

---

# ОСНОВЫ АДРОННОЙ ХИМИИ

Приложения к новым чистым  
энергиям и топливам

---

# ОСНОВЫ АДРОННОЙ ХИМИИ

Приложения к новым чистым  
энергиям и топливам

РУЖЕРО МАРИА САНТИЛЛИ

Institute for Basic Research

P.O. Box 1577, Palm Harbor, FL 34682, U.S.A.

[ibr@verizon.net](mailto:ibr@verizon.net), <http://www.i-b-r.org>

<http://www.magnegas.com>

*Перевод с английского В.В. Архипова под редакцией А.К. Арынгазина*

ББК 00.00

УДК 00

**Сантили Р.М.**

Основы адронной химии. Приложения к новым чистым энергиям и топливам: Пер. с англ. — 2002. — 554 с., ил.

ISBN 1-4020-0087-1 (англ.)

R.M. Santilli, Foundations of Hadronic Chemistry. With Applications to New Clean Energies and Fuels. Kluwer Academic Publishers, Boston-Dordrecht-London, 2001. Russian translation by V.V. Arkhipov.

© Kluwer Academic Publishers, 2001. This book was originally published in the English language by Kluwer Academic Publishers, Boston-Dordrecht-London, 2001.

Перевод на русский язык, В.В. Архипов под редакцией А.К. Арынгазина, 2002.

ISBN 1-4020-0087-1 (англ.)

Эта монография посвящена  
профессору **Т. Неят Везироглу** (T. Nejat Veziroglu),  
директору  
Clean Energy Research Institute,  
University of Miami, Coral Gables, Florida,  
и  
главному редактору  
журнала *International Journal of Hydrogen Energy*,  
Elsevier Science, Oxford, England,  
в виду его поддержки научной демократии  
в квалифицированных исследованиях  
и его безупречной редакционной работе,  
которая позволила создание новой  
дисциплины, представленной в этой монографии.



# Оглавление

Предисловие	x
<b>1 Введение</b>	<b>1</b>
1.1 Аксиоматическая согласованность квантовой химии . . . . .	1
1.2 Цель исследований . . . . .	3
1.3 Недостатки квантовой химии... . . . .	6
1.4 Недостаток квантовой химии для химических реакций . . .	12
1.5 Недостатки квантовой химии... . . . .	13
1.6 Центральная тема исследования . . . . .	20
1.7 Катастрофические несогласованности... . . . .	24
1.8 Адронная механика . . . . .	33
1.9 Адронная сверхпроводимость . . . . .	55
<b>2 Элементы изо-, гено- и гипер-математики</b>	<b>73</b>
2.1 Введение . . . . .	73
2.2 Элементы изоматематики . . . . .	75
2.2.1 Изоединицы и изопроизведения . . . . .	75
2.2.2 Изочисла и изополя . . . . .	79
2.2.3 Изопространства и изогеометрии . . . . .	80
2.2.4 Изодифференциальное исчисление . . . . .	85
2.2.5 Изогильбертовы пространства . . . . .	87
2.2.6 Изопертурбативная теория . . . . .	89
2.2.7 Изофункциональный анализ . . . . .	91
2.2.8 Изолинейность, изолокальность, изоканоничность и изоунитарность . . . . .	93
2.2.9 Изотеория Ли-Сантилли . . . . .	95
2.3 Элементы геноматематики . . . . .	99
2.3.1 Введение . . . . .	99

2.3.2	Главные структурные линии геноматематики . . . . .	101
2.3.3	Геноединицы и генопроизведения . . . . .	108
2.3.4	Геночисла и генополя . . . . .	109
2.3.5	Генопространства и генометрики . . . . .	111
2.3.6	Генодифференциальное исчисление . . . . .	113
2.3.7	Геногильбертовы пространства . . . . .	113
2.3.8	Генолинейность, генолокальность и геноунитарность	114
2.3.9	Генотеория Ли-Сантилли . . . . .	116
2.4	Гиперматематика . . . . .	118
2.5	Изодуальная математика . . . . .	120
<b>3</b>	<b>Основы адронной химии</b>	<b>129</b>
3.1	Введение . . . . .	129
3.2	Классические основы адронной химии . . . . .	133
3.2.1	Историческое учение Лагранжа и Гамильтона . . . . .	133
3.2.2	Неизменность исторического учения . . . . .	135
3.2.3	Проблемные аспекты внешних членов . . . . .	136
3.2.4	Классификация уравнений Гамильтона с внешними членами . . . . .	137
3.2.5	Изомеханика Гамильтона-Сантилли . . . . .	139
3.2.6	Классические скобки Ли-Сантилли . . . . .	142
3.2.7	Принцип наименьшего изодействия . . . . .	145
3.2.8	Изоуравнения Гамильтона-Якоби-Сантилли . . . . .	146
3.2.9	Примеры классических приложений . . . . .	147
3.2.10	Связь между изотопической и биркгофовой механикой . . . . .	147
3.2.11	Гено-, гипер- и изодуальная механика Гамильтона-Сантилли . . . . .	149
3.2.12	Простая конструкция классической изохимии . . . . .	152
3.2.13	Инвариантность классической изохимии . . . . .	154
3.2.14	Простая конструкция классической генохимии . . . . .	155
3.2.15	Инвариантность классической генохимии . . . . .	156
3.2.16	Простая конструкция и инвариантность гипермеханики и изодуальной механики . . . . .	156
3.3	Операторные основы адронной химии . . . . .	156
3.3.1	Введение . . . . .	156
3.3.2	Простые изо-, гено-, гипер- и изодуальное квантования . . . . .	157

3.3.3	Структура операторной изохимии . . . . .	159
3.3.4	Основные уравнения операторной изохимии . . . . .	161
3.3.5	Сохранение законов квантовой физики . . . . .	163
3.3.6	Простая конструкция операторной изохимии . . . . .	167
3.3.7	Инвариантность операторной изохимии . . . . .	170
3.3.8	Гауссовские экранирования как частные случаи изо- химии . . . . .	171
3.3.9	Элементы операторной гено-, гипер- и изодуальной химии . . . . .	173
3.3.10	Простая конструкция операторной гено-, гипер- и изодуальной химии . . . . .	177
3.3.11	Инвариантность операторной гено-, гипер- и изоду- альной химии . . . . .	178
3.3.12	Классификация адронной химии . . . . .	179
<b>4</b>	<b>Изохимическая модель молекулы водорода</b>	<b>185</b>
4.1	Введение . . . . .	185
4.2	Изохимическая модель молекулярных связей . . . . .	190
4.3	Предельный случай стабильного изоэлектронииума . . . . .	202
4.4	Изохимическая модель молекулы водорода . . . . .	210
4.5	Трехтельная изохимическая модель водорода . . . . .	212
4.6	Изохимическая модель молекулы водорода... . . . .	216
4.7	Гауссовская аппроксимация ... . . . .	220
4.8	Краткое изложение результатов . . . . .	226
4.9	Заключительные замечания . . . . .	230
	Дополнение 4.А Изохимические расчеты молекулы $H_2$ как си- стемы трех тел . . . . .	235
	Дополнение 4.В Изохимические расчеты молекулы $H_2$ как си- стемы четырех тел . . . . .	237
<b>5</b>	<b>Изохимическая модель молекулы воды</b>	<b>247</b>
5.1	Введение . . . . .	247
5.2	Основные характеристики воды . . . . .	255
5.3	Точно решаемая модель ... . . . .	259
5.4	Гауссовская аппроксимация ... . . . .	264
5.5	Метод . . . . .	269
5.6	Главные результаты . . . . .	272
5.7	Заключение . . . . .	274



<b>6</b>	<b>Вариационные расчеты изохимических...</b>	<b>283</b>
6.1	Введение . . . . .	283
6.2	Исследования Арынгазина-Кучеренко... . . . . .	284
6.3	Вариационное исследование... . . . . .	290
<b>7</b>	<b>Применение адронной химии...</b>	<b>305</b>
7.1	Введение . . . . .	305
7.2	Внушающие тревогу проблемы... . . . . .	309
7.3	Внушающие тревогу проблемы... . . . . .	313
7.4	Внушающие тревогу проблемы... . . . . .	314
7.5	Необходимость в новых источниках... . . . . .	318
7.6	Недостатки квантовой механики... . . . . .	319
7.7	Новые чистые первичные энергии... . . . . .	321
7.8	Использование PlasmaArcFlow реактора... . . . . .	344
7.9	Выполнение для магнегаза требований ЕРА... . . . . .	347
7.10	Аномальный химический состав магнегаза . . . . .	352
7.11	Аномальный энергетический баланс... . . . . .	354
7.12	Заключительные замечания . . . . .	362
	Дополнение 7.А . . . . .	365
<b>8</b>	<b>Новые химические соединения: Магнекулы</b>	<b>373</b>
8.1	Введение . . . . .	373
8.2	Гипотеза магнекул . . . . .	375
8.3	Пять силовых полей существующих в атоме . . . . .	379
8.4	Магнекулярные внутренние связи . . . . .	380
8.5	Производство магнекул... . . . . .	387
8.6	Новые молекулярные внутренние связи . . . . .	392
8.7	Главные признаки магнекул... . . . . .	393
8.8	Необходимые условия детектирования... . . . . .	396
8.8.1	Выбор аналитических инструментов . . . . .	396
8.8.2	Однозначное детектирование молекул . . . . .	398
8.8.3	Однозначное детектирование магнекул . . . . .	401
8.8.4	Очевидность магнекулярной структуры $H_3$ и $O_3$ . . . . .	405
8.8.5	Необходимость в новых аналитических методах . . . . .	407
8.9	Экспериментальные данные по магнекулам газа . . . . .	409
8.9.1	Обычный химический состав магнегаза используемого при тестированиях . . . . .	409
8.9.2	GC-MS/IRD измерения магнегаза на базе BBC McClellan410	

8.9.3	GC-MS/IRD тестирования магнегаза в лаборатории Pinellas County Forensic . . . . .	412
8.9.4	Интерпретация результатов . . . . .	414
8.9.5	Заключительные замечания . . . . .	415
8.10	Экспериментальные данные о магнекулах . . . . .	418
8.10.1	Приготовление магнекулярной жидкости использо- ваемой при тестированиях . . . . .	418
8.10.2	Данные фотографии о магнекулах в жидкости . . .	419
8.10.3	Спектроскопические данные по магнекулам жидко- сти, полученные в Tekmar-Dohrmann Corporation . .	439
8.10.4	Спектроскопические данные о магнекулах жидко- сти, полученные в Международном Университете Флориды . . . . .	445
8.11	Экспериментальное подтверждение... . . . . .	447
8.12	Заключительные замечания . . . . .	461
Дополнение 8.A Исследования Арынгазина тороидальных ор- бит атома водорода во внешнем магнитном поле . . . . .		462

## Предисловие

### Физические перспективы исследований недостатков и построений обобщающих теорий квантовой химии

#### Мои студенческие и аспирантские работы, посвященные недостаткам квантовой механики и квантовой химии

С проблемами квантовой химии я впервые столкнулся в ходе моих студенческих работ по физике в университете Неаполя, Италия, в конце 1950-х годов. Моим преподавателем была профессор Бакунина, хорошо известная в Европе того времени женщина-химик, которая бежала из России вместе со всей семьей после прихода к власти коммунистов. Мои три экзамена, которые я сдавал ей (неорганическая химия, органическая химия и лабораторная химия), были самыми трудными в моей жизни (хотя проф. Бакунина была довольна моими экзаменационными ответами).

Кроме химии, в процессе своих студенческих исследований я подключался к исследованиям в физике, в частности, относящимся к квантовой механике и ее математической структуре. Моим преподавателем математики был профессор Качиопполи (Caccioppoli), один из самых знаменитых итальянских математиков того времени, который учил о необходимости передовой математики для количественных физических исследований.

При чтении работ основоположников современной физики для меня было уже тогда, в студенческие годы, нетрудно видеть отсутствие заверщенного характера квантовой механики.

Например, я был впечатлен заявлением Энрико Ферми (Enrico Fermi) (чья кончина в 1954 г. все еще переживалась в физических лабораториях конца 1950-х годов), на стр. 111 его знаменитой "Ядерной физики" (University of Chicago Press, 1950):

*"есть сомнения в том, что обычные концепции геометрии сохраняются для таких малых областей пространства (области*

*проявления ядерных сил).*"

В следствии этого, я потратил несколько лет своей исследовательской жизни на конструирование геометрий, которые более подходили бы для воспроизведения сложности ядерных сил, так как физика действительно может быть сведена к примитивным геометрическим понятиям.

Равно вдохновляющими были работы Эмилио Сегре (Emilio Segre), Виктора Вейскопфа (Victor Weisskopf) и других ведущих ученых того времени, когда они показывали неспособность квантовой механики достичь точного воспроизведения полных ядерных магнитных моментов всех ядер, а не одного только уединенного дейтрона (эта неспособность все еще полностью сохраняется до наших дней), из-за очевидного "изменения" внутренних характеристик протонов и нейтронов при их переносе из условий вакуума (которые используются для их определения до настоящего времени) в новые условия, возникающие при их участии в ядерной структуре.

Например, я все еще ярко помню мое первое чтение заявления Блатта (Blatt) и Вейскопфа в их "*Теоретической ядерной физике*" (John Wiley & Sons, первое издание, 1952 г.), в разделе посвященном ядерным магнитным моментам (стр. 31, издания 1963 г.):

*"Возможно, внутренний магнетизм ядра изменяется, когда оно находится в тесном контакте с другим ядром."*

Легко было видеть, даже в процессе моих студенческих исследований, невозможность для квантовой механики воспроизводить изменения *внутренних* характеристик частиц, таких стабильных как протон, поэтому возникает требование обобщения теории. Впоследствии, я потратил годы моей исследовательской жизни на изучение проблемы и действительно, совсем недавно, достиг точного воспроизведения всех полных ядерных магнитных моментов, благодаря адронному обобщению квантовой механики, которая является основой данной монографии (см. сноски 1 и 6 этого Введения и т. III работы [9]).

Я был также впечатлен "*отсутствием завершенности*" квантовой механики, озвученной Эйнштейном (Einstein), Подольским (Podolsky) и Розеном (Rosen) (Phys. Rev. **47**, 777, 1935), о чем я читал в эпистемологических книгах, циркулировавших в Италии в то время. Действительно, впоследствии, я потратил десятилетия моей исследовательской жизни

на поиски приемлемого и согласованного "завершения" квантовой механики. Все содержание этой монографии, начиная с содержания этого Введения, может рассматриваться, как изучение возможности завершения квантовой механики и, следовательно, квантовой химии.

Я до сих пор помню статьи в итальянских газетах того времени, когда я учился в колледже, обсуждающих многочисленные сомнения, выраженные Альбертом Эйнштейном (тогда еще живого, поскольку он умер в 1955 г.), по поводу отсутствия детерминистского характера квантовой механики.

Я чувствовал, что выразительность этих основных сомнений является яркой манифестацией как в обучении, так и в науке, так как это стимулирует мышление в любом возрасте. Я чувствовал и до сих пор чувствую ненаучность любых учений или учебников, представляющих дисциплину как конец научных изысканий в этой области.

Во время моих студенческих исследований по истории науки я видел со всей очевидностью, что *наука никогда не допустит окончательных теорий*. Отсюда я приобрел убеждение, что *вера в конечный характер данной дисциплины является просто политически-ненаучной*. Истинные ученые могут, в действительности, обсуждать путь, которым данная теория должна быть обобщена, но подвергать сомнению, обструкции, или риску качественные технические исследования по расширению теорий является бесчестным. Прежде всего, история учит, что исследования по обобщению существующих теорий являются всегда продуктивными, независимо от того, увенчались они успехом или нет, в то время как их подавление является, очевидно, бесплодным.

Как это хорошо известно и на что сетуют различные ученые, в последние десятилетия 20-го века, физика и химия превратились в форму научной религии, из-за отсутствия правильных трактовок исторических сомнений, упомянутых выше. Вместе с тем, мы прошли путь от важнейших открытий первой половины 20-го века до периода виртуального научного застоя. Со своей стороны, я всегда игнорировал эти политические тенденции в науке и всегда оставался верным историческим сомнениям в окончательном характере квантовой механики.<sup>1</sup> Как читатель увидит,

---

<sup>1</sup>Для читателя важно понять, насколько существенными остаются упомянутые сомнения по сей день. Рассмотрим, например, проблему полного ядерного магнитного момента, выдвинутую Сегре, Вейскопфом и другими. Непосредственное использование квантовой механики и значений внутренних магнитных моментов протонов и нейтронов, такими как

новые адронная механика и адронная химия, представленные в этой монографии, имеют своим вдохновением и руководством, во-первых, учения Лагранжа (Lagrange), Гамильтона (Hamilton) и Якоби (Jacobi) и, во вторых, более поздние доктрины Ферми, Сегре, Вейсскопфа, Эйнштейна и множества других основателей современной науки (см. далее).

После окончания университета Неаполя, в начале 1960-х годов я начал свои аспирантские исследования по физике в университете Турина, Италия, с твердым намерением посвятить мою исследовательскую жизнь структурному обобщению квантовой механики. Упоминание моих ранних исследований имеет значение для этой монографии.

---

они измерены в вакууме, дают ошибку около 3.8% от экспериментального значения магнитного момента простейшего из возможных ядер – дейтрона, находящегося в основном состоянии. Эта ошибка становится большей для более тяжелых ядер, принимая очень большие значения для таких тяжелых ядер, как ядро циркония. Различные недавние работы и монографии заявляют о снижении ошибки для дейтрона до 1% в нерелятивистских трактовках, и получении существенно меньшей ошибки с учетом релятивистских поправок. Однако, эти достижения требуют смешивания трех и более энергетических уровней, поэтому утрачивается научное доверие (не важно, насколько авторитетным является автор теории) по различным причинам, таким как: 1) экспериментальное значение магнитного момента дейтрона измеряется для его *основного состояния* и, определено, не для смеси различных энергетических состояний; 2) принимается одновременное существование различных энергетических уровней без какого-либо излучения или поглощения квантов, чем нарушаются основные законы квантовой механики; 3) сведение нерешенной проблемы к кваркам *умножает* несогласованности более, чем уменьшает их, как мы увидим позже в этом Введении. В любом случае, предполагая, что вышеуказанные манипуляции (сотворенные с расчетом сохранить любой ценой любимую теорию и не поддаться фундаментальным исследованиям) являются действительно успешными, в смысле воспроизведения магнитных моментов дейтрона, может быть *те же манипуляции применимы и для оставшихся ядер, таких как ядра атомов меди, гадолиния или циркония?* Любой ученый, с минимумом этических стандартов, должен ответить отрицательно, чем подтверждается, на реальных научных основаниях, без академических политик, что квантовая механика *не может* воспроизвести *точно* магнитные моменты всех ядер. Квантовая механика, конечно, остается применимой, но только как первое приближение в ожидании более правильной теории. Множество дополнительных недостатков и несогласованностей не приводится здесь из соображений краткости (см. [12]), подразумевая без всяких, *внушающих доверие*, сомнений, что квантовая механика *не может* быть точной для ядерных структур, поэтому возникает необходимость в подходящем обобщении.

Основы квантовой механики даются теорией Ли в ее операторной реализации на гильбертовом пространстве  $\mathcal{H}$  над полем  $\mathbb{C}$  комплексных чисел, которая характеризуется известным представлением Гейзенберга в конечной и инфинитезимальной формах:

$$A(t) = U \times A(0) \times U^\dagger = e^{i \times H \times t} \times A(0) \times e^{-i \times t \times H}, \quad (1a)$$

$$i \frac{dA}{dt} = [A, B]_{\text{operator}} = A \times H - H \times A, \quad (1b)$$

$$U = e^{i \times H \times t}, \quad U \times U^\dagger = U^\dagger \times U = I, \quad (1c)$$

с дополнительным представлением Шредингера

$$H(r, p) \times |\psi\rangle = E \times |\psi\rangle, \quad (2a)$$

$$p_k \times |\psi\rangle = -i \times \hbar \times \partial_k |\psi\rangle, \quad (2b)$$

и классическим дополнением, даваемым гамильтоновой механикой:

$$A(t) = e^{-t \times (\partial H / \partial r^k) \times (\partial / \partial p_k)} \times A(0) \times e^{t \times (\partial / \partial r^k) \times (\partial H / \partial p_k)}, \quad (3a)$$

$$\frac{dr^k}{dt} = \frac{\partial H(t, r, p)}{\partial p_k}, \quad \frac{dp_k}{dt} = -\frac{\partial H(t, r, p)}{\partial r^k}. \quad (3b)$$

$$\frac{dA}{dt} = [A, H]_{\text{classical}} = \frac{\partial A}{\partial r^k} \times \frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial H}{\partial r^k} \times \frac{\partial A}{\partial p_k}. \quad (3c)$$

где  $\times$  воспроизводит обычное ассоциативное произведение.

Таким образом, группы Ли реализуются конечно-временными эволюциями (1a) и (3a), в то время как алгебры Ли реализуются скобками  $[A, B]$  в инфинитезимальных формах.

Главной физической характеристикой и классического, и операторного уровней является то, что антисимметричный характер скобок  $[A, B]$  подразумевает знакомые законы сохранения полных физических величин, такие как закон сохранения энергии:

$$i \times \frac{dH}{dt} = [H, H] = H \times H - H \times H = 0. \quad (4)$$

Стартовой точкой моих исследований (которые я проводил с самых первых дней моей студенческой исследовательской жизни) была очевидная недостаточность вышеуказанной теории для воспроизведения неконсервативных систем, тривиально, из-за подчеркивания в квантовой механике значения законов сохранения, в то время как рассматриваемые

системы нуждаются в *изменяющихся со временем физических величинах*, таких как энергия, импульс, момент импульса и т.д. <sup>2</sup>.

В моей первой статье [1] 1967 года (которая была частью моих докторских тезисов, см. также [2]), я предложил следующее обобщение (которое я назвал "поднятием" ("лифтингом") представления Гейзенберга:

$$A(t) = U \times A(0) \times W^\dagger = e^{i \times H \times q \times t} \times A(0) \times e^{-i \times t \times p \times H}, \quad H = H^\dagger, \quad (5a)$$

$$\begin{aligned} i \, dA/dt &= (A, B)_{\text{operator}} = p \times A \times H - q \times H \times A = \\ &= m \times (A \times B - B \times A) + n \times (A \times B + B \times A) = \\ &= m \times [A, B] + n \times \{A, B\}, \end{aligned} \quad (5b)$$

где правые и левые операторы  $U$ ,  $W$  теперь различны,  $p = m + n$ ,  $q = m - n$  и  $p \pm q$  – ненулевые *параметры*, с поднятием классической гамильтоновой

---

<sup>2</sup> Диссипативные ядерные модели и другие теории, воспроизводящие диссипацию через "мнимые потенциалы" в гамильтониане, начали вводиться в первой половине 20-го века и все еще широко используются в наше время. Эти теории страдают проблемами физической согласованности настолько сильно, что это препятствует их серьезному научному применению. В этом случае гамильтониан становится *неэрмитовым*,  $H = p^2/2m + i \times V \neq H^\dagger$ ; группа Ли принимает вид:  $A(t) = \{e^{i \times H \times t}\} \times A(0) \times \{e^{-i \times t \times H^\dagger}\}$ ; и скобки Ли (1b) обобщаются до триплетной системы:  $idA/dt = [A, H, H^\dagger] = A \times H^\dagger - H \times A$ . Это приводит тогда к тому, что диссипативные модели с "мнимыми потенциалами" утрачивают *все алгебры* в скобках временной эволюции, не говоря уже о всех алгебрах Ли (так как алгебры, как они понимаются на современном уровне, требуют *билинейных* скобок, удовлетворяющих определенным основным аксиомам). При этих условиях, слова, такие как "нейтроны" и "протоны", теряют какой-либо физический смысл, из-за: невозможности введения SU(2) симметрии, необходимой для характеристики спина; нарушения симметрии Пуанкаре, необходимой для правильного определения массы; и множества дополнительных пороков. Самое главное, величины, требующие измерения, такие как несохраняющаяся энергия  $H$ , более не наблюдаемы (из-за неэрмитовости). Напротив, исследования, представленные здесь, основаны на том требовании, что *все несохраняющиеся величины, которые должны измеряться, должны быть эрмитовыми*, как *необходимое условие наблюдаемости* (см. Раздел 1.7, Глава 1, о дополнительных несогласованностях существующих неконсервативных теорий и Раздел 2.10, Глава 1, об их разрешении).



механики [3]:

$$A(t) = \left[ e^{-t \times q \times (\partial H / \partial r^k) \times (\partial / \partial p_k)} \right] \times \\ \times A(0) \times \left[ e^{t \times p \times (\partial / \partial r^k) \times (\partial H / \partial p_k)} \right], \quad (6a)$$

$$\frac{dr^k}{dt} = p \times \frac{\partial H(t, r, p)}{\partial p_k}, \quad \frac{dp_k}{dt} = -q \times \frac{\partial H(t, r, p)}{\partial r^k} \quad (6b)$$

$$\frac{dA}{dt} = (A, H)_{\text{classical}} = p \times \frac{\partial A}{\partial r^k} \times \frac{\partial H}{\partial p_k} - q \times \frac{\partial H}{\partial r^k} \times \frac{\partial A}{\partial p_k}. \quad (6c)$$

Так как новые скобки  $(A, B)$  не антисимметричны по самой концепции, они действительно подходят для воспроизведения несохранения (или зависимости от времени) энергии:

$$i \times \frac{dH}{dt} = (H, H) = (p - q) \times H \times H \neq 0. \quad (7)$$

Как можно видеть, главная идея статей [1-3] заключается в том, что гамильтониан остается полностью эрмитовым, поэтому наблюдаемым, в то время как его несохранение характеризуется обобщением математической структуры теории.

Очевидно, что последняя теория больше не является теорией Ли. Несмотря на это, скобки  $(A, B)$  остаются билинейными, поэтому характеризующими согласованную алгебру, которая удовлетворяет аксиомам покрывающих Ли-допустимых алгебр, впервые определенных американским математиком А.А. Альбертом (A.A. Albert), хотя без специфических реализаций. Обычная неассоциативная алгебра со скобками  $(A, B)$  называется Ли-допустимой, когда ассоциированные с ними антисимметричные скобки являются скобками Ли:

$$[A \hat{;} B] = (A, B) - (B, A) = \text{Lie}, \quad (8)$$

(см. Раздел 1.7 Главы 1).

Это означает, что даже находясь вне теории Ли, новые временные эволюции сохраняют хорошо определенное содержание теории Ли, что и необходимо для покрывающей теории. Оказывается, что новая теория допускает также хорошо определенное содержание алгебр Джордана

(Jordan), так как ассоциированные со скобками новой теории симметричные скобки являются скобками Джордана:

$$\{A;B\} = (A,B) + (B,A) = \text{Jordan}. \quad (9)$$

Вышеприведенная структура, впервые, насколько я знаю, дает ответ поискам Джордана для физических приложений его алгебр. К сожалению, работы [1, 2, 3] по первым  $(p,q)$ -деформациям теории Ли, относящиеся 1967 году, были, в общем, проигнорированы в довольно обширной литературе того времени, посвященной более простым  $q$ -деформациям.

## **Мой проект в Гарвардском университете по конструированию адронного обобщения квантовой механики при поддержке DOE**

В 1967 году я эмигрировал со своей женой и дочерью в США, где я вскоре обнаружил, что не получившие все еще широкой известности в то время даже в *математических* кругах, не говоря уже о физических, Ли-допустимые алгебры не могут способствовать получению академической должности. Поэтому, в течении целого десятилетия, я публиковал различные работы с исследованиями в более традиционных направлениях того времени.

В 1978 году, будучи в Гарвардском университете, я вновь обратился к исследованиям, имеющим значение для этой монографии, благодаря поддержке Департамента Энергетики США (U.S. Department of Energy), которую я до сих пор вспоминаю с признательностью. Действительно, в 1978 году я предложил [4] конструкцию обобщения квантовой механики, специально предназначенную для воспроизведения адронов такими, какие они есть в физической реальности: протяженными, несферическими и с деформированными зарядовыми распределениями, обладающими одними из самых высоких плотностей, измеренными в лабораториях до настоящего времени.

Я предложил для новой механики название "*адронная механика*", чтобы подчеркнуть ее изначальное предназначение, – исследование сильновзаимодействующих частиц, известных как адроны, с полным пониманием того, что эта механика, как ожидается, будет равно применима и к другим областям (таким же образом, как квантовая механика, созданная для атомных структур, применима к исследованиям кристаллов и т.д.).

Впоследствии, адронная механика разрабатывалась множеством авторов, среди которых я хотел бы назвать следующих: С. Окубо (S. Okubo), С. Адлер (S. Adler), Т. Гилл (T. Gill), Л. Линдсей (L. Lindesay), К. Вольф (C. Wolf) и другие в США; Дж. Эллис (J. Ellis), М.Е. Мавроматос (M.E. Mavromatos), Н. Нанопоулос (N. Nanopoulos) (CERN) и другие в Швейцарии; Д.В. Кадейшвили (J.V. Kadeisvili), Ю. Арестов (Yu. Arestov) и А.К. Арынгазин (A.K. Aringazin) в СССР; Р. Мигнани (R. Mignani), М. Гасперини (M. Gasperini), Ф. Кардоне (F. Cardone) и другие в Италии; А. Яннуссис (A. Jannussis), Ф. Бродимас (F. Brodimas), К.Н. Кторидес (C.N. Ktorides) и другие в Греции; Дж. Ломус (J. Lohmus), Е. Паал (E. Paal), Л. Соргсепп (L. Sorgsepp) и другие в Эстонии; Д. Шух (D. Schuch), К.А.К. Дрейсмманн (C.A.C. Dreismann) и другие в Германии; Н. Нтибашираканди (N. Ntibashirakandi), Д.К. Каллебаут (D.K. Callebaut) и другие в Дании; Е. Трелл (E. Trelle) и другие в Швеции; Д. Рапорпорт-Камподонико (D. Rapoport-Camponico) и другие в Аргентине; М. Нишиока (M. Nishioka) и другие в Японии; А.О.Е. Анималу (A.O.E. Animalu) и другие в Африке; М. Миятович (M. Mijatovic), Б. Вельяновски (B. Veljanovski) и другие в Югославии; и другие (более полное перечисление см. том II монографии [9])<sup>3</sup>.

Оригинальный проект 1978 года базировался на следующих основных обобщениях:

**I) Общий Ли-допустимый лифтинг**, который может быть выражен через следующее обобщение представления Гейзенберга [4]:

$$A(t) = U \times A(0) \times W^\dagger = e^{i \times H \times Q \times t} \times A(0) \times e^{-i \times t \times P \times H}, \quad (10a)$$

$$\begin{aligned} i \frac{dA}{dt} &= (A; H)_{\text{operator}} = A \langle H - H \rangle A = A \times P \times H - H \times Q \times A = \\ &= (A \times T \times H - H \times T \times A) + (A \times W \times H + H \times W \times A) = \quad (10b) \\ &= [A; H] + \{A; H\}, \end{aligned}$$

$$H = H^\dagger, \quad P = Q^\dagger, \quad (10c)$$

<sup>3</sup> Исследования адронной механики изложены примерно в 2000 статьях, 20 монографиях и 40 томах материалов конференций, с общим объемом около 10000 страниц, опубликованных в странах Америки, Европы и Азии.

где  $P = T + W$ ,  $Q = T - W$  и  $P \pm Q$  – несингулярные операторы (или матрицы), с дополнительным лифтингом представления Шредингера [5],

$$H(r, p) > |\hat{\psi}\rangle = H(r, p) \times Q \times |\hat{\psi}\rangle = E \times |\hat{\psi}\rangle, \quad (11a)$$

$$\langle \hat{\psi}| < H = \langle \hat{\psi}| \times Q \times H(r, p) = \langle \hat{\psi}| \times E', \quad E' \neq E, \quad (11b)$$

и классических аналогов [4],

$$A(t) = \left[ e^{-t \times (\partial H / \partial r^j) \times Q_j^i \times (\partial / \partial p_i)} \right] \times A(0) \times \left[ e^{t \times (\partial / \partial r^j) \times P_j^i \times (\partial H / \partial p_i)} \right], \quad (12a)$$

$$\frac{dr^k}{dt} = P_i^k(t, r, p) \times \frac{\partial H(t, r, p)}{\partial p_i}, \quad (12b)$$

$$\frac{dp_k}{dt} = -Q_k^i(t, r, p) \times \frac{\partial H(t, r, p)}{\partial r^i},$$

$$\frac{dA}{dt} = (A \hat{;} H)_{\text{classical}} = \frac{\partial A}{\partial r^i} \times P_j^i \times \frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial H}{\partial r^i} \times Q_j^i \times \frac{\partial A}{\partial p_j}, \quad (12c)$$

при условии, что антисимметричные скобки  $[A \hat{;} B] = (A \hat{;} B) - (B \hat{;} A)$  являются скобками Ли и симметричные операторные скобки  $\{A \hat{;} B\} = (A \hat{;} B) + (B \hat{;} A)$  являются скобками Джордана.

Причин для обобщения параметра в операторную форму Ли-допустимых теорий было множество. Во первых, Ли-допустимая теория (5), очевидно, предполагала невозможность настоящего лифтинга представления Шредингера, в то время как расширенная теория (10) допускает нетривиальные лифтинги (11).

А также, временная эволюция уравнений (5а), очевидно, неунитарна:

$$U = e^{i \times H \times p \times t}, \quad W = e^{i \times t \times q \times H}, \quad U \times W^\dagger \neq I. \quad (13)$$

Полезным упражнением для читателя, заинтересованного в изучении новой химии, является доказательство того, что применение временной эволюции (5а) к самой себе производит точно оператор временной эволюции (10). В свою очередь, применение последней временной эволюции к самой себе сохраняет Ли-допустимую структуру (хотя и с другими значениями  $P$  и  $Q$ ).

Это является подтверждением того факта, что скобки  $(A \hat{;} B)$  являются наиболее общими из возможных билинейных неассоциативных скобок

(так как они являются наиболее общей из возможных комбинаций антисимметричных и симметричных скобок, как показано в (10b)).

Как результат, динамические уравнения (10) являются "непосредственно универсальными", то есть включающими в себя все бесконечное множество возможных теорий с алгеброй в скобках временной эволюции, непосредственно в системе координат экспериментатора.

Воспроизведение временной зависимости несохраняющихся величин, очевидно, имеет вид:

$$i \times \frac{dH}{dt} = (H; H) = H < H - H > H = H \times P \times H - H \times Q \times H \neq 0. \quad (14)$$

В частности, *Ли-допустимые теории (10)-(14) структурно необратимы, то есть, необратимы для обратимых гамильтонианов.*

**II) Общий Ли-изотопический лифтинг.** При исследовании теории (10)-(14) в 1978 г. я вернулся к тому факту, что ассоциированная антисимметричная алгебра характеризуется не обычными скобками Ли  $[A, B] = A \times B - B \times A$ , а более общими скобками:

$$[A; B] = (A, B) - (B, A) = A \times T \times B - B \times T \times A, \quad (15a)$$

$$T = P + Q = P^\dagger + Q^\dagger = Q + P = T^\dagger, \quad (15b)$$

которые удовлетворяют абстрактным аксиомам Ли, хотя и в обобщенной форме.

Поэтому, я назвал последнюю теорию *изотопией* теории Ли, подчеркивая этим "сохраняющий аксиомы" характер теории [4]. Я назвал полностью Ли-допустимую теорию (10)-(13) *генотопией* теории Ли [4], чтобы подчеркнуть характер "введения аксиом".

Соответствующие механики были названы *изомеханикой* и *геномеханикой*, в то время как математики, необходимые для трактовок соответствующих теорий, были названы *изоматематикой* и *геноматематикой*, соответственно.

Вследствие последнего свойства, в работе [4] 1978 года я предложил следующий *Ли-изотопический лифтинг* представления Гейзенберга:

$$A(t) = U \times A(0) \times U^\dagger = [e^{i \times H \times T \times t}] \times A(0) \times [e^{-i \times t \times T \times H}], \quad T = T^\dagger, \quad (16a)$$

$$i \frac{dA}{dt} = [A; H]_{\text{operator}} = A \hat{\times} H - H \hat{\times} A = A \times T \times H - H \times T \times A, \quad (16b)$$

где  $T$  – несингулярный оператор (или матрица), с соответствующим лифтингом уравнения Шредингера:

$$H(r, p) \times T \times |\hat{\psi}\rangle = E \times |\hat{\psi}\rangle, \quad \langle \hat{\psi}| \times T \times H(r, p) = \langle \hat{\psi}| \times E, \quad (17)$$

и классических аналогов:

$$A(t) = e^{-t \times (\partial H / \partial r^j) \times T_i^j \times (\partial / \partial p_i)} \times A(0) \times e^{t \times (\partial / \partial r^j) \times T_i^j \times (\partial H / \partial p_i)}, \quad (18a)$$

$$\frac{dr^k}{dt} = T_i^k(t, r, p) \times \frac{\partial H(t, r, p)}{\partial p_i}, \quad \frac{dp_k}{dt} = -T_k^i(t, r, p) \times \frac{\partial H(t, r, p)}{\partial r^i}, \quad (18b)$$

$$\frac{dA}{dt} = [A; H]_{\text{classical}} = \frac{\partial A}{\partial r^i} \times T_j^i \times \frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial H}{\partial r^i} \times T_j^i \times \frac{\partial A}{\partial p_j}. \quad (18c)$$

Основной чертой изомеханики является характеризуемость обычными законами сохранения, в виду антисимметричного характера скобок, например,

$$i \times \frac{dH}{dt} = H \hat{\times} H - H \hat{\times} H = H \times T \times H - H \times T \times H \equiv 0. \quad (19)$$

Следовательно, теория подходит для воспроизведения замкнуто-изолированных систем, с обычными законами сохранения.

Несмотря на это, теория не является полностью гамильтоновой. Действительно, она требует двух операторов для характеристики систем, – обычный гамильтониан  $H = p^2/2m + V$ , и новый оператор  $T$ . Поэтому, я принимаю, что обычный гамильтониан воспроизводит все обычные потенциальные взаимодействия, в то время как оператор  $T$  воспроизводит новые взаимодействия, не выводимые из потенциала.

Заметим, что вышеуказанные черты подразумевают новое понятие связанного состояния при обычных законах сохранения, хотя внутренние силы уже и консервативны, и неконсервативны. Мы просто имеем внутренний обмен энергией, моментом импульса и всеми другими физическими величинами, но всегда в таком виде, чтобы соответствующая полная величина для системы оставалась неизменной, а система изолированной.

Классический пример дается структурой Юпитера (рассматриваемого изолированным от остальной части Солнечной системы), которая, очевидно, подчиняется закону сохранения момента импульса, хотя, можно

непосредственно наблюдать в телескоп внутренние вихри с *переменными моментами импульса*. В моей монографии по теоретической механике, опубликованной издательством Springer-Verlag [14], я использовал классическую гамильтонову механику для изучения планетарных систем, и ее изотопическое покрытие для изучения структуры отдельных планет.

Операторные примеры замкнуто-изолированных негамильтоновых систем, изученные в моей монографии [9], опубликованной Украинской Академией Наук, даются адронами, ядрами, или звездами обладающими гиперплотной структурой, которая делает их концептуально эквивалентных Юпитеру. Я использовал квантовую механику для изучения атомной структуры и покрывающую адронную механику для структуры адронов, ядер и звезд. В любом случае, предположение о том, что адронные составляющие могут свободно перемещаться при гиперплотной адронной среде в ядре звезды, подобно атомным составляющим, не внушает научного доверия [12].

**III) Общие, многозначный Ли-допустимый и Ли-изотопический лифтинг.** Совсем недавно, прилагая к моим собственным исследованиям принцип отсутствия окончательного характера любой теории, я обнаружил, что несмотря на ее замечательную общность, теория (10)-(14) все еще недостаточна для воспроизведения сложных систем, таких как биологические структуры, так как недавние исследования показали, что, в общем, они требуют необратимых и *многозначных* формулировок.

Поэтому я предложил еще более общий лифтинг Ли-допустимых теорий в их многозначную покрывающую форму [6]:

$$A(t) = U \times A(0) \times U^\dagger = e^{i \times H \times \{Q\} \times t} \times A(0) \times e^{-i \times t \times \{P\} \times H}, \quad P = Q^\dagger, \quad (20a)$$

$$\begin{aligned} i \, dA/dt &= (A \hat{H})_{\text{operator}} = A \{ \langle \rangle H - H \{ \rangle \} A = \\ &= A \times \{P\} \times H - H \times \{Q\} \times A = \\ &= (A \times \{T\} \times H - H \times \{T\} \times A) + \end{aligned} \quad (20b)$$

$$\begin{aligned} &+ (A \times \{W\} \times H + H \times \{W\} \times A) = [A \hat{H}] + \{A \hat{H}\}, \\ &\{P\} = \{P_1, P_2, P_3, \dots\}, \quad \{Q\} = \{Q_1, Q_2, Q_3, \dots\}, \end{aligned} \quad (20c)$$

где  $\{P\}$ ,  $\{Q\}$  and  $\{P \pm Q\}$  являются теперь несингулярными (упорядоченными) наборами операторов (или матриц), с дополнительным лифтингом уравнений Шредингера:

$$H(r, p) \times \{P\} \times |\{\hat{\psi}\}\rangle = \{E\} \times |\{\hat{\psi}\}\rangle, \quad (21a)$$

$$\langle \{\hat{\Psi}\} | \times \{Q\} \times H(r, p) = \langle \{\hat{\Psi}\} | \times \{E\}, \quad (21b)$$

и классических аналогов [*loc. cit.*]:

$$A(t) = \left[ e^{-t \times (\partial H / \partial r^j) \times \{Q\}_i^j \times (\partial / \partial p_i)} \right] \times \quad (22a)$$

$$\times A(0) \times \left[ e^{t \times (\partial / \partial r^j) \times \{P\}_i^j \times (\partial H / \partial p_i)} \right], \quad (22a)$$

$$\frac{dr^k}{dt} = \{P\}_i^k(t, r, p) \times \frac{\partial H(t, r, p)}{\partial p_i}, \quad (22b)$$

$$\frac{dp_k}{dt} = -\{Q\}_k^i(t, r, p) \times \frac{\partial H(t, r, p)}{\partial r^i},$$

$$\frac{dA}{dt} = (A; H)_{\text{classical}} = \frac{\partial A}{\partial r^i} \times \{P\}_j^i \times \frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial H}{\partial r^i} \times \{Q\}_j^i \times \frac{\partial A}{\partial p_j}. \quad (22c)$$

при условии, опять-таки, что ассоциированные антисимметричные (операторно симметричные) скобки имеют Ли (Джордан) тип, хотя и в расширенной многозначной версии.

Существование мультизначного Ли-изотопического специфического вида вышеуказанной теории очевидна и будет подразумеваться в дальнейшем.

## Забывтое историческое наследство Лагранжа, Гамильтона и Якоби о происхождении необратимости

Есть небольшое сомнение, что одной из самых фундаментальных открытых проблем современной физики, непосредственно относящейся и к химии, является аксиоматически согласованное воспроизведение *необратимости* для множества физических и химических систем.

Эта проблема создана тем фактом, что квантовая механика является структурно *обратимой* во времени, а именно, образ систем с обращенным временем является таким же физическим, как и оригинальные системы. Эта черта определенно подтверждается для систем, для которых квантовая механика была построена, – для атомных структур. Однако, предположение, что весь микроскопический мир так же обратим, как электронные орбиты, является совершенно ненаучным.



Кроме того, все давно известные, далекодействующие, потенциальные силы и поэтому все возможные гамильтонианы являются также обратимыми. Эти черты находятся в явном противоречии с очевидной необратимостью природы.

В виду вышесказанного, на протяжении 20-го века было проведено поистине бесконечное число исследований в надежде примирить необратимость реальности с обратимостью квантовой механики.

Хотя я с уважением относился к этим исследованиям, я никогда не принимал их, и следовал принципиально другим путем, начиная с моих докторских исследований в физике.

В сущности, я всегда принимал применимость квантовой механики для тех условий, для которых она была сконструирована, – описание *стабильных обратимых орбит электронов в структуре атома водорода*.

Однако, предположение, что та же дисциплина равно применима для драматически отличающихся условий электронов в ядре коллапсирующей звезды, является настолько натянутым, что является отрицанием науки. Действительно, это предположение неизбежно подразумевает локальную стабильность движения электронов в гиперплотной среде, с вытекающим локальным сохранением момента импульса (следует из столпа теории, – вращательной симметрии), поэтому во всей полноте принимается существование "вечного двигателя".

В то время как мои современники пытались адаптировать необратимость физической реальности к облюбованным теориям, я разрабатывал обратный подход адаптации теории к физической реальности. То есть, я начал поиски обобщения квантовой механики подходящего для воспроизведения необратимости.

В любом случае, "должно" быть очевидно и, следовательно, допустимо всеми учеными, что *классические, макроскопические, необратимые системы не могут быть сведены к конечному набору элементарных частиц в обратимых условиях (как предписывается квантовой механикой) и, vice versa, ограниченный набор элементарных частиц в обратимых условиях не может производить необратимую макроскопическую систему*. Этим диктуется необходимость обобщения квантовой механики для любых серьезных исследований необратимых систем.

В ходе моих докторских исследований в Турине, я занимался изучением оригинальных статей Лагранжа (на итальянском языке), которые были для меня истинным откровением. Физическое сообщество 20-го века использует "усеченное уравнение Лагранжа", то есть без внешних

членов, с волнующей мечтой, – свести всю Вселенную к дальнодействию между изолированными точками.

Напротив, Лагранж имел драматически более широкие и более реалистичные взгляды, которые включали ограниченные концепции 20-го века как частные случаи, но подразумевали существование бесконечного класса не пренебрегаемых сил контактного типа, между протяженными частицами, которые, в этом случае, не выводимы из потенциала, поэтому являются *источником необратимости*.

Я также изучал оригинальные работы Гамильтона и нашел точно то же расхождение. Физика 20-го века использует "усеченные уравнения Гамильтона", а именно, без исторических внешних членов, и этим адаптируется физическая реальность к намеренно упрощенной теории.

Напротив, Гамильтон имел гораздо более адекватную концепцию природы. Он доказывал, что потенциальные силы должны быть воспроизводимы функцией, которую мы называем сегодня гамильтонианом, в то время как остальные силы и эффекты, не выводимые из потенциала, должны воспроизводиться внешними членами, полностью аналогичным вводимым Лагранжем. Гамильтон также принимал внешние члены как единственно возможный путь воспроизведения необратимости.<sup>4</sup>

Из осторожности *избегая* учебники по механике 20-го века (так как они имеют дело, как хорошо известно, *только* с усеченными уравнениями), я также изучал *оригинальные работы* Якоби и других основоположников аналитической механики, и нашел точно ту же замечательную концепцию природы (действительно, оригинальная теорема Якоби имеет *не тот вид*, что предлагается в современных учебниках, а она была изначально задумана для аналитических уравнений с внешними членами, случай без внешних членов является тривиальным).

Таким образом, я пришел к выводу, что *физика 20-го века терпела неудачи при попытках провести осмысленные исследования по происхождению необратимости из-за урезания аналитических уравнений Лагран-*

---

<sup>4</sup> Изменение гамильтониана добавлением необратимых членов,  $H = p^2/2m + V(r) \rightarrow H' = p^2/2m + V(r) + V'(t, \dots)$  подразумевала бы, что "необратимость имеет потенциальную энергию" и другие ненаучные следствия. Это приводит к *необходимости* введения дополнительных объектов, кроме гамильтониана, что является оригинальной концепцией Лагранжа, Гамильтона и Якоби, которая, как мы увидим, является основанием нашей трактовки необратимости химических процессов, изученной в этой монографии.

жа и Гамильтона через отбрасывание их внешних членов.

Вследствие этого, на протяжении моих исследований в Гарвардском университете, в конце 1970-х, я доказывал, что "истинные уравнения Гамильтона", то есть, с внешними членами, являются частным случаем уравнений (12) <sup>5</sup>,

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L(r, v)}{\partial r^k} - \frac{\partial L(r, v)}{\partial v^k} = F_k(t, r, v), \quad (23a)$$

$$\frac{dr^k}{dt} = \frac{\partial H(r, p)}{\partial p_i}, \quad \frac{dp_k}{dt} = -\frac{\partial H(r, p)}{\partial r^k} + F_k(t, r, p), \quad (23b)$$

$$P_j^i = \delta_j^i, \quad Q_i^j = \delta_i^j \left( 1 + \frac{f_j}{\partial H / \partial r^j} \right). \quad (23c)$$

Я также показал, что скобки истинных уравнений (23b) не характеризуют согласованной алгебры и не позволяют согласованного экспоненцирования в группу, именно из-за внешних членов, поэтому препятствуется конструирование покрывающей аналитической теории.

Поэтому я предложил *идентичную* Ли-допустимую переформулировку истинных уравнений Гамильтона, как *необходимое* условие сохранения согласованной алгебры и группы (см. Раздел 2.10 Главы 1). *Дополнение* внешних членов, тождественно переформулировано через *множители P и Q* в аналитических уравнениях, что приводит к согласованным обобщенным алгебрам и группам уравнений (12).

<sup>5</sup> Я написал две монографии [14] посвященных интегральным условиям существования лагранжиана и гамильтониана, названных *условиями вариационного самосопряжения*. Оказалось, что внешние члены Лагранжа и Гамильтона в трехмерии *существенным образом несамосопряжены*, то есть, они *не* допускают представления лагранжианом или гамильтонианом в системе отсчета наблюдателя, чем и подтверждается необходимость во внешних членах. Использование координатных преобразований  $r \rightarrow r'(r, p)$ ,  $p \rightarrow p'(r, p)$ , для сведения истинных аналитических уравнений к усеченным, является в высшей степени обескураживающим, из-за сильной *нелинейности* необходимых преобразований и поэтому отображения изначальных инерциальных систем отсчета наблюдателя в сильно неинерциальные, с соответствующим нарушением принципов относительности Галилея и Эйнштейна. В любом случае, такая редукция имеет чисто политико-академический характер, так как лабораторное оборудование и измерительные приборы, очевидно, не могут двигаться по трансформированным траекториям типа  $r' = A \times \exp[B \times r \times p]$ ,  $p' = C \times p \times \log(D \times p^2)$ ;  $A, B, C, D$  – константы.

Вышесказанное имело фундаментальные последствия для всех моих дальнейших исследований. Действительно, *достижение теоретического, на алгебраическом и групповом уровнях, согласованного воспроизведения исторических уравнений Гамильтона с внешними членами закладывает основы для аксиоматически и физически согласованного воспроизведения необратимости на всех желаемых уровнях исследований.*

Последующие исследования, рассмотренные в Разделе 2.10, Глава 1, установили однозначное и недвусмысленное операторное отображение уравнений (12) в (10), поэтому допускается идентификация необратимости на самом элементарном уровне природы, таком как электроны в центре звезд.

Я надеюсь, что химики, читающие эти вводные строки, не пропустят их как эзотерические *физические* следствия, не имеющие отношения к химии. Как мы увидим позже, в этом Введении и в монографии, химические реакции и другие явления в органической и неорганической химии являются строго необратимыми. Поэтому, в этих вводных строках, я обращаюсь к следствиям *теории, позволяющей аксиоматически согласованное воспроизведение необратимых химических процессов.*

## **Катастрофические несогласованности обобщенных теорий, трактуемых через обычную математику**

После получения вышеуказанной цепочки обобщенных теорий, я начал их тщательное исследование с точки зрения математической строгости и физической согласованности. Таким образом, я обнаружил, что *все вышеупомянутые операторные и классические обобщенные теории имеют математические и физические несогласованности, настолько безнадёжные, что это препятствует любому их осмысленному применению, всякий раз, когда они трактуются через обычную математику квантовой или гамильтоновой механики.* Эти несогласованности рассмотрены в Разделе 1.7 Главы 1, и для них я предложил резкий заголовок "Катастрофические несогласованности обобщенных теорий, сформулированных через обычную математику".

За происхождение несогласованностей ответственна *неунитарная структура* временной эволюции, которая подразумевает *отсутствие инвариантности единиц, собственных значений, эрмитовости, вероятности, причинности и других фундаментальных черт.*

Так как изотопическая, генотопическая и гиперструктурная ветви адронной механики являются "непосредственно универсальными" в своих областях, вышеупомянутые катастрофические несогласованности применимы также к довольно большому числу обобщенных теорий возникавших на протяжении 20-го века.

Более того, все попытки достигнуть согласованных лифтингов фундаментальных уравнений для импульса (2b) оказывались неудачными на протяжении десятилетий, и, в их отсутствие, адронная механика была принципиально неполной, а также недостаточно разработанной для практических приложений.

## Причины конструирования новой математики

С этого момента, я имел две альтернативы: отказаться от мечты построить согласованное покрытие квантовой механики, или искать разрешения упомянутых несогласованностей. Я выбрал второе и начал систематические исследования. Нетрудно было видеть, что *первопричиной катастрофических несогласованностей было использование "обычной" математики для трактовок "обобщенных" теорий.*

Например, легко было доказать, что использование обычного гильбертова пространства, определенного над обычными полями комплексных чисел, подразумевает отсутствие сохранения изначальной эрмитовости для всех неунитарных временных эволюций, что приводит к утрате наблюдаемых (см. Раздел 1.7 Главы 1). Напротив, подходящий лифтинг гильбертова пространства и чисел действительно позволяет сохранить оригинальную эрмитовость для любого выбора времени, поэтому позволяет согласованное воспроизведение наблюдаемых. Поэтому, я не имел другой альтернативы, кроме попытки построить новую математику для разрешения указанных несогласованностей и достижения аксиоматической согласованности, подобной той, что существует для обычной квантовой механики.

В этом направлении я сотрудничал со множеством математиков, среди которых я хотел бы отметить: Х.К. Мьюнга (H.C. Myung), Д.Б. Лина (D.B. Lin), М. Томбера (M. Tomber) и других в США; Г. Тсагаса (Gr. Tsagas), Д.С. Соурласа (D.S. Sourlas), Т. Воугиоуклиса (T. Vougiouklis) и других в Греции; Р. Мирона (R. Miron), С. Вакару (S. Vacaru), Я.В. Кадейшвили (J.V. Kadeisvili) и других в СССР; Р. Асланера (R. Aslaner), С. Келеса (S. Keles) и других в Турции; К.-К. Джанга (C.-X. Jiang) и

других в Китае; Н. Камийю (N. Kamiya) и других в Японии; и других математиков (см. Том I монографии [9]).

Таким образом, мы сконструировали следующие новые математики [6]:

А) **Изоматематика**, для согласованной формулировки однозначных обратимых Ли-изотопических теорий;

В) **Геноматематика**, для согласованной формулировки однозначных необратимых Ли-допустимых теорий;

С) **Гиперматематика**, для согласованной формулировки многозначных необратимых Ли-допустимых теорий;

плюс **изодуальные математики** [8], для согласованной формулировки анти-изоморфных образов вышеуказанных теорий для воспроизведения антиматерии начиная с классического уровня.

Читатель должен иметь в виду, что вышеуказанные новые математики включают в себя, как необходимое условие согласованности, *новые числа и поля, новые векторные и гильбертовы пространства, новые алгебры и группы, новые геометрии и топологии* и т.д., все это для каждой из вышеупомянутых изо-, гено- и гипер-математики, плюс всех их изодуальных.

Главной идеей новых математик [4] является лифтинг обычной, тривиальной единицы  $I$ , используемой в настоящее время в математике, физике и химии, в обобщенную единицу, которая является *инверсной* по отношению к изотопическому, генотопическому, или гиперструктурному элементу (технические детали см. в Главе 1)

$$\hat{I} = 1/T = \hat{I}^\dagger, \quad (24a)$$

$$\hat{I}^> = 1/P, \quad \hat{I}^< = 1/Q, \quad \hat{I}^> = (\hat{I}^<)^\dagger, \quad (24b)$$

$$\{\hat{I}^>\} = \{1\}/\{P\}, \quad \{\hat{I}^<\} = \{1\}/\{Q\}, \quad \{\hat{I}^>\} = (\{\hat{I}^<\})^\dagger. \quad (24c)$$

Тогда полностью вся обычная математика квантовой механики должна быть поднята в такую форму, чтобы допустить соответствующую новую единицу как корректную левую и правую единицу на всех уровнях. В этом случае, эти лифтинги производят *изо-, гено- и гипер-числа, изо-, гено- и гипер-пространства, изо-, гено- и гипер-геометрии* и т.д.

Достижение инвариантности, полностью сравнимой с таковой для квантовой механики, может быть видно из этих вводных строк. Действительно, обычная или инвариантная основная единица является фун-

даментальным инвариантом любой теории. Воспроизведение непотенциальных сил через обобщенные единицы гарантирует тогда их инвариантность.

Выражаясь другими словами, непотенциальные взаимодействия, обусловленные контактом между протяженными телами (например, космический корабль входящий в земную атмосферу, или глубокое перекрытие волновых пакетов частиц) должно воспроизводиться чем-либо иным, кроме гамильтониана. Действительно, такое воспроизведение лишает гамильтониан физического смысла как воспроизводящего полную энергию  $H = p^2/2m + V$ , и придает ему абстрактную математическую форму. К тому же, гамильтоново воспроизведение систем с непотенциальными силами существует в фиксированной системе отсчета наблюдателя только в весьма специальных и ограниченных случаях (как правило только в одномерии [14]).

Раз гамильтониан исключается из способов воспроизведения контактных непотенциальных взаимодействий, то единица, очевидно, является лучшим из известных решений, не только потому, что она гарантирует инвариантность, но также из-за достижения "непосредственной универсальности", понимаемой теперь, как способность воспроизведения всех возможных непотенциальных сил непосредственно в системе отсчета экспериментатора.

Дополнительные исследования доказали способность обобщенных единиц воспроизводить все возможные непотенциальные силы, которые, в добавок, могут быть *нелинейными* (по волновым функциям) и *нелокальными* (например, интегрального типа по поверхности или объему). Напомним, что квантовая механика является строго линейной, локальной и потенциальной. Обобщение единицы позволяет тогда получить покрывающую теорию со всеми, бесконечно возможными, нелинейными, нелокальными и непотенциальными взаимодействиями.

После начала исследований в 1967 г. [1], разрешение катастрофических несогласованностей, отмеченных выше, было достигнуто только в работе [6] 1996 года. Причиной столь долгого решения проблемы было то, что после того как были сконструированы необходимые новые числа и поля, новые векторные и гильбертовы пространства и т.д., обобщенные теории все еще страдали неприемлемыми несогласованностями, такими как отсутствие инвариантности обобщенных временных эволюций относительно действий на себя.

Эти несогласованности сохранялись из-за того, что я надеялся свести

их к минимуму использованием *обычных дифференциалов и производных* в обобщенных теориях. Только после того, как я вышел в работе [6] на обобщенные формулировки дифференциального исчисления для каждой из расширенных теорий, я, наконец, разрешил все известные математические и физические несогласованности.

Например, инвариантная и аксиоматически корректная формулировка изомеханики требует следующего простого *изодифференциального исчисления* [6]:

$$\hat{d}r^k = \hat{T}_i^k(t, r, p, \psi, \dots) \times dr^i, \quad \frac{\hat{\partial}}{\hat{\partial}r^k} = \hat{T}_k^i(t, r, p, \psi, \dots) \times \frac{\partial}{\partial r^i}, \quad (25)$$

с соответствующими формулировками Ли-изотопических динамических уравнений.

Вышеуказанное изодифференциальное исчисление позволило достижение, впервые, в работе [6] 1996 г., аксиоматически согласованного лифтинга фундаментальных уравнений для импульса,

$$p_k \times T \times |\hat{\psi}\rangle = -i \times \hbar \times \hat{\partial}_k |\hat{\psi}\rangle = -i \times \hbar \times T_k^i(t, r, p, \psi, \dots) \times \partial_i |\hat{\psi}\rangle, \quad (26)$$

с соответствующими *генодифференциальным и гипердифференциальным исчислениями* для оставшихся формулировок.

Отсюда, просто следовал аксиоматический лифтинг квантовой механики, как изложено в работе [7] 1997 года. *После трех десятилетий, прошедших с начала исследований, и благодаря участию математиков, теоретиков и экспериментаторов, упомянутых здесь в большом количестве, адронная механика достигла наконец своей операционной завершенности в 1997 году !*

Достижение этой завершенности включала в себя доказательство, что *изотопическая ветвь адронной механики полностью удовлетворяет всем обычным квантовым аксиомам и физическим законам (принцип неопределенности Гейзенберга, принцип запрета Паули, вероятностные и причинные законы и т.д.)*. Действительно, я подчеркивал в литературе, что *адронная механика не является "новой теорией", так как она просто обеспечивает "новые реализации" обычных абстрактных аксиом квантовой механики*.

Доказательство вышеуказанных черт элементарно для изомеханики, так как ее основная структура остается структурой Ли. То же доказательство для расширенных Ли-допустимых теорий было не так просто,



из-за явного отсутствия антисимметричного характера скобок временной эволюции. Однако, более глубокий анализ выявил, что правильно сформулированные, с помощью подходящей для них геноматематики, Ли-допустимые скобки превращаются в скобки Ли, поэтому допускается абстрактное тождество квантовой механики со всеми, рассмотренными здесь, теориями.

Читатель должен иметь в виду, что *все работы по обобщенным теориям с неунитарной структурой, изданные до 1996 года, страдают отмеченными катастрофическими несогласованностями.*

## Классификация адронных механик

В результате всех вышеупомянутых усилий, адронная механика, на сегодняшний день, достигла своей завершенности, соответствующей возможности практического применения и экспериментальных проверок, и включает в себя следующие ветви:

1) *Квантовая механика* (характеризуемая гамильтонианом  $H = p^2/2m + V$  и тривиальным значением единицы  $I$ ) воспроизводящая изолированные и обратимые системы точечных частиц на больших взаимных расстояниях, с только дальнедействующим, потенциальным взаимодействием, такие как кристаллы;

2) *Покрывающая изомеханика* (характеризуемая двумя величинами, – гамильтонианом  $H$  и изотопическим элементом  $T$ ), воспроизводящая изолированные и обратимые системы протяженных частиц с дальнедействующими, потенциальными взаимодействиями, воспроизводимыми  $H$ , и контактными, внутренними, непотенциальными взаимодействиями, воспроизводимыми  $T$ , которые ожидаются в структуре адронов;

3) *Расширенная геномеханика* (характеризуемая тремя величинами, – гамильтонианом  $H$ , плюс два оператора  $P$  и  $Q$ ), воспроизводящая открытые, неконсервативные и необратимые системы протяженных частиц, с потенциальными взаимодействиями, воспроизводимыми  $H$ , и не отбрасываемыми контактно-непотенциально-необратимыми взаимодействиями, воспроизводимыми  $P$ , для одного направления времени, и  $Q$ , для противоположного направления;

4) еще более расширенная многозначная *гипермеханика* (характеризуемая, в своей максимально общей форме, тремя наборами величин: набором гамильтонианов  $\{H\}$ , плюс два набора операторов  $\{P\}$  и  $\{Q\}$ ), воспроизводящая сложные многозначные необратимые системы в откры-

тых, неконсервативных условиях, такие как рост во времени пчелиных сот, или морских раковин;

5) Я ввел также дополнительную группу теорий анти-изоморфных всем вышеперечисленным, называемых "изодуальными" (8), для воспроизведения антиматерии, начиная с классического уровня, в надежде разрешить другой недостаток физики 20-го века, связанный с тем, что материя воспроизводится на всех возможных уровнях (от ньютоновской механики до квантовой теории поля), в то время как воспроизведение антиматерии становится возможным только при вторичном квантовании.

## Простой метод для явного конструирования адронной механики

Операторная завершенность адронной механики была достигнута следующим методом для явного конструирования конкретных адронных моделей [7]. Этот метод применяется в этой монографии несколько раз и включает в себя следующие основные шаги:

1) Явное конструирование специфических моделей адронной механики простым методом, доступным каждому и не требующим обязательного знания продвинутой новой математики, заключается в систематическом применении неунитарных преобразований  $U \times U^\dagger \neq I$  ко всем математическим и физическим аспектам любой данной унитарной модели. Для изотопического случая, метод производит изоединицу

$$I \rightarrow \hat{I} = U \times I \times U^\dagger = 1/\hat{T},$$

изоассоциативное произведение

$$\begin{aligned} A \times B \rightarrow \hat{A} \hat{\times} \hat{B} &= U \times (A \times B) \times U^\dagger = \\ &= (U \times A \times U^\dagger) \times (U \times U^\dagger)^{-1} \times (U \times B \times U^\dagger) = \hat{A} \times \hat{T} \times \hat{B}, \end{aligned}$$

изочисла

$$n \rightarrow \hat{n} = U \times n \times U^\dagger = n \times (U \times U^\dagger) = n \times \hat{I},$$

с изопроизведением  $\hat{n} \hat{\times} \hat{m}$ , изошредингеровскре уравнение

$$U \times H \times |\psi\rangle = (U \times H \times U^\dagger) \times (U \times U^\dagger)^{-1} \times (U \times |\psi\rangle) = \hat{H} \times \hat{T} \times |\hat{\psi}\rangle,$$

изогильбертово произведение

$$\begin{aligned} \langle \psi | \times | \psi \rangle \times I &\rightarrow \langle \hat{\psi} | \hat{\times} | \hat{\psi} \rangle = U \times (\langle \psi | \times | \psi \rangle \times I) \times U^\dagger = \\ &= (\langle \psi | \times U^\dagger \times (U \times U^\dagger)^{-1} \times (U \times | \psi \rangle)) \times (U \times I \times U^\dagger), \end{aligned}$$

и т.д. Дуальное неунитарное преобразование позволяет явное конструирование, во всех необходимых деталях, расширенной генотеории, с лифтингом для движения вперед во времени,  $I \rightarrow \hat{I}^> = U \times I \times W^\dagger$ ,  $U \times U^\dagger \neq I$ ,  $W \times W^\dagger \neq I$ , и с сопряженно отличающимся (почему и возникает необратимость) лифтингом для движения назад во времени,  $I \rightarrow \hat{I}^< = W \times U^\dagger = (\hat{I}^>)^\dagger \neq \hat{I}^>$ . Многозначные, необратимые, гиперструктурные теории конструируются подобным же простым образом через упорядоченные наборы неунитарных преобразований.

2) Доказательство, что модели полученные после вышеприведенных лифтингов являются действительно инвариантными, то есть, они дают те же численные предсказания для любого времени при одинаковых условиях. Это доказательство также выражаемо в весьма элементарных терминах, при условии, что инвариантность не исследуется с помощью математики квантовой механики, но с помощью соответствующей расширенной математики. Например, легко видеть, что применение обычных неунитарных преобразований не оставляет инвариантными вышеуказанные обобщенные структуры, так как, для  $Z \times Z^\dagger \neq I$ ,  $\hat{I} \rightarrow \hat{I}' = Z \times \hat{I} \times Z^\dagger \neq \hat{I}$ . Однако, неунитарные преобразования относятся к старой теории. Их использование в покрывающих теориях столь же неправомерно, как и использование *изоматематики* в квантовой механике. Отсюда возникает требование к переформулировке неунитарных преобразований в идентичную *изоунитарную форму*,  $Z = \hat{Z} \times \hat{I}^{-1}$ ,  $Z \times Z^\dagger \equiv \hat{Z}^\dagger \hat{\times} \hat{Z} = \hat{Z}^\dagger \hat{\times} \hat{Z} = \hat{I}$ , относительно которой, инвариантность изоединицы очевидна:  $\hat{I} \rightarrow \hat{I}' = \hat{Z}^\dagger \hat{\times} \hat{I} \hat{\times} \hat{Z}^\dagger \equiv \hat{I}$ . Как мы увидим в деталях, инвариантность единицы тогда подразумевает инвариантность всей теории.

3) *Проекция* вышеуказанных обобщенных теорий, сформулированных на обобщенных пространствах над обобщенными полями, в формулировку на *обычных* пространствах над обычными полями. Эта проекция полезна для практических вычислений, с пониманием того, что единственно корректной формулировкой является обобщенная. Другими словами, в отличии от квантовой механики, адронная механика допускает *две* явные трактовки: первая – это трактовка через *изоматематику*, которая подразумевает соотнесение всех величин с *обобщенной* единицей  $\hat{I}$ ; вторая – это трактовка через проекцию на *обычные* пространства, то

есть, соотнесение всех величин с *обычной* единицей  $I$ . Последняя формулировка, как мы увидим, полезна при численных вычислениях, но она является также источником множества неверных интерпретаций и ошибок, так как ученые имеют тенденцию к принятию заключений, выведенных из последней трактовки, как истинных, в то время как те же заключения являются, в общем, невозможными в правильных формулировках обобщенных теорий.

Случаем, фундаментальным для этой монографии, является изучение валентных связей через изотопическую ветвь адронной механики. Заключение сделанные на основе изотопической модели через обычную потенциальную яму, на обычном гильбертовом пространстве являются такими же несогласованными и невероятными для изомеханики, как заключения об *атомной* структуре полученные с использованием *изогильбертовых* пространств определенных над обобщенными изополями. Серьезные заключения для обычных теорий могут быть сделаны только при трактовке через обычную математику, и для обобщенных теорий – при трактовке через их собственную обобщенную математику. Любая смесь различных теорий и/или их математик не может приводить к серьезным научным заключениям.

## Рождение адронной сверхпроводимости

Другим событием, давшим значительный импульс к созданию этой монографии, является рождение *адронной сверхпроводимости*, работы по созданию которой были начаты А.О.Е. Анималу [10] в 1994 г., и затем продолжены Анималу и мною [11], и так же содержат изо-, гено- и гиперформулировки.

По существу, Анималу (который является одним из основателей адронной механики) фокусировал свое внимание на основном результате работы [4], посвященной структурной модели  $\pi^0$  мезона, как связанного состояния одного электрона и одного позитрона на близком расстоянии в синглетное состояние, с внутренними непотенциальными взаимодействиями. Анималу подтвердил тот факт, что появляющаяся хултеновская сила обуславливает настолько сильное притяжение, что оно превосходит все возможные кулоновские силы отталкивания, поэтому играет значительную роль и для пары электронов, воспроизводимых с помощью изомеханики, а не только для электронно-позитронных пар.

В результате, Анималу [*loc. cit.*] сформулировал принципиально но-

вую модель куперовской пары в сверхпроводимости, в которой, впервые, как мне известно, мы сталкиваемся с явно "притягивающей" силой между двумя идентичными электронами. Как это хорошо известно, квантовомеханические модели имеют строго статистический характер, то есть, воспроизводят очень большое число куперовских пар. Важным здесь является то, что квантовые модели не имеют возможности воспроизвести структуру одной куперовской пары, как это делается адронной сверхпроводимостью.

Впоследствии, Анималу и Сантилли [11]: перепроверили главные структурные уравнения новой изосверхпроводимости; проверили их согласие с аксиомами изомеханики; подтвердили нелинейный, нелокальный и непотенциальный характер контактных взаимодействий из-за глубокого перекрытия электронов; и указали замечательное подтверждение теории экспериментальными данными по сверхпроводимости.

## Приложение адронной механики к принципу запрета Паули

Действительно фундаментальной темой, оставленной полностью открытой обширнейшими квантовомеханическими исследованиями 20-го века, является научная интерпретация принципа запрета Паули, то есть способность идентичных фермионов, и электронов в частности, находящихся на одном и том же энергетическом уровне, "запрещать" друг другу обладание одинаковыми квантовыми числами. Как это хорошо известно, принцип Паули просто *накладывается* на все модели, без какого-либо объяснения механизма и взаимодействий приводящих к упомянутым запретам. Как мы увидим, знание последнего играет поистине главнейшую роль в *промышленных*, не говоря уже о научных, приложениях.

Как ясно заявлено работе [4] 1978 года, адронная механика была построена для достижения пропущенных научных представлений, то есть, идентификации взаимодействий ответственных за принцип запрета и их инвариантное математическое воспроизведение в форме предсказывающей численные значения проверяемые экспериментом.

Главной гипотезой являлось то, что за *принцип запрета Паули* ответственны *нелинейные, нелокальные и непотенциальные взаимодействия обусловленные перекрытием волновых пакетов фермионов*. Эти взаимодействия имеют *контактный тип*, поэтому не допускают потенциала и,

следовательно, находятся далеко за пределами описательных способностей квантовой механики.

И наоборот, любая попытка воспроизвести принцип запрета Паули через квантовую механику сталкивается с катастрофическими несогласованностями. Это происходит из-за того факта, что единственно возможным квантовым воспроизведением является воспроизведение с помощью гамильтониана, то есть, через потенциал. В свою очередь, приписывание этим взаимодействиям потенциальной энергии, скажем, между двумя электронами гелия, как можно легко показать, подразумевает соответствующие большие отклонения от экспериментальных данных относительно частот спектральных линий.

В действительности, доказательство полной неприменимости квантовой механики к воспроизведению принципа запрета Паули является непосредственным подтверждением *отсутствия* гамильтонова характера взаимодействий, ответственных за его существование.

Предположение непотенциально-негамильтонова характера взаимодействий, лежащих в основе принципа Паули, сформулированное в оригинальной работе [4], исключает эти фундаментальные несогласованности *ab initio*. Последующее воспроизведение этих взаимодействий через изоединицу обеспечивает их аксиоматически согласованную и инвариантную версию.

В оригинальной работе [4] было также установлено, что *непотенциальные взаимодействия обусловленные перекрытием волновых пакетов фермионов являются стабильными только в синглетном соединении (антипараллельные спины), так как в триплетных соединениях (антипараллельные спины) появляются силы отталкивания*. Эта черта была выведена из того свойства, что волновые пакеты двух идентичных фермионов на одном энергетическом уровне, вращающиеся один внутри другого, при антипараллельных спинах находятся "в фазе" друг с другом, в то время как волновые пакеты, вращающиеся один внутри другого, с параллельными спинами очевидно подразумевают тормозящие силы, из-за движения волновых пакетов навстречу друг другу, что приводит к возникновению силы отталкивания.. Эта черта, очевидно, находится в полном согласии с физической реальностью, например, с тем, что два электрона гелия, в основном состоянии, могут иметь только антипараллельные спины. Адронная механика просто подтвердила, что состояния с параллельными спинами является невозможным из-за высокой нестабильности.

Вышеуказанные черты были в огрубленном виде проиллюстрированы в оригинальной работе [4] с помощью "шестереночной модели", то есть соединением двух механических шестеренок, которые, как это хорошо известно, могут вращаться только с антипараллельными направлениями вращений, так как параллельные вращения подразумевали бы ломку шестереночных зубьев.

Понимание того, что антипараллельные соединения подразумевают отталкивание привело к гипотезе, что *непотенциальные взаимодействия, обусловленные перекрытием волновых пакетов идентичных фермионов в синглетном соединении, являются "сильно" притягивающими (то есть, сильными по численному значению, а не в обычном смысле сильных взаимодействий)*.

В заключение, оригинальное предложение построить адронную механику, вылилось в следующие результаты для принципа запрета Паули: 1) Неприменимость квантовой механики для научного воспроизведения принципа, из-за катастрофических несогласованностей при его воспроизведении через потенциал или гамильтониан; 2) Природа взаимодействий, ответственных за принцип, имеет контактный, непотенциально-негамильтоновский тип, обусловленный перекрытием волновых пакетов идентичных фермионов; 3) Открытие, что упомянутые непотенциальные взаимодействия являются сильно отталкивающими для триплетных соединений идентичных фермионов на одном и том же энергетическом уровне, синглетное соединение является единственно возможным состоянием; 4) Открытие, что упомянутые непотенциальные силы являются сильно притягивающими для синглетных соединений, что подтверждено расчетами для структурной модели  $\pi^0 = (\hat{e}^+, \hat{e}^-)_{\text{нм}}$ ; и 5) Предпосылки того, что с течением времени покрывающая адронная механика сможет действительно обеспечить желаемое научное воспроизведение этого принципа, а также, что особенно важно, *воспроизведение отклонений от квантовомеханических предсказаний относительно спектральных линий, которые, как это хорошо известно, существуют для всех атомов, начиная с гелия*.

Действительно фундаментальным моментом, который читатель должен иметь в виду на протяжении всего анализа, представленного в монографии, является то, что *нелинейные, нелокальные и непотенциальные взаимодействия электронов, обусловленные перекрытием волновых пакетов, имеют место при предположении, что электрические заряды частиц полностью сосредоточены в одной точке*. Другими словами, одним

из наиболее анти-научных убеждений физики 20-го века (из-за явного препятствования в развитии фундаментальных направлений) является то, что точечная структура заряда электронов допускает только локальные теории с потенциальными взаимодействиями. Такая убежденность, очевидно ориентированная на защиту старых теорий, возможна только при дополнительном предположении "точечности самого волнового пакета электрона", которое, как очевидно, является ненаучным.

За шестнадцать лет, прошедших с момента выхода оригинальной работы [4], не было никаких дополнительных исследований по принципу Паули, из-за известной академической оппозиции к рассматриваемым здесь исследованиям. В 1994 году, А.О.Е. Анималу связался со мной, чтобы попросить поддержки в его работе по приложению адронной механики к куперовской паре в сверхпроводимости, что упоминалось в предыдущем разделе. Исследования тогда были продолжены Анималу и Сантилли [11].

Адронная трактовка сверхпроводимости, по существу, дается куперовскими парами задуманными как прямое продолжение версии принципа Паули для двух электронов гелия. Действительно, непотенциальные взаимодействия при волновых перекрытиях в синглетных соединениях являются настолько сильными, что превосходят отталкивающую кулоновскую силу и формируют корреляционную связь.

Вышеуказанная концепция подтверждается вычислениями, проведенными Анималу [10], согласно которым куперовская пара имеет размер порядка боровского радиуса (около  $10^{-8}$  см). Эта концепция подтверждается также довольно твердыми экспериментальными фактами, представленными в работах [10].

Концепция куперовской пары, через изомеханическую трактовку исторического принципа Паули, не просто академический курьез, так как подразумевает довольно серьезные промышленные применения, такие как предсказание нового типа электрического тока, основанного на создании и переносе куперовских пар, а не отдельных электронов. Чтобы начать понимать практические следствия исследований представленных в этой монографии, читателю предлагается оценить драматические преимущества электрического тока, обусловленного движением куперовских пар, по сравнению с обычным током, используемым в наши дни. Куперовская пара имеет магнитный момент, который, в первом приближении, может быть проигнорирован (из-за антипараллельного соединения). Напротив, электроны имеют очень большой магнитный момент (по



стандартам элементарных частиц). Поэтому, при своем движении сквозь проводники, электрический ток испытывает электромагнитные взаимодействия с зарядовой структурой атомов, и вполне очевидно, что ток электронных пар в синглетных соединениях, с нулевыми магнитными моментами (куперовские пары) испытывает драматически меньшее сопротивление, чем тот же ток обусловленный отдельными электронами, с большими магнитными моментами, что и объясняет принцип адронной сверхпроводимости.

Возможности практического создания и переноса куперовских пар находятся сейчас в стадии промышленной разработки, и результаты будут представлены в ближайшее время.

В заключение, к середине 1990-х годов, адронная механика позволила значительные сдвиги в направлении научного воспроизведения принципа запрета Паули для атомной структуры, а также для приложения этого принципа к куперовской паре в сверхпроводимости. Однако, в то время, еще не существовало приложения к соединению валентных электронов в химии.

## Недостатки квантовой химии

Ко времени работы над статьями [7], в 1997 году, я не имел дела с химией со времен своих студенческих исследований с конца 1950-х годов. Как раз в то время, я получил неожиданный запрос химика Д.Д. Шиллады из США относительно комментариев на мою работу с А.О.Е. Анималу [11]. Я был впечатлен глубиной его химических знаний. Поэтому, я решил немедленно ответить на все многочисленные и развернутые вопросы Шиллады в работе [10b] настолько подробно, насколько мог. Таким образом, после почти сорока лет, я вновь обратился к химии.

Моя изначальная неспособность понять основные теоретические положения квантовой химии были вскоре заменены глубоким критическим анализом, который привел к выявлению явных недостатков теории, изложенных в первом разделе Главы 1.

Я не был удивлен, обнаружив, что точно таким же образом, как я забыл химию за эти 40 лет, химики также забыли физику, в сущности, за тот же период времени. Таким образом, большинство химиков оказывалось не в курсе большого числа фундаментальных разработок в физике, которые напрямую имели отношение к химии, среди которых я назову:

i) *Историческое событие в ядерной физике, которым явилось введение "новой сильной силы", из-за чрезвычайной слабости обменных, ван-дер-ваальсовских и других ядерных сил. В сущности, химия адаптировала для молекулярных структур обменные, ван-дер-ваальсовские и другие силы, чисто ядерного типа, но игнорировала их слабость, таким образом, в молекулярных связях отсутствует эквивалент сильным силам в ядерных связях. Эта сравнительная перспектива привела меня к первому критическому заключению, что квантовая химия упускает самую важную и доминантную силу в молекулярных структурах.*

ii) *Разногласие между орбитальными химическими теориями, где корреляция допускается для произвольного числа электронов, и экспериментальными данными, которые говорят о наличии корреляции только между парами электронов. Оказывается, что химики остались не информированными о различных исследованиях по корреляциям в физике элементарных частиц и сверхпроводимости. Это мотивировало мое второе критическое заключение, что квантовая химия упускает способ ограничения корреляций электронными парами, с довольно серьезными последствиями, такими как легко доказуемая возможность допустить в молекулах водорода и воды произвольное число атомов водорода.*

iii) *Отсутствие в квантовой химии контактных взаимодействий, ожидаемых при глубоких перекрытиях протяженных волновых пакетов валентных электронов, с точечными зарядами, которые необходимы в молекулярных структурах, но отсутствуют в их атомных аналогах. Это мотивировало мое третье критическое заключение, что квантовая химия была сконструирована с использованием слепого копирования квантовой механики, в виду ее известного успеха для атомных структур, но без серьезной научной оценки ее ограничений для отличающихся условий молекулярных структур. Действительно, электронные волновые пакеты в атомных структурах хорошо могут быть аппроксимированы точками, согласно относительно большим взаимным расстояниям, поэтому подразумевается применимость квантовой механики. При переходе к молекулярным связям, такие аппроксимации больше не действительны, так как, по самому своему определению, валентные связи подразумевают глубокое перекрытие волновых пакетов электронов, с соответствующим появлением нелинейных, нелокальных и непотенциальных взаимодействий, которые находятся далеко вне всяких мечтаний о научной трактовке через квантовую механику.*

iv) *Деформации основных аксиом квантовой механики и квантовой*

химии, предпринятые недавно в химии, для достижения более точных воспроизведений молекулярных данных, такие как гауссовские экранирования кулоновского закона, вариационные методы и другие подходы, которые выходят за рамки упомянутых аксиом по множеству причин. Закон Кулона является хорошо известным фундаментальным инвариантом квантовой механики и квантовой химии, то есть, он не меняет своей структуры относительно всех бесконечно возможных преобразований допускаемых теорией, то есть, унитарных преобразований типа  $U \times U^\dagger = U^\dagger \times U = I$ .

Любая модификация кулоновского закона может быть, следовательно, достигнута только через *неунитарные* преобразования  $U \times U^\dagger \neq I$ . В свою очередь, неунитарные отображения подразумевают выход за пределы аксиом квантовых теорий, и физических, и химических. Поэтому, все гауссовские и другие экранирующие модификации основного закона Кулона находятся вне рамок основных аксиом квантовой механики. В любом случае, эти модификации подразумевают неприменимость самого понятия "кванта энергии", так как последний требует стабильных энергетических уровней, которые запрещаются экранированными кулоновскими законами. Схожим образом, для того чтобы притязать, на истинных научно-неполитических основаниях, на то, чтобы вариационная теория действительно относилась к квантовой механике, следует доказать, что получающиеся волновые функции действительно являются точными решениями чисто квантовомеханических кулоновских уравнений, без *ad hoc* модификаций. Легко видеть, что это не тот случай.

