атомов в подсистемах.

По всем полученным данным была построена номограмма зависимости степени структурного взаимодействия ( $\rho$ ) от коэффициента  $\alpha$ , единая для широкого класса структур (см. рисунок).

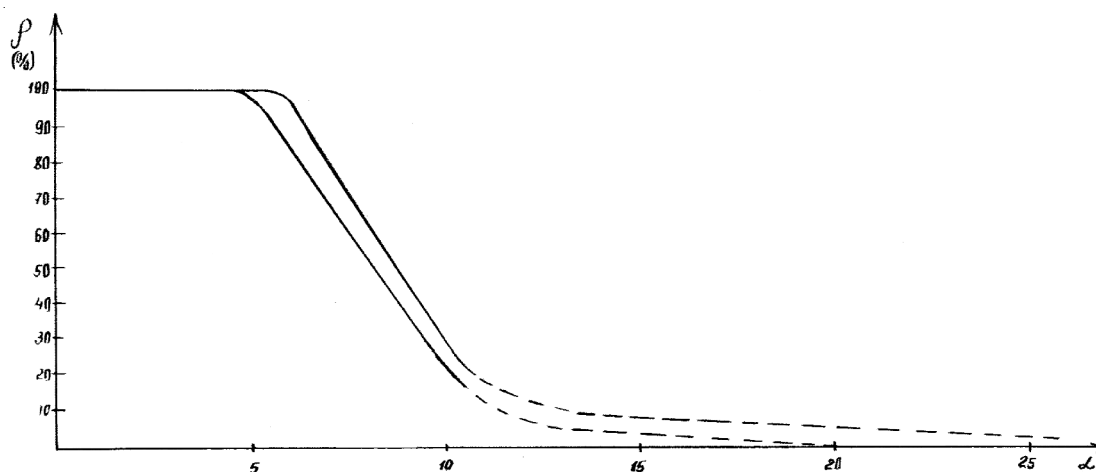
Данный подход дал возможность оценить степень и направление структурных взаимодействий процессов фазообразования, изоморфизма и растворимости в многочисленных системах, в том числе в молекулярных.

Такая номограмма может быть представлена и в виде линейной логарифмической зависимости:

$$\alpha = \beta \ln(\rho^{-1}), \quad (10)$$

где коэффициент  $\beta$  – постоянная величина для данного класса структур. От среднего значения величина  $\beta$  структурно может изменяться в основном только в пределах  $\pm 5 \%$ .

Таким образом, коэффициент  $\alpha$  обратно пропорционален логарифму степени структур-



Номограмма зависимости степени структурных взаимодействий ( $\rho$ ) от коэффициента  $\alpha$ .

ных взаимодействий и поэтому может характеризоваться как энтропия пространственно-энергетических взаимодействий атомно-молекулярных структур.

Действительно, чем больше  $\rho$ , тем более вероятно образование стабильных упорядоченных структур (например, образование твердых растворов), то есть тем меньше энтропия процесса. Но тем меньше и коэффициент  $\alpha$ . То есть относительная разность пространственно-энергетических параметров взаимодействующих структур может быть количественной характеристикой энтропии этого процесса:

$$\alpha = S = \beta \ln(\rho^{-1}). \quad (10a)$$

Уравнение (10) не имеет полной аналогии с уравнением (1) Больцмана, так как в данном случае сравниваются не абсолютные, а только относительные значения соответствующих характеристик взаимодействующих структур, которые могут выражаться в процентах. И это касается не только коэффициента  $\alpha$ , но и сравнительной оценки степени структурных взаимодействий ( $\rho$ ), например – процент содержания атомов данного элемента в твердом растворе, относительно общего числа атомов.

Поэтому в уравнении (10) коэффициент  $k = 1$ .

### Энтропия укрупнения бизнес-структур

Основные свойства бизнес-систем, обеспечивающие их экономические преимущества, это: 1) эффективная конкуренция и 2) максимальная личная заинтересованность каждого сотрудника.