В качестве иллюстрации, для  $H_2^+$  мы имеем следующее: 1) известное кулоновское квантовое уравнение неспособно точно воспроизвести энергию связи; 2) вариационный метод действительно достигает точного воспроизведения упомянутой энергии связи; поэтому 3) волновая функция вариационного метода не может быть точным решением кулоновского уравнения. Эти моменты мотивируют мое дополнительное критическое замечание, что квантовая химия находится в довольно сомнительном состоянии, когда основные аксиомы теории давно не воспринимаются как необходимое условие для достижения осмысленного воспроизведения экспериментальных данных; хотя химическая теория все еще прозывается "квантовой" из очевидных политических соображений. Говоря другими словами, под моим критическим исследованием, квантовая химия 20-го века не имеет определения и трактовки *неунитарных отклонений* от строго унитарной квантовой механики, необходимость которых

неопровержимо установлена *ad hoc* модификациями ее основных законов и принципов для достижения осмысленных воспроизведений.

v) Довольно серьезные несогласованности подразумеваются отсутствием ограничений корреляций электронными парами, такие как предсказание квантовой электродинамикой, что все молекулы, под действием внешнего магнитного поля, приобретают магнитную полярность, поэтому являются ферромагнетиками, в драматическом разногласии с экспериментальными данными (см. Раздел 1 Главы 1 этой монографии и работу [11]).

vi) Невозможность для квантовой механики обеспечить "какое-нибудь" согласованное теоретическое воспроизведение необратимых процессов, таких как химические реакции. Это имеет место из-за очевидного обратимого характера самой структуры теории, между тем существует необходимость в структурно необратимой теории, для описания необратимых процессов. Эта ситуация является результатом отсутствия распространения в химии последних физических достижений по идентификации источника необратимости согласно историческому учению Лагранжа и Гамильтона, отмеченным ранее.

vii) Неспособность квантовой химии обеспечить серьезные воспроизведения биологических систем. Как хорошо известно, квантовая механика применима только для идеально жестких, идеально консервативных и идеально обратимых, и поэтому неразрушаемых, систем, таких как атом водорода или кристалл. Ученые, которые верят, что такая теория может эффективно воспроизводить биологические системы, переходят научные границы. Действительно, строгое применение квантовой механики подразумевает, что наше тело должно быть идеально жестким, идеально консервативным и идеально обратимым, чем достигается статус Бог. Существует предел в широко распространенном желании сохранить старые теории любой ценой, за этим пределом начинается извращение науки. Таковым является случай веры в полную применимость квантовой механики и квантовой химии в биологии.

## Конструкция адронной химии

После критических выводов о том, что квантовая химия нуждается в большом количестве ревизий, вследствие практически двух десятилетий работы над адронной механикой, для меня было нетрудно предложить Шиллади лифтинг квантовой химии в неунитарную формулировку, с

прогрессивными уровнями сложности. Следуя основным чертам адронной механики, я предложил конструкцию *адронной химии* со следующими основными ветвями:

1) *Изохимия* (характеризуется *изоматематикой*, в которой обобщенная единица эрмитова) для нового, аксиоматически согласованного воспроизведения замкнуто-изолированных систем, с линейными и нелинейными, локальными и нелокальными, а также потенциальными и непотенциальными внутренними силами, таких как молекулярные структуры. В этом случае, обычные далекодействующие, потенциальные взаимодействия могут быть представлены с помощью гамильтониана  $H = p^2/2m + V$ , в то время как контактные непотенциальные взаимодействия, обусловленные глубоким волновым перекрытием валентных электронов, воспроизводятся с помощью изотопического элемента  $T$  (или, эквивалентно, изоединицей  $\hat{I} = 1/T$ ). Совместимость между обычной, унитарной, атомной структурой, и расширенной неунитарной валентной структурой (которая является критической для сохранения понятия кванта энергии, при своем применении) легко достигается наложением требования, чтобы обобщенная единица быстро переходила в обычную квантовую единицу на расстояниях больших 1 фм. Основные изошредингеровские уравнения могут быть получены через неунитарное преобразование обычных уравнений (2), которые принимаются характеризруемыми обобщенной единицей,

$$U \times U^\dagger = \hat{I} \neq I, \quad (27a)$$

$$\begin{aligned} U \times H \times |\psi\rangle &= (U \times H \times U^\dagger) \times (U \times U^\dagger)^{-1} \times (U \times |\psi\rangle) = \\ &= \hat{H} \times \hat{I} \times |\hat{\psi}\rangle = U \times E \times |\psi\rangle = E \times |\hat{\psi}\rangle, \end{aligned} \quad (27b)$$

$$\hat{H} = U \times H \times U^\dagger, \quad |\hat{\psi}\rangle = U \times |\psi\rangle, \quad \hat{I} = (U \times U^\dagger)^{-1}. \quad (27c)$$

Изошредингеровские уравнения могут быть тогда записаны для  $\hbar = 1$  (см. Главу 1)

$$\begin{aligned} \hat{i} \hat{\times} \hat{\partial}_i |\hat{\psi}\rangle &= \hat{H} \hat{\times} |\hat{\psi}\rangle = \hat{H}(r, p) \times \hat{T}(t, r, p, \hat{\psi}, \dots) \times |\hat{\psi}\rangle = \\ &= \hat{E} \hat{\times} |\hat{\psi}\rangle = E \times |\hat{\psi}\rangle, \end{aligned} \quad (28a)$$

$$\hat{p}_k \hat{\times} |\hat{\psi}\rangle = \hat{p}_k \times \hat{T} \times |\hat{\psi}\rangle = -i \times \hat{\partial}_k |\hat{\psi}\rangle = -i \hat{T}_k^i \times \partial_i |\hat{\psi}\rangle, \quad (28b)$$

с эквивалентными сопряженными уравнениями, пропущенными здесь. Отметим способность вышезаписанных изоуравнений воспроизводить все,

бесконечно возможные, потенциальные взаимодействия, также как и нелинейные, нелокальные и непотенциальные силы. Отметим также, что в этом случае, основным произведением является  $A \hat{\times} B = A \times \hat{I} \times B$  с изоединицей  $\hat{I}$ ,  $\hat{I} \hat{\times} A = A \hat{\times} \hat{I} = A$ , для которой обычное произведение " $2 \times 2$ " более не равно 4, но довольно более общей интегродифференциальной величине, зависящей от выбора изоединицы  $\hat{I}$ . Это иллюстрирует отклонение изоматематики от обычной математики.

II) *Генохимия (характеризуется расширенной геноматематикой с неэрмитовыми геноединицами)*, для нового, аксиоматически согласованного описания необратимых химических процессов, с неотбрасываемыми взаимодействиями, как ожидается в химических реакциях. В этом случае, все обычные, обратимые, потенциальные взаимодействия воспроизводятся гамильтонианом, в то время как необратимость появляется из-за неэрмитового характера лагранжевых и гамильтоновых "внешних членов", воспроизводимых действительной и несимметричной матрицей  $Q$  для движения вперед во времени, и сопряженной матрицей  $P = Q^\dagger$  для движения назад во времени. В этом случае, основные уравнения для обоих направлений времени могут быть получены через два различных неунитарных преобразования, по одному на каждое упорядоченное произведение направо и налево

$$U \times U^\dagger \neq I, \quad W \times W^\dagger \neq I, \quad U \times W^\dagger = \hat{I}^>, \quad W \times U^\dagger = \hat{I}^<, \quad (29a)$$

$$U \times H \times |\psi\rangle = (U \times H \times W^\dagger) \times (U \times W^\dagger)^{-1} \times (U \times |\psi\rangle) = \hat{H}^> \times Q \times |\hat{\psi}^>\rangle, \quad (29b)$$

$$\langle \psi| \times H \times W = \langle \psi| \times W \times (W \times U^\dagger)^{-1} \times (U^\dagger \times H \times W) = \langle \hat{\psi}^<| \times P \times \hat{H}^<, \quad (29c)$$

$$\hat{H}^> = U \times H \times W^\dagger, \quad Q = (U \times W^\dagger)^{-1}, \quad |\hat{\psi}^>\rangle = U \times |\psi\rangle, \quad (29d)$$

и могут быть записаны, для направления времени вперед, в виде:

$$\hat{H}^> > |\hat{\psi}^>\rangle = \hat{H}^> \times \hat{Q} \times |\hat{\psi}^>\rangle = \hat{E}^> > |\hat{\psi}^>\rangle, \quad (30a)$$

$$\hat{p}_k^> > |\hat{\psi}^>\rangle = \hat{p}_k^> \times \hat{Q} \times |\hat{\psi}^>\rangle = -i \times \partial_k^> |\hat{\psi}^>\rangle = -i \hat{Q}_k^i \times \partial_i |\hat{\psi}^>\rangle, \quad (30b)$$

с сопряженным выражением для обратного направления времени. Отметим: структурную необратимость теории, то есть, необратимость для всех обратимых гамильтонианов; необходимость, в этом случае, двух произведений, одного упорядоченного направо и одного упорядоченного

налево,  $A > B = A \times \hat{Q} \times B$  и  $A < B = A \times \hat{P} \times B \neq A > B$ , с соответствующими геноединицами  $\hat{I}^> = 1/\hat{Q}$  и  $\hat{I}^< = 1/\hat{P}$ ; и тот факт, что обычное произведение " $2 \times 2$ " не только производит обобщенные значения, но также различные значения для различных упорядочиваний, так как, в общем,  $2 < 2 \neq 2 > 2$ .

III) Гиперхимия (характеризуется еще более расширенной гиперматематикой, с гиперединицами характеризуемыми упорядоченными наборами неэрмитовых операторов), для нового, аксиоматически согласованного воспроизведения биологических структур, с многозначными передупуемыми внутренними процессами. Основные уравнения могут быть получены через многозначное расширение двух неунитарных преобразований генохимии и могут быть записаны, для движения вперед во времени, как

$$\begin{aligned} \{U\} \times \{U^\dagger\} \neq I, \quad \{W\} \times \{W^\dagger\} \neq I, \quad \{U\} \times \{W^\dagger\} = \{\hat{I}^>\}, \\ \{W\} \times \{U^\dagger\} = \{\hat{I}^<\}, \quad \{\hat{H}^>\} > |\hat{\psi}^>\} = \{E\} \times |\hat{\psi}^>\}, \end{aligned} \quad (31a)$$

$$\{\hat{p}_k^>\} > |\hat{\psi}^>\} = -i \times \{\partial_k^>\} |\hat{\psi}^>\}. \quad (31b)$$

В последнем случае, произведение " $2 \times 2$ " производит два различных набора значений, один набор – для движения вперед во времени, и другой – для движения назад. Это предоставляет интригующие возможности, например, возможность понимания кода ДНК через числовую теорию, чья основная единица может быть счетным набором обобщенных значений.

## Основные свойства адронной химии

Как и в случае адронной механики, изотопическая ветвь адронной химии удовлетворяет, по концепции и конструкции, всем обычным законам и принципам квантовой химии, только реализует их расширенным образом.

Кроме того, также по концепции и конструкции, в их явных реализациях, адронная и квантовая химии совпадают всюду, за исключением новых эффектов, обусловленных корреляцией валентных электронов на близких расстояниях.

Наконец, следует отметить, что квантовая и адронная химии совпадают на абстрактном, нереализуемом уровне, опять-таки по концепции и конструкции, и адронная химия обеспечивает просто "новые реализации" абстрактных аксиом квантовой химии. Следовательно, критика в

отношении аксиоматической структуры адронной химии "есть" критика в отношении аксиоматической структуры квантовой химии.

Как ясная иллюстрация, аксиоматическая структура квантовомеханического и квантовохимического уравнения на собственные значения является *правым, ассоциативным модулем* " $H \times |\psi\rangle$ " на гильбертовом пространстве состояний  $|\psi\rangle$ . Который, в по существу, состоит в умножении справа оператора  $H$  на состояние  $|\psi\rangle$ , где ассоциативный характер выражается свойством  $H_1 \times (H_2 \times |\psi\rangle) = (H_1 \times H_2) \times |\psi\rangle = H_1 \times H_2 \times |\psi\rangle$ .

Адронная химия сохраняет вышеуказанную аксиоматическую структуру уравнения на собственные значения. Действительно, мы также имеем *правый ассоциативный модуль*  $H \hat{\times} |\hat{\psi}\rangle (= H \times \hat{T} \times |\hat{\psi}\rangle)$ ,  $\hat{T}$  – фиксированно, в котором ассоциативность также характеризуется свойствами  $H_1 \hat{\times} (H_2 \hat{\times} |\hat{\psi}\rangle) = (H_1 \hat{\times} H_2) \hat{\times} |\hat{\psi}\rangle = H_1 \hat{\times} H_2 \hat{\times} |\hat{\psi}\rangle$ . В частности,  $\hat{T}$  является положительно определенным, как мы увидим. Следовательно, на абстрактном, не реализуемом уровне, все различия между " $H \times |\psi\rangle$ " и " $H \hat{\times} |\hat{\psi}\rangle$ " исчезают, поэтому подразумевается абстрактное тождество между квантовой и адронной химией.

## Практическое конструирование изо-, гено- и гиперхимических моделей

Для читателя, заинтересованного в изучении новой химии, важно знать, что *новые математики не являются необходимыми для практических приложений адронной химии*. Действительно, они необходимы только для доказательства аксиоматической согласованности и инвариантности новой химии, чья проверка, однажды проведенная для общего случая, не требует повторений для каждого приложения.

*Виртуальная бесконечность количества специфичных изо-, гено- и гипер-моделей может быть сконструирована очень просто, нужно только подвергнуть обычные квантовохимические модели неунитарным преобразованиям согласно динамическим уравнениям (28), (30a), и (31), с дополнительными условиями, чтобы упомянутые преобразования являлись неунитарными только в области валентной связи, в то время как в остальном пространстве они были унитарными (условие полной применимости квантовой химии вне валентных связей).*

Фундаментальной иллюстрацией изохимии является неунитарное преобразование, необходимое для воспроизведения взаимодействий, обуслов-



ленных глубоким перекрытием протяженных волновых пакетов двух валентных электронов, с точечными зарядами, при синглетных соединениях, которые могут быть записаны при предположении, что валентная связь ограничена расстояниями порядка 1 фм (более правильные трактовки даны ниже),

$$U \times U^\dagger = \begin{cases} I & \text{for } r > 1 \text{ fm,} \\ e^{\hat{\Psi}/\Psi \int d^3r \hat{\Psi}_\uparrow(r) \times \hat{\Psi}_\downarrow(r)} & \text{for } r \leq 1 \text{ fm,} \end{cases} \quad (32)$$

где  $\hat{\Psi}$  воспроизводит адронную волновую функцию валентной электронной пары;  $\Psi$  воспроизводит обычную квантовомеханическую волновую функцию; обобщенная единица (32) реализует условие тождественности с квантовой химией при  $r > 1$  фм; нелинейные взаимодействия явно выражены присутствием волновых функций в экспоненте; и все важные нелокальные взаимодействия воспроизводятся интегралом. Как можно видеть, на достаточно больших взаимных расстояниях между валентными электронами, интеграл в экспоненте тождественно равен нулю, преобразование является унитарным всюду и адронная химия тождественно переходит в квантовую химию на всех расстояниях.

В литературе по адронной механике, существует множество дополнительных приложений и реализаций обобщенных единиц, в зависимости от рассматриваемого случая. <sup>6</sup> Гено- и гипер-модели могут быть сконструированы аналогично и будут представлены в последующих работах.

<sup>6</sup> Еще одним простым примером является *неунитарное преобразование допускающее воспроизведение реального, протяженного, несферического и деформируемого зарядового распределения для адронов, например, сфероидально эллипсоидального типа*  $U \times U^\dagger = \hat{I} = \text{Diag.}(n_1^2, n_2^2, n_3^2, n_4^2)$ , где  $n_k$  – функции различных локальных величин, явно характеризующие полуоси эллипсоида, и  $n_4$  воспроизводит плотность рассматриваемого адрона. Воспроизведение более общих форм возможно с помощью недиагональных изоединиц [9]. Заметим, что воспроизведение адронов как "протяженных", как печально известно, невозможно для математической структуры квантовой механики, не говоря уже о воспроизведении "несферических" и "деформируемых" форм, чье воспроизведение подразумевало бы нарушение основ квантовой механики, начиная с ее фундаментальной вращательной симметрии. Как можно видеть, эти воспроизведения становятся элементарными для покрывающей адронной механики. Одним из немедленных и непосредственных приложений и экспериментальных подтверждений является *достижение "точного" воспроизведения "всех" полных ядерных магнитных моментов*, которые, как отмечено в сноске 1, невозможны для квантовой механики. Действительно,

Для читателя важно также знать, что *изохимия допускает, как частные случаи, все модификации кулоновского закона, используемые в химии*. Например, все, бесконечно возможные экранирования кулоновского закона легко получаемы через вышеуказанное неунитарное правило, как иллюстрируется через экранирование с одной гауссовской функцией:

$$U \times U = Ae^{Br}, \quad U(1/r)U^\dagger = Ae^{Br}/r, \quad A, B = \text{const.} \quad (33)$$

Подобным же образом, легко доказать, что волновые функции вариационных методов, которые не могут удовлетворять немодифицированным квантовым уравнениям, по причинам указанным ранее, действительно удовлетворяют частному случаю изохимических уравнений.

В заключение, мы можем сказать, что главные элементы адронной химии появляющиеся из неунитарных преобразований квантовых структур, производимые гауссовскими экранированиями, вариационными методами и некоторыми другими подходами, уже существуют в технической литературе.

Их истинно неунитарная структура не была выявлена в традиционной химической литературе по множеству причин. Основной функцией адронной химии является идентификация таких неунитарных структур, конструирование наиболее общего класса моделей, с такими неунитарными структурами, и обеспечение формулировки, которая аксиоматически согласована *per se*, и в то же время совместима с обычными квантовыми законами.

Таким образом, адронная химия достигает "непосредственной универсальности" в воспроизведении всех возможных неунитарных структур, в то же время достигая инвариантности, то есть, предсказания тех

---

мы просто имеем дело с явным воспроизведением исторической гипотезы, что протоны и нейтроны могут подвергаться деформациям формы под действием сильных взаимодействий ядерной структуры. В свою очередь, такие (в общем случае малые) деформации подразумевают деформации внутренних, магнитных моментов (называемые "мутациями" по причинам относящимся к лежащим в основе алгебрам [1]), которые, уже в свою очередь, позволяют точные воспроизведения магнитных моментов всех ядер. Заметим, что мы обращаемся к деформациям формы, без какого-либо изменения внутреннего момента импульса (спина) протонов и нейтронов. Воспроизведение магнитных моментов достигается при полной совместимости с обычными квантовомеханическими законами, такими как принцип запрета Паули (см. Том III работы [9] и цитируемую там литературу).

же численных значений для той же величины, при тех же условиях, но при различных значениях времени.

## Главное предположение адронной химии: корреляционная связь валентных электронных пар в "изоэлектрониум"

Как отмечено ранее, молекулярные модели, построенные на основе квантовой химии в 20-м веке, страдают действительно серьезными недостатками, или явными несогласованностями, такими как: отсутствие силы достаточно "сильной" для расчета действительной длины молекулярных связей; допущение произвольного числа атомов водорода в молекуле водорода и воды; недостаточно точное воспроизведение молекулярных энергий связи и других молекулярных характеристик; предсказание ферромагнетизма всех молекул; и другие серьезные пороки.

Изначальной мотивацией моего интереса к конструированию адронной химии было достигнуть разрешения вышеперечисленных недостатков, в форме совместимой с экспериментальными данными.

Изначальным средством для достижения этой цели является принятие адронной химии, согласно которой, *пары валентных электронов от различных атомов коррелируют и связываются друг с другом в синглетное квазичастичное состояние, которое мы называем изоэлектрониумом.*

Название изоэлектрониума было выбрано, во первых, так как "электрониум" понимается как дополнение к "позитрониуму", что подчеркивает, что составляющими являются электроны, и, во вторых, чтобы подчеркнуть, что состояние предсказывается изохимией. Приставка "изо", следовательно, показывает, что взаимодействия ответственные за корреляционную связь являются отталкивающими кулоновскими силами, плюс непотенциальные силы притяжения, обусловленные волновыми перекрытиями в синглетных соединениях. Более технически, приставка "изо" отмечает тот факт, что составляющими являются *не* обычные электроны  $e^-$ , но *изоэлектроны*  $\hat{e}^-$ , то есть, электроны с новыми перенормировками, обусловленными новыми взаимодействиями.

Важно знать, что изоэлектрониум является следующим шагом в изучении принципа запрета Паули через адронную механику. Как отмечено ранее, адронная механика уже позволила многозначительное количественное воспроизведение принципа Паули для двух электронов гелия

в основном состоянии. Впоследствии, адронная трактовка куперовских пар оказалась непосредственной реализацией принципа Паули для той же электронной пары гелия, только в свободном для перемещения состоянии, как часть электрического тока. В частности, размер куперовской пары оказался того же порядка величины, что и боровский радиус.

Изоэлектрониум является еще одним проявлением принципа запрета Паули, выраженного для электронных пар двух различных атомов. Во первых, как мы увидим, неунитарное преобразование (32) вводит новую контактную *непотенциальную* силу между парами валентных электронов, которая является настолько притягивающей, что превосходит отталкивающую кулоновскую силу. Это дает первую конкретную и явную силу *притяжения* между валентными электронами, насколько мне известно, так как среднее от всех остальных сил, допускаемых квантовой механикой, в полуклассическом приближении, равно нулю, как мы увидим в дальнейшем. Новая непотенциальная сила оказывается "сильной молекулярной силой", которая отсутствует в обычных молекулярных моделях, как отмечалось ранее.

Очевидно, что понятие изоэлектрониума строго ограничивает корреляции валентными электронными *парами*, поэтому объясняет *ab initio* невозможность более чем двух H-атомов в молекулах водорода и воды.

Достижение адронной химией существенно более точного воспроизведения молекулярных характеристик является очевидным уже из этих вводных строк. Напомним, что молекулярные модели, основанные на гауссовских экранированиях кулоновского закона, уже достигли значительного улучшения воспроизведения молекулярных характеристик. Но эти модели являются частными случаями более широкого класса неунитарных экранирований допускаемых адронной химией. Следовательно, желаемая точность в воспроизведении адронной химией экспериментальных данных сводится к правильному выбору основного неунитарного преобразования.

Разрешение других недостатков современных молекулярных моделей будет обсуждено в монографии.

Следует сделать несколько комментариев в связи с открытой проблемой *среднего времени жизни изоэлектрониума*, относительно которой существуют кажущиеся различными точки зрения. Важно понимать, что эти различия являются различиями в предположениях, а не в структуре.

Одна группа коллег предполагает, что изоэлектрониум является сильно нестабильной квазичастицей, со средним временем жизни порядка

$10^{-16}$  сек. Я думаю, что эта точка зрения корректна, при лежащем в ее основе главном предположении, ограничении радиуса коррелирующей связи около  $10^{-13}$  см.

Однако, читателю следует рассматривать и альтернативную точку зрения предлагаемую принципом запрета Паули, согласно которой, среднее время жизни изоэлектрониума должно быть равным времени, в течении которого, применим принцип Паули. При предположении, что рассматриваемая здесь двухатомная молекула является невозбужденной, то есть, в своем основном состоянии, то логично предположить, что два валентных электрона изоэлектрониума находятся на одном энергетическом уровне. В этом случае, принцип запрета Паули должен действовать в течении всего времени жизни невозбужденного основного состояния молекулы. При этом предположении, *изоэлектрониум имеет бесконечное время жизни.*

*Mutatis mutandae*, предположение, что два валентных электрона находятся на одном и том же невозбужденном уровне, плюс предположение конечного времени жизни изоэлектрониума, непосредственно подразумевало бы нарушение принципа запрета Паули, очевидно потому, что эти два предположения допускали бы электроны на одном и том же энергетическом уровне с одинаковыми характеристиками.

Как можно видеть, предположение, что для молекулы водорода, изоэлектрониум является выражением принципа запрета Паули, с бесконечным временем жизни, при корреляционной длине связи порядка размера орбитали, является совместимым с предположением, что изоэлектрониум имеет небольшое среднее время жизни, когда корреляционная длина связи ограничена примерно одним ферми.

## Экспериментальные подтверждения адронной химии

После получения главных структурных элементов адронной химии, последующие шаги были довольно естественными. Я знал, из изучения шаровой молнии в высшей школе, что электроны могут связываться друг с другом, несмотря на кулоновское отталкивание. К 1978 г., я разработал основные элементы их теоретического воспроизведения, включая неунитарный характер теории и появление сильной связывающей силы [4]. Эти идеи нашли свои приложения и экспериментальные подтверждения в различных исследованиях, включая конструкцию изосверхпроводимости А.О.Е. Анималу и новую интерпретацию куперовской пары [10]. На

Sanibel Symposium 1996 года, я представил неопубликованную работу по естественному расширению этих исследований до новой модели молекулярных связей, основанной на синглетном соединении пар валентных электронов.

Трудной частью исследования было доказать, что адронная химия может воспроизводить экспериментальные данные более точно, чем квантовая механика. Эта задача была решена Сантилли и Шиллади, как показано в Главах 4 и 5.

Оглядываясь назад, согласованность адронной химии с экспериментальными данными оказалась больше моих оптимистических ожиданий, так как:

- *Адронная химия разрешила все известные мне недостатки и несогласованности квантовой химии;*
- *Адронная химия достигла, из недеформированных принципов, воспроизведений энергий связи, электрического и магнитного моментов и других молекулярных характеристик, с точностью до нескольких значащих цифр;*
- *Адронная химия позволила новые промышленные приложения, которые немислимы для квантовой химии (см. Главу 7).*

И самое главное, я уверен, что эти успехи адронной химии выявили совершенно очевидную необходимость учитывать недостатки квантовой механики и искать расширенную теорию.

## **Предложенные эксперименты**

Адронная химия находится в своем зачаточном состоянии, и очень многое еще должно быть сделано. В этой монографии, я приложил неподдельное усилие представить правдоподобные альтернативы по различным вопросам не нашедшим еще ответа. В частности, я пытался представлять различные точки зрения без принятия окончательной, той или иной, позиции.

Среди множества интригующих проблем, остающихся до сих пор неразрешенными, я отмечу здесь *открытую проблему среднего времени жизни изоэлектроннума*, обсужденную выше. Мое личное мнение заключается

в том, что окончательное разрешение этой проблемы *не может* быть достигнуто только на теоретической основе и требует проведения всесторонних экспериментов по фотоэффекту с газом водорода, как обсуждается в замечаниях в Главах 4 и 5. Измерения процентного содержания выбитых электронных пар по отношению к отдельным электронам обеспечило бы численное значение стабильности изоэлектронииума, конечно, только если составляющие находятся на близком расстоянии друг к другу.

Я предполагаю, что читатель знаком с подобными экспериментами по фотоэффекту, которые регистрируют выбивание электронных пар, хотя и для гелия, а не для водорода. Эти эксперименты подтверждают, что глубокая корреляция электронных пар в синглетном соединении, без сомнения, имеет место в молекулярных структурах, так как это уже подтверждается для двух электронов гелия; спаренное состояние удерживается в куперовской паре в сверхпроводимости; соответственно, спаренное состояние имеет место в соединении валентных электронов в молекулярных структурах; и, наконец, связанные электроны в шаровой молнии; а также в различных других условиях.

Я должен подчеркнуть, что правильно поставленный *предложенный эксперимент, должен использовать фотоны с различными частотами, начиная от частот разрушающих молекулу водорода и переходя к характерным частотам изоэлектронииума, и, конечно, включать частоту дезинтеграции изоэлектронииума.*

Для достижения действительно окончательного разрешения вопроса о среднем времени жизни изоэлектронииума, подобные эксперименты должны быть дополнительно проведены и для других молекул. Действительно, вполне допустимо, что рассматриваемое среднее время жизни может меняться в зависимости от типа и размера молекул.

## **Приложение адронной химии к новым чистым энергиям и топливам**

Самой важной моей мотивацией для конструирования адронной химии была той самой, которая служила основанием для всех рассмотренных здесь исследований: необходимость создания новых чистых энергий и топлив, в связи со все нарастающими тревожными проблемами окружающей среды, обусловленными диспропорциональным сжиганием

около 74 миллионов баррелей сырой нефти в день. Результат моих исследований в этих промышленных приложениях адронной механики и химии изложен в Главе 7.

Читатель должен видеть, в свете всего вышесказанного, реальные недостатки квантовой механики и квантовой химии в связи с огромными социальными проблемами и, в частности, неспособности современной модели молекулярных структур предсказать действительно *новые* методы по созданию приемлемых для окружающей среды новых энергий и топлив, с ценой конкурентоспособной с ценами природных топлив.

Читатель должен также заметить, почему появление новой изохимической модели молекулярных структур оказывается весьма уместным: предсказание и количественная трактовка принципиально нового метода для высоко эффективного разделения воды и других жидкостей, или, более обще, утилизация энергии молекул жидкости, в то время как параллельно производится топливо, которое чище и дешевле бензина.

Кульминация исследования дается недостаточностью изохимической молекулярной модели самой по себе и введением новых *химических соединений*, впервые, насколько я знаю, с открытия валентности в 1800 годах, которые я пробно назвал *магнекулами*, и/или димерами, и/или отдельными атомами с новой сильно притягивающей внутренней связью, обусловленной поляризацией орбит периферийных атомных электронов. Магнекулы являются идентифицируемыми через явные пики в хроматографических приборах, которые остаются нераспознаваемыми после самого тщательного поиска среди известных молекул, в то же время не дают инфракрасного сигнала в газообразном состоянии, или ультрафиолетового в жидком, в отличии от их отдельных составляющих.

Вполне предсказуемо, что открытие новых химических соединений порождает множество интригующих открытых проблем, включая новые способы хранения энергии в молекулах газа и жидкости, новые процессы сгорания, новые аналитические методы для изучения магнекул и т.д.



В заключение, как это обычно и бывает в научных исследованиях, разрешение адронной химией основных открытых проблем квантовой химии привело не к достижению финальной стадии, а наоборот, создало множество новых интригующих проблем для будущих дальнейших исследований.

Ruggero Maria Santilli  
The Institute For Basic Research  
Palm Harbor, Florida, USA  
November 10, 2000

# Литература

- [1] Santilli, R.M.: Nuovo Cimento **51**, 570 (1967).
- [2] Santilli, R.M.: Suppl. Nuovo Cimento **6**, 1225 (1968).
- [3] Santilli, R.M.: Meccanica **1**, 3 (1968).
- [4] Santilli, R.M.: Hadronic J. **1**, 224, 574 and 1267 (1978).
- [5] Myung, H.C. and Santilli, R.M.: Hadronic J. **5**, 1277 and 1367 (1983).
- [6] Santilli, R.M.: Rendiconti Circolo Matematico Palermo, Suppl. **42**, 7 (1996).
- [7] Santilli, R.M.: Found. Phys. **27**, 625 and 1159 (1997).
- [8] Santilli, R.M.: Hyperfine Interactions **109**, 63 (1997).
- [9] Santilli, R.M.: *Elements of Hadronic Mechanics*, Vols. **I** and **II** (1995), and **III** (in preparation), Ukraine Academy of Sciences, Kiev.
- [10] Animalu, A.O.E.: Hadronic J. **17**, 379 (1994).
- [11] Animalu, A.O.E. and Santilli, R.M.: Int. J. Quantum Chemistry **29**, 175 (1995).
- [12] Santilli, R.M.: Hadronic J. **21**, 789 (1998).
- [13] Santilli, R.M.: J. New Energy **4**, issue 1 (1999).
- [14] Santilli, R.M.: Foundations of Theoretical Mechanics, Vol. **I** (1978) and **II** (1978), Springer-Verlag, New York, Heidelberg.
- [15] Aringazin, A.K.: Hadronic J. **23**, 57 (2000).

- [16] Santilli, R.M. and Shillady, D.D.: Int. J. Hydrogen Energy, **24**, 943 (1999). Santilli, R.M. and Shillady, D.D.: Int. J. Hydrogen Energy, **24**, 173 (2000).

## Благодарности

Автор благодарен профессору Т. Неят Везироглу (T. Nejat Veziroglu) Университета Майами, Корал Гэйблс, Флорида, главному редактору журнала *International Journal of Hydrogen Energy* (Elsevier Science, Oxford, England), его редакционную коллегию и рецензентов за редакционную работу и обзор двух первых работ в области адронной химии, которые представляют рождение новой дисциплины (см. работы [16] в Предисловии).

Особые благодарности проф. М. ван дер Мерву (M. van der Merwe), главному редактору журналов *Foundations of Physics* и *Foundations of Physics Letters*, его редакционной коллегии и рецензентам за публикацию последней серии работ по основам адронной механики, без которой эта монография не вышла бы в свет (см. работы [7] в Предисловии).

Также автор благодарен профессору Д.В. Алувалиа (D.V. Ahluwalia), редактору журналов *International Journal of Modern Physics A* и *B* и *Modern Physics Letters*, за отличную редакцию дополнительных работ, обеспечивающих решающие основания для новой дисциплины (см. ссылки в Главе 2).

Дополнительные благодарности проф. Д.Д. Шиллади (D.D. Shillady), А.К. Арынгазину и М.Г. Кучеренко за фундаментальный вклад в приложения и проверки адронной химии, без которого эта монография не могла бы быть написана.

Особые благодарности также г-ну Леону Тоупсу (Leon Toups), Президенту корпорации *USMagneGas, Inc.*, г-ну Джону Стэнтону (John Stanton), президенту корпорации *EarthFirst Technologies, Inc.*, Ларго, Флорида, и всем сотрудникам этих компаний за неоценимую финансовую и личную поддержку в проведении экспериментов, необходимых для исследования новых химических веществ — магнекул газа — предсказанных адронной химией.

Дополнительные особые благодарности г-ну Дж. Хирски (J. Herskее), старшему вице-президенту, г-ну Томасу МакГи (Thomas McGee), старшему вице-президенту, и г-ну Кеннету Л. Пурзицки (Kenneth L. Purzyski), директору по парфюмерии корпорации *Givaudan-Roure Corporation*, Teaneck, New Jersey, за предоставление экземпляров парфюмерных масел, которые были использованы для создания и детектирования магнекул в жидкостях. Дополнительные благодарности г-ну Конраду Лерчу (Konrad Lerch), директору лаборатории *Givaudan-Roure Research*

*Laboratory*, Dubendorf, Switzerland, за обеспечение первых фотографических свидетельств магнекул в жидкостях (Рис. 8.19).

Особые благодарности автор приносит различным аналитическим лабораториям, таким как *National Technical Systems*, McClellan Air Force Base, Sacramento, California; *Pinellas County Forensic Laboratory*, Largo, Florida; *Givaudan-Roure Research Laboratory*, Dubendorf, Switzerland; *Marine Science Laboratory*, University of South Florida in St. Petersburg; *Chemistry Laboratory of Florida International University*, Miami; *SGS U.S. Testing Company*, Fairfield, New Jersey; *Spectra Laboratory*, Largo, Florida; и другим лабораториям.

Автор также благодарен г-ну Дэвиду Гамильтону (David Hamilton), Департамент Энергетики США, профессорам А.О.Е. Анималу (A.O.E. Animalu) и Ж.В. Кадейшвили (J.V. Kadeisvili), *Institute for Basic Research*, Palm Harbor, Florida, за критический обзор рукописи и многочисленные неоценимые предложения по улучшению и разъяснениям.

Благодарности также г-же Д. Цукерман (D. Zuckerman) за долгие часы, потраченные на лингвистическую правку монографии, и сотрудникам Института Фундаментальных Исследований Карагандинского Государственного Университета, Казахстан, под руководством директора А.К. Арынгазина за обеспечение ЛАТ<sub>Е</sub>Х версии монографии и техническую редакцию.

Благодарности также г-же Сабин Фрайзем (Sabine Freisem) и ее коллегам по редакционному офису издательства *Kluwer Academic Publishers*, Dordrecht, The Netherlands, за безупречный редакционный обзор и окончательную подготовку монографии к публикации.

Автор конечно же сам несет ответственность за содержание этой монографии, в частности, ввиду многочисленных добавлений и правок в окончательном варианте монографии.

# Глава 1

## Введение

### 1.1 Аксиоматическая согласованность квантовой химии

Одной из самых ярких характеристик *квантовой химии* (см., например, традиционные книги [1]) это ее великолепная аксиоматическая согласованность, когда она выражена через аксиомы, лежащие в основе *квантовой механики*.

Такая согласованность существует благодаря тому факту, что фундаментальная временная гейзенберговская эволюция, в ее конечной форме, характеризует *группу Ли унитарных преобразований* на гильбертовом пространстве  $\mathcal{H}$ , с состояниями  $|\psi\rangle$  и внутренним произведением  $\langle\phi|\times|\psi\rangle$  над полем  $\mathbb{C}(c, +, \times)$  комплексных чисел  $c$ , с традиционным коммутативным сложением "+" и ассоциативным умножением "\times", аддитивной единицей 0 и мультипликативной единицей 1,

$$A(t) = U(t) \times A(0) \times U^\dagger(t) = e^{i \times H \times t} \times A(0) \times e^{-i \times t \times H}, \quad (1.1a)$$

$$|\psi(t)\rangle = U \times |\psi(t_0)\rangle = e^{iH \times t} \times |\psi(t_0)\rangle, \quad (1.1b)$$

$$U \times U^\dagger = U^\dagger \times U = I. \quad (1.1c)$$

Соответствующая инфинитезимальная версия дается известными представлениями Гейзенберга и Шредингера

$$i \frac{dA}{dt} = [A, H] = A \times H - H \times A, \quad (1.2a)$$

$$[r^i, p_j] \times |\psi\rangle = \delta_j^i \times |\psi\rangle,$$

$$H \times |\psi\rangle = E \times |\psi\rangle, \quad H = H^\dagger, \quad E \in \mathbb{R}(n, +, \times), \quad (1.2b)$$

$$p_k \times |\psi\rangle = -i\hbar \partial_k |\psi\rangle, \quad (1.2c)$$

где:  $H$  это эрмитов, то есть наблюдаемый гамильтониан, воспроизводящий полную энергию;  $\mathbb{R}(n, +, \times)$  это поле действительных чисел  $n$  и скобка  $[A, B] = A \times B - B \times A$  характеризует известное произведение Ли.

Тогда, аксиоматическая согласованность квантовой химии гарантируется теорией Ли на гильбертовом пространстве над полем комплексных чисел, которая является одним из наиболее строгих научных построений 20-го века. В частности, теория Ли гарантирует, что квантовая химия, сформулированная согласно вышеизложенному, допускает те же числовые предсказания, всякий раз при тех же условиях.

Последняя особенность, которая, очевидно, необходима для практического значения теории, выражена следующей *инвариантностью временной эволюции относительно унитарных преобразований*

$$\begin{aligned} U \times H \times |\psi\rangle &= U \times H \times U^\dagger \times U \times |\psi\rangle = \\ &= H' \times |\psi'\rangle = E' \times |\psi\rangle, \quad E' \equiv E, \end{aligned} \quad (1.3a)$$

$$\begin{aligned} U \times \{e^{i \times H \times t}\} \times U^\dagger &= U \times \{I + i \times H \times t/1! + \\ &+ (i \times H \times t)^2/2! + \dots\} \times U^\dagger = e^{i \times H' \times t}, \end{aligned} \quad (1.3b)$$

$$U \times (A \times B) \times U^\dagger = A' + B', \quad K' = U \times K \times U^\dagger, \quad K = A, B, \quad (1.3c)$$

$$U \times [A, B] \times U^\dagger = A' \times B' - B' \times A', \quad (1.3d)$$

$$U \times [r^i, p_j] \times |\psi\rangle = [r'^i, p'_j] \times |\psi'\rangle = \delta_j^i \times |\psi'\rangle. \quad (1.3e)$$

Следовательно, квантовая химия обладает инвариантными функциями и преобразованиями используемыми для выработки данных теории. Это приводит к тому, что теория допускает: *инвариантные единицы пространства, времени, энергии* и т.д., что делает возможным измерения; *инвариантность эрмитовости*, что допускает всякий раз те же наблюдаемые; а также *уникальные и инвариантные числовые предсказания*.

В общем, когда квантовая химия основана на правильных аксиомах квантовой механики без *ad hoc* дополнений, она имеет великолепную аксиоматическую согласованность и обеспечивает инвариантные результаты без какой либо внутренней несогласованности.

Естественно, мы не намерены рассматривать в деталях вышеуказанные аксиоматические аспекты. Для технического понимания этой монографии, существенно знание техники квантовой механики и теории Ли.

## 1.2 Цель исследований

Несмотря на прекрасную аксиоматическую согласованность и достижения исторических соотношений на протяжении 20-го века, любая вера в то, что квантовая химия может описать точно все химические условия существующие во вселенной, предполагает существование границ познания.

После целого века попыток, квантовая химия все еще остается страдающей некоторыми, по существу неразрешимыми, ограничениями, недостаточностью или явными несогласованностями, которые хорошо известны специалистам в теории поля, но в общем игнорируются в студенческих курсах и в специализированной технической литературе.

Во второй половине 20-го века, квантово-химические исследования были основаны на *ad hoc* сконструированных подделках великолепной аксиоматической структуры вышеуказанной теории, со специальной ссылкой на отклонения от самых фундаментальных свойств, таких как закон Кулона и ее унитарная инвариантность.

Например, множество химических исследований было основано на так называемом *экранировании закона Кулона* через гауссианы или другие функции  $f(r)$ ,  $V(r) = \pm e^2/r \rightarrow f(r) \times e^2/r$ , с целью оправдать неполноту воспроизведения молекулярных экспериментальных данных традиционной теории.

Такие экранирования и другие уклонения составляют *ad hoc* подделки аксиоматической структуры квантовой химии, и так как они могут быть произведены только через *неунитарные преобразования*, следовательно появляется технически известная граница "квантовой химии".

Фундаментальным свойством квантовой химии является точная *инвариантность закона Кулона относительно унитарных преобразований*,

$$V(r) = \pm \frac{e^2}{r} \rightarrow V'(r') = U(r'(r)) \times V(r) \times U^\dagger(r'(r)) = V(r') = \pm \frac{e^2}{r'},$$

$$U \times U^\dagger = U^\dagger \times U = I.$$

Следовательно, экранирование  $V(r) = \pm e^2/r \rightarrow f(r) \times e^2/r$  может быть достигнуто *только* через неунитарное преобразование  $U \times U^\dagger = f(r)$ . Тогда



выход из аксиоматической структуры квантовой химии необратим. Важным следствием здесь является то, что неунитарные преобразования имеют "катастрофические несогласованности", изученные в деталях в Разделе 1.7 и эти несогласованности должны быть изучены прежде попыток получить научные результаты.

Более того, понятие "кванта" энергии требует, для своего собственного существования, *стабильных квантованных орбит*, которые допускаются только кулоновским законом. *Ad hoc* модифицированные законы типа  $f(r) \times e^2/r$  не допускают стабильные орбиты, то есть боровские орбиты невозможны при такой модификации. Следовательно, гауссианы и другие экранирования закона Кулона препятствуют самому понятию "кванта" энергии, поэтому делается сомнительным само название "квантовая химия".

Дополнительные недостатки вытекают из сравнения аксиоматической структуры квантовой химии и реальности. Теория существенно *линейна* (по волновым функциям), *локально-дифференциальна* (из самой топологии, то есть согласно теореме Маккея об импримитивности) и *потенциально-гамильтоново-унитарна* (именно, работающая с системами, допускающими только потенциалы с унитарной временной эволюцией). Как следствие, химические структуры абстрагируются в замкнутый набор изолированных точек, взаимодействующих только на расстоянии, потенциал взаимодействия представим обычным гамильтонианом.

Как мы увидим, вышеуказанные ограниченные возможности представлений подразумевают серьезные недостатки в современной концепции молекулярных связей. Фактически, валентные электроны имеют *точечную структуру*, но только для *заряда*, в то же время обладая хорошо определенной формой "*размазанных*" *волновых пакетов*. При корреляции валентных электронов на малых расстояниях мы, следовательно, имеем необходимые условия для глубокого взаимного перекрытия их волновых пакетов, которое, как известно, должно быть: *нелинейно* (по волновым функциям); *нелокально-интегрируемо* (в том смысле, что взаимодействие осуществляется по ограниченному объему, который не сводится к ограниченному набору изолированных точек) и *непотенциально-негамильтоново-неунитарно* (в том смысле, что взаимодействия являются контактного типа, для которого понятие потенциала или гамильтониана не имеет математического или физического смысла, следовательно имеет своим результатом неунитарную структуру, как позднее мы увидим в деталях).

Другие различия между аксиоматической структурой квантовой химии и реальностью настолько велики и заметны, что вполне могут быть названы драматическими. Мы ссылаемся здесь на следующее:

- *Структурная обратимость во времени квантово-химических законов и аксиом*, то есть причинную допустимость обращения в них времени, что можно сравнить с
- *явной необратимостью различных химических процессов*, то есть имеет место нарушение причинности при обращении в них времени; например, это очевидно для химических реакций биологических процессов и т.д.

При указанных выше серьезных структурных недостатках, так же как и при дополнительных, указанных в следующем разделе, становится ясно, что любая попытка примирения вышеизложенных структурных проблем квантовой химии является ненаучной. Вместо адаптирования реальности к предпочтительной теории, наука может послужить путем модификации теории для достижения лучшего воспроизведения реальности.

Главная цель этой монографии, это подчинение обобщения-расширения квантовой химии следующим условиям, которые:

1) совпадают с квантовой химией везде, за исключением области электронных валентных связей;

2) расширяют применимость теории до включения инвариантного представления наиболее широкого класса неунитарных преобразований, воспроизводящих коротко-действующие нелинейные, нелокальные и непотенциальные взаимодействия, согласно перекрытию волновых пакетов валентных электронов; и

3) сохраняют справедливость для замкнуто-изолированных обратимых систем всех устоявшихся физических законов на всех расстояниях и при всех условиях, включая короткие расстояния, принцип неопределенности Гейзенберга, принцип запрета Паули, вероятностные и причинные законы и т.д.

В этой монографии мы введем новую модель молекулярных связей для молекулы водорода (Глава 4), воды и других молекул (Глава 5); покажем, что новая модель позволяет воспроизводить экспериментальные данные касающиеся энергий связи, электрических и магнитных моментов гораздо более точно, чем позволяет квантовой химией; и укажем

разрешение по крайней мере некоторых недостатков современного химического описания.

Главная линия наших исследований заключается в том, чтобы принять аксиоматическую согласованность квантовой химии как основание наших обобщенных теорий, и сконструировать покрывающие теории через *расширенные реализации* тех же аксиом, пригодные для расширенных условий.

Прежде всего, самое фундаментальное требование для наших исследований, это *сохранение абстрактных аксиом Ли и просто предложение их расширенных реализаций пригодных для линейных и нелинейных, потенциальных и непотенциальных, гамильтоновых и негамильтоновых эффектов*. Как мы увидим, это условие само по себе гарантирует, что обобщение химической теории, представленная на рассмотрение в этой монографии, имеет точно такую же аксиоматическую согласованность как и обычная теория.

### 1.3 Недостатки квантовой химии для молекулярных структур

Определим теперь недостатки квантовой химии для возможно простейшего класса систем, *изолированных от остальной Вселенной*, и поэтому удовлетворяющей обычным законам сохранения полной энергии, полного импульса и т.д., и являющимися *обратимыми* (то есть, их образ с обращенным временем является так же физически допустимым как и исходная система).

Самые характерные системы вышеуказанного класса даются *молекулами*, определенными здесь, в общем, как совокупность атомов связанных валентными связями [1]. Несмотря на неоспоримые достижения, *квантово-химические модели молекулярных структур* имеют следующие фундаментальные недостатки:

**1.3.1) Недостаток достаточно сильных связывающих сил.** Как это хорошо известно, среднее от всех кулоновских сил между атомами составляющими молекулу, на полуклассическом уровне, тождественно равно нулю, следовательно, в результате мы получаем полное отсутствие каких-либо сил притяжения вообще. К примеру, применяемое сейчас уравнение Шредингера, для молекулы  $H_2$ , дается схожим выраже-

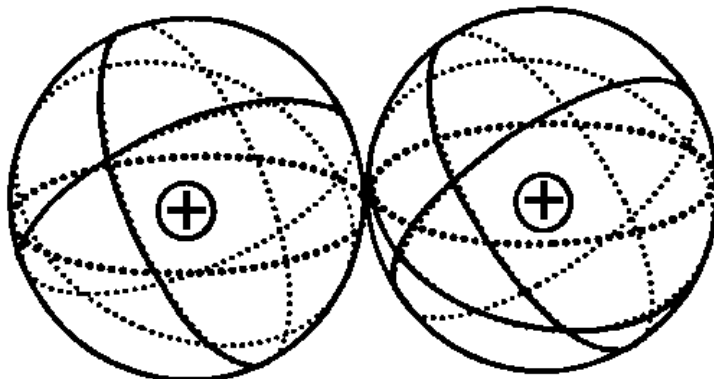


Рис. 1.1: Схематический вид современной *физической* (а не химической) концепции простейшей из возможных молекул, молекулы водорода при абсолютном нуле температуры, концептуально воспроизведенной здесь как два Н-атома рядом друг с другом в отсутствие вращательных и колебательных движений. Следовательно, сферы воспроизводят сферическое распределение *орбит* (а не орбиталей) отдельных электронов. Концептуально, химические визуализации, например в терминах орбиталей (которые есть вероятностное распределение, то есть нечто иное чем физические орбиты) не имеют применений в этом разделе.

нием [1],

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu_2}\nabla_2^2 - \frac{e^2}{r_{1a}} - \frac{e^2}{r_{2a}} - \frac{e^2}{r_{1b}} - \frac{e^2}{r_{2b}} + \frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{r_{12}} \right) |\psi\rangle = E|\psi\rangle, \quad (1.4)$$

которое содержит кулоновское притяжение каждого электрона собственным ядром, кулоновское притяжение каждого электрона ядром другого атома, кулоновское отталкивание двух электронов и кулоновское отталкивание двух протонов. Легко видеть, что в полуклассическом среднем, две силы притяжения электронов к ядрам других атомов компенсируются средним двух сил отталкивания между двумя электронами и двумя протонами, и следовательно (1.1) сводится к двум независимым *нейтральным* атомам водорода без сил притяжения, как показано

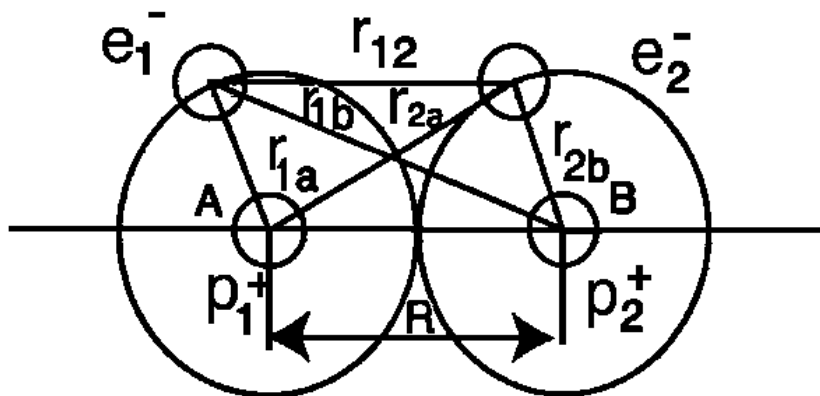


Рис. 1.2: Схематическое изображение факта, что полная кулоновская сила между двумя атомами в молекулярной структуре, в полуклассическом приближении, *точно равна нулю*. И как следствие, обычные кулоновские взаимодействия не могут считаться основанием для молекулярных связей.

на Рис. 1.1,

$$\left[ \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu_1} \nabla_1^2 - \frac{e^2}{r_{1a}} \right) + \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu_2} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{r_{2a}} \right) \right] |\psi\rangle = E|\psi\rangle. \quad (1.5)$$

В виду вышесказанного, квантовая химия пытается воспроизвести молекулярные связи через *обменные, ван-дер-ваальсовы и другие силы* [1]. Однако, исторически, последние силы были введены для ядерных структур, в которых они известны как *очень слабые*, и это является крупным недостатком для обеспечения истинного воспроизведения молекулярных связей. Фактически, теперь это часть истории, о том, как из-за слабости обменных, ван-дер-ваальсовых и других сил, физики-ядерщики были вынуждены ввести *сильное взаимодействие*. В качестве иллюстрации, вычисления показывают, что при предполагаемых сейчас молекулярных связях, молекулы листвы деревьев должны были бы распадаться на отдельные атомные составляющие даже при слабом ветре порядка 10 миль в час. Короче говоря, после века исследований, *квантовая химия*

все еще не нашла в молекулярных структурах эквивалента сильных взаимодействий в ядерных структурах.

**1.3.2) Квантовая химия допускает произвольное число атомов в молекулах водорода, воды и других.** Этот дополнительный недостаток научно неоспоримо подтверждается тем фактом, что обменные, Ван-дер-Ваальсовские и другие связывающие силы, используемые для объяснения молекулярных связей в настоящее время, были сконструированы в ядерной физике со специальной целью, допустить любое число составляющих. Когда те же силы используются для объяснения молекулярных структур, они так же допускают произвольное число составляющих. Как специфический пример возьмем молекулу водорода или воды. Любой студент-химик может доказать, что при обменных, ван-дер-ваальсовых и других силах ядерного типа, водород, вода и другие молекулы допускают произвольное число атомов водорода и это гораздо проще, чем объяснить причину того, почему природа выбирает молекулы  $H_2$  и  $H_2O$  как единственно возможные. Современные молекулярные модели равно допускают молекулы  $H_5$ ,  $H_{23}$ ,  $H_7O$ ,  $HO_{21}$ ,  $H_{12}O_{15}$  и т.д., в драматическом разногласии с экспериментальными данными. Эти несогласованности независимо выявляются еще и тем фактом, что взаимодействия в современных химических моделях не ограничиваются парами валентных электронов, но действуют для произвольного числа электронов.

**1.3.3) Квантовая химия не в состоянии достичь точного воспроизведения молекулярных энергий связи и других молекулярных характеристик через не-модифицированные аксиоматические принципы.** После почти целого века попыток, квантовая химия все еще теряет исторических 2% в воспроизведении энергии связи водорода, воды и других основных молекул, несмотря на использование своих лучших методов, таких как самосогласованный метод [1].

**1.3.4) Более точное воспроизведение энергий связи нарушает основные квантовые аксиомы и физические законы.** Как упомянуто в предыдущем разделе, было проведено определенное число попыток, которые действительно достигли более точного воспроизведения энергий связи, хотя такие воспроизведения достигались через определенное число математических схем, таких как так называемое гауссовское экранирование кулоновского закона [1]. Как мы будем подробно изучать в Разделе 1.7, эти схемы подразумевают неизбежное нарушение квантовых аксиом и физических законов. Действительно, закон Кулона являет-

ся фундаментальным инвариантом квантовой механики. Из этого тогда следует, что невозможно вообще никакое экранирование при сохранении жесткой аксиоматической структуры теории и лежащих в ее основе *унитарных преобразований*, очерченных в Разделе 1.1. Единственная возможность экранирования кулоновского закона заключается тогда в использовании *неунитарных преобразований* отмеченных выше, то есть

$$F = \pm \frac{e^2}{r} \rightarrow U \times \left( \pm \frac{e^2}{r} \right) \times U^\dagger = \pm \frac{e^2}{r}, \quad U \times U^\dagger = I, \quad (1.6a)$$

$$F = \pm \frac{e^2}{r} \rightarrow W \times \left( \pm \frac{e^2}{r} \right) \times W^\dagger = \pm e^{A \times r} \times \frac{e^2}{r}, \quad (1.6b)$$

$$W \times W^\dagger = e^{A \times r} \neq I.$$

Это приводит к тому, что *гауссовские экранирования кулоновского закона подразумевают отказ от всей аксиоматической структуры квантовой химии*.

**1.3.5) Квантовая химия не может обеспечить осмысленное воспроизведение термодинамических свойств.** Неточность 2% в воспроизведении энергий связи обманчиво мала, так как это соответствует около 1000 ккал/моль, в то время как обычная термодинамическая реакция подразумевает в среднем около 20 ккал/моль. Научные вычисления не могут признаваться удовлетворительными, когда ошибка почти в 50 раз превышает вычисляемую величину.

**1.3.6) Применение компьютеров в квантово-химических вычислениях требует чрезмерно большого периода времени.** Это хорошо известно и происходит из-за медленной сходимости квантовых рядов, особенность которая упорно сохраняется до наших дней, несмотря на возможности мощных компьютеров.

**1.3.7) Квантовая химия неспособна объяснить корреляцию валентных электронов в пары.** Корреляция валентных электронов именно в пары происходит из-за принципа запрета Паули (который *применяется* квантовой химией без всяких объяснений) и принимает на себя важную роль в молекулярных структурах. Неспособность квантовой химии ограничить корреляции строго в валентные пары переходит затем в орбитальные теории, которые хорошо работают на полуэмпирических уровнях, но остаются страдающими все еще неразрешенными проблемами, такими как возможность корреляции между *многими электронами*,

в то время как экспериментальные данные утверждают что корреляции осуществляются строго внутри *электронных пар*. Этот недостаток приводит тогда к другим несогласованностям, таким как произвольное число атомов во всех молекулах, как было отмечено ранее.

**1.3.8) Квантовая химия неспособна достичь точного воспроизведения электрических и магнитных дипольных и мультипольных моментов молекул водорода, воды и других.** Эти воспроизведения испытывают неточность в несколько процентов для молекулы водорода и еще больше для больших молекул. Отклонения предсказаний квантовой химии от реальности такие, что сказанные воспроизведения имеют временами даже *неверный знак* [1].

**1.3.9) Квантовая химия предсказывает, что все молекулы парамагнетики.** Эта несогласованность есть следствие наиболее строгой дисциплины этого века, квантовой электродинамики, которая утверждает, что под действием внешнего магнитного поля, орбиты валентных электронов должны быть поляризованы таким образом, чтобы иметь магнитную полярность противоположную внешнему магнитному полю (поляризация осуществляется через переход от пространственного к тороидальному распределению орбиталей). Как это хорошо известно, отдельные атомы молекулы сохраняют свою индивидуальность в современной модели химических связей. Как результат, квантовая электродинамика предсказывает, что валентные электроны отдельных атомов, связанных в молекулу, должны иметь поляризованные орбиты во внешнем магнитном поле. Как результат, квантовая химия предсказывает, что приложение внешнего магнитного поля "Юг-Север" к водороду Н-Н, воде Н-О-Н и другим молекулам предполагает приобретение ими противоположной полярности "Север-Юг",  $H_{\uparrow}-H_{\uparrow}$ ,  $H_{\uparrow}-O_{\uparrow}-H_{\uparrow}$  и т.д., что находится в драматическом несогласии с экспериментальными данными.

Никакое серьезное продвижение в химии не может быть сделано, во-первых, без допущений и, во-вторых, без детального научного изучения вышеуказанных недостатков.



## 1.4 Недостаток квантовой химии для химических реакций

Недостатки гораздо более велики чем они очерчены, это становится видно при любой попытке изучить через квантовую механику или квантовую химию структуры и/или процессы, являющиеся *необратимыми* (а именно, полное обращение времени физически некорректно, например потому, что это должно нарушать принцип причинности или принцип сохранения энергии). Необратимость является типичным случаем для *химических реакций* вообще, например для такой как



Как отмечено ранее, этот недостаток существует благодаря тому факту, что *квантовая механика и квантовая химия структурно обратимы*, то есть, все их математические аксиомы и физические законы полностью обратимы во времени. Это препятствует любой научной строгости в воспроизведении необратимых систем и процессов.

В то же время, все известные потенциальные взаимодействия полностью обратимы во времени, без каких-либо исключений известных автору. Этот дополнительный факт препятствует научно-количественному воспроизведению необратимых процессов через гамильтонианы с нарушенной обратимостью времени.

Во всяком случае, одно из самых важных учений в истории науки было создано Лагранжем, Гамильтоном и Якоби, которые указывали, что *необратимость не может быть воспроизведена с помощью потенциала* и из этих соображений они формулировали аналитическую механику с *внешними членами, воспроизводящими контактно-непотенциальные взаимодействия, которые являлись источником необратимости*.

В планетарных и атомных структурах, очевидно, нет нужды во внешних членах в аналитических уравнениях, так как все действующие силы имеют потенциальный тип. Действительно, эти системы допускают прекрасную аппроксимацию, которая обычно и используется, *массивными точками движущимися в вакууме без взаимодействий*. В этих областях, исторические аналитические уравнения были "урезаны" путем удаления внешних членов.

В виду успехов планетарной и атомной моделей, все научные исследования 20-го века были сведены к "урезанным аналитическим урав-

нениям", без каких-либо намеков, что *они не* воспроизводят научную концепцию создателей аналитической механики.

Вышеуказанные исторический, концептуальный и технический сценарии мешают любой попытке точного воспроизведения необратимости химических задач через квантовую химию, очевидно потому, что эта теория строго потенциально-гамильтонова.

Следовательно, серьезное научное продвижение в сторону необратимых процессов в общем, и необратимых химических реакций в частности, не может быть достигнуто, в первую очередь, без *превращения квантовой химии в структурно необратимую теорию*, которая будет необратима для всех возможных обратимых гамильтонианов.

## 1.5 Недостатки квантовой химии для биологических структур

Любая вера в пригодность квантовой механики и квантовой химии для биологии будет находится вне научных границ. Дело в том, что различия между предсказаниями квантовой механики и химии и явлениями в биологии настолько велики, что это препятствует количественному научному описанию.

Кроме обратимых, квантовая механика и квантовая химия могут воспроизводить только *совершенно жесткие системы*, как хорошо известно из фундаментальной вращательной симметрии. Как следствие, воспроизведение биологических систем через квантовую механику и квантовую химию должно предполагать наше тело абсолютно твердым, без какой-либо возможности введения деформируемых, эластичных систем, так как последние должны были бы предполагать катастрофические несогласованности в основных аксиомах.

Более того, другим столпом квантовой механики и квантовой химии является выполнение законов сохранения, для которых есть исторически устоявшее уравнение движение Гейзенберга. Действительно, временная эволюция произвольной величины  $A$  дается выражением

$$i \frac{dA}{dt} = [A, H] = A \times H - H \times A, \quad (1.8)$$

которое дает нам закон сохранения полной энергии,  $i dH/dt = H \times H - H \times H \equiv 0$ .

Основная проблема научного воспроизведения биологических структур это воспроизведение физических характеристик, таких как размер, вес, плотность и т.д. *зависящих от времени*. В отличие от атомно-молекулярных структур, для которых были построены квантовая механика и квантовая химия, биологические структуры *растут* во времени, и их *возраст* со временем меняется.

Непримиримая несовместимость *вариации во времени* биологических структур и *сохранения во времени* квантово-механических и квантово-химических систем, как описано уравнением Eq. (1.8), устанавливает неприменимость квантовой механики и квантовой химии для научного описания биологических структур.

При проведении углубленных исследований, недостатки квантовой механики и квантовой химии проявляются даже более сильно. Например, квантовая механика и квантовая химия могут хорошо объяснить форму морских раковин, но не их *рост во времени*. Действительно, компьютерные моделирования [2] показали, что когда геометрические аксиомы квантовой механики и квантовой химии (то есть евклидовой геометрии) считаются *точно* выполняемыми, морские раковины сначала растут деформируемым способом, а затем трескаются в процессе их роста.

Последние результаты должны быть не удивительны для читателей с пытливым мышлением, напротив, так как рост морских раковин есть *необратимый* и несохраняющийся процесс, в то время как геометрические аксиомы квантовой механики и химии прекрасно *обратимы* и *сохраняемы*, как отмечено ранее, следовательно это говорит о непримиримой структурной несовместимости в настоящее время на геометрическом уровне, без какой-либо мыслимой возможности примирения.

Дополнительные исследования установили, что недостатки квантовой механики и квантовой химии в биологии много глубже чем сказано выше и затрагивают *математику*, лежащую в основе этих дисциплин. Действительно, Иллерт установил, что для минимально правильного воспроизведения роста во времени морских раковин требуется *удвоение евклидовых осей*. Однако, морские раковины воспринимаются человеческим мышлением (через наши три евстахиевы трубки) как рост в нашем *трехмерном* евклидовом пространстве. Сантили [2] показал, что единственно известное разрешение такой дихотомии может быть сделано через *многозначную математику*, где операции, такие как произведение, сложение и т.д. производят *набор значений*, в отличие от единственного значения в квантовой механике и квантовой химии (подробности см. в

следующей Главе).

В любом случае, вера в то, что простейшая математика, лежащая в основе квантовой механики и химии может объяснить сложность ДНК, не имеет научного правдоподобия, и единственной серьезной научной темой является исследование подходящих обобщений.

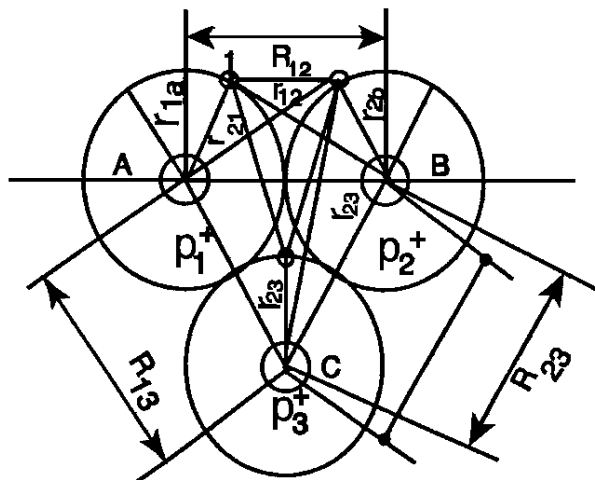


Рис. 1.3: Схематическое изображение того факта, что современная концепция структуры молекулы водорода (Рис. 1.1 и 1.2) допускает третий атом водорода с молекулярной структурой  $H_3$  и следовательно, произвольное число атомов  $H$ , поэтому допускаются молекулы общего типа  $H_5$ ,  $H_{27}$  и т.д. Как мы увидим в Главе 8, структура с весом трех атомов  $H$  действительно детектирована, хотя и неверно истолкована, согласно различным причинам, обсужденным в Главе 8. Здесь мы хотим только отметить, что структура  $H_3$ , понятая как молекула, должна так же допускать  $H_4$ ,  $H_5$  и т.д., которые никогда не были детектированы. Эта черта находится в драматическом несогласии с экспериментом, так как единственно возможной устойчивой структурой молекулы водорода является  $H_2$ . Эта несогласованность появляется из-за того, что квантово-химические модели молекулярных структур используют связывающие силы, такие как обменные, ван-дер-ваальсовы и другие, которые были введены в ядерной физике для произвольного числа составляющих. Другая причина, это недостаток ограничения корреляции только парами валентных электронов, как это происходит в действительности. Как следствие, квантовая химия испытывает недостаток в эквиваленте сильного взаимодействия для молекулярных структур. Квантовая химия испытывает также недостаток в каких-либо прямых или косвенных соображениях насчет ограничения числа составляющих молекулярных структур, что подтверждает несогласованность, представленную на Рис. 1.2.

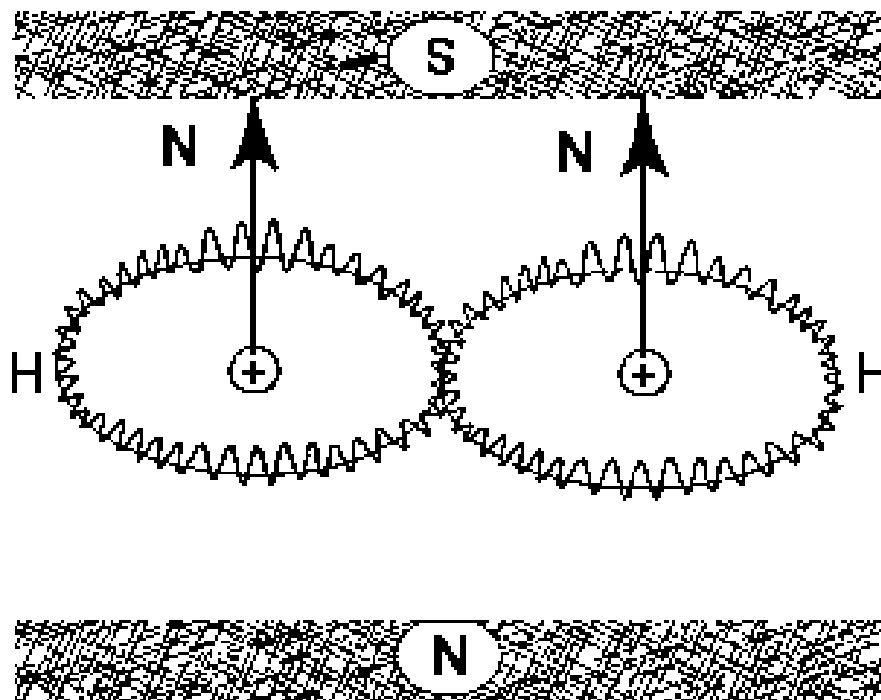


Рис. 1.4: Схематическое изображение предсказания квантовой химией парамагнетизма всех молекул; построено здесь для случая простейшей молекулы водорода H-H при абсолютном нуле. Это предсказание является неизбежным следствием современной концепции молекулярной структуры (Рис. 1.1), в которой каждый атом сохраняет свою индивидуальность когда действуют только обменные или другие силы ядерного типа. Наиболее строгая дисциплина этого века, квантовая электродинамика, предсказывает, что под действием внешнего магнитного поля, орбиты всех валентных электронов принимают одну и ту же поляризацию  $H_{\uparrow}H_{\uparrow}$ , что драматически не согласовывается с экспериментальными данными.

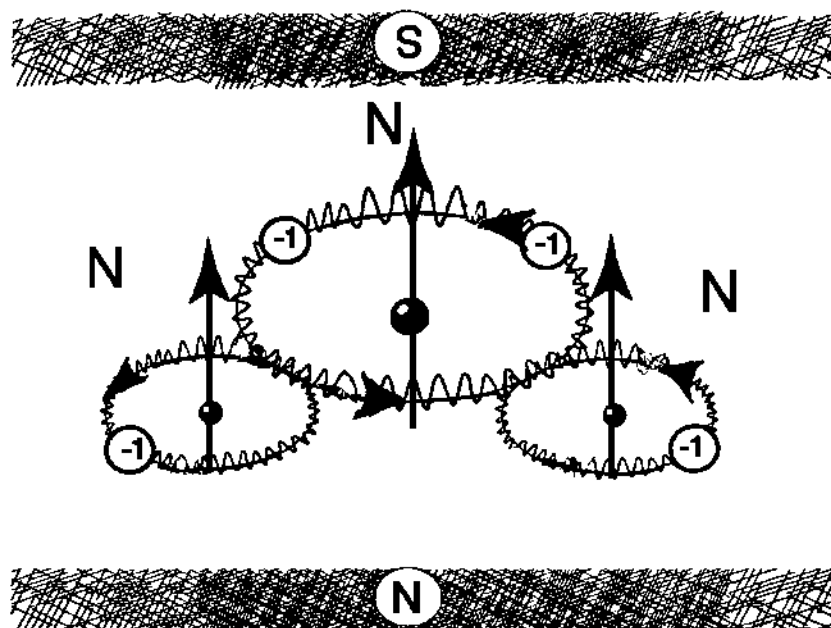


Рис. 1.5: Схематическое изображение предсказания квантовой химии о парамагнетизме воды, находящегося в драматическом несогласии с опытными данными. Действительно, квантовая химия не ограничивает взаимодействие валентных электронов парами и как результат, отдельные валентные электроны молекулы воды остаются существенно независимыми. В этом случае, квантовая электродинамика требует поляризации всех валентных электронов, под действием внешнего магнитного поля, точно в одном направлении как показано на этой фигуре и вытекающего отсюда парамагнитного характера. Все силы, допускаемые квантовой химией, такие как обменные силы, ван-дер-ваальсовы и т.д., не могут убедительно снять эту несогласованность, существующую, как известно, из-за отсутствия ограничения взаимодействия валентных электронов парами.

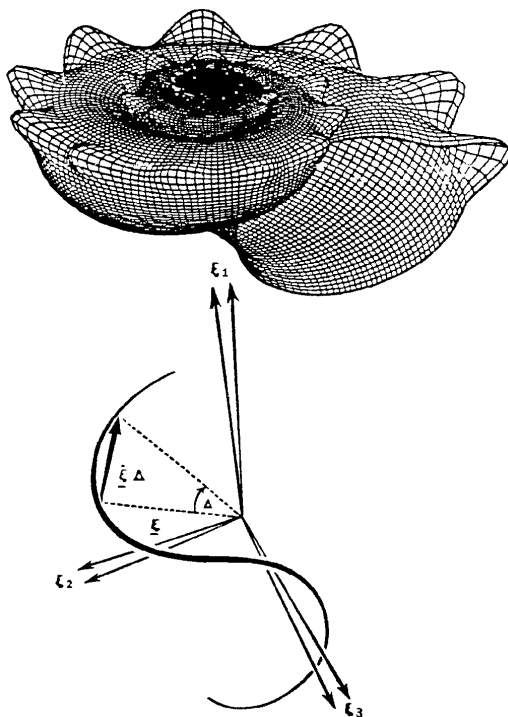


Рис. 1.6: Компьютерная визуализация формы морской раковины, *Angaria Delphinium* из работы [2], основанная на *точном выполнении* геометрических аксиом квантовой механики и квантовой химии, то есть евклидовой геометрии. Как можно видеть, воспроизведение *формы* довольно точно. Тем не менее, та же визуализация становится в большом противоречии с очевидностью, когда расширяется до *роста во времени* той же морской раковины. Иллерт [2] доказал, что правильное воспроизведение роста требует *3 × 3-мерного пространства*, то есть дублирования наших обычных декартовых координат. Но это математическое воспроизведение должно быть совместимо с нашим 3-мерным восприятием морской раковины. Сантилли [2] показал, что вышеуказанная дихотомия устанавливает *многозначный* характер биологических структур во всем объеме, то есть они нуждаются в математике драматически более общей, чем используемая сейчас в квантовой механике и квантовой химии (подробности см. в Разделе 2.4).



В заключение, наука никогда не допускает "окончательных теорий". Не важно насколько веской любая данная теория может оказаться в какой-либо момент времени, ее структурное расширение для описания более сложных условий является только делом времени. Это также судьба квантовой механики и квантовой химии, которые, несмотря на очевидные достижения, не могут рассматриваться как "окончательные теории" для всех бесконечно возможных условий, существующих во вселенной.

В конце концов, после нескольких веков эволюции, вместо того, чтобы добраться до "финальной стадии", наука все еще находится в своем младенчестве.

## 1.6 Центральная тема исследования этой монографии

В виду недостатков, очерченных выше, в этой монографии мы вводим три обобщения-расширения квантовой химии в порядке возрастания сложности, в надежде разрешения по крайней мере некоторых недостатков для молекул, химических реакций и биологических структур, соответственно. Результаты будут применены в Главах 7 и 8 для новых источников энергии и топлив.

Среди определенного числа возможностей, мы следуем историческому учению Эйнштейна, Подольского, Розена [3a] (ЭПР) о "неполноте" квантовой механики и, следовательно, квантовой химии.

Среди разнообразных возможностей, мы изучаем возможное "завершение" через воспроизведение глубокого перекрытия волновых пакетов валентных электронов в химических связях. Другими словами, наше главное предположение заключается в том, что квантовая химия "неполна" из-за рассматривания валентных электронов как точек (что необходимо для согласованности из-за существенно топологической структуры теории), или, эквивалентно, из-за ограничения исследования строго точечными зарядами и полного игнорирования протяженности волновых пакетов.

Как хорошо известно, все массивные частицы (начиная с электрона) имеют волновой пакет порядка 1 фм ( $10^{-13}$  см). Таким образом, мы считаем квантовую механику и квантовую химию точно действующими на расстояниях достаточно больших, чем 1 фм, в то же время мы

ищем возможные малые поправки на взаимных расстояниях порядка 1 фм или менее, соответствующим глубокому перекрытию волновых пакетов валентных электронов.

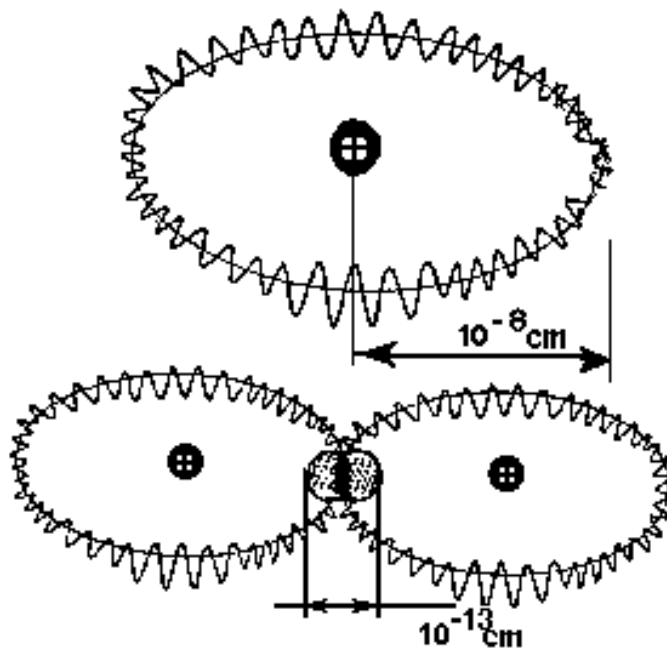


Рис. 1.7: Схематическое изображение главного концептуального отличия между структурами атома водорода и молекулы водорода. В первом случае, мы имеем большие взаимные расстояния, сравнимые с размерами волновых пакетов, что предполагает полную пригодность квантовой механики. В последнем случае, мы имеем глубокое перекрытие волновых пакетов электронов, что практически отсутствует в атомных структурах и что мешает всякой надежде научного описания молекулярных структур через квантовую механику и химию.

На более глубоком уровне, мы применяем квантовую механику как точную для структур отдельных атомов водорода. В этом случае, размер волнового пакета электрона может быть вполне проигнорирован из-за большого расстояния кулоновского взаимодействия с ядром. Это предполагает точную применимость аксиоматической структуры Раздела 1.1, и позволяет эффективное применение линейной, локальной и потенциаль-

ной теории, для точного описания атома водорода, как это и установлено исторически.

При переходе от структуры атома водорода к структуре молекулы водорода, дополнительно появляется глубокое перекрытие волновых пакетов валентных электронов на малых расстояниях, которое полностью отсутствует для атомной структуры. Следовательно, мы убеждаемся, что остающиеся пригодными для атомных структур квантовая механика и с ней вместе квантовая химия, нуждаются в подходящем "пополнении" для описания молекулы водорода из-за появления условий и взаимодействий, находящихся за описательными способностями их основных аксиом (Раздел 1.1).

*Центральной темой изучения данной монографии, следовательно, является количественное инвариантное воспроизведение глубокого перекрытия волновых пакетов валентных электронов.*

Эти физические условия, как известно, должны быть (см. Рис. 1.8):

1) *нелинейными* (то есть зависеть от волновых функций в степени большей чем один);

2) *нелокально-интегрируемыми* (то есть зависеть от интегралов по пространству перекрытия волновых функций, которое, как известно, не может быть сведено к конечному набору изолированных точек);

3) *непотенциальными* (то есть, содержать "контактные" взаимодействия, осуществляемые путем действительного физического контакта, с соответственно "нулевым радиусом действия", для которых понятие потенциальной энергии не имеет математического или физического смысла);

4) *негамильтоновыми* (то есть не воспроизводимыми через гамильтониан, следовательно, требующими дополнительных членов); и, как следствие,

5) *неунитарными* (то есть временная эволюция не подчиняется условию унитарности (1.1с)).

Заметим, что нелокальность ожидается из-за протяженного характера волновых пакетов валентных электронов при полностью точечной зарядовой структуре.

Короче говоря, мы изучаем "завершение" квантовой механики и квантовой химии через добавление эффектов на расстояниях порядка 1 фм (всего лишь), которые предполагаются нелинейными, нелокальными, непотенциальными, негамильтоновыми и неунитарными.

Заметим также, что условие неунитарности необходимо для новиз-

ны, так как нужно покинуть класс эквивалентности квантовой химии. Другими словами, предположение унитарного воспроизведения волнового перекрытия подразумевает *запрещение* любой новизны, так как теория была бы полностью подчинена аксиомам существующих доктрин.

Как мы увидим в Главах 2 и 3, вышеуказанное воспроизведение глубокого перекрытия валентных электронов в синглетном соединении позволяет:

1') **Введение принципиально новой, сильной не-кулоновской силы притяжения между парами валентных электронов**, которая может быть записана, в первом приближении, для случая молекулы водорода через халтеновский член в уравнении,

$$\left[ \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu_1} \nabla_1^2 - \frac{e^2}{r_{1a}} \right) + \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu_2} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{r_{2a}} \right) - V_0 \frac{e^{-r_{12}/R}}{1 - e^{-r_{12}/R}} \right] |\psi\rangle = E \times |\psi\rangle. \quad (1.9)$$

Как это можно видеть, вышеуказанная сила полностью отсутствует в современных моделях молекулярных связей и может действительно служить эквивалентом сильных ядерных сил, отсутствующим сейчас для молекулярных структур.

2') **Объяснение, почему молекула водорода допускает только два атома.** Соединенные в синглетное состояние, как на Рис. 1.8, валентные электроны будут отталкивать любые другие электроны, что понижает количество взаимодействующих электронов строго до двух.

3') **Новую связывающую силу между валентными электронами**, которая позволяет воспроизводить энергии связи с точностью до седьмого порядка (*sic*), как мы увидим в Главах 4 и 5.

4') **Получить рассмотренное здесь воспроизведение из первых аксиоматических принципов, без *ad hoc* манипуляций.**

5') **Воспроизведения энергий связи с точностью до седьмого порядка, допускающие точные термодимические вычисления.**

6') **Компьютерные вычисления, основанные на новой связывающей силе (1.9), происходящие как минимум в 1000 раз быстрее, чем обычные вычисления.**

7') **Ограничить корреляцию валентных электронов строго парами на всех уровнях.**

8') **Воспроизведение электрического и магнитного моментов правильными в знаке и с точностью до седьмого порядка (*sic*).**

9') Новую модель молекулярной структуры, исключаящую неправильное предсказание о парамагнетизме всех молекул.

Короче говоря, в этой монографии, мы покажем, что изучение нелинейных, нелокальных и непотенциальных условий глубокого перекрытия волновых пакетов валентных электронов предлагает реальные возможности разрешения недостатков 1.3.1)–1.3.9) квантовой механики, указанных в Разделе 1.3.

## 1.7 Катастрофические несогласованности обобщенных неунитарных теорий, основанных на обычной математике

Следующим аспектом, фундаментально важным для этих исследований, является то, что трактовка нелинейных, нелокальных и неунитарных эффектов через обычную математику квантовой механики и квантовой химии предполагает физические и математические несогласованности настолько серьезными, что их можно назвать катастрофичными, как это изучено в деталях в работах [4].

Автор посвятил свою исследовательскую жизнь конструированию аксиоматически согласованных и инвариантных обобщений квантовой механики для работы с нелинейными, нелокальными и непотенциальными эффектами (см. работы [5] и монографии [6], независимые физические работы [7], математические работы [8], приложения и экспериментальные подтверждения [9, 10] и независимый обзор монографий [11]). Результаты этих исследований остаются, однако, в общем неизвестными в физических кругах, не говоря уже о специализированной химической литературе, и это оправдывает обзор сделанный в этом разделе.

Для начала напомним, что теория называется *эквивалентной квантовой механике* если она может быть получена из последней через какое-либо унитарное преобразование (проверка обязательного условия топологической гладкости опускается здесь для простоты).

Как следствие, *необходимым и достаточным условием для того, чтобы теория была неэквивалентна квантовой механике является ее нахождение вне класса унитарной эквивалентности квантовой механике*, то есть новая теория должна быть связана с квантовой механикой через *неунитарное преобразование* на гильбертовом пространстве  $\mathcal{H}$  над по-

лем комплексных чисел  $\mathbb{C} = \mathbb{C}(c, +, \times)$ ,

$$U \times U^\dagger \neq I. \quad (1.10)$$

Раз так, то обобщенные теории должны иметь *неунитарную структуру*, например, их временная эволюция должна подчиняться закону (1.10), иному чем закон (1.1с).

В течении своих студенческих исследований в Туринском университете (Италия) и затем как часть своей докторской диссертации, Сантилли [5а, 5б] опубликовал в 1967 году следующее структурное обобщение основного уравнения (1.1), первое в научной литературе (которое стало известно два десятилетия спустя как "*q*-деформации" без ссылки на их источники в [5а]),

$$A(t) = e^{i \times H \times q \times t} \times A(0) \times e^{-i \times t \times p \times H}, \quad (1.11a)$$

$$\begin{aligned} i \, dA/dt &= (A, B)_{\text{operator}} = p \times A \times H - q \times H \times A = \\ &= m \times (A \times B - B \times A) + n \times (A \times B + B \times A) = \\ &= m \times [A, B] + n \times \{A, B\}, \end{aligned} \quad (1.11b)$$

где  $p = m + n$ ,  $q = m - n$  и  $p + q$  это ненулевые параметры (и знак " $\times$ " вновь воспроизводит обычное ассоциативное произведение чисел матриц,  $AB \equiv A \times B$ ,  $A \times (B \times C) \equiv (A \times B) \times C$ ).

После обширных поисков в европейских математических библиотеках, было найдено, что скобки  $(A, B) = p \times A \times B - q \times B \times A$  являются *Ли-допустимыми* согласно Альберту, если связанное с ними антисимметричное произведение  $(A, B) - (B, A) = (p + q) \times [A, B]$  является Ли-произведением. В то время (1967 г.) появилось только три статьи на эту тему и исключительно в математической литературе.

В последствии, работая в Гарвардском университете при поддержке Департамента Энергетики США, Сантилли предложил следующую, наиболее общую из возможных, Ли-допустимую теорию [см. [5е], уравнения (4.15.34) и (4.18.11)],

$$A(t) = U \times A(0) \times U^\dagger = e^{i \times H \times Q \times t} \times A(0) \times e^{-i \times t \times P \times H}, \quad P = Q^\dagger, \quad (1.12a)$$

$$\begin{aligned} i \, dA/dt &= (A; B)_{\text{operator}} = A < B - B > A = \\ &= A \times P \times H - H \times Q \times A = \\ &= (A \times T \times B - B \times T \times A) + (A \times W \times B + B \times W \times A) = \\ &= [A; B] + \{A; B\}. \end{aligned} \quad (1.12b)$$

Далее предлагаются полезные упражнения для читателей, заинтересованных в изучении формализма этих исследований. Проверьте, что:

- 1) временные эволюции (1.11) и (1.12) неунитарны,  $U \times U^\dagger \neq I$ ;
- 2) приложение других неунитарных преобразований  $R \times R^\dagger \neq I$  к структуре (1.11) дает именно расширенную структуру (1.12) путем преобразования параметров  $p$  и  $q$  в операторы  $P = p \times (R \times R^\dagger)^{-1}$  и  $Q = q \times (R \times R^\dagger)^{-1}$ ; и
- 3) применение любых дополнительных неунитарных преобразований  $S \times S^\dagger \neq I$  к структуре (1.12) мешает ее Ли-допустимому характеру, даже с различными версиями операторов  $P$  и  $Q$ . Это, очевидно, доказывает следующее:

**Теорема 1.1:** *Общие Ли-допустимые законы (1.12) являются "непосредственно универсальными" в смысле содержания в качестве частных случаев всех неограниченно возможных неунитарных обобщений квантово-механических уравнений ("универсальность") непосредственно в системе отсчета наблюдателя ("непосредственная универсальность") и в то же время допускают согласованную алгебру в ее инфинитезимальной форме (то есть произведение подчиняется дистрибутивному закону и закону умножения на скаляр).*

Сформулированная выше теорема может быть легко доказана замечая, что произведение  $(A \hat{B})$  является наиболее общим "произведением" "алгебр" как оно вообще понимается в математике (а именно, билинейный композиционный закон, подчиняющийся левому и правому дистрибутивному закону и закону умножения на скаляр). Действительно, произведение  $(A \hat{B})$  содержит наиболее общую из возможных комбинаций произведений Ли и Жордана, поэтому, как частные случаи, допускаются все известные алгебры и связанные с ними физико-химические модели, включая ассоциативные алгебры, алгебры Ли, алгебры Жордана, альтернативные алгебры, суперсимметричные алгебры, алгебры Каца-Муди и т.д.

Несмотря на бесспорную математическую красоту, теории (1.11) и (1.12) обладают следующими катастрофическими физическими несогласованностями [4]:

**Теорема 1.2:** *Все теории обладающие неунитарной временной эволюцией, сформулированные на обычных гильбертовых пространствах  $\mathcal{H}$*

над обычными полями комплексных чисел  $\mathbb{C}(c, +, \times)$  не допускают последовательного физического применения, так как они:

- 1) не обладают инвариантными единицами времени, пространства, энергии и т.д., поэтому утрачивается физический смысл экспериментальных измерений;
- 2) не сохраняют эрмитовости во времени, поэтому утрачивается физический смысл наблюдаемых;
- 3) не дают однозначных и инвариантных числовых предсказаний;
- 4) в общем, нарушают законы вероятности и причинности; и
- 5) нарушают основные аксиомы специальной теории относительности Эйнштейна.

Исчерпывающее изложение представлено в работе [4g]. Мы напомним здесь только следующие важнейшие моменты.

Основные геометрические единицы физических и химических теорий не являются абстрактными математическими понятиями, потому что они входят в состав наиболее фундаментальных величин, основных единиц. Например, основная единица трехмерного евклидова пространства  $I = \text{Diag.}(1, 1, 1)$  в действительности воспроизводит в безразмерной форме основные единицы длины, используемые в каждом направлении пространства,  $I = \text{Diag.}(1 \text{ см}, 1 \text{ см}, 1 \text{ см})$ . Но неунитарные преобразования не сохраняют, по концепции, геометрическую единицу  $U \times U^\dagger \neq I$  и, например, для евклидовой единицы мы можем иметь:

$$\begin{aligned} I &= \text{Diag.}(1 \text{ см}, 1 \text{ см}, 1 \text{ см}) \rightarrow \\ \rightarrow I' &= U \times I \times U^\dagger = \text{Diag.}(7 \text{ см}, 9.2 \text{ см}, -2 \text{ см}). \end{aligned} \quad (1.13)$$

Это приводит к отсутствию инвариантности основных единиц во всех неунитарных теориях и, как следствие, их неприменимость для измерений.

Схожим образом, легко доказать, что условие эрмитовости в начальный момент времени ( $\langle \phi | \times H^\dagger \rangle \times |\psi \rangle \equiv \langle \phi | \times (H \times |\psi \rangle)$ ) нарушается в последующие времена во всех теориях с неунитарной структурой, сформулированных на  $\mathcal{H}$  над  $\mathbb{C}$ . Эта дополнительная катастрофическая несогласованность (называемая *леммой Лопеса* [4b]), может быть выражена таким образом:

$$[\langle \psi | \times U^\dagger \times (U \times U^\dagger)^{-1} \times U \times H \times U^\dagger] \times U |\psi \rangle =$$



$$\begin{aligned}
&= \langle \psi | \times U^\dagger \times [(U \times H \times U^\dagger) \times (U \times U^\dagger)^{-1} \times U | \psi \rangle] = \\
&= (\langle \hat{\psi} \times T \times \hat{H}^\dagger \rangle \times |\hat{\psi}\rangle) = \langle \hat{\psi} | \times (\hat{H} \times T \times |\hat{\psi}\rangle), \quad (1.14) \\
&|\hat{\psi}\rangle = U \times |\psi\rangle, \quad \hat{T} = (U \times U^\dagger)^{-1} = T^\dagger, \\
&\hat{H}^\dagger = T^{-1} \times \hat{H} \times T \neq H.
\end{aligned}$$

Как результат, все неунитарные теории не допускают физического смысла наблюдаемых.

Предполагая, что перечисленные недостатки могут быть преодолены с помощью некоторых дополнений и манипуляций, неунитарные теории все еще остаются с дополнительными катастрофическими несогласованностями. Например, с отсутствием инвариантности числовых предсказаний.

Предположим, что рассматриваемая неунитарная теория такая, что  $U \times U^\dagger_{[t=0]} = 1$  и  $U \times U^\dagger_{[t=15min]} = 15$ , и что теория изначально предсказывает в момент времени  $t = 0$ , скажем, собственное значение 2 эВ. Легко видеть, что та же теория предсказывает, при тех же условиях, другое собственное значение 30 эВ в момент  $t = 15$  минут, поэтому не имеется никакого физического значения. Действительно, мы имеем

$$U \times U^\dagger[t = 0] = I, \quad U \times U^\dagger[t = 15 \text{ мин}] = 15, \quad (1.15a)$$

$$\begin{aligned}
&U \times H \times |\psi\rangle = (U \times H \times U^\dagger) \times (U \times U^\dagger)^{-1} \times (U \times |\psi\rangle) = \\
&= H' \times T \times |\hat{\psi}\rangle = U \times E \times |\psi\rangle = E \times (U \times |\psi\rangle) = E \times |\hat{\psi}\rangle, \quad (1.15b) \\
&H' = U \times H \times U^\dagger, \quad T = (U \times U^\dagger)^{-1},
\end{aligned}$$

$$H' |\hat{\psi}\rangle |_{t=0} = 2 \text{ eV} \times |\hat{\psi}\rangle |_{t=0}, \quad T = 1 |_{t=0}, \quad (1.15c)$$

$$\begin{aligned}
&H' \times |\hat{\psi}\rangle |_{t=15 \text{ м}} = 2 \text{ eV} \times (U \times U^\dagger) \times |\hat{\psi}\rangle |_{t=15 \text{ м}} = \\
&= 30 \text{ eV} \times |\hat{\psi}\rangle |_{t=15 \text{ м}}. \quad (1.15d)
\end{aligned}$$

Законы вероятности и причинности, как известно, основаны на унитарном характере временной эволюции и инвариантном разложении единицы. Теперь очевидно их нарушение во всех неунитарных теориях. Полезным упражнением для читателя, заинтересованного в изучении адронной химии, может быть задача найти специфический пример неунитарных преобразований, в котором следствие опережает причину.

Нарушение основных аксиом теории относительности Эйнштейна всеми неунитарными теориями настолько очевидно, что не требует пояснений.

Наиболее фундаментальным препятствием в рассмотренных теориях является *отсутствие их инвариантности*. Это лучше всего может быть проиллюстрировано отсутствием инвариантности общих Ли-допустимых законов (1.12), которые допускают, как частные случаи, все другие неунитарные теории. Действительно, относительно неунитарных преобразований  $U \times U^\dagger \neq I$  мы имеем, например, отсутствие инвариантности Ли-допустимых скобок,

$$\begin{aligned} U \times (A \mathbin{\&B} B) \times U^\dagger &= U \times (A < B - B > A) \times U^\dagger = (U \times A \times U^\dagger) \times \\ &\times [(U \times U^{-1}) \times (U \times P \times U^\dagger) \times (U \times U^\dagger)^{-1}] \times (U \times B \times U^\dagger) - \\ &- (U \times B \times U^\dagger) \times [(U \times U^{-1}) \times (U \times Q \times U^\dagger) \times (U \times U^\dagger)^{-1}] \times \\ &\times (U \times A \times U^\dagger) = A' \times P' \times B' - B' \times Q' \times A' = \\ &= A' < B' - B' > A'. \end{aligned} \quad (1.16)$$

Вышеизложенные правила подтверждают сохранение Ли-допустимой структуры относительно наиболее общих преобразований, что подтверждает непосредственную универсальность законов (1.12), как это описано в Теореме 1.1. Дело в том, что *формулировки не инвариантны*, потому что

$$P' = (U \times U^{-1}) \times (U \times Q \times U^\dagger) \times (U \times U^\dagger)^{-1} \neq P, \quad (1.17a)$$

$$Q' = (U \times U^{-1}) \times (U \times Q \times U^\dagger) \times (U \times U^\dagger)^{-1} \neq Q. \quad (1.17b)$$

Инвариантность квантовой механики следует из того факта, что ассоциативное произведение " $\times$ " не меняется в (1.3с). В то же время, обобщенные произведения "<" и ">" расширенных теорий (1.12) меняются преобразованиями, включающими саму временную эволюцию теории. Такие же результаты имеют место для любых других неунитарных теорий, как предлагается проверить читателю.

Важно знать, что соответствующие катастрофические несогласованности существуют для всех *классических* примеров неунитарных теорий, а именно, *классических неканонических формулировок* [4g]. Отсутствие канонического характера временной эволюции подразумевает отсутствие сохранения основных единиц, отсутствие уникальных и инвариантных числовых предсказаний и т.д.

Математические несогласованности неунитарных и неканонических теорий просто катастрофичны. Все эти теории сформулированы *над данным полем чисел*. Какая бы не была теория, неканоническая на классическом уровне или неунитарная на операторном уровне, ее первая инвариантность это инвариантность основной единицы, то есть, *основной единицы, лежащей в основе поля*.

Отсутствие сохранения единицы тогда подразумевает утрату основного поля чисел в котором теория сконструирована. Это приводит к тому, что вся аксиоматическая структура теории, сформулированная в начальный момент времени, не годится для последующих моментов времени.

Например, формулировка неунитарной теории на обычном гильбертовом пространстве не имеет математического смысла, так как это пространство определено над полем комплексных чисел. Утрата последнего, при неунитарных преобразованиях, подразумевает утрату первого.

Схожим образом, формулировка классической неканонической теории над евклидовым пространством, страдает катастрофическими математическими несогласованностями, так как, из ясных соображений аксиоматической согласованности, евклидово пространство требует инвариантного поля действительных чисел.

Короче говоря, потеря инвариантности фундаментальной единицы при неканонических или неунитарных временных эволюциях подразумевает коллапс всей математической формулировки, без известных исключений.

**Теорема 1.3 :** *Все классические теории с неканоническими временными эволюциями, сформулированные на обычных метрических пространствах над обычными полями, не обладают последовательной математической структурой, так как, отсутствует инвариантность во времени единицы, полей, векторных и метрических пространств и т.д.*

Лучшая иллюстрация дается Ли-допустимой переформулировкой исторических аналитических уравнений, лагранжевых и гамильтоновых уравнений с внешними членами [14] (см. монографии [6c, 6d]), которые "непосредственно универсальны" для всех возможных уравнений движения. Тем не менее, они не обладают инвариантной структурой и, как сформулировано выше, не имеют известного физического применения.

То же происходит для биркгоффовского обобщения гамильтоновой механики, представленного в монографии [6b]. Действительно, такая ме-

ханика является *неканоническим* образом обычной гамильтоновой механики, описываемой литературой того же времени (с урезанными внешними членами). Раз так, они неинвариантны относительно их собственного действия, с соответствующим появлением несогласованностей из Теоремы 1.3.

Читатель должен иметь в виду, что указанные несогласованности относятся не только к уравнениям (1.12), но так же к большому числу обобщенных теорий, как ожидается из непосредственной универсальности (1.12). Существенно выделить в дальнейшем, по крайней мере самые важные характерные случаи физически несогласованных теорий, для предотвращения их возможного применения в химии (литературу и подробности см. в [4g]):

1) Диссипативные ядерные теории [12a], воспроизводимые через мнимый потенциал в неэрмитовых гамильтонианах  $H = H_0 = iV \neq H^\dagger$ , и соответственно нарушающие структуру (1.1). Эти теории утратили все алгебры со скобками их временной эволюции (требующими билинейное произведение), ради тройных систем,  $i dA/dt = A \times H - H^\dagger \times A = [A, H, H^\dagger]$ . Это подразумевает полную утрату таких понятий как "нейтроны и протоны" понимаемых в традиционном смысле, так как их определение (например, для спина) предполагает наличие согласованной алгебры со скобками временной эволюции.

2) Статистические теории с внешним членом  $C$  [12b], отвечающим за столкновения, и уравнениями движения плотности  $i d\rho/dt = \rho \odot H = [\rho, H] + C$ ,  $H = H^\dagger$ , которые не позволяют произведению  $\rho \odot H$  характеризовать какую-либо алгебру, так же как и существованию экспоненциального закона (1.1a), не говоря уже об условиях унитарности.

3) Так называемые " $q$ -деформации" произведения Ли  $A \times B - q \times B \times A$ , где  $q$  - отличный от нуля скаляр [12c], которые являются тривиальным частным случаем  $(p, q)$ -деформаций Сантилли (1.11).

4) Так называемые " $k$ -деформации" [12d] которые являются релятивистской версией  $q$ -деформаций, поэтому также являющиеся частным случаем общих структур (1.11).

5) Так называемые "звездочные деформации" [12e] с обобщенным ассоциативным произведением  $A \star B = A \times T \times B$ , где  $\hat{T}$  - фиксирован, и обобщенным произведением Ли  $A \star B - B \star A$ , которые нарушают структуры (1.1) и *совпадают* с Ли-изотопическими законами Сантилли.

6) Деформированные теории с операторами рождения-уничтожения [12f, 12g].

- 7) Неунитарные статистические теории [12h].
- 8) Необратимые динамики черных дыр с Ли-допустимыми структурами Сантилли (1.16) [12i].
- 9) Неканонические временные теории [12j].
- 10) Так называемые суперсимметричные теории [12k] с произведением  $(A, B) = [A, B] + \{A, B\} = (A \times B - B \times A) + (A \times B + B \times A)$ , которое, очевидно, является частным случаем Ли-допустимого произведения Сантилли (1.12b) с  $T = 1$  и  $W = I$ .
- 11) Супералгебры Каца-Муди [12l], в которых так же используется частный случай Ли-допустимого произведения Сантилли (1.12b) с  $T = I$  и фазовым фактором  $W$ .
- 12) Теории струн [12m], которые имеют суперсимметричную структуру с соответственной временной эволюцией, которая является неканонической на классическом уровне и неунитарной на операторном уровне.
- 13) Теории великого объединения на искривленном многообразии [12m], для которых временная эволюция, так же неканонична на классическом уровне и неунитарна на операторном уровне.

*Все вышеперечисленные теории имеют неунитарную структуру сформулированную через обычную математику и, следовательно, имеют катастрофические физические несогласованности Теоремы 1.2*

Были попытки построить обобщенные теории через *ослабление линейного характера квантовой механики* [4]. Эти теории, по существу, основаны на уравнениях на собственные значения со структурой  $H(t, r, p, |\psi\rangle) \times |\psi\rangle = E \times |\psi\rangle$  (то есть  $H$  зависит от волновых функций).

Даже несмотря на математическую непогрешимость и обладание на вид почти унитарной временной эволюцией, эти теории обладают рядом других серьезных физических недостатков, таких как: они нарушают принцип суперпозиции квантовой механики, поэтому они совершенно неприменимы к таким композитным системам как молекула; они нарушают фундаментальную теорему Маккея об импримитивности, которая необходима для применения принципов относительности Галилея и Эйнштейна; и обладают другими столь серьезными недостатками [4], что это препятствует любым их применениям.

Еще одной типичной расширенной теорией является теория *Вайнберга с неассоциативной обертывающей алгеброй* [12n]. Это теория, в которой ассоциативное произведение  $A \times B$  произведения Ли  $[A, B] = A \times B - B \times A$  заменяется определенным *неассоциативным* произведением  $A \odot B, A \odot (B \odot C) \neq (A \odot B) \odot C$ .

Последняя теория нарушает теорему некантования Окубо [4a], которая запрещает использование неассоциативных обертывающих алгебр из-за катастрофических физических последствий, таких как утрата эквивалентности между представлениями Шредингера и Гейзенберга (первое остается ассоциативным, в то время как последнее становится неассоциативным, что приводит к неэквивалентности).

Теория Вайнберга так же имеет дополнительные серьезные несогласованности, изученные в деталях в работе [4d], такие как: полное отсутствие какой-либо единицы вообще, не говоря уже о недостатке ее инвариантности (из-за отсутствия какой-либо величины  $E$  такой, что  $E \odot A \equiv A \odot E = A$ ,  $\forall A$ ), с соответствующей невозможностью применения для измерений; нарушение принципов относительности Галилея и Эйнштейна (из-за отсутствия экспоненцирования); и другие.

Некоторые авторы пытались также *ослабить локально-дифференциальный характер квантовой механики* [4]. Попытки были сделаны через добавление "интегральных потенциалов"  $V = \int d\tau \Gamma(\tau, \dots)$  в гамильтониан.

Эти теории имеют структурные расколы как в математическом, так и физическом основаниях. Действительно, нелокальное расширение развивается через традиционную математику квантовой механики, которая, начиная с ее топологии, строго локально-дифференциальна, следовательно предполагаются фундаментальные *математические несогласованности*. Нелокальные взаимодействия имеют в общем контактный тип, для которого понятие потенциала не имеет физического смысла, что выливается в серьезные *физические несогласованности*.

В заключении отметим, что в начале 1980-х годов, Сантили были найдены классические и операторные обобщающие теории [5, 6], которые являются непосредственно универсальными в своей области, а также множество более простых версий различных авторов. Однако, все эти теории не имеют физического смысла, так как они неинвариантны при их разработке с помощью обычной математики.

## 1.8 Адронная механика

Работая в Гарвардском университете при поддержке Департамента Энергетики США (DOE), Сантили в 1978 г. в ряде работ [5c, 5d, 5e] предложил конструкцию *адронного обобщения квантовой механики*, или

для краткости *адронную механику*, имеющую следующие ветви:

**I) Изотопическая ветвь адронной механики**, которая характеризуется следующим обобщением основных уравнений Раздела 1.1 на  $\mathcal{H}$  над  $\mathbb{C}$ , впервые предложенное в [5e], уравнение (4.15.49),

$$A(t) = U \times A(0) \times U^\dagger = e^{i \times H \times T \times t} \times A(0) \times e^{-i \times t \times T \times H}, \quad (1.18a)$$

$$i \frac{dA}{dt} = [A, \hat{H}]_{\text{operator}} = A \hat{H} - H \hat{A} = A \times T \times H - H \times T \times A, \quad (1.18b)$$

$$T = T^\dagger > 0, \quad U \times U^\dagger \neq I, \quad (1.18c)$$

где  $T$  это несингулярный оператор (или матрица), с классическими аналогами [5d]

$$A(t) = e^{t \times T_i^j \times (\partial H / \partial r^i) \times (\partial / \partial p_j)} \times A(0) \times e^{-t \times T_i^j \times (\partial / \partial r^i) \times (\partial H / \partial p_j)}, \quad (1.19a)$$

$$\frac{dr^k}{dt} = T_i^k(t, r, p) \times \frac{\partial H(t, r, p)}{\partial p_i}, \quad \frac{dp_k}{dt} = -T_k^i(t, r, p) \times \frac{\partial H(t, r, p)}{\partial r^i}, \quad (1.19b)$$

$$\frac{dA}{dt} = [A, \hat{H}]_{\text{classical}} = \frac{\partial A}{\partial r^i} \times T_j^i \times \frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial H}{\partial r^i} \times T_j^i \times \frac{\partial A}{\partial p_j}, \quad (1.19c)$$

где термин "изотопический" был предложен [5d], исходя из греческого смысла этого слова, чтобы подчеркнуть "сохраняющий аксиомы характер" новой теории. Действительно, новые скобки  $[A, B] = A \hat{B} - B \hat{A} = A \times T \times B - B \times T \times A$  в самом деле удовлетворяют аксиомам алгебр Ли, хотя и в их обобщенной форме.

Доминирующая черта теории (1.18) состоит в наличии *неунитарности* (1.18c), благодаря отсутствию коммутативности между  $H$  и  $T$ . Следовательно, теория не входит в класс эквивалентности квантовой механике.

Отсюда следует, что теория (1.18) допускает непотенциально-негамильтоновы силы, представляемые изотопическим элементом  $T$ , который в самом деле негамильтонов по своей природе. В частности, кроме условия эрмитовости и положительной определенности,  $T = T^\dagger > 0$ , уравнение (1.18) сохраняет функциональную зависимость изотопического оператора, которая может иметь форму  $T = T(r, v, \psi, \partial \psi, \dots)$ . Следовательно, непотенциальные взаимодействия воспроизводимые  $T$  могут быть нелинейными по волновым функциям, а также непотенциальными интегральными, по желанию.

Другой важной чертой теории (1.18) является наличие *структурной обратимости, то есть обратимости для обратимого гамильтониана*, так же как в случае квантовой механики. Это происходит из-за сопряжения во времени через операцию эрмитова сопряжения, которая сводит на нет все возможные попытки воспроизведения необратимости через зависимость от времени изотопических элементов  $T = T(t, \dots) \neq T(-t, \dots)$ .

Еще одна важная черта вышеприведенной теории, это выполнение обычных законов сохранения, в виду, очевидно, полного антисимметричного характера фундаментальных скобок, например,

$$i \times \frac{dH}{dt} = H \hat{\times} H - H \hat{\times} H = H \times T \times H - H \times T \times H \equiv 0. \quad (1.20)$$

Следовательно, изотопическая ветвь адронной механики, в частности, подходит для воспроизведения *замкнуто-изолированных обратимых систем с линейными и нелинейными, локальными и нелокальными, потенциальными и непотенциальными внутренними силами*.

Очевидно, что теории (1.18) и (1.19) обещают более глубокое понимание молекулярных структур, так как, в добавок ко всем традиционным чертам квантовой механики, воспроизведенной с гамильтонианом  $H$ , они позволяют количественное воспроизведение глубокого взаимного перекрытия волновых пакетов валентных электронов через изотопические элементы, которое мы будем изучать в дальнейшем.

**II) Генотопическая ветвь адронной механики**, которая основана на следующем дальнейшем обобщении динамических уравнений Раздела 1.1, впервые предложенном в [5e], уравнения (4.15.34) и (4.18.11):

$$A(t) = U \times A(0) \times U^\dagger = e^{i \times H \times Q \times t} \times A(0) \times e^{-i \times t \times P \times H}, \quad P = Q^\dagger, \quad (1.21a)$$

$$\begin{aligned} i \frac{dA}{dt} &= (A \hat{;} B)_{\text{operator}} = A \langle B - B \rangle A = \\ &= A \times P \times H - H \times Q \times A = \\ &= (A \times T \times B - B \times T \times A) + (A \times W \times B + B \times W \times A) = \\ &= [A \hat{;} B] + \{A \hat{;} B\}, \end{aligned} \quad (1.21b)$$

$$P \neq Q, \quad P = Q^\dagger, \quad U \times U^\dagger \neq I, \quad (1.21c)$$

где  $P = T + W$ ,  $Q = T - W$  и  $P + Q$  несингулярные неэрмитовы операторы (или матрицы), с классическими аналогами [5d, 5f],

$$A(t) = e^{t \times (\partial H / \partial p_j) \times P_j^i \times (\partial / \partial r^i)} \times A(0) \times e^{-t \times (\partial / \partial p_j) \times Q_j^i \times (\partial H / \partial r^i)}, \quad (1.22a)$$



$$\frac{dr^k}{dt} = P_i^k(t, r, p) \times \frac{\partial H(t, r, p)}{\partial p_i}, \quad \frac{dp_k}{dt} = Q_k^i(t, r, p) \times \frac{\partial H(t, r, p)}{\partial r^i}, \quad (1.22b)$$

$$\frac{dA}{dt} = (A \hat{;} B)_{\text{classical}} = \frac{\partial A}{\partial r^i} \times P_j^i \times \frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial H}{\partial r^i} \times Q_j^i \times \frac{\partial A}{\partial p_j}, \quad (1.22c)$$

при условии, что антисимметричные скобки, связанные с обобщенными скобками,  $[A \hat{;} B] = (A \hat{;} B) - (B \hat{;} A)$ , есть Ли-скобки.

Термин "генотопический" был предложен [5d], исходя из его греческого значения, чтобы подчеркнуть "аксиоматически индуцированный характер" теории. Действительно, изначальный Ли-характер теории теперь потерян, в предпочтении более широких аксиом Ли-допустимости.

Очевидно, что теория (1.21) неунитарна, как упрощенная версия (1.18), хотя теперь теория структурно необратима, то есть необратима для всех обратимых гамильтонианов, как и было желательно. Более того, необратимость воспроизводится неэрмитовостью генотопических элементов  $P$  и  $Q$ , а не гамильтонианом, что тоже было желательно.

Другой важной характеристикой вышеизложенной расширенной теории, является воспроизведение временной нормы вариаций физических характеристик (иной, чем обычные законы сохранения), очевидно в виду того факта, что динамические скобки не обязательно теперь концептуально антисимметричны. Тогда мы имеем временную норму вариации полной энергии

$$i \times \frac{dH}{dt} = (H \hat{;} H) = H \langle H - H \rangle H = H \times P \times H - H \times Q \times H \neq 0. \quad (1.13)$$

Очевидно, что теории (1.21) и (1.22) обещают более глубокое понимание необратимых процессов и химических реакций, так как в добавок к включению всех обычных квантово-химических методов через обычный гамильтониан  $H$ , они допускают дополнительные генотопические элементы  $P$  и  $Q$ , подходящие для воспроизведения необратимости.

**III) Гиперструктурная ветвь адронной механики**, которая основана на следующих многозначных уравнениях, впервые предложенных Сантилли в одной из последних статей [5k]

$$A(t) = U \times A(0) \times U^\dagger = e^{i \times H \times \{Q\} \times t} \times A(0) \times e^{-i \times t \times \{P\} \times H}, \quad (1.24a)$$

$$P = Q^\dagger,$$

$$\begin{aligned}
i\frac{dA}{dt} &= (A\hat{H})_{\text{operator}} = A < H - H > A = \\
&= A \times \{P\} \times H - H \times \{Q\} \times A = \\
&= (A \times \{T\} \times H - H \times \{T\} \times A) + \\
&+ (A \times \{W\} \times H + H \times \{W\} \times A) = \\
&= [A\hat{H}] + \{A\hat{H}\},
\end{aligned} \tag{1.24b}$$

$$\{P\} = \{P_1, P_2, P_3, \dots\} \neq \{Q\} = \{Q_1, Q_2, Q_3, \dots\}, \tag{1.24c}$$

где  $\{P\} = \{T\} + \{W\}$ ,  $\{Q\} = \{T\} - \{W\}$  и  $\{P \pm Q\}$  теперь несингулярный набор операторов (или матриц), с классическими аналогами [5k]

$$\begin{aligned}
A(t) &= e^{t \times (\partial H / \partial p_j) \times \{P\}_j^i \times (\partial / \partial r^i)} \times \\
&\times A(0) \times e^{-t \times (\partial / \partial p_j) \times \{Q\}_j^i \times (\partial H / \partial r^i)},
\end{aligned} \tag{1.25a}$$

$$\frac{dr^k}{dt} = \{P\}_i^k(t, r, p) \times \frac{\partial H(t, r, p)}{\partial p_i}, \quad \frac{dp_k}{dt} = -\{Q\}_k^i(t, r, p) \times \frac{\partial H(t, r, p)}{\partial r^i}, \tag{1.25b}$$

$$\frac{dA}{dt} = (A\hat{H})_{\text{classical}} = \frac{\partial A}{\partial r^i} \times \{P\}_j^i \times \frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial H}{\partial r^i} \times \{Q\}_j^i \times \frac{\partial A}{\partial p_j}. \tag{1.25c}$$

вновь при условии, что привлеченные антисимметричные скобки имеют Ли-тип, хотя и многозначной версии.

Термин "гиперструктурный" был предложен [5k] как соответствующий математическому смыслу термина "многозначный". Вышеозначенное третье расширение адронной механики, очевидно, сохраняет неунитарный, необратимый характер генотопической теории, но добавляет многочисленные уровни свободы, связанные с многозначностью и, следовательно, позволяет количественные исследования биологических структур, как это будет показано.

Достижение инвариантной формулировки нелинейных, нелокальных и непотенциальных взаимодействий требует конструирования *новой математики* сильно возросшей сложности, предложенной Сантилли [5d, 5k] под названиями *изо-, гено- и гипер-математики*. Эти новые математики будут рассмотрены в следующей главе.

Главная существенная причина для введения новой математики следующая. Основная единица  $I$  квантовой механики и квантовой химии есть единица универсальной обертывающей операторной алгебры с обычным произведением  $A \times B (= AB)$ ,  $I \times A = A \times I = A$ , для всех возможных элементов  $A$ .

После поднятия ассоциативного произведения в форме  $A \hat{\times} B = A \times T \times B$ , с фиксированным оператором (или матрицей)  $T$ , очевидно, что  $I$  больше не единица теории,  $I \hat{\times} A = T \times A \neq A$ , что ведет к катастрофическим физическим и математическим несогласованностям, в том случае, если мы пользуемся обычной математикой.

Достижение инвариантности требует, во первых, идентификации новой обобщенной единицы теории, и затем, реконструкции изначальной математики в соответствии с новой единицей, следовательно, подразумевается введение новых чисел и полей, новых векторов и гильбертова пространства, новых алгебр и геометрий и т.д.

В середине 1990-х годов эта новая математика была достаточно разработана. Однако, различные ветви адронной механики все еще испытывают недостаток в инвариантности. После усиленных исследований, проблема вылилась, как минимум, в *принципиально новое* исчисление, зависящее, очевидно, от основной единицы, когда последняя больше не является тривиальной константой.

Математическая зрелость, наконец, была достигнута только в работе [5k] 1996 года, которая показала необходимость поднятия изначального дифференциального исчисления. Инвариантная формулировка адронной механики была затем достигнута в работах [5l, 5n]. Следовательно, читатель должен иметь в виду, что *все публикации касающиеся адронной механики до работ [5k, 5l, 5n] 1996-1997 годов, физически несогласованы, так как, испытывают недостаток в полной инвариантности, необходимой для последовательного применения.*

В общем, адронная механика, это образ квантовой механики, сформулированный через новую изо-, гено- и гипер-математику и их изодуальные, с соответствующей *изо-, гено- и гипер-механикой* для воспроизведения *однозначных обратимых, однозначных необратимых и многозначных необратимых систем* соответственно.

Следует заметить, что *адронная механика совпадает с квантовой механикой на абстрактном, свободном от реализации уровне во всех изо-, гено и гипер-ветвях.* Фактически, адронная механика всего лишь предполагает расширенную реализацию традиционных квантовых аксиом Раздела 1.1.

В частности, *адронная механика сохраняет все обычные законы и принципы квантовой механики*, такие как принцип запрета Паули, принцип неопределенности Гейзенберга, законы причинности, вероятности и т.д.

К тому же, адронная механика представляет собой "пополнение" квантовой механики в соответствии со знаменитым аргументом Эйнштейна-Подольского-Розена [3a], и обеспечивает конкретную и ясную реализацию теории "скрытых переменных" [3c], которая точно реализуется изотопическим элементом  $\lambda = T$ . Последний аспект детально изучен в работе [3e] и мы не приводим здесь эти результаты для краткости.

Мы должны наконец отметить, что адронная механика допускает дополнительную новую математику, так называемую *изодуальную математику* [5k], для инвариантной формулировки *антиматерии* на всех уровнях [5o]. Следовательно, адронная механика допускает восемь классических ветвей (классическая гамильтонова, изо-, гено- и гипер-механика для описания материи, плюс изодуальные к ним для описания антиматерии), так же как восемь соответствующих операторных ветвей с восьмью перекрывающимися картами (называемыми обычными, изо-, гено- и гипер-квантованиями и их изодуальные).

Для краткости, в этой монографии мы будем рассматривать только материю, и изодуальная математика и связанные с ней теории рассматриваться не будут. Однако, читатель должен иметь в виду, что изодуальная математика оказывается весьма полезной для численного воспроизведения биологических процессов, таких как бифуркации. Поэтому, изучение изодуальной теории рекомендуется исследователям, работающим в области биологии.

К настоящему времени, новая адронная механика находит свое применение и экспериментальные подтверждения практически во всех областях науки, включая физику элементарных частиц, ядерную физику, астрофизику, сверхпроводимость, химию, гравитацию и космологию. Работа [6k] дает всесторонний обзор. Несколько обычных применений показаны на Рис. 1.9–1.20 без трактовок.

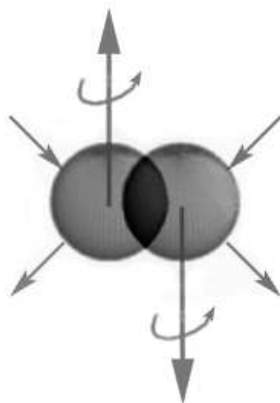


Рис. 1.8: Схематическое изображение фундаментальных условий, изученных в этой статье, – *глубокое перекрытие протяженных волновых пакетов валентных электронов с точечными зарядами в синглетном соединении*, как требует принцип Паули. Заметим еще раз, что для квантовой механики электроны точечны и, следовательно, условия этой фигуры не имеют смысла вообще. Однако, этот точечный характер в общем относится к *зарядовой* структуре электрона. Для обобщающей адронной механики точечная зарядовая структура электронов сохраняется, с дополнительным изучением *перекрытия протяженных волновых пакетов*. К тому же, квантовая механика может описать электроны только через динамические уравнения, которые являются *линейными, локальными и потенциальными*. Напротив, адронная механика способна инвариантным способом воспроизвести главные характеристики волнового перекрытия, так как она в общем случае *нелинейна, нелокальна и непотенциальна*. Как мы увидим в Главах 3 и 4, последнее условие предполагает появление принципиально новой силы притяжения между валентными электронами, с логически вытекающей новой концепцией валентных связей и молекулярных структур, способной весьма точно воспроизводить экспериментальные данные.

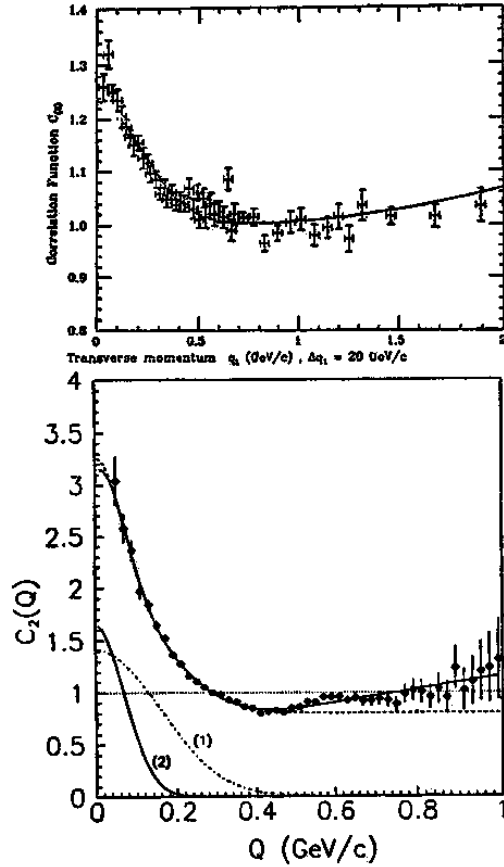


Рис. 1.9: [6k] Экспериментальное подтверждение адронной механики в физике элементарных частиц, весьма важное для этой монографии. Точное совпадение экспериментальных данных по Бозе-Эйнштейновским корреляциям для протон-антипротон аннигиляции при высоких энергиях (верхняя линия) и при низких энергиях (нижняя линия). Квантовая механика может воспроизвести эти экспериментальные данные только через введение нескольких дополнительных параметров неизвестного физического происхождения (так называемых "параметров хаотичности"). Двухточечная корреляционная функция выпадает за рамки возможностей квантовой механики, из-за необходимости недиагональных элементов в вакуумных ожидаемых значениях, которых нет. Недиагональные элементы являются действительными источниками корреляции и полностью допускаются адронными ожидаемыми значениями для недиагональных изотопических элементов  $\hat{T}$ .

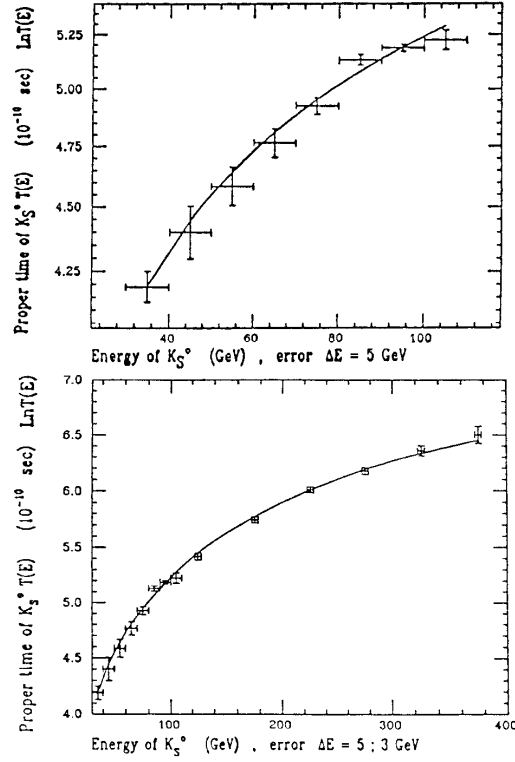


Рис. 1.10: [6k] Еще одно воспроизведение экспериментального подтверждения адронной механики в физике элементарных частиц. Точное совпадение экспериментальных данных для (нестабильного) каона, по аномальному поведению среднего времени жизни в зависимости от энергии. Верхняя фигура воспроизводит точное совпадение экспериментальных данных от 0 до 100 Гэв, и нижняя фигура воспроизводит точное совпадение от 0 до 400 Гэв. Это экспериментальное подтверждение весьма важно для данной монографии, так как это устанавливает существование нелинейных, нелокальных и непотенциальных эффектов для каонов, подобных эффектам, касающихся Бозе-Эйнштейновских корреляций, которые лежат в основе новой изохимической модели валентных связей, представленной в этой монографии.

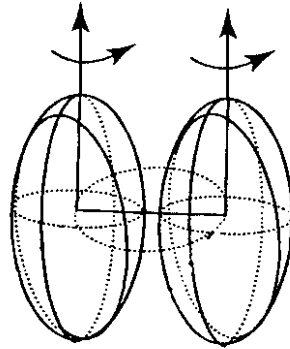


Рис. 1.11: [6k] Схематическое изображение экспериментального подтверждения адронной механики в ядерной физике. *Первое точное численное воспроизведение всех ядерных магнитных моментов.* Квантовая механика должна воспроизводить протоны и нейтроны идеально жесткими и с идеальным сферическим распределением заряда. Как необходимое условие ненарушения основ теории – сферической симметрии  $O(3)$ . Однако, при этом квантовая механика неспособна воспроизвести ядерные магнитные моменты, несмотря на огромные (и дорогие) усилия приложенные в прошедшем веке. Фактически, после всех возможных поправок, около 1% все еще не достает для воспроизведения магнитного момента дейтрона, а по мере укрупнения ядер отклонения становятся все больше и больше (что еще больше смущает). Адронная механика воспроизводит протоны и нейтроны как они есть в физической реальности, имеющими объем, несферическими и деформированными, сфероидальными эллипсоидами. Такое воспроизведение достигается через изоединицу  $\hat{I} = \text{Diag.}(n_1^2, n_2^2, n_3^2, n_4^2)$ , where  $n_1^2, n_2^2, n_3^2$  воспроизводящую сфероидальные полуоси (нормированные на единицу для сферы), и  $n_4^2$  позволяет первое воспроизведение плотности нуклонов (также нормированное на единицу для вакуума). Деформация зарядового распределения нуклонов тогда подразумевает соответствующие изменения их внутренних магнитных моментов внутри ядерной структуры. И уже в свою очередь, последнее изменение позволяет точное численное воспроизведение всех полных ядерных магнитных моментов (для дейтрона, как показано на рисунке, вытянутая деформация составляет около 1%). Это подтверждение адронной механики, также подразумевает значительное индустриально-экологическое применение, находящееся сейчас в стадии разработки: переработку радиоактивных ядерных отходов путем стимулированного распада.



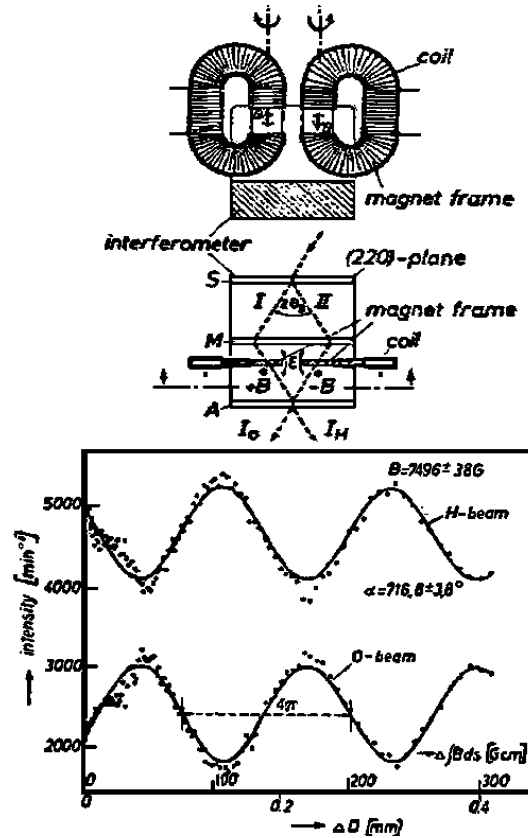


Рис. 1.12: [6k] Другое подтверждение адронной механики в ядерной физике. Точное численное воспроизведение экспериментальных данных для  $4\pi$ -спинорной симметрии быстрых нейтронов при прохождении через сильные внешние электромагнитные поля, такие, какие существуют в окрестностях ядер. Этот эффект также связан с отсутствием идеальной жесткости нейтронов. Под воздействием сильных внешних полей, нейтроны испытывают деформацию своей формы, что изменяет их внутренние магнитные моменты. Следовательно, спины быстрых нейтронов не полностью ориентированы в двух направлениях, как это ожидается из традиционных представлений. Снова, адронная механика позволяет точное воспроизведение экспериментальных данных через изоединицу из текста к предыдущему рисунку, при этом принимая спинорную симметрию  $SU(2)$  как точную.

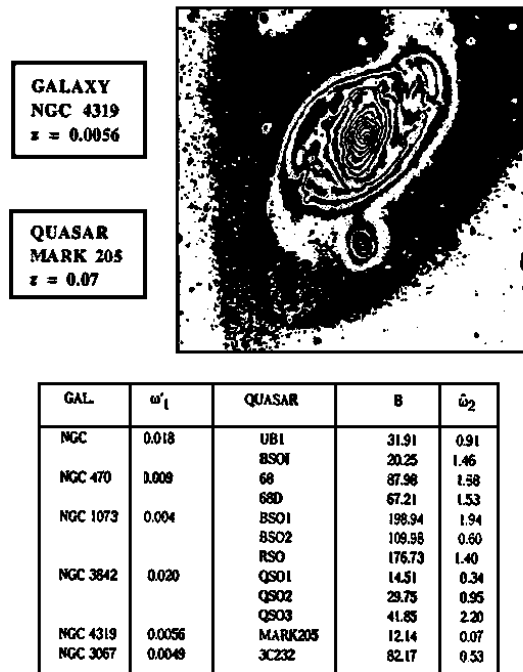


Рис. 1.13: [6к] Пример экспериментального подтверждения адронной механики в астрофизике. Точное числовое воспроизведение больших отличий космологических красных смещений некоторых квазаров (таких как Mark 205) и связанной с ними галактики (такой как MGC 4319), в том случае когда они физически связаны, согласно ясным экспериментальным данным гамма-спектроскопии. В этом случае они должны иметь одинаковое красное смещение. Согласно специальной теории относительности, скорость света есть универсальная постоянная. Согласно покрывающей изоспециальной теории относительности, скорость света есть локальная переменная, зависящая от характеристик среды в которой он распространяется. Астрофизические данные, следовательно, показывают красное смещение для квазаров, свет от которых уже имел красное смещение сразу после прохождения их гигантских хромосфер. Как следствие, красное смещение не обязательно мера расширения вселенной, как это считается в настоящее время.

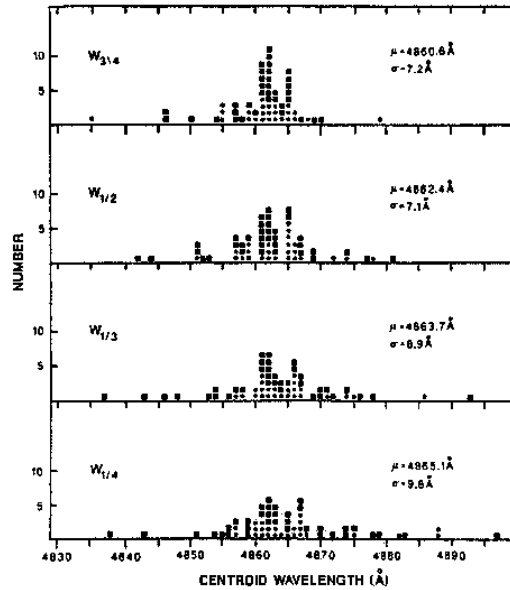


Рис. 1.14: [6k] Еще одно подтверждение в астрофизике адронной механики и ее изоспециальной теории относительности: *точные числовые воспроизведения внутренних красного и синего смещений квазаров*. В сущности, для каждого данного квазара космологическое красное смещение непостоянно, а зависит от частоты света, с внутренним красным смещением (дальнейшее увеличение космологического красного смещения) для инфракрасного спектра и внутренним синим смещением (уменьшение космологического красного смещения) для ультрафиолетового спектра. Эти красное и синие смещения, очевидно, несовместимы со специальной теорией относительности, так как они подразумевают различные скорости света внутри хромосферы квазаров для различных частот. Изоспециальная теория относительности предсказывает эти события и воспроизводит их точно. Другими космологическими применениями адронной механики и лежащей в ее основе изоминковской геометрии являются: первая космологическая модель с точной *симметрией*, прямое произведение Пуанкаре-Сангилли изосимметрии для материи и изодуальной к ней – для антиматерии; первое включение биологических систем в космологии; полная тождественно нулевая характеристика вселенной (нулевая полная масса, нулевое полное время и т.д.) для равных количеств материи и антиматерии (как следствие изодуальной математики), поэтому без нарушения баланса при рождении; отсутствие необходимости в "недостающей массе"; и другие интересные применения.

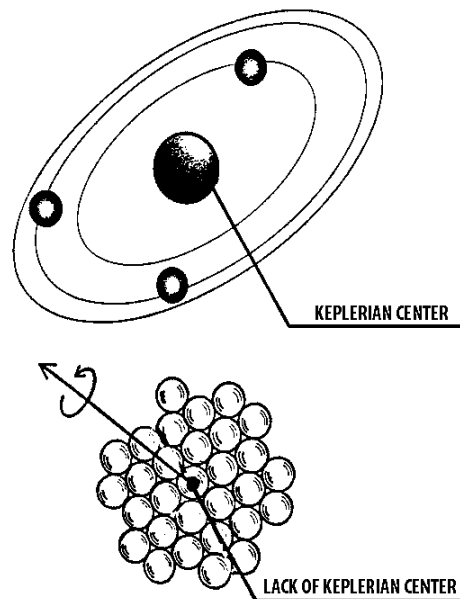


Рис. 1.15: [6k] Иллюстрация еще одного экспериментального подтверждения адронной механики индустриальными применениями, отмеченными в Главе 7. Воспроизведение драматических структурных различий между атомной структурой кеплеровского типа, с точным подчинением симметрии Пуанкаре и специальной теории относительности, против структур адронов, ядер и молекул, которые не имеют кеплеровского центра, поэтому подразумевают обязательное нарушение симметрии Пуанкаре и неприменимость специальной теории относительности. Адронная механика достигает точного воспроизведения адронных и ядерных структур без кеплеровского центра через изопопии симметрии Пуанкаре и специальной теории относительности. Некеплеровское воспроизведение молекулярных структур представлено в этой монографии. В свою очередь, такое воспроизведение является основанием для описания новых чистых источников энергии, представленных в Главе 7.

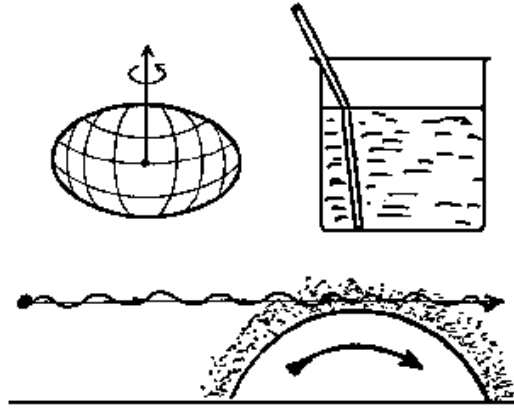


Рис. 1.16: [6k] Схематическое изображение возможности воспроизведения реального поведения света с *локальной вариацией скорости* с помощью изоспециальной теории относительности Сантиллы. Воспроизведение достигается через неканоническое преобразование на классическом уровне, или неунитарное преобразование на операторном уровне, *всех* аспектов специальной теории относительности, начиная с основной четырехмерной единицы и переходя затем к числам, пространствам и т.д. Для случая метрики Минковского, простейший возможный изотопический лифтинг подразумевает отображение обычной метрики, предполагающую постоянную скорость света в вакууме,  $m = \text{Diag.}(1, 1, 1, -c^2)$  в изометрику  $\hat{m} = \text{Diag.}(1, 1, 1, -c^2/n^2)$ , где  $n$  это изодуальный показатель преломления. Следовательно, изоспециальная теория относительности достигает непосредственного воспроизведения (то есть воспроизведения через саму геометрию) локальной вариации скорости света, причем специальная теория относительности является частным случаем при  $n = 1$ . Более сложные поднятия (лифтинги) геометрии Минковского допускают воспроизведение связанных систем без кеплеровского центра, так как обобщенные единицы воспроизводят контактные непотенциальные взаимодействия, так что взаимодействующие составляющие контактируют друг с другом точно так, как это происходит в структурах адронов, ядер и молекул. Изоспециальная теория относительности является, следовательно, самой фундаментальной теорией, лежащей в основе всех исследований представленных в этой монографии.

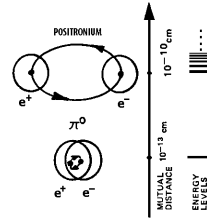


Рис. 1.17: [6k] Иллюстрация структурной модели, возможной для адронной механики и тем не менее строго запрещенной квантовой механикой:  $\pi^0$  мезона как связанного состояния одного электрона и одного позитрона на эффективных расстояниях около 1 фм. Эта модель невозможна в квантовой механике из-за множества соображений. Например, квантовое связанное состояние имеет отрицательную энергию связи, поэтому подразумевается, что полная масса меньше, чем сумма масс составляющих, требование чего, для случая  $\pi^0$ , подразумевало бы энергию покоя менее, чем 1 Мэв, в то время как  $\pi^0$  имеет энергию покоя 138 Мэв. Адронная механика разрешает это и все другие ограничения квантовой механики, введением структурной модели, которая способна точно воспроизвести все характеристики  $\pi^0$ , включая энергию покоя, зарядовый радиус, среднее время жизни, заряд, спин и их равенство, магнитный момент, так же как его распад по преобладающей схеме  $\pi^0 \rightarrow e^+ + e^-$ , который является результатом туннелирования его составляющих. Следует подчеркнуть, что когда электроны являются членами  $\pi^0$  структуры, они не являются обычными частицами, детектируемыми в лабораториях и характеризующиеся симметрией Пуанкаре, но являются *изоэлектронами*, то есть частицами характеризующиеся изосимметрией Пуанкаре-Сантилли. Вышеприведенная модель наименьшего из возможных адронов, была indexPoincaré-Santilli isosymmetry расширена на все мезоны, которые могут быть сведены к адронным связанным состояниям электронов и позитронов. Новая структурная модель адронов совместима с современными кварковыми теориями, при предположении, что кварки имеют составную структуру и действительно разрешают связанные с ними неприятные несогласованности, например, отсутствие строгого конфайнмента кварков (что легко может быть достигнуто адронной механикой через отсутствие связности между внешним и внутренним гильбертовыми пространствами).

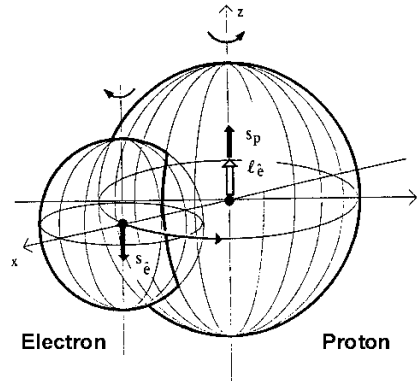


Рис. 1.18: [6k] Иллюстрация еще одной структурной модели, которая строго невозможна для квантовой механики, хотя легко достигается адронной механикой, – нейтрон, как он был изначально предположен Резерфордом, а именно, атом водорода, "сжатый до размеров протона" в центре звезды (связанное состояние протона и электрона на расстоянии 1 фм). Квантовая механика неспособна достичь этого воспроизведения из-за главных несогласованностей, таких как: необходимость "положительной" энергии связи (для получения энергии покоя нейтрона из энергий покоя протона и электрона); невозможность воспроизведения спина  $1/2$  для нейтрона, исходя из связанного состояния двух частиц со спинами  $1/2$  каждая; неспособность воспроизведения магнитного момента, зарядового радиуса и времени жизни нейтрона; и т.д. Все эти несогласованности разрешаются адронной механикой. Редукция структуры нейтрона к физическим частицам, позволяет тогда сконструировать сходную модель для нестабильных барионов, которая оказывается совместимой с кварковыми теориями при предположении составной структуры кварков. Следует заметить, что неспособность квантовой механики воспроизвести резерфордовскую концепцию нейтрона имело негативные научные последствия в историческом отношении, так как это привело к заброшенности адронных составляющих как физических частиц и предположению гипотетических ненаблюдаемых частиц, таких как кварков. Случившееся привело также к экологическим последствиям, так как препятствовало изучению нейтрона как крупнейшего резервуара чистой энергии, доступной человечеству. И наконец, это препятствовало изучению новых форм чистой ядерной энергии, которые теперь разрабатываются посредством адронной механики (см. Главу 7).

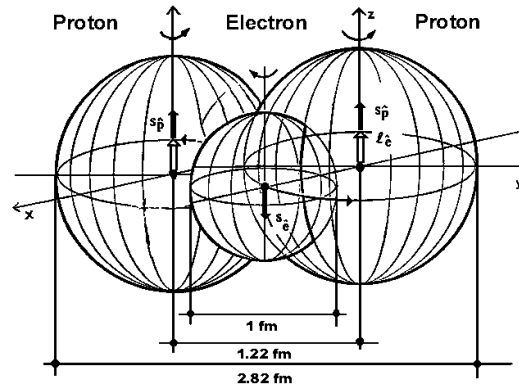


Рис. 1.19: [6к] Другая фундаментальная проблема, которая была оставлена нерешенной квантовой механикой после исчерпывающих исследований на протяжении 20-го века, это спин единица для дейтрона. Основные аксиомы квантовой механики требуют нулевого спина для системы из двух частиц со спинами  $1/2$  каждая. Эта дополнительная проблема была решена покрывающей адронной механикой. Действительно, из редукции нейтрона к адронному связанному состоянию протона и электрона, как на предыдущем рисунке, следует, что дейтрон – это система трех тел, состоящая из двух изопротонов и одного изоэлектрона, что подтверждается изоспециальной теорией относительности Сантилли и изосимметрией Пуанкаре-Сантилли. В результате, последняя модель способна воспроизвести все характеристики дейтрона, включая спин, магнитный момент и другие, невозпроизводимые квантовой механикой. Эта модель дейтрона была расширена на все ядра, что привело к адронной структурной модели ядер, сводящейся к изопротонам и изоэлектронам и покрывающей обычную модель с протонами и электронами в первом приближении. Следует подчеркнуть, что кроме академической эзотерической темы, сведение ядер к изопротонам и изоэлектронам фундаментально затрагивает и непосредственно социальные проблемы, так как предполагает новые формы чистой энергии, которые невозможны для старой протонно-нейтронной модели. Имея в виду наши тревожные проблемы окружающей среды, новая адронная структурная модель ядер не может быть проигнорирована на почве персональных мнений без поднятия серьезных проблем научной ответственности.



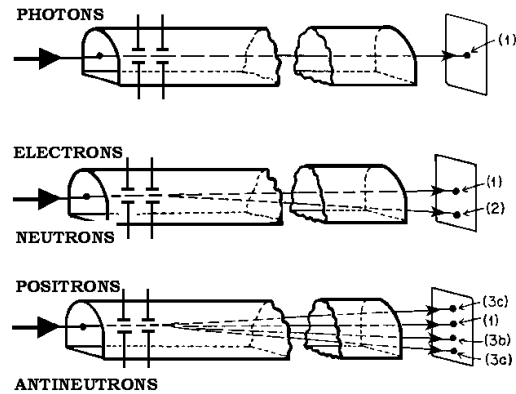


Рис. 1.20: [6k] Схематическое изображение предсказания адронной механики о том, что антиматерия в гравитационном поле материи (или наоборот), испытывает отталкивание (антигравитация). Это предсказание было сделано после разрешения всех известных аргументов против антигравитации благодаря использованию изодуальной математики. Сан-тилли предложил проверить это предсказание, используя горизонтальную вакуумную трубу длиной 50 метров и диаметром 1 метр, в которой: 1) фотоны из коллиматора первыми проходят сквозь туннель для определения точки на сцинтилляционном экране в конце туннеля, соответствующей отсутствию гравитации; 2) затем пучок электронов очень малой энергии проходит через тот же самый коллиматор для определения смещения вследствие гравитации, детектируемого с помощью того же сцинтилляционного экрана, это смещение должно быть видно невооруженным глазом при энергии электронов в несколько миллиэлектронвольт; и 3) пучок позитронов очень низкой энергии пропускается через тот же самый коллиматор. Отклонение позитронов вверх из-за гравитации установит тогда существование антигравитации, причем результат будет видим невооруженным глазом. Неважно, будет он положительным или отрицательным, эксперимент будет иметь далеко идущие последствия для всей науки.

Проверяя результаты, читатель должен помнить, что первоначальной целью адронной механики является построение новых структурных моделей адронов, ядер и молекул как необходимое условие для предсказания и разработки новых чистых источников энергии, так как идентификация всех возможных источников энергии с существующими моделями уже давно исчерпана (см. Раздел 7.7). Новая структурная модель молекул является первоначальной целью этой монографии. Новые структурные модели адронов и ядер были сделаны в других работах (см. недавнюю работу [6k]), и они не могут быть детально рассмотрены здесь во избежание чрезмерного объема монографии.

Для минимальных искажений в восприятии нижеприведенных фигур, важно знать, что адронная механика принимает как точные  $SU(3)$ -цветовые модели адронной классификации и в то же время предполагает составной характер кварков, поэтому допускаются другие элементарные составляющие.

Фактически, с одной стороны, экспериментальное подтверждение  $SU(3)$  классификации адронов, менделеевского типа, внутри семейств не оставляет сомнений. С другой стороны, предположение, что кварки являются элементарными составляющими адронов страдает большим количеством несогласованностей и неразрешимых проблем. При анализе, читатель должен помнить, что по самому определению, кварки есть чисто математическое воспроизведение чисто математической унитарной симметрии определенной в чисто математическом унитарном пространстве без всякой возможности строго определения в нашем пространстве-времени.

Более того, единственной научной возможностью определения физических масс является второй инвариант Казимира симметрии Пуанкаре. Но последняя симметрия не может допускать кварков. Следовательно, на строгом научном основании, можно сказать, что массы кварков это чисто математические параметры, определенные в чисто математическом унитарном пространстве, без возможности определения в нашем пространстве-времени.

Сходным образом, показано, что истинно научный (точный) конфайнмент ненаблюдаемых гипотетических кварков невозможен, в противоположность экспериментальным данным, что кварки не существуют в изолированной, непосредственно детектируемой форме.

После этих предпосылок, любое твердое убеждение, что кварки существуют в нашем пространстве-времени просто ненаучно.

И наоборот, предположение, что кварки это математические объекты

с композитной структурой, как показано адронной механикой, разрешает все известные недостатки адронной физики, достижением гармоничного симбиоза между  $SU(n)$  классификацией адронов и структурой каждого отдельного адрона данного семейства, с физическими частицами, полностью определяемыми в нашем пространстве-времени, обычно идентифицируемыми в спонтанных распадах простейшими методами.

Заметим, что вышеуказанные исследования строго запрещены квантовой механикой из хорошо известных исторических причин. Например, наименьший из известных адронов,  $\pi^0$  мезон, допускает спонтанный распад по следующей простейшей схеме  $\pi^0 \rightarrow e^+ + e^-$ . Следовательно, естественно предположить, что  $\pi^0$  есть связанное состояние одного электрона и одного позитрона. Такое предположение строго запрещено квантовой механикой, потому что это требовало "положительных" энергий связи и подразумевало другие несогласованности. Однако, после предположения, что члены адронной структуры, электроны и позитроны, подчиняются расширенным физическим законам и симметриям адронной механики, все несогласованности разрешаются [6k].

Схожая ситуация имеет место для нейтрона, который спонтанно распадается на протон, электрон и антинейтрино. Следовательно, естественно предположить, что нейтрон есть связанное состояние одного протона и одного электрона, как было изначально предположено Резерфордом ("сжатие атомов водорода в центре звезд"). И опять, такое предположение строго запрещено квантовой механикой из множества соображений, известных со времен Паули. Фактически, резерфордовская "гипотеза" для нейтронов была принята, хотя его "концепция" нейтронов была забракована. Однако все исторические возражения против последней разрешаются, когда составляющие подчиняются обобщенным законам и симметриям адронной механики [6k].

Кроме существования чисто эзотерического аспекта, вопрос о том являются ли составляющими нейтронов гипотетические кварки или физические протон и электрон, имеет и непосредственную социальную значимость, так как нейтрон является крупнейшим резервуаром чистой энергии доступной для человечества, как показано в Разделе 7.7. Предположение, что кварки являются элементарными составляющими нейтронов, препятствует практическому использованию этой энергии по различным техническим соображениям [6k]. И наоборот, предположение, что протоны и электроны физические составляющие нейтронов (в обобщенной форме), непосредственно позволяет предсказание и индустриальное ис-

пользование упомянутого неиссякаемого источника чистой энергии. То же кварковое предположение запрещает огромное количество новых видов чистой энергии ядерного типа.

В заключение, предположение, что кварки есть "элементарные" составляющие адронов, без рассмотрения на предмет множества несогласованностей, составляет одну из наибольших угроз современному обществу, поскольку препятствует, или другими словами подвергает сомнению, предсказания и индустриальные разработки новых видов чистой энергии, так необходимых человечеству. Понимание кварков как "составных" математических объектов, полностью приемлемо на научном и социальном основаниях.

## 1.9 Адронная сверхпроводимость

Понимание изоспециальной теории относительности неизбежно приводит к заключению, что новая дисциплина и лежащая в ее основе математика пригодны в областях лежащих и вне ядерной физики, физики элементарных частиц и астрофизики. Еще одной областью применения является сверхпроводимость.

Куперовское (или электронное) спаривание в сверхпроводимости это физическая система, требующая сил *притяжения* между двумя *идентичными* электронами через вспомогательное действие купрат-ионов, как подтверждено недавним наблюдением их совместного туннелирования и другими данными.

Есть небольшие сомнения относительно современного квантового объяснения сверхпроводимости через взаимодействие посредством "фононов", так как остаются открытыми некоторые вопросы. Действительно, фононы есть не что иное, как тепловое возбуждение осцилляций в кристалле. В этом случае трудно понять как фононы могут распространяться в вакууме от атома к атому при фиксированной решетке кристалла без столкновений и, даже предполагая это возможным, трудно понять как фононы могут создавать *притяжение* между парами идентичных электронов.

В любом случае, физика элементарных частиц 20-го века идентифицировала все возможные частицы. Тем не менее, эта область физики не имеет данных о фононах, также как и об электрон-фононном взаимодействии.

Куперовские пары (КП) это прекрасная физическая система для проверки эффективности изотопического метода вообще. Исчерпывающие исследования в этом направлении были проведены Анималу [10a], который ввел нелинейную, нелокальную и негамильтонову теорию, называемую *изопроводимостью Анималу*, которая находится в замечательном согласии с экспериментальными данными и обладает новыми и интересными предсказательными возможностями.

Ниже мы суммируем недавнее представление куперовской пары (КП) Анималу и Сантилли [10b] на Sanibel Symposium в 1995 году во Флориде, символически воспроизведенное в виде

$$CP = (\hat{e}_\uparrow^-, \hat{e}_\downarrow^-)_{\text{HM}}, \quad (1.26)$$

где  $\hat{e}^-$  представляет изоэлектрон, то есть электрон, описанный через изомеханику. Для краткости мы очертим только нерелятивистские аспекты и отсылаем к цитированной литературе для ознакомления с релятивистским расширением.

Модель (1.26) имеет некоторые интригующие следствия и возможности. Фактически, модель существенна потому, что адронное связанное состояние  $\pi^0$  мезона, представленное на рассмотрение Сантилли, послужило поводом для построения адронной механики (работа [5e], Раздел 5)

$$\pi^0 = (\hat{e}_\uparrow^+, \hat{e}_\downarrow^-)_{\text{HM}}, \quad (1.27)$$

потому, что появление нелокальных непотенциальных взаимодействий приводит к появлению притяжения, независимо от того, является кулоновское взаимодействие притяжением или отталкиванием. Существование согласованной структуры КП =  $(\hat{e}_\uparrow^-, \hat{e}_\downarrow^-)_{\text{HM}}$ , где кулоновское взаимодействие является отталкиванием, обеспечивает тогда дополнительное подтверждение адронной модели  $\pi^0 = (\hat{e}_\uparrow^+, \hat{e}_\downarrow^-)_{\text{HM}}$ , где кулоновское взаимодействие является притяжением.

Рассмотрим один электрон с зарядом  $-e$ , со спином направленным вверх  $\uparrow$  и волновой функцией  $\psi_\uparrow$  в поле, рассматриваемом как *внешнее*, другого электрона с тем же зарядом, спином направленным вниз  $\downarrow$  и волновой функцией  $\psi_\downarrow$ . Уравнение Шредингера для них дается известным выражением

$$H_{\text{Coul.}} \times \psi(t, r) = \left( \frac{1}{2m} p_k p^k + \frac{e^2}{r} \right) \times \psi_\uparrow(t, r) = E_0 \times \psi_\uparrow(t, r), \quad (1.28a)$$

$$p_k \times \Psi_{\uparrow}(t, r) = -i \times \partial_k \Psi_{\uparrow}(t, r), \quad (1.28b)$$

где  $m$  это масса покоя электрона. Приведенное уравнение и связанная с ним волновая функция  $\Psi_{\uparrow}(t, r)$  воспроизводят отталкивание, как это хорошо известно. Мы интересуемся физической реальностью, в которой имеет место *притяжение*, воспроизводимое новыми волновыми функциями, обозначенными здесь  $\hat{\Psi}_{\uparrow}(t, r)$ .

Вспоминая, что квантово-механические кулоновские взаимодействия инвариантны относительно унитарных преобразований, отображение  $\Psi_{\uparrow} \rightarrow \hat{\Psi}_{\uparrow}$  производится неунитарным преобразованием  $\hat{\Psi} = U \Psi$ ,  $U \times U^{\dagger} = U^{\dagger} U = \hat{I} \neq I$ , где  $\hat{I}$  должно быть определено (см. ниже). Это активизирует *ab initio* применимость адронной механики согласно Разделу 1.8. Первым шагом предложенной модели, следовательно, является преобразование системы (1.28), выраженной через  $\Psi_{\uparrow}$ , в новую систему, выраженную через  $\hat{\Psi}_{\uparrow} = U \times \Psi_{\uparrow}$ , где  $U$  это неунитарный оператор,

$$\begin{aligned} U \times H_{\text{Coulomb}} \times U^{\dagger} \times (U \times U^{\dagger})^{-1} \times U \times \Psi_{\uparrow}(t, r) &= \\ &= \hat{H}_{\text{Coulomb}} \times T \times \hat{\Psi}_{\uparrow}(t, r) = \\ &= \left( \frac{1}{2m} \hat{p}_k \times T \times \hat{p}^k + \frac{e^2}{r} \hat{I} \right) \times T \times \hat{\Psi}_{\uparrow}(t, r) = E \times \hat{\Psi}_{\uparrow}(t, r), \end{aligned} \quad (1.29a)$$

$$\hat{p}_k \times T \times \hat{\Psi}_{\uparrow}(t, r) = -i \times T_k^i \times \partial_i \hat{\Psi}_{\uparrow}(t, r). \quad (1.29b)$$

Система (1.29) неполна, так как не учтено взаимодействие с  $\text{Cu}^{z+}$  ионами, воспроизводимое знакомым членом  $-ze^2/r$  [10]. Последние выражения не трансформированы (то есть они обычные квантово-механические) и, следовательно, они должны быть просто добавлены к трансформированным уравнениям (1.29). Формальные уравнения предложенной модели КП =  $(e_{\uparrow}^-, e_{\downarrow}^-)_{\text{HM}}$ , следовательно, даются выражением

$$\begin{aligned} \left( \frac{1}{2m} \hat{p}_k \times T \times \hat{p}^k + \frac{e^2}{r} \times \hat{I} - z \frac{e^2}{r} \right) \times T \times \hat{\Psi}_{\uparrow}(t, r) &= \\ = \frac{1}{2m} \hat{p}_k \times T \times \hat{p}^k \times T \times \hat{\Psi}_{\uparrow} + \frac{e^2}{r} \hat{\Psi}_{\uparrow} - z \frac{e^2}{r} \times T \times \hat{\Psi}_{\uparrow}(t, r) &= \\ = E \times \hat{\Psi}_{\uparrow}(t, r), \quad \hat{p}_k \times T \times \hat{\Psi}_{\uparrow}(t, r) = -i \times T_k^i \times \partial_i \hat{\Psi}_{\uparrow}(t, r). \end{aligned} \quad (1.30)$$

Чтобы привести модель к виду, позволяющему сравнить ее результаты с экспериментальными данными, нам необходимо явное выражение

для изоединицы  $\hat{I}$ . Среди различных возможностей, Анималу [10] выбрал наипростейшую из возможных единиц, подходящих для текущей проблемы, называемую теперь *изоединицей Анималу*, которую мы записываем в виде

$$\begin{aligned}\hat{I} &= e^{-\langle \hat{\psi}_\uparrow | \hat{\psi}_\downarrow \rangle \psi_\uparrow / \hat{\psi}_\uparrow} \approx 1 - \langle \hat{\psi}_\uparrow | \hat{\psi}_\downarrow \rangle \psi_\uparrow / \hat{\psi}_\uparrow + \dots, \\ \hat{T} &= e^{+\langle \hat{\psi}_\uparrow | \hat{\psi}_\downarrow \rangle \psi_\uparrow / \hat{\psi}_\uparrow} \approx 1 + \langle \hat{\psi}_\uparrow | \hat{\psi}_\downarrow \rangle \psi_\uparrow / \hat{\psi}_\uparrow + \dots,\end{aligned}\quad (1.31)$$

с которым уравнение (1.30) может быть записано как

$$\begin{aligned}\frac{1}{2m} \hat{p}_k T \hat{p}^k T \hat{\psi}_\uparrow - (z-1) \frac{e^2}{r} \hat{\psi}_\uparrow - \\ - z \frac{e^2}{r} \langle \hat{\psi}_\uparrow | \hat{\psi}_\downarrow \rangle (\psi_\uparrow / \hat{\psi}_\uparrow) \hat{\psi}_\uparrow(t, r) = E \hat{\psi}_\uparrow.\end{aligned}\quad (1.32)$$

Хорошо известно из квантовой механики, что радиальная часть  $\psi_\uparrow$  в основном состоянии ( $L = 0$ ) ведет себя как

$$\psi_\uparrow(r) \approx A e^{-r/R}, \quad (1.33)$$

где  $A$  это (приблизительно) постоянная и  $R$  это длина связи пары. Радиальное решение для  $\hat{\psi}_\uparrow$ , также в основном состоянии, известное из уравнений (5.1.21), стр. 837, [5e], ведет себя как

$$\hat{\psi}_\uparrow \approx B \frac{1 - e^{-r/R}}{r}, \quad (1.34)$$

где  $B$  – также приблизительно константа. Последний член в левой части уравнения (1.34) ведет себя подобно *Халтеновскому (Hulten) потенциалу*

$$V_0 \times \frac{e^{-r/R}}{1 - e^{-r/R}}, \quad V_0 = e^2 \langle \hat{\psi}_\uparrow | \hat{\psi}_\downarrow \rangle. \quad (1.35)$$

После подстановки выражения для изомомента, радиальное изошредингеровское уравнение может быть записано в виде

$$\left( -\frac{\hat{I}}{2 \times \hat{m}} r^2 \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} - (z-1) \frac{e^2}{r} - V_0 \frac{e^{-r/R}}{1 - e^{-r/R}} \right) \times \hat{\psi}_\uparrow(r) = E \times \hat{\psi}_\uparrow(r), \quad (1.36)$$

где  $\hat{m}$  это изонормированная масса изоэлектрона.

Решение последнего уравнения известно из [5e], Раздел 5.1. На малых расстояниях халтеновский потенциал ведет себя подобно кулоновскому потенциалу,

$$V_{\text{Hulten}} = V_0 \times \frac{e^{-r/R}}{1 - e^{-r/R}} \approx V_0 \times \frac{R}{r}. \quad (1.37)$$

Следовательно, на расстояниях меньших длины связанной пары, (1.36) может быть эффективно сведено к форме

$$\left( -\frac{1}{2 \times \hat{m}} r^2 \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} - V \frac{e^{-r/R}}{1 - e^{-r/R}} \right) \times \hat{\psi}_{\uparrow}(r) = E \times \hat{\psi}_{\uparrow}(r), \quad (1.38a)$$

$$V = V_0 \times R + (z - 1) \times e^2, \quad (1.38b)$$

с общим решением, граничными условиями и соответствующим спектром (см. [5c], стр. 837-838)

$$\hat{\psi}_{\uparrow}(r) = {}_2F_1(2 \times \alpha + 1 + n, 1 - \alpha, 2 \times \alpha + 1, e^{-r/R}) e^{-\alpha r/R} \frac{1 - e^{-r/R}}{r}, \quad (1.39a)$$

$$\alpha = (\beta^2 - n^2)/2n > 0, \quad \beta^2 = \hat{m} \times V \times R^2/\hbar^2 > n^2, \quad (1.39b)$$

$$E = -\frac{\hbar^2}{4 \times \hat{m} \times R^2} \left( \frac{\hat{m} \times V \times R^2}{\hbar^2} \frac{1}{n} - n \right)^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.39c)$$

где мы восстановили константу  $\hbar$  для ясности.

Сантилли [5e] нашел численное решение уравнения (1.39) для адронной модели  $\boldsymbol{\pi}^0 = (\hat{e}_{\uparrow}^+, \hat{e}_{\downarrow}^-)_{\text{HM}}$  (в котором, очевидно, нет вклада со стороны купрат-ионов в константу  $V$ ), введением параметров

$$k_1 = \hbar/2 \times \hat{m} \times R \times c_0, \quad k_2 = \hat{m} \times V \times R^2/\hbar, \quad (1.40)$$

где  $c_0$  это скорость света в вакууме. Тогда,

$$V = 2 \times k_1 \times k_2^2 \times \hbar \times c_0/R, \quad (1.41)$$

и полная энергия состояния  $\boldsymbol{\pi}^0 = (e_{\uparrow}^+, e_{\downarrow}^-)_{\text{HM}}$  в основном состоянии (для которого  $n = 1$  для халтеновского потенциала)

$$\begin{aligned} E_{\text{tot}, \boldsymbol{\pi}^0} &= 2 \times k_1 \times [1 - (k_2 - 1)^2/4] \times \hbar \times c_0/R = \\ &= 2 \times k_1 (1 - \varepsilon^2) \times \hbar \times c_0/R. \end{aligned} \quad (1.42)$$



Использование полной энергии  $\pi^0$  (135 МэВ), его зарядового радиуса ( $R \approx 10^{-13}$  см) и его среднего времени жизни ( $\tau \approx 10^{-16}$  сек) дают тогда значения (см. [5e], стр. 840, уравнения (5.1.33))

$$k_1 = 0.34, \quad \varepsilon = 4.27 \times 10^{-2}, \quad (1.43a)$$

$$k_2 = 1 + 8.54 \times 10^{-2} > 1. \quad (1.43b)$$

Анималу [10a] нашел решение уравнения (1.39) для куперовских пар введением параметров

$$k_1 = \varepsilon \times F \times R / \hbar \times c_0, \quad k_2 = KR / \varepsilon_F, \quad (1.44)$$

где  $\varepsilon_F$  это изо-энергия Ферми изоэлектрона (в адронной механике)

Тогда, полная энергия куперовской пары, в основном состоянии, дается выражением

$$E_{\text{Tot, Cooper pair}} = 2 \times k_1 \times [1 - (k_2 - 1)^2 / 4] \times \hbar \times c_0 / R \approx k_2 \times T_c / \theta_D, \quad (1.45)$$

где  $\theta_D$  это дебаевская температура.

Несколько числовых примеров было рассмотрено в работе [10]. Использование экспериментальных данных для алюминия,

$$\theta_D = 428^0 K, \quad \varepsilon_F = 11.6 \text{ eV}, \quad T_c = 1.18^0 K, \quad (1.46)$$

дает значения

$$k_1 = 94, \quad k_2 = 1.6 \times 10^{-3} < 1. \quad (1.47)$$

Для случая  $YBa_2Cu_3O_{6-\chi}$  модель дает [*loc. cit.*]

$$k_1 = 1.3z^{-1/2} \times 10^{-4}, \quad k_2 = 1.0 \times z^{1/2}, \quad (1.48)$$

где эффективная валентность  $z = 2(7 - \chi) / 3$  варьируется от минимума  $z = 4.66$  для  $YBa_2Cu_3O_{6.96}$  ( $T_c = 91^0 K$ ) до максимума  $z = 4.33$  для  $YBa_2Cu_3O_{6.5}$  ( $T_c = 20^0 K$ ). Общее выражение, предсказываемое квантовой механикой для  $YBa_2Cu_3O_{6-\chi}$  дается ([10a], стр. 373, ур. (5.15))

$$T_c = 367.3 \times z \times e^{-13.6/z}, \quad (1.49)$$

и это замечательно согласовывается с экспериментальными данными (см. Рис. 1.21–1.23).

Теперь сделаем несколько замечаний. Приведенная выше модель куперовских пар Анималу-Сантилли является действительно нелинейной, нелокальной и непотенциальной. Действительно, нелинейность по  $\hat{\Psi}_\uparrow$  выражена наличием такой величины в уравнении (1.31). Нелокальность выражена членом  $\langle \hat{\Psi}_\uparrow | \hat{\Psi}_\downarrow \rangle$ , отражающим перекрытие волновых пакетов электронов, и непотенциальность выражена наличием взаимодействий, характеризующихся изоединицей, воспроизведение которых находится за возможностями гамильтониана  $H$ . Это иллюстрирует необходимость использования адронной механики или других похожих негамильтоновых теорий (при условии, что они физически согласованы), из-за строго линейно-локально-потенциального характера квантовой механики.

Заметим, что если волновое перекрытие не особенно значительно, то есть для  $\langle \hat{\Psi}_\uparrow | \hat{\Psi}_\downarrow \rangle = 0$ ,  $\hat{I} \equiv I$ , квантовая механика воспроизводится как частный случай, хотя и без притяжения.

Механизм возникновения притяжения между двумя *идентичными* электронами, через посредническое действие купрат-ионов, является весьма общим для адронной механики, согласно которому, *нелинейно-нелокально-непотенциальные взаимодействия из-за волнового перекрытия на малых расстояниях являются всегда притяжением в синглетных соединениях, кулоновское же взаимодействие поглощается, что приводит к результирующему взаимодействию притяжения, независимо имеется ли кулоновское притяжение или отталкивание*. Как замечено ранее, халтеновский потенциал, как известно, ведет себя как кулоновский на малых расстояниях и, следовательно, при определенных условиях последний поглощается первым.

Другими словами, мы можем сказать, что на расстоянии связи куперовской пары халтеновское взаимодействие сильнее, чем кулоновское, что приводит к результирующему притяжению. Таким образом, мы имеем дело с замечательной схожестью между моделью для  $\pi^0$  и для куперовской пары. Отсюда следует ожидать применимости той же модели к другим аспектам, например, для более глубокого понимания валентности, как это будет изучено в следующих главах.

Другая важная черта модели, также характеризующаяся общим законом адронной механики, заключается в том, что *связанное состояние частиц, согласно волновому перекрытию на малых расстояниях в синглетных состояниях, "сдавливает" атомный энергетический спектр только до одного возможного уровня*. Халтеновский потенциал, как известно, допускает ограниченное число энергетических уровней. Решение Сантилли [5e] для

$\pi^0$  показывает "сжатие" энергетического спектра позитронииума только до одного энергетического уровня, 135 МэВ для  $\pi^0$  в случае  $k_2 > 1$ . Схожим образом, решения для куперовской пары [10], так же сводятся к тому же ограниченному спектру только с одним разрешенным уровнем.