Но на различных уровнях концентрации экономики эти первопричинные особенности функционируют и проявляют себя по-разному. Наибольшая их эффективность соответствует малому бизнесу, когда число членов организации минимально, более четкая личная заинтересованность и активная конкурентная борьба за выживание. По мере укрупнения предприятий и производств, с увеличением численности персонала роль каждого сотрудника постепенно снижается, уменьшается конкурентная борьба, так как появляются новые возможности для согласованных дей-

ствий разных бизнес-структур. Идет снижение качества экономических отношений в бизнесе, то есть возрастание энтропии. Более всего такой процесс характерен в моноструктурах на крупнейших предприятиях большого бизнеса (синдикаты и картели).

Понятие термодинамической вероятности как числа микросостояний, отвечающих данному макросостоянию, можно модифицировать применительно к процессам экономических взаимоотношений, которые напрямую зависят от параметров бизнес-структур [9].

За макросостояние системы можно принять данную отдельную бизнес-структуру, а за число микросостояний – число ее сотрудников ( $N$ ), которое есть число доступных наиболее вероятных состояний данной бизнес-структуры. Таким образом, предполагается, что такое число сотрудников бизнес-структуры является аналогом термодинамической вероятности применительно к процессам экономических взаимоотношений в бизнесе.

Поэтому можно принять, что общая энтропия качества бизнеса состоит из двух энтропий, характеризующих: 1) уменьшение эффективности конкуренции ( $S_1$ ) и 2) уменьшение личной заинтересованности каждого сотрудника ( $S_2$ ), то есть:  $S = S_1 + S_2$ . Величина  $S_1$  пропорциональна числу работников предприятия:  $S \sim N$ , а величина  $S_2$  имеет сложную зависимость не только от числа работников предприятия, но и от эффективности самого управления им. Она обратно пропорциональна персональной заинтересованности каждого сотрудника. Поэтому можно принять, что  $S_2 = 1/\gamma$ , где  $\gamma$  – коэффициент личной заинтересованности каждого сотрудника.

По аналогии с уравнением Больцмана (1) получаем:

$$S = (S_1 + S_2) \sim [\ln N + \ln\left(\frac{1}{\gamma}\right)] \sim \ln\left(\frac{N}{\gamma}\right)$$

или

$$S = k \ln\left(\frac{N}{\gamma}\right),$$

где  $k$  – коэффициент пропорциональности.

Здесь  $N$  показывает во сколько раз данная бизнес-структура больше эталонной

структуры малого бизнеса, при которой  $N = 1$ , то есть эта величина не имеет наименования.

Для нетермодинамических систем принимаем  $k = 1$ . Поэтому:

$$S = \ln\left(\frac{N}{\gamma}\right) \quad (11)$$

В таблице приведены примерные расчеты бизнес-энтропии по уравнению (11) для трех основных уровней бизнеса: малого, среднего и крупного. При этом предполагалось, что число  $N$  соответствует некоторому среднему значению из наиболее вероятных величин. Подробнее в работе [10].

При расчете коэффициента личной заинтересованности  $\gamma$  учитывалось, что он может меняться от 1 (один сотрудник работает только сам на себя) до нуля (0), если такой работник как бесправный раб, и для наиболее крупных предприятий принималось  $\gamma = 0,1 - 0,01$ .

Несмотря на весьма приближенную точность таких усредненных расчетов, можно сделать достаточно достоверный вывод о том, что энтропия бизнеса с укрупнением его структур резко возрастает при переходе именно от среднего к крупному бизнесу, так как снижается качество бизнес-процессов. Применение более точных исходных данных позволит получить конкретные значения энтропии бизнеса, выше которых процесс экономических отношений может выйти на критический уровень.

Сравнение номограммы (см. рисунок) с данными таблицы показывает аддитивность величин энтропии бизнеса ( $S$ ) со значениями коэффициента пространственно-энергетических взаимодействий ( $\alpha$ ).