В действительности, возбужденные уровни допускаются, но они подразумевают такие большие расстояния  $R$ , для которых нелинейные-нелокальные-непотенциальные взаимодействия игнорируются. Это подразумевает, что все возбужденные состояния являются обычными квантово-механическими, то есть, они не представляют собой  $\pi^0$  или куперовскую пару. Упомянутые возбужденные состояния воспроизводят либо дискретный спектр изначального позитронииума, либо непрерывный спектр кулоновского отталкивания между двумя идентичными электронами.

Другими словами, мы можем сказать, что вдобавок к обычному, квантово-механическому, кулоновскому взаимодействию между двумя электронами, имеется *только одна дополнительная система* адронного типа с *только одним энергетическим уровнем* на каждую пару связанных частиц, одна для  $\pi^0 = (e_{\uparrow}^+, e_{\downarrow}^-)_{\text{нм}}$  и другая для куперовской пары, КП =  $(e_{\uparrow}^-, e_{\downarrow}^-)_{\text{нм}}$ .

Возможность триплетных соединений также следует из общего закона адронной механики. В то время как для квантовой механики синглеты и триплеты равно допустимы (читай, соединения частиц на больших взаимных расстояниях при точечной аппроксимации), это не так для адронной механики (читай, соединения частиц, воспроизводимых протяженными в пространстве, на расстояниях меньших чем ширина их волновых пакетов или длина волны). Действительно, *все триплетные соединения частиц при нелинейных-нелокальных-негамильтоновых взаимодействиях крайне нестабильны, и единственными стабильными состояниями являются синглеты.*

Этот закон был впервые выведен в работе [5e] через "механистическую модель", то есть иллюстрацию с помощью механических приборов, которые испытывают сильное отталкивание в триплетном соединении и могут быть соединены стабильным образом только в синглеты. Отсюда логически вытекает возможность применения модели для более глубокого понимания принципа запрета Паули, что и будет изучено в Главах 4 и 5.

Интригующей является связь между предложенной моделью и обыч-

ной моделью куперовских пар. Константа в халтеновском потенциале может быть записана как

$$V_0 = \hbar\omega, \quad (1.50)$$

где  $\omega$  это именно (усредненная) *фононная частота*. Полная энергия может быть тогда переписана

$$E_{Tot} = 2 \times \epsilon_F - E \approx 2 \times k_1 \times k_2 \times \hbar \times c_0 / R(e^{1/N \times V} - 1), \quad (1.51)$$

где  $N \times V$  – (безразмерная) *электрон-фононная константа связи*.

В общем, главным результатом исследований [10] является то, что *традиционное воспроизведение куперовской пары через неуловимый "фонон" может быть переформулировано, без всякой необходимости в такой частице, с использованием реального, достаточно сильного притяжения между идентичными электронами, которое отсутствует в фононной теории.*

Вышеозначенная модель куперовских пар предполагает свою правильную формулировку на релятивистском уровне, так как это обеспечивает *геометризацию* куперовских пар, лучшие возможности для новых предсказаний и наилучшие из возможных экспериментальные проверки. Эти аспекты [10] не будут рассматриваться здесь из соображений краткости изложения.

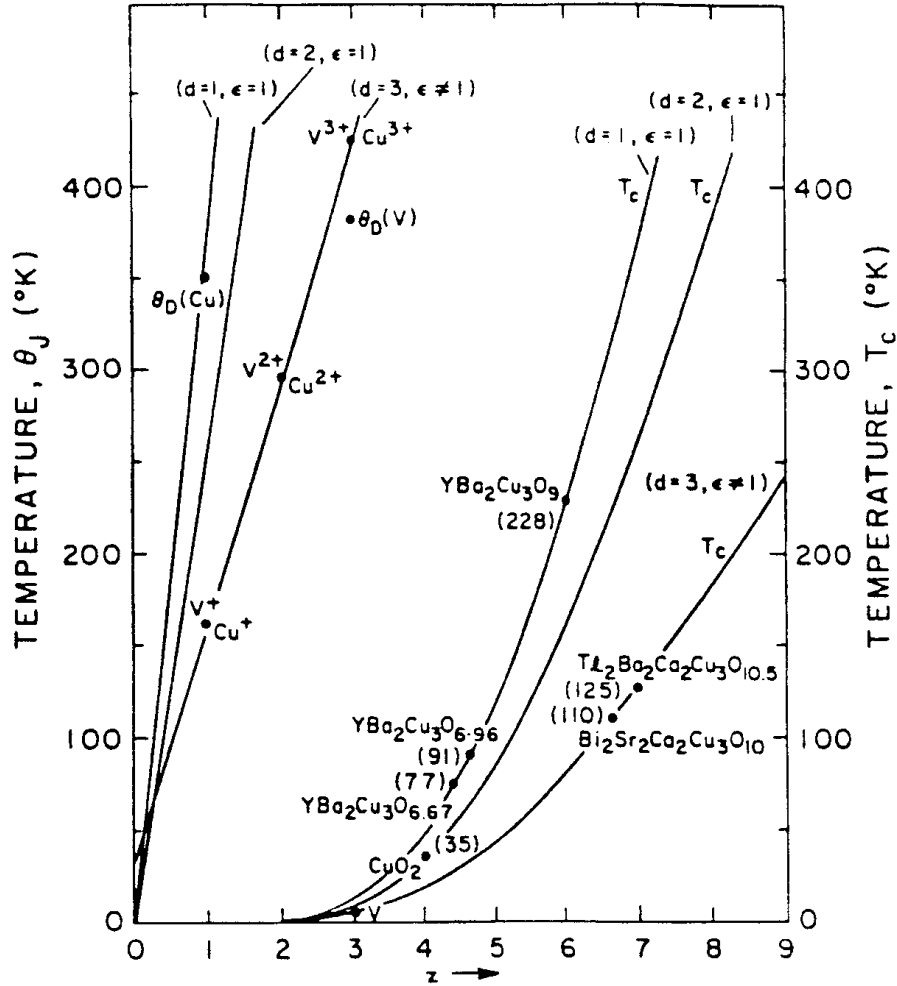


Рис. 1.21: Воспроизведение Рис. 10 работы [10a], иллюстрирующего замечательное согласие между предсказанием зависимости  $T_c$  от эффективной валентности  $z$  ионов (гладкая кривая) и экспериментальными значениями "температуры застывания" для различных составляющих (заполненные точки).

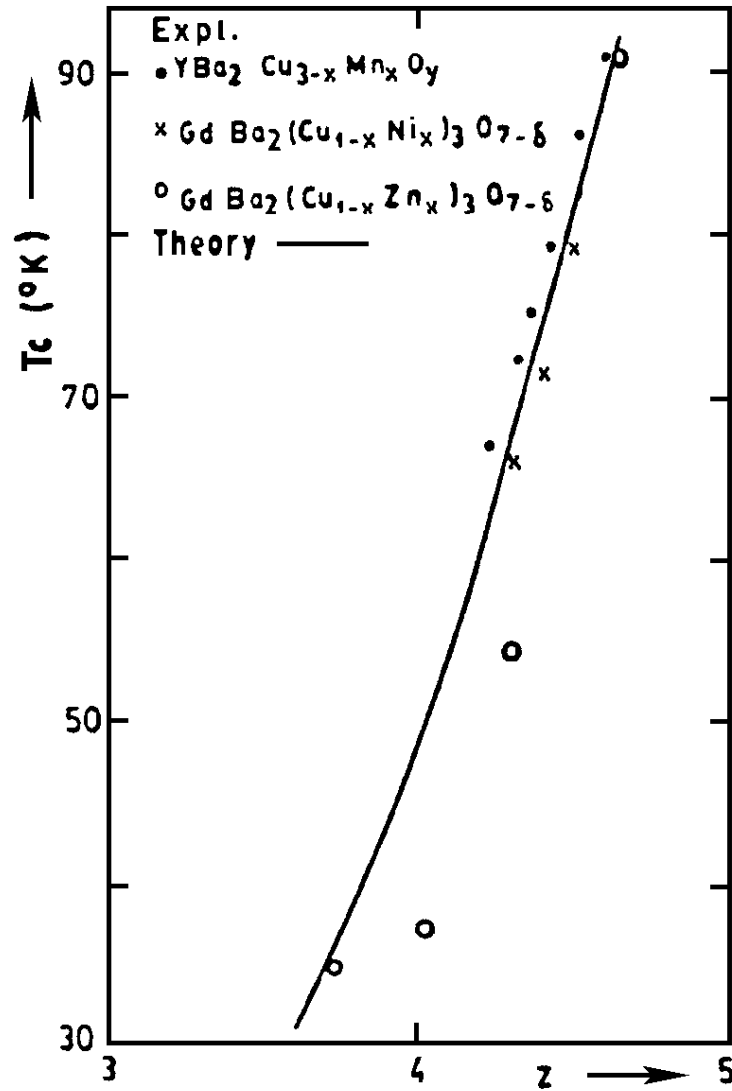


Рис. 1.22: Воспроизведение Рис. 5 из работы [10а], стр. 380, показывающего согласие между предсказанием изосверхпроводимости для допированных 1:2:3 купратов и экспериментальными данными.

**Table 1.**  $\text{YBa}_2\text{Cu}_{3-x}\text{Mn}_x\text{O}_y$   
(After N.L. Saini *et al.*, Int. J. Mod. Phys. B6, 3515 (1992))

$x$	$y$	$z$	$T_c$ (theory)	$T_c$ (expt.)
0.00	6.92	4.613	88.9	91
0.03	6.88	4.541	83.5	86.6
0.09	6.87	4.447	76.7	79.0
0.15	6.91	4.387	72.6	75.0
0.21	6.92	4.312	67.6	72.0
0.30	6.95	4.212	61.3	67.0

Note:  $T_c$  (theory) =  $367.3z \exp(-13.6/z)$ , where the effect of replacing  $\text{Cu}_3$  by  $\text{Cu}_{3-x}\text{Mn}_x$  is obtained by replacing 3 by  $(3-x)+2x=3+x$ , which lowers the effective valence ( $z$ ) on  $\text{Cu}^{2+}$  ions to  $z=2y/(3+x)$ .

**Table 2.**  $\text{GdBa}_2(\text{Cu}_{1-x}\text{Ni}_x)_3\text{O}_{7-\delta}$   
(After, Chin Lin *et al.*, Phys. Rev. B42, 2554 (1990))

$x$	$y = 7-\delta$	$z$	$T_c$ (theory)	$T_c$ (expt.)
0.000	6.96	4.640	91.0	91
0.025	6.96	4.527	82.4	79
0.050	6.96	4.419	74.8	71
0.075	6.96	4.316	67.9	65

Note:  $T_c$  (theory) =  $367.3z \exp(-13.6/z)$ ,  $z = 2y/3(1+x)$  as discussed in Table 1.

**Table 3.**  $\text{GdBa}_2(\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x)_3\text{O}_{7-\delta}$   
(After, Chin Lin *et al.*, Phys. Rev. B42, 2554 (1990))

$x$	$y = 7-\delta$	$z$	$T_c$ (theory)	$T_c$ (expt.)
0.000	6.96	4.640	91.0	91
0.025	6.96	4.309	67.4	54
0.050	6.96	4.009	49.0	37
0.075	6.96	3.737	36.1	35

Рис. 1.23: Воспроизведение таблиц из работы [10a], стр. 379, иллюстрирующих согласие между предсказаниями модели и экспериментальными данными другого плана.

# Литература

- [1] Boyer, D.J.: *Bonding Theory*, McGraw Hill, New York (1968) [1a]. Hanna, M.W.: *Quantum Mechanical Chemistry*, Benjamin, New York (1965) [1b]. Pople, J.A. and Beveridge, D.L.: *Approximate Molecular Orbitals*, McGraw Hill, New York (1970) [1c]. Linnet, J.W.: *The Electronic Structure of Molecules, A New Approach*, Methuen Press, London and Wiley, New York, (1964) [1d].
- [2] Illert, C. and Santilli, R.M.: *Foundations of Conchology*, Hadronic Press (1996).
- [3] Einstein, A. Podolsky, B. and Rosen, N.: Phys. Rev. **47**, 777 (1935) [3a]. Von Neumann, J.: *The Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*, Princeton Univ. Press, Princeton, N. J., 1955 [3b]. Bell, J.S.: Physics **1**, 195 (1965) [3c]. Bohm, D.: *Quantum Theory*, Dover Publ., New York (1979) [3d]. Santilli, R.M.: Acta Appl. Math. **50**, 177 (1998) [3e].
- [4] Okubo, S.: Hadronic J. **5**, 1667 (1982) [4a]. Lopez, D.F.: in *Symmetry Methods in Physics* (Memorial Volume dedicated to Ya.S. Smorodinsky), A.N. Sissakian, G.S. Pogosyan, and S.I. Vinitzky (ed.), J.I.N.R., Dubna, Russia, p. 300 (1994); and Hadronic J. **16**, 429 (1993) [4b]. Jannussis, A. and Skaltzas, D.: Ann. Fond. L. de Broglie **18**, 1137 (1993) [4c]. Jannussis, A., Mignani, R. and Santilli, R.M.: Ann. Fond. L. de Broglie **18**, 371 (1993) [4d]. Schuch, D.: Phys. Rev. **A55**, 955 (1997) [4e]. Santilli, R.M.: Modern Phys. Letters **13**, 327 (1998) [4f]. Santilli, R.M.: Intern. J. Modern Phys. **A14**, 3157 (1999) [4g].
- [5] Santilli, R.M.: Nuovo Cimento **51**, 570 (1967) [5a]. Supl. Nuovo Cimento **6**, 1225 (1968) [5b]. *Mechanica* **1**, 3 (1968) [5c]. Hadronic J. **1**, 224 [5d], 574 [5e] and 1267 (1978) [5f]. Hadronic J. **3**, 440 (1979) [5g]. Lett. Nuovo



- Cimento **37**, 509, (1983) [5h]. Hadronic J. **8**, 25 and 36 (1985) [5i]. Algebras, Groups and Geometries **10**, 273 (1993) [5j]. Rendiconti Circolo Matematico Palermo, Suppl. **42**, 7 (1996) [5k]. Found. Phys. **27** 625 (1997) [5l]. Found. Phys. Letters **4**, 307 (1997) [5m]. Found. Phys. **27**, 1159 (1997) [5n]. Hyperfine Interactions **109**, 63 (1997) [5o]. Intern. J. Modern Phys. **D7**, 351 (1998) [5p]. in *Modern Modified Theories of Gravitation and Cosmology*, E.I. Guendelman (ed.); Hadronic J. **2**, 113 (1998) [5q]. in *Proceedings of the VIII M. Grossmann Meeting on General Relativity*, Jerusalem, June 1997, World Scientific, in press (1999) [5r]. Algebras, Groups and Geometries **15**, 473 (1998) [5s]. IBR Web Site <http://www.i-b-r.org>, pages 18 [5t] and 19 [5u].
- [6] Santilli, R.M. *Foundations of Theoretical Mechanics*, Vol. **I** (1978) [6a] and **II** (1983) [6b], Springer-Verlag, Heidelberg-New York. *Lie-Admissible Approach to the Hadronic Structure*, Vol. **I** (1978) [6c] and **II** Hadronic Press (1982) [6d]. *Isotopic Generalization of Galilei's and Einstein's Relativities*, Vols. **I** [6e] and **II** [6f], Hadronic Press (1991). *Elements of Hadronic Mechanics*, Vol. **I** [6g] and **II** (1995) [6h] and **III**, in preparation [6i], Ukraine Academy of Sciences, Kiev. *Isotopic, Genotopic and Hyperstructural Method in Theoretical Biology*, Ukraine Academy of Sciences, Kiev (1996) [6j]; Journal of New Energy **4**, issue 1 (1998) [6k].
- [7] Adler, S.L.: Phys. Rev. **17**, 3212 (1978). George, Cl., Henin, F., Mayne, F. and Prigogine, I.: Hadronic J. **1**, 520 (1978). Okubo, S.: Hadronic J. **3**, 1 (1979). Fronteau, J., Tellez Arenas, A. and Santilli, R.M.: Hadronic J. **3**, 130 (1978). Ktorides, C.N., Myung, H.C. and Santilli, R.M.: Phys. Rev. **D22**, 892 (1982). Kalnay, A.J.: Hadronic J. **6**, 1 (1983). Gasperini, M.: Hadronic J. **6**, 935 and 1462 (1993), **7**, 650 and 951 (1984). Mignani, R.: Lett. Nuovo Cimento **39**, 413 (1984). Constantoupoulos, J.D. and Ktorides, C.N.: J. Phys. **A17**, L29 (1984). Nishioka, M.: Nuovo Cimento **82A**, 351 (1984). Rapoport-Campodonico, D.: Algebras, Groups and Geometries **8**, 1 (1991). Jannussis, A., Brodimas, G. and Mignani, R.: J. Phys. **A24**, L775 (1991). Jannussis, A., Mignani, R. and Skaltsas, D.: Physica **A187**, 575 (1992). Gill, T., Lindesay, J. and Zachary, W.W.: Hadronic J. **17**, 449 (1994). Jannussis, A., Mijatovic, M. and Veljanowski, B.: Physics Essays **4**, 202 (1991). Aringazin, A.K.: Hadronic J. **12**, 71 (1989). Aringazin, A.K., *et al.*: in *Frontiers of*

- Fundamental Physics*, M. Barone and F. Selleri (ed.), Plenum, New York, p. 153 (1995). Ellis, J.: in *Proceedings of the Seventh Marcel Grossmann Meeting on General Relativity*, R.T. Jantsen, G. MacKaiser and R. Ruffini (ed.), World Scientific, p. 755 (1996). Ellis, J., Mavromatos, N.E. and Nanopoulos, D.V.: in *Proceedings of the Erice Summer School, 31st Course: From Superstrings to the Origin of Space-Time*, World Scientific (1996).
- [8] Tsagas, Gr.T. and Sourlas, D.S.: *Algebras, Groups and Geometries* **12**, 1 and 67 (1995), and *Algebras, Groups and Geometries* **13**, 129 (1996). Rapoport-Campodonico, D.: in *New Frontiers in Physics*, T.L. Gill (ed.), Hadronic Press (1996). Aslaner, R. and Keles, S.: *Algebras, Groups and Geometries* **14**, 211 (1997). Vacaru, S.: *Algebras, Groups and Geometries* **14**, 225 (1997). Lin, E.B.: *Hadronic J.* **11**, 81 (1988). Jiang, C.X.: *Algebras, Groups and Geometries* **15**, 351 (1998). Trell, E.: *Algebras, Groups and Geometries* **15**, 299 (1998). Kamiya, N. *et al.*: *Hadronic J.* **16**, 68 (1993). Aslander R. and Keles, S.: *Algebras, Groups and Geometries* **14** (1997), in press. Kadeisvili, J.V.: *Algebras, Groups and Geometries* **9**, 283 and 319 (1992). In *Symmetry Methods in Physics* (Dedicated to Smorodinsky), Pogosyan, G. *et al.* (ed.), JINR, Dubna (1994). *Indian J. Appl. of Math.* **25**, 7 (1995). *Math. Methods in Applied Sciences* **19**, 362 (1996). *Algebras, Groups and Geometries* **13**, 171 (1996). *Acta Appl. Math.* **50**, 131 (1998). IBR Web Site <http://www.i-b-r.org>, page 18.
- [9] Arestov Yu. *et al.*: *Found. Phys. Letters* **11**, 483 (1998) [9a]. Santilli, R.M.: in *Collection of Papers on the Lorentz Symmetry*, V.V. Dvoeglazov (ed.), Nova Publisher, in press [9b]. Cardone, F. *et al.*: *Phys.* **C18**, L61 and L141 (1992) [9c]. Santilli, R.M.: *Hadronic J.* **15**, 1 (1992) [9d]. Mignani, R.: *Lett. Nuovo Cimento* **39**, 413 (1982) [9e]. Kalnay, A.J.: *Hadronic J.* **6**, 1 (1983) [9f]. Santilli, R.M.: *Comm. Theor. Phys.* **4**, 123 (1995) [9g]. Santilli, R.M.: *Intern. J. Phys.*, in press [9h]. Santilli, R.M.: *Hadronic J.* **17**, 311 (1994) [9j]. Mignani, R.: *Physics Essays* **5**, 531 (1992) [9k]. Santilli, R.M.: in *Frontiers of Fundamental Physics*, M. Barone and F. Selleri (ed.), Plenum Press (1994) [9l]. USMagnegas Web Site <http://www.usmagnegas.com> [9m].
- [10] Animalu, A.O.E.: *Hadronic J.* **17**, 379 (1994) [10a]. Animalu, A.O.E. and Santilli, R.M.: *Int. J. Quantum Chemistry* **29**, 175 (1995) [10b].

- [11] Tsagas Gr. and Sourlas, D.: *Mathematical Foundations of the Lie-Santilli Theory*, Ukraine Academy of Sciences, Kiev (1992) [11a]; Kadeisvili, J.V.: *Santilli's Isotopies of Contemporary Algebras, Geometries and Relativities*, Ukraine Academy of Sciences, Kiev, 2-nd edition (1997) [11b]; Aringazin, A.K., Jannussis, A., Lopez, D.F., Nishioka, M. and Veljanosky, B.: *Santilli's Lie-Isotopic Generalization of Galilei's and Einstein's Relativities*, Kostarakis Publisher, Athens (1990) [11c]; Lohmus, J., Paal, E. and Sorgsepp, L.: *Nonassociative Algebras in Physics*, Hadronic Press, Palm Harbor, FL, USA (1994) [11d]. Vacaru, S.: *Interactions, Strings and Isotopies in Higher Order Anisotropic Superspaces*, Hadronic Press (1999) [11e]. Jiang, C.X.: *An Introduction to Santilli's Isonumber Theory*, Hadronic Press, in press [11f].
- [12] Blatt, J.M. and Weiskopf, V.F.: *Theoretical Nuclear Physics*, Wiley, New York (1964) [12a]. Band, W.: *An Introduction to Quantum Statistics*, van Nostrand, Princeton (1955) [12b]. Biedernharn, L.C.: J. Phys. **A22**, L873 (1989); Macfarlane, A. J.: Phys. **A22**, L4581 (1989) [12c]. Lukierski, J., Viowiski, A. and Ruegg, H.: Phys. Lett. **B293**, 344 (1992); Lukierski, J., Ruegg, H. and Ruhl, W.: Phys. Lett. **B13**, 357 (1993) [12d]. Bayer, F., Flato, M., Fronsdal, C., Lichnerowicz, A. and Sternheimer, D.: Ann. Phys. **111**, 61 and 111 (1978); Fronsdal, C.: Rep. Math. Phys. **15**, 111 (1978) [12e]. Jannussis, A. *et al.*: Nuovo Cimento **B103**, 17 and 537 (1989) [12f]. S. Sebawe Abdallah *et al.*: Physica **A163**, 822 (1990) [12g]. George, Cl., Henin, F., Mayne, F. and Prigogine, I.: Hadronic J. **1**, 520 (1978) [12h]. Ellis, J., Mavromatos, N.E. and Nanopoulos, D.V.: in *Proceedings of the Erice Summer School, 31st Course: From Superstrings to the Origin of Space-Time*, World Scientific (1996) [12i]. Caldirola, P.: Nuovo Cimento **3**, 297 (1956); Jannussis, A. *et al.*: Lett. Nuovo Cimento **29**, 427 (1980); Lee, D.: Phys. Rev. Lett. **122**, 217 (1983) [12j]. Mahopatra, R.N. *Unification and Supersymmetries: The Frontiers of Quark-Lepton Physics*, 2-nd ed., Springer-Verlag, (1992) [12k]. Kac, V.G.: *Infinite Dimensional Lie Algebras*, Birkhauser, New York (1983) [12l]. Sanchez, N.S. (ed.): *String Theory in Curved Spacetime*, World Scientific, Singapore (1998) [12m]. Weinberg, S.: Ann. Phys. **194**, 336 (1989). Jordan, T.F.: Ann. Phys. **225**, 83 (1993) [12m].
- [13] Shektman, V.: *The Real Structure of High  $T_c$  Superconductivity*,

- Springer-Verlag, New York (1993) [6a]. Zhang, M.-L. and Zhao, Z.-X.: Phys. Lett. **A207**, 362 (1995).
- [14] Lagrange, L.: *Mechanique Analytique* (1788), reprinted by Gauthier-Villars, Paris (1888) [14a]. Hamilton, W.R.: *On a General Method in Dynamics* (1834), reprinted in: *Hamilton's Collected Works*, Cambridge Univ. Press (1940) [14b].
- [15] Sinanoglu, O.: Proc. Nat. Acad. Sciences **47**, 1217 (1961) [15a]. Lewis, G.N.: J. Am. Chem. Soc. **38**, 762 (1916) [15b]. Langmuir, I.: J. Am. Chem. Soc. **41**, 868 (1919) [15c]. Boyd, R.J. and Yee, M.C.: J. Chem. Phys. **77**, 3578 (1982) [15d]. Cann, N.M. and Boyd, R.J.: J. Chem. Phys. **98**, 7132 (1992) [15e].



## Глава 2

# Элементы изо-, гено- и гипер-математики и их изодуальные

### 2.1 Введение

В предыдущей главе мы показали, что настоящее расширение квантовой механики, сверхпроводимости и химии возможно без выхода из классов эквивалентности этих теорий, которые даются всеми возможными *каноническими преобразованиями* для классических формулировок, и *унитарными преобразованиями* для операторных теорий, для которых, в стандартных обозначениях:  $U \times U^\dagger = U^\dagger \times U = I$ .

Следовательно, настоящее расширение классических теорий должно иметь *неканоническую структуру*, а истинно продвинутые операторные теории требуют *неунитарных структур*, для которых  $U \times U^\dagger \neq I$ .

В предыдущей главе мы подчеркивали, что неканонические теории необходимы для воспроизведения классических, контактных, препятствующих взаимодействий, таких какие испытывает космический корабль при входе в атмосферу Земли. Действительно, уравнения движения таких систем обязательно негамильтоновы в системе отсчета экспериментатора, как подробно изучено в монографии [2a], через условия интегрируемости для существования гамильтониана или через так называемые *условия вариационного самосопряжения*.

Мы указывали, что подобным же образом, неунитарные теории необ-

ходимы для воспроизведения взаимодействия сопротивления, испытываемого протяженным протоном при движении в центре звезды. Равным образом, неунитарные теории необходимы для воспроизведения контактных взаимодействий из-за глубокого перекрытия волновых пакетов частиц. Действительно, последние взаимодействия тоже являются взаимодействиями контактного типа, не допускающими потенциала. Как следствие, эти взаимодействия не могут быть представлены гамильтонианом  $H = p^2/2 \times m + V(r, p) = H^\dagger$ , то есть выходят из класса унитарной эквивалентности с временной эволюцией  $U = \exp[i \times H \times t]$ ,  $U \times U^\dagger = U^\dagger \times U = I$ .

В предыдущей главе, мы также показали очевидность существования этих контактных негамильтоновых и неунитарных эффектов в физике элементарных частиц, ядерной физике, астрофизике, гравитации, космологии и сверхпроводимости. Очевидность была представлена в подведении к главной теме исследования данной монографии: *взаимодействие валентных электронов в молекулярных связях*, которые предполагаются точно негамильтоново-неунитарного типа из-за глубокого перекрытия волновых пакетов валентных электронов, которое отсутствует в атомной структуре.

Более того, в предыдущей главе мы отмечали, что все неканонические (неунитарные) теории страдают катастрофическими физическими и математическими несогласованностями, когда формулируются через традиционную математику, то есть с обычными числами, полями, метрическими пространствами, гильбертовыми пространствами и т.д. В частности, теории с неканонической (неунитарной) временной эволюцией предсказывают различные числовые значения для одного и того же измерения при тех же условиях, но в различное время, например, длина данного жесткого стержня под воздействием сил сопротивления изменяется во времени при обычном неканоническом воспроизведении. Как следствие, *неканонические неунитарные теории, сформулированные с использованием обычной математики, не имеют известного физического или химического значения.*

Вышеуказанный сценарий не оставляет другого выбора, кроме конструирования *новой математики*, специально предназначенной для работы с неканоническими (неунитарными) теориями инвариантным путем.

Решение последней проблемы было начато Сантилли в 1978-м [1a] предложением сконструировать новую *изо-математику* и *гено-математику*, с еще более расширенной *гипер-математикой* и их *изодуальные*, добавленных позже (см. недавние расчеты в [1e]). Эти новые теории затем бы-

ли развиты многими математиками и теоретиками, и в настоящее время достигли операционной завершенности. Адронная химия является образцом обычной квантовой химии с новой изо-, гено- и гипер-математикой и их изодуальными.

В этой главе мы очертим элементы этих расширенных изо-математики, гено-математики и гипер-математики с расчетом на то, что ученые, заинтересованные в достижении глубоких технических знаний адронной химии, изучат также оригинальную литературу в этой области. Знание обычных чисел, полей, метрического и гильбертова пространств, алгебр и групп, геометрий и топологий и т.д. предполагается само собой.

Для менее склонных к математике читателей, мы представляем в следующей главе очень простой метод, основанный на неканонических (неунитарных) преобразованиях, который позволяет без труда конструировать неканонические неунитарные химические теории, подходящие для всех практических нужд.

## 2.2 Элементы изоматематики

### 2.2.1 Изоединицы и изопроизведения

Как мы увидим в следующей главе, достижение инвариантности теории с неунитарной временной эволюцией  $U \times U^\dagger \neq I$  требует введения  $\hat{I} = U \times U^\dagger$ , как новой обобщенной единицы. *Изоматематика Сантилли* строится тогда реконструированием всей обычной математики таким образом, чтобы допустить  $\hat{I}$ , отличную от  $I$ , как корректную левую и правую новую единицу на всех уровнях.

Как мы увидим в Главе 3, изоматематика характеризует *изотопическую ветвь адронной химии*, или, для краткости, *изохимии*. Эта ветвь адронной химии подходит для воспроизведения замкнуто-изолированных систем, обратимых во времени, и допускает внутренние взаимодействия обычного, неконтактного, линейного, локального и потенциального типа, а также короткодействующие взаимодействия нелинейного, нелокального и непотенциального типа, связанные с глубоким перекрытием волновых пакетов валентных электронов.

Главным фундаментальным понятием адронной химии, следовательно, является обобщение тривиальной  $n$ -мерной единицы  $I = (I_j^i) = \text{Diag}(1, 1, 1, \dots)$ ,  $i, j = 1, 2, \dots, n$ , используемой в настоящее время в хи-



мии (такой как евклидова единица  $I = \text{Diag.}(1, 1, 1)$ ), которая для случая изохимии, поднимается в нигде не сингулярную, положительно-определенную,  $n \times n$ -мерную матрицу  $\hat{I}$ , чьи элементы имеют дополнительную, нелинейную и интегральную зависимость по всем нужным переменным, таким как время  $t$ , пространственные координаты  $r$ , импульсы  $p$ , волновые функции  $\psi$ , их производные  $\partial\psi$  и любые другие необходимые величины [1a],

$$I = \text{Diag.}(1, 1, 1) > 0 \rightarrow \hat{I} = (\hat{I}_i^j) = \hat{I}(t, r, p, \psi, \partial\psi, \dots) = 1/\hat{T} > 0. \quad (2.1)$$

Напомним, что обычные поля чисел содержат две единицы, аддитивную единицу  $0$ , такую что для любого числа  $n$  имеем  $n + 0 = 0 + n = n$  и мультипликативную единицу  $I$ , такую что для любого числа  $n$  имеем  $n \times I = I \times n = n$ . Следовательно, поднятие (лифтинг) (2.1) подразумевает обобщение мультипликативной единицы.

Рассмотрим обычное ассоциативное произведение, используемое в настоящее время в химии,  $A \times B = AB$ , где  $A, B$  – величины одного класса (например числа, векторные поля, операторы и т.д.). Легко видеть, что обобщенная единица  $\hat{I}$  не может оставаться единицей относительно произведения  $A \times B$ , так как  $A \times \hat{I} \neq A$ . Следовательно, для согласованности, обычное ассоциативное произведение  $A \times B$  должно быть поднято на величину, инверсную по отношению к единице [1a],

$$A \times B \rightarrow A \hat{\times} B = A \times \hat{T} \times B, \quad \hat{T} \text{ фиксированно для всех произведений,} \quad (2.2)$$

при котором  $\hat{I}$  – действительно корректная левая и правая единица,

$$I \times A = A \times I = A \rightarrow \hat{I} \hat{\times} A = A \hat{\times} \hat{I} = A, \quad (2.3)$$

для всех элементов  $A$  рассматриваемого набора. В этом (и только в этом) случае  $\hat{I}$  называется *изоединицей* и  $\hat{T}$  называется *изотопическим элементом*.

Поднятия (2.1), (2.2) и (2.3) были названы *изотопическими* [1a], исходя из греческого смысла слова, чтобы подчеркнуть сохранение всех изначальных аксиом. Действительно,  $\hat{I}$  сохраняет все свойства  $I$ , такие как несингулярность, эрмитовость и положительную определенность, в то время как новое произведение  $A \hat{\times} B$  сохраняет изначальную аксиому ассоциативности,  $A \hat{\times} (B \hat{\times} C) = (A \hat{\times} B) \hat{\times} C$ , и из этих соображений произведение  $A \hat{\times} B$  названо *изоассоциативным произведением* или *изопроизведением* для краткости.

Заметим, что другие обобщения ассоциативного произведения, такие как  $\hat{T} \times A \times B$  или  $A \times B \times \hat{T}$ , будут нарушать общие аксиомы алгебры (левые и правые дистрибутивные законы и законы умножения на число [*loc. cit.*]).

Примеры изоединиц были даны в Главе 1. Дополнительные примеры будут даны в соответствующих разделах и главах. На этой математической стадии, достаточно понимать изоединицы как произвольные, несингулярные, положительно-определенные,  $n \times n$ -мерные матрицы. Как таковые, изоединицы всегда могут быть диагонализированы в виде  $\hat{I} = \text{Diag.}(A, B, C, \dots)$ , где  $A, B, C, \dots$  – положительно-определенные константы или функции, которые могут быть подчинены различным интерпретациям.

Простейшей из возможных, но уже поучительной интерпретацией является случай трехмерной  $\hat{I}$ , представляющей *протяженную, несферическую и деформированную форму* рассматриваемых частиц, при этом функции  $A = n_1^2$ ,  $B = n_2^2$  и  $C = n_3^2$  представляют полуоси  $n_1, n_2, n_3$  деформированных сфероидальных эллипсоидов (см. ниже Раздел 2.3). Недиагональные единицы  $\hat{I}$  могут воспроизводить тогда более сложные формы.

Простейшая из возможных интерпретация, для случая, когда  $\hat{I}$  четырехмерна,  $\hat{I} = \text{Diag.}(A, B, C, D)$  заключается в том, что  $A, B, C$  воспроизводят форму и  $D$  воспроизводит *плотность* рассматриваемых частиц.

Более общий класс изоединиц имеет структуру

$$\hat{I} = \text{Diag.}(A, B, C, D) \times \Gamma(t, r, \psi, \dots),$$

где  $A, B, C$  воспроизводят форму,  $D$  воспроизводит плотность и  $\Gamma = \exp F(t, r, \psi, \dots)$  воспроизводит нелинейные, нелокальные и непотенциальные взаимодействия (см. следующую главу).

Напомним, что *квантовая механика может воспроизводить только идеально сферические и идеально жесткие тела*, как необходимое условие ненарушения ее основы – вращательной симметрии. В частности, идеальная сферичность воспроизводится через основную единицу евклидовой геометрии,  $I = \text{Diag.}(1, 1, 1)$ , где  $1, 1, 1$  -полуоси идеальной сферы. Поднятие  $I = \text{Diag.}(1, 1, 1) \rightarrow \hat{I} = \text{Diag.}(A, B, C)$  полезно тогда для воспроизведения *несферических и деформированных форм*, кроме простого обеспечения возможности *инвариантного описания*.

Напомним также, что *квантовая механика не обеспечивает геометрическое или другое описание плотности рассматриваемых частиц, кроме*

плотности вакуума, последняя нормируется на значение 1 в 4-х компонентной основной единице

$I = \text{Diag.}(1, 1, 1, 1)$  пространства Минковского с метрикой  $\eta = \text{Diag.}(1, 1, 1, -1)$ .

Поднятие  $I = \text{Diag.}(1, 1, 1, 1) \rightarrow \hat{I} = \text{Diag.}(A, B, C, D)$  тогда полезно для воспроизведения плотности  $D$  любой физической среды, отличной от вакуума. Нормировка  $D$  на единицу для вакуума предполагает тогда хорошо известную реализацию  $D = n_4^2$ , где  $n_4$  знакомый коэффициент преломления света с локальной скоростью  $c_0/n_4$ , где при  $n_4 = 1$  воспроизводится скорость света в вакууме  $c_0$ . Как можно видеть, *изотопии* позволяют непосредственную геометризацию локальной вариации скорости света в зависимости от среды, в которой он распространяется (исчерпывающие исследования см. в [1d]).

Наконец напомним, что квантовая механика не способна воспроизводить контактные непотенциальные взаимодействия. Это имеет место из-за того, что гамильтониан имеет структуру  $H = p^2/2 \times m + V(r, p)$ . Как следствие, гамильтониан может воспроизводить только взаимодействия на расстоянии с помощью потенциала  $V$ . Любое изменение вышеприведенной структуры, в надежде воспроизвести непотенциальные взаимодействия в форме совместимой с квантовой механикой, подразумевает обязательную утрату  $H$  как полной энергии, с большими структурными последствиями.

Все это можно сравнить с единственно известным воспроизведением нелинейных, нелокальных и непотенциальных взаимодействий через поднятие основной единицы  $I = 1 \rightarrow \hat{I} = \Gamma(t, r, p, \psi, \dots)$ . Действительно, воспроизведение через изоединицу носит обязательно непотенциальный характер, в то же время, существование единственно известного инвариантного воспроизведения тривиально, потому что единица есть основной инвариант любой теории.

Это иллюстрирует важность изоединиц для центральной темы этой монографии: *инвариантное воспроизведение нелинейных, нелокальных и непотенциальных взаимодействий ожидаемых при глубоком перекрытии волновых пакетов электронов в валентных связях, чье воспроизведение полностью отсутствует в квантовой химии.*

В частности, в этой монографии поставлена задача показать, что вышеуказанное воспроизведение подразумевает принципиально новую модель молекулярных структур, которая позволяет воспроизведение молекулярных характеристик с точностью до седьмого порядка (*sic*), в то время как квантово-химическая модель в общем теряет до 2% (Раздел

1.2).

Надеемся, что вышеизложенные соображения вполне иллюстрируют необходимость обобщения основной единицы квантовой химии для включения таких черт, как несферические деформированные формы, плотности и непотенциальные взаимодействия, которые находятся вне возможностей строгого описания квантовой химией.

Раз обоснована необходимость обобщения основной единицы, то необходимость обобщения всей математической структуры квантовой химии становится очевидным условием для самосогласованности, и это является толчком для рождения изоматематики.

В следующем разделе мы зафиксируем наиболее важные математические понятия, которые являются необходимыми при осуществлении поднятий  $I \rightarrow \hat{I} = 1/\hat{I} > 0$  и  $A \times B \rightarrow A \hat{\times} B = A \times \hat{I} \times B$ .

### 2.2.2 Изочисла и изополя

Пусть  $\mathbb{F} = \mathbb{F}(a, +, \times)$  это поле обычных действительных чисел  $a = n$ ,  $\mathbb{F} = \mathbb{R}(n, +, \times)$ , комплексных чисел  $a = c$ ,  $\mathbb{F} = \mathbb{C}(c, +, \times)$ , или кватернионов  $a = q$ ,  $\mathbb{F} = \mathbb{Q}(q, +, \times)$ . *Изополями*  $\hat{\mathbb{F}} = \hat{\mathbb{F}}(\hat{a}, \hat{+}, \hat{\times})$ , впервые введенными Сантилли [1b] (см. также независимое исследование [4a]), являются наборы элементов  $\hat{a} = a \times \hat{I}$ , называемые *изочислами*, где  $a \in \mathbb{F}$  и  $\hat{I}$  в общем не принадлежит  $\mathbb{F}$ , снабженные *изосуммой*  $\hat{a} \hat{+} \hat{b} = (a + b) \times \hat{I}$  и *изопроизведением*  $\hat{a} \hat{\times} \hat{b} = \hat{a} \times \hat{I} \times \hat{b} = (a \times b) \times \hat{I}$ . Легко видеть, что  $\hat{\mathbb{F}}$  подчиняется всем аксиомам поля, включая наиболее важную замкнутость относительно ассоциативного и дистрибутивного законов. Следовательно, поднятие  $\mathbb{F} \rightarrow \hat{\mathbb{F}}$  является изотопией.

Все операции  $\hat{\mathbb{F}}$  поднимаются простейшим образом, производя *изостепень*, *изочастное*, *изоквадратный корень*, *изомодуль* и т.д. [1b],

$$\hat{a}^n = \hat{a} \hat{\times} \hat{a} \hat{\times} \dots \hat{\times} \hat{a} = (a^n) \times \hat{I}, \quad (2.4a)$$

$$\hat{a} \hat{/} \hat{b} = (\hat{a}/\hat{b}) \times \hat{I} = (a/b) \times \hat{I}, \quad (2.4b)$$

$$\hat{a}^{\hat{1}/2} = a^{1/2} \times \hat{I}, \quad \hat{a}^{\hat{1}/2} \hat{\times} \hat{a}^{\hat{1}/2} = a \times \hat{I}, \quad (2.4c)$$

$$\hat{|}\hat{a}\hat{|} = |a| \times \hat{I}. \quad (2.4c)$$

Наиболее важным моментом в теории изочисел является то, что абстрактные аксиомы числовых полей не обязательно требуют от единицы

принимать тривиальное значение  $+1$ , как это предполагалось с библейских времен, так как те же аксиомы вполне допускают произвольное значение единицы, при условии, что оно положительно определено.

Действительно, набор изодействительных чисел, определенных изначально [1b] как  $\hat{n} = n \times \hat{I}$ , где  $n$  – произвольное действительное число и  $\hat{I}$  может быть положительно определенным числом, матрицей, оператором и т.д., снабженное изосуммой  $\hat{n} \hat{+} \hat{m} = (n + m) \times \hat{I}$  и изопроизведением  $\hat{n} \hat{\times} \hat{m} = (n \times m) \times \hat{I}$ , подчиняется точно тем же аксиомам, что выполняются и для действительных чисел  $n$ .

Несмотря на схожесть между числами и изочислами, последняя теория имеет важные приложения, изученные в деталях в монографии Джинга [4a]. Для ограниченных целей представленной работы, будет достаточно заметить, что *простота чисел зависит от принятой единицы*. Например, число 4 становится простым, когда изоединица имеет значение  $\hat{I} = 3$ .

Подобным же образом, традиционные утверждения, такие как " $2 \times 2 = 4$ ", имеют смысл только в обычной математике и квантовой химии, но они не имеют математического смысла в изоматематике и в связанной с ней изохимии без изначально определенной единицы и произведения. Действительно, для  $\hat{I} = 3$  мы имеем  $2 \hat{\times} 2 = 12$ .

В заключение отметим, что обычная квантовая химия основана на обычных числах. Расширенная адронная химия основана на *новых числах* с положительно определенной, но в остальном полностью произвольной единицей  $\hat{I}$ . Это не просто математический курьез, но *единственно* известный способ для *инвариантного* воспроизведения несферических деформированных форм, плотностей и нелинейных, нелокальных и непотенциальных взаимодействий возникающих при глубоком перекрытии волновых пакетов валентных электронов.

### 2.2.3 Изопространства и изогеометрии

Как хорошо известно, метрические (или псевдометрические) пространства  $S = S(r, m, \mathbb{R})$  с локальными координатами  $r$  и метрикой  $m$  определены над полем действительных чисел  $\mathbb{R} = \mathbb{R}(n, +, \times)$ . В случае наиболее часто используемого пространства в химии, мы имеем трехмерное евклидово пространство  $E = E(r, \delta, \mathbb{R})$  с координатами  $r = \{r^k\} = \{x, y, z\}$ ,  $k = 1, 2, 3$ , метрикой  $\delta = \{\delta_{ij}\} = \text{Diag.}(1, 1, 1)$  и основной единицей  $I = (I^i) = \text{Diag.}(1, 1, 1)$ . Поднятие чисел  $\mathbb{R} \rightarrow \hat{\mathbb{R}}$  обязательно требует

поднятия всего метрического (или псевдометрического) пространства.

Изоевклидовы пространства  $\hat{E} = \hat{E}(\hat{r}, \hat{\delta}, \hat{\mathbb{R}})$ , впервые введенные Сантилли в работе [1c] (см. также недавние расчеты [1d]), являются метрическими пространствами с изокоординатами  $\hat{r} = r \times \hat{I} = \{r^k\} \times \hat{I}$  и изометрикой  $\hat{\Delta} = \hat{\delta} \times \hat{I}$ ,  $\hat{\delta} = \{\hat{\delta}_{ij}\} = \{\hat{T}_i^k \times \delta_{kj}\}$  с интервалом определенным над  $\hat{\mathbb{R}}$

$$\begin{aligned} \hat{r}^2 &= \hat{r}^k \hat{\times} \hat{r}_k = \hat{r}^i \hat{\times} \hat{\Delta}_{ij} \hat{\times} \hat{r}^j = \\ &= (r^i \times \hat{I}) \times \hat{T} \times (\hat{\delta}_{ij} \times \hat{I}) \times \hat{T} \times (r^j \times \hat{I}) = \\ &= (r^i \times \hat{\delta}_{ij} \times r^j) \times \hat{I} \in \hat{\mathbb{R}}. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Было доказано [*loc. cit.*], что  $\hat{E}$  сохраняет все аксиомы обычного пространства  $E$  и, следовательно, лифтинг  $E \rightarrow \hat{E}$  является изотопией. В сущности, аксиомы евклидовой геометрии реализованы таким образом, чтобы допустить метрику с неограниченной функциональной зависимостью,  $\hat{\delta} = \hat{\delta}(t, r, p, \psi, \partial\psi, \dots)$ . Заметим, что изометрика содержит как частные случаи все возможные метрики с той же сигнатурой, включая риманову метрику, хотя аксиомы остаются евклидовыми. Заметим также, что изоединица остается та же самая и для изопространств и лежащего в их основе изополя.

Изоевклидова геометрия [1c] это геометрия изоевклидовых пространств, целиком разработанная через изоматематику. Читатель должен иметь в виду, что в то время как символы Кристоффеля, ковариантные производные и другие инструменты римановой геометрии отсутствуют в евклидовой геометрии из-за того, что последнее является плоским, те же инструменты используются полностью в более общей изоевклидовой геометрии [1d, 1e], очевидно, из-за явной зависимости изометрики от локальных координат  $r$ . Как результат, поднятие евклидовой геометрии до изотопически более общей является весьма нетривиальным.

В действительности, как доказано в работах [1d, 1e], изоевклидова геометрия позволяет симбиотическое объединение обычной евклидовой и римановой геометрии в пространственных координатах, которые теперь различаются выбором единицы, а не метрики, как это делается обычно.

Подобное изотопическое объединение имеет место для геометрии Минковского и римановой геометрии в пространстве-времени, которые геометрически объединяются в *изоминковскую геометрию* [1d, 1e], что приводит к возможности симбиотического объединения специальной и общей теорий относительности, с решением по крайней мере некоторых

неприятных проблем, которые влияли на общую теорию относительности на протяжении 20-го века.

Читатель также должен иметь в виду существование других изометрий, таких как *изосимплектическая геометрия*, которая важна для изоквантования и будет изучена в следующей главе. К сожалению, мы не можем рассматривать здесь все эти геометрии, так как это слишком сильно увеличило бы размеры монографии.

Здесь мы примем обозначения, что все величины со "шляпкой", такие как  $\hat{r}$ ,  $\hat{H}$  и т.д. определены на изопространстве над изополями, все величины без "шляпки", такие как  $r$ ,  $H$  и т.д. определены на обычных пространствах над обычными полями. Заметим, что изопроизведение  $\hat{r}$  с произвольной величиной  $A$  есть обычная величина,  $\hat{r} \hat{\times} A = (r \times \hat{I}) \times \hat{T} \times A \equiv r \times A$ . Следовательно, мы должны подразумевать, что  $\hat{r}$  это обычная координата, только записанная в изопространстве над изополем. Это предположение подтверждается инвариантностью (2.5), в котором использование  $r$  является достаточным.

Мы будем также предполагать, что свертки такие как  $\hat{r}^k \hat{\times} \hat{r}_k$  производятся в изопространстве (то есть требуют изометрики  $\hat{\delta}$ ), в то время как свертки такие как  $\delta_{ij} \times \hat{r}_i \times \hat{r}_j$  или  $\hat{T}_k^i \times \hat{r}^k$  производятся в изначальном пространстве (то есть требуют обычной метрики  $\delta$ ).

Фундаментальным понятием изоевклидовой геометрии являются *обобщенные пространственные единицы*. Действительно, евклидова единица  $I = \text{Diag.}(1, 1, 1)$  воспроизводит, в безразмерной форме, единицы используемые для каждой из трех декартовых осей, например,  $I = \text{Diag.}(1 \text{ cm}, 1 \text{ cm}, 1 \text{ cm})$ . Поэтому изоединица положительно определена и всегда может быть приведена к диагональной форме

$$\hat{I} = \text{Diag.}(n_1^2, n_2^2, n_3^2), \quad \hat{T} = \text{Diag.}(n_1^{-2}, n_2^{-2}, n_3^{-2}), \quad n_k > 0. \quad (2.6)$$

Это означает, что изопространства подразумевают не только принятие новых единиц  $n_k^2 \times \text{см}$ , но также тот факт, что такие единицы, вообще говоря, различны для различных осей.

Когда используемое пространство  $\hat{E}$  расширено до включения времени через произведение Кронекера  $\hat{E}(\hat{t}, \hat{\mathbb{R}}_t) \times E(\hat{r}, \hat{\delta}, \hat{\mathbb{R}})$ , это подразумевает дополнительное введение новой, положительно определенной, одномерной единицы времени, приводящее к полной пространственно-временной единице

$$\hat{I}_{\text{Tot}} = \hat{I}_{\text{space}} \times \hat{I}_{\text{time}} = \{\text{Diag.}(n_1^2, n_2^2, n_3^2)\} \times \{n_4^2\}. \quad (2.7)$$

В заключение, фундаментальным понятием адронной химии является новая концепция пространства-времени, называемая *изопространством-временем* с *изокоординатами*  $\hat{r} = \{r^k\} \times \hat{I}$  и *изовременем*  $\hat{t} = t \times \hat{I}_t$ , определенными на соответствующих изополях.

Расширение основных единиц очевидно требует соответствующего расширения понятия расстояния в *изорасстоянии*, которое с помощью реализации (2.6) может быть записано [1c, 1d] как

$$\hat{D} = \left[ \frac{(r_{1x} - r_{2x})^2}{n_1^2} + \frac{(r_{1y} - r_{2y})^2}{n_2^2} + \frac{(r_{1z} - r_{2z})^2}{n_3^2} \right]^{1/2} \times \hat{I}. \quad (2.8)$$

Как мы увидим, адронная химия может быть введена через "скрытые" степени свободы обычной химии. В первую очередь, этот момент может быть проиллюстрирован замечанием, что изопространство происходит из следующих степеней свободы евклидовой метрики и связанной с ним единицы [*loc. cit.*]

$$\delta \rightarrow \hat{\delta} = n^{-2} \times \delta, \quad I \rightarrow \hat{I} = n^2 \times I, \quad (2.9)$$

где  $n$  – ненулевой действительный параметр, при котором евклидово расстояние остается инвариантом [*loc. cit.*],

$$\begin{aligned} r^2 &= (r^i \times \delta_{ij} \times r^j) \times I \equiv [r^i \times (n^{-2} \times \delta_{ij}) \times r^j] \times (n^2 \times I) = \\ &= (r^i \times \hat{\delta}_{ij} \times r^j) \times \hat{I} = \hat{r}^2. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Общая форма изопространства появляется когда параметр  $n$  расширяется до  $3 \times 3$  положительно определенной матрицы  $\hat{I}$ . Классическая формулировка изохимии основана на вышеупомянутой "скрытой" степени свободы евклидовой геометрии.

Следовательно, фундаментальным геометрическим инвариантом изохимии является

$$[\text{Длина}]^2 \times [\text{Единица}]^2 = \text{инвариант}, \quad (2.11)$$

где предполагаются тождества  $I \times I = I$  и  $\hat{I} \hat{\times} \hat{I} = \hat{I}$ . Мы свободны в изменении длин и единиц при вышеуказанном законе инвариантности, при условии, что изменения будут *обратны* друг к другу.

Заметим, что если единица поднята в форме  $I = \text{Diag.}(1, 1, 1) \rightarrow \hat{I} = \text{Diag.}(n_1^2, n_2^2, n_3^2)$ , то метрика поднимается в инверсной форме  $\delta = \text{Diag.}(1, 1, 1) \rightarrow$



$\hat{\delta} = \text{Diag.}(n_1^{-2}, n_2^{-2}, n_3^{-2})$ . В этом случае, правильная сфера поднимается до несферическим и деформированным формам, отмеченным в Разделе 2.2.2,  $r^2 = r^i \times \delta_{ij} \times r^j = (x^2 + y^2 + z^2) \times I \rightarrow \hat{r}^2 = r^i \times \hat{\delta}_{ij} \times r^j \times \hat{I} = (x^2/n_1^2 + y^2/n_2^2 + z^2/n_3^2) \times \hat{I}$ .

Понимание изоматематики требует знания, что величина  $\hat{r}^2 = r^i \times \hat{\delta}_{ij} \times r^j \times \hat{I} = (x^2/n_1^2 + y^2/n_2^2 + z^2/n_3^2) \times \hat{I}$  описывает правильную сферу, когда она вычисляется в изопространстве, это так называемая *изосфера*, а эллипсоидная форма получается только при ее *проектировании* на обычные поля. Это происходит из-за того факта, что каждая полуось поднята в отношении  $1_k \rightarrow n_k^2$ , в то время как соответствующая единица в *инверсном* отношении  $1_k \rightarrow 1/n_k^2$ . В виду основной инвариантности (2.11), *числовые значения полуосей изосферы остаются равными 1*.

Релятивистское расширение вышеприведенных евклидовых изотопий основано на лифтинге 4-мерной единицы геометрии Минковского в 4-мерную изоединицу  $I = \text{Diag.}(1, 1, 1, 1) \rightarrow \hat{I} = \text{Diag.}(n_1^2, n_2^2, n_3^2, n_4^2)$ ,  $n_\mu > 0$ , лифтинге метрики Минковского в изометрику  $\eta = \text{Diag.}(1, 1, 1, -c_0^2) \rightarrow \hat{\eta} = \text{Diag.}(1/n_1^2, 1/n_2^2, 1/n_3^2, -c_0^2/n_4^2)$  и лифтинге светового конуса в *световой изоконус*,  $x^2 + y^2 + z^2 - c_0^2 \times t^2 = 0 \rightarrow x^2/n_1^2 + y^2/n_2^2 + z^2/n_3^2 - c_0^2 \times t^2/n_4^2 = 0$ . Тогда становится очевидным воспроизведение изотопиями локального характера скорости света в зависимости от характера среды  $c = c_0/n_4$  (см. [1d] для детальных исследований).

Несмотря на свою простоту, физические и химические следствия вышеприведенных результатов простираются весьма далеко. Напомним, что пресловутое "универсальное постоянство скорости света" есть философская абстракция, так как свет имеет скорость  $c_0/n_4$  зависящую от свойств пространства в которой он распространяется, он имеет одну скорость в нашей атмосфере, другую скорость в воде, третью скорость в стекле и т.д. Конструкция релятивистской модели основанная на "универсальном постоянстве скорости света" не может, следовательно, быть точной, когда рассматривается распространение импульсов или событий через физическую среду, такую как в области волнового перекрытия валентных электронов. Хотя и численно малые, поправки к действительному значению скорости света подразумевают возможное появление новых эффектов и связанных с ними новых технологий, как мы увидим в заключительной части этой монографии.

Заметим также, что вышеприведенная инвариантность делает изометрии совместимыми с нашим сенсорным восприятием, поэтому воз-

можны интересные исследования в биологии, например, использование изоевклидовой геометрии для воспроизведения *роста* морских раковин во времени, которое численно *невозможно* через обычную евклидову геометрию, как показано в Главе 1 [2e]. Важным аспектом является то, что внутренне обобщенная изотопическим способом геометрия, совместима с нашим евклидовым восприятием. И наоборот, использование других (например искривленных) геометрий будет заметно для нашего сенсорного восприятия и, следовательно, неприемлемо, так как это противоречит нашим визуальным наблюдениям.

Вышеприведенный пример иллюстрирует ожидаемую роль изоматематики в химии, так как позволяет структурное расширение формализма с сохранением аксиом и следовательно, совместимости с нашим сенсорным восприятием евклидовых аксиом.

Читатель должен иметь в виду, что введение нового понятия изопространства-времени имеет далеко идущие следствия. Например, любая данная биологическая структура, рассматриваемая с позиции обычного наблюдателя (скажем, морская раковина), имеет другие измерения так же как и другую форму для внутреннего изотопического наблюдателя из-за инвариантности (2.11); переход может произойти через локальную замену геометрии без применения какой-либо внешней силы из-за характерной замены расстояния (2.8); еще большие специфичности появляются при введении изотопий времени, которые позволяют квантовые интерпретации бифуркаций через четыре возможные движения во времени, по направлению вперед и назад, в будущее и прошлое времена (см. [2e] для детальных исследований и затем Рис. 2.1).

Следует подчеркнуть, что изоевклидова геометрия представлена здесь с единственной целью: обеспечить *математическую* разработку изотопий квантовой химии, так как наша физическая реальность остается в обычном евклидовом пространстве. Действительно, при завершении желаемых математических исследований в изопространстве над изополями, физически измеримые величины получаются как *проекции* на обычные пространства над обычными полями.

#### 2.2.4 Изодифференциальное исчисление

Одной из причин задержки конструирования адронной механики со времени ее предложения в 1978 г. были сложности в объяснении изначальной неинвариантности первой формулировки, то есть отсутствие

предсказаний тех же числовых значений для тех же величин при тех же условиях, но в разные моменты времени. В конце концов, такая неинвариантность привела к необходимости изменения, по крайней мере, изначального дифференциального исчисления.

В работе [1e] 1996 года, Сантилли впервые решил проблему инвариантности введением *изодифференциального исчисления с пространством изодифференциалов*

$$d\hat{r}^k = \hat{I}_i^k \times d\hat{r}^i, \quad (2.12a)$$

$$\hat{d}\hat{r}_k = \hat{T}_k^i \times d\hat{r}_i, \quad (2.12b)$$

и пространством изопроизводных

$$\begin{aligned} \hat{\partial}_k &= \hat{\partial} \hat{\partial} \hat{r}^k = \hat{\partial} \hat{\partial} (\hat{I}_i^k \times \partial \hat{r}^i) = \hat{T}_k^i \times \hat{\partial} \hat{\partial} \hat{r}^i = \\ &= (\hat{T}_k^i \times \partial / \partial \hat{r}^i) \times \hat{I} = \hat{T}_k^i \times \partial / \partial r^i, \end{aligned} \quad (2.13a)$$

$$\begin{aligned} \hat{\partial}^k &= \hat{\partial} \hat{\partial} \hat{r}_k = \hat{\partial} \hat{\partial} (\hat{T}_k^i \times \partial \hat{r}_i) = \hat{I}_i^k \times \hat{\partial} \hat{\partial} \hat{r}_i = \\ &= (\hat{I}_i^k \times \partial / \partial \hat{r}_i) \times \hat{I} = \hat{T}_i^k \times \partial / \partial r_i, \end{aligned} \quad (2.13b)$$

с основными свойствами

$$\hat{\partial} \hat{r}^i \hat{\partial} \hat{r}^j = \hat{\delta}_j^i = \delta_j^i \times \hat{I}, \quad (2.14)$$

и, используя (2.13b), *изолапласиана*

$$\hat{\partial}_k \hat{\partial}^k = \hat{\partial}_i \times \hat{\delta}^{ij} \times \hat{\partial}_j = \partial_i \times \delta^{ij} \times \hat{T}_j^k \times \partial_k. \quad (2.15)$$

Заметим, что изопроизводные коммутируют, когда они определены на изопространстве над изополями, то есть  $\hat{\partial}_i \hat{\partial}_j = \hat{\partial}_j \hat{\partial}_i$ , как необходимо для изотопии. Однако, их проекции на обычные пространства  $E$  над обычным полем  $\mathbb{R}$  не обязательно коммутируют из-за возможной зависимости  $\hat{T}$  от  $r$ ,  $(\hat{T}_i^m \times \partial_m) \times (\hat{T}_j^n \times \partial_n) \neq (\hat{T}_j^m \times \partial_m) \times (\hat{T}_i^n \times \partial_n)$ . Эта дихотомия является общим правилом для всех изотопических теорий, потому что они допускают две в общем различные интерпретации: одну на изопространствах над изополями (то есть вычисление с учетом обобщенных единиц) и другую через их проекции на обычные пространства над обычными полями (то есть вычисление с учетом обычных единиц).

*Изодифференциалы времени* и *изопроизводные* определены соответственно через использование (скалярной) *изоединицы времени*  $\hat{I}_t = 1/\hat{T}_t$

$$\hat{d}t = \hat{I}_t \times dt, \quad \hat{\partial}_t = \hat{T}_t \times \partial_t = \hat{T}_t \times \partial / \partial t. \quad (2.16)$$

Изоинтегралы (неопределенные) определяются тривиально  $\hat{\int} = \int \hat{T}$ , так что

$$\hat{\int} \hat{d}\hat{r} = \int \hat{T} \times \hat{I} d\hat{r} = \hat{r}. \quad (2.17)$$

Лежащее в основе расширения понятие непрерывности определено в последующем Разделе 2.7.

### 2.2.5 Изогильбертовы пространства

Как это хорошо известно, гильбертово пространство  $\mathcal{H}$ , используемое в обычных химических связях, выражено в терминах состояний  $|\psi\rangle, |\phi\rangle, \dots$ , с нормировкой  $\langle\psi|\times|\psi\rangle = 1$  и внутренним произведением  $\langle\phi|\times|\psi\rangle = \int dr^3 \phi^\dagger(r) \times \psi(r)$  определенным над полем комплексных чисел  $\mathbb{C} = \mathbb{C}(c, +, \times)$ .

Лифтинг последнего,  $\mathbb{C}(c, +, \times) \rightarrow \hat{\mathbb{C}}(\hat{c}, \hat{+}, \hat{\times})$ , требует совместного лифтинга  $\mathcal{H}$  в *изогильбертово пространство*  $\hat{\mathcal{H}}$  с *изосостояниями*  $|\hat{\psi}\rangle, |\hat{\phi}\rangle, \dots$ , *изовнутренним произведением* и *изонормировкой*

$$\begin{aligned} \langle\hat{\psi}|\hat{\times}|\psi\rangle \times \hat{I} &= \left[ \hat{\int} \hat{d}\hat{r}^3 \hat{\psi}^\dagger(\hat{r}) \times \hat{T} \times \hat{\psi}(\hat{r}) \right] \times \hat{I} \in \hat{\mathbb{C}}, \\ \langle\hat{\psi}|\hat{\times}|\hat{\psi}\rangle &= 1, \end{aligned} \quad (2.18)$$

впервые введенные Миунгом и Сантили в 1982 г. [3a] (всесторонние исследования см. также в монографиях [2c, 2d]).

Легко видеть, что изовнутреннее произведение остается внутренним (так как  $\hat{T} > 0$ ). Поэтому,  $\hat{\mathcal{H}}$  остается гильбертовым и лифтинг  $\mathcal{H} \rightarrow \hat{\mathcal{H}}$  является изотопией. Также можно доказать, что *изоэрмитовость совпадает с эрмитовостью*. Как результат, все величины, которые являются наблюдаемыми для обычной квантовой химии, остаются таковыми для нашей адронной химии, и наоборот.

Для самосогласованности, обычное уравнение на собственные значения  $H \times |\psi\rangle = E \times |\psi\rangle$  также должно быть поднято в форму *изособственных значений* [3a]

$$\begin{aligned} \hat{H} \hat{\times} |\hat{\psi}\rangle &= \hat{H} \times \hat{T} \times |\hat{\psi}\rangle = \hat{E} \hat{\times} |\hat{\psi}\rangle = \\ &= (E \times \hat{I}) \times \hat{T} \times |\hat{\psi}\rangle = E \times |\hat{\psi}\rangle, \end{aligned} \quad (2.19)$$

где, как можно видеть, в окончательном результате получаются изначальные числа. Отметим *необходимость* изотопического действия  $\hat{H} \hat{\times} |\hat{\psi}\rangle$ ,

иного, чем  $\hat{H} \times |\hat{\psi}\rangle$ . Действительно, первое допускает  $\hat{I}$  как правильную единицу,  $\hat{I} \hat{\times} |\hat{\psi}\rangle = \hat{T}^{-1} \times \hat{T} \times |\hat{\psi}\rangle \equiv |\hat{\psi}\rangle$ .

Можно доказать, что *изособственные значения изоэрмитовых операторов являются изодействительными*, то есть они имеют структуру  $\hat{E} = E \times \hat{I}$ ,  $E \in \mathbb{R}(n, +, \times)$ . Как результат, все действительные собственные значения обычных квантово-химических связей остаются действительными для адронной химии.

Мы также напомним понятие *изоунитарных операторов*, как изооператоров  $\hat{U}$  на  $\hat{\mathcal{H}}$  над  $\hat{\mathbb{C}}$ , удовлетворяющих изозаконам

$$\hat{U} \hat{\times} \hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger \hat{\times} \hat{U} = \hat{I}. \quad (2.20)$$

где мы использовали тождество  $\hat{U}^\dagger \equiv \hat{U}^\dagger$ . Мы также отметим понятие *изоожидаемого значения* изооператора  $\hat{H}$  на  $\hat{\mathcal{H}}$  над  $\hat{\mathbb{C}}$

$$\langle \hat{H} \rangle = \frac{\langle \hat{\psi} | \hat{\times} \hat{H} \hat{\times} | \hat{\psi} \rangle}{\langle \hat{\psi} | \hat{\times} | \hat{\psi} \rangle}. \quad (2.21)$$

Легко видеть, что *изоожидаемые значения изоэрмитовых операторов совпадают с изособственными значениями*, как и в обычном случае.

Заметим также, что *изоожидаемое значение изоединицы является изоединицей*,  $\langle \hat{I} \rangle = \hat{I}$ , при условии, конечно, что используется изочастное (иначе  $\langle \hat{I} \rangle = I$ ).

Изотопии квантовой химии, изученные в следующей главе, основаны на следующем новом свойстве инвариантности обычного гильбертова пространства [1f], выраженного здесь через ненулевой скаляр  $n$  независимый от переменных интегрирования:

$$\langle \hat{\phi} | \times | \hat{\psi} \rangle \times I \equiv \langle \hat{\phi} | \times n^{-2} \times | \hat{\psi} \rangle \times (n^2 \times I) = \langle \hat{\phi} | \hat{\times} | \hat{\psi} \rangle \times \hat{I}. \quad (2.22)$$

Это приводит тогда к тому, что изотопии квантовой химии основаны на конкретной реализации теории "скрытых переменных", то есть через явную реализацию скрытой *переменной* в элементе изотопического оператора,  $\lambda = \hat{T}$ , и законе для изособственных значений (2.19). Заметим, что изособственное значение  $E$ , очевидно, зависит от принятого значения  $\lambda = \hat{T}$  для каждого  $\hat{H}$ . "Скрытый" характер реализации лучше всего выражен тождеством основных абстрактных аксиом квантовой и адронной механики и химии.

Последнее имеет фундаментальное значение, потому что известный аргумент Эйнштейна, Подольского и Розена об "отсутствии завершенности квантовой механики", обсужденный в Главе 1, является, очевидно, распространяемым во всей своей полноте до "отсутствия завершенности квантовой химии". Адронная химия и ее новая модель молекулярных структур, представленная в Главах 4 и 5, является, следовательно, "завершением" квантовой химии и обычных молекулярных моделей точно в соответствии с историческим учением Эйнштейна, Подольского и Розена. "Завершенность" достигается через инвариантное обращение к нелинейным, нелокальным и непотенциальным взаимодействиям, которые полностью отсутствуют в квантовой химии. Эти аспекты и связанные с ними ссылки можно найти в работе [1g] или монографии [2d].

Заметим, что новые инвариантности (2.10) и (2.22) оставались не обнаруженными в течении всего 20-го века, так как они требовали предвзятельного открытия *новых чисел* с новыми единицами.

### 2.2.6 Изопертурбативная теория

Теперь мы достаточно подготовлены для иллюстрации вычислительных преимуществ при использовании изотопий. При достаточных условиях непрерывности, *все пертурбативные и другие ряды, которые обычно расходятся (или слабо сходятся), могут перейти в сходящиеся (или сильно сходящиеся) формы путем использования изотопий с достаточно малым изотопическим элементом (достаточно большой изоединицей),*

$$|\hat{T}| \ll 1, \quad |\hat{I}| \gg 1. \quad (2.23)$$

Появление таких пертурбативных теорий впервые было изучено Яннуссом и Мигнани [3b] и затем более подробно исследовано в монографии [2d] под названием *изопертурбативная теория*.

Рассмотрим эрмитов оператор на  $\mathcal{H}$  над  $\mathbb{C}$  типа

$$H(k) = H_0 + k \times V, \quad H_0 \times |\psi\rangle = E_0 \times |\psi\rangle, \quad (2.24a)$$

$$H(k) \times |\psi(k)\rangle = E(k) \times |\psi(k)\rangle, \quad k \gg 1. \quad (2.24b)$$

Предположим, что  $H_0$  имеет невырожденный дискретный спектр. Тогда, как хорошо известно, пертурбативные ряды расходятся. Действи-

тельно, собственное значение  $E(k)$  оператора  $H(k)$  с точностью до второго порядка дается выражением

$$\begin{aligned} E(k) &= E_0 + k \times E_1 + k^2 \times E_2 = \\ &= E_0 + k \times \langle \psi | \times V \times | \psi \rangle + k^2 \times \sum_{p \neq n} \frac{|\langle \psi_p | \times V \times | \psi_n \rangle|^2}{E_{0n} - E_{0p}}, \end{aligned} \quad (2.25)$$

Но с использованием изотопий мы имеем

$$H(k) = H_0 + k \times V, \quad H_0 \times \hat{T} \times |\tilde{\psi}\rangle = \tilde{E}_0 \times |\tilde{\psi}\rangle, \quad \tilde{E}_0 \neq E_0, \quad (2.26a)$$

$$H(k) \times \hat{T} \times |\hat{\psi}(k)\rangle = \tilde{E}(k) \times |\hat{\psi}(k)\rangle, \quad \tilde{E} \neq E, \quad k > 1. \quad (2.26b)$$

Простейший лифтинг обычного пертурбативного пространства дает тогда

$$\begin{aligned} \tilde{E}(k) &= \tilde{E}_0 + k \times \tilde{E}_1 + k^2 \times \tilde{E}_2 + \hat{O}(k^2) = \\ &= \tilde{E}_0 + k \times \langle \tilde{\psi} | \times \hat{T} \times V \times \hat{T} \times |\tilde{\psi}\rangle + \\ &+ k^2 \times \sum_{p \neq n} \frac{|\langle \hat{\psi}_p | \times \hat{T} \times V \times \hat{T} \times |\hat{\psi}_n \rangle|^2}{\tilde{E}_{0n} - \tilde{E}_{0p}}, \end{aligned} \quad (2.27)$$

чья сходимость, может быть, очевидно, достигнута через подходящий выбор изотопического элемента, например, такого как  $|\hat{T}| \ll k$ .

Например, для положительно определенной константы  $\hat{T} \ll k^{-1}$ , выражение (2.27) становится

$$\begin{aligned} \tilde{E}(k) &= \tilde{E}_0 + k \times \hat{T}^2 \times \langle \hat{\psi} | \times V \times | \hat{\psi} \rangle + k^2 \times T^5 \times \\ &\times \sum_{p \neq n} \frac{|\langle \psi_p | \times V \times | \psi_n \rangle|^2}{\tilde{E}_{0n} - \tilde{E}_{0p}}. \end{aligned} \quad (2.28)$$

Это показывает, что изначально расходящиеся коэффициенты  $1, k, k^2, \dots$  превращаются в явно сходящиеся коэффициенты  $1, k \times T^2, k^2 \times T^5, \dots$ , с  $k > 1$  и  $\hat{T} \ll 1/k$ , гарантируя таким образом изосходимость для подходящего выбора  $\hat{T}$  для каждого данного  $k$  и  $V$ .

Более эффективное реконструирование сходимости может быть сделано в алгебраическом подходе, следуя очерченной схеме следующего Раздела 2.9. На этой вводной стадии мы рассматриваем расходящиеся канонические ряды,

$$\begin{aligned} A(k) &= A(0) + k \times [A, H]/1! + \\ &+ k^2 \times [[A, H], H]/2! + \dots \rightarrow \infty, \quad k > 1, \end{aligned} \quad (2.29)$$

где  $[A, H] = A \times H - H \times A$  – известное Ли-произведение и операторы  $A$  и  $H$  являются эрмитовыми и достаточно ограниченными. Тогда, после изотопического лифтинга предшествующие ряды приобретают следующий вид:

$$\hat{A}(k) = \hat{A}(0) + k \times [A; H]/1! + k^2 \times [[A; H]; H]/2! + \dots \leq |N| < \infty, \quad (2.30a)$$

$$[A; H] = A \times \hat{T} \times H - H \times \hat{T} \times A, \quad (2.30b)$$

что выполняется, например, для случая  $T = \varepsilon \times k^{-1}$ , где  $\varepsilon$  – достаточно малая положительно определенная константа.

В заключение, исследования конструкции адронной механики показывают, что видимые изначальные расходимости (или медленные сходимости) в квантовой механике и квантовой химии являются следствием отсутствия воспроизведения ими нелинейных, нелокальных и непотенциальных эффектов, так как, когда последние воспроизводятся через изоединицу, может быть получена полная сходимость (более быстрая сходимость).

Как мы увидим в Главах 4 и 5, предложенная новая модель химической связи действительно удовлетворяет решающему условию (2.23), позволяя сходимость химических численных вычислений по крайней мере в тысячу раз быстрее, чем в квантовой химии, с очевидными преимуществами, например, существенным сокращением необходимого компьютерного времени.

### 2.2.7 Изофункциональный анализ

Необходимым условием согласованности изохимии является тщательная разработка нового *изофункционального анализа*, впервые изученного Кадейшвили [3с], который ввел понятие *изонепрерывности*.

Изофункциональный анализ содержит обычные и специальные функции и преобразования, реконструированные таким образом, чтобы величина  $\hat{I}$  являлась корректной левой и правой единицей.

Заметим, что использование в адронной химии обычных тригонометрических функций, полиномов Лежандра, преобразований Фурье и Лапласа и т.д. будет приводить к большому количеству несогласованностей, что часто остается незамеченным неэкспертами в этой области. Несогласованности также случаются при использовании элементарных понятий, таких как экспоненцирование, детерминант, след и т.д.



Мы не можем здесь сделать обзор изофункционального анализа и вынуждены, для краткости, сослаться на монографию [2с]. Мы просто отметим *изотригонометрические функции*, впервые изученные Сантиллы [2с], которые определены в двумерном изоевклидовом пространстве с диагональной единицей

$$\hat{E}(\hat{r}, \hat{\delta}, \hat{\mathbb{R}}), \quad \hat{r} = \{x, y\} \times \hat{I}, \quad \hat{I} = \text{Diag.}(n_1^2, n_2^2), \quad n_k > 0, \quad (2.31a)$$

$$\hat{r}^2 = (x^2/n_1^2 + y^2/n_2^2) \times \hat{I} \in \hat{\mathbb{R}}. \quad (2.31b)$$

В изополярных координатах, вышеупомянутое изопространство превращается в *изогауссову плоскость* с изоединицей  $\hat{I}_{\hat{\theta}} = n_1 \times n_2$ . Обычные углы  $\theta \in \mathbb{R}$  превращаются в *изоуглы*  $\hat{\theta} = \theta \times \hat{I}_{\hat{\theta}} = \theta \times (n_1 \times n_2) \in \hat{\mathbb{R}}_{\hat{\theta}}$ . Обычные тригонометрические функции принимают тогда форму [2с]

$$\text{isocos } \hat{\theta} = [n_1 \times \cos(\theta \times n_1 \times n_2)] \times \hat{I}, \quad (2.32a)$$

$$\text{isosin } \hat{\theta} = [n_2 \times \sin(\theta \times n_1 \times n_2)] \times \hat{I}, \quad (2.32b)$$

со свойствами

$$\begin{aligned} & \text{isocos}^2 \hat{\theta} / n_1^2 + \text{isosin}^2 \hat{\theta} / n_2^2 = \\ & = (\cos^2(\theta \times n_1 \times n_2) + \sin^2(\theta \times n_1 \times n_2)) \times \hat{I} = \hat{I}. \end{aligned} \quad (2.33)$$

Выражение (2.33) характеризует *изоокружность*, то есть правильную окружность в изопространстве с *изополярными координатами* [*loc. cit.*]

$$\hat{x} = \hat{r} \hat{\times} \text{isocos } \hat{\theta}, \quad \hat{y} = \hat{r} \hat{\times} \text{isosin } \hat{\theta}. \quad (2.34)$$

Действительно, при переходе  $E \rightarrow \hat{E}$  мы делаем поднятие полуосей окружности  $1_k \rightarrow n_k^{-2}$ , что приводит к эллипсу. Но, соответствующие единицы поднимаются *инверсным* образом,  $1_k \rightarrow n_k^2$ , поэтому сохраняется изначальная правильность окружности в соответствии с законом инвариантности (2.11).

Изосферические координаты даются тогда [2с] выражениями

$$\begin{aligned} \hat{x} &= \hat{r} \hat{\times} \text{isosin } \hat{\phi} \hat{\times} \text{isocos } \hat{\theta}, \\ \hat{y} &= \hat{r} \hat{\times} \text{isocos } \hat{\phi} \hat{\times} \text{isosin } \hat{\theta}, \\ \hat{z} &= \hat{r} \hat{\times} \text{isocos } \hat{\phi}, \end{aligned} \quad (2.35)$$

где  $\hat{\phi} = \phi \times n_3$ .

Для краткости мы, к сожалению, должны отослать заинтересованного читателя к цитированной выше литературе за оставшимися аспектами изофункционального анализа. Дополнительные понятия изофункционального анализа будут вводиться по мере потребности в течении курса нашего анализа.

### 2.2.8 Изолинейность, изолокальность, изоканоничность и изоунитарность

Важно знать, что несмотря на их физическую неэквивалентность, *изотопии гильбертовых пространств сохраняют обычную линейность, локальность и унитарность*. Как мы увидим, достижение инвариантности в описании нелинейных, нелокальных и неканонических (неунитарных) взаимодействий достигается правильной реконструкцией изопространств над изополями обычных структур.

Начнем с того, что изотопии гильбертовых пространств в высокой степени нелинейны по волновым функциям (и их производным), как очевидно из уравнения на собственные значения  $\hat{H}(\hat{r}, \hat{p}) \hat{\times} \hat{T}(\hat{r}, \hat{p}, \hat{\psi}, \partial \hat{\psi}, \dots) \times |\hat{\psi}\rangle = E \times |\hat{\psi}\rangle$ . Хотя теория является *изолинейной*, то есть удовлетворяет условиям линейности в изопространстве. Действительно, для всех возможных  $\hat{a}, \hat{b} \in \hat{\mathcal{C}}$  и  $|\hat{\phi}\rangle, |\hat{\psi}\rangle \in \hat{\mathcal{H}}$ , мы имеем тождество

$$\hat{A} \hat{\times} (\hat{a} \hat{\times} |\hat{\psi}\rangle + \hat{b} \hat{\times} |\hat{\phi}\rangle) = \hat{a} \hat{\times} \hat{A} \hat{\times} |\hat{\psi}\rangle + \hat{b} \hat{\times} \hat{A} \hat{\times} |\hat{\phi}\rangle. \quad (2.36)$$

Следствия вышеприведенного свойства весьма обширны. Напомним из Раздела 1.7, что обычным образом сформулированные нелинейные теории не могут быть использованы для исследования композитных систем из-за нарушения принципа суперпозиции (которое следует из нарушения линейности). Это подразумевает, что *квантовая химия не может позволять согласованные нелинейные формулировки молекулярных связей, отсюда возникает драматическое сведение реальности к линейным теориям*. Изолинейность разрешает эту несогласованность, впервые позволяя строгую формулировку *нелинейных молекулярных моделей*, из-за точной реконструкции принципа суперпозиции на изопространствах над изополями.

Похожая ситуация возникает для *локальности*. Действительно, изотопии гильбертова пространства являются *нелокальными-интегральными*, поскольку взаимодействия такого типа допускаются в изоединицах, как

мы увидим в дальнейшем. Однако, изогильбертовы пространства являются *изолакальными*, то есть они удовлетворяют условию локальности на изопространствах над изополями. В частности, изотопии обычных теорий всюду локально-дифференциальны, исключая изоединицу. На более технических основаниях, изотопии подразумевают рождение новой *интегро-дифференциальной топологии*, впервые предложенной Тсагасом и Соурласом [3d] (см. также Сантилли [1e]).

При учете, что квантовая химия является строго локально-дифференциальной, вышеупомянутая новая топология имеет фундаментальное значение в виду того, что это позволяет математически строгие количественные исследования нелокально-интегральной компоненты валентных связей, обусловленной волновыми перекрытиями.

Реконструкция каноничности на изопространстве над изополями, называемой *изоканоничностью*, изучается в следующем разделе.

Напомним затем, что квантовая химия называется унитарной в том смысле, что единственные разрешенные ею преобразования имеют унитарный тип,  $U \times U^\dagger = U^\dagger \times U = I$ . Напротив, изотопии гильбертовых пространств являются *неунитарными*, поскольку, как мы увидим, они допускают взаимодействия, не воспроизводимые гамильтонианом. Однако, изотопии реконструируют унитарность на изопространстве над изополями, – свойство называемое *изоунитарностью*. Действительно, неунитарные преобразования всегда могут быть переписаны в *идентичной* изотопической форме [2c]

$$W \times W^\dagger = \hat{I} = 1/\hat{T} \neq I, \quad W = \hat{W} \times \hat{T}^{1/2}, \quad (2.37a)$$

$$W \times W^\dagger \equiv \hat{W} \hat{\times} \hat{W}^\dagger = \hat{W}^\dagger \hat{\times} \hat{W} = \hat{I}. \quad (2.37b)$$

Реконструкция унитарности на изопространстве над изополями имеет такие же глубокие следствия для математической структуры, как и для практических применений адронной химии. Действительно, упомянутая реконструкция впервые позволяет инвариантную трактовку *непотенциальных* взаимодействий и эффектов, что полностью отсутствует в квантовой химии.

В заключение, серьезное понимание адронной химии требует знания, что лежащая в ее основе новая математика позволяет строгое инвариантное воспроизведение новых свойств, эффектов и взаимодействий, которые строго запрещены квантовой химией, как это обычно и бывает для

новых покрывающих моделей в отношении их оригиналов, выступающих в роли частных случаев.

### 2.2.9 Изотеория Ли-Сантилли

Фундаментальная алгебраическая структура современной химии, теория Ли, является линейной, локально-дифференциальной и канонической в ее классической реализации, или унитарной в ее операторной форме (см., например, монографии [6]). Вследствие этого теория Ли является недостаточной для характеристики желаемой нелинейной, нелокально-интегральной и неканонической (неунитарной) компоненты валентных связей.

В ряде исследований, относящихся к 1978 г., Сантилли [1a] (см. также монографии [2b]) предложил изотопии всей теории Ли (универсальных обертывающих алгебр, алгебр Ли, групп Ли, теорий преобразований и представлений и т.д.). Появившаяся расширенная теория известна сегодня как изотеория Ли-Сантилли. Для независимого обзора можно обратиться к монографиям [4].

По концепции и конструкции, изотеория Ли-Сантилли *не* является новой теорией, а просто *новой реализацией* абстрактных аксиом теории Ли. Напомним также, что все простые алгебры Ли (над полем нулевой характеристики) известны из классификации Картана. Следовательно, изотопии теории Ли не имеют возможности производить новые алгебры и были сконструированы ради *новых нелинейных, нелокальных и неканонических (неунитарных) реализаций* уже известных алгебр Ли.

Сохранение абстрактных аксиом Ли при нелинейных, нелокальных и неканонических (неунитарных) реализациях допускается реконструированием линейности, локальности и каноничности (унитарности) на изопространствах над изополями, этим иллюстрируется методологическая значимость последних.

Основные положения изотеории Ли-Сантилли могут быть суммированы следующим образом. Пусть  $\xi(L)$  это универсальная обертывающая ассоциативная алгебра  $n$ -мерной алгебры Ли  $L$  с генераторами  $X = \{X_k\} = \{X_k^\dagger\}$ , единицей  $I = \text{Diag.}(1, 1, 1, \dots)$ , ассоциативным произведением  $X_i \times X_j$ , бесконечномерным базисом  $I, X_k, X_i \times X_j, i \leq j, X_i \times X_j \times X_k, i \leq j \leq k, \dots$ , (теорема Пуанкаре-Биркгоффа-Витта) и экспоненцированием  $e^{iXw} = I + (i \times X \times w)/1! + (i \times X \times w) \times (i \times X \times w)/2! + \dots, w \in \mathbb{R}$ .

Универсальная обертывающая изоассоциативная алгебра  $\hat{\xi}(L)$ , впервые предложенная Сантилли в работе [1a], является изотопическим образом  $\xi(L)$  с изоединицей  $\hat{I}$ , теми же генераторами  $\hat{X}_k = X_k$ , только считаемыми на изопространстве, изоассоциативным произведением  $\hat{X}_i \hat{\times} \hat{X}_j$ , бесконечномерным изобазисом (изотопическая теорема Пуанкаре-Биркгоффа-Витта [*loc. cit.*])

$$\hat{I}, \hat{X}_k, \hat{X}_i \hat{\times} \hat{X}_j, \quad i \leq j, \quad \hat{X}_i \hat{\times} \hat{X}_j \hat{\times} \hat{X}_k, \quad i \leq j \leq k, \dots, \quad (2.38)$$

и изоэкспоненцированием (для  $\hat{X} = X$ )

$$\hat{e}^{i \times X \times w} \equiv \hat{e}^{\hat{i} \hat{\times} \hat{X} \hat{\times} \hat{w}} = \{e^{i \times X \times \hat{T} \times w}\} \times \hat{I}, \quad (2.39)$$

где  $w = \{w_k\} \in \mathbb{R}$  и  $\hat{w} = w \times \hat{I} \in \hat{\mathbb{R}}$  это *изопараметры*.

Пусть  $L$  это алгебра Ли гомоморфная антисимметричной алгебре  $[\xi(L)]^-$  из  $\xi(L)$  над полем  $\mathbb{F}(a, +, \times)$  действительных, комплексных или кватернионных чисел с известной второй теоремой Ли  $[X_i, X_j] = X_i \times X_j - X_j \times X_i = C_{ij}^k \times X_k$ . *Изоалгеброй Ли-Сантилли*, впервые введенной в работе [1a], является изопространство  $\hat{L}$  с элементами  $\hat{X}_k = X_k = X_k^\dagger$  на  $\hat{\mathcal{H}}$  над  $\hat{\mathbb{F}}$ , с *изокоммутационными правилами*

$$[\hat{X}_i, \hat{X}_j] = \hat{X}_i \hat{\times} \hat{X}_j - \hat{X}_j \hat{\times} \hat{X}_i = \hat{C}_{ij}^k \hat{\times} \hat{X}_k, \quad (2.40)$$

чьи скобки удовлетворяют аксиомам Ли в изотопической форме

$$[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}], \quad (2.41a)$$

$$[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0, \quad (2.41b)$$

и *изодифференциальными правилами*

$$[\hat{A} \hat{\times} \hat{B}, \hat{C}] = \hat{A} \hat{\times} [\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}] \hat{\times} \hat{B}. \quad (2.42)$$

Пусть  $G$  это (связная) группа преобразований Ли, характеризуемая "экспоненцированием"  $G$  в элементы  $U(w) = e^{i \times X \times w}$  с известными законами  $U(w) \times U(w') = U(w + w')$ ,  $U(w) \times U(-w) = U(0) = I$ . Тогда (связная) группа изопреобразований Ли-Сантилли  $\hat{G}$ , впервые предложенная в работе [1a], является "изоэкспоненцированием"  $\hat{L}$  согласно (2.39) с изотопическими законами

$$\begin{aligned} \hat{x}' &= \hat{U}(\hat{w}) \hat{\times} \hat{x} = \hat{e}^{\hat{i} \hat{\times} \hat{X} \hat{\times} \hat{w}} \hat{\times} \hat{x} = \\ &= \{e^{i \times X \times \hat{T} \times w}\} \times \hat{I} \times \hat{T} \times \hat{x} = \{e^{i \times X \hat{\times} \hat{T} \times w}\} \times \hat{x}, \end{aligned} \quad (2.43a)$$

$$\hat{U}(\hat{w}) \hat{\times} \hat{U}(\hat{w}') = \hat{U}(\hat{w} + \hat{w}'), \quad \hat{U}(\hat{w}) \hat{\times} \hat{U}(-\hat{w}) = \hat{U}(\hat{0}) = \hat{I}. \quad (2.43b)$$

Наконец мы напомним *изотопическую теорему Бэйкера-Кемпбела-Хаусдорфа* [1a]:

$$\hat{U}_1 \hat{\times} \hat{U}_2 = \{e^{\hat{X}_1}\} \hat{\times} \{e^{\hat{X}_2}\} = \hat{U}_3 = e^{\hat{X}_3}, \quad (2.44a)$$

$$\hat{X}_3 = \hat{X}_1 + \hat{X}_2 + [\hat{X}_1, \hat{X}_2]/2 + [(\hat{X}_1 - \hat{X}_2), [\hat{X}_1, \hat{X}_2]]/12 + \dots, \quad (2.44b)$$

которая гарантирует, что изоалгебра  $\hat{L}$  замкнута относительно изокоммутационных правил всякий раз, когда замкнута оригинальная алгебра (то есть  $\hat{L}$  не производит новых генераторов) для всех возможных несингулярных изотопических элементов  $\hat{T}$ .

Классическая реализация (детали см. в Главе 3) одномерной связной изогруппы Ли-Сантilli дается в унифицированных обозначениях  $b = \{b^\mu\} = \{I^k, p_k\}$ ,  $\mu = 1, 2, \dots, 6$ , [1a, 2c],

$$\hat{b}(\hat{0}) = \hat{U}(\hat{t}) \hat{\times} \hat{b} = \{e^{\hat{i} \hat{\times} \hat{t} \hat{\times} \hat{\partial} \hat{H}} \hat{\partial} \hat{b}^\mu \hat{\times} \hat{\omega}^{\mu\nu} \hat{\times} \hat{\partial} \hat{\partial} \hat{b}^\nu\} \hat{\times} \hat{b}(0), \quad (2.45)$$

где  $\hat{\omega} = \omega \times \hat{I}$  и  $\omega^{\mu\nu}$  это обычные тензоры Ли. Тогда в окрестности изоединицы мы имеем следующее уравнение

$$\hat{d} \hat{b}^\mu \hat{\times} \hat{d} \hat{t} = \hat{\omega}^{\mu\nu} \hat{\times} \hat{\partial} \hat{H} \hat{\times} \hat{\partial} \hat{b}^\nu. \quad (2.46)$$

где следует отметить использование обоих пространств и временных производных.

Операторная реализация (детали см. в Главе 3) одномерной связной изогруппы Ли-Сантilli на  $\hat{\mathcal{H}}$  над  $\hat{\mathcal{C}}$  дается в следующем виде [1a, 2c]:

$$\begin{aligned} \hat{A}(\hat{t}) &= \{e^{\hat{i} \hat{\times} \hat{H} \hat{\times} \hat{t}}\} \hat{\times} \hat{A}(\hat{0}) \hat{\times} \{e^{-\hat{i} \hat{\times} \hat{t} \hat{\times} \hat{H}}\} = \\ &= \{e^{i \times \hat{H} \times \hat{T} \times t}\} \times \hat{A}(0) \times \{e^{-i \times t \times \hat{T} \times \hat{H}}\}, \end{aligned} \quad (2.47)$$

что допускает в окрестности изоединицы уравнение

$$\hat{i} \times \hat{d} \hat{A} \hat{\times} \hat{d} \hat{t} = [\hat{A}, \hat{H}] = \hat{A} \hat{\times} \hat{H} \hat{-} \hat{H} \hat{\times} \hat{A} = \hat{A} \times \hat{T} \times \hat{H} - \hat{H} \times \hat{T} \times \hat{A}. \quad (2.48)$$

Теперь сделаем несколько комментариев. Нетривиальность изотеории Ли-Сантilli относительно обычной формулировки устанавливается *появлением изотопического элемента  $\hat{T}$  в экспоненте групповой структуры* (2.44). Это гарантирует, что изотеория имеет наиболее общую из возможных, нелинейную, нелокально-интегральную и негамильтонову-неунитарную структуру, хотя переформулирована в тождественно изоллинейную, изокальную и изоунитарную форму.

Свойства (2.44) гарантируют, что, при условиях достаточной регулярности и непрерывности, изотопии  $\hat{L}$  или  $\hat{G}$  данной алгебры Ли  $L$  или группы  $G$  сохраняют оригинальную связность и размерность. Более того, из положительной определенности изоединицы  $\hat{I} > 0$  легко видеть, что изоалгебры и изогруппы локально изоморфны оригинальным алгебрам и группам,  $\hat{L} \approx L, \hat{G} \approx G$ .

Последний изоморфизм является первостепенно важным для адронной химии. Действительно, он гарантирует сохранение всех обычных физических законов и соотношений. Например, сохранение принципа запрета Паули может быть заранее предсказано уже на этом алгебраическом уровне из сохранения *точной*  $SU(2)$  спинорной симметрии при нелинейных, нелокальных и неунитарных взаимодействиях, при их трактовке через изоматематику (детали см. в Главе 4). То же самое имеет место для всех пространственно-временных симметрий, таких как симметрии Галилея и Пуанкаре, или для внутренних симметрий, таких как изоспиновая симметрия (см. [2с, 2d] для деталей).

На самом деле, общим свойством изотеории Ли-Сантиллы, для которой она была сконструирована, является *реконструкция точных пространственно-временных и внутренних симметрий, в то время как считается, что происходит их неизбежное нарушение*.

Например, вращательная симметрия  $SO(2)$ , в общем, предполагается нарушенной для эллипсов (2.33), в то же время, в действительности, эта симметрия является точной, когда она сформулирована на изопространстве  $\hat{E}$  над изополем  $\hat{\mathbb{R}}$ . Действительно, выражение (2.33) воспроизводит эллипс только в обычном пространстве  $E$  над обычным полем  $\mathbb{R}$ , в то время, как он становится точной окружностью на  $\hat{E}$  над  $\hat{\mathbb{R}}$ , и этим подтверждается точный характер  $S\hat{O}(2)$ .

Заметим, что использование квантовых деформаций подразумевает переход к алгебрам, которые *не являются* изоморфными изначальным алгебрам, поэтому подразумевается принятие новых, еще неизвестных физических законов и относительностей.

Несмотря на *математическую схожесть* между обычной и изотопической теориями, теория Ли и теория Ли-Сантиллы *физически не эквивалентны*. Действительно, классическая реализация изотопической теории характеризуется *неканоническим* преобразованием обычной реализации (см. Главу 3), в то же время, операторная реализация характеризуется *неунитарным* преобразованием обычной операторной реализации (см. также Главу 3). Как таковая изотеория Ли-Сантиллы не входит в класс

эквивалентности обычной теории Ли.

Заметим, что обычная теория Ли допускает единственную интерпретацию, на обычных пространствах над обычными полями. Наоборот, изотопия Ли-Сантилли допускает две интерпретации: на изопространствах над изополями и ее проекцию на обычные пространства над обычными полями.

В качестве заключительного комментария мы должны отметить, что наиболее строгий путь для получения новой модели химических связей, предложенной в этой монографии, лежит через изотопии симметрии Галилея для нерелятивистского случая и симметрии Пуанкаре для релятивистского случая. Эти изотопии подробно изучены в монографии [2f] (см. также работу [3f] и монографию [4c] с независимыми обзорами).

Мы, к сожалению, не можем изучить последний подход в этой монографии (и пропускаем многие другие важные темы, такие как алгебры Клиффорда и их изотопии), так как их технический уровень будет выходить за рамки целей этой работы.

## 2.3 Элементы геноматематики

### 2.3.1 Введение

Несколько наиболее фундаментальных проблем, оставленных неразрешенными наукой 20-го века, включая химию, касаются *происхождения и инвариантности необратимых процессов*, таких как обычные химические реакции (которые являются в общем необратимыми в том смысле, что их образ после обращения времени не соответствует естественным процессам).

Необратимость остается существенно неразрешенной, так как, с одной стороны, необратимые процессы, такие как химические реакции, являются в общем неконсервативными, с другой стороны, теории используемые для их изучения, такие как квантовая механика и квантовая химия, могут воспроизводить только строго *консервативные* системы. Действительно, *единственная* временная эволюция, допускаемая квантовой механикой и квантовой химией, дается уравнениями Гейзенберга, которые подразумевают *обязательное* сохранение энергии,  $i \times dH/dt = [H, H] = H \times H - H \times H \equiv 0$ .

Все исследования, проведенные Сантилли и посвященные необрати-



мости, говорят о том, что рассмотренные здесь недостатки являются следствием лежащей в основе *математики*. Действительно, все аксиомы квантовой механики, такие как аксиомы теории Ли (которые воспроизводят временную эволюцию), являются существенно обратимыми во времени. Следовательно, все попытки количественного воспроизведения необратимых процессов через математику, которая структурно обратима, не могут быть квалифицированы как истинно научные.

Легко видеть, что то же самое верно для расширенной изоматематики. Действительно, ее основные аксиомы, такие же как и изотеория Ли-Сантилли, являются также полностью обратимыми во времени как необходимое условие изотопии. Следовательно, не может считаться действительно научной попыткой воспроизведение необратимых процессов через изоматематику.

Вышеприведенные соображения дают повод для конструирования еще более расширенной математики, известной сегодня как *геноматематика Сантилли*, которая была задумана и разработана специально для воспроизведения необратимых процессов. В частности, по концепции и конструкции, геноматематика обладает *структурно необратимыми аксиомами*, то есть аксиомами, которые остаются необратимыми даже при использовании обратимых взаимодействий, потенциалов и гамильтонианов.

Сантилли предложил алгебраические основания геноматематики во время своих докторских исследований [5a, 5b, 5c] в 1967 году. Значительные успехи в этой области были сделаны в следующих областях: генотопии теории Ли [1a] в 1978 г.; начало исследований структуры теории [5d] в 1979 г.; первая формулировка генопространства [1c] в 1983 г.; и первая известная формулировка геночисел [1b] в 1993 г. Математическую завершенность геноматематика получила в работе [1e] 1996 года, тогда как физическая завершенность, включающая разрешение катастрофических несогласованностей, описанных в Разделе 1.7, была достигнута в работе [5e] 1997 года. Как результат этих усилий, геноматематика сегодня стала пригодна для приложений.

Довольно странно, в виду очевидно важных математических, физических и химических следствий, но Сантилли остается по сей день инициатором и наиболее активным автором работ по геноматематике, косвенные сотрудничества осуществляются только в алгебраической области, как мы увидим в дальнейшем.

В этом разделе мы приведем наиболее важные элементы геномате-

матики, с пониманием того, что глубокие знания могут быть получены единственно через изучение первоисточников.

Геноматематика будет принята в следующей главе как основание *генотопической ветви адронной химии*, или *генохимии* для краткости.

Для менее искушенного в математике читателя, мы представим в следующей главе очень простые методы, основанные на неунитарных преобразованиях, которые позволяют ясное конструирование генохимии во всех деталях, необходимых для приложений.

Мы наконец заметим, в этих заключительных строках, что термин "генотопии" был введен Сантилли в 1978 г., исходя из греческого смысла, подчеркивающего "вывод аксиом". Следовательно, в то время как изотопии являются отображениями, сохраняющими оригинальные аксиомы, генотопии являются расширенными отображениями нарушающими оригинальные аксиомы с целью получения расширенных формулировок.

### 2.3.2 Главные структурные линии геноматематики

Для непосвященного читателя может быть полезно начать эту монографию с главных структурных линий геноматематики и ее необратимой структуры, и затем перейти к изучению их специфических понятий.

Руководящим принципом является конструирование геноматематики как покрывающей изоматематики, то есть как расширенную математику, допускающую изоматематику как частный случай, хотя и обладающую необратимой структурой в ее общей формулировке.

Главная идея геноматематики заключается в том, что ее структура свойственна *обычной* теории Ли. Однопараметрическая связная группа преобразований Ли реализованная через эрмитов оператор  $X = X^\dagger$  на гильбертовом пространстве  $\mathcal{H}$  над полем  $\mathbb{F}$  имеет в действительности структуру *бимодуля* (также называемую *спит-нулевым расширением* [1d]).

В нетехнических терминах, бимодуль Ли существенно характеризуется *действием слева*  $U^>$  и *действием справа*  $\langle U$  с явной реализацией и связывающим сопряжением

$$\begin{aligned} A(w) &= U^> > A(0) < \langle U = \\ &= \{e^{i \times X^> \times w}\} > A(0) < \{e^{-i \times w \times \langle X}\} = \\ &= (I^> + i \times X^> \times w + \dots) > A(0) < (\langle I - i \times w \times \langle X + \dots), \end{aligned} \quad (2.49a)$$

$$U^> = (\langle U \rangle)^\dagger = U, \quad X^> = (\langle X \rangle)^\dagger = X, \quad I^> = \langle I \rangle = I, \quad (2.49b)$$

где  $w$  это параметр Ли и умножения  $>$  и  $<$  воспроизводят обычные ассоциативные произведения, направленные направо и налево соответственно.

Инфинитезимальная версия в окрестности единицы приобретает тогда знакомую форму

$$\begin{aligned} i \times dA/dw &= i \times [A(dw) - A(0)]/dw = \\ &= A \langle X - X \rangle A = A \times X - X \times A, \end{aligned} \quad (2.50)$$

которая делает ясным важное бимодулярное понятие, что в  $A \times X = A \langle X$  ( $X \times A = X \rangle A$ ), оператор  $X$  действует справа (слева).

Бимодулярная структура Ли может быть, следовательно, записана как би-группа  $\{\langle U, U^>\}$ , действующая на гильбертовом бимодуле  $\{\langle \mathcal{H}, \mathcal{H}^>\}$  над би-полями  $\{\langle \mathbb{F}, \mathbb{F}^>\}$ , где  $\langle U = (U^>)^\dagger = U$ ,  $\langle \mathcal{H} = \mathcal{H}^> = \mathcal{H}$ ,  $\langle \mathbb{F} = \mathbb{F}^>$ .

Для обычной формулировки теории Ли, приведенная выше бимодулярная структура в общем игнорируется, даже в наиболее передовых научных трактатах в этой области. (см., например, теоретическую работу [6a] или математическую монографию [6b]), так как это излишне и несущественно когда модульное действие справа и слева связаны правилами

$$X^> \times \psi^> = X \times \psi = -\langle \psi \langle \langle X = -\psi \times X, \quad (2.51)$$

где  $\psi^> \in \mathcal{H}^>$ ,  $\langle \psi \in \langle \mathcal{H}, X^>$  это элемент универсальной обертывающей ассоциативной алгебры  $\xi^>(L)$  рассматриваемой алгебры Ли  $L \approx [\xi^>(L)]^-$  для действия справа и  $\langle X \in \langle \xi(L)$  для действия слева.

Так как  $\mathcal{H}^> = \langle \mathcal{H} = \mathcal{H}$ , и  $\xi^>(L) = \langle \xi(L) = \xi(L)$ , бивоспроизведения бимодулярной структуры  $\{\langle \xi(L), \xi^>(L)\}$  над  $\{\langle \mathcal{H}, \mathcal{H}^>\}$  могут быть эффективно сведены к односторонним представлениям, или просто представлениям, для краткости,  $\xi(L)$  над  $\mathcal{H}$ , как это хорошо известно [6]. Однако, как мы скоро увидим, оригинальная бимодулярная структура теории Ли является нетривиальной для расширенных реализаций аксиом.

Изо- и гено-математика были предложены [1a] на основе простого наблюдения, что абстрактные аксиомы бимодулярной структуры Ли (2.51) не обязательно требуют, чтобы умножения  $>$  и  $<$  были обычными, так как эти умножения могут быть также обобщенными, лишь бы они оставались ассоциативными. Другими словами, абстрактная аксиоматическая

структура действия справа  $U^> > A(0)$  является *правым модульным ассоциативным действием*, без ограничения реализации произведения  $>$  чем-нибудь, кроме закона ассоциативности, и то же имеет место для действия слева  $A(0) < < U$ .

Простейшее из возможных расширений обычной формулировки теории Ли дается *изотопиями теории Ли*, изученными в предыдущих разделах. Эти изотопии существенно характеризуются лифтингом (поднятием) обычного правого модульного ассоциативного произведения в форму предыдущего раздела  $U^> A(0) = U^> \times T \times A(0)$  с сопряженной версией слева  $A(0) < < U = A(0) \times T \times < U$ , где  $T = T^\dagger$  это фиксированная, хорошо определенная, нигде не сингулярная эрмитова матрица (или оператор) той же размерности, что и рассматриваемое представление. Инверсная к ней  $\hat{T} = T^{-1}$  является тогда полностью допустимой, обобщенной, левой и правой единицей  $A^> > \hat{T} = \hat{T} < < A = A$  для всех возможных элементов  $A$  рассматриваемой алгебры.

Изотопическая реализация аксиом Ли (2.49) дается тогда выражением, изученным в предыдущем разделе,

$$\begin{aligned} A(w) &= U^> > A(0) < < U = \\ &= \{e^{i \times X^> \times w}\} > A(0) < \{e^{-i \times w \times < X}\} = \\ &= \{e^{i \times X^> \times \hat{T} \times w}\} \hat{\times} A(0) \hat{\times} \{e^{-i \times w \times \hat{T} \times < X}\}, \\ &X = X^\dagger, \quad \hat{T} = \hat{T}^\dagger, \end{aligned} \quad (2.52)$$

с инфинитезимальным видом

$$i \times dA/dw = i \times [A(dw) - A(0)]/dw = A \times \hat{T} \times X - X \times \hat{T} \times A. \quad (2.53)$$

Изотопии требуют тогда, для математической и физической согласованности, реконструкции *всей* теории Ли в соответствии с новой единицей  $\hat{T}$  и изопроизведением  $A > B = A < B = A \hat{\times} B = A \times T \times B$ , включая: числа и поля; метрику и гильбертовы пространства; алгебры Ли; группы и симметрии; теорий преобразований и представлений; и т.д.

Изотопии теории Ли также обладают тривиальной бимодулярной структурой, в том смысле, что двусторонние представления всегда могут быть эффективно сведены к односторонним изопредставлениям через правило эквивалентности (2.51).

*Генотопии теории Ли*, впервые предложенные в работе [1a] и затем изученные в различных работах, на которые мы ссылались выше, происходят из расширенной *реализации* абстрактного бимодуля Ли (2.49) под

именем геноассоциативного умножения и единицы (или генопроизведения и геноединицы, для краткости),

$$A > B = A \times P \times B, \quad A < B = A \times Q \times B, \quad (2.54a)$$

$$\hat{I}^> = P^{-1}, \quad I^> > A = A > \hat{I}^> = A, \quad (2.54b)$$

$$\hat{I}^< = Q^{-1}, \quad \hat{I}^< < A = A < \hat{I}^< = A, \quad (2.54c)$$

$$\hat{I}^> = P^{-1} = (\hat{I}^<)^\dagger = (Q^{-1})^\dagger, \quad (2.54d)$$

где  $P \neq Q$  это хорошо определенные, всюду обратимые, неэрмитовы матрицы или операторы в общем случае реализованные через действительные несимметричные матрицы той же размерности, что и рассматриваемое воспроизведение Ли. Более того, требуется чтобы  $P + Q$  и  $P - Q$  были несингулярными, для сохранения хорошо определенного содержания теорий Ли и Жордана, соответственно.

Генопроизведения и геноединицы (2.54) характеризуют следующую более общую реализацию абстрактных аксиом (2.49), впервые предложенную в работах [5а, 1а] и называемую сегодня *геногруппами Ли-Сантилли*

$$\begin{aligned} A(t) &= U^> > A(0) < \hat{I}^< A = \\ &= \{e_{>}^{i \times X \times w}\} > A(0) < \{e_{<}^{-i \times w \times X}\} = \\ &= \{e^{i \times X \times P \times w}\} \times A(0) \times \{e^{-i \times w \times Q \times X}\} = \\ &= (I^> + i \times X \times w + \dots) > A(0) < (\hat{I}^< - i \times w \times X + \dots), \end{aligned} \quad (2.55a)$$

$$\begin{aligned} U^> &= (\hat{I}^<)^\dagger, \\ X^> &= (\hat{X}^<)^\dagger = \hat{X}^< = X, \\ P^> &= P = (\hat{Q}^<)^\dagger = \hat{Q}^<, \end{aligned} \quad (2.55b)$$

$$\hat{I}^> = P^{-1} = (\hat{I}^<)^\dagger = (Q^{-1})^\dagger, \quad (2.55c)$$

с инфинитезимальной версией в окрестности геноединиц, характеризующей геноалгебрами Ли-Сантилли [*loc. cit.*]

$$\begin{aligned} i \times [A(dw) - A(0)]/dw &= (A, B) = \\ &= A < X - X > A = A \times P \times X - X \times Q \times A = \\ &= (A \times \hat{T} \times B - B \times \hat{T} \times A) + \\ &+ (A \times \hat{W} \times B + B \times \hat{W} \times A) = \\ &= [A, B] + \{A, B\}, \end{aligned} \quad (2.56)$$

где  $P = \hat{T} + W$ ,  $Q = W - \hat{T}$ , и мы использовали *геноэкспоненцирование направо и налево*

$$\begin{aligned} e_{>}^{i \times X \times w} &= I^> + i \times X \times w / 1! + (i \times X \times w) > (i \times X \times w) / 2! + \dots = \\ &= \{e^{i \times X \times P \times w}\} \times I^>, \end{aligned} \quad (2.57a)$$

$$\begin{aligned} e_{<}^{i \times w \times X} &= <I + i \times X \times w / 1! + (i \times X \times w) > (i \times X \times w) / 2! + \dots = \\ &= <I \times \{e^{i \times w \times Q \times X}\}. \end{aligned} \quad (2.57b)$$

С этого момента, существенный бимодулярный характер аксиом (2.49) требует их полного освещения, так как в дальнейшем отсутствует эффективное сведение к односторонней форме. Действительно, мы можем еще воспроизводить структуру (2.55) с бимодулем, действующим на би-изопространствах  $\{<\mathcal{H}, \mathcal{H}>\}$  над некоторыми би-полями  $\{<\mathbb{F}, \mathbb{F}>\}$  (которые будут определены ниже). Однако,  $<\mathcal{H}$  теперь нетривиально отличается от  $\mathcal{H}>$ . Как результат, *теория представления изогрупп Ли-Сантилли имеет существенную бимодулярную структуру, которая не может быть сведена к односторонним изопредставлениям.*

Следует отметить, что (неассоциативная) алгебра с произведением  $(A, B) = A \times P \times B - B \times Q \times A$  временной эволюции (2.56) является *Ли-допустимой алгеброй*, как показано американским математиком А.А. Альбертом [7] (см. также [5]). В общем, неассоциативная алгебра  $A$  с абстрактными элементами  $a, b, c, \dots$  (например несингулярными матрицами) и абстрактным произведением " $ab$ " называется Ли-допустимой, когда связанная с ней антисимметричная алгебра  $U^-$ , которая содержит те же элементы, что и  $U$ , снабженная новым произведением  $[a, b]_U = ab - ba$ , является алгеброй Ли.

Простейшей из возможных Ли-допустимых алгебр является алгебра  $\xi$   $n \times n$ -матриц  $A, B, C, \dots$  и обычным ассоциативным произведением  $A \times B, A \times (B \times C) = (A \times B) \times C$ . Действительно, алгебры Ли  $L$  сконструированы точно как связанные с ними антисимметричные алгебры  $\xi^-$  из  $\xi$  с известным произведением Ли  $[A, B]_A = A \times B - B \times A$ .

Неассоциативная алгебра  $A$  с произведением (2.56) является Ли-допустимой в том более общем смысле, что связанное с ней антисимметричное произведение является Ли-изотопическим,  $[A, B]_A = (A, B) - (B, A) = [A, B]_A = A \times \hat{T} \times B - B \times \hat{T} \times A$ .

Заметим, что *Ли-допустимые алгебры с произведением  $(A, B)$ , впервые введенные в работе [1a] 1978 года, являются наиболее общими из*

известных алгебр, как они понимаются в математике на сегодняшний день (характеризуются билинейным произведением, которое подчиняется левому и правому дистрибутивным законам и законам умножения на скаляр). Действительно, алгебры с произведением  $(A, B)$ , включают как частный случай, в зависимости от принятых значений  $P$  и  $Q$ , все известные алгебры, такие как: ассоциативные алгебры, алгебры Ли и Жордана, изотопические алгебры Ли и Жордана, суперсимметричные алгебры, алгебры Каца-Муди и т.д.

Отметим решающую роль сопряжения  $U^> = (\langle U \rangle)^\dagger$  (или  $\hat{I}^> = (\langle \hat{I} \rangle)^\dagger$ ) на всех уровнях, включая обычный, изотопический и генотопический уровни. Действительно, легко видеть, что нарушение указанного сопряжения подразумевает нарушение аксиом Ли, приводящее к катастрофическим несогласованностям, отмеченным в Разделе 1.7.

Для понимания обратимого или необратимого характера вышеприведенных структур, давайте здесь предположим в уравнениях (2.55), что: произведение  $>$  воспроизводит движение вперед во времени, а произведение  $<$  воспроизводит движение назад во времени;  $H = p^2/2m + V(r)$  воспроизводит полную энергию; и  $w = t$  воспроизводит время. Напомним, что все известные потенциалы инвариантны относительно обращения времени, включая электрический, магнитный, гравитационный и другие потенциалы. Соответственно, все известные гамильтонианы также инвариантны относительно обращения времени,  $H(t) \equiv H(-t)$ . В заключение отметим, что на этом простом операторном уровне, инвариантность относительно обращения времени требует не только изменения направления времени, но также операции эрмитового сопряжения.

Тогда очевидно, что обычная реализация аксиом Ли (2.49) действительно инвариантна относительно обращения времени. В качестве иллюстрации предположим, что  $A$  воспроизводит импульс  $p = m \times v = m \times dr/dt$ , который, очевидно, меняет знак при обращении времени,  $p(-t) = -p$ . Тогда очевидно, что уравнения Гейзенберга (2.50) инвариантны относительно обращения времени, то есть

$$\begin{aligned} i^\dagger \times dp(-t)/d(-t) &= p(-t) \times H - H \times p(-t) = \\ &= -i \times dp/dt = -(p \times H - H \times p). \end{aligned} \quad (2.58)$$

Также очевидно, что когда  $\hat{T}$  не зависит от времени, изотопическая реализация аксиом Ли является точно обратимой при реализации  $\hat{w} = \hat{t} = \hat{t} \times \hat{I}_t$ , опять-таки потому, что все уравнения остаются инвариантными

относительно обращения времени  $t \rightarrow -t$ , как иллюстрируется случаем с импульсом

$$\begin{aligned} i^\dagger \times dp^\dagger(-t)/d(-t) &= \\ &= p^\dagger(-t) \times \hat{T}^\dagger \times H^\dagger - H^\dagger \times \hat{T}^\dagger \times p^\dagger(-t) = \\ &= -i \times dp/dt = -(p \times \hat{T} \times H - H \times \hat{T} \times p). \end{aligned} \quad (2.59)$$

Следует заметить, что принятие изотопического элемента  $\hat{T}$  явно зависящего от времени и не инвариантного относительно отражения времени,  $\hat{T} = \hat{T}(t, \dots) \neq \hat{T}(-t, \dots)$ , делает теорию необратимой, но только для замкнуто-консервативного случая, так как гамильтониан сохраняется независимо от характеристик  $\hat{T}$ , то есть,  $i \times dH/dt = H \times \hat{T} \times H - H \times \hat{T} \times H \equiv 0$ . Эта изотеория Ли-Сангилли, следовательно, рекомендуема для замкнуто-изолированных систем с внутренней энтропией, например, для описания структуры звезд, изолированных от остальной вселенной [2b].

Наконец очевидно, что все предыдущие инварианты относительно обращения времени теряются на расширенном уровне генотопий. Действительно, для того же импульса, из (2.56) мы имеем

$$\begin{aligned} i^\dagger \times dp^\dagger(-t)/d(-t) &= \\ &= p^\dagger(-t) \times P^\dagger \times H^\dagger - H^\dagger \times Q^\dagger \times p^\dagger(-t) = \\ &= -i \times dp/dt = -(p \times Q \times H - H \times P \times p), \end{aligned} \quad (2.60)$$

а именно, генотопии теорий Ли необратимы, так как операция обращения времени меняет местами различные операторы  $P$  и  $Q$ , что приводит к различию уравнений для движения вперед во времени и назад во времени.

Заметим, что указанная выше необратимость имеет место при отсутствии сохранения энергии,  $i \times dH/dt = H \times P \times H - H \times Q \times H \neq 0$ , что обязательно для всех открытых, неконсервативных систем, таких как химические реакции.

Приведенные выше результаты сигнализируют о достижении главной цели этого раздела — единственно известной математики, которая является структурно необратимой, то есть необратимой для всех бесконечно возможных обратимых потенциалов и гамильтонианов. Таким образом, мы достигли математики, обладающей реальными возможностями для



количественных научных исследований необратимых химических процессов, которые будут изучены позже.

Очевидно, что для достижения согласованности, вся теория Ли должна быть поднята в дуальную генотопическую форму, без каких-либо известных исключений. В дальнейшем мы дадим элементарный обзор результирующей геноматематики.

### 2.3.3 Геноединицы и генопроизведения

Фундаментальными элементами геноматематики являются:

1) Предположение двух различных, обобщенных, несингулярных и неэрмитовых единиц: геноединицы  $\hat{I}^> = 1/\hat{Q}$  для движения вперед во времени, и  $\hat{I}^<$  для движения назад во времени, как в (2.54);

2) Предположение двух соответствующих, упорядоченных, обобщенных произведений: генопроизведения  $A > B = A \times Q \times B$ , где  $Q$  – фиксирован, которое должно использоваться для всех движений вперед во времени, и генопроизведения  $A < B = A > P > B$ , которое должно использоваться для всех движений назад во времени, относительно которых  $\hat{I}^>$  и  $\hat{I}^<$  являются левыми и правыми единицами, соответственно, также согласно (2.54); и

3) Предположение свойства  $\hat{I}^> = P^{-1} = (\hat{I}^<)^{\dagger} = (Q^{-1})^{\dagger}$ .

Заметим, что последнее предположение является необходимым для избежания катастрофических несогласованностей, описанных в Разделе 1.7.

Теперь несколько замечаний относительно геноединиц. Напомним из Раздела 2.2, что изоединицы являются действительными, положительно определенными, диагональными матрицами типа  $\hat{I} = \text{Diag.}(n_1^2, n_2^2, n_3^2, n_4^2)$ , где  $n_1^2, n_2^2, n_3^2$  характеризует форму частиц как сфероидальных эллипсоидов, и  $n_4^2$  характеризует плотность рассматриваемых частиц.

Реализация геноединиц  $\hat{I}^>$  и  $\hat{I}^<$ , используемых в приложениях, дается действительными, но недиагональными и несимметричными матрицами, то есть имеющими те же члены  $n_1^2, n_2^2, n_3^2, n_4^2$  что и  $\hat{I}$ , плюс по крайней мере одна дополнительная функция  $F(t, r, p, \psi, \dots)$  вне диагонали. Как мы увидим в следующих главах, последняя недиагональная функция идеально подходит для воспроизведения внешних непотенциальных сил в аналитических уравнениях. Воспроизведение необратимости гарантируется тогда несимметричной природой геноединиц, в то время как инвариантная природа воспроизведения обеспечивается его осуществлением

через единицу теории.

Сделаем несколько комментариев относительно упорядочения произведения слева или справа. Как хорошо известно, произведения двух величин в квантовой механике и химии в общем делаются без какого-либо рассмотрения их порядка. Это происходит из-за того факта, что операция " $2 > 3$ " (а именно, 2 умножается на 3 слева) приводит к точно тому же результату, что и операция " $2 < 3$ " (а именно, 3 умножается на 2 справа).

Отсутствие упорядочения умножений опять-таки необходимо для изоматематики и ее приложений, так как изопроизведения двух величин справа и слева приводят к тому же результату.

При переходе к геноматематике, ситуация становится другой, потому что два различных умножения двух величин, таких как " $2 > 3$ " и " $2 < 3$ ", приводит к различным результатам. Как следствие, согласованное обращение к генотеории требует предположения одного из двух порядков умножения, направо или налево, то есть сведения умножения к одному из двух видов, что и предполагается в дальнейшем.

Как мы увидим, упорядочение умножения приводит к фундаментальным результатам для воспроизведения необратимости, потому что, как отмечено ранее, упорядоченное произведение  $>$  принимается для воспроизведения движения вперед во времени, и сопряженное к нему  $<$  принимается для воспроизведения движения назад во времени.

Следовательно, мы можем сказать, что невозможность для квантовой механики и химии воспроизведения необратимости может быть объяснено тождеством их произведений слева и справа.

### 2.3.4 Геночисла и генополя

Пусть  $\mathbb{F} = \mathbb{F}(a, +, \times)$  это обычное поле действительных  $\mathbb{R}$ , комплексных  $\mathbb{C}$  или кватернионных  $\mathbb{Q}$  чисел  $a$  с аддитивной единицей  $0$ , мультипликативной единицей  $I = 1$ , суммой  $a + b$  и произведением  $a \times b$ . Генополя, действующие направо  $\mathbb{F}^> = \mathbb{F}^>(a^>, +^>, \times^>)$ , впервые введенные Сантилли [1b] в 1993 г., являются кольцами с элементами  $a^> = a \times I^>$  называемыми геночислами, где  $a$  это элемент  $\mathbb{F}$ , и  $I^> = P^{-1}$  это хорошо определенная, всюду обратимая и неэрмитова величина, в общем не входящая в  $\mathbb{F}$ , снабженные всеми операциями упорядоченными направо, то есть упорядоченная геносумма направо, упорядоченное генопроизведе-

ние направо и т.д.

$$a^> +^> b^> = (a + b) \times I^>, \quad (2.61a)$$

$$a^> \times^> b^> = a^> > b^> = a^> \times \hat{Q} \times b^> = (a \times b) \times I^>, \quad (2.61b)$$

геноаддитивной единицей действующей направо  $0^> = 0$  и мультипликативной геноединицей действующей направо  $I^>$ .

Генополя, действующие налево  $\langle \mathbb{F} = \langle \mathbb{F}(\langle a, \langle +, \langle \times) [1b]$ , являются кольцами с геночислами  $\langle a = \langle I \times a$ , всеми операциями упорядоченными налево, включая геносумму  $\langle a \langle + \langle b = \langle I \times (a + b)$ , генопроизведение  $\langle a \langle \times \langle b = \langle a \times Q \times \langle b = \langle I \times (a \times b)$  и т.д., с аддитивной геноединицей, действующей налево  $\langle 0 = 0$ , и мультипликативной геноединицей, действующей налево  $\langle I = Q^{-1}$ .

Бигенополе является структурой  $\{\langle \mathbb{F}, \mathbb{F}^>\}$  с соответствующими биэлементами, биединицами, биооперациями и т.д., действующими налево и направо при условии  $\hat{I}^> = (\langle I)^\dagger$ .

Легко доказать, что каждое отдельное генополе, действующее направо,  $\mathbb{F}^>$ , или налево,  $\langle \mathbb{F}$ , изоморфно оригинальному полю  $\mathbb{F}$ . Поэтому, лифтинги  $\mathbb{F} \rightarrow \mathbb{F}^>$ ,  $\mathbb{F} \rightarrow \langle \mathbb{F}$  и  $\{\mathbb{F}, \mathbb{F}\} \rightarrow \{\langle \mathbb{F}, \mathbb{F}^>\}$  сохраняют аксиомы.

Напомним, что в определении полей (и изополей) нет нужды в упорядочении умножения, так как умножения справа и слева совпадают, то есть  $a > b = a < b$  (даже для некоммутативных изополей, таких как кватернионные и изокватернионные).

Для случая генополей, разделение упорядоченных умножений направо и налево является необходимым, так как, даже хотя геноумножения остаются коммутативными, их числовые значения различны, то есть

$$a > b = b > a \text{ и } a < b = b < a, \quad (2.62a)$$

$$a > b = a \times P \times b \neq a < b = a \times Q \times b. \quad (2.62b)$$

Важное открытие, сделанное в работе [1b], заключается в том, что аксиомы поля сохраняются, если все операции упорядочены налево и, отдельно, направо. Строгое и инвариантное воспроизведение необратимости через геноматематику позволяет в виду последнего свойства, которое позволяет ввести необратимость для большинства основных величин, таких как единицы и произведения. Все последующие математические структуры построенные на числах будут автоматически сохранять ту же аксиоматизацию необратимости.

### 2.3.5 Генопространства и генометрики

Пусть  $S = S(r, g, \mathbb{R})$  это обычное  $n$ -мерное метрическое или псевдометрическое пространство с локальной картой  $r = \{r^k\}, k = 1, 2, \dots, n$ , нигде несингулярной, действительной и симметричной метрикой  $g = g(r, \dots)$  и инвариантным  $r^2 = (r^t \times g \times r) \times I$  (где  $t$  обозначает перенос) определенным над обычным полем действительных чисел  $\mathbb{R} = \mathbb{R}(a, +, \times)$ .

$n$ -Мерные генопространства действующие направо  $S^> = S^>(r^>, G^>, \mathbb{R}^>)$ , впервые введенные Сантили в работах [1с, 2с, 1е], являются векторными пространствами с локальными *генокоординатами действующими направо*  $r^> = r \times I^>$ , генометрикой  $G^> = Q \times g \times I^> = (g^>) \times I^>$ ,  $g^> = Q \times g$  и *геноинвариантными направо*

$$(r^>)^{2>} = (r^>)^t > (G^>) > r^> = [r^t \times (g^>) \times r] \times I^> \in \mathbb{R}^>, \quad (2.63)$$

которые, для согласованности, должны быть геноскалярами, действующими направо, со структурой  $n \times I^>$  и элементами генополей  $\mathbb{R}^>$ . Заметим также, что генопространства и лежащие в их основе генополя должны иметь, для согласованности, ту же геноединицу, действующую направо  $I^> = Q^{-1}$ , где  $Q$  дается всюду обратимой, действительной, несимметричной  $n \times n$  матрицей.

$n$ -мерные *генопространства, действующие налево*,  $\langle S = \langle S(\langle r, \langle +, \langle \mathbb{F})$  [*loc. cit.*] являются генопространствами над генополями со всеми операциями упорядоченными налево и общей  $n \times n$ -мерной геноединицей, действующей налево  $\langle I = P^{-1}$ , которая в общем отличается от действующей направо, но удовлетворяющей условию  $P = Q^\dagger$ .

*Бигенопространства* являются структурами  $\{\langle S, S^>\}$  с бигенокоординатами и т.д. определенными над бигенополем  $\{\langle \mathbb{R}, \mathbb{R}^>\}$  при условии  $I^> = (\langle I)^\dagger$ .

Легко доказать, что генопространства, действующие направо  $S^>$  и, независимо, действующие налево  $\langle S$  (поэтому бигенопространства  $\{\langle S, S^>\}$ ) локально изоморфны оригинальным пространствам  $S(\{S, S\})$ .

Действительно, оригинальная метрика  $g$  поднимается в форму  $g^> \rightarrow Q \times g$ , но единица поднимается *инверсным* способом  $I \rightarrow I^> = P^{-1}$ , поэтому сохраняются оригинальные аксиомы (так как  $(\text{длина})^2 \times (\text{unit})^2$  это инвариант), то же самое происходит и для других случаев.

Лучшим способом увидеть локальный изоморфизм между обычными и генопространствами является замечание, что последние являются результатом следующей новой степени свободы обычных пространств

(выраженное здесь для случая скалярной комплексной функции  $Q$ )

$$\begin{aligned} r^t \times g \times r \times I &\equiv r^t \times g \times r \times Q \times Q^{-1} \equiv (r^t \times g^> \times r) \times I^> \equiv \\ &\equiv P^{-1} \times P \times (r^t \times g \times r \times I) \equiv \langle I \times (r \times \langle g \times r^t). \end{aligned} \quad (2.64)$$

Это подтверждает сохранение основного инварианта (2.11) также и для генопространств.

*Геногеометрии* [1d, 1e] являются геометриями генопространств. Мы отмечали в Разделе 2.2, что изотопии обычных геометрий нетривиальны, так как они позволяют унификацию различных геометрий с той же сигнатурой, поэтому унифицируют евклидову и риманову геометрии.

Генотопии обычных геометрий имеют даже более глубокие следствия. Действительно, *геногеометрии допускают несимметричные метрики способом совместимым с оригинальными аксиомами*. В свою очередь, допущение несимметричных метрик впервые позволяет согласованное, геометрическое обращение к необратимости.

Рассмотрим в качестве иллюстрации евклидову геометрию. Хорошо известная неспособность характеризовать необратимость происходит из полностью обратимого характера ее основных аксиом, полностью симметричной природы ее *диагональной* метрики  $\delta = \text{Diag.}(1, 1, \dots, 1)$  и логически вытекающего применения той же метрики для обоих движений вперед и назад во времени.

Рассмотрим теперь *геноевклидову геометрию*. По концепции и структуре, она допускает *две* различные метрики, генометрику  $\hat{\delta}^> = Q \times \delta$  для движения вперед во времени и сопряженную генометрику  $\langle \hat{\delta} = \delta \times P$  для движения во времени назад. Так как  $\hat{\delta}^> \neq \langle \hat{\delta}$ , возможность последовательно обеспечить геноевклидовой геометрией характеристику необратимости очевидна.

Как интересный комментарий для занимающихся геометрией, генотопии опровергли уверенность, сохранявшуюся в течении 20-го века, что аксиомы римановой геометрии допускают только симметричные метрики. Действительно, *генориманова геометрия* [1e] допускает точно те же аксиомы что и обычная геометрия, хотя метрика не симметрична. Вышеуказанная ложная уверенность происходила из необязательного предположения, что единица геометрии должна быть тривиальной симметричной единицей  $I = \text{Diag.}(1, 1, \dots, 1)$ . Если те же аксиомы реализованы, вместо обычной, через обобщенную единицу, которая несимметрична, метрика, допускаемая аксиомами, должна быть также несимметричной.

Читатель должен иметь в виду, что достижение несимметричной метрики при сохранении римановых аксиом, имеет истинно фундаментальный характер для последовательного рассмотрения необратимости в гравитации.

### 2.3.6 Генодифференциальное исчисление

Генодифференциальное исчисление направо на генопространстве  $S^{\triangleright}(r^{\triangleright}, \mathbb{R}^{\triangleright})$  над  $\mathbb{R}^{\triangleright}$ , впервые введенное Сантилли в [1e], является отображением обычного дифференциального исчисления, характеризуемого выражениями (где мы игнорировали для упрощения обозначений умножение направо  $I^{\triangleright}$ ),

$$dr^k \rightarrow d^{\triangleright} r^k = (I^{\triangleright})_i^k \times dr^i, \quad (2.65a)$$

$$dr_k \rightarrow d^{\triangleright} r_k = P_k^i \times dr_i, \quad (2.65b)$$

$$\partial/\partial r^k \rightarrow \partial^{\triangleright}/\partial^{\triangleright} r^k = P_k^i \times \partial/\partial r^i, \quad (2.65c)$$

$$\partial/\partial r_k \rightarrow \partial^{\triangleright}/\partial^{\triangleright} r_k = (I^{\triangleright})_i^k \times \partial/\partial r_i, \quad (2.65d)$$

где все операции упорядочены направо, и главные свойства

$$\partial^{\triangleright} r^i \hat{\triangleright} \partial^{\triangleright} r^j = \delta_j^i \times \hat{I}^{\triangleright}, \quad \partial^{\triangleright} r_i \hat{\triangleright} \partial^{\triangleright} r_j = \delta_i^j \times \hat{I}^{\triangleright}, \quad etc. \quad (2.66)$$

Генодифференциальное исчисление налево является сопряженным к предыдущему с геноединицей, действующей налево,  $\langle I \neq I^{\triangleright}$ . Бигенодифференциальное исчисление действует на  $\{\langle S, S^{\triangleright} \rangle\}$  над  $\{\langle \mathbb{R}, \mathbb{R}^{\triangleright} \rangle\}$  при дополнительном условии  $I^{\triangleright} = (\langle I \rangle)^{\dagger}$ .

Легко видеть, что геноисчисление направо и, независимое от него, налево сохраняют все оригинальные свойства, такие как коммутативность производных второго порядка и т.д.

### 2.3.7 Геногильбертовы пространства

Пусть  $\mathcal{H}$  это обычное гильбертово пространство с состояниями  $|\psi\rangle, |\phi\rangle, \dots$ , внутренним произведением  $\langle \phi | \times |\psi\rangle$  над полем  $\mathbb{C} = \mathbb{C}(c, +, \times)$  комплексных чисел и нормировкой  $\langle \psi | \times |\psi\rangle = 1$ .

Геногильбертово пространство, действующее направо,  $\mathcal{H}^{\triangleright}$  [1e] есть правое генолинейное пространство с геносостояниями  $|\psi^{\triangleright}\rangle, |\phi^{\triangleright}\rangle, \dots$ , геновнутренним произведением и генонормировкой направо

$$\langle \phi^{\triangleright} | \times |\psi^{\triangleright}\rangle = \langle \phi^{\triangleright} | \times Q \times |\psi^{\triangleright}\rangle \times I^{\triangleright} \in \mathbb{C}^{\triangleright}(c^{\triangleright}, +^{\triangleright}, \times^{\triangleright}), \quad (2.67a)$$

$$\langle \phi^{\rangle} | \rangle | \psi^{\rangle} \rangle = \hat{I}^{\rangle}, \quad (2.67b)$$

определенное над генокомплексным полем, действующим направо,  $\mathbb{C}^{\rangle} (c^{\rangle}, +^{\rangle}, \times^{\rangle})$  с общей геноединицей  $\hat{I}^{\rangle} = Q^{-1}$ .

Геногильбертово пространство, действующее налево,  $\langle \mathcal{H}$  [*loc. cit.*] есть левое сопряженное  $\mathcal{H}^{\rangle}$  с левой геноединицей  $\langle I = P^{-1}$ , в общем отличной от  $I^{\rangle}$ . Бигеногильбертово пространство есть биструктура  $\{\langle \mathcal{H}, \mathcal{H}^{\rangle}\}$  над биполем  $\{\langle \mathbb{C}, \mathbb{C}^{\rangle}\}$  при условии сопряжения  $I^{\rangle} = (\langle I)^{\dagger}$ .

Опять, правое, левое и би-геногильбертово пространства локально изоморфны оригинальному пространству  $\mathcal{H}$ . Действительно, оригинальное гильбертово произведение поднято следующим образом:  $\langle | \times | \rangle \rightarrow \langle | \times P \times | \rangle$ , но лежащая в основе единица поднята *инверсным* образом,  $1 \rightarrow P^{-1}$ , поэтому оригинальная аксиоматическая структура остается неизменной.

Генооператорная теория [2c] является следствием следующей степени свободы обычных гильбертовых пространств (где  $P$  и  $Q$ , для простоты, принимаются независимыми от переменной интегрирования)

$$\begin{aligned} \langle \phi | \times | \psi \rangle &\equiv \langle \psi | \times | \psi \rangle \times P \times P^{-1} \equiv \\ &\equiv \langle \phi | \times P \times | \psi \rangle \times P^{-1} = \langle \phi | \langle | \psi \rangle \times \langle I \equiv \\ &\equiv \langle \phi | \times | \psi \rangle \times Q \times Q^{-1} \equiv \langle \phi | \rangle | \psi \rangle \times I^{\rangle}. \end{aligned} \quad (2.68)$$

Очевидно, что вышеуказанное свойство является аналогом новой инвариантности (2.64) для гильбертова пространства. Следует заметить, что новые инвариантности (2.64) и (2.68) были не замечены со времен Римана и Гильберта, соответственно, так как они требуют предварительного открытия *новых чисел*, с произвольной, в общем неэрмитовой единицей.

Заметим, что геноматематика допускает *второй тип конкретной реализации скрытых переменных и пополнения* квантовой механики и химии в согласии с историческим учением Эйнштейна, Подольского и Розена, кроме пополнения, допускаемого изотопиями. Другие реализации скрытых переменных и завершения предложены гиперматематикой и изодуальной математикой в следующих разделах [1g].

### 2.3.8 Генолинейность, генолокальность и геноунитарность

Генолинейные операторы, действующие направо, есть операторы  $A$ ,

$B, \dots$ , генообертывающей алгебры, действующей направо,  $\xi^>$ , удовлетворяющие условию генолинейности, то есть линейности на  $\mathcal{H}^>$  над  $\mathbb{C}^>$ ; подобное же имеет место и для левого случая.

Генолокальность определяется подобно изолакальности и воспроизводятся топологические свойства локальности всюду кроме геноединицы.

Схожим образом, мы имеем понятия геноунитарных операторов, действующих направо и налево,

$$U^> > U^{>\dagger} = U^{>\dagger} > U = I^>, \quad (2.69a)$$

$$\langle U < \langle U^\dagger = \langle U^\dagger < \langle U = \langle I. \quad (2.69b)$$

Важным свойством является то, что операторы  $X$ , которые изначально эрмитовы на  $\mathcal{H}$  над  $\mathbb{C}$ , остаются эрмитовыми на  $\mathcal{H}^>$  над  $\mathbb{C}^>$ , или на  $\langle \mathcal{H}$  над  $\langle \mathbb{C}$ . Поэтому генотопии сохраняют оригинальные наблюдаемые. Это свойство имеет место благодаря тому факту, что условие геноэрмитовости на  $\mathcal{H}^>$  имеет вид  $X^{\dagger >} = Q \times Q^{-1} \times X^\dagger \times Q \times Q^{-1} = X^\dagger$ , как в этом легко убедиться.

Вышеуказанное математическое свойство имеет фундаментальный смысл в химии, так как этим впервые допускается эрмитова наблюдаемость физических величин при отсутствии сохранения. Действительно, все другие методы для неконсервативных систем (таких как диссипативные ядерные системы) основаны на добавлении мнимого потенциала к гамильтониану, который при этом теряет свою эрмитову наблюдаемость.

Другим важным свойством является то, что при достаточных топологических условиях, любой обычно неунитарный оператор  $U$  на  $\mathcal{H}$  над  $\mathbb{C}$ ,  $U \times U^\dagger \neq I$ , всегда может быть тождественно записан в геноунитарной форме, действующим направо или налево, через простое правило [11f]

$$U = (U^>) \times Q^{1/2} \quad \text{or} \quad P^{1/2} \times (\langle U). \quad (2.70)$$

Читатель должен иметь в виду, что вся теория линейных операторов на гильбертовом пространстве должна быть поднята в генотопическую форму для согласованности. Например, легко может быть доказано, что обычные операции, такие как  $\text{Tr}X$ ,  $\text{Det}X$  и т.д. неприменимы в геноматематике и должны быть приведены к соответствующим геноформам. То же самое происходит для всех обычных специальных функций и преобразований. К сожалению, за подробностями мы должны отослать читателя к монографии [2c].



### 2.3.9 Генотеория Ли-Сантилли

Теперь мы вполне подготовлены для знакомства с центральной математической структурой генохимии, *генотопиями теории Ли*, впервые введенными Сантилли в работе [1a] (см. также последующие работы [1e, 2], известные сегодня как *генотеория Ли-Сантилли*) [4].

Рассмотрим обычную теорию Ли с упорядоченным  $N$ -мерным базисом эрмитовых операторов  $X = \{X_k\}$ , параметрами  $w = \{w_k\}$ , универсальной обертывающей ассоциативной алгеброй  $\xi = \xi(L)$ , алгеброй Ли  $L \approx [\xi(L)]^-$ , соответствующими (связными) преобразованиями Ли группы  $G$  на метрическом пространстве  $S(r, \delta, \mathbb{F})$  с локальными координатами  $r = \{r^k\}$  над полем  $\mathbb{F}$ .

*Генотеория Ли-Сантилли* определена здесь как пошаговое бимодулярное полнятие обычной теории Ли на бигенопространствах над бигенополями, и включает:

1) *Универсальную генообертывающую алгебру, действующую направо*,  $\xi^>(L)$   $N$ -мерной алгебры Ли  $L$  с упорядоченным базисом  $X^> \equiv X = \{X_k\}, k = 1, 2, \dots, N$ , геноединицей  $\hat{I}^> = Q^{-1}$ , геноассоциативным произведением  $X_i > X_j = X_i \times Q \times X_j$  и бесконечномерным генобазисом характеризуемым *генотопической правой теоремой Пуанкаре-Биркгофа-Витта*,

$$\begin{aligned} \hat{I}^> &= Q^{-1}, \quad X_k, \quad X_i > X_j \quad (i \leq j), \\ X_i &> X_j > X_k \quad (i \leq j \leq k), \dots, \end{aligned} \quad (2.71)$$

и геноэкспоненцированием (2.57a); *универсальную геноассоциативную алгебру, действующую налево*,  $\xi^<(L)$  с геноединицей  $\hat{I}^< = P^{-1}$  и генопроизведением  $X_i < X_j = X_i \times P \times X_j$ , с бесконечномерным генобазисом, характеризуемым *генотопической левой теоремой Пуанкаре-Биркгофа-Витта*,

$$\begin{aligned} \hat{I}^< &= P^{-1}, \quad X_k, \quad X_i < X_j \quad (i \leq j), \\ X_i &< X_j < X_k \quad (i \leq j \leq k), \dots, \end{aligned} \quad (2.72)$$

и геноэкспоненцированием слева (2.57b); *бигенообертывающая алгебра* является би-структурой  $\{\xi^<, \xi^>\}$ , определенной на соответствующих бигенопространствах и бигенополях при условии  $\hat{I}^> = (\hat{I}^<)^{\dagger}$ .

2) *Геноалгебра Ли-Сантилли* есть бигенолинейная бигеноалгебра определенная на  $\{\xi^<, \xi^>\}$  над  $\{\mathbb{F}, \mathbb{F}\}$  с Ли-допустимым произведением

$$\begin{aligned} (X_i, X_j) &= X_i < X_j - X_j > X_i = \\ &= X_i \times P \times X_j - X_j \times Q \times X_i. \end{aligned} \quad (2.73)$$

3) Группа (связная) генопреобразований Ли-Сантиллы есть би-набор  $\{\langle G, G \rangle\}$  бигенопреобразований на  $\{\langle S, S \rangle\}$  над  $\{\langle \mathbb{F}, \mathbb{F} \rangle\}$  с геноединицами  $\langle \hat{I} = (\hat{I})^\dagger$

$$\begin{aligned} r^{>} &= (U^{>}) > r^{>} = (U^{>}) \times Q > r \times I^{>} = V \times r \times \hat{I}^{>}, \\ U^{>} &= V \times \hat{I}^{>}, \end{aligned} \quad (2.74a)$$

$$\begin{aligned} \langle r' &= \langle r < \langle U \rangle = \langle I \times r \times P \times \langle U \rangle = \langle I \hat{\times} r \times W, \\ \langle U &= \langle \hat{I} \times W, \end{aligned} \quad (2.74b)$$

удовлетворяющие следующим условиям: генодифференцируемость отображений  $G^{>} > S^{>} \rightarrow S^{>}$  и  $\langle S \leftarrow \langle S < \langle G$ , инвариантность геноединиц и генолинейности, с реализациями  $U^{>} = \exp_{>}(i \times w \times X)$  и  $\langle U = \exp_{<}(-i \times w \times X)$ , генозаконами

$$\begin{aligned} U^{>}(w^{>}) &> U^{>}(w^{>'}) = U^{>}(w^{>} + w^{>'}), \\ U^{>}(w^{>}) &> U^{>}(-w^{>}) = U^{>}(0^{>}) = I^{>}, \end{aligned} \quad (2.75)$$

и Ли-допустимой алгеброй (2.56) в окрестности геноединицы  $\{\langle \hat{I}, \hat{I} \rangle\}$ .

Напомним из Раздела 2.2, что на абстрактном уровне, обычное произведение Ли  $[A, B] = A \times B - B \times A$  и произведение Ли-Сантиллы  $[A, B] = A \hat{\times} B - B \hat{\times} A = A \times \hat{T} \times B - B \times \hat{T} \times A$  совпадают, очевидно в виду того факта, что оба произведения полностью антисимметричны и удовлетворяют тождеству Якоби. Следует заметить, что, неожиданно, Ли-допустимое произведение  $(A, B) = A < B - B > A = A \times P \times B - B \times Q \times A$  удовлетворяет аксиомам Ли когда определено на  $\{\langle \xi, \xi \rangle\}$  над  $\{\langle \mathbb{F}, \mathbb{F} \rangle\}$ , несмотря на явное отсутствие антисимметричности.

Действительно, левая генообертывающая алгебра  $\langle \xi$  и правая  $\xi >$  изоморфны оригинальной обертывающей алгебре  $\xi$ , поэтому подразумевается  $\langle I(A, B) = (A, B)I^{>}$ , то есть значение генопроизведения  $A < B = A \times P \times B$ , вычисленное с использованием геноединицы  $\langle I = P^{-1}$ , равно значению генопроизведения  $A > B = A \times Q \times B$ , измеренному в соответствии с геноединицей  $I^{>} = Q^{-1}$ .

Одно из наиболее важных математических свойств этого раздела, которое является очевидным следствием приведенного анализа, это совпадение на абстрактном уровне геногрупп Ли-Сантиллы с оригинальными группами преобразований Ли.

Заметим, что генераторы оригинальной алгебры Ли не поднимаются генотопиями, очевидно потому, что они воспроизводят обычные физические величины, такие как энергия, импульс, момент импульса и т.д.

Поднимаются только операции, определенные на них. Заметим также, что когда сопряжение  $P = Q^\dagger$  нарушается, аксиомы Ли теряются. Заметим также, что генотеория весьма нелинейна, так как элементы  $P$  и  $Q$  имеют произвольную функциональную зависимость, включающую зависимость от волновых функций. Однако, геноматематика реконструирует линейность в генопространствах над генополями. То же самое имеет место для нелокальности, неканоничности, неунитарности и необратимости [1f]. Действительно, на генопространствах над генополями, генотеории полностью линейны, локальны, канонические или унитарные и обратимые. Отклонения от этих аксиоматических свойств случаются только в их проекции над обычными пространствами и полями.

Само собой разумеется, мы можем представить в этом разделе только необходимые элементы геноматематики, с пониманием того, что детальные исследования гораздо более обширны.

## 2.4 Гиперматематика

Как отмечено в Разделе 2.2, *изоматематика* только частный случай расширенной *геноматематики* предыдущего раздела. В свою очередь, геноматематика является частным случаем еще более общей многозначной *гиперматематики* [1e, 2e]. Как мы увидим, изоматематика достаточна для работы с *обратимыми системами* с потенциальными и непотенциальными внутренними эффектами, такими как молекулярные структуры; геноматематика необходима для воспроизведения *необратимых процессов* обусловленных потенциальными и непотенциальными силами, таких как химические реакции; и гиперматематика была разработана для воспроизведения *биологических систем*.

Фундаментальными понятиями гиперматематики являются понятия *правой и левой гиперединиц*, которые даются ограниченным и упорядоченным набором нигде несингулярных неэрмитовых геноединиц,

$$\{\hat{I}^>\} = \{\hat{I}_1^>, \hat{I}_2^>, \dots\} = \{1/Q_1, 1/Q_2, \dots\}, \quad (2.76a)$$

$$\{\hat{I}^<\} = \{\hat{I}_1^<, \hat{I}_2^<, \dots\} = \{1/P_1, 1/P_2, \dots\}, \quad (2.76b)$$

с соответствующими упорядоченными *правыми и левыми гиперумножениями*,

$$A\{>\}B = \{A \times Q_1 \times B, A \times Q_2 \times B, \dots\}, \quad (2.77a)$$

$$A\{\langle\rangle B = \{A \times P_1 \times B, A \times P_2 \times B, \dots\}, \quad (2.77b)$$

для которых, гиперединицы  $\{\hat{I}^{\rangle}\}$  и  $\{\langle\hat{I}\}$  являются корректными левыми и правыми единицами.

Вышеупомянутые гиперединицы и гиперпроизведения подразумевают тогда существование соответствующей *гиперматематики*, которая характеризуется *гиперчислами и гиперполями, гиперпространствами и гипергеометриями, гипералгебрами и гипергруппами* и т.д.

В качестве иллюстрации, напомним, что умножения "2 < 3" (3 умножается на 2 справа) и "2 > 3" (2 умножается на 3 слева) дают значение 6 только в обычной математике. Для случая изоматематики, умножения "2 < 3" и "2 > 3" продолжают давать одинаковый результат, но значение теперь произвольно и зависит от принятой единицы, например "2 < 3 – "2 > 3 – 275.65.

Для случая геноматематики, умножения "2 < 3" и "2 > 3" в общем случае имеют различные результаты, каждое в общем произвольно и зависит от принятой единицы для каждого умножения, например "2 < 3 – 31.37 ≠ "2 > 3 – 27.81.

Для случая гиперматематики, два умножения "2{<}3" и "2{>}3" не только приводят к различным результатам и каждое значение произвольно, но также *каждое умножение производит набор значений*, например "2 < 3 – {5.23, 72.45, 0.67, ...} ≠ 2 > 3 – {1.24, 45.43, 137.42, ...}.

К сожалению, мы не можем очертить геноматематику во избежание большого объема этой монографии. Поэтому, за подробностями мы отсылаем заинтересованного читателя к монографии [2e].

Важным свойством является, как это было в случае изоматематики и геноматематики, *совпадение гиперматематики с обычной математикой на абстрактном уровне*. Из этих соображений, гиперматематика по существу содержит новую многозначную реализацию обычных математических аксиом.

Следует заметить, что *гиперматематика была сконструирована для численного воспроизведения биологических процессов*. Мы упоминали в Главе 1, Рис. 1.6, что правильное воспроизведение *роста во времени морских раковин* требует дублирования трех евклидовых координат.

Необходимость гиперматематики в этом случае диктуется тем фактом, что нашими чувствами мы воспринимаем рост морских раковин как происходящий в обычном трехмерном пространстве. Единственно известное согласование *трехмерности* нашего сенсорного восприятия с

дублированием эталонных осей позволяет гиперматематикой, благодаря ее абстрактному тождеству с обычной математикой.

Более подробно, гиперевклидово пространство совпадает с обычным евклидовым пространством на абстрактном уровне. Следовательно, наше сенсорное восприятие  $3 \times 2$ -мерного гипер-воспроизведения роста морских раковин полностью трехмерно для нашего сенсорного восприятия. Другими словами, воспроизводимое пространство Рис. 1.6 *не является* шестимерным. Оно *трехмерно и многозначно*.

Мы должны также отметить, что гиперматематика вообще и гиперчисла в частности были предложены для более адекватного понимания кода ДНК, который по сей день продолжает изучаться через простейшие из возможных чисел, с единицей  $+1$ , известные еще с библейских времен. В действительности, сложность кода ДНК может приводить к результатам находящимся вне нашего понимания, и может потребовать гиперчисел, чья единица по существу представляет собой упорядоченный набор каких-либо  $10^{40}$  различных значений.

Как дальнейшую иллюстрацию того, что наука никогда не допускает "окончательной теории", мы заметим, что никоим образом, гиперматематика не является наиболее общей возможной формой математики. Действительно, последующий шаг уже определен и содержит *гиперматематику*, определенную так называемыми *слабыми операциями и тождествами* [8]. Однако, такой уровень математики выходит за рамки этой монографии.

## 2.5 Изодуальная математика

Один из наибольших научных дисбалансов 20-го века связан с *антиматерией*. Действительно, на протяжении 20-го века к материи обращались на всех уровнях исследований, начиная с ньютоновской механики до вторичного квантования, в то время как к антиматерии обращались только на уровне *вторичного квантования*. Научный дисбаланс становится очевидным если принять во внимание тот факт, что астрофизика 20-го века не могла даже обратиться, не говоря уже о том чтобы ответить, к вопросу являются ли удаленные галактики состоящими из материи или антиматерии, очевидно из-за отсутствия *классического* описания антиматерии.

Сангилли [9] изучал на протяжении десятилетий вышеуказанный на-

учный дисбаланс и впервые установил, что проблема происходит более из *отсутствия подходящей математики*, чем из недостатков физических законов. Действительно, наука 20-го века имеет только одну математику – обычную, с соответствующим известным способом квантования. Любое классическое обращение к антиматерии, после квантования, приводит к *частицам с зарядом неправильного знака*, иного чем должен быть у античастиц.

Заметим, что точно то же заключение получается из использования изо-, гено- и гипер-математик. Действительно, каждая из этих обобщенных математик имеет свой собственный способ квантования, который может производить только частицы, без античастиц.

Сантилли [*loc. cit.*] установил, что последовательное обращение к антиматерии на классическом уровне требует уже *новой математики*, которая: 1) является антиизоморфной к обычной, изо-, гено-, и гипер-математике; 2) имеет свой собственный способ квантования; и 3) операторные образы действительно соответствуют античастицам, определенным как зарядово-сопряженные к обычным частицам на гильбертовом пространстве.

Антиизоморфное отображение *обычной* математики было предложено в работе [9a] 1985 года. Оно характеризуется отображением тривиальной единицы  $+1$  в свое *отрицательное* значение,

$$I = +1 \rightarrow I^d = -1, \quad (2.78)$$

отображение, названное *изодуальным* из определенных технических соображений и обозначается верхним индексом  $d$ , и тогда реконструкция всей обычной математики сводится к допущению  $-1$ , а не  $+1$ , в качестве правильной левой и правой единицы.

В качестве примера мы приведем *изодуальные поля*  $\mathbb{F}^d(n^d, +^d, \times^d)$  [1b], которые являются кольцами чисел  $n^d = n \times I^d = -n$ , где  $n$  это обычное число, снабженные *изодуальной суммой, изодуальным произведением, изодуальной нормой* и т.д.

$$n^d +^d m^d = (n + m) \times I^d = -n - m, \quad (2.79a)$$

$$n^d \times^d m^d = n^d \times (-1) \times m^d = -n \times m, \quad (2.79b)$$

$$|n|^d = |n| \times I^d = -|n|, \quad (2.79c)$$

где  $+$ ,  $\times$  и  $|\dots|$  - обычные операции для  $\mathbb{F}(n, +, \times)$ .

Заметим, что изодуальные поля допускают отрицательно определенную норму. Тогда очевидно, что изодуальное отображение меняет знак всех величин, не только заряда, но также массы, времени, энергии и т.д., с учетом того, что эти отрицательные величины теперь соотносятся с отрицательными единицами. Например, изодуальное время действительно дается отрицательным значением времени  $t^d = t \times I^d = -t$ , но соотносится с отрицательной единицей  $I^d = -1$  сек. В результате, движение назад во времени, соотнесенное с отрицательной единицей времени, так же причинно, как движение вперед во времени, соотнесенное с положительной единицей времени. Сходный результат имеет место для отрицательных масс, соотнесенных с отрицательной единицей массы и т.д.

Изодуальная математика дается изодуальными числами и полями, изодуальными пространствами и геометриями, изодуальными алгебрами и группами, изодуальным функциональным анализом и, неизбежно, изодуальным квантованием (см. [9b]). В работе [9] было легко доказано, что изодуальная теория изоматерии дает корректное классическое описание, которое после изодуального квантования, дает правильные античастицы.

Следует также отметить, что отображение (2.78) недостаточно для конструирования анти-изоморфных образов расширенных изо-, гено- и гиперматематики, которые требуют следующего изодуального отображения

$$A = A(r, p, \psi, \dots) \rightarrow A^d = -A^\dagger(-r^\dagger, -p^\dagger, -\psi^\dagger, \dots), \quad (2.80)$$

с соответствующими изодуальными произведениями,

$$A > B = A \times Q \times B \rightarrow A >^d B = A \times (-Q^\dagger) \times B, \quad (2.81)$$

которые должны быть применяемы во всей изо-, гено- и гиперматематике.

К сожалению, мы не имеем возможности рассмотреть все изодуальные математики и должны отослать заинтересованного читателя к работе [9] или монографии [2e]. Для иллюстрации сложности и новизны результирующих теорий, мы ограничим себя только фиксированием в Рис. 2.1 появления новых понятий времени. Читатель должен иметь в виду, что существование изодуальной математики необходимо для последовательного численного воспроизведения биологических систем. Это не удивительно, так как сложность биологических систем как раз требует полноты наших научных знаний.

## НОВЫЕ ПОНЯТИЯ ВРЕМЕНИ

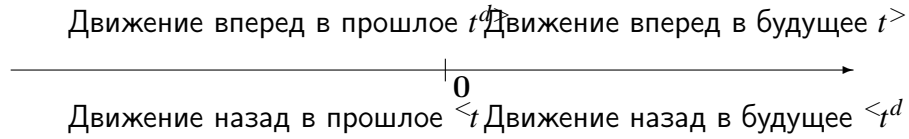


Рис. 2.1: Общий вид новых понятий времени, введенные изотопическим, генотопическим, гиперструктурным и изодуальным методами для численных расчетов биологических структур.

До недавнего времени была общая убежденность в том, что "стрела времени" Эддингтона указывает два направления: вперед во времени и назад во времени. Исследования [9] установили, что существуют четыре различных понятия времени прогрессирующе возрастающих сложности и методологических потребностей. Вышеприведенный рисунок показывает четыре характерные различные времена, которые даются движением вперед и назад в будущее и прошлое. Очевидно, что эти четыре времени требуют двух различных сопряжений, одно для отображения из будущего в прошлое и другое для отображения движения вперед в движение назад, каждое сопряжение является би-инъективным (то есть такое, что, примененное дважды, воспроизводит изначальное время). Отображение, связывающее "стрелу времени" Эддингтона (движение вперед с движением назад, или *vice versa*) является схожей

$$\text{обращение времени: } t^> = t \rightarrow <math>t^<math> = -t, \quad (2.82)$$

Отображение будущего в прошлое (или наоборот) должно быть анти-изоморфно предыдущему из различных соображений, поэтому эквивалентна изодуальному отображению [9], которое, как таковое, действует на единицу времени,

$$\text{временная изодуальность: } \hat{I}_t^> = t \rightarrow \hat{I}_t^{>d} = -\hat{I}_t^{>\dagger} = -t. \quad (2.83)$$

Так как для обычного времени единицей является  $I_t = +1$ , вышеупомянутые два отображения являются тождественными, то есть  $\hat{t}^> = t \times I^> = t, I^> = 1$ , и  $I^{>d}$  совпадают с  $-t$ . Однако, вышеуказанное тривиальное



тождество исчезает когда единица времени не +1 сек. Легко видеть, что обычное время составляет простейшую мыслимую реализацию понятия времени, как *воспринимаемое нашими чувствами* и, раз так, это необязательно соответствует существованию реальности. Изотопии, генотопии, гиперструктуры и их изодуальности позволяют *цепочку структурных обобщений, указанного выше простейшего понятия времени путем, совместимым с нашим восприятием*, которые достигаются через основной инвариант всех геометрий,

$$(\text{время})^2 \times (\text{единица})^2 = \text{инвариант.} \quad (2.84)$$

Первое возможное обобщение времени, встречающееся с вышеуказанными требованиями, обеспечивается изотопиями и их изодуальностями, приводящими к следующим четырем различным новым временам:

1) *Изовремя*, воспроизводящее движение вперед в будущее, с обобщенной единицей строго трактуемой через упорядоченные умножения направо и записываемое как  $\hat{t}^> = t \times \hat{I}_t^>$ , где  $\hat{I}_t^> = \hat{I}_t^>(t, r, p, \dots) = 1/\hat{T}_t > 0$  обозначает *изоединицу вперед во времени*, то есть новое численное значение единицы времени (например,  $\hat{I}_t^> = 187$  сек., или, более правильно, функция локальных переменных), принимаемое положительно определенным;

2) *Инверсное изовремя*, воспроизводящее движение назад в прошлое, с той же самой обобщенной единицей для движения вперед, но применяемое строго для упорядоченных произведений налево и записываемое  $\langle \hat{t} = \langle \hat{I}_t \times (-t), \langle \hat{I}_t = \hat{I}_t^>$ ;

3) *Изодуальное изовремя*, воспроизводящее движение вперед в прошлое, применимое строго упорядоченными произведениями направо, которое записывается  $\hat{t}^{>d} = -\hat{t}^\dagger = -\hat{I}^{>\dagger} \times t$ ; и

4) *Инверсное изодуальное изовремя*, воспроизводящее движение назад в будущее, применимое строго для упорядоченных произведений налево, и записываемое  $\langle \hat{t}^d = -\langle \hat{I}_t^\dagger \times (-t)$ .

Несмотря на изменение единицы времени, изовремя воспринимается нашими чувствами как обычное время, так как удовлетворяет основной инвариантности,

$$(t_2 - t_1)^2 \times 1 \equiv [(t_2 - t_1) \times \hat{T}^d \times (t_2 - t_1)] \times \hat{t}^d,$$

поэтому принимается, что *наше восприятие времени не обязательно отражает действительное поведение времени в биологических и других*

*структурах.* Более того, изодуальное изовремя также удовлетворяет той же основной инвариантности, что устанавливает, что *течение времени назад внутри биологических структур является таким же причинным, как обычное течение вперед, и это вновь совместимо с нашим сенсорным восприятием.*

Наконец заметим, что течение времени обратно пропорционально единице, в том смысле, что *время замедляется для  $\hat{I}_t^> > 1$  сек. и ускоряется для  $\hat{I}_t^> < 1$  сек.* Как следствие, *шаг времени воспринимаемый нашими чувствами, никоим образом, не является действительным шагом рассматриваемой структуры.* Действительно, если внутренняя изоединица времени морской раковины  $\hat{I}_t^> \ll 1$  сек., мы кажемся замедленными для ее сенсорного восприятия, и морские раковины воспринимают себя стареющими много быстрее, чем наше восприятие той же эволюции. Никоим образом вышеуказанные четыре обобщенных понятия времени не исчерпывают все возможные варианты времени, так как мы имеем *четыре дополнительных геновремени*, в каждом из которых геноединица времени может принимать комплексные или кватернионные значения и *четыре последующих гипервремени*, в каждом из которых гиперединица времени дается упорядоченным набором в общем комплексных или кватернионных значений.

Читатель должен иметь в виду, что понятием времени действительно необходимым для научного (то есть математически строгого и численного) воспроизведения биологических структур и их эволюций является *гипервремя.* Рассмотрим, например, проблему бифуркации морских раковин на протяжении их роста. Легко видеть, что два понятия времени недостаточны для их воспроизведения, которое требует все четыре возможных времени (для деталей см. монографию [2e]). Но, как упомянуто в Разделе 2.4, математикой необходимой для описания роста морских раковин во времени является гиперматематика. Соответственно, единственно применимым понятием времени является гипервремя с удвоенной многозначной структурой в ее четырех различных реализациях.

Необходимость в обобщенных временах, наконец устанавливается тем фактом, что *обычное время в своих четырех реализациях, единственно позволяет описание обратимых систем (это тривиально, так как основополагающие математические аксиомы обратимы), поэтому находится в драматическом разногласии с необратимым характером природы.* Известная необратимость биологических структур может быть воспроизведена единственным научно допустимым путем, во первых, через приня-

тие обобщенной единицы времени, и во вторых, такая обобщенная единица должна быть различной для движения вперед и назад во времени.

Надеемся, что приведенные выше результаты убеждают в том, что любая вера в окончательный характер квантовой механики является ненаучной, и научная действительность, очевидно, говорит о том, что биологические структуры требуют теорий, сложность которых возможно выходит за рамки нашего понимания.

# Литература

- [1] Santilli, R.M.: Hadronic J. **1**, 224, 574, and 1267 (1978) [1a]; Algebras, Groups and Geometries **10**, 273 (1993) [1b]; Lett. Nuovo Cimento **37**, 545, (1983) [1c]; Intern. J. Modern Phys. **D7**, 351 (1998) [1d]; Rendiconti Circolo Matematico Palermo, Suppl. **42**, 7 (1996) [1e]; Found. Phys. **27** 625 (1997) [1f]; Acta Appl. Math. **50**, 177 (1998) [1g].
- [2] Santilli, R.M.: *Foundations of Theoretical Mechanics*, Vol. **I** (1978) [2a] and **II** (1983) [2b], Springer-Verlag, Heidelberg-New York; *Elements of Hadronic Mechanics*, Vol. **I** [2c] and **II** [2d] (1995), Ukraine Academy of Sciences, Kiev; *Isotopic, Genotopic and Hyperstructural Method in Theoretical Biology*, Ukraine Academy of Sciences, Kiev (1996) [2e]; *Isotopic Generalization of Galilei's and Einstein's Relativities*, Vols. **I** and **II**, Hadronic Press (1991) [2f].
- [3] Myung, H.C., and Santilli, R.M.: Hadronic J. **5**, 1120 (1982) [3a]. Jannussis, A. and Mignani, R.: Physica **A187**, 575 (1992) [3b]. Kadeisvili, J.V.: Algebras, Groups and Geometries **9**, 283 and 319 (1992) [3c]. Tsagas, Gr.T. and Sourlas, D.S.: Algebras, Groups and Geometries **12**, 1 and 67 (1995) and **13**, 129 (1996) [3d]. Kamiya, N. and Santilli, R.M.: Hadronic J. **16**, 168 (1993) [3e]. Kadeisvili, J.V.: Math. Methods in Applied Sciences **19**, 1349 (1996) [3f]. Illert, C. and Santilli, R.M., *Foundations of Conchology*, Hadronic Press (1996) [3g].
- [4] Jiang, C.X.: *An Introduction to Santilli's Isonumber Theory*, Hadronic Press, in press [4a]. Tsagas, Gr.R. and Sourlas, D.: *Mathematical Foundations of the Lie-Santilli Theory*, Ukraine Academy of Sciences, Kiev (1992) [4b]. Kadeisvili, J.V.: *Santilli's Isotopies of Contemporary Algebras, Geometries and Relativities*, Ukraine Academy of Sciences, Kiev, 2nd edition (1997) [4c].

- [5] Santilli, R.M.: Nuovo Cimento **51**, 570 (1967) [5a]; Suppl. Nuovo Cimento **6**, 1225 (1968) [5b]; Meccanica **1**, 3 (1968) [5c]; Hadronic J. **3**, 440 (1979) [5d]; Found. Phys. **27**, 1159 (1997) [5e]; *Lie-Admissible Approach to the Hadronic Structure*, Vol. **I** (1978) and **II** (1982) [6d], Hadronic Press [5f].
- [6] Gilmore, R.: *Lie Groups, Lie Algebras, and Some of their Representations*, Wiley, New York (1974) [6a]. Jacobson, N.: *Lie Algebras*, Interscience, New York (1962) [6b].
- [7] Albert, A.A.: Trans. Amer. Math. Soc. **64**, 552 (1948).
- [8] Santilli, R.M. and Vougiouklis, T.: in *Frontiers in Hyperstructures*, Vougiouklis, T., Editor, Hadronic Press, Florida (1996).
- [9] Santilli, R.M.: Hadronic J. **8**, 25 and 36 (1985) [9a]; Intern. J. Modern Phys., **A14**, 2205 (1999) [9b]; Hyperfine Interactions **109**, 63 (1997) [9c].

## Глава 3

# Основы адронной химии

### 3.1 Введение

Следуя историческому аргументу Эйнштейна, Подольского, Розена об "отсутствии завершенности" квантовой механики, центральное предположение этой монографии состоит в утверждении, что *квантовая химия* [2] является также "незавершенной".