Более того, значения коэффициента  $\alpha$  для высокой степени структурных взаимодей-

ствий (до 7 %) совпадают со значениями энтропии для малого и среднего бизнеса. Такая закономерность изменения величин сохраняется и далее: для ограниченной степени структурных взаимодействий по номограмме идет резкое возрастание коэффициента  $\alpha$  и аналогично резко возрастает величина  $S$  при переходе от среднего к крупному бизнесу.

Все это подтверждает утверждение о том, что понятие энтропии имеет множественное проявление в самых разнообразных областях исследований.

### Вывод

Аналогично представлениям термодинамики о статистической энтропии можно использовать понятие энтропии пространственно-энергетических взаимодействий.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Грибов, Л. А. Основы физики / Л. А. Грибов. – М. : Высш. шк., 1992. – 430 с.
2. Осипов, А. К. Проблемы и пути решения эффективного управления малыми предприятиями общественного питания / А. К. Осипов // Вестник Ижевской государственной сельскохозяйственной академии. – 2010. – № 1. – С. 29–34.
3. Рейф, Ф. Статистическая физика / Ф. Рейф. – М. : Наука, 1972. – 352 с.
4. Семенова, Л. М. Качество управления производством с позиций сенергетики / Л. М. Семенова // Вестник Волгоградского государственного университета. Серия 10, Инновационная деятельность. – 2012. – № 7. – С. 120–126.
5. Эйринг, Г. Квантовая химия / Г. Эйринг. – М., 1948. – 528 с.
6. Clementi, E. Atomic Screening constants from S.C.F. Functions, 1 / E. Clementi // J.Chem. Phys. – 1963. – Vol. 38, N 11. – P. 2686–2689.

### Рост энтропии по мере укрупнения бизнес-структуры

Параметры структур	Бизнес		
	Малый	Средний	Крупный
$N_1 - N_2$	10–50	100–1000	10 000–100 000
$\gamma$	0,9–0,8	0,6–0,4	0,1–0,01
$S$	2,408–4,135	5,116–7,824	11,513–16,118
$\langle S \rangle$	3,271	6,470	13,816

7. Clementi, E. Atomic Screening constants from S.C.F. Functions, 1 / E. Clementi // J. Chem. Phys. – 1967. – Vol. 47, N4. – P. 1300–1307.

8. Fischer, C. F. Average-Energy of Configuration Hartree-Fock Results for the Atoms Helium to Radon / C. F. Fischer // Atomic Data. – 1972. – N4. – P. 301–399.

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

10. Waber, J. T. Orbital Radii of Atoms and Ions / J. T. Waber // J. Chem. Phys. – 1965. – Vol. 42, N 12. – P. 4116–4123.

## ENTROPY OF SPATIAL AND POWER INTERACTIONS

### **Korablev Grigory Andreevich**

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

### **Petrova Natalya Grigoryevna**

Specialist Expert of Department of Information Security and Communication  
of the Ministry of informatization and communication of the Udmurt Republic  
biakaa@mail.ru  
Sivkova St., 186, 426057 r. Izhevsk, Russian Federation

### **Korablev Roman Grigoryevich**

Postgraduate student, Izhevsk State  
Agricultural Academy  
korablevga@mail.ru  
Studencheskaia St., 11, 426069 Izhevsk, Russian Federation

### **Zaikov Gennady Efremovich**

Doctor of Chemical Sciences, Professor, Head of Division of Biological and Chemical physics  
of Polymer, Institution of Science N. M. Emanuel Institute of Biochemical Physics  
chembio@sky.chph.ras.ru  
Kosygina St., 4, 119334 Moscow, Russian Federation

**Abstract.** Similar to ideas of thermodynamics of statistical entropy the concept of entropy of spatial and power interactions is used. Diversity of manifestations of entropy is discussed.

**Key words:** thermodynamic probability, entropy, statistical thermodynamics, spatial and power parameter.