В этой Главе мы рассматриваем "завершение" квантовой химии под названием *адронная химия*, впервые предложенное Сантилли и Шиллади в работе [3]. Предложенное "завершение" осуществляется через дополнительные *нелинейные, нелокальные и непотенциальные взаимодействия из-за глубокого перекрытия волновых пакетов валентных электронов*, которые отсутствуют в квантовой химии.

Инвариантная трактовка указанных взаимодействий требует их воспроизведения через обобщение основной единицы теории, приводящее к использованию новой *изо-, гено- и гипер-математики* предыдущей главы. Следовательно, адронная химия имеет три главные ветви, называемые *изо-, гено- и гипер-химия*, которые используются для воспроизведения *молекулярных связей, необратимых процессов и биологических структур*, соответственно.

Как это было для случая математики, по концепции и конструкции, адронная и квантовая химия всюду совпадают, с единственным общим исключением расстояний порядка 1 фм, на которых первая теория вносит несколько новых вкладов по сравнению со второй теорией, при полной действительности всех обычных квантовых аксиом и физических за-

конов. Как мы увидим, новые вклады на малых расстояниях, вообще говоря, малы, хотя они позволяют сделать явное устранение по крайней мере некоторых недостатков квантовой химии, указанных в Разделе 1.3.

Главной целью этой главы является изложение основ адронной химии. Приложения к новым моделям водорода, воды и других молекул, с существенной точностью воспроизведения молекулярных характеристик, представлено в следующих главах.

Вполне понятно, наша новая модель молекулярных связей имеет также свои корни во множестве передовых исследований химиков. Действительно, понятие "электронной корреляции" [4a] в химии довольно старо, и некоторые связанные с ней исследования действительно ввели большой спектр понятий, соответствующий понятиям наших изохимических электронных связей Главы 4.

Мы должны упомянуть исследования Г.Н. Льюиса [4b], который предложил *октетную структуру* для легких элементов. И. Ленгмюр [4c] расширил это понятие до 2 – He, 8 – Ne, 8 – Ar, 18 – Kr, 18 – Xe, 32 – Ra. Дополнительные разработки, связанные с нашей работой были сделаны Д. Бойдом и др. [4d, 4e] с их "кулоновской дырой" в расчетах Хартри-Фока-Рутана, которые достигли согласия более точными, явно коррелированными волновыми функциями. Это находится в согласии с работой, представленной в этой монографии и ясно демонстрирует необходимость взаимодействия притяжения между коррелированными электронами на очень коротких расстояниях (см. Главы 4 и 5).

Хотя довольно очевидна реальность такой "кулоновской дыры", работы [4] не объясняют природу "дыры" в электронной корреляции. Как мы увидим в следующих главах, адронная химия подразумевает не просто отсутствие отталкивания ("кулоновская дыра"), но существование *притяжения* между идентичными электронами и возможность его количественного описания.

В основном, прежние исследования, напрямую связанные с адронной химией, были основаны на *экранированиях кулоновского закона* [4], которые возникли из необходимости улучшить воспроизведение молекулярных характеристик. Не забывая, что закон Кулона является центральным *инвариантом* квантовой механики и химии (то есть инвариантом относительно унитарной временной эволюции теории), упомянутые экранирования могут быть достигнуты единственно через *неунитарные* преобразования кулоновского закона, то есть выходом из класса эквивалентности квантовой химии.

Как результат, формулируя теорию на обычных гильбертовых пространствах над обычными полями, использование термина "квантовая химия", на строгих научных основаниях, является не совсем правильным для экранированных законов Кулона. Легко видеть, что экранированные кулоновские законы не допускают традиционного понятия "кванта" энергии, они препятствуют существованию квантованных боровских электронных орбит и имеют другие черты совершенно выпадающие из рамок квантовой механики и квантовой химии в их оригинальных формулировках.

Более того, читатель должен иметь в виду катастрофические несогласованности неунитарных теорий рассмотренных в Разделе 1.7, и самое важное это *отсутствие их инвариантности*, то есть предсказание различных числовых значений для одной и той же величины, при тех же условиях, но в различные времена.

Главная цель адронной химии это обеспечение общей трактовки всех возможных неунитарных образов квантовой химии, включая неунитарные образы кулоновского закона как частные случаи, инвариантным путем, совместимым с применимостью квантовой механики и квантовой химии на расстояниях порядка Боровской орбиты.

Действительно, адронная химия имеет наиболее общую из возможных неунитарных структур, поэтому является *непосредственно универсальной* для всех возможных экранирований, то есть допускает их все как частные случаи (универсальность) в фиксированной системе отсчета экспериментатора (непосредственная универсальность). Воспроизведение инвариантно, так как делается через основное неунитарное преобразование  $U \times U^\dagger = \hat{I}$ , где  $\hat{I}$  определяется в качестве фундаментальной обобщенной единицы теории. Совместимость с квантовой механикой на расстояниях порядка боровской орбиты легко достигается тем, что  $\lim_{r \gg 1\text{fm}} (U \times U^\dagger) = I$ .

Вышеизложенная концепция позволит конструкцию принципиально новой модели молекулярных структур, в которой квантовая механика и квантовая химия не слишком пригодны для описания молекулярных структур, но сохраняется пригодность квантовой механики для структур из отдельных атомов, вдоль всех концептуальных линий, показанных на Рис. 1.7.

Как мы увидим, численное значение "завершения" квантовой в адронную химию через неунитарные эффекты, в общем, малó. Как результат, квантовая механика и квантовая химия остаются применимыми как



хорошая аппроксимация молекулярных структур. Тем не менее, несмотря на их малые числовые значения, инвариантное сложение неунитарных взаимодействий и эффектов имеет драматические научные следствия такой величины, что это подразумевает новые эффекты и связанные с ними технологии, которые просто немислимы в рамках квантовой химии (см. Главы 7 и 8).

Другой важной целью адронной химии является достижение научно воспроизведения необратимых процессов (таких как химические реакции), то есть воспроизведения, основанного на действительно необратимой структуре, предсказывающего инвариантные числа, которые подтверждаются измерениями.

Как хорошо известно, квантовая химия неспособна воспроизводить необратимые процессы. Это происходит из-за того, что квантовая химия может воспроизводить системы только через гамильтониан  $H = p^2/2 \times m + V(r, p)$ , в то время как все существующие в природе потенциалы (такие как электрический, магнитный, гравитационный и другие) являются строго обратимыми без каких-либо известных исключений. Более того, все геометрические и другие аксиомы математики, лежащей в основе квантовой химии, строго обратимы. Это приводит к тому, что все попытки воспроизвести необратимые процессы через квантовую химию не могут выдержать проверку временем или научной строгостью.

Как проделано в деталях в предыдущей Главе, наше инвариантное воспроизведение необратимости начинается с наиболее фундаментального понятия, – отсутствия симметричного характера основной единицы теории. Тогда, та же необратимость распространяется на уровне всех последующих математических структур. В этой главе мы покажем, что физические и химические теории, основанные на такой необратимой математике, могут действительно обеспечивать единственно известное аксиоматически согласованное и инвариантное воспроизведение необратимости – от классического до квантового описания.

Еще одной целью конструирования адронной химии является обеспечение методов научной обработки биологических структур. Помня, что центральным столпом квантовой механики является *вращательная симметрия жестких тел*, любая попытка исследования биологических структур на серьезном научном основании через квантовую химию, неизбежно подразумевает, что такая структура является *идеально жесткой, идеально обратимой и идеально постоянной*, (как в случае кристалла). Попытка снять одно из этих несогласованностей с намерением сохранить ориги-

нальную теорию может быть легко отброшена как ненаучная, так как она омрачается массой несогласованностей.

Как очевидно, уже в математической структуре представленной в предыдущей главе, адронная химия действительно позволяет воспроизведение биологических структур как *деформируемых, необратимых и с конечным временем*. Однако, в этой процедуре, получаемые в результате методы становятся *мультиразмерными*, поэтому приобретают неизбежную сложность. В окончательном анализе, сложность биологических структур драматически масштабнее элементарных аксиом квантовой механики и квантовой химии.

Для понимания этой главы, требуются некоторые знания аналитической механики, квантовой механики и квантовой химии и новой математики, очерченной в предыдущей главе. Простые методы для явного конструирования классической и операторной адронной химии будут также представлены в помощь читателям менее склонным к сложной математике.

Читатель должен также иметь в виду, что квантовая механика и квантовая химия имеют только *одну* формулировку – традиционную [2]. Напротив, адронные теории имеют *две* различные формулировки: на обобщенных пространствах над обобщенными полями и в *проекции* на обычные пространства над обычными полями. Во избежание чрезмерных сложностей, в этой работе мы будем часто рассматривать *проекцию* адронных теорий на обычные пространства над обычными полями и оставлять математически корректную формулировку на обобщенных пространствах математическим исследованиям.

## 3.2 Классические основы адронной химии

### 3.2.1 Историческое учение Лагранжа и Гамильтона

Центральными аналитическими уравнениями адронной механики являются оригинальные уравнения Лагранжа и Гамильтона [5], которые *не* являются теми, которые использовались химией на протяжении 20-го века, а являются теми, которые были первоначально предложены – с наличием *внешних членов*,

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L(t, \mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}})}{\partial \dot{\mathbf{r}}} - \frac{\partial L(t, \mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}})}{\partial \mathbf{r}} = \mathbf{F}(t, \mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}), \quad (3.1a)$$

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{\partial H(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}}, \quad \frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\frac{\partial H(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F}(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}, \dots), \quad (3.1b)$$

где  $\mathbf{r} = \{r^k\}$ ,  $\dot{\mathbf{r}} = \{\dot{r}^k\}$ ,  $\mathbf{p} = \{p_k\}$ ,  $\mathbf{F} = \{F^k\}$ . Все оставшиеся оригинальные конструкции аналитической механики, такие как известная теория Якоби [5с], также были сформулированы для правильных аналитических уравнений с внешними членами.

Внешние члены могут быть найдены в большинстве исследований вплоть до начала 20-го века, с этого момента они были сокращены согласно успешному применению *усеченных аналитических уравнений*.

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L(t, \mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}})}{\partial \dot{\mathbf{r}}} - \frac{\partial L(t, \mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}})}{\partial \mathbf{r}} = 0, \quad (3.2a)$$

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{\partial H(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}}, \quad \frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\frac{\partial H(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{r}}, \quad (3.2b)$$

для воспроизведения планетарных и атомных структур. Внешние члены в общем избегались на протяжении 20-го века, поскольку дополнение подразумевало очевидное отклонение от главной структуры, – теории относительности Галилея или Эйнштейна.

Однако, Лагранж и Гамильтон в своих оригинальных рукописях довольно ясно выражали взгляд, что одна функция, называемая сегодня лагранжианом или гамильтонианом, не может воспроизвести всю физическую реальность, поскольку такая единственная функция может воспроизвести только силы, описываемые потенциалом. Все остальные силы и эффекты контактного, непотенциального типа были воспроизводимы внешними членами  $\mathbf{F}(t, \mathbf{r}, \mathbf{p}, \dots)$ .

Классические основы адронной химии точно даются вышеуказанным историческим учением, то есть, следуя забытому наследству Лагранжа и Гамильтона, мы принимаем, что гамильтониан  $H$  воспроизводит все возможные взаимодействия на расстоянии, выводимые из потенциала, в то время как внешние члены  $\mathbf{F}$  воспроизводят контактные и другие особенности и эффекты, не воспроизводимые потенциалом или гамильтонианом.

Более того, дополнительное учение Лагранжа и Гамильтона, также забытое в 20-м веке, заключается в том, что *истоки необратимости связаны с непотенциальными силами, воспроизводимыми внешними членами*, так как все потенциальные взаимодействия, воспроизводимые лагранжианом или гамильтонианом, являются обратимыми, как это упомянуто в Разделе 3.1.

Следовательно, *отбрасывание внешних членов в фундаментальных аналитических уравнениях подразумевает изъятие самого научного смысла, необходимого для воспроизведения необратимости.* Это является причиной, почему изначальные, исторические внешние члены в аналитических уравнениях играют поистине центральную роль для адронной химии.

Первоначальной задачей этого раздела является нахождение *методов для инвариантной обработки внешних членов*, как необходимое условие жизнеспособности аналитической механики.

### 3.2.2 Неизменность исторического учения

Всестороннее исследование, проведенное в монографии [6a] через условие интегрируемости для существования лагранжиана или гамильтониана (так называемые *условия вариационного самосопряжения*), подтвердило историческое учение Лагранжа и Гамильтона [5] о том, что усеченные аналитические уравнения могут воспроизводить в координатах наблюдателя только довольно ограниченный подкласс ньютоновских систем.

Привычное преобразование систем, которые являются негамильтоновыми в данной системе отсчета, к эквивалентным формам в других системах, в которых они принимают гамильтонов характер (то есть редукция оригинальных в усеченные аналитические уравнения через координатные преобразования) будет строго запрещено в наших исследованиях из различных соображений. В первую очередь потому что методы, лежащие в основе вышеупомянутого преобразования (известного как теорема Дарбу в симплектической геометрии, или теорема Ли-Кенига, в аналитической механике [6a]) являются строго применимыми к *локально-дифференциальным* системам, в то время, как мы в первую очередь заинтересованы в обработке *нелокально-интегральных* эффектов, для которых топологические основы этих методов неприменимы.

Даже принимая локальную аппроксимацию через степенные ряды по скоростям, редукция будет все равно запрещена, так как необходимые преобразования существенно *нелинейны*, поэтому отображение инерциальных систем отсчета наблюдателя в существенно *неинерциальные системы*, имеет следствием нарушение принципов относительности Галилея и Эйнштейна.

Наконец, известно, что ни одно экспериментальное оборудование не

может быть размещено в координатах, преобразованных согласно Дарбу, в которых, например,  $r' = \exp[Nrp]$ .

Исходя из вышеприведенных причин, мы будем допускать в наших исследованиях *непосредственно аналитические представления* [6a, 6b], а именно, представления уравнений движения через функционал действия, который рассматривается в *фиксированной* инерциальной системе отсчета наблюдателя. Только *после* достижения этого непосредственного представления, использование преобразований теории может иметь практическую уместность.

### 3.2.3 Проблемные аспекты внешних членов

Исследование уравнений (3.1) вскрывает множество методологических проблем, порожденных присутствием внешних членов. Напомним, что уравнения (3.2), без внешних членов, характеризуют временную эволюцию,

$$\frac{dA}{dt} = [A, H] = \frac{\partial A}{\partial r^k} \frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial H}{\partial r^k} \frac{\partial A}{\partial p_k}, \quad (3.3)$$

через известные *скобки Пуассона*  $[A, H]$ , которые, во-первых, удовлетворяют всем условиям характерным для алгебры (правый и левый дистрибутивный закон и закон умножения на скаляр) и во вторых, это Ли алгебра. Для сравнения, аналитические уравнения (3.1) с внешними членами характеризуют обобщенную временную эволюцию,

$$\frac{dA}{dt} = (A, H) = \frac{\partial A}{\partial r^k} \frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial H}{\partial r^k} \frac{\partial A}{\partial p_k} + \frac{\partial A}{\partial p_k} F^k, \quad (3.4)$$

чьи скобки  $(A, H)$  не характеризуют какую-либо алгебру, как обычно определенную в математике (так как скобки нарушают правый дистрибутивный закон и правый закон умножения на скаляр). Как результат, уравнения (3.1) должны быть переписаны таким образом, чтобы допускать согласованную алгебраическую структуру, из-за отсутствия которой невозможно эффективное покрытие обычной аналитической механики.

Более того, очевидно, что временная эволюция (3.1b) *неканонична*. Сегодня известно, что в то время, как усеченные уравнения Гамильтона (3.2b) обладают *инвариантными основными единицами пространства и времени* (поскольку канонические преобразования сохраняют, по определению, единицы в симплектических структурах и структурах Ли), это не

имеет места для уравнений (3.1), когда они сформулированы на обычных пространствах над обычными полями. Как результат, уравнения (3.1) не допускают недвусмысленных применений для действительного измерения, как подробно изучено в Разделе 1.7.

Вышеприведенные аргументы требуют переформулировки уравнений (3.1) таким образом, чтобы они:

- 1) были записаны в фиксированной инерциальной системе отсчета экспериментатора;
- 2) допускали инвариантные единицы пространства и времени;
- 3) обладали согласованной скобочной алгеброй временной эволюции;
- 4) были выводимы из принципа наименьшего действия; и последнее, но не менее важное,
- 5) сохраняли аксиоматическую структуру обычной гамильтоновой механики (случай без внешних членов).

Сегодня известно, что вышеприведенные требования удовлетворяются *изо-, гено- и гипер-формулировкой уравнений (3.1)*, впервые предложенными в работе [7] и известные под названиями *изо-, гено- и гипер-механики Гамильтона-Сантилли*. Эти механики предполагаются здесь в качестве классической основы адронной химии.

### 3.2.4 Классификация уравнений Гамильтона с внешними членами

На протяжении большей части 20-го века существовала уверенность в том, что десять полных законов сохранения, лежащих в основе галилеевской теории относительности и специальной теории относительности (сохранение полной энергии, импульса, момента импульса и постоянство движения центра масс) применимы единственно к замкнутым системам изолированных частиц с *консервативными* внутренними силами.

Эта уверенность была разрушена исследованиями монографии [6b] (см. в частности Раздел 6.3, стр. 236). Действительно, замкнутая система частиц с консервативными, так же как и с *непотенциальными*, внутренними силами, воспроизводится внешними членами  $F^k$  в уравнениях (3.1), в действительности удовлетворяющими всем десяти *обычным* законам сохранения, когда внешние силы удовлетворяют условиям

$$\sum_k F^k(t, r, p) = 0, \quad (3.5a)$$

$$\sum_k r_k \wedge F^k(t, r, p) = 0, \quad (3.5b)$$

$$\sum_k p_k \cdot F^k(t, r, p) = 0. \quad (3.5c)$$

Вышеприведенные условия составляют классическую основу *нового* понятия *связанных систем*, которые технически называются *замкнутыми вариационно несамосопряженными* (или *замкнутыми негамильтоновыми*) [6b], в том смысле, что системы удовлетворяют всем обычным законам сохранения (замкнутость), хотя они вариационно не самосопряжены (не воспроизводятся при использовании только гамильтониана).

Читатель должен иметь в виду, что примитивная классическая структура новой модели молекулярных связей, представленная в следующих главах, точно дается вышеупомянутыми замкнутыми несамосопряженными системами.

Расширенный класс *открытых несамосопряженных систем*, очевидно, включает в себя системы, в которых по крайней мере одно из условий (3.5) нарушено внешними членами, отвечающими за обмен энергией, импульсом или моментом импульса с внешними системами.

В заключение, классификация в монографии [6b] всех возможных систем, характеризующихся гамильтоновыми уравнениями с внешними членами, дается следующим:

1) *Замкнутые самосопряженные системы*, в которых все силы консервативны и внешние члены равны нулю. Эти системы явно обратимы во времени и составляют классическую основу всех моделей обычной квантовой механики. Характерный пример дается планетарными системами.

2) *Замкнутые несамосопряженные системы*, в которых все потенциальные силы являются консервативными и внешние силы отличны от нуля, однако, удовлетворяют условиям (3.5). Эти системы составляют очевидное обобщение первых, они в общем необратимы и составляют классическую основу изохимии. Характерный пример дается Юпитером, изолированным от остальной Вселенной. Эта система действительно удовлетворяет всем десяти полным законам сохранения, однако внутренняя структура имеет вихревые движения с *переменными угловыми моментами*, видимыми в телескоп, и явную необратимость.

3) *Открытые несамосопряженные системы*, в которых потенциальные и непотенциальные силы являются (достаточно гладкими) произвольными, и в общем нарушены условия (3.5). Эти системы очевидно *открыты*,

в смысле взаимодействия с системами принятыми как внешние, в общем необратимы и составляют основу генохимии. Характерным примером является космический корабль входящий в атмосферу Земли, когда остальная планета рассматривается как внешняя система.

Другим, довольно общим предположением физики 20-го века, опровергаемым исследованиями через условия вариационного самосопряжения [6], является то, что все открытые системы могут быть сведены к замкнутой, обычной, гамильтоновой форме через добавление внешних систем. Достижение замкнутости (в вышеуказанном смысле удовлетворения всем десяти законам сохранения в нашем пространстве-времени), через добавление внешних систем, очевидно. Однако, результирующая новая система является обычной гамильтоновой, только когда система образована точечными частицами с консервативными, действующими на расстоянии взаимодействиями, без столкновений. Наоборот, если оригинальные составляющие являются протяженными частицами с потенциальными или непотенциальными взаимодействиями, результирующая замкнутая система *не может* быть обычной гамильтоновой, и это оправдывает вышеприведенную классификацию.

### 3.2.5 Изомеханика Гамильтона-Сантилли

Когда внешние члены удовлетворяют условиям (3.5), решение проблематичных аспектов из Раздела 3.2.3 возможно при помощи изоматематики, изложенной в Разделе 2.2, приводящей к так называемой *изомеханике Гамильтона-Сантилли* [7].

Переформулировка уравнений (3.1b) требует в этом случае использования 6-мерного *изофазового пространства*  $T^*\hat{E}(\hat{r}, \hat{\delta}, \hat{\mathbb{R}})$  (Раздел 2.2.3 или, более точно, *изосимплектической геометрии* [7]) с локальными координатами  $\hat{b} = \{b^\mu\} = \{b^\mu\} \times \hat{I}_6 = \{r^k, p_k\} \times \hat{I}_6$ , определенной в соответствии с 6-мерной геноединицей [*loc. cit.*]

$$\hat{I}_6 = \text{Diag.}(\hat{I}_3, \hat{T}_3), \quad \hat{I}_3 = 1/\hat{T}_3 > 0. \quad (3.6)$$

Последняя структура существует благодаря тому факту, что  $\hat{r}^k$  это контравариантная величина, в то время как  $\hat{p}_k$  это ковариантная величина, для которых  $\hat{d}\hat{r}^k = \hat{I}_i^k \times d\hat{r}^i$  и  $\hat{d}\hat{p}_k = \hat{T}_k^i \times d\hat{p}_i$ .

Игнорируя для простоты изопроизводную по времени, но используя изопроизводные по координатам и импульсам, уравнения (3.1b) тогда могут быть *точно* переписаны в виде *геноуравнений Гамильтона-Сантилли*



[7]

$$\begin{aligned}
(\omega) \times \begin{pmatrix} dr^k/dt \\ dp_k/dt \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0_{3 \times 3} & -I_{3 \times 3} \\ I_{3 \times 3} & 0_{3 \times 3} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} dr^k/dt \\ dp_k/dt \end{pmatrix} = \\
\begin{pmatrix} -dp_k/dt \\ dr^k/dt \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \hat{\partial} \hat{H} / \hat{\partial} r^k \\ \hat{\partial} \hat{H} / \hat{\partial} p_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{T}_k^i \times \partial \hat{H} / \partial r^i \\ \hat{I}_i^k \times \partial \hat{H} / \partial p_i \end{pmatrix}, \tag{3.7a}
\end{aligned}$$

$$\hat{H} = \hat{p}_k \hat{\times} \hat{p}^k / 2 \hat{\times} \hat{m} + \hat{V}(\hat{r}) = [p_k \times p^k / 2 \times m + V(r)] \times \hat{I}_3, \tag{3.7b}$$

$$\hat{T}_3 = \text{Diag.}[I - F / (\partial H / \partial r)], \tag{3.7c}$$

где  $\omega$  это канонический симплектический тензор, все обобщенные произведения изотопические, то есть  $A \hat{\times} B = A \times \hat{T}_3 \times B$  и свертка по повторяющимся  $k$ -индексам происходит в изопространстве с изометрикой  $\hat{\delta}^> = \hat{T}_3 \times \delta$ ;  $r = \{r^k\}$ ,  $\dot{r} = \{\dot{r}^k\}$ ,  $p = \{p_k\}$ ,  $F = \{F^k\}$ .

Как можно видеть, главный механизм уравнений (3.7) заключается в трансформации внешних членов  $F$  в явный вид изотопического элемента  $\hat{T}_3$ . Как следствие, переформулировка (3.7), очевидно, напрямую зависит от способности воспроизвести негамильтоновы силы и эффекты обобщением единицы теории.

Заметим, в частности, что внешние члены внедряются в изопродные. Однако, записанные явно, уравнения (3.1) и (3.7) совпадают. Заметим, что  $\hat{T}_3$ , как в правиле (3.7c), полностью симметрично, поэтому приемлемо как изотопический элемент изоматематики. Заметим также, что все нелокальные и негамильтоновы эффекты вставлены в  $\hat{T}$ , поэтому допускается использование новой топологии Сантилли-Соурласа-Тсагаса [7] (топология, которая всюду локально-дифференциальна и обычна, за исключением единицы).

Наконец заметим, что изоуравнения Гамильтона-Сантилли необратимы для всех обратимых гамильтонианов всякий раз, когда внешние члены или, эквивалентно, их представления через изоединицу, не инвариантны относительно обращения времени,

$$F(t, \dots) \neq F(-t, \dots), \quad \text{or} \tag{3.8a}$$

$$\begin{aligned}
\hat{T}(t, \dots) &= \text{Diag.}[I - F(t, \dots) / (\partial H / \partial t)] \neq \\
&\neq \hat{T}(-t, \dots) = \text{Diag.}[I - F(t, \dots) / (\partial H / \partial r)]. \tag{3.8b}
\end{aligned}$$

$$(\hat{\partial} \hat{H} / \hat{\partial} \hat{r})|_t \neq (\hat{\partial} \hat{H} / \hat{\partial} \hat{r})|_{-t}, \quad (\hat{\partial} \hat{H} / \hat{\partial} \hat{p})|_t \neq (\hat{\partial} \hat{H} / \hat{\partial} \hat{p})|_{-t}, \tag{3.8c}$$

В частности, следуя нашим предположениям, мы имеем необратимость относительно сохранения полной энергии (см. следующий раздел).

Для дальнейшего, полезно воспроизвести уравнения (3.7) в унифицированных обозначениях

$$\hat{\omega}_{\mu\nu} \hat{\times} \frac{d\hat{b}^\nu}{dt} = \frac{\hat{\partial}\hat{H}(t, \hat{b})}{\hat{\partial}\hat{b}^\mu} = \hat{T}_{6\mu}^\nu \times \frac{\partial\hat{H}(t, b)}{\partial b^\nu}, \quad (3.9a)$$

$$\hat{\omega}_{\mu\nu} = \omega_{\mu\nu} \times \hat{I}_6, \quad \hat{b} = (\hat{r}, \hat{p}), \quad \hat{T}_6 = \text{Diag.}(\hat{I}_3, \hat{T}_3). \quad (3.9b)$$

Еще одна полезная версия аналитических уравнений (3.7) характеризуется следующими унифицированными обозначениями [6a, 6b]

$$R^\circ = \{R^\circ\} = (p_k, 0), \quad b = \{b^\mu\} = (r^k, p_k) \quad (3.10a)$$

$$\omega_{\mu\nu} = \frac{\partial R_\nu^\circ}{\partial b^\mu} - \frac{\partial R_\mu^\circ}{\partial b^\nu}. \quad (3.10b)$$

Учитывая свойства изодифференциального исчисления, уравнения (3.9) могут быть записаны как

$$\left( \frac{\hat{\partial}\hat{R}_\nu^\circ}{\hat{\partial}\hat{b}^\mu} - \frac{\hat{\partial}\hat{R}_\mu^\circ}{\hat{\partial}\hat{b}^\nu} \right) \hat{\times} \frac{d\hat{b}^\nu}{dt} = \frac{\hat{\partial}\hat{H}(b)}{\hat{\partial}\hat{b}^\mu} = \hat{T}_{6\mu}^\alpha \times \frac{\partial H(b)}{\partial b^\alpha}. \quad (3.11)$$

Важным следствием является то, что *изоуравнения Гамильтона-Сантilli совпадают с уравнениями Гамильтона без внешних членов на абстрактном уровне*. Действительно, как показано в Разделе 2.2, на абстрактном уровне, все различия между  $I$  и  $\hat{I}$ ,  $\times$  и  $\hat{\times}$ ,  $\partial$  и  $\hat{\partial}$  и т.д., исчезают. Это доказывает достижение центральной цели изомеханики, — того свойства, что аналитические уравнения с внешними членами действительно могут быть *идентично* переписаны в форме эквивалентной аналитическим уравнениям без внешних членов, с условием, однако, что переформулировка делается через расширенную изоматематику.

Следует отметить "непосредственную универсальность" уравнений (3.7), (3.9) и сравнить с ограниченными воспроизводящими способностями обычных уравнений (3.2b). Действительно, уравнения (3.7) могут воспроизводить все возможные (хорошо определенные) системы с локальными и нелокальными, так же как и с потенциальными и непотенциальными силами (универсальность), в фиксированных инерциальных

координатах экспериментатора (непосредственная универсальность). Заметим, что эта универсальность сохраняется также для всех возможных *нелокально-интегральных* реализаций внешних сил  $F$ , которые запрещены для усеченных гамильтоновых уравнений. Отметим наконец простоту воспроизведения всех возможных внешних сил через *алгебраические* уравнения (3.7с). Для сравнения, конструкция лагранжиана или гамильтониана для несамосопряженных систем, если когда и существует, требует решения *нелинейных уравнений в частных производных* [6а, 6б].

Мы должны наконец заметить, что уравнения (3.7) были сформулированы, для простоты, с использованием обычного времени  $t$  и обычной производной по времени  $d/dt$ , отличных от изовремени  $\hat{t} = t \times \hat{I}$  (см. Рис. 2.1) и изопроизводной  $\hat{d}/\hat{d}\hat{t}$ . Такая формулировка достаточна для изучения классической и квантовой изохимии, так как главные системы, которые должны быть изучены (молекулярные структуры), обратимы во времени и результаты будут относиться к нашему обычному времени. Расширение уравнений (3.7) до включения изовремени и производной по изовремени сделаны в работе [7] и приводят к замечательным дополнительным степеням свободы изомеханики Гамильтона-Сантилли.

### 3.2.6 Классические скобки Ли-Сантилли

Важно проверить, что уравнения (3.7) и (3.9) решают проблематичные аспекты внешних членов, отмеченные в Разделе 3.2.3. Это делается замечанием, что временная эволюция уравнений (3.7) имеет структуру [7]

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{A}}{dt} &= [\hat{A}; \hat{H}] = \frac{\hat{\partial}\hat{A}}{\hat{\partial}r^k} \hat{\times} \frac{\hat{\partial}\hat{H}}{\hat{\partial}\hat{p}_k} - \frac{\hat{\partial}\hat{H}}{\hat{\partial}r^k} \hat{\times} \frac{\hat{\partial}\hat{A}}{\hat{\partial}\hat{p}_k} = \\ &= \left( \frac{\partial A}{\partial r^k} \times \frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial H}{\partial r^k} \times \frac{\partial A}{\partial p_k} \right) \times \hat{I}, \end{aligned} \quad (3.12)$$

где суммирование происходит в изопространстве. Отметим сохранение полной энергии  $H$  даже в том случае, когда изотопический элемент  $\hat{T}$  не является инвариантом относительно обращения времени,

$$\frac{d\hat{H}}{dt} = [\hat{H}; \hat{H}] = \frac{\hat{\partial}\hat{H}}{\hat{\partial}r^k} \hat{\times} \frac{\hat{\partial}\hat{H}}{\hat{\partial}\hat{p}_k} - \frac{\hat{\partial}\hat{H}}{\hat{\partial}r^k} \hat{\times} \frac{\hat{\partial}\hat{H}}{\hat{\partial}\hat{p}_k} \equiv 0, \quad (3.13)$$

Заметим, что проекция вышеприведенного выражения на изопространства в ее соответствующей форме на обычных пространствах читается как

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial r^k} \times \frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial H}{\partial p_k} \times \frac{\partial H}{\partial r^k} + \frac{\partial H}{\partial p_k} \times F^k = \frac{\partial H}{\partial p_k} \times F^k \equiv 0, \quad (3.14)$$

где последнее тождество сохраняется, в виду принятого условия (3.5с).

Сохранение полной энергии, так же как и другие законы сохранения, рекомендуется для переформулировки без двусмысленностей гамильтоновых уравнений (3.1b), в терминах их изотопической формы (3.7).

Читатель, однако, должен иметь в виду, что переформулировка (3.7) "универсальна", то есть касается всех возможных внешних членов, включая те, для которых условия (3.5) нарушены и энергия больше не сохраняется. В этом последнем случае свойство (3.13) продолжает быть справедливым, то есть полная энергия сохраняется на изопространствах над изополями, в то время как ее проекция на обычные пространства не сохраняется.

Как можно видеть, последний случай может быть причиной двусмысленностей для неискушенного читателя, хотя лежащий в основе механизм довольно прост. В сущности, полная энергия сохраняется на изопространстве и не сохраняется на обычном пространстве, так как в первом случае энергия соотносится с обобщенной единицей, которая точно инверсна к степени несохранения. Очевидно, что при этих условиях гамильтониан сохраняется. Тот же гамильтониан не сохраняется при его проекции на обычное пространство, так как в этом случае он соотносится с тривиальной постоянной единицей  $I$ .

Основные скобки изоуравнений Гамильтона-Сантиллы (3.7) явно даются выражением

$$[A \hat{;} B] = \frac{\partial A}{\partial r_j} \times \hat{T}_i^j(t, r, p, \dots) \times \frac{\partial B}{\partial p_j} - \frac{\partial B}{\partial r_i} \times \hat{T}_i^j(t, r, p, \dots) \times \frac{\partial A}{\partial p_j}, \quad (3.15)$$

и могут быть переписаны из уравнений (3.9) в унифицированном  $\hat{b}$ -обозначении [7]

$$\begin{aligned} [\hat{A} \hat{;} \hat{B}] &= \frac{\partial \hat{A}}{\partial \hat{b}^\mu} \hat{\times} \hat{\omega}^{\mu\nu} \hat{\times} \frac{\partial \hat{B}}{\partial \hat{b}^\nu} = \\ &= \left( \frac{\partial A}{\partial b^\alpha} \times \hat{T}_\mu^\alpha \times \omega^{\mu\nu} \times \hat{T}_\nu^\beta \times \frac{\partial B}{\partial b^\beta} \right) \times \hat{I} = \left( \frac{\partial A}{\partial b^\alpha} \times \omega^{\alpha\beta} \times \frac{\partial B}{\partial b^\beta} \right) \times \hat{I}, \end{aligned} \quad (3.16)$$

где суммирование вновь производится по изопространствам,  $\omega_{\mu\nu}$  это канонический симплектический тензор уравнений (3.9),

$$\{\omega^{\mu\nu}\} = \{(|\omega_{\alpha\beta}|^{-1})^{\mu\nu}\} = \begin{pmatrix} 0_{3\times 3} & I_{3\times 3} \\ -I_{3\times 3} & 0_{3\times 3} \end{pmatrix}, \quad (3.17)$$

является каноническим тензором Ли, и мы использовали свойство инвариантности (см. [*loc. cit.*], (2.67))

$$\hat{T}_\mu^\alpha \times \omega^{\mu\nu} \times \hat{T}_\nu^\beta = \omega^{\alpha\beta}. \quad (3.18)$$

Как можно видеть, изотопическая переформулировка исторических уравнений Гамильтона с внешними членами решает проблематичные аспекты, перечисленные в Разделе 3.2.3. В отличие от скобок (3.4), обобщенные скобки  $[\hat{A}; \hat{B}]$  удовлетворяют левым и правым законам умножения на скаляр и дистрибутивным законам, поэтому характеризуют полностью приемлемую (неассоциативную) алгебру.

Более того, алгебра, характеризующаяся скобками  $[\hat{A}; \hat{B}]$ , удовлетворяет изотопическим аксиомам Ли, поэтому существует *реализация изотопии Ли-Сантилли*, изложенная в Разделе 2.2.9. Важным свойством изоскобок  $[\hat{A}; \hat{B}]$  является *их совпадение с обычными скобками Пуассона на абстрактном уровне*. Действительно, единственное различие между обычными и изотопическими скобками заключается в том, что суммирование в последних, например в реализации (3.13), идет по изопространствам, а в остальных они идентичны.

Геометрический аналог уравнений (3.9) дается *изосимплектической геометрией* [7], которую мы не можем рассматривать здесь из соображений краткости. Мы просто сделаем замечание для читателей интересующихся геометрией, что абстрактное тождество обычных и изотопических скобок подразумевает абстрактное тождество между фундаментальными симплектическими и изосимплектическими формами. На самом деле, изосимплектическая геометрия может быть сформулирована с использованием всех обычных символов, просто подчиняя их затем расширенной изотопической реализации. Все это подтверждает, что изотопии являются новой степенью свободы, которая скрыта в обычных геометрических или алгебраических аксиомах.

### 3.2.7 Принцип наименьшего изодействия

Легко видеть, что уравнения (3.7) выводимы из принципа наименьшего изодействия [7]

$$\begin{aligned}\hat{\delta}\hat{A} &= \hat{\delta} \int_{t_1}^{t_2} (\hat{p}_k \hat{\times} \hat{d}\hat{r}^k - \hat{H} \times dt) = \\ &= \hat{\delta} \int_{t_1}^{t_2} (p_k \times \hat{I}_i^k(t, r, p, dp/dt, \dots) \times \hat{d}\hat{r}^i - \hat{H} \times dt) = 0.\end{aligned}\quad (3.19)$$

Эквивалентный вариационный принцип записывается в терминах обозначений (3.10), для которых принцип наименьшего изодействия,

$$\begin{aligned}\hat{A} &= \hat{\delta} \int_{t_1}^{t_2} (\hat{p}_k \hat{\times} \hat{d}\hat{r}^k - \hat{H} \times dt) \equiv \hat{\delta} \int_{t_1}^{t_2} (\hat{R}_\mu^\circ \hat{\times} \hat{d}\hat{b}^\mu - \hat{H} \hat{\times} dt) = \\ &= \hat{\delta} \int_{t_1}^{t_2} (R_\mu^\circ \times \hat{I}_{6\nu}^\mu \times db^\nu - H \times dt) = 0,\end{aligned}\quad (3.20)$$

дает унифицированную версию (3.11), где мы, не оговаривая, предполагаем отбрасывание лишних изотопических произведений.

Вывод, главным образом, требует поднятия всех частных производных и дифференциалов обычного вариационного исчисления согласно правилам изодифференциального исчисления. В качестве альтернативы можно использовать обычную вариацию обычного действия и уже тогда подчинять производные и дифференциалы их изотопической интерпретации.

Это устанавливает *изоканоничность* теории (Раздел 2.2.8), а именно, ее способность реконструировать каноническую структуру на изопространстве над изополями, такую как структуры  $\hat{p}_k \hat{\times} \hat{d}\hat{r}^k - H \times dt$ . Расширение до изотопии времени добавляет следующую степень свободы [7], которая не существенна для этой работы.

Читатель может теперь видеть, что изоматематика не просто формальная теория, поскольку приводит к довольно глубоким последствиям. Напомним, что *уравнения Гамильтона с внешними членами не выводимы вариационным принципом*. В свою очередь, это мешало установлению операторного аналога уравнений (3.1b) на протяжении всего 20-го века.

Теперь мы утверждаем, что *идентичная* переформулировка уравнений (3.1b) в изоуравнение Гамильтона-Сантилли полностью выводима из

вариационного принципа. В свою очередь, это скоро позволит идентификацию уникального и недвусмысленного операторного аналога, который будет являться основой для новой модели молекулярной структуры представленной в следующих главах.

Непосредственная универсальность классической изохимии может быть тогда видна из произвольности интегрального функционала изодействия (3.6), спроектированного на обычные пространства над обычными полями.

Важным свойством принципа наименьшего изодействия (3.19) является функциональная зависимость от *производных произвольного порядка*, которые явно вставлены в изотопический элемент. Для сравнения, обычное действие может быть зависимым только от производных *первого порядка*  $dr/dt$ . Более обще, изотопии позволяют переформулировку хорошо ведущих себя функционалов действия произвольного порядка в их идентичную изоканоническую форму (3.20). Все это имеет важные динамические следствия, изученные в последующих главах.

Другими словами, мы можем сказать, что *лагранжианы или вариационные действия более высокого порядка чем первый несущественны*, потому что все они могут быть тождественно сведены к изотопической форме первого порядка внесением всех членов более высокого порядка в изопроизводные. Это важный результат, так как теории более высокого порядка чем первый, как известно, не допускают имеющего смысл фазового пространства и аналога гамильтониана, последний типичен для теорий первого порядка. Как результат, *механика Гамильтона-Сантиллы непосредственно универсальна для всех возможных порядков*.

### 3.2.8 Изоуравнения Гамильтона-Якоби-Сантиллы

Первым важным следствием принципа наименьшего изодействия является характеристика следующих *уравнений Гамильтона-Якоби-Сантиллы* [7]

$$\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \hat{H} = 0, \quad \frac{\partial \hat{A}}{\partial \hat{r}^k} - \hat{p}_k = 0, \quad \frac{\partial \hat{A}}{\partial \hat{p}_k} \equiv 0, \quad (3.21)$$

которые скоро будут иметь основное значение для изоквантования.

### 3.2.9 Примеры классических приложений

Типичным ньютоновским приложением изомеханики Гамильтона-Сан-тилли является космический корабль входящий в нашу атмосферу, который испытывает локально потенциальные силы приложенные к гравитационному центру  $r$ , воспроизводимые с помощью  $V(r)$ , так же как и контактные, нелокальные тормозящие силы, зависящие от формы корабля, которые могут быть записаны в терминах подходящего ядра  $\mathcal{F}(\sigma, \mathbf{r}, \mathbf{p}, \dots)$ ,

$$m \frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F}^{\text{NSA}}, \quad \mathbf{F}^{\text{NSA}} = \int d\sigma \mathcal{F}(\sigma, \mathbf{r}, \mathbf{p}, \dots), \quad (3.22)$$

где NSA обозначает вариационную несамосопряженность (nonselfadjointness), а именно, отсутствие выводимости из потенциала [6a].

Изоаналитическое воспроизведение вышеуказанной системы дается тогда уравнениями (3.7) с  $H = p^2/2m + V(r)$  и  $\hat{T} = 1 - F/(\partial V/\partial r)$ . Читатель может легко сконструировать большое число других непосредственных представлений негамильтоновых систем.

Заметим, что идентификация функционала действия впервые позволяет приложение *теории оптимального контроля* к оптимизации формы протяженных объектов,двигающихся в тормозящей среде, без аппроксимации. Эта оптимизация была невозможна из-за отсутствия принципа наименьшего действия.

Специфичные классические приложения будут изучены в дальнейших работах.

### 3.2.10 Связь между изотопической и биркгофовой механикой

Монография [6b] посвящена всестороннему представлению обобщения обычной гамильтоновой механики (с усеченными аналитическими уравнениями), названной Сантилли из ясных исторических соображений *биркгофовой механикой* (Birkhoffian mechanics). Принцип наименьшего действия последней механики в унифицированных обозначениях дается в виде

$$\delta A = \delta \int_{t_1}^{t_2} (R_\mu \times db^\mu - H \times dt) = 0, \quad (3.23a)$$

$$R = R(b) = \{R_\mu\} = \{A_k(r, p), B^k(r, p)\}, \quad (3.23b)$$



$$k = 1, 2, 3, \quad \mu, \nu = 1, 2, 3, 4, 5, 6, \quad (3.23c)$$

а именно, главное отличие между обычной гамильтоновой и биркгоффово-вой механикой заключается в том, что первая характеризуется частной реализацией  $R^\circ = (p, 0)$ , (3.10), в то время как последняя характеризуется общей формой  $R = R(r, p)$ , то есть произвольными (невырожденными) функциями  $r$  и  $p$ .

Уравнения Биркгоффа могут быть без труда получены из принципа (3.23) и могут быть записаны в следующих ковариантной и контравариантной формах

$$\Omega_{\mu\nu}(b) \times \frac{db^\nu}{dt} = \frac{\partial H(b)}{\partial b^\mu}, \quad (3.24a)$$

$$\frac{db^\mu}{dt} = \Omega^{\mu\nu}(b) \times \frac{\partial H(b)}{\partial b^\nu}, \quad (3.24b)$$

$$\Omega_{\mu\nu} = \frac{\partial R_\nu}{\partial b^\mu} - \frac{\partial R_\mu}{\partial b^\nu}, \quad (3.24c)$$

$$\Omega^{\mu\nu} = \|(\Omega_{\alpha\beta})^{-1}\|^{\mu\nu}. \quad (3.24d)$$

Важным аспектом для адронной химии является то, что биркгоффо-ва механика, как доказано в [6b], также "непосредственно универсальна" для всех возможных ньютоновских систем. Как результат, все возможные гамильтоновы уравнения (3.1b) могут быть всегда представлены уравнениями (3.24) в фиксированной системе отсчета  $b = (r, p)$  экспериментатора.

Однако, биркгоффо-ва механика имеет неканоническую структуру, поэтому страдает от проблематичных аспектов, изложенных в Разделе 1.7, в то же время она не допускает известных, или как-нибудь иначе согласованных, операторных образов несмотря на множество попыток. Из-за этих недостатков целые годы, последующие после появления монографии [6b], ушли на разработку подходящей аналитической механики для неусеченных ньютоновских систем, которая должна была быть построена заново с самых основ, и в конце концов привели к конструкции изогамильтоновой механики [7], которая разрешила все недостатки биркгоффовой механики.

Читателю может быть интересно знать, что эти трудные поиски могут быть в конечном счете сведены к следующей тождественной переформулировке уравнений Биркгоффа в уравнения Гамильтона-Сантилли

$$\frac{db^\mu}{dt} = \Omega^{\mu\nu}(b) \times \frac{\partial H(b)}{\partial b^\nu} =$$

$$= \omega^{\mu\nu} \times \hat{T}_{6\alpha}^{\nu}(b) \times \frac{\partial H(b)}{\partial b^{\nu}} = \omega^{\mu\nu} \times \frac{\hat{\partial} H(b)}{\hat{\partial} b^{\nu}}. \quad (3.24e)$$

Более явно, переформулировка основана на:

1) факторизации биркгоффа тензора  $\Omega^{\mu\nu}(b)$ , уравнения (3.23с), в канонический тензор Ли  $\omega^{\mu\nu}$ , (3.17),

$$\Omega^{\mu\nu}(b) = \omega^{\mu\nu} \times \hat{T}_{6\mu}^{\nu}(b); \quad (3.25)$$

2) интерпретации  $6 \times 6$ -мерной матрицы множителя  $\hat{T}$  как изотопического элемента теории в фазовом пространстве и, самое главное, на

3) внесении такого изотопического элемента в изопроизводные

$$\hat{T}_{6\mu}^{\nu}(b) \times \partial_{\nu} = \hat{\partial}_{\mu}. \quad (3.26)$$

Последняя переформулировка производит изогамильтоновы уравнения (3.9), которые формально тождественны обычным (усеченным) уравнениям, даже если лежащие в их основе уравнения имеют неусеченные внешние члены. В свою очередь, такая переформулировка разрешает все недостатки биркгоффовы механики, потому что достигается полная инвариантность через понятие изоканоничности (см. Раздел 3.5), в то же время допускается уникальное и недвусмысленное операторное представление (см. Разделы 3.3 и 3.4).

К качестве дополнительного замечания читатель должен иметь в виду, что конструкция аналитического воспроизведения через уравнения Биркгоффа достаточно гладкая, но с другой стороны, произвольные, в общем неконсервативные, ньютоновские системы в ней довольно сложны, в виду того, что она требует решения нелинейных уравнений в частных производных или интегральных уравнений [6b].

Для сравнения, конструкция тех же уравнений через изоуравнения Гамильтона-Сантиллы (3.7) или (3.9) действительно элементарна и просто требует идентификации изотопического элемента согласно правилу (3.7с) для произвольных данных внешних сил  $F_k(t, r, p)$  без какого-либо решения какого-либо уравнения.

### 3.2.11 Гено-, гипер- и изодуальная механика Гамильтона-Сантиллы

Как отмечено ранее, изоуравнения Гамильтона-Сантиллы всегда консервативны на изопространстве согласно закону (3.13). Как таковая их

физическая интерпретация является недвусмысленной для замкнутых негамильтоновых систем, удовлетворяющих условиям (3.5), в то время как их использование для открытых, неконсервативных систем может быть двусмысленным для непосвященного читателя.

Всякий раз, когда необходимо воспроизведение *изменения во времени* энергии, или других физических величин, наиболее адекватной механикой является *геномеханика Гамильтона-Сантилли* [7], которая основана на геноматематике, представленной в предыдущей Главе.

Главное различие между изо- и гено-механикой заключается в том, что в первом случае изотопический элемент  $\hat{T}$  действителен и симметричен, в то время как в последнем случае он действителен, но несимметричен. Это автоматически подразумевает существование *двух* элементов  $\hat{T}^>$  и  $\hat{T}^<$ , интерпретируемых как характеризующие движение вперед и назад во времени, с соответствующими геноединицами  $\hat{I}^> = 1/\hat{T}^>$  и  $\hat{I}^< = 1/\hat{T}^<$  для движения вперед и назад и соответствующими упорядоченными произведениями направо ">" и налево "<". Таким образом, мы пришли к аксиоматической согласованности воспроизведения необратимости при несохраняющихся гамильтонианах, которая начинается с наиболее фундаментальных элементов теории, — основных единиц и произведений.

Геноматематика допускает множество реализаций. Характерным является случай геноуравнений в которых симметрия изотопического элемента нарушена на геометрическом уровне фазового пространства (симплектическая геометрия). Вновь игнорируя для простоты генопроизводные по времени, мы имеем в этом случае следующую реализацию *геноуравнений Гамильтона-Сантилли* [7]

$$\left(\frac{db^\mu}{dt}\right) = \begin{pmatrix} dr^k/dt \\ dp_k/dt \end{pmatrix} = \hat{\omega}^> > \begin{pmatrix} \hat{\partial}^>\hat{H}/\hat{\partial}^>r^k \\ \hat{\partial}^>\hat{H}/\hat{\partial}^>p_k \end{pmatrix} = \omega^{\mu\alpha} \times \hat{I}_{6\alpha}^> > \frac{\partial H}{\partial b^v} =$$

$$= \begin{pmatrix} 0_{3\times 3} & I_{3\times 3} \\ -I_{3\times 3} & 0_{3\times 3} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} I_{3\times 3} & K_{3\times 3} \\ 0_{3\times 3} & I_{3\times 3} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \partial H/\partial r^k \\ \partial H/\partial p_k \end{pmatrix} = \quad (3.27a)$$

$$\begin{pmatrix} \partial H/\partial p_k \\ -\partial H/\partial r^k + F_k \end{pmatrix},$$

$$\hat{I}_6^> = \begin{pmatrix} I_{3\times 3} & K_{3\times 3} \\ 0_{3\times 3} & I_{3\times 3} \end{pmatrix}, \quad (3.27b)$$

$$\begin{aligned}
b &= \{r^k, p_k\}, \quad H = p^2/2 \times m + V(r, p), \\
K &= -F/(\partial H/\partial p) = -F/(p/m).
\end{aligned}
\tag{3.27c}$$

В этом случае, временная эволюция характеризуется следующими скобками [7]:

$$\begin{aligned}
\frac{dA}{dt} &= (A, H) = \frac{\hat{\partial}^> A}{\partial^> b^\mu} > \hat{\omega}^{>\mu\nu} > \frac{\hat{\partial}^> H}{\partial^> b^\nu} \equiv \\
&\equiv \frac{\partial A}{\partial r^k} \times \frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial H}{\partial r^k} \times \frac{\partial A}{\partial p_k} - \frac{\partial H}{\partial p_k} K_k^i \frac{\partial A}{\partial p_i} \equiv \\
&\equiv \frac{\partial A}{\partial r^k} \times \frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial H}{\partial r^k} \times \frac{\partial A}{\partial p_k} + \frac{\partial A}{\partial p_k} \times F_k
\end{aligned}
\tag{3.28}$$

Как можно видеть, новые скобки  $(A, H)$  больше не полностью антисимметричны, поэтому это позволяет описать *изменения энергии во времени*,

$$dH/dt = (H, H) = p_k \times F^k. \tag{3.29}$$

Это подтверждает то, что геномеханика действительно неконсервативна, как и оригинальная механика. Необратимость уравнений (3.27) очевидна. Следовательно, геномеханика позволяет классическое воспроизведение необратимых и неконсервативных систем, как это необходимо для классической генохимии.

Переформулировка (3.27) уравнений Гамильтона (3.1b) не является простым математическим курьезом в виду ее следствий. Во-первых, переформулировка разрешает несогласованности скобок (3.4), допуская новые скобки  $(A, B)$  для конструирования согласованной алгебры (удовлетворяющей правым и левым дистрибутивным законам и законам умножения на скаляр). В частности, такая алгебра оказывается Ли-допустимой в том смысле, что связанные с ней антисимметричные скобки  $[A, B] = (A, B) - (B, A)$  являются скобками Ли, хотя эта классическая алгебра *не является* допустимой по Жордану (см. [7]).

Более того, уравнения Гамильтона с внешними членами, как известно, *не выводимы* из вариационного принципа. Этот недостаток вновь без труда разрешается уравнениями (3.27), которые действительно выводимы из *принципа наименьшего генодействия* [7],

$$\begin{aligned}
\delta^> \hat{A} &= \delta^> \int_{t_1}^{t_2} (\hat{R}_\mu^\circ > \hat{d}^> \hat{b}^\mu - H \times dt) = \\
&= \hat{\delta}^> \int_{t_1}^{t_2} (R_\mu^\circ \times \hat{I}_{6\nu}^{\mu} \times db^\nu - H \times dt) = 0,
\end{aligned}
\tag{3.30}$$

где член  $H \times dt$  не был поднят в целях упрощения записи. Вышеуказанный принцип требует только поднятия всех производных, содержащихся в обычной вариации, в генопроизводные.

В свою очередь, пригодность принципа наименьшего действия делает возможным вывод следующих *геноуравнений Гамильтона-Якоби-Сантилли* [7]:

$$\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \hat{H} = 0, \quad \frac{\hat{\partial} > \hat{A}}{\hat{\partial} > \hat{r}^k} - \hat{p}_k = 0, \quad \frac{\hat{\partial} > \hat{A}}{\hat{\partial} > \hat{p}_k} \equiv 0. \quad (3.31)$$

И в свою очередь, пригодность уравнений Гамильтона-Якоби-Сантилли позволяет достичь впервые однозначного и недвусмысленного операторного образа гамильтоновых уравнений с внешними членами, изученного в следующих разделах. Для сравнения, неизвестно, или не может быть последовательно сформулировано, операторное представление уравнений (3.1b), например, из-за алгебраических несогласованностей лежащих в их основе скобок (3.4).

Для краткости за дополнительной реализацией геноуравнений Гамильтона-Сантилли мы отсылаем заинтересованного читателя к монографии [6d].

*Гипермеханика Гамильтона-Сантилли* [7], формально, та же геномеханика, с тем исключением, что генотопические элементы и геноединицы теперь реализуются через набор действительных несимметричных матриц. Для краткости, их явная конструкция оставлена заинтересованному читателю.

*Изодуальная гено- и гипер-механика* [7] являются анти-изоморфными образами, сконструированными через изодуальное отображение Главы 2. Эти механики, изначально были сконструированы для инвариантного *классического* воспроизведения антиматерии [14]. Впоследствии, они оказались необходимыми для инвариантного классического воспроизведения сложных биологических систем, таких как бифуркация, которая требует обращений времени (см. Рис. 2.1).

### 3.2.12 Простая конструкция классической изохимии

Классическая изохимия может быть сконструирована через простой метод не требующий передовой математики, хотя являющийся достаточным и эффективным для практических применений.

Действительно, изомеханика Гамильтона-Сантиллы может быть сконструирована через систематическое применение следующего неканонического преобразования ко всем величинам и операциям обычной гамильтоновой механики

$$U \times U^t = \hat{I}_6 = \begin{pmatrix} \hat{T} & 0 \\ 0 & \hat{T}^{-1} \end{pmatrix}, \quad (3.32a)$$

$$\hat{T} = I - \frac{F}{\partial H / \partial p} = I - \frac{F}{p/m}, \quad (3.32b)$$

где  $t$  обозначает транспонирование и  $F$  представляет внешние члены уравнений (3.1b).

Успешность конструкции зависит от применения вышеприведенных неканонических преобразований ко *всей* гамильтоновой механике, без исключений. Таким образом, мы будем иметь следующие поднятия: 6-мерной единицы обычного фазового пространства в изоединицу

$$I_6 \rightarrow \hat{I}_6 = U \times I_6 \times U^t; \quad (3.33a)$$

чисел в изочисла,

$$n \rightarrow \hat{n} = U \times n \times U^t = n \times (U \times U^t) = n \times \hat{I}_6; \quad (3.33b)$$

ассоциативного произведения  $A \times B$  между величинами одного вида  $A$ ,  $B$ , в изоассоциативное произведение с правильным выражением и свойством для изотопического элемента,

$$A \times B \rightarrow A \hat{\times} B = U \times (A \times B) \times U^t = A' \times \hat{T} \times B', \quad (3.34a)$$

$$A' = U \times A \times U^t, \quad B' = U \times B \times U^t, \quad \hat{T} = (U \times U^t)^{-1} = T^t; \quad (3.34b)$$

евклидовых пространств в изоевклидовы (где мы используем только пространственные компоненты преобразования)

$$\begin{aligned} x^2 &= x^t \times \delta \times x \rightarrow \hat{x}^2 = U \times x^2 \times U^t = \\ &= [(x^t \times U^t) \times (U^{t-1} \times \delta \times U^{-1}) \times (U \times x) \times (U \times U^t)] = \\ &= [x'^t \times (\hat{T} \times \delta) \times x'] \times \hat{I}; \end{aligned} \quad (3.35)$$

и, наконец, мы имеем следующий изотопический лифтинг уравнений Гамильтона в уравнения Гамильтона-Сантилли:

$$\begin{aligned}
 db/dt - \omega \times \partial H / \partial b &= 0 \rightarrow \\
 \rightarrow U \times db/dt \times U^t - U \times \omega \times \partial / \partial b \times U^t &= \\
 = db/dt \times (U \times U^t) - (U \times \omega \times U^t) \times (U^t^{-1} \times U^{-1}) \times & \quad (3.36) \\
 \times (U \times \partial H / \partial b \times U^t) \times (U \times U^t) = d\hat{b}/dt - \omega \times \hat{\partial} \hat{H} / \hat{\partial} \hat{b} &= 0,
 \end{aligned}$$

где  $\hat{b} = b \times \hat{I}$ ,  $\hat{\partial} H / \hat{\partial} \hat{b} = \hat{T} \times \partial H / \partial b$  и мы использовали свойство  $U \times \omega \times U^t \equiv \omega$ .

Как можно видеть, видимая сложность изоматематики сводится к действительно простой элементарной конструкции. Полезным упражнением для читателя, заинтересованного в изучении нового метода, будет разработать вышеприведенную конструкцию во всех деталях и доказать ее универсальность.

### 3.2.13 Инвариантность классической изохимии

Последнее требование является необходимым для физически и химически приемлемых теорий, и этим требованием является *инвариантность теории относительно временной эволюции и теории преобразований*, которая гарантирует предсказание тех же значений для той же величины при одинаковых условиях в различные времена, и этим избегаются проблематические аспекты неинвариантных теорий, представленные в Разделе 1.7.

Напомним, что обычная гамильтонова механика действительно физически и химически согласована, так как удовлетворяет вышеприведенному требованию инвариантности. Действительно, временная эволюция теории является *каноническим преобразованием*,

$$U \times \omega \times U^t \equiv \omega. \quad (3.37)$$

Теория преобразований также канонична, а именно, удовлетворяет вышеприведенному закону. Тогда вся теория инвариантна, то есть гамильтоновы уравнения отображаются в себя и т.д.

И наоборот, все аналитические уравнения, чья временная эволюция не является каноническим преобразованием, не инвариантны и, соответственно, не приемлемы для физических и химических приложений (Раздел 1.7). Это случай оригинальных гамильтоновых уравнений с внешними членами, биркгоффовых уравнений и всех структурных обобщений обычных аналитических уравнений без внешних членов.

Действительно, легко видеть, что неканоническое преобразование  $U \times \omega \times U^t \neq \omega$ , изменяет изоединицу, без изменения формы изоуравнений, поэтому подразумевается переход от оригинальной системы к новой.

С этого момента, использование новой изоматематики становится обязательным. Действительно, сформулированная на изопространстве над изополем, временная эволюция  $\hat{U}$  изомеханики Гамильтона-Сантилли является изоканонической, то есть

$$\hat{U} \hat{\times} \hat{\omega} \hat{\times} \hat{U}^t \equiv \hat{\omega}. \quad (3.38)$$

Теперь мы приходим к инвариантности всей теории, не говоря уже об изоединице и численных результатах, в чем предлагается удостовериться читателю.

### 3.2.14 Простая конструкция классической генохимии

Расширенная генохимия может быть полностью сконструирована через использование двух неканонических преобразований [7]

$$U \times \omega \times U^t \neq \omega, \quad W \times \omega \times W^t \neq \omega, \quad (3.39)$$

и идентификацию геноединиц

$$\hat{I}_6^> = U \times W^t, \quad \hat{I}_6^< = W \times U^t = (\hat{I}_6^>)^t. \quad (3.40)$$

Приложение преобразования  $U \times W^t$  ко всей обычной гамильтоновой механике производит геномеханику для движения вперед во времени, включая геночисла  $\hat{n}^> = U \times n \times W^t = n \times \hat{I}_6^>$  для движения вперед, генопространства, геноуравнения и т.д., как предлагается проверить читателю [7].

Схожим образом, использование сопряженного преобразования  $W \times U^t$  ко всей обычной гамильтоновой механике дает геномеханику для движения назад во времени.



### 3.2.15 Инвариантность классической генохимии

Легко видеть, что геноуравнения не инвариантны относительно обычных канонических или неканонических преобразований. Однако, должным образом сформулированные на генопространствах над генополями, временные эволюции для движений вперед и назад во времени являются индивидуально инвариантными, так как обуславливают геноканонические преобразования, например, удовлетворяют соответствующим правилам:

$$\hat{U} > \hat{\omega}^> > \hat{W}^t \equiv \hat{\omega}^>, \quad (3.41a)$$

$$\hat{W} < \hat{\omega} < \hat{U}^t \equiv \hat{\omega}. \quad (3.41b)$$

Отсюда следуют индивидуальные инвариантности теорий, что предлагается проверить читателю.

### 3.2.16 Простая конструкция и инвариантность гипермеханики и изодуальной механики

Методы явного конструирования гипермеханики и изодуальной механики и их инвариантности являются простым расширением предыдущих методов. Их явное конструирование предлагается читателям, заинтересованным в аксиоматически последовательном и инвариантном изучении необратимости, начиная с классического уровня и продолжая затем до операторного уровня (см. подробности в [14] или монографии [6e]).

## 3.3 Операторные основы адронной химии

### 3.3.1 Введение

Наконец, мы снабжены всем необходимым для изложения основ *нерелятивистской адронной химии*, которая будет использоваться в следующих главах для конструирования новой модели молекулярных связей.

Эти операторные основы новой химии даются адронной механикой [6c,6d] специально сформулированной для химии, как это сделано в этом разделе. Мы будем обращать внимание главным образом на *изотопическую ветвь адронной химии*, называемую, для краткости, *операторной*

изохимией и только очерчивать элементы расширенных операторной генохимии и операторной гиперхимии, которые могут пригодиться в дальнейшем.

Для технического понимания этого раздела требуется знание Раздела 3.2. Математически более простое изложение представлено в следующем разделе. Пока не оговорено специально, все величины и операции, обозначаемые обычными символами  $A$ ,  $H$ ,  $\times$  и т.д., обозначают величины и операции на обычных гильбертовых пространствах над обычными полями. Все величины и символы типа  $\hat{A}$ ,  $\hat{H}$ ,  $\hat{\times}$  и т.д., определены на изогильбертовых пространствах над изополями. Схожим образом, все величины и операции типа  $\hat{A}^>$ ,  $\hat{H}^>$ ,  $>$  и т.д. определены на геногильбертовых пространствах с движением вперед во времени, над соответствующими генополями.

Отметим, что использование термина "операторный" в изо-, гено- и гипер-химии, иное чем "квантовый", вследствие различий между квантовой механикой и адронной механикой.

### 3.3.2 Простые изо-, гено-, гипер- и изодуальное квантования

Эффективным способом вывода основных динамических уравнений операторной изохимии является изотопия обычного отображения классических уравнений Гамильтона-Якоби в их операторные аналоги. Более строгие методы, такие как симплектическое квантование, в сущности, приводят к тем же операторным уравнениям.

Напомним, что *простейшее квантование* может быть выражено через следующее отображение канонического действия

$$A = \int_{t_1}^{t_2} (p_k \times dr^k - H \times dt) \rightarrow -i \times \hbar \times \ln |\psi\rangle, \quad (3.42)$$

при котором, обычные уравнения Гамильтона-Якоби отображаются в уравнения Шредингера,

$$-\partial_t A = H \rightarrow i \times \hbar \times \partial_t |\psi\rangle = H \times |\psi\rangle, \quad (3.43a)$$

$$\partial_k A = p_k \rightarrow -i \times \hbar \times \partial_k |\psi\rangle = p_k \times |\psi\rangle. \quad (3.43b)$$

Изоканоническое действие (3.19) очевидно отличается от обычного канонического действия, например, наличием производных более высокого порядка. Вследствие чего, вышеприведенное простейшее квантование не употребляется.

Здесь мы предлагаем следующее *простейшее изоквантование*, впервые введенное Анималу и Сантилли [8]

$$\hat{A} = \int_{t_1}^{t_2} [\hat{p}_k \hat{\times} \hat{d}x^k - \hat{H} \hat{\times} \hat{d}t] \rightarrow -i \times \hat{I} \times \ln |\hat{\psi}\rangle, \quad (3.44)$$

где  $\hat{i} = i \times \hat{I}$  и мы должны отметить, что  $\hat{i} \hat{\times} \hat{I} \times \ln |\hat{\psi}\rangle = i \times \text{isoln} |\hat{\psi}\rangle$ .

Использование изоуравнений Гамильтона-Якоби-Сантилли (3.21) приводит к следующим операторным уравнениям (записанным здесь для простейшего случая, в котором  $\hat{T}$  не имеет зависимости от  $r$ , но допускает зависимость от скоростей и производных более высоких степеней),

$$-\partial_t \hat{A} = \hat{H} \rightarrow i \times \hbar \times \partial_t |\hat{\psi}\rangle = \hat{H} \hat{\times} |\hat{\psi}\rangle = \hat{H} \times \hat{T} \times |\hat{\psi}\rangle, \quad (3.45a)$$

$$\hat{\partial}_k \hat{A} = \hat{p}_k \rightarrow -i \times \hbar \times \hat{\partial}_k |\hat{\psi}\rangle = \hat{p}_k \hat{\times} |\hat{\psi}\rangle = \hat{p}_k \times \hat{T} \times |\hat{\psi}\rangle, \quad (3.45b)$$

которые являются фундаментальными уравнениями *операторной изохимии*, как мы увидим в следующем разделе.

Расширение вышеприведенных результатов до простейшего геноквантования является элементарным:

$$\hat{A} = \int_{t_1}^{t_2} [\hat{p}_k > \hat{d}^> x^k - \hat{H} \hat{\times} \hat{d}t] \rightarrow -i \times \hat{I}^> \times \ln |\hat{\psi}^>\rangle. \quad (3.46)$$

Использование геноуравнений Гамильтона-Якоби-Сантилли (3.31) дает тогда следующие операторные уравнения:

$$-\partial_t \hat{A} = \hat{H} \rightarrow i \times \hbar \times \partial_t |\hat{\psi}^>\rangle = \hat{H} > |\hat{\psi}^>\rangle = \hat{H} \times \hat{T}^> \times |\hat{\psi}^>\rangle, \quad (3.47a)$$

$$\partial_k^> \hat{A} = \hat{p}_k \rightarrow -i \times \hbar \times \partial_k^> |\hat{\psi}^>\rangle = \hat{p}_k > |\hat{\psi}^>\rangle = \hat{p}_k \times \hat{T}^> \times |\hat{\psi}^>\rangle, \quad (3.47b)$$

и сопряженные к ним для движения назад во времени, которые являются фундаментальными уравнениями *операторной генохимии*, как мы увидим в следующем разделе.

Выводы *простейших гиперквантования и изодуального квантования* [7] оставляются заинтересованному читателю.

### 3.3.3 Структура операторной изохимии

Отметим весьма важный момент, касающийся изоуравнений Гамильтона-Якоби-Сантилли (3.23), а именно,  $\hat{\partial}\hat{A}/\hat{\partial}\hat{p}_k = 0$ . Действительно, из этих уравнений вытекает, что *собственные изофункции не зависят от импульса*,  $\hat{\partial}\hat{\psi}/\hat{\partial}\hat{p} = 0$ ,  $\hat{\psi} = \hat{\psi}(t, r)$ , как и в случае обычной квантовой механики. И наоборот, невозможность достижения согласованного операторного представления биркгоффовой механики, как было отмечено, следует из того, что соответствующие уравнения имеют тип  $\partial\hat{A}/\partial p_k = 0$ , поэтому подразумевается обобщение волновых функций с явной зависимостью от импульса,  $\psi = \psi(t, r, p)$ , чья трактовка, по множеству причин, лежит вне наших современных знаний.

Структура операторной изохимии по существу дается следующим (см. подробности и ссылки в Разделе 3.2):

1) Описание химических связей, а также замкнуто-изолированных систем вообще, делается через две величины: гамильтониан  $H(t, r, p) = p^2/2m + V(r, p)$ , используемый для воспроизведения всех дальнедействующих взаимодействий выводимых из потенциала  $V$ , и изоединицу,

$$\hat{I} = \hat{I}(t, r, p, \psi, \nabla\psi, \dots),$$

используемую для воспроизведения всех нелинейных, нелокальных и непотенциально-негамильтоновых сил и эффектов. Явная форма гамильтониана это та, что обычно используется в квантовой химии [2]. Явная форма изоединицы зависит от конкретного случая. Общее выражение для спиновых частиц с точечным зарядом (таких как электрон) дается двумя величинами

$$H(t, r, p) = p^2/2m + V(r, p), \quad (3.48a)$$

$$\hat{I} = \exp \left[ N \int dv \psi_{\downarrow}^{\dagger}(r) \psi_{\uparrow}(r) \right], \quad (3.48b)$$

где первая величина используется для воспроизведения обычных взаимодействий, а вторая величина – для воспроизведения глубокого волнового перекрытия валентных электронов. Дополнительно, явные выражения изоединиц в химии будут представлены в последующих главах.

2) Поднятие мультипликативной единицы  $I > 0 \rightarrow \hat{I} = 1/\hat{T} > 0$ , которое требует реконструкции всей теории в такую форму, чтобы содержал  $\hat{I}$  как корректную левую и правую единицу на всех уровнях изучения, включая числа и углы, обычные и специальные функции, дифференциальное

и интегральное исчисление, метрические и гильбертовы пространства, алгебры и группы и т.д., без каких-либо исключений, известных автору. Эта реконструкция является изотопической в смысле сохранения аксиом. В частности, важным является сохранение всех обычных квантовых законов, как показано ниже.

3) Математическая структура, характеризуемая [7]:

3а) изополем  $\hat{\mathbb{C}} = \hat{\mathbb{C}}(\hat{c}, +, \hat{\times})$  с *изоединицей*  $\hat{I} = 1/\hat{T} > 0$ , *изокомплексными числами* и связанным с ними *изопроизведением*

$$\begin{aligned} \hat{c} = c \times \hat{I} &= (n_1 + i \times n_2) \times \hat{I}, & \hat{c} \hat{\times} \hat{d} &= (c \times d) \times \hat{I}, \\ \hat{c}, \hat{d} \in \hat{\mathbb{C}}, & & c, d \in \mathbb{C}, \end{aligned} \quad (3.49)$$

изополем  $\hat{\mathbb{R}}(\hat{n}, +, \hat{\times})$  *изодействительных чисел*  $\hat{n} = n \times \hat{I}, n \in \mathbb{R}$ , как частным случаем предыдущего;

3б) *изогильбертовым пространством*  $\hat{\mathcal{H}}$  с *изосостояниями*  $|\hat{\psi}\rangle, |\hat{\phi}\rangle, \dots$ , *изовнутренним произведением* и *изонормировкой*

$$\langle \hat{\phi} | \hat{\times} | \hat{\psi} \rangle \times \hat{I} \in \hat{\mathbb{C}}, \quad \langle \hat{\psi} | \hat{\times} | \hat{\psi} \rangle = 1, \quad (3.50)$$

и связанной с ним теорией *изоунитарных операторов*;

3с) *изоевклидовым пространством*  $\hat{E}(\hat{r}, \hat{\delta}, \hat{\mathbb{R}})$  с *изокоординатами*, *изометрикой* и *изоинвариантами*, соответственно,

$$\hat{r} = \{r^k\} \times \hat{I}, \quad \hat{\delta} = \hat{T}(t, r, p, \psi, \nabla\psi, \dots) \times \delta, \quad \delta = \text{Diag.}(1, 1, 1), \quad (3.51)$$

$$\hat{r}^{\hat{2}} = (r^i \times \hat{\delta}_{ij} \times r^j) \times \hat{I} \in \hat{\mathbb{R}};$$

3д) *изодефференциальным исчислением* и *изофункциональным анализом* (см. Раздел 3.2) с обращением к формам (2.13);

3е) *изотеорией Ли-Сантилли* с *изоассоциативной обертывающей алгеброй*  $\hat{\xi}$  операторов  $\hat{A}, \hat{B}, \dots$ , с *изоединицей*  $\hat{I}$ , *изоассоциативным произведением*  $\hat{A} \hat{\times} \hat{B} = \hat{A} \times \hat{T} \times \hat{B}$ , *изоалгеброй Ли-Сантилли со скобками* и *изоэкспоненцированием*

$$[\hat{A}; \hat{B}] = \hat{A} \hat{\times} \hat{B} - \hat{B} \hat{\times} \hat{A}, \quad (3.52a)$$

$$\hat{U} = e^X = (e^{X \times \hat{T}}) \times \hat{I} = \hat{I} \times (e^{\hat{T} \times X}), \quad X = X^\dagger, \quad (3.52b)$$

и связанными с ними *изосимметриями* с *характеристическими группами* *изоунитарных преобразований* на  $\hat{\mathcal{H}}$  над  $\hat{\mathbb{C}}$ ,

$$\hat{U} \hat{\times} \hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger \hat{\times} \hat{U} = \hat{I}. \quad (3.53)$$

Заметим, что квантовая химия представляется идентично и во всей полноте как частный случай, каждый раз, когда изоединица  $\hat{I}$  сводится к обычной квантовой единице  $I$ . В этом смысле изохимия является *покрывающей* квантовой химии.

Более того, на коротких расстояниях, каждый раз, когда волновое перекрытие становится ощутимым, изохимия является единственно применимой. Как результат, все реализации изоединицы ограничены условиями положительной определенности, допускающей  $I$  как частный случай, и требованием  $\lim_{r \rightarrow \infty} \hat{I} = I$ .

Заметим, что *составные изохимические системы*, такие как *изолекулы*, воспроизводятся через тензорное произведение вышеуказанных структур. Лучше всего, это может быть сделано через идентификацию в первую очередь *полной изоединицы, полных изополей, полных изогильбертовых пространств* и т.д.,

$$\hat{I}_{\text{tot}} = \hat{I}_1 \times \hat{I}_2 \times \dots, \quad \hat{C}_{\text{tot}} = \hat{C}_1 \times \hat{C}_2 \times \dots, \quad \hat{\mathcal{H}}_{\text{tot}} = \hat{\mathcal{H}}_1 \times \hat{\mathcal{H}}_2 \times \dots \quad (3.54)$$

Заметим также, что некоторые единицы, поля и гильбертовы пространства в вышеупомянутых тензорных произведениях могут быть *обычными*, а именно, составные структуры могут подразумевать *локально-потенциальные далекодействующие взаимодействия* (например кулоновского типа), которые требуют обязательной трактовки через *обычную* квантовую механику и *нелокально-непотенциальные короткодействующие взаимодействия* (например при глубоком волновом перекрытии), которые требуют использования операторной изохимии.

Вышеуказанная смесь квантовых и адронных компонентов имеет место в нашей изотопической модели химических связей, представленной в следующих главах. Такая смесь допускается тем фактом, что обе механики имеют те же аксиомы и физические законы и могут использоваться совместно, поскольку они воспроизводят эффекты, связанные с далекодействием и короткодействием, соответственно. Эквивалентно, смесь позволяет произвольностью изоединицы, которая, в этом случае, допускает обычную квантовую единицу  $I$  как частный случай.

### 3.3.4 Основные уравнения операторной изохимии

Использование простейшего изоквантования, представленного в Разделе 3.3, и математической структуры из предыдущего раздела позволяет формулировку следующих основных *изошредингеровских уравнений*

[7],

$$\hat{i} \hat{\times} \hat{\partial}_t |\hat{\psi}\rangle = \hat{H} \hat{\times} |\hat{\psi}\rangle = \hat{H} \times \hat{T} \times |\hat{\psi}\rangle = \hat{E} \hat{\times} |\hat{\psi}\rangle = E \times |\hat{\psi}\rangle, \quad (3.55a)$$

$$\hat{p}_k \hat{\times} |\hat{\psi}\rangle = \hat{p}_k \times \hat{T} \times |\hat{\psi}\rangle - \hat{i} \hat{\times} \hat{\partial}_k |\hat{\psi}\rangle = -i \times \hat{T}_k^i \times \nabla_i |\hat{\psi}\rangle, \quad (3.55b)$$

$$|\hat{\psi}(\hat{t})\rangle = \hat{U} \hat{\times} |\hat{\psi}(\hat{0})\rangle = \{e^{i\hat{H}\hat{\times}\hat{t}}\} \hat{\times} |\hat{\psi}(\hat{0})\rangle, \quad (3.55c)$$

с соответствующими изогейзенберговскими уравнениями [7],

$$\hat{A}(\hat{t}) = \hat{U} \hat{\times} \hat{A}(\hat{0}) \hat{\times} \hat{U}^\dagger = \{e^{i\hat{H}\hat{\times}\hat{t}}\} \hat{\times} \hat{A}(\hat{0}) \hat{\times} \{e^{-i\hat{H}\hat{\times}\hat{t}}\}, \quad (3.56a)$$

$$\hat{i} \hat{\times} \hat{d}\hat{A} / \hat{d}\hat{T} = [\hat{A}; \hat{H}] = \hat{A} \hat{\times} \hat{H} - \hat{H} \hat{\times} \hat{A} = \hat{A} \times \hat{T} \times \hat{H} - \hat{H} \times \hat{T} \times \hat{A}, \quad (3.56b)$$

$$[\hat{b}^\mu; \hat{b}^\nu] = \hat{i} \hat{\times} \hat{\omega}^{\mu\nu} = i \times \omega^{\mu\nu} \times \hat{I}_6, \quad \hat{b} = (\hat{r}^k, \hat{p}_k). \quad (3.56c)$$

Очевидно, что изогейзенберговские уравнения в их инфинитезимальной и экспоненцированной форме являются реализацией изотеории Ли-Сантilli (Раздел 3.2), которая, следовательно, является алгебраической и групповой теоретической структурой операторной изохимии.

Заметим, что уравнения (3.55) и (3.56) автоматически ставят вопрос о необходимости временной изоединицы  $\hat{I}_t(t, r, \psi, \dots) = \hat{T}_t > 0$  для характеристики временного изодифференциала  $\hat{d}\hat{t} = \hat{I}_t \times dt$  и изопроизводной  $\hat{\partial}_t = \hat{T}_t \times \partial_t$ . Заметим также, что  $\omega^{\mu\nu}$  в уравнениях (3.46b) является обычным тензором Ли, а именно, тот же тензор появляется в обычных канонических коммутационных правилах, поэтому подтверждается сохраняющий аксиомы характер изохимии.

"Непосредственная универсальность" основных уравнений (3.55) и (3.56) должна иметься в виду и сравниваться с ограниченными возможностями современных моделей в химии. Более конкретно, последние модели чисто гамильтоновы и поэтому, они могут воспроизводить только линейные, локальные и потенциальные системы. И наоборот, мы можем записать (3.55a) в явной форме

$$\begin{aligned} \hat{i} \hat{\times} \hat{\partial}_t \hat{\psi} &= i \times \hat{I}_t \times \partial_t |\hat{\psi}\rangle = \hat{H} \hat{\times} |\hat{\psi}\rangle = \hat{H} \times \hat{T} \times |\hat{\psi}\rangle = \\ &= \{\hat{p}_k \times \hat{p}_k / 2 \hat{\times} \hat{m} + \hat{U}_k(\hat{t}, \hat{r}) \hat{\times} \hat{v}^k + \\ &+ \hat{U}_0(\hat{t}, \hat{r})\} \times \hat{T}(\hat{t}, \hat{r}, \hat{p}, \hat{\psi}, \nabla \psi, \dots) \times |\hat{\psi}(\hat{t}, \hat{r})\rangle = \\ &= \hat{E} \hat{\times} |\hat{\psi}(t, \hat{x})\rangle = E \times |\hat{\psi}(\hat{t}, \hat{x})\rangle, \end{aligned} \quad (3.57)$$

что показывает способность воспроизведения всех бесконечно возможных линейных и нелинейных, локальных и нелокальных, а также потенциальных и непотенциальных систем с сохранением полной энергии (универсальность) непосредственно в системе отсчета наблюдателя (непосредственная универсальность).

Изогейзенберговские уравнения (4.56a) были впервые сформулированы Сантилли [9] как основная структура предложенной адронной механики, совместно с основополагающими изотопиями теории Ли (Раздел 3.2). Изошредингеровские уравнения (3.55a) были сформулированы Сантилли [10a], Мигнани [10b] и Миунгом и Сантилли [11] в изогильбертовых пространствах.

Согласованная формулировка изоимпульса (3.55b) не была сформулирована в течении двух десятилетий, поэтому откладывалось завершение конструкции адронной механики, также как и ее практическое применение. Согласованная и инвариантная форма (3.55b) с последующими изоканоническими коммутационными правилами (3.56b) была впервые определена Сантилли в работе [7] благодаря открытию изодифференциального исчисления в той же работе.

### 3.3.5 Сохранение законов квантовой физики

Как можно видеть, фундаментальным предположением изоквантования является поднятие (лифтинг) основной единицы квантовой химии, постоянной Планка  $\hbar$ , в матрицу  $\hat{I}$  с нелинейными, интегро-дифференциальными элементами, которые также зависят от волновых функций и их производных

$$\hbar = I > 0 \rightarrow \hat{I} = \hat{I}(t, r, p, \psi, \hat{\psi}, \dots) = \hat{I}^\dagger > 0. \quad (3.58)$$

Следует заметить, что вышеуказанное обобщение является исключительно *внутренним*, в рассматриваемой системе, так как внешние измерения *изоождаемых значений и изособственных значений изоединицы тождественно дают постоянную Планка*,

$$\langle \hat{I} \rangle = \frac{\langle \hat{\psi} | \hat{I} \hat{\psi} \rangle}{\langle \hat{\psi} | \hat{\psi} \rangle} = 1 = \hbar, \quad (3.59a)$$

$$\hat{I} \hat{\psi} = \hat{I}^{-1} \times \hat{I} \times \hat{\psi} = 1 \times \hat{\psi} = \hat{\psi}. \quad (3.59b)$$



Более того, единица является фундаментальным инвариантом изохимии, поэтому сохраняются все аксиомы обычной единицы  $I = \hbar$ , например,

$$\hat{I}^n = \hat{I} \hat{\times} \hat{I} \hat{\times} \dots \hat{\times} \hat{I} \equiv \hat{I}, \quad (3.60a)$$

$$\hat{I}^{\frac{1}{2}} \equiv \hat{I}, \quad (3.60b)$$

$$\hat{i} \hat{\times} \hat{d}\hat{I} \hat{\times} \hat{d}\hat{t} = [\hat{I}, \hat{H}] = \hat{I} \hat{\times} \hat{H} - \hat{H} \hat{\times} \hat{I} \equiv 0. \quad (3.60c)$$

Несмотря на их очевидно обобщенную структуру, уравнения (3.55) и (3.56) сохраняют обычные квантово-механические законы при нелинейных, нелокальных и непотенциальных взаимодействиях [7].

Начнем с того, что сохранение принципа неопределенности Гейзенберга может быть легко выведено из изокмутационных правил (3.56с):

$$\Delta x^k \times \Delta p_k \geq \frac{1}{2} \times \langle [\hat{x}^k, \hat{p}_k] \rangle = \frac{1}{2}. \quad (3.61)$$

Чтобы увидеть сохранение принципа запрета Паули, напомним, что правильное (двумерное) воспроизведение группы SU(2) характеризуется обычными матрицами Паули  $\sigma_k$  с известными правилами коммутации и собственными значениями на  $\mathcal{H}$  над  $\mathbb{C}$ ,

$$[\sigma_i, \sigma_j] = \sigma_i \times \sigma_j - \sigma_j \times \sigma_i = 2 \times i \varepsilon_{ijk} \times \sigma_k, \quad (3.62a)$$

$$\sigma^2 \times |\psi\rangle = \sigma_k \times \sigma^k \times |\psi\rangle = 3 \times |\psi\rangle, \quad (3.62b)$$

$$\sigma_3 \times |\psi\rangle = \pm 1 \times |\psi\rangle. \quad (3.62c)$$

Изохимия требует конструирования неунитарных представлений матриц Паули, которые, для диагональных изоединиц, могут быть записаны в виде (см. также Раздел 3.3.6)

$$\hat{\sigma}_k = U \times \sigma_k \times U^\dagger, \quad U \times U^\dagger = \hat{I} \neq I, \quad (3.63a)$$

$$U = \begin{pmatrix} i \times m_1 & 0 \\ 0 & i \times m_2 \end{pmatrix}, \quad U^\dagger = \begin{pmatrix} -i \times m_1 & 0 \\ 0 & -i \times m_2 \end{pmatrix}, \quad (3.63b)$$

$$\hat{I} = \begin{pmatrix} m_1^2 & 0 \\ 0 & m_2^2 \end{pmatrix}, \quad \hat{T} = \begin{pmatrix} m_1^{-2} & 0 \\ 0 & m_2^{-2} \end{pmatrix},$$

где  $m$  это хорошо определенные, нигде не нулевые функции, приводящие к регулярным изоматрицам Паули, впервые полученным Сантilli [15]

$$\hat{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & m_1^2 \\ m_2^2 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \times m_1^2 \\ i \times m_2^2 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} m_1^2 & 0 \\ 0 & m_2^2 \end{pmatrix}. \quad (3.64)$$

Другая реализация дается *недиагональными унитарными преобразованиями* [*loc. cit.*],

$$\begin{aligned} U &= \begin{pmatrix} 0 & m_1 \\ m_2 & 0 \end{pmatrix}, & U^\dagger &= \begin{pmatrix} 0 & m_2 \\ m_1 & 0 \end{pmatrix}, \\ \hat{I} &= \begin{pmatrix} m_1^2 & 0 \\ 0 & m_2^2 \end{pmatrix}, & \hat{T} &= \begin{pmatrix} m_1^{-2} & 0 \\ 0 & m_2^{-2} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.65)$$

с соответствующими *регулярными изоматрицами Паули*,

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_1 &= \begin{pmatrix} 0 & m_1 \times m_2 \\ m_1 \times m_2 & 0 \end{pmatrix}, & \hat{\sigma}_2 &= \begin{pmatrix} 0 & -i \times m_1 \times m_2 \\ i \times m_1 \times m_2 & 0 \end{pmatrix}, \\ \hat{\sigma}_3 &= \begin{pmatrix} m_1^2 & 0 \\ 0 & m_2^2 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.66)$$

или более общими реализациями с эрмитовыми *недиагональными* *изо-*  
*единицами*  $\hat{I}$  [15].

Все *изоматрицы Паули* вышеупомянутого *регулярного класса* удовлетворяют следующим *изокоммутационным* *правилам* и *уравнениям* на *собственные значения* на  $\hat{\mathcal{H}}$  над  $\hat{\mathbb{C}}$

$$[\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j] = \hat{\sigma}_i \times \hat{T} \times \hat{\sigma}_j - \hat{\sigma}_j \times \hat{T} \times \hat{\sigma}_i = 2 \times i \times \varepsilon_{ijk} \times \hat{\sigma}_k, \quad (3.67a)$$

$$\hat{\sigma}_i^2 \hat{\times} |\hat{\psi}\rangle = (\hat{\sigma}_1 \hat{\times} \hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_2 \hat{\times} \hat{\sigma}_2 + \hat{\sigma}_3 \hat{\times} \hat{\sigma}_3) \hat{\times} |\hat{\psi}\rangle = 3 \times |\hat{\psi}\rangle, \quad (3.67b)$$

$$\hat{\sigma}_3 \hat{\times} |\hat{\psi}\rangle = \pm 1 \times |\hat{\psi}\rangle, \quad (3.67c)$$

которые сохраняют *обычный спин*  $1/2$ , поэтому подразумевают сохранение в *изохимии* *статистики Ферми-Дирака* и *принципа запрета Паули*.

Для *полноты* следует отметить, что *воспроизведение* *изотопической группы*  $S\hat{U}(2)$  также допускает *иррегулярные изовоспроизведения*, которые больше не сохраняют *обычные значения спина* [15]. Последние *структуры* изучаются для *охарактеризования спина* при наиболее *экстремальных условиях*, таких как для *протонов* и *электронов* в *ядрах коллапсирующих звезд* и, следовательно, они не имеют отношения к *изохимии*.

*Сохранение принципа суперпозиции* при *нелинейных взаимодействиях* имеет место из-за *реконструкции линейности* на *изопространстве* над *изополями*, поэтому *возвращается применимость теории* к *составным системам*.

Принимая во внимание последнее, напомним, что обычные нелинейные модели,

$$H(t, x, p, \psi, \dots) \times |\psi\rangle = E \times |\psi\rangle, \quad (3.68)$$

нарушают принцип суперпозиции и имеют другие недостатки (см. Раздел 1.7). Поэтому, они не могут применяться для изучения составных систем таких как, например, молекулы. Все эти модели могут быть *тождественно* переформулированы в терминах изотопической техники через внедрение всех нелинейных членов в изотопический элемент,

$$H(t, x, p, \psi, \dots) \times |\psi\rangle \equiv H_0(t, x, p) \times \hat{T}(\psi, \dots) \times |\psi\rangle = E \times |\psi\rangle, \quad (3.69)$$

с возвращением полной действительности принципа суперпозиции в изопространствах над изополями с последующим применением к составным системам.

Сохранение причинности следует из одномерной изоунитарной групповой структуры временной эволюции (3.56а) (которая изоморфна обычной); сохранение законов вероятности следует из сохранения аксиом единицы и ее инвариантного разложения, как отмечено ранее; из этого всего следует сохранение других квантовых законов.

Те же результаты также могут быть получены исходя из того факта, что операторная изохимия, на абстрактном уровне, совпадает с квантовой химией по концепции и конструкции. Как результат, адронная и квантовая версии химии являются *различными реализациями одних и тех же абстрактных аксиом и физических законов*.

Заметим, что сохранение обычных квантовых законов при нелинейных, нелокальных и непотенциальных взаимодействиях принципиально зависит от возможности изоматематики реконструировать линейность, локальность и каноническую унитарность на изопространствах над изополями.

Сохранение обычных физических законов изотопической ветвью адронной механики впервые было отмечено Сантилли в работе [12]. Следует заметить, что те же квантовые законы, в общем *не* сохраняются расширенной геномеханикой, очевидно потому, что последняя должна воспроизводиться при предположении законов *не-сохранения* и других *отклонений* от обычных квантовых основ.

С пониманием того, что теория не обладает классическим детерминизмом, очевидно, что изохимия обеспечивает разнообразные "завершения" квантовой химии согласно знаменитому ЭПР аргументу [1], так как:

1) Изохимия "пополняет" квантовую химию через добавление непотенциально-негамильтоновых взаимодействий воспроизводимых неунитарными преобразованиями.

2) Изохимия "пополняет" квантовую химию через наиболее широкую из возможных (не ориентированную) реализацию ассоциативного произведения в изоассоциативной форме.

3) Изохимия "пополняет" квантовую химию в ее классическом представлении.

Действительно, как доказано хорошо известными процедурами, основанными на *неравенствах Белла*, квантовая химия не допускает непосредственных классических представлений во множестве расчетов. И наоборот, как детально изучено в работах [15], неунитарные представления неравенств Белла допускают действительно непосредственные и осмысленные классические пределы, которые не существуют для обычных формулировок.

Схожим образом очевидно, что изохимия представляет собой специфичную и конкретную реализацию "скрытых переменных"  $\lambda$ , которые явно реализуются изотопическим элементом  $\lambda = \hat{T}$  и действительно превращаются в операторные скрытые переменные. "Скрытый" характер реализации выражается тем фактом, что скрытые переменные включены в единицу и произведение теории. Действительно, мы можем записать изошредингеровское уравнение  $\hat{H} \hat{\times} |\hat{\psi}\rangle = \hat{H} \times \lambda \times |\hat{\psi}\rangle = E \times |\hat{\psi}\rangle, \lambda = \hat{T}$ . Как результат, "переменная"  $\lambda$  (обобщенная теперь до оператора  $\hat{T}$ ) является "скрытой" в модульном ассоциативном произведении гамильтониана  $\hat{H}$  и состояния  $|\hat{\psi}\rangle$ .

Для изучения вышеупомянутого и соответствующих следствий, мы отсылаем заинтересованного читателя к работам [15] и цитированной литературе.

### 3.3.6 Простая конструкция операторной изохимии

Несмотря на *математическую эквивалентность*, следует отметить, что химия и изохимия *физически неэквивалентны*, или, другими словами, изохимия находится вне классов эквивалентности химии, так как первая является *неунитарным образом* последней.

Как мы увидим в следующих главах, вышеуказанное свойство объясняет причины явного конструирования новой модели изохимических связей из обычной модели. Главным требованием является идентификация

негамильтоновых эффектов, которые желательно воспроизвести и которые, в силу негамильтоновости, *неунитарны*. Результирующее неунитарное преобразование тогда принимается как фундаментальная пространственная изоединица новой изохимии [12]

$$U \times U^\dagger = \hat{I} \neq I, \quad (3.70)$$

относительно этого преобразования мы получаем следующие поднятия (лифтинги): квантовой единицы в изоединицу,

$$I \rightarrow \hat{I} = U \times I \times U^\dagger; \quad (3.71)$$

чисел в изочисла,

$$a \rightarrow \hat{a} = U \times a \times U^\dagger = a \times (U \times U^\dagger) = a \times \hat{I}; \quad a = n, c, \quad (3.72)$$

ассоциативных произведений  $A \times B$  в изоассоциативную форму с корректным изотопическим элементом,

$$A \times B \rightarrow \hat{A} \hat{\times} \hat{B} = \hat{A} \times \hat{T} \times \hat{B}, \quad (3.73a)$$

$$\hat{A} = U \times A \times U^\dagger, \hat{B} = U \times B \times U^\dagger, \hat{T} = (U \times U^\dagger)^{-1} = T^\dagger; \quad (3.73b)$$

уравнения Шредингера в изошредингеровское уравнение

$$\begin{aligned} H \times |\psi\rangle = E \times |\psi\rangle &\rightarrow U(H \times |\psi\rangle) = \\ &= (U \times H \times U^\dagger) \times (U \times U^\dagger)^{-1} \times (U \times |\psi\rangle) = \\ &= \hat{H} \times \hat{T} \times |\hat{\psi}\rangle = \hat{H} \hat{\times} |\hat{\psi}\rangle; \end{aligned} \quad (3.74a)$$

уравнений Гейзенберга в их изогейзенберговское обобщение

$$\begin{aligned} i \times dA/dt - A \times H - H \times A = 0 &\rightarrow \\ \rightarrow U \times (i \times dA/dt) \times U^\dagger - U(A \times H - H \times A) \times U^\dagger &= \\ = \hat{i} \hat{\times} d\hat{A}/dt - \hat{A} \hat{\times} \hat{H} - \hat{H} \hat{\times} \hat{A} = 0; \end{aligned} \quad (3.74b)$$

гильбертова произведения в его изовнутреннюю форму

$$\begin{aligned} \langle \psi | \times | \psi \rangle &\rightarrow U \times \langle \psi | \times | \psi \rangle \times U^\dagger = \\ = (\langle \psi | \times U^\dagger) \times (U \times U)^{-1} \times (U \times | \psi \rangle) \times (U \times U)^{-1} &= \langle \hat{\psi} | \hat{\times} | \hat{\psi} \rangle \times \hat{I}; \end{aligned} \quad (3.74c)$$

канонических степенных рядов в их расширенную изотопическую форму

$$\begin{aligned}
 A(k) &= A(0) + k \times [A, H] + k^2 \times [[A, H], H] + \dots \rightarrow U \times A(k) \times U^\dagger = \\
 &= U \times \left[ A(0) + k \times [A, H] + k^2 \times [[A, H], H] + \dots \right] \times U^\dagger = \\
 &= \hat{A}(\hat{k}) = \hat{A}(0) + \hat{k} \hat{\times} [\hat{A}; \hat{H}] + \hat{k}^2 \hat{\times} [[\hat{A}; \hat{H}]; \hat{H}] + \dots, \\
 &k > 1, \quad |\hat{T}| \ll 1;
 \end{aligned} \tag{3.74d}$$

предингеровского пертурбационного разложения в его изотопическое покрытие (где принято обычное суммирование по состояниям  $p \neq n$ )

$$\begin{aligned}
 E(k) &= E(0) + k \times \langle \psi | \times V \times | \psi \rangle + k^2 \frac{|\langle \psi | \times V \times | \psi \rangle|^2}{E_{0n} - E_{0p}} + \dots \rightarrow \\
 \rightarrow U \times E(k) \times U^\dagger &= U \times \left[ E(0) + k \times \langle \psi | \times V \times | \psi \rangle + \dots \right] \times U^\dagger = \\
 &= \hat{E}(\hat{k}) = \hat{E}(0) + \hat{k} \hat{\times} \langle \hat{\psi} | \times \hat{T} \times \hat{V} \times \hat{T} \times | \hat{\psi} \rangle + \dots, \\
 &k > 1, \quad |\hat{T}| \ll 1;
 \end{aligned} \tag{3.74e}$$

и т.д. Все оставленные аспекты операторной химии могут быть выведены тем же образом, включая изоэкспоненту, изологарифм, изодетерминант, изослед, изоспециальные функции и преобразования и т.д.

Заметим, что изотопические образы обычных пертурбативных разложений, как в иллюстрирующих уравнениях (3.74d) и (3.74e), имеют далеко идущие следствия для химии. Напомним из Раздела 1.3, что одной из неприятных проблем современной химии является чрезмерное компьютерное время, необходимое для расчетов составных молекулярных структур, несмотря на огромные возможности самых современных компьютеров. Этот недостаток решается изохимией настолько полно, что время вычислений в сущности сводится ко времени выбора подходящей единицы. Как явное подтверждение, в Главах 4, 5 и 6 мы представим изохимические модели молекулярных структур, чьи компьютерные расчеты занимают времени по крайней мере в 1000 раз меньше, чем это требовала бы квантовая химия для вычисления той же величины.

Это замечательное свойство является следствием того факта, иллюстрированного поднятиями (3.74d) и (3.74e), что любые обычные ряды, которые являются слабо (поэтому медленно) сходящимися, могут быть превращены изотопиями в ряды так сильно (поэтому быстро) сходящиеся как это желательно, при единственном условии, что абсолютное

(или среднее) значение изотопического элемента (изоединицы) достаточно меньше (больше) единицы,  $|\hat{T}| \ll 1$  ( $|\hat{T}| \gg 1$ ) (см. монографию [6d]).

Более того, даже расходящиеся ряды, после вышеупомянутых изотопий, могут принимать быстро сходящиеся формы. В самом деле, было доказано, после первого же предложения построить адронную механику [9] (см. опять [6d] для деталей), что сходимость пертурбативной теории сильных взаимодействий может зависеть от природы математики положенной в основу, использовать же ассоциативное произведение  $A \times B$  учат еще со школьных лет.

Действительно, рассмотрим уравнения (3.74d) и (3.74e) для  $k > 1$ , в этом случае обычные пертурбативные ряды расходятся как в случае сильных взаимодействий. Рассмотрим теперь изотопические ряды для частного случая в котором  $|\hat{T}| = 1/k$ . Тогда легко видеть, что изотопические образы тех же рядов (3.74d) и (3.74e) становятся сходящимися. Это также иллюстрирует, что пертурбативные ряды, которые сходятся медленно, легко превратить в ряды, сходящиеся по желанию быстро, подходящим выбором значения  $|\hat{T}|$  достаточно меньшей чем единица.

Как мы увидим, все реализации изоединицы приводят к удовлетворению вышеупомянутого фундаментального требования, поэтому гарантируется сходимость изопертурбативной теории так быстро как это желается. Довольно замечательно, как мы увидим в Главах 4 и 5, что значение  $|\hat{T}| \gg 1$ , необходимое для быстрой сходимости, иное чем было принято, появляется довольно естественно из характеристик молекулярных структур.

Заметим, что вышеуказанная конструкция при помощи неунитарных преобразований является корректным операторным подобием выводимости классической изогамильтоновой механики из обычной формы посредством неканонических преобразований (Раздел 3.2.12).

Конструирование адронной механики посредством неунитарных преобразований квантовой механики было впервые предложено Сантилли в оригинальной работе [5e] и затем разработана в последующих статьях (последние результаты см. в [12]).

### 3.3.7 Инвариантность операторной изохимии

Важно видеть, что совершенно аналогично классическому случаю (Раздел 3.2.13), операторная изохимия действительно инвариантна относительно наиболее общих нелинейных, нелокальных и негамильтоново-

неунитарных преобразований, то есть, вновь, инвариантность трактуется через изоматематику. Действительно, любое данное неунитарное преобразование  $U \times U^\dagger \neq I$  всегда может быть представлено в виде [12]

$$U = \hat{U} \times \hat{T}^{1/2}, \quad (3.75)$$

относительно которой, неунитарные преобразования на  $\mathcal{H}$  над  $\mathbb{C}$  являются тождественно переформулированными как изоунитарные преобразования на изогильбертовом пространстве  $\hat{\mathcal{H}}$  над изополем  $\hat{\mathbb{C}}$ ,

$$U \times U^\dagger \equiv \hat{U} \hat{\times} \hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger \hat{\times} \hat{U} = \hat{I}. \quad (3.76)$$

Тогда следует форм-инвариантность операторной изохимии относительно изоунитарных преобразований,

$$\hat{I} \rightarrow \hat{I}' = \hat{U} \hat{\times} \hat{I} \hat{\times} \hat{U}^\dagger \equiv \hat{I}, \hat{A} \hat{\times} \hat{B} \rightarrow \hat{U} \hat{\times} (\hat{A} \hat{\times} \hat{B}) \hat{\times} \hat{U}^\dagger = \hat{A}' \hat{\times} \hat{B}', \text{ etc.}, \quad (3.77a)$$

$$\begin{aligned} \hat{H} \hat{\times} |\hat{\psi}\rangle &= \hat{E} \hat{\times} |\hat{\psi}\rangle \rightarrow \hat{U} \hat{\times} \hat{H} \hat{\times} |\hat{\psi}\rangle = \\ &= (\hat{U} \hat{\times} \hat{H} \hat{\times} \hat{U}^\dagger) \hat{\times} (\hat{U} \hat{\times} |\hat{\psi}\rangle) = \hat{H}' \hat{\times} |\hat{\psi}'\rangle = \\ &= \hat{U} \hat{\times} \hat{E} \hat{\times} |\hat{\psi}\rangle = \hat{E} \hat{\times} \hat{U} \hat{\times} |\hat{\psi}\rangle = \hat{E} \hat{\times} |\hat{\psi}'\rangle, \end{aligned} \quad (3.77b)$$

где следует отметить сохранение числовых значений изоединицы, изопроизведений и изособственных значений, как необходимое для последовательного применения.

Заметим, что инвариантность квантовой химии сохраняется только для преобразований  $U \times U^\dagger = I$  с фиксированным  $I$ . Схожим образом, инвариантность изохимии сохраняется только для всех неунитарных преобразований, таких как  $\hat{U} \hat{\times} \hat{U}^\dagger = \hat{I}$  с фиксированным  $\hat{I}$ , а не для преобразования  $\hat{W} \hat{\times} \hat{W}^\dagger = \hat{I}' \neq \hat{I}$ , так как изменение изоединицы  $\hat{I}$  подразумевает переход к другой физической системе.

Форм-инвариантность адронной механики относительно изоунитарных преобразований впервые была изучена Сантилли в работе [12].

### 3.3.8 Гауссовские экранирования как частные случаи изохимии

В Разделе 1.3 мы напоминали, что закон Кулона является одним из фундаментальных инвариантов квантовой механики и квантовой химии,



как необходимое условие их физической согласованности. Действительно, этот закон инвариантен относительно любых возможных преобразований квантовой химии

$$F = 1/r^2 \rightarrow U \times (1/r^2) \times U^\dagger = 1/r^2, \quad U \times U^\dagger = I. \quad (3.78)$$

В Разделе 1.3 мы отмечали, что манипуляции с законом Кулона, проводимые в квантовой химии, например так называемые гауссовские экранирования, в надежде улучшить воспроизведение экспериментальных данных, обязательно требуют выхода за рамки основных аксиом "квантовой" химии. Действительно, такие экранирования требуют обязательного использования *неунитарных преобразований*, например, как в этом простом случае:

$$F = 1/r \rightarrow W \times (1/r) \times W^\dagger = e^{A \times r}/r, \quad W \times W^\dagger = e^{A \times r} \neq I. \quad (3.79)$$

Независимо от этого, если "экранированный кулоновский потенциал" принимается как потенциал гамильтониана, с унитарной временной эволюцией, сохранение "квантовой" химии является только видимым, так как такой экранированный кулоновский потенциал запрещает существование атома водорода, делает все электронные орбиты крайне нестабильными и препятствует самому существованию "кванта" энергии, который и дает название "квантовой" химии.

Используя анализ предыдущих разделов, легко видеть, что *все бесконечно возможные гауссовские экранирования кулоновского закона являются частными случаями изохимии*.

Действительно, их вывод является частным случаем конструирования изохимии через неунитарные преобразования, как показано в предыдущих секторах. Однако, чтобы избежать катастрофической несогласованности неунитарных теорий (Раздел 1.7), обязательно следует применить выбранное неунитарное преобразование ко всему формализму реальной "квантовой" химии, то есть без всякого экранирования вообще. Появляющаяся тогда теория есть именно операторная изохимия, как иллюстрируется преобразованием гамильтониана

$$U \times U^\dagger = \text{screening function} \neq I, \quad (3.80a)$$

$$\begin{aligned} U \times H \times U^\dagger &= U \times (p \times p/2 \times m + 1/r)U^\dagger = \\ &= \hat{p} \hat{\times} \hat{p} / 2 \hat{\times} \hat{m} + (1/r) \times (U \times U^\dagger) = \\ &= \hat{p}^2 / 2 \hat{\times} \hat{m} + \text{any desired function}. \end{aligned} \quad (3.80b)$$

В заключение, вместо доказательства несовершенства современных направлений на экранирование кулоновского закона, операторная изохимия подтверждает их пригодность, хотя проясняет, что на истинно научных основаниях, они не имеют отношения к "квантовой" химии, но являются частными случаями структурно более широкой операторной изохимии.

Схожая ситуация имеет место для вариационных методов, чьи волновые функции, как может быть легко доказано, не являются решениями чисто кулоновских уравнений, как в случае усеченного уравнения для трех тел  $H_2^+$  молекулярного иона. Из этого следует, что на строгих научных основаниях, эти волновые функции относятся к адронной химии.

Другими словами, волновые функции вариационной модели достигающие точного воспроизведения молекулярных данных через множество *ad hoc* параметров, как можно легко показать, не являются решениями уравнений Шредингера для той же структуры при точном выполнении квантово-химических аксиом, тривиально, потому что последние неточны и не соответствуют до 2% экспериментальным значениям. Однако, как мы увидим в Главах 3 и 4, изошредингеровские уравнения, для той же структуры, являются действительно точными до любого желаемого порядка. Это доказывает, что, как установлено выше, решения точных вариационных моделей являются точными решениями изохимии и, по определению, не квантовой химии.

### 3.3.9 Элементы операторной гено-, гипер- и изодуальной химии

В Главе 2 мы упомянули, что изоматематика является частным случаем расширенной *геноматематики*, которая, в свою очередь, является частным случаем еще более широкой *гиперматематики* [7].

Как отмечено ранее, изоматематика базируется на обобщенных единицах, которые несингулярны, действительны и эрмитовы, поэтому подразумевается *однозначное* обобщенное произведение,

$$\hat{I} = 1/\hat{T} = \hat{I}^\dagger, \quad A \hat{\times} B = A \times \hat{T} \times B = A \times \hat{T}^\dagger \times B, \quad \hat{T} \text{ фиксирован.} \quad (3.81)$$

Расширенная геноматематика характеризуется обобщенными единицами, называемыми *геноединицами*, которые также несингулярны и действительны, но *неэрмитовы* (например, полученные добавлением недиа-

гональных членов в данную действительную, диагональную изоединицу). Это подразумевает существование двух различных геноединиц, с последующей необходимостью упорядочения обобщенных правых и левых произведений, обычно обозначаемых следующим образом:

$$\hat{I}^> = 1/\hat{T}^>, \quad A > B = A \times \hat{T}^> \times B, \quad \hat{T}^> \text{ фиксирован,} \quad (3.82a)$$

$$\hat{I}^< = 1/\hat{T}^<, \quad A < B = A \times \hat{T}^< \times B, \quad \hat{T}^< \text{ фиксирован,} \quad (3.82b)$$

$$\hat{I}^> = (\hat{I}^<)^\dagger. \quad (3.82c)$$

Как результат, геноматематика характеризуется двумя отдельными изотопиями, по одному на каждое направление произведения, которые связаны эрмитовым сопряжением и предполагают воспроизведение двух направлений времени.

Основными уравнениями операторной генохимии являются геношредингеровские уравнения для движения вперед во времени

$$\begin{aligned} \hat{i} > \hat{\partial}_t^> |\hat{\psi}^>\rangle &= \hat{H} > |\hat{\psi}^>\rangle = \hat{H} \times \hat{T}^> \times |\hat{\psi}^>\rangle = \\ &= \hat{E} > |\hat{\psi}^>\rangle = E \times |\hat{\psi}^>\rangle, \end{aligned} \quad (3.83a)$$

$$\begin{aligned} \hat{p}_k > |\hat{\psi}^>\rangle &= \hat{p}_k \times \hat{T}^> \times |\hat{\psi}^>\rangle = \\ &= -\hat{i} > \hat{\partial}_k^> |\hat{\psi}^>\rangle = -i \times \hat{T}_k^{>i} \times \nabla_i |\hat{\psi}^>\rangle, \end{aligned} \quad (3.83b)$$

$$|\hat{\psi}(t)^>\rangle = \hat{U}^> > |\hat{\psi}(\hat{0})\rangle = \{e^{i \times \hat{H} \times \hat{T}^> \times t}\} \times |\hat{\psi}(\hat{0})\rangle, \quad (3.83c)$$

и сопряженные к ним геноуравнения для движения назад во времени

$$\langle \hat{\psi}(0) | \hat{\partial}_t^< \hat{i} = \langle \hat{\psi} | \hat{H} = \langle \hat{\psi} | \hat{E} = \langle \hat{\psi} | \times E', \quad (3.84a)$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{\psi}(t) | &= \langle \hat{\psi}(0) | \hat{U}^< = \langle \hat{\psi}(0) | \times e^{t \times \hat{T}^< \times H}, \langle \hat{\psi}(t) | \hat{p}_k = \\ &= \langle \hat{\psi}(0) | \times \hat{T}^< < p_k = -\langle \hat{\psi}(0) | \hat{\partial}_k^< \times i = -\langle \hat{\psi}(0) | \partial_i \times \hat{T}_k^< \times i, \end{aligned} \quad (3.84b)$$

$$\hat{T}^> = (\hat{T}^<)^\dagger, \quad (3.84c)$$

где величины, характеризующиеся символом  $> (<)$ , относятся к движению вперед (назад) во времени, и следует отметить различные генособственные значения  $E \neq E'$  для движений вперед и назад во времени (согласно различиям генотопических элементов).

Предыдущие уравнения характеризуют тогда следующие *геногейзенберговские уравнения* в ограниченной и инфинитезимальной формах

$$\hat{A}(\hat{t}) = \hat{U} > > \hat{A}(\hat{0}) < < \hat{U}^\dagger = \{e^{i \times \hat{H} \times \hat{T} > \times t}\} \times \hat{A}(\hat{0}) \times \{e^{-i \times \hat{t} \times < \hat{T} \times \hat{H}}\}, \quad (3.85a)$$

$$i \times \hat{d}\hat{A}/\hat{d}\hat{t} = (\hat{A}; \hat{H}) = A < \hat{H} - \hat{H} > \hat{A} = \hat{A} \times < \hat{T} \times \hat{H} - \hat{H} \times \hat{T} > \times \hat{A}, \quad (3.85b)$$

$$(\hat{b}^\mu; \hat{b}^\nu) = i \times \hat{\omega}^{\mu\nu} = i \times \omega^{\mu\nu} \times \hat{I}_6, \quad \hat{b} = (\hat{r}^k, \hat{p}_k). \quad (3.85c)$$

Операторная генохимия должна разрабатываться, для согласованности, с использованием геноматематики Главы 2, включая использование геночисел и генополей, генометрических и геногильбертовых пространств и т.д.

В этом случае, легко видеть, что *геноэрмитовость связанная с движением вперед во времени (или назад)* совпадает с обычной эрмитовостью. Как результат, *все величины являющиеся наблюдаемыми для обычной квантовой химии остаются наблюдаемыми для генохимии*. Это свойство позволяет получение *несохраняющихся наблюдаемых физических величин*, таких как несохраняющаяся энергия, несохраняющийся момент импульса и т.д., которое впервые достигнуто геноматематикой, так как все несохраняющиеся физические величины квантовой механики и квантовой химии являются, как известно, неэрмитовыми, поэтому ненаблюдаемыми.

Читателю, заинтересованному в изучении новой химии, предлагается разработать оставшиеся детали генохимии. Например, *геноожидаемые значения геноединиц покрывают обычную единицу*. Это подразумевает, что геномеханика является вторым "завершением" квантовой механики согласно историческому примеру Эйнштейна, Подольского и Розена.

Первая аксиоматически согласованная формулировка геномеханики была достигнута в работе [7], спустя 18 лет после оригинального предложения в работе [8].

Как изучено в Главе 2, расширенная *гиперматематика* имеет место, когда единицы образованы *упорядоченными наборами* несингулярных, действительных и несимметричных матриц или операторов, приводящими к соответственно упорядоченным многозначным правым и левым

произведениям, связанным эрмитовым сопряжением,

$$\begin{aligned} \hat{I}^{\triangleright} &= \{1/\hat{T}_1^{\triangleright}, 1/\hat{T}_2^{\triangleright}, \dots\}, \\ A > B &= A \times \hat{T}_1^{\triangleright} \times B + A \times \hat{T}_2^{\triangleright} \times B + \dots, \end{aligned} \quad (3.86a)$$

$$\begin{aligned} \hat{I}^{\triangleleft} &= \{1/\hat{T}_1^{\triangleleft}, 1/\hat{T}_2^{\triangleleft}, \dots\}, \\ A < B &= A \times \hat{T}_1^{\triangleleft} \times B + A \times \hat{T}_2^{\triangleleft} \times B + \dots, \end{aligned} \quad (3.86b)$$

$$\hat{I}^{\triangleright} = (\hat{I}^{\triangleleft})^{\dagger}. \quad (3.86c)$$

Основными динамическими уравнениями являются тогда уравнения (3.83)-(3.85), сформулированные в терминах гиперматематики (см. [6e, 7]).

*Изодуальная химия* является образом обычной квантовой химии при анти-изоморфном *изодуальном отображении* основных единицы и произведения

$$I \rightarrow I^d = -I, \quad (3.87a)$$

$$A \times B \rightarrow A \times^d B = A \times (-I) \times B, \quad (3.87b)$$

$$I \times A = A \times I = A \rightarrow I^d \times^d A = A \times^d I^d = A, \quad (3.87c)$$

и реконструкции всего математического формализма, таким образом, чтобы допустить  $I^d = -I$ , иное чем  $I$ , как корректную левую и правую единицу. Это подразумевает использование *изодуальных чисел, изодуальных пространств, изодуальных алгебр и т.д.*

*Изодуальные изо-, гено- и гипер-химии* являются антиизоморфными образами *изо-, гено- и гипер-химии*, соответственно, относительно *общего изодуального отображения* [14]

$$\hat{I}(r, p, \psi, \dots) \rightarrow \hat{I}^d = -I^{\dagger}(-r^{\dagger}, -p^{\dagger}, -\psi^{\dagger}, \dots), \quad (3.88a)$$

$$A \hat{\times} B = A \times \hat{T} \times B \rightarrow A \hat{\times}^d B = A \times \hat{T}^d \times B, \quad (3.88b)$$

$$\hat{I} \hat{\times} A = A \hat{\times} \hat{I} = A \rightarrow \hat{I}^d \hat{\times}^d A = A \hat{\times}^d \hat{I}^d = A. \quad (3.88c)$$

Читателю, заинтересованному в изучении адронной химии, предлагается сконструировать изодуальную *изо-, гено- и гипер-химию* во всех необходимых деталях через систематическое применение вышеприведенного отображения ко всем аспектам формализма.

### 3.3.10 Простая конструкция операторной гено-, гипер- и изодуальной химии

Как и в случае изохимии, представленной в Разделе 3.3.6, гено-, гипер- и изодуальная химия могут быть также полностью сконструированы через простые, но эффективные методы, достаточные для практических применений.

Напомним из Раздела 3.3.6, что изохимия может быть сконструирована через использование *одного* неунитарного преобразования, которое характеризует изоединицу  $U \times U^\dagger = \hat{I} \neq I$ . Расширенная генохимия может быть сконструирована через следующие *два* неунитарных преобразования [12, 13]:

$$U \times U^\dagger \neq I, W \times W^\dagger \neq I, \quad (3.89a)$$

$$U \times W^\dagger = \hat{I}^>, W \times U^\dagger = \hat{I}^<, \quad (3.89b)$$

при условии, что вышеприведенные преобразования вновь прикладываются ко всей теории для движения вперед во времени и, независимо, для движения назад.

Таким образом мы приходим к *геноединице для движения вперед, геночислам для движения вперед, генопроизведениям для движения вперед, геношредингеровскому уравнению для движения вперед и т.д.* [12, 13]

$$I \rightarrow \hat{I}^> = U \times I \times W^\dagger, \quad (3.90a)$$

$$n \rightarrow \hat{n}^> = U \times n \times W^\dagger = n \times \hat{I}^>, \quad (3.90b)$$

$$\begin{aligned} A \times B \rightarrow A' > B' &= U \times (A \times B) \times W^\dagger = \\ &= (U \times A \times W^\dagger) \times (U \times W^\dagger)^{-1} \times (U \times B \times W^\dagger), \end{aligned} \quad (3.90c)$$

$$\begin{aligned} H \times |\hat{\psi}\rangle &\rightarrow U \times (H \times |\hat{\psi}\rangle) = \\ &= (U \times H \times W^\dagger) \times (U \times W^\dagger)^{-1} \times (U \times |\hat{\psi}\rangle) = \\ &= \hat{H} \times \hat{I}^> \times |\hat{\psi}^>\rangle = \hat{H} > |\hat{\psi}^>\rangle, \end{aligned} \quad (3.90d)$$

$$\begin{aligned} \langle \psi | \times | \psi \rangle &\rightarrow U \times (\langle \psi | \times | \psi \rangle) \times W^\dagger = \\ &= (\langle \psi | \times W^\dagger) \times (U \times W^\dagger)^{-1} \times (U \times | \psi \rangle) \times (U \times W^\dagger) = \\ &= \langle \hat{\psi} | > |\hat{\psi}^>\rangle \times \hat{I}^>. \end{aligned} \quad (3.90e)$$

Все остальные аспекты генохимии для движения вперед могут быть сконструированы схожим образом. Конструирование генохимии для движения назад во времени производится сопряженным отображением  $W \times U^\dagger = \hat{I}$ .

Схожим образом, конструкция гиперхимии имеет место, когда два неунитарных преобразования (3.89) многозначны.

Конструкция изодуальной химии может быть легко построена с использованием следующего анти-унитарного преобразования [14],

$$U \times U^\dagger = -I, \quad (3.91)$$

приложенного ко всему формализму обычной квантовой химии. Таким образом, мы получаем *изодуальную единицу, изодуальные числа, изодуальные произведения и т.д.* [14],

$$I \rightarrow I^d = U \times I \times U^\dagger = -I, \quad (3.92a)$$

$$n \rightarrow U \times n \times U^\dagger = n^d = -n, \quad (3.92b)$$

$$A \times B \rightarrow A^d \times^d B^d = U \times (A \times B) \times U^\dagger. \quad (3.92c)$$

Изодуальная изо-, гено- и гипер-химия может быть сконструирована через комбинацию вышеприведенных методов.

Заметим, что формализм, полученный из вышеуказанного отображения, окажется *несогласованным*, если даже *одна* из величин (скажем, преобразование Фурье) или операция (скажем, степень) не преобразованы. Несогласованность появляется из-за очевидного смешивания обычной и обобщенной математик и будет та же самая, как в случае разработки обычной квантовой химии через изо- или гено-математику.

### 3.3.11 Инвариантность операторной гено-, гипер- и изодуальной химии

Поскольку вышеизложенные гено-, гипер- и изодуальная формулировки были сконструированы через простые методы, доказанные выше, их инвариантность также может быть легко доказана. В данном случае просто требуется формулировка теории преобразований через подходящую математику, опять-таки, чтобы избежать смешения различных математик, предназначенных для различных теорий.

Рассмотрим, например, проблему инвариантности основных уравнений генохимии. Так как эта теория структурно необратима, изучение этой теории впервые требует выбора направления движения во времени: вперед *или* назад. Затем, любое данное неунитарное преобразование должно быть переформулировано в подходящий *геноунитарный закон* действующий на геногильбертовых пространствах над генополями [13]

$$Z \times Z^\dagger \neq I, Z = \hat{Z} \times \hat{T}^{>1/2}, \quad (3.93a)$$

$$Z \times Z^\dagger \equiv \hat{Z} > \hat{Z}^\dagger = \hat{Z}^\dagger > Z^\dagger = \hat{T}^\dagger. \quad (3.93b)$$

Легко видеть, что геноуравнения для движения вперед во времени действительно инвариантны относительно вышеуказанного геноунитарного преобразования. Действительно, мы имеем законы инвариантности [13],

$$\hat{T}^\dagger \rightarrow \hat{T}'^\dagger = \hat{Z} > \hat{T}^\dagger > \hat{Z}^\dagger \equiv \hat{T}^\dagger, \quad (3.94a)$$

$$A > B \rightarrow \hat{Z} > (A > B) > Z^\dagger = \hat{A}' > \hat{B}', \quad (3.94b)$$

а именно, геноединицы и генопроизведения *численно сохраняются*. Отсюда следует инвариантность остальной части теории, как предлагается проверить это заинтересованному читателю.

В сущности, такие же переформулировки необходимы для доказательства инвариантности остальных ветвей адронной химии.

### 3.3.12 Классификация адронной химии

В заключение, *адронная химия имеет восемь топологически и химически различных классических формулировок, которые следуя восьми различным отображениям, характеризуют восемь различных операторных формулировок, производят следующие ветви:*

- *квантовая химия и ее изодуальная;*
- *изохимия и ее изодуальная;*
- *генохимия и ее изодуальная;*
- *гиперхимия и ее изодуальная.*



Эти теории были задуманы для условий с возрастающими сложностью и методологическими нуждами, в том числе ради попытки углубить понимание кода ДНК, например, через теорию чисел с единицей, являющейся бесконечным упорядоченным набором чисел.

В частности, покрывающая квантовая химия, которую мы назвали *изохимией*, была сконструирована для достижения инвариантного воспроизведения *замкнуто-изолированных обратимых систем с нелинейными, нелокальными и негамильтоновыми внутренними эффектами, удовлетворяющих обычным законам сохранения и обычным квантовым принципам*, как очевидно из изоуравнения Гейзенберга-Сантиллы [9],

$$i \times \frac{d\hat{H}}{dt} = \hat{H} \hat{\times} \hat{H} - \hat{H} \hat{\times} \hat{H} = \hat{H} \times \hat{T} \times \hat{H} - \hat{H} \times \hat{T} \times \hat{H} \equiv 0. \quad (3.95)$$

Более широкая, *гено-химия* была построена для достижения инвариантного воспроизведения *открытых, неконсервативных и необратимых химических явлений при линейных и нелинейных, локальных и нелокальных, а также гамильтоновых и негамильтоновых процессах наподобие химических реакций и других*, как очевидно из геноуравнения Гейзенберга-Сантиллы [9] приложенного к энергии,

$$i \times \frac{d\hat{H}}{dt} = \hat{H} \langle \hat{H} - \hat{H} \rangle \hat{H} = \hat{H} \times \langle \hat{T} \times \hat{H} - \hat{H} \times \hat{T} \rangle \hat{H} \neq 0. \quad (3.96)$$

Вышеприведенный закон представляет *изменение энергии со временем* и, очевидно, допускает простейший закон сохранения (3.95) как частный случай.

Еще более расширенная *гиперхимия* была сконструирована для достижения инвариантного воспроизведения *неконсервативных, необратимых и многозначных систем*, таких как биологические структуры (см. Рис. 1.6 для иллюстрации через морские раковины), как показано *гипергейзенберговским уравнением* приложенным к энергии,

$$\begin{aligned} i \times \frac{d\hat{H}}{dt} &= \hat{H} \langle \hat{H} - \hat{H} \rangle \hat{H} = \\ &= (\hat{H} \times \langle \hat{T}_1 \times \hat{H} - \hat{H} \times \hat{T}_1 \rangle \times \hat{H}) + \\ &+ (\hat{H} \times \langle \hat{T}_2 \times \hat{H} - \hat{H} \times \hat{T}_2 \rangle \times \hat{H}) + \dots \neq 0. \end{aligned} \quad (3.97)$$

*Изодуальная химия* была сконструирована для воспроизведения сложных биологических систем, подразумевающих *бифуркации* или другие

сложные явления, требующие математического воспроизведения с обоими движениями вперед и назад во времени согласно четырем направлениям времени Рис. 2.1. В этом случае, все величины и их операции подвергнуты анти-изоморфному изодуальному отображению, например, для случая изодуальной временной эволюции Гейзенберга-Сантиллы, мы имеем [15]

$$\begin{aligned} i^d \times^d d^d A^d / d^d t^d &= -i \times dA/dt = \\ &= A^d \times^d H^d - H^d \times^d A^d = -A \times H + H \times A. \end{aligned} \quad (3.98)$$

Тогда, совместное использование химии и ее изодуального образа позволяет численное воспроизведение бифуркаций и других подобных эффектов (Рис. 1.6 и 2.1). В сущности те же результаты сохраняются для комбинированного использования изо-, гено- и гипер-химии и их соответствующих изодуальных.

Вышеприведенные последовательные цепи обобщений подтверждают тот исторический урок, что подобно всем другим количественным наукам, химия является дисциплиной, которая никогда не допустит "окончательной теории". Неважно насколько эффективной любая данная теория может казаться на данный момент времени, ее структурное обобщение для количественных трактовок уже более передовых знаний является просто неизбежным.



# Литература

- [1] Einstein, A., Podolsky, B. and Rosen, N.: Phys. Rev. **47**, 777 (1935).
- [2] Boyer, D.J.: *Bonding Theory*, McGraw Hill, New York (1968) [2a]. Hanna, M.W.: *Quantum Mechanical Chemistry*, Benjamin, New York (1965) [2b]. Pople, J.A. and Beveridge, D.L.: *Approximate Molecular Orbitals*, McGraw Hill, New York (1970) [2c]. Linnet, J.W.: *The Electronic Structure of Molecules, A New Approach*, Methuen Press, London, and Wiley, New York (1964) [2d].
- [3] Santilli, R.M. and Shillady, D.D.: Hadronic J. **21**, 633 (1998) [3a]; Intern. J. Hydrogen Energy **24**, 943 (1999) [3b]; Intern. J. Hydrogen Energy **25**, 173 (2000) [3c].
- [4] Sinanoglu, O.: Proc. Nat. Acad. Sciences **47**, 1217 (1961) [4a]. Lewis, G.N.: J. Am. Chem. Soc. **38**, 762 (1916) [4b]. Langmuir, I.: J. Am. Chem. Soc. **41**, 868 (1919) [4c]. Boyd, R.J. and Yee, M.C.: J. Chem. Phys. **77**, 3578 (1982) [4d]. Cann, N.M. and Boyd, R.J.: J. Chem. Phys. **98**, 7132 (1992) [4e].
- [5] Lagrange, L.: *Mechanique Analytique* (1788), reprinted by Gauthier-Villars, Paris (1888) [5a]; Hamilton, W.R.: *On a General Method in Dynamics* (1834), reprinted in *Hamilton's Collected Works*, Cambridge Univ. Press (1940) [5b]. Jacobi, C.G.: *Zur Theorie der Variationensrechnung unter der Differentialgleichungen* (1937) [5c].
- [6] Santilli, R.M.: *Foundations of Theoretical Mechanics*, Vol. **I** (1978) [6a] and **II** (1983) [6b], Springer-Verlag, Heidelberg-New York; *Elements of Hadronic Mechanics*, Vol. **I** [6c] and **II** [6d] (1995) and **III**, in preparation [6i], Ukraine Academy of Sciences, Kiev; *Isotopic, Genotopic*

- and Hyperstructural Method in Theoretical Biology*, Ukraine Academy of Sciences, Kiev (1996) [6e].
- [7] Santilli, R.M.: Rendiconti Circolo Matematico Palermo, Suppl. **42**, 7 (1996).
- [8] Animalu, A.O.E. and Santilli, R.M.: in *Hadronic Mechanics and Nonpotential Interactions*, M. Mijatovic, Editor, Nova Science, New York (1990).
- [9] Santilli, R.M.: Hadronic J. **1**, 574 (1978).
- [10] Santilli, R.M.: Hadronic J. **3**, 440 (1979) [10a]. Mignani, R., Hadronic J. **5**, 1120 (1982) [10b].
- [11] Myuing, H.C. and Santilli, R.M.: Hadronic J. **5**, 1277 and 1367 (1983).
- [12] Santilli, R.M.: Found. Phys. **27**, 625 (1997).
- [13] Santilli, R.M.: Found. Phys. **27**, 1159 (1997).
- [14] Santilli, R.M.: Hyperfine Interactions **109**, 63 (1997); Intern. J. Modern Phys. **D7**, 351 (1998).
- [15] Santilli, R.M.: JINR Rapid Comm. **6**, 24 (1993); Acta Appl. Math. **50**, 177 (1998).

## Глава 4

# Изохимическая модель молекулы водорода

### 4.1 Введение

Хорошо известно, что основными структурными характеристиками *квантовой химии* (см., например, [1]) являются следующие:

1) *линейность*, в том смысле, что уравнения на собственные значения зависят от волновых функций только в первой степени;

2) *локально-дифференцируемость*, в смысле действия среди ограниченного числа изолированных точек; и

3) *потенциальность*, в смысле выводимости всех действующих сил из потенциальной энергии.

Следовательно, квантовая химия является *гамильтоновой теорией*, то есть для полной характеристики квантовохимической модели требуется, *единственно*, знание гамильтонова оператора, с *унитарной структурой*, то есть временная эволюция удовлетворяет условиям унитарности

$$U = e^{iH \times t}, \quad U \times U^\dagger = U^\dagger \times U = I, \quad H = H^\dagger, \quad (4.1)$$

когда формулируется на обычных гильбертовых пространствах над обычным полем комплексных чисел.

Несмотря на выдающиеся достижения в течении 20-го века, квантовая химия не может рассматриваться как "окончательная" из-за большого количества недостатков приведенных в Главе 1.

Самым важным недостатком является невозможность воспроизведения глубокого взаимопроникновения волновых пакетов валентных электронов в молекулярных связях. Последние взаимодействия известны как:

1) *нелинейные*, то есть зависящие от степеней волновых функций выше первой;

2) *нелокально-интегральные*, то есть зависящие от интегралов по пространству перекрытия волновых пакетов, которое, по существу, не может быть сведено к ограниченному набору изолированных точек; и

3) *непотенциальные*, то есть состоящие из "контактных" взаимодействий, для которых понятие потенциальной энергии не имеет математического или физического смысла.

Воспроизведение последних черт очевидно требует *негамильтоновой теории*, то есть теории которая не может характеризоваться только гамильтонианом и требует дополнительных членов. Это приводит к *неунитарности* возникающей теории, то есть ее временная эволюция удовлетворяет закону,

$$U \times U^\dagger = U^\dagger \times U \neq I, \quad (4.2)$$

когда она формулируется на обычных гильбертовых пространствах над обычными полями.

Очевидно, что вышеуказанные черты не оставляют никакой надежды, чтобы быть научно-количественно трактованными через квантовую механику или квантовую химию.

В предыдущей Главе 3 мы предложили основы покрывающего обобщения квантовой химии под названием *–адронная химия*, впервые предложенного Сантilli и Шиллади в работе [2], которое способно обеспечить инвариантное воспроизведение упомянутых выше нелинейных, нелокальных, непотенциальных, негамильтоновых и неунитарных взаимодействий при значительных корреляциях валентных электронов.

В Главе 3, мы также показали, что обычные "экранирования" кулоновского потенциала (которые необходимы для лучшего воспроизведения экспериментальных данных) выходят за рамки структуры "квантовой" химии, так как такие экранирования могут быть получены только через неунитарные отображения кулоновского закона, и поэтому являются частными случаями более общей адронной химии.

Главная цель этой главы заключается в приложении адронной химии к конструированию новой модели молекулярных связей и ее проверке воспроизведением экспериментальных данных молекулы водорода.

Молекулярные структуры рассматриваются как изолированные, поэтому в виду их замкнутости, консервативности и обратимости, применяемой ветвью адронной химии является *изохимия*, которая характеризуется определением неунитарной временной эволюции обобщенной единицей теории, называемой *изоединицей*,

$$U \times U^\dagger = \hat{I}(r, p, \psi, \partial\psi, \dots) \neq I, \quad (4.3)$$

принятой здесь и далее не зависящей явно от времени, и реконструкцией всего формализма квантовой химии в новую форму, допускающую  $\hat{I}$ , вместо  $I$ , как корректную правую и левую новую единицу.

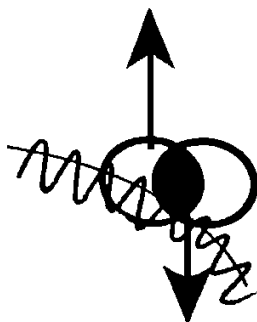


Рис. 4.1: Схематический вид главных условий, изученных в этой главе. Глубокое перекрытие волновых пакетов валентных электронов в синглетном соединении (для удовлетворения принципа запрета Паули). Эти условия, как известно, нелинейны, нелокальны и непотенциальны (согласно контактному характеру взаимодействий), поэтому невоспроизводимы через гамильтониан и, следовательно, неунитарны. Как результат, первичная природа валентных связей выходит за рамки любого заслуживающего доверия воспроизведения через квантовую химию. Адронная химия (Глава 3) была построена специально для описания связей валентных электронов, подобных рассматриваемым здесь.

Возможность воспроизвести изоединицей нелинейные, нелокальные и негамильтоновы взаимодействия очевидна. Ее выбор среди всех возможных диктуется условием *инвариантности*, то есть предсказанием тех же числовых значений при тех же условиях, но в различные моменты времени. Действительно, обобщенная или нет, единица любой теории является ее основным инвариантом.



Центральное предположение этой главы заключается в том, что квантовая механика и квантовая химия применимы на всех расстояниях порядка боровского радиуса ( $\simeq 10^{-8}$  см), и покрывающая адронная химия необходима только на расстояниях порядка размеров волновых пакетов валентных электронов (1 фм =  $10^{-13}$  см).

Это условие очевидно необходимо, с одной стороны, чтобы допустить обычную квантовую структуру атома водорода и, с другой стороны, допустить количественные исследования негамильтоновых короткодействующих взаимодействий в валентных связях.

Вышеуказанное условие без труда достигается требованием для всех изоединиц, используемых в этой главе, покрывать обычную единицу на расстояниях больших 1 фм,

$$\lim_{r \gg 1 \text{ фм}} \hat{I}(r, p, \psi, \partial\psi, \dots) = I, \quad (4.4a)$$

$$|\hat{I}| \ll 1, \quad |\hat{T}| \gg 1. \quad (4.4b)$$

Действительно, при этом условии адронная химия тождественно и целиком воспроизводит квантовую химию.

Читатель должен иметь в виду значительные следствия условий (4.4b), которые, как показано в Разделе 3.6, (см. (3.74d) и (3.74e)), позволяют драматическое улучшение сходимости химических рядов с соответствующим сокращением компьютерного времени, что подтверждается моделями этой главы и рассматриваемыми далее.

Читатель должен также заметить, что оба условия (4.4a) и (4.4b), еще до своего наложения, удовлетворяются действующими химическими моделями.

Следует напомнить, что при предположении воспроизведения замкнуто-изолированных систем, *изохимия удовлетворяет всем обычным законам и принципам квантовой механики* (Глава 3). Следовательно, *a priori* нет смысла ограничивать применимость адронной химии малой областью пространства валентных связей.

Это приводит к тому, что выбор применяемой теории обуславливается способностью воспроизведения экспериментальных данных. Квантовая механика способна давать точное воспроизведение экспериментальных данных для структуры *одного отдельного* атома водорода. Следовательно, квантовая механика принимается как точная для таких хорошо определенных систем и любое возможное улучшение является излишним.

По сравнению с этим, квантовая механика и квантовая химия не способны достигнуть точного воспроизведения экспериментальных данных для *отличающихся* условий молекулярных структур, как это обсуждалось в Главе 1. Как результат, эти теории *не* рассматриваются как точные при описании молекулярных связей (см. Фиг. 1.7).

Как мы увидим в этой главе, адронная химия действительно может обеспечить точное воспроизведение молекулярных характеристик, и, следовательно, может рассматриваться как точная при применении в указанных условиях.

Для технического понимания содержания этой главы существенно знание *изоматематики* Главы 2 и *изохимии*, представленной в Главе 3 (см. также [3, 4]).

Для менее склонных к математике читателей, напомним (см. Раздел 3.3.6), что специфические приложения изохимии могут быть сконструированы во всей полноте через простые неунитарные преобразования обычных квантово-химических моделей. Действительно, такое преобразование как раз добавляет желаемые контактные, нелинейные, нелокальные и негамильтоновы эффекты.

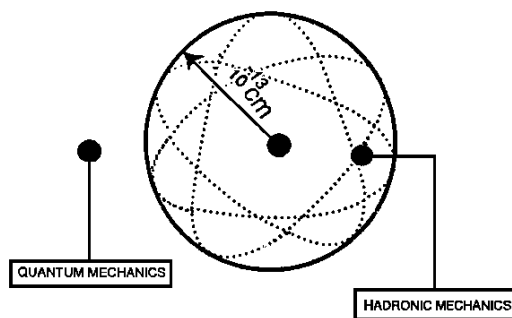


Рис. 4.2: Схематическое изображение *адронного горизонта*, а именно, сферы радиуса 1 фм ( $= 10^{-13}$  см), вне которой квантовая химия принимается как точная и внутри которой нелинейные, нелокальные и непотенциальные эффекты не могут больше игнорироваться, поэтому там требуется использование адронной химии для их численной и инвариантной трактовки.

## 4.2 Изохимическая модель молекулярных связей

Теперь мы представляем концептуальные основания нашей *изохимической модели молекулярных связей* для простейшего возможного случая, молекулы  $H_2$ , которая впервые была предложена Сантилли и Шиллади в работе [5]. В последующей главе мы расширяем эту модель до молекулы воды и других молекул.

Так как ядра двух H-атомов остаются на сравнительно большом взаимном расстоянии, связь молекулы  $H_2$  очевидно осуществляется через связь (периферийных) валентных электронов, как в общем и принято [1].

Наше главное предположение [5] заключается в том, что *валентные электроны двух разных атомов могут объединяться на малых расстояниях в синглетное квазичастичное состояние называемое "изоэлектронием", который описывает орбиту oo-формы вокруг двух ядер, подобно планетам в бинарных звездных системах (Рис. 4.3).*

Следует отметить, что недавние чисто математические исследования [39] установили, что орбита oo-формы, называемая решением в виде *восьмерки*, является одним из наиболее стабильных решений проблемы нескольких тел.

Изначально, силы связывающие изоэлектронием в единое целое принимаются как нелинейные, нелокальные и непотенциальные, согласно контактному эффектам при глубоком перекрытии волновых пакетов валентных электронов, как изучено в Разделе 4.3.

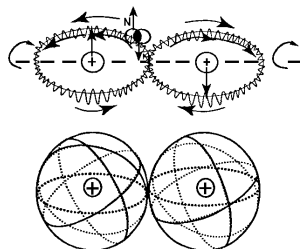


Рис. 4.3: Схематический вид предложенной *изохимической модели молекулы водорода с полностью стабильным изоэлектрониумом*, где верхнее изображение относится к абсолютному нулю температуры и отсутствию какого-либо движения, в то время как нижнее включает вращения, поэтому воспроизводит обычное сферическое распределение. Это изображение дополняет Рис. 4.7 для нестабильного изоэлектрониума. Модель изображена здесь в терминах *орбит валентных электронов*, отличающихся от терминов *орбиталей* или *плотностей распределений*. Фундаментальным предположением является то, что два валентных электрона, по одному на каждый атом, коррелируют друг с другом в связанном синглетном состоянии на близком расстоянии, которое мы называем изоэлектрониумом и которое в этом рисунке предполагается стабильным. В этом случае  $H_2$ -молекула может быть стабильной только при таких орбитах изоэлектрониума которые имеют *oo*-форму вокруг соответствующих двух ядер, как это имеет место для планет в некоторых бинарных звездных системах. В этом случае, изоэлектрониум ответственен за *силу притяжения* между двумя атомами. *Энергия связи* характеризуется орбитой *oo*-формы изоэлектрониума вокруг двух ядер, концептуально воспроизведенной на этом рисунке через стоячую волну для частицы со спином 0, зарядом  $-2e$  и нулевым магнитным моментом. Как мы увидим в этой главе, такая модель позволяет: объяснить почему молекулы  $H_2$  и  $H_2O$  имеют только два атома водорода; точное воспроизведение энергии связи; разрешение некоторых несогласованностей обычной модели; и другое. Заметим наконец, что модель легко расширяется на димеры, такие как  $HO$ ,  $HC$  и т.д., как изучено в Главе 3. Новизна предсказательного характера модели может быть видна уже из этих предварительных строк. Например, модель, изображенная на этой фигуре предсказывает, что *молекула водорода становится асимметричной, что дает инфракрасный сигнал, при соответствующей магнитной поляризации, которая ориентирует ее вращательные движения.*

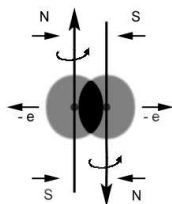


Рис. 4.4: Схематический вид обычных кулоновских сил электростатического и магнитостатического типа в структуре изоэлектроннума. Так как заряды равны, они приводят к силам *отталкивания*. Однако соединение в синглет с противоположными магнитными полюсами подразумевает *притяжение*. Элементарные расчеты показывают, что магнитостатическое притяжение равно электростатическому отталкиванию на взаимном расстоянии порядка 1 фм, в то же время оно становится больше на меньших расстояниях, этим объясняется причина того почему адронный горизонт установлен порядка  $10^{-13}$  см. Эти данные устанавливают, что происхождение связывающей силы изоэлектроннума может быть усмотрено в чисто кулоновских силах и, в частности, в доминировании магнитных эффектов над электрическими на малых расстояниях, что является довольно общим случаем при определенных условиях (см. о новом химическом понятии *магнекул* Главу 8). Несмотря на полностью потенциальную полную силу притяжения, следует подчеркнуть, что изоэлектроннум не может трактоваться в чисто квантово-механическом контексте по ряду причин. Первая причина заключается в том, что при уменьшении расстояния и электростатический, и магнитостатический эффекты расходятся, что препятствует любому серьезному научному исследованию. Адронная механика и адронная химия были построены специально для ликвидации этих расхождений через изотопии общих произведений  $A \hat{\times} B = A \times \hat{T} \times B$  с  $|\hat{T}| \ll 1$  (Глава 3). Следовательно, адронная трактовка изоэлектроннума позволяет делать точные численные предсказания, которые были бы невозможны для квантовой химии. Независимо от этого, неунитарный лифтинг квантовой химии необходим для достижения точного воспроизведения экспериментальных данных молекул, которые, как теперь установлено, требуют экранирования, получаемых только через неунитарные преобразования кулоновского потенциала.

К Рис.4.4. Таким образом, любая попытка сохранения старых теорий как точных обречена на неудачу. Несмотря на это, электростатические и магнитостатические эффекты, изображенные на этом рисунке, иллюстрируют, что обычные потенциальные эффекты должны быть также ожидаемы в структуре изоэлектрониума. Другими словами, вместо принятия чисто квантового или чисто адронного подхода, мы имеем *in media virtus*, то есть наиболее вероятное происхождение связывающей силы изоэлектрониума имеет частично потенциальную и частично непотенциальную природу. В свою очередь, это подразумевает возможность значительной (отрицательной) энергии связи для изоэлектрониума, которая, очевидно, характеризуется потенциальной компонентой (Раздел 4.3).

Однако, читатель должен иметь в виду, что изоэлектрониум имеет, как ожидается, компоненту связывающей силы чисто потенциального типа, потому что когда электроны находятся в синглетном соединении, магнитостатическое *притяжение* может быть, предположительно, больше чем электростатическое *отталкивание* на расстояниях порядка одного ферми или менее (см. Рис. 4.4).

Следует подчеркнуть, однако, что чисто потенциальное происхождение изоэлектрониума не является полностью приемлемым по множеству причин, наиболее очевидная из которых та, что на очень малых взаимных расстояниях рассматриваемых здесь, магнитостатический и электростатический законы расходятся, поэтому надежные количественные исследования становятся затруднительными.

Адронная химия была построена для устранения всех расходимостей в изучении изоэлектрониума благодаря изоматематике с произведением  $A \hat{\times} B = A \times \hat{T} \times B$  и изотопическим элементом  $\hat{T}$  уменьшенным до абсолютного значения много меньше 1. Таким образом, адронная компонента связывающей силы изоэлектрониума будет "поглощать" все расходимости или какие-либо отталкивающие эффекты и приводить к сходящимся числовым значениям.

Мы также не советуем читателю сводить изоэлектрониум к чисто квантовой структуре потому, что при этом теория сохранит все недостатки квантовой химии изученные в Главе 1, самое главное, неспособность достигнуть точного воспроизведения молекулярных характеристик при прямом применении первых квантовых принципов без *ad hoc* дополнений. Действительно, как теперь хорошо известно, такое точное воспроизведение требует экранирования кулоновского закона, которые могут быть получены только через неунитарные преобразования. То же самое

неунитарное расширение квантовой химии требуется и множеством других, независимых от изоэлектрониума, расчетов.

Несмотря на эти ограничения, чисто магнитостатически-электростатическая структура изоэлектрониума остается важной в *первом приближении*, потому что она очень простым путем вводит адронный горизонт (Рис. 4.2), так же как и предсказание адронной механики относящееся к 1978 г., что триплетные соединения крайне нестабильны. Действительно, в последнем случае и электростатическая, и магнитостатическая силы будут являться *отталкиваниями*, поэтому запрещается любое возможное связанное состояние, в прекрасном согласии с принципом запрета Паули.

Легко предсказать, что *изоэлектрониум не может быть перманентно стабильным когда интерпретируется как квазичастица с зарядовым диаметром примерно 1 фм*. Действительно, просто наличие обменных сил, которые остаются полностью допустимыми изохимией, препятствует достижению полной стабильности при отмеченных малых расстояниях между электронами. Как мы более детально увидим в Главе 6, есть дополнительные технические причины, которые препятствуют полной стабильности на малых расстояниях, что делает изоэлектрониум короткоживущей квазичастицей, когда валентные электроны оказываются на взаимном расстоянии 1 фм.

Однако легко видеть, что *изоэлектрониум должен быть полностью стабильным когда взаимное расстояние двух валентных электронов допускается быть порядка размеров молекулы*. Действительно, любая *нестабильность, при этих условиях больших расстояний, должна подразумевать неизбежное нарушение фундаментального принципа запрета Паули*.

Другими словами, *изоэлектрониум является первым известным количественным воспроизведением принципа Паули*, в том смысле, что:

1) При предположении потенциальности взаимодействия, отвечающего за принцип Паули, подразумеваются катастрофические несогласованности, такие как сдвиги экспериментально установленных энергетических уровней, отклонения от всех спектральных линий и т.д. Как результат, численное представление принципа Паули *невозможно* для квантовой механики, очевидно, из-за ее явного потенциального характера. На этом основании, принцип Паули, как известно, просто накладывается в квантовой механике без всяких объяснений. Напротив, в адронной механике возможно численное воспроизведение именно потому, что она допускает *непотенциальные* взаимодействия, то есть взаимодействия, не порождающие энергетических уровней и спектральных линий.

2) Квантовая механика, в общем, допускает и синглетные и триплетные соединения, так как частицы принимаются точечными согласно самой топологической структуре теории. Напротив, адронная механика воспроизводит частицы как протяженные, на взаимных расстояниях меньших чем их волновые пакеты, и допускает единственно синглетные соединения согласно высокой нестабильности предсказываемой для триплетных соединений. Силы отталкивания, ответственные за нестабильность возникают как из-за взаимодействий, испытываемых волновыми пакетами при вращении в ту же или другую сторону относительно вращения другого волнового пакета, так и из-за того факта, что в триплетных соединениях как магнитостатический, так и электростатический эффекты являются отталкивающими (Рис. 4.4); и

3) Как обсуждалось ранее, квантовая механика не может обеспечить точное воспроизведения *притяжения* между *идентичными* электронами на очень малых расстояниях в противоречии с экспериментальными данными, например, два электрона гелия связаны большую часть времени до такой степени, что они испускаются в такой связанной форме при фотоэффекте и т.д. Напротив, адронная механика была построена для точного воспроизведения связи идентичных электронов в *синглетном* соединении при взаимодействиях, не выводимых из потенциала.

Предположение изоэлектрониума как нестабильной квазичастицы, когда валентные электроны находятся на взаимных расстояниях порядка размера молекулы, подразумевает нарушение принципа Паули, например, из-за автоматического допущения триплетных соединений для двух электронов на одном энергетическом уровне.

При предположении стабильности, в предельном случае квазичастицы с зарядовым радиусом 1 фм, *наиболее стабильная траектория изоэлектрониума имеет oo-тип, где каждая o-ветвь окружает одно из ядер* (Рис. 4.3). Как проиллюстрировано на Рис. 4.4 (см. также Главу 8), такая форма автоматически убирает несогласованность связанную с предсказанием ферромагнитного характера всех молекул.

Когда корреляция (связь) распространена по всей молекулярной орбите, *траектория изоэлектрониума так же ожидается в oo-форме вокруг двух ядер с обратными направлением вращения в двух o-ветвях*. Это следует из разных соображений, таких как: необходимость избежать несогласованность, связанную с предсказанием ферромагнетизма, совместимость с предельным случаем полностью стабильной частицы на коротких расстояниях (которая, как мы увидим, может описывать несколько



орбит *oo*-формы до разделения) и другие.

Следует отметить, что предположение ограниченного времени жизни изоэлектрониаума, независимо от его продолжительности, подразумевает возможность присоединения нескольких Н-атомов к молекуле Н<sub>2</sub> на протяжении несвязанного состояния валентных электронов, а так же другие несогласованности, такие как возможность парамагнетизма для водорода и воды (Глава 8).

В этой главе мы применяем вышеизложенные гипотезы для конструирования новой модели молекулы водорода и доказываем ее способность:

- 1) обеспечить существенно более точное воспроизведение энергии связи и другие характеристики молекулы водорода;
- 2) упомянутое воспроизведение осуществляется из первых аксиоматических принципов, без выхода из класса эквивалентности как это имеет место для кулоновских экранировок;
- 3) впервые (по нашим данным) объяснить причину, почему молекула водорода имеет только два атома;
- 4) ввести действительно "сильную" молекулярную связь;
- 5) достигнуть более быстрой сходимости степенных рядов с соответствующим большим сокращением компьютерного времени;
- 6) избежать несогласованностей, таких как предсказание ферромагнетизма водорода. Действительно, какая бы магнитная полярность не приобреталась ориентацией орбиты вокруг одного из ядер, соответствующая полярность для второго ядра будет обязательно противоположной, согласно противоположным направлениям вращений в двух *o*-ветвях, чем предотвращается полная поляризация молекулы (Север-Юг).

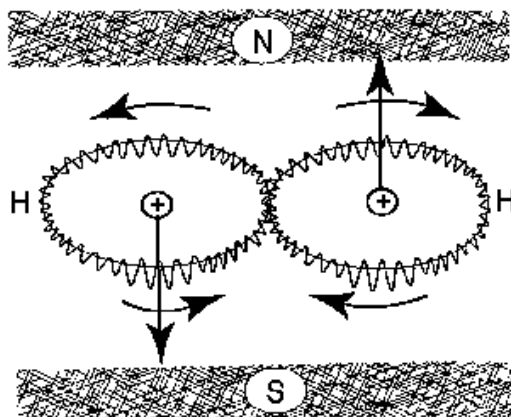


Рис. 4.5: Схематическое изображение, иллюстрирующее невозможность для изохимической модели молекулы водорода, приобретения магнитной поляризации, чем разрешается серьезная несогласованность квантовой химии. Напомним из Главы 1, что современные молекулярные модели базируются на обменных, ван-дер-ваальсовских и других силах ядерного происхождения, и все подразумевают независимость орбиталей отдельных атомов. При этом предположении, квантовая электродинамика требует от всех молекул приобретения полной магнитной полярности Север-Юг при наложении внешнего магнитного поля, что находится в драматическом несогласии с реальностью. Изохимическая модель молекулярной структуры разрешает эту несогласованность, так как, как отмечено на Рис. 4.3, наиболее стабильная траектория для изоэлектрониума имеет *oo*-форму (как это имеет место также для траекторий планет двойных звезд), с каждой *o*-ветвью вокруг одного из ядер. В этом случае, направления вращений в двух *o*-ветвях обязательно противоположно друг другу, что приводит к *противоположным* магнитным полярностям с соответствующей невозможностью приобретения молекулами магнитной полярности. Как мы увидим в Главе 7, вышеприведенные свойства имеют важные промышленные приложения для новых чистых топлив и источников энергии.

Напомним из Главы 3, что гауссовские экранирования кулоновского закона являются частным случаем общей неунитарной структуры адронной химии. Из этого факта легко видеть, что наше первое достижение существенно более точного воспроизведения молекулярных характеристик сводится к подходящему выбору основного неунитарного преобразования, так как последнее будет допускать гораздо более ограниченные экранирования.

Получение существенно более точного воспроизведения из первых аксиом адронной химии без специальных допущений является очевидным.

Равно очевидным является первое введение действительно существующей, "сильной" межатомной силы взаимодействия (где слово "сильная" не обязательно имеет отношение к сильным взаимодействиям в адронной физике), которая отсутствует в современных моделях, согласно печально известной "слабой" природе обменных и других сил, используемых в настоящее время в молекулярных структурах (где слово "слабый" не обязательно имеет отношение к слабым взаимодействиям между лептонами).

Объяснение причины, почему молекула водорода (или воды) имеет только два Н-атома, кроется в самой концепции изоэлектронииума. Раз два валентных электрона Н-атома соединены в синглетное квазичастичное состояние, для третьего валентного электрона невозможно участвовать в этом связанном состоянии, например, потому, что мы имели бы невозможное связанное состояние между фермионом (третий электрон) и бозоном (изоэлектронииум).

Достижение более быстрой сходимости степенных рядов или, эквивалентно, существенное сокращение компьютерного времени для тех же вычислений, является очевидным из структуры адронной химии, как обсуждалось в Главе 3.

Предсказания ферромагнитных свойств (приобретение полной Север-Юг полярности во внешнем магнитном поле) избегается благодаря самой природе орбиты изоэлектронииума, как будет детально обсуждаться в Главе 8.

В этой главе, мы будем изучать две реализации предложенной новой модели молекулы водорода. Первая модель является предельным случаем, в котором изоэлектронииум принимается *стабильным* (с бесконечным временем жизни) в обычных условиях, и во второй модели, изоэлектронииум принимается *нестабильным* (с ограниченным временем жизни). Время жизни изоэлектронииума будет оценено в Главе 6.

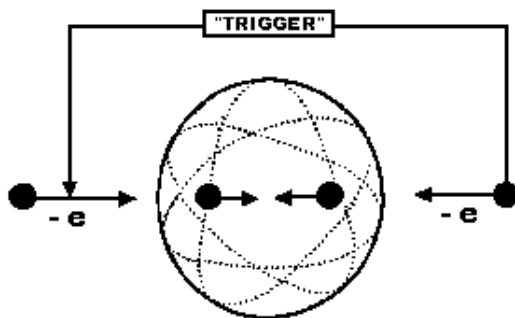


Рис. 4.6: Схематическая иллюстрация пускового механизма, а именно, внешнего воздействия, подходящего для того, чтобы заставить электроны с одинаковым зарядом преодолеть адронный горизонт (Фиг. 4.2), в котором адронные силы притяжения превосходят отталкивающий кулоновский барьер.

Гипотеза связанных электронов на близких расстояниях впервые была предложена Сантилли [7a] для структуры  $\pi^0$  мезона как адронного связанного состояния одного электрона и одного позитрона. Анималу [7b] и Анималу и Сантилли [7c] расширили модель до куперовской пары в теории сверхпроводимости как адронного связанного состояния двух одинаковых электронов.

Важнейшим понятием для самого существования изоэлектрониума является понятие *пускового механизма*, а именно, *внешних (обычных) взаимодействий*, которые заставляют одинаковые электроны двигаться навстречу друг другу и проникать сквозь адронный горизонт (Рис. 4.2) против отталкивающего кулоновского взаимодействия. Внутри вышеупомянутого горизонта адронные силы притяжения превосходят кулоновское взаимодействие отталкивания, что приводит к связанному состоянию.

В случае модели  $\pi^0$  мезона как связанного состояния электрона и позитрона на близком расстоянии, нужды в пусковом механизме нет, так как составляющие естественно притягиваются друг к другу. Напротив, существование куперовской пары обязательно требует пускового механизма, который был найден Анималу [7b] и Анималу и Сантилли [7c] как обеспечиваемый купрированными ионами. Для случая изолированных молекул водорода, мы предполагаем, что пусковой механизм обеспечивается двумя Н-атомами, которые действительно создают притяжение электронов. Мы приводим существенные доводы в пользу того, что притяжение электронов двумя ядрами достаточно для перекрытия двух волновых пакетов, поэтому срабатывает механизм проникновения электронов сквозь адронный горизонт.

Следует отметить, что мы не можем использовать термин "электрониум" так как при этом будет подразумеваться связанное состояние двух одинаковых электронов на основе *квантовой* механики, что, как известно, невозможно. Термин "электрониум" будет также технически неприемлем, потому что составляющие *не* являются обычными электронами, но "изоэлектронами", то есть образом обычных частиц относительно *неунитарных* преобразований или, более технически, несводимыми изоунитарными воспроизведениями покрытия симметрии Пуанкаре, известной как *изосимметрия Пуанкаре-Сантилли*. [3c, 3d, 4a].

Мы не можем завершить этот концептуальный раздел без нескольких комментариев касающихся возможности трактовки изоэлектрониума через *квантовую электродинамику* (КЭД), так как последняя является

ся естественной дисциплиной для изучения взаимодействия одинаковых электронов на близких расстояниях. Эта проблема появляется из-за общей уверенности в *неограниченной* точной применимости КЭД во всех случаях, вплоть до очень малых расстояний порядка  $10^{-24}$  см.

Легко видеть, что, как и в случае квантовой механики, количественная трактовка изоэлектроннума остается вне возможностей КЭД по многочисленным концептуальным и техническим соображениям. Действительно, КЭД полностью линейна, локальна и потенциальна, в то время как интересующие нас взаимодействия являются нелинейными, нелокальными и непотенциальными.

В любом случае, с использованием фейнмановских диаграмм легко доказать, что КЭД *не может* воспроизводить никакого *притяжения* между одинаковыми электронами в синглетном соединении на близком расстоянии, как это имеет место в физической реальности для двух электронов гелия, куперовской пары, валентных электронов и других систем. Напротив, *изотопии квантовой электродинамики* (изоКЭД), как ожидается, могут обеспечить такое воспроизведение, но их изучение выходит далеко за рамки ограниченной цели данной монографии.

Примерение современных представлений о неограниченной точной применимости КЭД и связыванием одинаковых электронов позволяет тем фактом, что все экспериментальные подтверждения КЭД на близких и очень близких расстояниях были проведены с использованием *высоких и очень высоких энергий*. Напротив, экспериментальное подтверждение КЭД для условий изоэлектроннума требует *низких и очень низких энергий*, что полностью отсутствовало в физике 20-го века из-за полной сосредоточенности на высоких энергиях.

В качестве заключительного комментария следует заметить, что ограничения КЭД для изучения изоэлектроннума чисто классические и основаны на *неспособности классической электродинамики воспроизводить явление притяжения одинаковых спинорных зарядов на достаточно малых расстояниях*, – явление видимое даже *невооруженным глазом*, например, в шаровой молнии, создаваемой природой и другими способами.

Собственно говоря, классическая теория электромагнетизма не может считаться "завершенной" пока не достигнута возможность воспроизведения притяжения одинаковых зарядов при подходящих условиях. Как результат, квантовая теория электромагнетизма, включая КЭД, не может рассматриваться как "завершенная" пока она базируется на предыдущей классической теории. Отчасти, цель классической и операторной

изохимии как раз заключается в достижении этого недостающего воспроизведения.

### 4.3 Предельный случай стабильного изоэлектрониума

Теперь мы достаточно подготовлены для нерелятивистского исследования изоэлектрониума (Рис. 4.3) в предельном случае полной стабильности при предположении, что связывающая сила имеет чисто адронный тип без потенциального вклада (Рис. 4.4). Этот подход, очевидно, дает проверку эффективности адронной химии для численных исследований рассматриваемой проблемы, так как поправки согласно потенциальным эффектам могут быть легко добавлены.

Читатель должен иметь в виду, что *вышеуказанные предположения подразумевают, что изоэлектрониум не имеет энергии связи*, тривиально, потому что непотенциальные силы не имеют потенциальной энергии по самой концепции.

Читатель должен также иметь в виду, что действительная адронная трактовка должна быть проведена в контексте изоматематики, то есть на изоевклидовых и изогильбертовых пространствах над изополями. Во избежание чрезмерной математической сложности, в этом разделе мы изучаем *проекцию* этой изотопической трактовки на обычные пространства над обычными полями. Однако, следует подчеркнуть, что единственно корректной формулировкой остается изотопическая.

Как мы увидим, адронная трактовка изоэлектрониума приводит к притяжению типа халтеновского потенциала, которое достаточно сильно, чтобы "поглотить" на коротких дистанциях все остальные силы, как притяжения так и отталкивания. Однако, непосредственная интерпретация халтеновского потенциала как истинного потенциала была бы ошибочной, поскольку он имеет место только в *проекции* модели на обычные пространства, в то же время полностью отсутствует в технически приемлемой трактовке на изопространствах над изополями. Непосредственная интерпретация халтеновского потенциала как действительной потенциальной ямы квантовомеханической природы была бы также в прямом противоречии с отсутствием энергии связи.

Следовательно, предположение спроектированной модели как пра-

### 4.3. ПРЕДЕЛЬНЫЙ СЛУЧАЙ СТАБИЛЬНОГО ИЗОЭЛЕКТРОНИУМА 203

вильной приводит к коварным несогласованностям и ошибочным представлениям, таким как возможная интерпретация изоэлектрониума через потенциальную яму, чья трактовка очень знакома в квантовой механике, но эта трактовка не имеет физического смысла для изоэлектрониума. Это происходит из-за того факта, что, как было подчеркнуто ранее, необходимым условием избежания несогласованностей в интерпретации принципа Паули является то, что это взаимодействие *не* допускает потенциальной энергии, поэтому интерпретации через обычную потенциальную яму оказываются бессмысленными или, точнее, противоречивыми.

Заметим, что появление "сильного" халтеновского потенциала отмечает спорный вопрос о том, является ли изоэлектрониум следствием доминирования магнитостатических сил притяжения над электрическими силами отталкивания (Рис. 4.4). Это благодаря тому факту, что халтеновский потенциал, как мы скоро увидим в деталях, ведет себя на близких расстояниях как  $const/r$ , поэтому поглощаются все кулоновские силы, независимо, являются ли они притяжением или нет. Более того, унифицированная трактовка через халтеновский потенциал, представленная ниже, исключает расходящийся характер этих сил на близких расстояниях, поэтому допускаются осмысленные численные результаты.

Мы должны, наконец, отметить, во избежание несогласованностей, что исследование этого раздела касается *предельного случая идеально стабильного изоэлектрониума, интерпретируемого как квазичастица с зарядовым диаметром около 1 фм*, в то время как в реальности такая форма изоэлектрониума является нестабильной. Более того, в этом разделе мы не будем изучать вероятность того, что в изоэлектрониуме устойчиво сохраняется взаимная дистанция между валентными электронами порядка 1 фм, как необходимое условие ненарушения принципа Паули.

Мы начнем наш количественный анализ с нерелятивистского квантовомеханического уравнения для двух обычных электронов в синглетном соединении,  $e_{\downarrow}^{-}$  и  $e_{\uparrow}^{-}$ , воспроизводимом волновой функцией  $\psi_{\uparrow\downarrow}(r) = \psi(r)$ ,

$$\left( \frac{p \times p}{m} + \frac{e^2}{r} \right) \times \psi(r) = E \times \psi(r). \quad (4.5)$$

Для преобразования этого состояния в изоэлектрониум, представляющего собой связь Н-электрона с валентным электроном другого атома с общим зарядом  $ze$ , мы должны, во первых, подвергнуть уравнение



(4.5) неунитарному преобразованию характеризующему контактные адронные эффекты, и затем мы должны добавить пусковой механизм, а именно, кулоновское притяжение ядрами,

Эта процедура дает *изошредингеровское уравнение для изоэлектронности* (Глава 1),

$$U \times U^\dagger = \hat{I} = 1/\hat{T} > 0, \quad (4.6a)$$

$$\hat{A} = U \times A \times U^\dagger, \quad A = p, H, \dots, \quad (4.6b)$$

$$U \times (A \times B) \times U^\dagger = \hat{A} \hat{\times} \hat{B} = \hat{A} \times \hat{T} \times \hat{B}, \quad \hat{\psi} = U \times \psi, \quad (4.6c)$$

$$\left( \frac{1}{m} \hat{p} \times \hat{T} \times \hat{p} \times \hat{T} + \frac{e^2}{r} \times \hat{T} - \frac{z \times e^2}{r} \right) \times \hat{\psi}(r) = E_0 \times \hat{\psi}(r), \quad (4.6d)$$

$$\hat{p} \hat{\times} \hat{\psi}(r) = -i \times \hat{T} \times \nabla \hat{\psi}(r), \quad (4.6e)$$

где множитель  $\hat{T}$  в первом кулоновском члене появляется из-за неунитарного преобразования модели (4.5), в то же время этот множитель отсутствует во втором кулоновском члене, так как последний является дальнедействующим и поэтому остается обычным. Как результат, в рассматриваемой здесь модели, пусковой механизм просто добавляется к уравнению.

Угловая компонента модели (4.6) является обычной [3] и игнорируется здесь и в дальнейшем. Для радиальной компоненты  $r = |\mathbf{r}|$ , мы принимаем изоединицу [7]

$$\hat{I} = e^{N \times \psi / \hat{\psi}} \approx 1 + N \times \psi / \hat{\psi}, \quad N = \int dr^3 \hat{\psi}^\dagger(r)_{1\downarrow} \times \hat{\psi}(r)_{2\uparrow}, \quad (4.7a)$$

$$\hat{T} \approx 1 - N \times \psi / \hat{\psi}, \quad (4.7b)$$

$$|\hat{I}| \gg 1, \quad |\hat{T}| \ll 1, \quad (4.7c)$$

$$\lim_{r \gg 1\text{фм}} \hat{I} = 1, \quad (4.7d)$$

где следует отметить, что уравнения (4.7c) и (4.7d) автоматически удовлетворяются выражениями (4.7a) и (4.7b).

Заметим, что явная форма  $\psi$  имеет кулоновский тип, поэтому ведет себя как

$$\psi \approx N \times \exp(-b \times r), \quad (4.8)$$

#### 4.3. ПРЕДЕЛЬНЫЙ СЛУЧАЙ СТАБИЛЬНОГО ИЗОЭЛЕКТРОНИУМА 205

с  $N$  примерно равным константе на расстоянии, близком к адронному горизонту радиуса

$$r_c = \frac{1}{b}, \quad (4.9)$$

в то время как  $\hat{\psi}$  ведет себя как

$$\hat{\psi} \approx M \times \left( 1 - \frac{\exp(-b \times r)}{r} \right), \quad (4.10)$$

с  $M$  также примерно равным константе в той же области [7a]. Мы тогда имеем

$$\hat{T} \approx 1 - \frac{V_{\text{Hulten}}}{r} = 1 - V_0 \frac{e^{-b \times r}}{(1 - e^{-b \times r})/r}, \quad (4.11)$$

а именно, мы видим появление халтеновского потенциала в этом локальном приближении. Но халтеновский потенциал на малых расстояниях ведет себя подобно кулоновскому,

$$V_{\text{Hulten}} r \approx \frac{1}{b} \approx \frac{V_0}{b} \times \frac{1}{r}. \quad (4.12)$$

Как результат, внутри адронного горизонта мы можем игнорировать кулоновские силы отталкивания (или притяжения) вообще и записать

$$+\frac{e^2}{r} \times \hat{T} - \frac{e^2}{r} \approx +\frac{e^2}{r} \times \left( 1 - \frac{V_{\text{Hulten}}}{r} \right) - \frac{z \times e^2}{r} = -V \times \frac{e^{-b \times r}}{1 - e^{-b \times r}}, \quad (4.13)$$

с последующим получением желаемой силы *притяжения* между одинаковыми электронами внутри адронного горизонта.

Принимая в первом приближении  $|\hat{T}| = \rho \approx 1$ , радиальное уравнение модели сводится к модели  $\pi^0$  мезона [7a] или куперовской пары [7b, 7c], хотя и с различными значениями  $V$  и  $b$ ,

$$\left[ \frac{1}{r^2} \left( \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{m}{\rho^2 \times \hbar^2} \left( E_0 + V \times \frac{e^{-b \times r}}{1 - e^{-b \times r}} \right) \right] \times \hat{\psi}(r) = E_0 \times \hat{\psi}(r). \quad (4.14)$$

Точное решение и связанные с ним граничные условия были впервые вычислены в работе [7a], Раздел 5 и остаются полностью применимыми к изоэлектрониуму.

Результирующий спектр является типичным для халтеновского потенциала,

$$|E_0| = \frac{\rho^2 \times \hbar^2 \times b^2}{4 \times m} \left( \frac{m \times V}{\rho^2 \times \hbar^2 \times b^2} \times \frac{1}{n} - n \right)^2, \quad (4.15)$$

который, как хорошо известно, обладает *ограниченным* спектром.

Для получения численного решения, мы введем параметризацию как в работе [7a],

$$k_1 = \frac{1}{\lambda \times b}, \quad (4.16a)$$

$$k_2 = \frac{m \times V}{\rho^2 \times \hbar^2 \times b^2}. \quad (4.16b)$$

Вновь заметим, что из уравнений (1.39) и связанных с ними граничных условий,  $k_2$  должно быть больше, но стремиться к единице,  $k_2 \approx 1$  [7].

Мы принимаем, следовательно, в первом нерелятивистском приближении, что

$$\frac{m \times V}{\rho^2 \times \hbar^2 \times b^2} = 1. \quad (4.17)$$

Принимая, что  $V$  имеет величину порядка полной энергии покоящихся изоэлектронов, как в предыдущих моделях [7],

$$V \approx 2 \times \hbar \times \omega \approx 2 \times 0.5 \text{ MeV} = 1 \text{ MeV}, \quad (4.18)$$

и вспоминая, что  $\rho \approx 1$ , мы получаем следующую оценку для *радиуса изоэлектрониаума*

$$\begin{aligned} r_c = b^{-1} &\approx \left( \frac{\hbar^2}{m \times V} \right)^{1/2} = \left( \frac{\hbar}{m \times \omega_0} \right)^{1/2} = \\ &= \left( \frac{1.054 \times 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{сек}}{1.82 \times 10^{-27} \text{ г} \times 1.236 \times 10^{20} \text{ Гц}} \right)^{1/2} = \\ &= 6.8432329 \times 10^{-11} \text{ см} = 0.015424288 \text{ бор} = 0.006843 \text{ \AA}, \end{aligned} \quad (4.19)$$

Следует отметить, что: 1) вышеприведенные значения  $r_c$  и  $V$  являются только *верхними значениями* в системе отсчета центра масс изоэлектрониаума, то есть наибольшие возможные значения при предположениях, делаемых в этом разделе; 2) значения были вычислены при пренебрежении релятивистской кинетической энергией изоэлектронов, с полной энергией равной их энергии покоя; и 3) значения очевидно *понижутся* с добавлением релятивистской кинетической энергии изоэлектронов (так как это подразумевает возрастание  $m$  в знаменателе).

#### 4.3. ПРЕДЕЛЬНЫЙ СЛУЧАЙ СТАБИЛЬНОГО ИЗОЭЛЕКТРОНИУМА 207

Истинный радиус изоэлектрониума, в случае его рассмотрения как квазичастицы, как и было сделано в этом разделе, ожидается также зависимым от "пускового механизма", то есть от зарядов ядер, что подтверждается вычислениями представленными в следующих разделах. Это вновь иллюстрирует верхний характер значения (4.19).

Тогда значение  $k_1$  дается следующим:

$$k_1 = \frac{V}{2 \times k_2 \times b \times c_0} = 0.19, \quad k_2 \approx 1. \quad (4.20)$$

Замечательно, что оба значения для изоэлектрониума стремятся к соответствующим значениям  $\pi^0$  мезона [7a] и куперовской пары [7b, 7c] (см. также Раздел 1.9),

$$k_1 = 0.34, \quad k_2 = 1 + 8.54 \times 10^{-2}, \quad (4.21a)$$

$$k_1 = 1.3 \times \sqrt{z} \times 10^{-4}, \quad k_2 = 1.0 \times \sqrt{z}, \quad (4.21b)$$

Важно видеть, что при этом нерелятивистском приближении, энергия связи изоэлектрониума не только однозначна, но и также тождественно равна нулю,

$$|E_0| = \frac{\rho^2 \times \hbar^2 \times b^2}{4 \times m} \left( \frac{m \times V}{\rho^2 \times \hbar^2 \times b^2} - 1 \right)^2 = \frac{V}{4 \times k_2} \times (k_2 - 1)^2 = 0. \quad (4.22)$$

Этот результат является решающим для предотвращения несогласованностей с принципом запрета Паули, который, как отмечалось ранее, требует отсутствия потенциальной энергии между двумя электронами для его интерпретации путем согласованным с экспериментальными данными.

Понятие связанного состояния с одним только разрешенным уровнем энергии (называемое "адронное сжатие атомного спектра" [7a]) чуждо обычной квантовой механике и обычной квантовой химии, хотя оно имеет огромное значение для адронной механики. Действительно, любое возбуждение составляющих, все равно,  $\pi^0$  мезона, куперовской пары или изоэлектрониума, приводит к их выходу за пределы адронного горизонта и, следовательно, к возвращению типичного атомного спектра. Каждое из рассматриваемых трех адронных состояний имеет, следовательно, только один возможный уровень энергии.

Дополнительное понятие связанного состояния с нулевой энергией связи также является чуждым квантовой механике и квантовой химии,

хотя оно является еще одной фундаментальной характеристикой адронной механики и изохимии. Действительно, адронные взаимодействия не допускают потенциальной энергии, и раз так, они не могут допускать какой-либо ощутимой энергии связи, что является типичным для обычных контактных сил нашей макроскопической ньютоновской реальности.

Нулевое значение энергии связи может быть подтверждено выражением для времени жизни изоэлектрониума, которое может быть записано в этом нерелятивистском приближении [7a] как

$$\tau = \frac{\hbar}{4 \times \pi \times \hbar^2} |\hat{\psi}(0)| \times \alpha \times E_{\hat{e}}^{\text{Kin}} = 7.16 \times 10^4 \times \frac{k_1}{(k_2 - 1)^3 \times b \times c_0}. \quad (4.23)$$

Полная стабильность изоэлектрониума  $\tau = \infty$ , следовательно, требует точного значения  $k_2 \equiv 1$ , которое, в свою очередь, подразумевает  $E_0 \equiv 0$ .

Вышеприведенный вывод характеризует *ограниченность предположения полной стабильности изоэлектрониума в нерелятивистском приближении*. Напротив, при том же выводе, куперовская пара не всегда стабильна, так как ее энергия связи хотя и очень мала, но конечна [7b], поэтому подразумевается хотя и большое, но конечное время жизни.  $\pi^0$  мезон также не может быть стабильным и в действительности имеет очень короткое время жизни, очевидно потому, что его составляющие являются парой частица-античастица и, раз так, аннигилируют друг с другом, оказавшись на близком расстоянии.

Другой важной информацией этого раздела является то, что *изоэлектрониум достаточно мал по размерам и может трактоваться как квазичастица*. Это свойство позволит довольно важные упрощения в изохимической структуре молекул в следующих разделах.

Напротив, куперовская пара имеет размер много больше, чем изоэлектрониум [7b, 7c]. Это свойство является фундаментальным для предотвращения присвоения куперовской паре роли изоэлектрониума в молекулярных связях, то есть даже несмотря на обладание теми же составляющими и схожими физическими происхождениями, изоэлектрониум и куперовская пара различные, не взаимозаменяемые, адронные связанные состояния.

Отсутствие энергии связи изоэлектрониума является может быть наиболее важной информацией этого раздела. Действительно, это переносит воспроизведение энергии связи молекул на движение изоэлектрониума в молекулярной структуре, как это изучено в следующих разделах.

#### 4.3. ПРЕДЕЛЬНЫЙ СЛУЧАЙ СТАБИЛЬНОГО ИЗОЭЛЕКТРОНИУМА 209

Новым в изохимии по сравнению с квантовой химией является то, что взаимное расстояние (зарядовый диаметр) между двумя изоэлектронами может быть, как предельный случай, тождественно равным нулю, то есть два изоэлектрона могут быть наложены друг на друга в синглетное состояние. Этот предельный, трудно достижимый случай является весьма интересным тем, что производит значение  $-2e$  для заряда изоэлектрониума, нулевое значение релятивистской кинетической энергии и тождественно нулевое магнитное поле. Это идеальное диамагнитное состояние, которое, очевидно, позволяет большую стабильность изохимической связи по сравнению с квазичастицей ненулевого размера.

Заметим, что понятий в обычном смысле (то есть воспроизведенный на обычных пространствах над обычными полями), неунитарный образ модели (4.5) давал бы *неинвариантные численные результаты*, которые, в этом случае, были бы неприемлемы (Раздел 1.7). Это приводит к требованию использования покрывающей изохимии и связанной с ней изо-математики, которые обеспечивают достижение инвариантных результатов.

Заметим также, что главная физическая идея изоединицы (4.7) заключается в *воспроизведении перекрытия волновых пакетов двух электронов, при условии восстановления обычной квантовой химии каждый раз, когда такое перекрытие становится неощутимым*. Действительно, на достаточно больших взаимных расстояниях, объемный интеграл от изоединицы (4.7a) равен нулю, экспонента сводится к  $I$  (4.7d), неунитарное преобразование становится обычным унитарным, и квантовая химия восстанавливается полностью.

Также важно видеть, что при преобразовании (4.7a), модель (4.5) снабжена взаимодействиями которые: *нелинейны*, согласно множителю  $\psi/\hat{\psi}$  в экспоненте; *нелокальны*, из-за объемного интеграла в (4.7a); и *непотенциальны*, из-за невозпроизводимости гамильтонианом.

Мы наконец отметим, что явная форма изотопического элемента  $\hat{T}$ , уравнения (4.7b), появляется довольно естественным путем как *меньшая единицы* по абсолютному значению, (4.7c), то есть

$$|\hat{T}| = |1 - N \times \psi/\hat{\psi}| \ll 1. \quad (4.24)$$

Как отмечено в Главе 3, этого одного свойства достаточно для *гарантирования* того, чтобы все медленно сходящиеся ряды квантовой химии сходились быстрее для изохимии.

#### 4.4 Изохимическая модель молекулы водорода со стабильным изоэлектронием

Теперь мы достаточно подготовлены для изучения изохимической модели молекулы водорода, впервые предложенной Сантилли и Шиллади в работе [5] (см, Рис. 4.3, 4.4 и 4.5). В этом разделе мы начнем изучение с определения уравнения структуры молекулы водорода при предельном предположении, что изоэлектронием идеально стабилен на малых расстояниях, а именно, что два валентных электрона постоянно находятся внутри адронного горизонта и проявляют основные черты, описанные в предыдущем разделе.

$$\begin{aligned} \text{масса} &\approx 1 \text{ MeV}, \quad \text{спин} = 0, \\ \text{заряд} &= 2 \times e, \quad \text{магнитный момент} \approx 0, \end{aligned} \quad (4.25a)$$

$$\begin{aligned} \text{радиус} = r_c = b^{-1} &= 6.8432329 \times 10^{-11} \text{ см} = \\ &= 0.015424288 \text{ бор} = 0.006843 \text{ \AA}. \end{aligned} \quad (4.25b)$$

Более реалистичный случай, когда изоэлектронием нестабилен на таких коротких расстояниях, изучен позднее в этой же главе, где мы также получим существенно более точное воспроизведение характеристик молекулы водорода.

Главная причина предположения стабильности изоэлектрониема на близких расстояниях, с характеристиками (4.25), заключается в том, что такое упрощение позволяет довольно важные структурные упрощения, наиболее замечательное из которых, это переход от обычной молекулы водорода (которая является *системой четырех тел*) к изохимической модели этого раздела (которая является *системой трех тел*, Рис. 4.3). Имея в виду, что ограниченные системы четырех тел не допускают точного решения, в то время как ограниченные системы трех тел допускают точное аналитическое решение, следствия приближенной модели этого раздела заслуживают всяческого внимания.

За основу возьмем обычную квантовую модель молекулы  $\text{H}_2$  [1],

$$\begin{aligned} &\left( \frac{1}{2\mu_1} p_1 \times p_1 + \frac{1}{2\mu_2} p_2 \times p_2 + \right. \\ &\left. + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{1a}} - \frac{e^2}{r_{2a}} - \frac{e^2}{r_{1b}} - \frac{e^2}{r_{2b}} + \frac{e^2}{R} \right) \times |\psi\rangle = E \times |\psi\rangle. \end{aligned} \quad (4.26)$$

Наша задача заключается в том, чтобы подвергнуть вышеуказанную модель преобразованию

$$U \times U^\dagger|_{r \approx r_c} = \hat{I} = 1/\hat{T} \neq I, \quad (4.27)$$

которое является неунитарным только на малых взаимных расстояниях

$$r_c = b^{-1} = r_{12} \approx 6.8 \times 10^{-11} \text{ см}, \quad (4.28)$$

и становится унитарным на больших расстояниях,

$$U \times U^\dagger|_{r \leq 10^{-10} \text{ см}} \neq I, \quad I_{r \gg 10^{-10} \text{ см}} = I. \quad (4.29)$$

Это гарантирует, что наша изохимическая модель совпадает с обычной моделью всюду, за исключением небольших отклонений на малых расстояниях.

Предположение (4.29) также гарантирует, что *не изменяются обычные уровни энергии отдельных атомов водорода*. Другими словами, предположение (4.29) реализует главную концепцию этой монографии, — точный характер квантовой механики для структуры *одного* атома водорода и ее недостаточность для *двух* атомов водорода связанных в молекулу (Глава 1).

Гильбертово пространство (4.26) может быть факторизовано в знаковой форме (в которой каждый член строго симметризован или антисимметризован) как в работе [1]

$$|\psi\rangle = |\psi_{12}\rangle \times |\psi_{1a}\rangle \times |\psi_{1b}\rangle \times |\psi_{2a}\rangle \times |\psi_{2b}\rangle \times |\psi_R\rangle, \quad (4.30a)$$

$$\mathcal{H}_{\text{Tot}} = \mathcal{H}_{12} \times \mathcal{H}_{1a} \times \mathcal{H}_{1b} \times \mathcal{H}_{2a} \times \mathcal{H}_{2b} \times \mathcal{H}_R. \quad (4.30b)$$

Неунитарное преобразование, которое мы ищем, будет действовать только на переменную  $r_{12}$  и оставит остальные без изменений. Самое простое решение дается в следующем виде:

$$U(r_{12}) \times U^\dagger(r_{12}) = \hat{I} = \exp \left[ \frac{\psi(r_{12})}{\hat{\psi}(r_{12})} \int dr_{12} \hat{\psi}^\dagger(r_{12})_{1\downarrow} \times \hat{\psi}(r_{12})_{2\uparrow} \right], \quad (4.31)$$

где  $\psi$  — обычная волновая функция и  $\hat{\psi}$  — изоволновая функция.

Чтобы получить этот же результат другим способом, можно преобразовать члены, отвечающие за контактные взаимодействия, (изохимия)



и добавить непреобразованные члены, отвечающие за дальное действие (квантовая химия), что приводит к радиальному уравнению

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2 \times \mu_1} \hat{T} \times \nabla_1 \times \hat{T} \times \nabla_1 - \frac{\hbar^2}{2 \times \mu_2} \hat{T} \times \nabla_2 \times \hat{T} \times \nabla_2 + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{1a}} - \frac{e^2}{r_{2a}} - \frac{e^2}{r_{1b}} - \frac{e^2}{r_{2b}} + \frac{e^2}{R} \right) \times |\hat{\psi}\rangle = E \times |\hat{\psi}\rangle. \quad (4.32)$$

Имея в виду, что халтеновский потенциал ведет себя на малых расстояниях подобно кулоновскому, уравнение (4.32) принимает вид:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2 \times \mu_1} \times \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2 \times \mu_2} \times \nabla_2^2 - V \times \frac{e^{-r_{12} \times b}}{1 - e^{-r_{12} \times b}} - \frac{e^2}{r_{1a}} - \frac{e^2}{r_{2a}} - \frac{e^2}{r_{1b}} - \frac{e^2}{r_{2b}} + \frac{e^2}{R} \right) \times |\hat{\psi}\rangle = E \times |\hat{\psi}\rangle. \quad (4.33)$$

Вышеприведенное уравнение действительно достигает нашей цели. В самом деле, оно дает *новую явно притягивающую силу между нейтральными атомами молекулы водорода, которая отсутствует в обычной квантовой химии*. Уравнение также объясняет причину почему молекула  $H_2$  допускает только два H-атома. Как мы увидим в оставшихся разделах, уравнение (4.33) позволяет также существенно более точное воспроизведение энергии связи и других молекулярных характеристик, приводит к более быстрой сходимости рядов с ощутимым сокращением компьютерного времени и разрешает другие недостатки обычных моделей.

## 4.5 Точно решаемая трехтельная изохимическая модель молекулы водорода

Наша изохимическая модель молекулы водорода (4.33) может быть подвергнута дополнительному упрощению, невозможному для квантовой химии. В нашей изотопической модели, два изоэлектрона связаны вместе в синглетное состояние, которое мы называем изоэлектрониемом. В частности, зарядовый радиус последнего достаточно мал (см. Рис. 4.3)

$$r_{12} \leq r_{1a}, \text{ и } r_{1b}, \quad r_{12} \approx 0, \quad (4.34a)$$

#### 4.5. ТРЕХТЕЛЬНАЯ ИЗОХИМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ВОДОРОДА 213

$$r_{1a} \approx r_{2a} = r_a, \quad r_{1b} \approx r_{2b} = r_b. \text{eqno}(4.34b)$$

Более того, Н-ядра примерно в 2000 раз тяжелее, чем изоэлектронииум. Следовательно, наша модель (4.33) может быть сведена к *ограниченной задаче трех тел*, подобно тому, как это возможно для обычного  $\text{H}_2^+$  иона [1], но не для обычной молекулы  $\text{H}_2$ .

Такая ограниченная модель содержит два покоящихся протона на фиксированном взаимном расстоянии, плюс изоэлектронииум двигающийся вокруг протонов по орбите (например, *oo*-формы, Рис. 4.4), согласно структурному уравнению

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu_1} \times \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu_2} \times \nabla_2^2 - V \times \frac{e^{-r_{12}b}}{1 - e^{-r_{12}b}} - \right. \\ \left. - \frac{2e^2}{r_a} - \frac{2e^2}{r_b} + \frac{e^2}{R} \right) \times |\hat{\psi}\rangle = E \times |\hat{\psi}\rangle. \quad (4.35)$$

При последнем приближении, модель впервые позволяет получение *точного решения для структуры молекулы  $\text{H}_2$* , подобно случаю  $\text{H}_2^+$  иона или для других ограниченных задач трех тел. Это решение будет изучено в Главе 6 с помощью вариационных методов. Точное аналитическое решение не исследуется в этой работе и оставляется заинтересованным коллегам. На этом вводном уровне мы ограничиваемся только несколькими комментариями.

Отметим, что *вышеупомянутое точное решение молекулы водорода возможно только для случая полностью стабильного изоэлектронииума при малой взаимной дистанции между двумя электронами*. Действительно, для случая взаимной дистанции между валентными электронами не ограниченной 1 фм, модель имеет *структуру четырех тел*, которая не допускает точного решения.

Отметим также, что (4.35) является изохимической моделью молекулы  $\text{H}_2$  внутри адронного горизонта. Соответствующее воспроизведение *внешнего случая* по отношению к адронному горизонту представлено в следующем разделе.

Отметим также, что приведенная выше ограниченная модель трех тел может быть использована для изучения связи Н-атома с другим простым атомом, таким как О, поэтому допускаются, опять-таки впервые, новые точные расчеты для воды, как для НОН, а именно, как для двух

пересекающихся изотопических связей НО и ОН, каждая из которых допускает точное решение, с возможным расширением до молекулярной цепочки и очевидным расширением до других молекул.

Читатель, заинтересованный в изучении модели (4.35), должен иметь в виду, что энергия покоя изоэлектрониума в этой работе неизвестна, поэтому используется как свободный параметр пригодный для подгонки к экспериментальным данным. Более точно, в уравнении (4.35) мы приняли из Раздела 4.3, что

$$m_{\text{изоэлектрониум}} = 2 \times m_{\text{электрон}}. \quad (4.36)$$

Тем не менее, результаты Раздела 4.7 являются приближенными. В частности, они имеют место при предположении, что изоэлектрониум не имеет внутренней энергии связи. Такое предположение было сделано со специальной целью, – доказать, что непотенциальные силы, воспроизводимые с помощью изоединицы, действительно могут производить связанное состояние. И в частности, это предположение было продиктовано необходимостью воспроизведения принципа запрета Паули без введения потенциала.

Однако, такая точка зрения может оказаться единственно приемлемой на молекулярных расстояниях валентных электронов и не необходимой на малых расстояниях. Как результат, изоэлектрониум действительно может иметь внутреннюю энергию связи, то есть он может иметь внутренние силы выводимые из потенциала в дополнение к непотенциальным силам без энергии связи, как отмечено на Рис. 4.4.

Это происходит согласно тому факту, что структура изоэлектрониума подразумевает три действующие силы: одна отталкивающая сила, согласно одноименным зарядам, плюс две силы притяжения, согласно двум парам противоположных магнитных полярностей в синглетной конфигурации. Последние две притягивающие силы могут превосходить отталкивание согласно изменениям начинающимся на расстояниях порядка одного ферми, приводящим к возможной чисто притягивающей силе выводимой из потенциала.

При выполнении последних условий, изоэлектрониум действительно имел бы отрицательную энергию связи, имеющую неизвестное значение

$$m_{\text{изоэлектрониум}} < 2 \times m_{\text{электрон}}. \quad (4.37)$$

Понятно, что случай  $m_{\text{изоэлектрониум}} > 2 \times m_{\text{электрон}}$  является невозможным.

#### 4.5. ТРЕХТЕЛЬНАЯ ИЗОХИМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ВОДОРОДА 215

Неизвестный характер массы изоэлектрониума значительно меняет перспективу ограниченной модели (4.35). Как мы увидим в Главе 6, возможно доказать через вариационный и другие методы, что модель (4.35) при предположении (4.36) не допускает точных решений правильно воспроизводящих энергию связи молекулы водорода. Однако, при свободном использовании массы изоэлектрониума для подгонки под экспериментальные данные, ситуация может быть другая.

Другая информация, которая не должна приниматься как точная, касается размеров изоэлектрониума, (4.19). Действительно, как подчеркивалось в Разделе 4.3, это значение должно приниматься как верхнее. В модели (4.35) изоэлектрониум считается точечным. Однако, сначала модель может быть расширена через (4.35) для стабильного изоэлектрониума с фиксированным неизвестным радиусом

$$r_c = b^{-1} \leq 6.8 \times 10^{-11} \text{ см.} \quad (4.38)$$

Во втором расширении модели (4.35), которое также должно быть рассмотрено,

$$r_c = b^{-1} \geq 6.8 \times 10^{-11} \text{ см,} \quad (4.39)$$

так как, как подчеркнуто в Разделе 4.2 и 4.3, любое предположение, что изоэлектрониум прекращает существование на дистанциях больших, чем  $10^{-11}$  см, подразумевало бы нарушение принципа запрета Паули.

В сущности, принятая масса (4.36) больше согласуется с предположением (4.39), чем с (4.38), опять-таки из соображений предотвращения существования на больших взаимных дистанциях между валентными электронами внутренних потенциальных сил притяжения с энергией связи, которая изменяла бы обычные атомные структуры.

Несмотря на то, что в физической реальности допускаются изменения размера изоэлектрониума, его среднее значение взятое как константа может иметь смысл, конечно только как первое приближение.

Третья заслуживающая внимания величина модели (4.35) это экспериментальное значение длины связи, которая, в общем, связана с расстоянием между двумя ядрами  $R$ . В принципе, такое расстояние ожидается меняющимся полностью стабильным изоэлектрониумом. Следовательно, решение модели (4.35), в которой  $R$  взято из экспериментальных данных, действительно имеет смысл, разумеется как первое приближение.

В заключение, и в модели четырех тел (4.33) и в ограниченной модели (4.35) трех тел, мы имеем три величины, которые, в принципе, могут

быть приняты как неизвестные и, следовательно, должны быть подобраны из соображений совпадения с экспериментальными данными: 1) масса изоэлектроннума; 2) размер изоэлектроннума; и 3) длина связи.

Нет сомнений в том, что точное аналитическое решение модели (4.35) подходящее для воспроизведения энергии связи водорода допускается вышеприведенными тремя возможностями подгонки с интересными следствиями для всех Н-связей, чье изучение мы оставляем заинтересованным исследователям.

## 4.6 Изохимическая модель молекулы водорода с нестабильным изоэлектроннумом

В этом разделе мы делаем обзор исследований работы [5], посвященной решению ограниченной изохимической модели молекулы водорода, (4.35) и Рис. 4.3, через обычные вариационные методы используемые в химии, при предположении, что изоэлектроннум имеет характеристики (4.25). Как мы увидим, эти исследования достигли существенно точного воспроизведения экспериментальных данных молекулы водорода, включая ее энергию связи и длину связи, впервые только из первых принципов и без *ad hoc* допущений.

Из исторических работ в химии, связанных с нашей моделью, можно привести работу [6]. Более свежие работы [8–38] связаны с нашим исследованием технически.

В этом разделе не будут рассмотрены возможности того, что масса изоэлектроннума может быть меньше, чем удвоенная масса электрона, и его радиус больше, чем  $6.8 \times 10^{-11}$  см.

Отметим сразу, что решение полной модели с халтеновским потенциалом  $e^{-rb}/(1 - e^{-rb})$ , где  $r_c = b^{-1}$  – размер изоэлектроннума, подразумевает довольно значительные технические трудности. Поэтому, мы будем изучать модель (4.35) с аппроксимацией халтеновского потенциала в гауссовском виде

$$\frac{e^{-rb}}{1 - e^{-rb}} \approx \frac{1 - Ae^{-br}}{r}, \quad (4.40)$$

с константой  $A$  определенной ниже.

Известно, что линейная комбинация достаточного числа гауссовских функций может аппроксимировать любую функцию. Следовательно, до-

стижение довольно точного воспроизведения молекулярных данных через аппроксимацию (4.40), очевидно, сохранится при полном использовании халтеновского потенциала.

Напомним из Раздела 4.3, что *стабильный* характер изоэлектрониума решающим образом зависит от использования халтеновского потенциала притяжения, который на малых расстояниях "поглощает" кулоновские силы отталкивания, что приводит к результирующему притяжению. Следовательно, ослабление халтеновского потенциала в вышеуказанной гауссовской форме имеет своим прямым следствием переход изоэлектрониума в *нестабильное* состояние.

В этом и последующих разделах, мы, следовательно, будем изучать изохимическую модель молекулы водорода, которая является чем-то средним между обычной химической моделью и изохимической моделью с полностью стабильным изоэлектрониумом.

Следует отметить, что термин "нестабильный изоэлектрониум" следует соотносить с периодом времени в течение которого два валентных электрона остаются внутри адронного горизонта  $6.8 \times 10^{-11}$  см. Этот же термин *не должен* интерпретироваться как тот факт, что изоэлектрониум не существует вне адронного горизонта, так как последнее подразумевает множество несогласованностей, таких как возможное нарушение принципа запрета Паули, приобретение молекулами ферромагнитного характера и т.д.

Главная цель этого раздела заключается в том, чтобы показать достижение точного воспроизведения молекулярных характеристик даже для случая одного гауссовского приближения (4.40). Вопрос, является ли изоэлектрониум стабильным или нестабильным, очевидно, зависит от величины нестабильности и ее противоречия с экспериментальными данными, например магнитной восприимчивостью. Раз так, этот вопрос теоретического и экспериментального плана оставляется будущим работам.

При вышеуказанном предположении, нашим первым шагом является изучение модели (4.35) в типичной кулоновской форме, характеризуемой следующим уравнением, выраженном здесь и далее в атомных единицах (ат.ед.)

$$H \times \Psi = \left( -\frac{1}{2} \nabla^2 - \frac{2}{r_a} - \frac{2}{r_b} + \frac{1}{R} \right) \times \Psi, \quad (4.41)$$

где отличия от соответствующего уравнения для  $H_2^+$  иона [1] заключа-

ются в замене массы  $\mu = 1$  на  $\mu = 2$  и электрического заряда  $e = 1$  на  $e = 2$ .

Стандартным методом для решения вышеприведенного уравнения является следующий. Вариационное исчисление вводится в форме матричной алгебры с неортогональным базисным набором  $S$  нормированном к 1. Метрика этой неортогональной системы уравнений  $S$  используется для введения ортогональной задачи на собственные значения и среди собственных значений ищется наименьшее значение.  $H$  и  $S$  – эрмитовы матрицы.  $E$  – диагональная матрица с собственными значениями воспроизводящими энергию.

$$HC = ESC; \text{ define } C = S^{-\frac{1}{2}}C', \text{ then } HS^{-\frac{1}{2}}C' = ES^{-\frac{1}{2}}C', \quad (4.42a)$$

$$HC = ESC; \text{ определяет } C = S^{-\frac{1}{2}}C', \text{ тогда } HS^{-\frac{1}{2}}C' = ES^{-\frac{1}{2}}C', \quad (4.42a)$$

$$(S^{-\frac{1}{2}}HS^{+\frac{1}{2}}C') = H'C' = E(S^{-\frac{1}{2}}SS^{-\frac{1}{2}})C' = EC', \quad (4.42b)$$

где последнее уравнение получено умножением первого уравнения слева на  $S^{-\frac{1}{2}}$ , и далее использовалось свойство унитарности  $S^{-\frac{1}{2}} = S^{+\frac{1}{2}}$  для формирования задачи на собственные значения. Наконец мы решаем уравнение относительно  $C'$  приведением  $H'$  к диагональному виду и получаем  $C = S^{-\frac{1}{2}}C'$ .

Здесь базис сформирован из ограниченных базисных наборов  $\Phi$ , которые являются фиксированными линейными комбинациями гауссовских сферических функций  $\chi$  подобранных к действительным формам сферических гармонических функций. Собственный вектор-столбец  $C$  дает базисные коэффициенты молекулярных орбиталей согласно выражению

$$\Psi_i = \sum_{c_{i,j}} (j : \Psi_j = \sum_{a_{j,k}} \Psi_k; \chi = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{3/4} \exp[-(\alpha - A)^2] = / \alpha, A). \quad (4.43)$$

Задача формирования острого пика на  $1s$  орбитали практически решается использованием до шести гауссовских функций; мы используем здесь наилучшую "с наиминимизированной энергией"  $1s$  орбиталь из группы Поупла [18]. В этой задаче  $s$ -,  $p$ -,  $d$ - и  $f$ - орбитали являются функциями поляризации и служат просто для оценки эффектов других угловых моментов на  $1s$  орбиталях, которые являются главными терминами  $1s$ -сигма связи в  $H_2$ .

Гауссовские орбитали могут быть легко проградуированы на экранированный ядерный заряд умножением гауссовских экспонент на квадрат градуировочного множителя (в сущности, сокращение пространства модели H-атома) и последующей перенормировкой линейной комбинации гауссовских функций. В этой разделе, градуировочная константа 1s орбиталей была оптимизирована как 1.191 и орбитали 2-й, 3-й и 4-й оболочек оптимизированы как градуированные оболочки иначе, чем для каждой орбитали индивидуально.

После того как орбитали были оптимизированы использованием параболических подгонок к трем значениям энергии, функциями градуировочного значения, стало очевидно, что длина связи модели трех тел много короче обычного значения 1.4011 бор (= 0.74143 Ангстрема). Поэтому, длина связи была переоптимизирована после оптимизации градуировки для каждой оболочки. Градуировочные константы и орбитальные сокращения принимают значения порядка Ангстрема при энергии  $-7.61509174$  хартри (=  $-207.2051232$  эВ), где достижение точного воспроизведения энергии связи изучено в деталях.

Хотя использовался большой набор 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d, 4s, 4p, и 4f орбиталей, вариационная энергия вероятно выше, чем точное решение полученное Бейтсом, Ледшемом и Стюартом [12]. Тем не менее, энергия 6-гауссовской (6G) 1s функции с наименьшей энергией [18] равна  $-0.499946$  хартри для H атома, таким образом приведенная здесь энергия должна быть в пределах 0.001 хартри от точного решения.

В то время как ожидается, что изоэлектронииум должен быть даже более нестабильным чем коллапсирующая квазичастица позитронииум, согласно взаимодействию отталкивания электронов, эта модель трех тел H<sub>2</sub> предсказывает усиление молекулярной стабильности на 6 хартри и существенное сокращение длины связи. Значение  $E(1)$  для электронииума (около  $-11.473164$  хартри) ниже, чем полная энергия молекулы согласно отталкиванию протонов-ядер по закону  $1/R$ .



## 4.7 Гауссовская аппроксимация изохимической модели молекулы водорода как системы четырех тел

Как отмечено ранее, возможно, что валентные электроны связаны друг с другом в изоэлектронии не постоянным образом, а статистическим, находясь только часть времени в связанном состоянии. В этом случае, ограниченная модель трех тел, очевидно, недостаточна. В этом разделе мы делаем обзор исследований [5], касающихся полной изохимической модели четырех тел  $H_2$ , которая также позволяет достижение точного воспроизведения энергии связи из первых принципов, без каких-либо допущений (см. Рис. 4.7).

Со времени Хиллерааса [20] 1930-х годов были приложены значительные усилия в поисках пути для вычисления последних 2% энергии связи молекул. Бойс [22] вывел форму "конфигурационного взаимодействия", которая позволяла точные вариационные решения, но оказалась очень медленно сходящейся и применимой только к небольшим молекулам. Пертурбация Моллера-Плессета, разработанная Поуплом и др. [23], является сегодня популярной, но исследования с точностью до восьмого порядка показали несходимость после огромных затрат компьютерного времени. Диаграммы связанных кластеров Барлетта и др. [24], метод мультikonфигурационного самосогласованного поля (MCSCF) Шейфера и др. [25] и Голдстоун-Брюкнер-Фейнмановская диаграммная пертурбация Келли [26], как было показано, требуют очень больших компьютерных ресурсов, ограничены малыми молекулами и иногда врут, давая даже отрицательные энергии связи, как показано Годдардом [27] для  $Cr_2$ .

Все эти медленные и дорогостоящие методы похоже наделены одной общей чертой, — использование пустых "виртуальных" орбиталей с высокой энергией при вычислениях основного состояния, обычно типа Хартри-Фока-Рутана, для улучшения воспроизведения основного состояния.

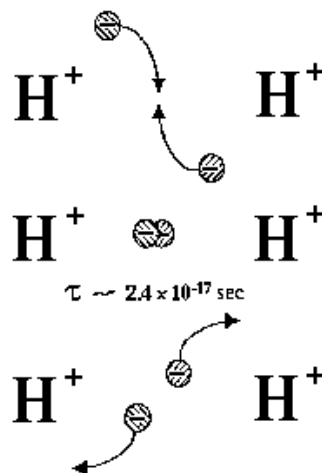


Рис. 4.7: Схематический вид *изохимической модели молекулы водорода с нестабильным изоэлектронием*, согласно слабости халтеновского потенциала и последующей отмены бесконечного времени жизни, как дополнительный к виду Рис. 4.4 со стабильным изоэлектронием. В этом случае, понятие изоэлектрониема по существу отражает тенденцию пар валентных электронов к объединению в синглетные состояния на близком расстоянии. Использование изохимии, более чем обычной химии, является необходимым, так как даже эта слабая форма изоэлектрониема, так же как все экранирования кулоновского потенциала вообще, является неунитарным образом обычного кулоновского взаимодействия, как это установлено в Главе 1. Следовательно, все эти модели, для своей инвариантной формулировки, требуют воспроизведения на изопространствах над изополями. В тексте, для простоты, мы представляем проекцию такой инвариантной формулировки на обычные пространства над обычными полями.

Можно спросить, как это возможно: понизить энергию использованием волновых функций более высокой энергии? Фактически, некоторое понижение энергии найдено предположением довольно путанной динамики электрона, и уровень сходимости этого метода довольно слабый.

Принятый здесь метод использует обычные уравнения Хартри-Фока-Рутана самосогласованного поля [1] (которые также имеют некоторые формальные пороки, такие как самодействующие члены [27]) и направлен на исследование формы кулоновского взаимодействия электрона.

Заметим, что понижение значений кулоновских интегралов будет понижать энергию уменьшением электрон-электрон отталкивания, в то время как обменные члены будут повышать энергию, но множитель  $1/2$  понизит эффект обменных членов. Поэтому, понижение значений интегралов будет понижать энергию. Заметим, что Годдард [27] уже советовал понижать собственную энергию атома вычитанием  $1.39$  эВ из обменных интегралов Хартри-Фока в случаях  $\text{Cr}_2$  и  $\text{Mo}_2$ . Таким образом, мы получаем выражения

$$FC = ESC; \quad F_{i,j} = H_{i,j} + \sum_{k,l} P_{k,l} [(i,j|k,l) - \frac{1}{2}(i,k|j,l)], \quad (4.44a)$$

$$(i,j|k,l) = \iint \chi_i(1)\chi_j(1) \frac{1}{r_{12}} \chi_k(2)\chi_l(2) d\tau_1 d\tau_2, \quad (4.44b)$$

$$P_{i,j} = 2 \sum_n c_{n,i} c_{n,j} \quad (\text{sum } n \text{ only over occupied orbitals}). \quad (4.44c)$$

$$P_{i,j} = 2 \sum_n c_{n,i} c_{n,j} \quad (\text{сумма } n \text{ только по занятым орбиталиям}). \quad (4.44c)$$

Работа Сантилли и Анималу [7c] 1995 г. посвященная куперовским парам обращается к нелокальной адронной силе притяжения, впервые введенной для  $\pi^0$ -мезона [7a], как применимой к синглетно-спаренным электронам, которые формируют бозонную частицу. После использования нелокального изотопического нелинейного преобразования, адронное притяжение было преобразовано обратно в действительное пространство и моделировало результирующую силу притяжения, которая превосходит кулоновскую силу отталкивания. В свою очередь, последнее составляет физико-химическую основу для использования подходящим образом экранированного кулоновского потенциала для воспроизведения энергии связи.

Применение результатов оригинальной работы 1978 г. к коллапсу позитрониума, осуществленное Сантилии [7a], показало, что халтеновский потенциал не обязательно является единственным воспроизведением адронной силы. Линейная комбинация подобных потенциалов может быть использована для воспроизведения того же адронного связанного состояния, при условии, что они характеризуют силу притяжения между электронами способную пересилить их кулоновское отталкивание.

Эта работа предполагает, что матричные элементы дву-гауссовски экранированного кулоновского потенциала могут быть использованы для аппроксимации действительной пространственной формы адронного притяжения. Важным свойством этой формы является то, что она может быть слита с общим случаем четырехцентрового кулоновского интеграла или обменного интеграла, предложенного Шавитом [16], с использованием техники гауссовского преобразования.

$$\frac{1}{r_{12}} = \sqrt{\frac{1}{\pi}} \int_0^{\infty} s^{-\frac{1}{2}} \exp[-sr_{12}^2] ds, \quad (4.45a)$$

$$1 + \frac{p+q}{pq} s = \frac{1}{1-t^2}. \quad (4.45b)$$

На будущее отметим, что это преобразование уже имеет полюс в нижнем пределе, где  $s = 0$ . Этот полюс был перенесен, на последнем шаге, заменой переменной, даваемой (4.45). Шавит был способен (как бывший студент С.Ф. Бойса) показать, что техника гауссовского преобразования воспроизводит формулу, выведенную ранее Бойсом [6] в 1950 г. с использованием электростатических аргументов. Гауссовская часть является основанием SCF программ Шиллади [8, 28] и других.

Важно отметить, что эта формула является полностью общей относительно ориентации четырех гауссовских сферических вытянутых орбиталей и расстояния между электронами. Модифицированная для описания корреляции двух электронов, *такая общая формула может описывать угловую корреляцию и расстояние взаимодействия*. Поэтому, матричное кулоновское отталкивание моделирует действительную пространственную форму адронного притяжения двух электронов.

Хорошо обоснованное восхищение работой Шавита по выводу кулоновского взаимодействия было вновь подтверждено, когда его вывод был проверен. Эта работа добавляла гауссовское экранирование как  $\exp[-r^2]/r$ ,

так что могли быть использованы специальные свойства гауссовских функций, особенно то свойство, что полярные координаты с легкостью разделяются по перемножаемым  $x$ ,  $y$ ,  $z$  компонентам. Целью является оценить матричные элементы для двух электронов и четырех центров гауссовски экранированного кулоновского потенциала, как показано ниже,

$$Y(r) = \frac{1 - 2 \exp[-\alpha r^2]}{r}. \quad (4.46)$$

Интересно, что гауссова экспонента пронесена сквозь оригинальный вывод кулоновского взаимодействия с помощью хорошо известной вспомогательной функции  $F_0$ , которая была изучена Шиллади [8, 28] и другими. Так как оба  $s^{\frac{1}{2}}$  и  $(s + \alpha)^{\frac{1}{2}}$  оказываются в знаменателе экранированной кулоновской формы, то два полюса оказываются в интеграле. Заменой переменной поглощается член

$$1 + \frac{p+q}{pq}(s + \alpha) = \frac{1}{1-t^2}, \quad (4.47)$$

тогда как полюс согласно  $(s + \alpha)^{-1/2}$  сдвигает другой полюс в  $s^{-\frac{1}{2}}$  к нижнему пределу интеграла. Гладкий всплеск очевиден у нижнего значения интегрирования при использовании 70-точечного симпсоновского правила интегрирования (две области рядом с полюсом заполняются более плотно 20 точками и 50 точек приходится на оставшееся пространство.)

Вышеупомянутая работа была проведена с использованием 64-битной, удвоенной точности арифметики, которая обеспечила 14 значащих цифр. Простой офсет ( $\delta$ )  $1.0 \times 10^{-15}$  (во избежание числового переполнения) обеспечил полезные результаты. Хотя полюс является проблемой при интегрировании, так как необходима непрерывность функции, численное интегрирование без особого труда дает до 14 значащих цифр, в частности, процедуры, используемые для вычисления кулоновских интегралов, как известно, дают точность только до 12 значащих цифр [28].

Область под пиком полюса оценивается как узкий треугольник на прямоугольнике шириной  $1.0 \times 10^{-15}$  с высотой треугольного набора  $1.79940 \times 10^{13}$  умноженного на высоту набора  $1.0 \times 10^{-15}$  в области интегрирования (первая симпсоновская точка).

Имеющийся код для этого экранированного кулоновского интеграла является сейчас более медленным, чем соответствующая функция, используемая для кулоновских интегралов согласно 70-точечному симпсоновскому интегрированию, но интегрируемая функция почти ровная

после пика при  $s = 0.0$ , так что эта часть интеграла может быть оценена более быстро, по нескольким точкам. Простой офсет нижнего предела  $1.0 \times 10^{-15}$  адекватен для этой монографии.

$$\left( aA(1), bB(1) \left| \frac{\exp(-\alpha(r_{12})^2)}{r_{12}} \right| cC(2), dD(2) \right) = \quad (4.48a)$$

$$= \frac{2\pi^{5/2}}{pq\sqrt{p+q}} e^{[ab/(a+b)]\overline{AB}^2 - [cd/(c+d)]\overline{CD}^2} \times \\ \times \int_{\rho}^1 e^{-[pq/(p+q)]\overline{PQ}^2 t^2} \left( \frac{[pq/(p+q)]t^2}{[pq/(p+q)]t^2 + \alpha(t^2 - 1)} \right)^{1/2} dt, \quad (4.48b)$$

$$\rho = \delta + \frac{\alpha\sqrt{p+q}}{pq + (p+q)\alpha}, \quad p = (a+b), \quad q = c+d, \quad \delta = 1.0 \times 10^{-15}, \quad (4.48c)$$

$$\text{pole} = (1.79940 \times 10^{13}) e^{-[pq/(p+q)]\overline{PQ}^2 \rho^2}. \quad (4.48d)$$

Новый интеграл был включен в те же процедуру, что используется для оценки обычной схемы Хартри-Фока-Рутана (SCF), за исключением  $F_0$ , для которой была предложена новая вспомогательная функция (4.46). Молекула  $H_2$  была истрактрована с использованием того же метода с фиксированными ядрами и дистанцией связи 1.4011 бор. Простой базисный набор только одной  $6G-1s$  орбитали с наименьшей энергией [18], центрированной на каждом из  $H$ -ядер был использован для тестирования новой программы Сантили-Анималу-Шиллади SASLOBE, которая основана для расчета 512 сжатых орбиталей.

Должно быть отмечено, что данные энергии являются теперь параметрически зависимыми от константы гауссовского экранирования как  $E(\alpha)$ . Энергия вариационно связана с вышеупомянутой истинной энергией в узкой области вокруг оптимального значения. Весьма важно отметить, что энергия понижается с использованием нового притягивающего адронного члена, но оптимальное значение является трудным для локализации, и "вариационный коллапс" имеет место когда  $r_c$  расширяется или вообще сокращается от невысокого минимума энергии.

Для минимизации числа параметров модели (до только одного: константы кулоновского экранирования  $A$ ) на гауссовскую функцию накладываются два уравнения. Во первых, от функции требуется равенство

нулю при некотором радиальном обрезавшем значении  $r_c$ , которое принимается обратным к  $b$  – переменной из Раздела 5,

$$b = \frac{1}{r_c} = A \frac{\exp[-\alpha r_c^2]}{r_c}, \quad A = \exp[+\alpha r_c^2]. \quad (4.49)$$

Во вторых, это радиальное обрезавшее значение было использовано как сигма обратной гауссовской функции (радиус на половине высоты),

$$A \exp\left[-\frac{\ln 2}{r_c^2} r_c^2\right] = \frac{A}{2}, \quad \alpha = \frac{\ln 2}{r_c}, \quad A = 2. \quad (4.50)$$

Верхнее ограничение радиуса изоэлектрониа было оценено в Разделе 4.3 около  $0.6843 \times 10^{-10}$  см, что соответствует 0.012931401 бор. Этот радиус делает значительной нижнюю энергию Хартри-Фока-Рутана для  $H_2$ , и дальнейшая оптимизация пика полюса производила SCF энергию  $-1.17446875$  хартри, с обрезавшим радиусом 0.0118447 бор или  $1.18447 \times 10^{-10}$  см, с использованием минимального  $1s$  базиса. В заключение, подобранное значение  $b \equiv 1/r_c$  для молекулы  $H_2$  является ограниченным по ряду причин. Минимальный базис был позже расширен до  $6G-1s$ ,  $1G-2s$ ,  $1G-2p$  для полюсной калибровки.

Детали точного воспроизведения энергии связи через вышеупомянутый второй метод представлены в Дополнении 4.В.

## 4.8 Краткое изложение результатов

Для демонстрации преимуществ изохимической модели с использованием гауссовски экранированного кулоновского притяжения между электронами, было применено стандартное исчисление Бойса-Ривза [22] из работы [2]. Оно включало все синглетные и дуплетные возбуждения CISD из основного состояния Хартри-Фока-Рутаана SCF орбиталей для  $99 \times 99$  "codetor" [6] взаимодействия. Только  $1s$  орбитали были оптимизированы с градуировкой 1.191 для  $6G-1s$  орбиталей с наименьшей энергией, но базис включал также  $1G-2s$ ,  $2G-2p$ ,  $1G-3s$ ,  $1G-3p$ ,  $3G-3d$ , Thd  $1G-4sp$  (тетраэдральное расположение четырех гауссовских сфер), и  $4G-4f$  орбитали градуированные к водородным значениям как предварительно оптимизированным [17].

Дополнительные базисные функции обеспечивают благоприятную возможность для описания возбуждения электронов и их перехода на более

Таблица 4.1: Краткое изложение результатов для молекулы водорода.

$Bu\partial$	H <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> <sup>a</sup>	H <sub>2</sub>
Базисное экранирование			
1s	1.191	6.103	1.191
2s	0.50	24.35	0.50
2p	0.50	24.35	2.36
3s	0.34	16.23	*
3p	0.34	16.23	*
3d	0.34	-16.2 <sup>b</sup>	*
4sp	0.25	12.18	*
4f	0.25	12.18	*
Вариационная энергия (ат. ед.)	*	-7.61509174	*
SCF энергия (ат. ед.)	-1.12822497	*	-1.13291228
CI энергия (ат. ед.)	-1.14231305	*	*
CINO энергия (ат. ед.)	-1.14241312	*	*
SAS энергия (ат. ед.)	*	*	-1.174444
Точная энергия (ат. ед.) [30]	-1.174474	*	-1.174474
Длина связи (бор)	1.4011	0.2592	1.4011
Радиус изоэлектронума (бор)	*	*	0.01124995

<sup>a</sup>Гамильтониан трех тел (5.1).

<sup>b</sup>Отрицательная 3d градуировка показывает пять эквивалентных три-сферы градуированные до 16.20 в отличии от "канонических" 3d форм.

высокие орбитали, как и при использовании стандартной техники конфигурационного взаимодействия, что несколько противоречит главной гипотезе этого раздела, которая предполагает наличие адронной силы притяжения между электронными парами внутри критического радиуса  $r_c$ . Результаты вышеупомянутых расчетов приведены в Таблице 4.1.

С.И. Бойса-Ривза достигла энергии  $-1.14241305$  хартри, основанной на SCF энергии  $-1.12822497$  хартри. Это было достигнуто одним дополнительным повторением "естественных орбиталей" (CINO), в которых матрица плотности первого порядка диагонализирована для улучшения электронного спаривания до первого порядка [29]. Фактически, эта процедура, только немного понижающая энергию, до  $-1.14241312$  хартри (то есть на  $-7.0 \times 10^{-7}$  хартри), показывает, что 99-конфигурационное



воспроизведение стремится к понижению энергии связи при использовании такого базисного набора, в то время как изохимические расчеты дают точную энергию при сравнительно намного меньшем базисном наборе.

Так как SASLOBE имеет только  $n^7$  процедур для необходимого интегрального преобразования, вместо наиболее эффективного  $n^5$  алгоритма ( $\simeq n$  – число базисных функций), SASLOBE C.I. работает немного медленнее и требует около 20 часов на компьютере 300 MFLOPS Silicon Graphics.

С использованием более эффективных процедур, это время может быть понижено примерно до трех часов. Однако, метод экранированного кулоновского притяжения использовал маленький базис и достигал низких энергий в считанные секунды. Это также говорит о том, что правильное расположение нескольких квадратурных точек в новом интегральном порядке может существенно понизить время расчетов SASLOBE по крайней мере в два раза.

Следовательно, становится ясным, что вычисления в адронной химии являются, по скромным расчетам, по крайней мере в 1000 раз более быстрыми чем C.I. вычисления, что полностью схоже с соответствующим случаем в адронной vs. квантовой механике.

Другая оценка говорит о том, что, так как новые интегральные поправки требуют немного больше времени чем обычные кулоновские интегралы (но не занимают больше памяти), компьютерное время для изохимического вычисления должно быть примерно в три раза больше чем для соответствующего вычисления согласно Хартри-Фоку-Рутану, в любом данном базисе.

Расширение изохимической модели молекулы  $H_2$  до других молекул является концептуально очевидным. В частности, понятие изоэлектронума существенным образом ограничивает количество возможных связей только до реально существующих, как это происходит в случае молекулы воды (см. следующую главу).

Для того чтобы обобщить лежащую в основе численную трактовку до молекул содержащих от H до F, пик полюса был реоптимизирован для получения 100% корреляционной энергии ниже SCF энергии в данном базисном наборе, так как SCF энергии было не достаточно на пределе Хартри-Фока.

Энергия получена в данном случае из подбора пика полюса к экспериментальному значению HF, и она ниже энергии полученной методом

Таблица 4.2: Результаты для некоторых молекул, полученные на основе теории изоэлектронииума.

<i>Вид</i>	H <sub>2</sub>	H <sub>2</sub> O	HF
SCF-энергия (DH) (ат. ед.)	-1.132800 <sup>a</sup>	-76.051524	-100.057186
Хартри-Фок <sup>d</sup> (ат. ед.)			-100.07185 <sup>d</sup>
Изо-энергия (ат. ед.)	-1.174441 <sup>c</sup>	-76.398229 <sup>c</sup>	-100.459500 <sup>c</sup>
Горизонт $R_c$ (Å)	0.00671	0.00038	0.00030
QMC энергия <sup>d,e</sup> (ат. ед.)	-1.17447	-76.430020 <sup>e</sup>	-100.44296 <sup>d</sup>
Точная не-рел. (ат. ед.)	-1.174474 <sup>f</sup>		-100.4595 <sup>d</sup>
Корреляция (%)	99.9 <sup>b</sup>	91.6 <sup>b</sup>	103.8
SCF-диполь (D)	0.0	1.996828	1.946698
Изо-диполь (D)	0.0	1.847437	1.841378
Эксп. диполь (D)	0.0	1.85 <sup>g</sup>	1.82 <sup>g</sup>
Время <sup>h</sup> (мин:с)	0:15.49	10:08.31	6:28.48

(DH<sup>+</sup>) Даннинг-Хузинага (10S/6P), [6,2,1,1,1/4,1,1]+H<sub>2</sub>P<sub>1</sub>+3D1.

<sup>a</sup>LEAO-6G1S + оптимизированный GLO-2S и GLO-2P.

<sup>b</sup>Связанный с базисным набором используемым здесь, не достаточный HF-предел.

<sup>c</sup>Изо-энергия подобранная к данной точной энергии для HF.

<sup>d</sup>Хартри-Фока и QMC энергии из Лучова и Андерсона [33].

<sup>e</sup>QMC энергии из Хаммонда и др. [30].

<sup>f</sup>Первые 7 зн. цифр из Колоса и Волниевича [34].

<sup>g</sup>Данные из Chemical Rubber Handbook, 61-е изд., стр. E60.

<sup>h</sup>Машинное время на O2 Silicon Graphics workstation (100 MFLOPS max.).

квантового Монте-Карло (QMC) Лучовым и Андерсоном [33], которая потребовала нескольких часов работы мощного компьютера, что можно сравнить с менее чем 10 минутами для этой работы. Действительно, время работы для HF было около 8 CPU минут на 100 MFLOP Silicon Graphics O2 workstation.

Принципиальное значение полюса (4.48d) было принято за 100% энергии HF, H<sub>2</sub>O имеет две сильные сигма связи и две диффузные уединенные пары, таким образом единственное компромиссное значение является хорошей проверкой для метода. В HF F<sup>-</sup> имеет примерно сферическую форму, так что среднее значение  $r_c$  лучше работает при описании "корреляционной дыры" короткоживущего изоэлектронииума. Вычислен-

ные дипольные моменты находятся в прекрасном согласии с экспериментальными значениями. Использование того же значения полюса для  $\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{HF}$  слегка снижает энергию  $\text{H}_2$ . Результаты наших исследований для молекул образованных из  $\text{H}$  и  $\text{F}$  суммированы в Таблице 4.2.

Весьма поучительным является сравнение вышеприведенных данных (в частности по затраченному машинному времени) с соответствующими данными полученными через обычные подходы.

## 4.9 Заключительные замечания

Фундаментальным понятием новой модели молекулярных связей, изученной в этой главе [5], является объединение на близких расстояниях пар валентных электронов от двух различных атомов в синглетное квазичастичное состояние, называемое *изоэлектрониумом*, который движется как единое целое по орбитам *oo*-формы вокруг двух соответствующих ядер.

Изоэлектрониум и связанная с ним методология характеризуется тогда *изохимией*, покрывающей обычную химию, которая является ветвью более общей *адронной химии*, специально сконструированной для воспроизведения замкнуто-изолированных систем с линейными и нелинейными, локальными и нелокальными, а также потенциальными и непотенциальными внутренними силами.

Главным предположением является то, что линейные, локальные и потенциальные взаимодействия достаточны для атомных структур, поскольку атомные расстояния много больше чем размеры волновых пакетов электронов. Однако, при переходе к молекулярным структурам, добавляются дополнительные нелинейные, нелокальные и непотенциальные эффекты согласно глубокому взаимопроникновению волновых пакетов валентных электронов, которое, по существу, отсутствует в атомных структурах (Рис. 1.7).

Контактное взаимодействие притяжения, должно превосходить кулоновскую силу отталкивания в структуре изоэлектрониума, обязано своим происхождением именно нелинейным, нелокальным и негамильтоновым эффектам при глубоком перекрытии волновых пакетов; оно описывается *адронной механикой* [3b] и его инвариантная формулировка допускается недавно достигнутым расширением обычной математики, называемой *изоматематикой*.

Необходимы специальные экспериментальные исследования для подтверждения существования изоэлектрониума, причем имея в виду, что это состояние может оказаться нестабильным вне молекулы, в которой притяжение ядер подводят электронную плотность к критическому порогу для образования связи, – свойство, которое мы называем "пусковым механизмом" (триггером).

Нерелятивистские исследования дают радиус изоэлектрониума  $0.69 \times 10^{-10}$  см. Этот "горизонт", в частности, важен для изохимических приложений и разработок, так как вне горизонта электроны отделяются друг от друга, в то время как внутри горизонта они испытывают адронное притяжение.

Те же нерелятивистские исследования также предсказывают, что, как предельный случай, изоэлектрониум стабилен внутри молекулы, хотя частично стабильные конфигурации также дают приемлемые результаты. Вопрос стабильности или нестабильности изоэлектрониума внутри адронного горизонта должен быть, следовательно, также оставлен до экспериментального разрешения.

Вполне понятно, что когда ограничение до адронного горизонта снимается и молекулярные объемы допускаются для межэлектронного расстояния, изоэлектрониум должен быть стабильным, иначе может иметь место нарушение принципа запрета Паули. В этом смысле, изоэлектрониум является непосредственным отображением принципа запрета Паули.

Основания идеи изоэлектрониума могут быть найдены в работе Сан-тилли [7a] 1978 года, посвященной структуре  $\pi^0$ -мезона как связанному состоянию электрона и позитрона. Последняя модель также иллюстрирует возможности адронной механики по сравнению с квантовой механикой. Действительно, квантовая механика *не может* воспроизвести  $\pi^0$ -мезон как естественное связанное состояние одного электрона и одного позитрона из-за множества несогласованностей, таких как: невозможность воспроизведения энергии покоя  $\pi^0$ , которая требовала бы "положительной" энергии связи, так как сумма энергий покоя составляющих много меньше чем энергия покоя связанного состояния; невозможность воспроизведения зарядового радиуса  $\pi^0$ , который в квантовой механике мог быть равным только радиусу позитрониума; отсутствие воспроизведения времени жизни  $\pi^0$ ; и других недостатков.

Напротив, все вышеуказанные недостатки разрешаются адронной механикой, которая впервые допускает количественное, численное воспроизведение всех характеристик  $\pi^0$ -мезона, как связанного состояния на

близком расстоянии одного электрона и одного позитрона, включая его спонтанный распад с низшей модой  $\pi^0 \rightarrow e^- + e^+$ , который является следствием туннелирования составляющих [7a].

В частности, отмеченная модель  $\pi^0$ -мезона содержит первую идентификацию притягивающего характера нелинейных, нелокальных и негамильтоновых взаимодействий согласно волновому перекрытию в синглетном соединении (и их отталкивающего характера в триплетном соединении).

Изоэлектронииум также имеет свои обоснования в последующих работах Анималу [7b] 1994 года и Анималу и Сантилли [7c] 1995 года, по построению *адронной сверхпроводимости*, для численного воспроизведения структуры куперовской пары. Мы имеем здесь дело со схожим случаем для структуры  $\pi^0$ -мезона. Действительно, квантовая механика может описывать сверхпроводимость, но только через *ансамбль куперовских пар*, принимаемых как точечные. В частности, квантовая механика просто не может описать структуру *одной* куперовской пары, из-за расходящегося характера кулоновского отталкивания между идентичными электронами пары.

И снова, адронная сверхпроводимость Анималу-Сантилли разрешает этот недостаток и позволяет, впервые, построение структурной модели *одной* куперовской пары в замечательном согласии с экспериментальными данными (Раздел 1.9). Адронная сверхпроводимость обладает также предсказательными возможностями, просто отсутствующими в квантовой механике, такими как *предсказание нового электрического тока, образуемого по большей части движением электронных пар, в отличие от обычного электрического тока образуемого отдельными электронами* (патент заявлен). Этот новый адронный ток подразумевает очевидное снижение электрического сопротивления из-за, по существу, нулевого магнитного момента пары, по сравнению с огромными магнитными моментами отдельных электронов и их взаимодействиями с электронами атомов при движении внутри проводника.

Заметим наконец, что предыдущая адронная модель  $\pi^0$ -мезона и куперовской пары возможны благодаря способности адронной механики исключать расходимости на малых расстояниях, что технически реализуется через изотопии единицы и связанных с ней ассоциативных производений квантовой механики

$$I \rightarrow \hat{I} = 1/\hat{T}, \quad (4.51a)$$

$$|\hat{I}| \gg 1, \quad |\hat{T}| \ll 1, \quad (4.51b)$$

$$A \times B \rightarrow A \times \hat{T} \times B, \quad (4.51c)$$

при которых расходящиеся или медленно сходящиеся ряды могут очевидным образом принять быстро сходящиеся формы.

Тенденция отдельных валентных электронов связываться в изоэлектрониум дополнительно подтверждается и иными явлениями, такими как шаровая молния, которая состоит из большого числа электронов, связанных вместе внутри небольшой области.

В заключение, неопровержимые экспериментальные данные свидетельствуют о том, что электроны имеют способность объединяться друг с другом на близких расстояниях, несмотря на кулоновское отталкивание. Квантовая механика просто неспособна обеспечить научное изучение этой физической реальности. Адронная механика разрешает эту типовую ситуацию, впервые определяя условия необходимые для возникновения притяжения, называемые "пусковым механизмом", и тем самым допуская количественное исследование связи.

Изоэлектрониум приводит к установлению глубоких связей с разнообразными исследованиями в химии проводимых на протяжении 20-го века [6, 8–38] и дает физико-химические обоснования для этих исследований, так же как для их соответствующей математической формулировки для обеспечения инвариантности результатов.

В заключение, *изохимическая модель молекулярных связей предложенная Сантилли и Шиллади [5] поддерживается следующими концептуальными, теоретическими и экспериментальными данными:*

1) Изоэлектрониум вводит новую силу притяжения между нейтральными атомами молекулярной структуры, которая отсутствует в квантовой химии, и позволяет количественное понимание силы и стабильности молекулярных связей.

2) Изоэлектрониум допускает непосредственную интерпретацию причин почему молекулы  $H_2$  и  $H_2O$  допускают только два Н-атома.

3) Изоэлектрониум позволяет воспроизводить энергию связи молекулы водорода с точностью до седьмого порядка, поэтому позволяют осмысленные термодинамические расчеты.

4) Изоэлектрониум обеспечивает объяснение давно известного, хотя все еще мало понятного принципа запрета Паули, согласно которому, электроны коррелируют друг с другом в синглетном состоянии, когда находятся на одной орбитали, без какой либо обменной энергии, поэтому

этот процесс находится вне описательных способностей квантовой механики и квантовой химии.

5) Изоэлектрониум согласуется с существующими, как известно, электронными парами ответственными за сверхпроводимость, которые связаны друг с другом так сильно, что совместно тунеллируют сквозь потенциальный барьер.

6) Изоэлектрониум обеспечивает количественную модель для объяснения электронных корреляций. Вместо сложного "электронного танца" описываемого возбуждениями с положительной энергией, изохимическое объяснение состоит в том, что электроны энергетически находятся вне горизонта притягивающего потенциала согласно перекрытию их волновых функций вдали от критического порога адронного горизонта.

7) Изоэлектрониум согласуется с "кулоновской дырой" изученной Бойдом и Йи [35], как найдено из выделения точных явно-скоррелированных волновых функций из волновых функций самосогласованных полей. В наших исследованиях, "кулоновская дыра" ре-интерпретируется как "адронная дыра".

8) Изоэлектрониум находится также в согласии с "биполяроном", вычисленным для анионных вакансий в KCl Фойсом, Селлони, Паринелло и Каром [36], и биполаронным спектром представленным Ксиа и Блумфилдом [37].

9) Изоэлектрониум позволяет повысить скорость компьютерных расчетов, по скромной оценке, по крайней мере в 1000 раз и предотвращает неверное предсказание о ферромагнетизме всех молекул (см. Главу 7).

Кроме того, другим замечательным результатом этого исследования является то, что значение радиуса изоэлектрониума,  $0.69 \times 10^{-10}$  см, вычисленное через динамические уравнения в Разделе 4.3, было полностью подтверждено независимыми вычислениями проведенными в Разделах 4.6 и 4.7, через гауссовский базисный набор вытянутых функций, дающими 0.00671 Å.

Мы должны также отметить предварительные, но уже непосредственные экспериментальные подтверждения изоэлектрониума, предлагаемые продолжающимися экспериментами по выбиванию фотонами валентных электронов в гелии, отмечающих тот факт, что электроны вылетают в парах [38]. Исследования этой монографии оправдывают систематическое проведение этих экспериментов специально для молекулы водорода и экспериментальное решение вопроса о том, испускаются ли электроны в изолированной форме или в парах, включая относительный процентаж

обеих эмиссий. Если обнаружится порог дезинтеграции изоэлектрониума, предложенные эксперименты могут дать ясное окончательное доказательство существования изоэлектрониума.

Мы должны, наконец отметить, что воспроизведение энергии связи и других характеристик молекулы водорода с точностью до седьмого порядка, впервые достигнутое в работе [5], составляет сильные экспериментальные данные для признания недостаточности квантовой механики и пригодности покрывающей адронной механики для воспроизведения нелинейных, нелокальных и непотенциальных, и поэтому, негамильтоновых и неунитарных эффектов согласно перекрытию "протяженных волновых пакетов" электронов с "точечной зарядовой структурой".

Очевидно, что все вышеприведенные результаты обеспечивают научную достоверность изоэлектрониума, связанной с ним изохимической модели молекулярных связей и лежащей в ее основе адронной химии и достаточны для оправдания систематических теоретических и экспериментальных исследований.

Как показано в Главе 7, важной чертой предложенной новой изохимии является не только возможность обеспечения точных воспроизведений экспериментальных данных за короткое компьютерное время, но также возможность предсказывать и количественно трактовать *новые промышленные приложения*.

## Дополнение 4.А Изохимические расчеты молекулы $H_2$ как системы трех тел

Это дополнение содержит результаты компьютерных расчетов проведенных в работе [5] для молекулы водорода как ограниченной модели трех тел согласно изохимии, (4.35), показывающие точное воспроизведение энергии связи. Расчеты основаны на изоэлектрониуме как имеющем характеристики (4.25).

Программа для больших молекул основанная на гауссовских  
вытянутых функциях

авторы: Д. Шиллади и С. Болдуин

Ричмонд, Вирджиния 1978-1997

3 BODY  $H_2$  (Электрониум)



236 Глава 4. ИЗОХИМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ МОЛЕКУЛЫ ВОДОРОДА

ipear = 1, dt = 0.0, tk = 0.0, imd = 0, ntime = 60, mul = 1, iqd = 0,  
 icor = 3, mdtim = 0, idb = 0.

ELECTRONIUM-PAIR CALCULATION

Atomic Core	Nuclear			Coordinates
	X	Y	Z	Z
1.	0.000000	0.000000		0.000000
	Z1s = 6.103	Z2s = 24.350	Z2p = 24.350	
	Z3s = 16.230	Z3p = 16.230	Z3d = -16.200	
	Z4p = 12.180	Z4f = 12.180		
1.	0.000000	0.000000		0.259200
	Z1s = 6.103	Z2s = 24.350	Z2p = 24.350	
	Z4p = 12.180	Z4f = 12.180	Z3d = -16.200	

Basis Size = 50 and Number of Spheres = 142 for 2 Electrons.

Distance Matrix in Angströms:

	H	H
H	0.00000	0.13716
H	0.13716	0.00000

A-B-C Arcs in Degrees for 2 Atoms.

The Center of Mass is at  $X_m = 0.000000$ ,  $Y_m = 0.000000$ ,  $Z_m = 0.129600$ .

One-Electron Energy Levels:

E( 1) =	-11.473116428176	E(26) =	28.974399759209
E( 2) =	-4.103304982059	E(27) =	28.974400079775
E( 3) =	-1.621066945385	E(28) =	31.002613061833
E( 4) =	-1.621066909587	E(29) =	31.002614578175
E( 5) =	0.735166320188	E(30) =	35.201145239721
E( 6) =	3.760295564718	E(31) =	38.003259639003
E( 7) =	3.760295673022	E(32) =	44.948398097510
E( 8) =	4.206194459198	E(33) =	44.94839B118458
E( 9) =	4.813241859203	E(34) =	52.259825531212
E(10) =	11.2330B0571453	E(35) =	57.732587951875
E(11) =	15.70B645318078	E(36) =	57.732589021798
E(12) =	15.708645469273	E(37) =	68.743644612501
E(13) =	18.535761604401	E(38) =	68.743644649428
E(14) =	18.535761951543	E(39) =	73.195648957615
E(15) =	19.329445299735	E(40) =	79.303486379907
E(16) =	19.329445306194	E(41) =	85.865499885249
E(17) =	19.644048052034	E(42) =	85.865531919077
E(18) =	24.002368034839	E(43) =	127.196518644932
E(19) =	24.002368621986	E(45) =	130.602186113463
E(20) =	24.076849036707	E(46) =	130.602190550265
E(21) =	24.076853269415	E(47) =	137.484863078186
E(22) =	24.574406183060	E(48) =	158.452350229845
E(23) =	26.836031180463	E(49) =	205.158233049979
E(25) =	27.860752485358	E(50) =	446.152984041077

epair Energy = -7.615091736818.

## Дополнение 4.В Изохимические расчеты молекулы $\text{H}_2$ как системы четырех тел

В этом дополнении мы представляем результаты компьютерных расчетов проведенных в работе [5] для молекулы водорода как системы четырех тел, (4.33), согласно изохимии с использованием только  $6G-1s$  орбиталей для краткости. Вычисления также базируются на характеристиках изоэлектронума в (4.25). Отметим, вновь, точное воспроизведение энергии связи  $-1.174447$  хартри.

238 Глава 4. ИЗОХИМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ МОЛЕКУЛЫ ВОДОРОДА

Программа для больших молекул основанная на гауссовских  
 вытянутых функциях  
 авторы: Д. Шиллади и С. Болдвин  
 Государственный университет Вирджинии  
 Ричмонд, Вирджиния  
 1978-1997  
 Test of SASLOBE on H2

SANTILLI-RADIUS = 0.01184470000000.

Cutoff = (A/r)\*(exp(-alp\*r\*r)), A = 0.20E+01, alp = 0.49405731E+04.

Atomic Core	Nuclear			Coordinates
	X	Y	Z	
1.	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
	Z1s = 1.200	Z2s = 0.000	Z2p = 0.000	0.000
	Z3s = 0.000	Z3p = 0.000	Z3d = 0.000	0.000
	Z4p = 0.000	Z4f = 0.000		
1.	0.000000	0.000000		1.401100
	Z1s = 1.200	Z2s = 0.000	Z2p = 0.000	0.000
	Z3s = 0.000	Z3p = 0.000	Z3d = 0.000	0.000
	Z4p = 0.000	Z4f = 0.000		

Basis Size = 2 and Number of Spheres = 12 for 2 Electrons.

Distance Matrix in Angströms:

	H	H
H	0.00000	0.74143
H	0.74143	0.00000

The center of Mass is at: Xm = 0.000000, Ym = 0.000000, Zm = 0.700550.

Spherical Gaussian Basis Set:

No. 1	alpha =	0.944598E+03	at X = 0.0000	Y = 0.0000	Z = 0.0000	a.u.
No. 2	alpha =	0.934768E+02	at X = 0.0000	Y = 0.0000	Z = 0.0000	a.u.
No. 3	alpha =	0.798123E+01	at X = 0.0000	Y = 0.0000	Z = 0.0000	a.u.
No. 4	alpha =	0.519961E+01	at X = 0.0000	Y = 0.0000	Z = 0.0000	a.u.
No. 5	alpha =	0.235477E+00	at X = 0.0000	Y = 0.0000	Z = 0.0000	a.u.
No. 6	alpha =	0.954756E+00	at X = 0.0000	Y = 0.0000	Z = 0.0000	a.u.
No. 7	alpha =	0.1944598E+03	at X = 0.0000	Y = 0.0000	Z = 1.4011	a.u.
No. 8	alpha =	0.7934768E+02	at X = 0.0000	Y = 0.0000	Z = 1.4011	a.u.
No. 9	alpha =	0.40798123E+01	at X = 0.0000	Y = 0.0000	Z = 1.4011	a.u.
No. 10	alpha =	0.11519961E+01	at X = 0.0000	Y = 0.0000	Z = 1.4011	a.u.
No. 11	alpha =	0.37235477E+00	at X = 0.0000	Y = 0.0000	Z = 1.4011	a.u.
No. 12	alpha =	0.12954756E+00	at X = 0.0000	Y = 0.0000	Z = 1.4011	a.u.

Contracted Orbital No. 1:

0.051420\*(1), 0.094904\*(2), 0.154071\*(3), 0.203148\*(4), 0.169063\*(5), 0.045667\*(6).

Contracted Orbital No.2:

0.051420\*(7), 0.094904\*(8), 0.154071\*(9), 0.203148\*(10), 0.169063\*(11),  
0.045667\*(12).

\*\*\*\*\* Nuclear Repulsion Energy in au = 0.71372493041182. \*\*\*\*\*

Overlap Matrix:

#	at-orb	1	2
1	H 1s	1.000	0.674
2	H 1s	0.674	1.000

S(-1/2) Matrix:

#	at-orb	1	2
1	H 1s	1.263	-0.490
2	H 1s	-0.490	1.263

H-Core Matrix:

#	at-orb	1	2
1	H 1s	-1.127	-0.965
2	H 1s	-0.965	-1.127

Initial-Guess-Eigenvectors by Column:

240 Глава 4. ИЗОХИМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ МОЛЕКУЛЫ ВОДОРОДА

#	at-orb	1	2
1	H 1s	0.546	1.239
2	H 1s	0.546	-1.239

One-Electron Energy Levels:  $E(1) = -1.249428797385$ ,  $E(2) = -0.499825553916$ .

(1,1/1,1) =	0.75003658795676
minus (1,1/1,1) =	0.08506647783478
total (1,1/1,1) =	0.66497011012199
(1,1/1,2) =	0.44259146066210
minus (1,1/1,2) =	0.02960554295227
total (1,1/1,2) =	0.41298591770983
(1,1/2,2) =	0.55987025041920
minus (1,1/2,2) =	0.01857331166211
total (1,1/2,2) =	0.54129693875709
(1,2/1,2) =	0.30238141375547
minus (1,2/1,2) =	0.01938180841827
total (1,2/1,2) =	0.28299960533720
(1,2/2,2) =	0.44259146066210
minus (1,2/2,2) =	0.02960554295227
total (1,2/2,2) =	0.41298591770983
(2,2/2,2) =	0.75003658795676
minus (2,2/2,2) =	0.08506647783478
total (2,2/2,2) =	0.66497011012199

Block No. 1 Transferred to Disk/Memory. The Two-Electron Integrals Have Been Computed.

Electronic Energy = -1.88819368266525 a.u., Dif. = 1.8881936827,

Electronic Energy = -1.88819368266525 a.u., Dif. = 0.0000000000.

Energy Second Derivative = 0.00000000000000.

e1a =	-2.499	e1b =	-2.499		
e2a =	0.611	e2b =	0.611	e2ab =	0.611

Iteration No. = 2, alpha = 0.950000.

Electronic Energy = -1.88819368266525 a.u., Dif. = 0.0000000000.

**Total Energy = -1.17446875 a.u.**

One-Electron Energy Levels:  $E(1) = -0.638764885280$ ,  $E(2) = 0.561205833046$

Reference State Orbitals for 1 Filled Orbitals by Column:

#	at-orb	1	2
1	H 1s	0.546	1.239
2	H 1s	0.546	-1.239

Dipole Moment Components in Debyes:

$D_x = 0.0000000$ ,  $D_y = 0.0000000$ ,  $D_z = 0.0000000$ .

Resultant Dipole Moment in Debyes = 0.0000000.

Computed Atom Charges:  $Q(1) = 0.000$ ,  $Q(2) = 0.000$ .

Orbital Charges: 1.000000, 1.000000.

Mulliken Overlap Populations:

#	at-orb	1	2
1	H 1s	0.597	0.403
2	H 1s	0.403	0.597

Total Overlap Populations by Atom:

	H	H
H	0.597222	0.402778
H	0.402778	0.597222

Orthogonalized Molecular Orbitals by Column:

#	at-orb	1	2
1	H 1s	0.422	2.172
2	H 1s	0.422	-2.172

Wiberg-Trindie Bond Indices:

#	at-orb	1	2
1	H 1s	0.127	0.127
2	H 1s	0.127	0.127

Wiberg-Trindie Total Bond Indices by Atoms:

	H	H
H	0.127217	0.127217
H	0.127217	0.127217



## Литература

- [1] Boyer, D.J.: *Bonding Theory*, McGraw Hill, New York (1968) [1a]. Hanna, M.W.: *Quantum Mechanical Chemistry*, Benjamin, New York (1965) [1b]. Pople, J.A. and Beveridge, D.L.: *Approximate Molecular Orbitals*, McGraw Hill, New York (1970) [1c]. Schaefer, H.F.: *The Electronic Structure of Atoms and Molecules*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1972) [1d].
- [2] Santilli, R.M. and Shillady, D.D.: *Ab Initio Hadronic Chemistry: Basic Methods*, Hadronic J. **21**, 633 (1998).
- [3] Santilli, R.M.: Rendiconti Circolo Matematico Palermo, Suppl. **42**, 7 (1996) [3a]; Found. Phys. **27**, 625 (1997) [3b]; Nuovo Cimento Lett. **37**,545 (1983) [3c]; J. Moscow Phys. Soc. **3**, 255 (1993) [3d]; *Elements of Hadronic Mechanics*, Vol. **I** and **II**, Ukraine Academy of Sciences, Kiev, 2-nd Edition (1995) [3e]; *Isotopic, Genotopic and Hyperstructural Methods in Theoretical Biology*, Ukraine Academy of Sciences, Kiev (1996) [3f]; Intern. J. Modern Phys. **A14**, 3157 (1999) [3g].
- [4] Kadeisvili, J.V.: Math. Methods Applied Sciences **19**, 1349 (1996) [4a]. Tsagas, Gr. and Sourlas, D.S.: Algebras, Groups and Geometries **12**, 1 and 67 (1995) [4b]. Tsagas, Gr. and Sourlas, D.: *Mathematical Foundations of the Lie-Santilli Theory*, Ukraine Academy of Sciences, Kiev (1992) [4c]. Löhmus, J., Paal, E. and Sorgsepp, L.: *Nonassociative Algebras in Physics*, Hadronic Press (1995) [4d]. Vacaru, S.: *Interactions, Strings and Isotopies on Higher order Superspaces*, Hadronic Press (1998) [4c].
- [5] Santilli, R.M. and Shillady, D.D.: Intern. J. Hydrogen Energy, **24**, 943 (1999).



- [6] Lewis, G.N.: J. Am. Chem. Soc., **38**, 762 (1916) [6a]. Langmuir, I.: J. Am. Chem. Soc., **41**, 868 (1919) [6b]. Frost, A.A.: J. Chem. Phys., **47**, 3707 (1967) [6c]. Bates, D.R., Ledsham, K. and Stewart, A.L.: Phil. Tran. Roy. Soc. (London) **A246**, 215 (1954) [6e]. Wind, H.: J. Chem. Phys. **42**, 2371 (1965) [6f]. Boys, S.F.: Proc. Roy. Soc. (London) **A200**, 542 (1950) [6g].
- [7] Santilli, R.M.: Hadronic J. **1**, 574 (1978) [7a]. Animalu, A.O.E.: Hadronic J. **17**, 379 (1994) [7b]. Animalu, A.O.E. and Santilli, R.M.: Intern. J. Quantum Chemistry **29**, 175 (1995) [7c].
- [8] Whitten, J.L.: J. Chem. Phys. **39**, 349 (1963); Sambe, H.: J. Chem. Phys. **42**, 1732 (1965); Preuss, H.: Z. Naturforsch. **11a**, 823 (1956); Whitten, J.L. and Allen, L.C.: J. Chem. Phys. **43**, S170 (1965); Harrison, J.F.: J. Chem. Phys. **46**, 1115 (1967); Frost, A.A.: J. Chem. Phys. **47**, 3707 (1967).
- [9] Le Rouzo, H. and Silvi, B.: Int. J. Quantum Chem. **13**, 297, 311 (1978); Nguyen, T.T., Raychowdhury, P.N. and Shillady, D.D.: J. Comput. Chem. **5**, 640 (1984).
- [10] Shavitt, I.: *Methods in Computational Physics*, B. Alder (ed.), Academic Press, New York (1963).
- [11] Born, M. and Oppenheimer, J.R.: Ann. Physik **84**, 457 (1927).
- [12] Bates, D.R., Ledsham, K. and Stewart, A.L.: Phil. Tran. Roy. Soc. (London), **A246**, 215 (1954); Wind, H.: J. Chem. Phys. **42**, 2371 (1965).
- [13] Boys, S.F.: Proc. Roy. Soc. (London) **A200**, 542 (1950).
- [14] Whitten, J.L.: J. Chem. Phys. **39**, 349 (1963). Sambe, H.: J. Chem. Phys. **42**, 1732 (1965). Preuss, H.: Z. Naturforsch. **11a**, 823 (1956). Whitten, J.L. and Allen, L.C.: J. Chem. Phys. **43**, S170 (1965). Harrison, J.F.: J. Chem. Phys. **46**, 1115 (1967). Frost, A.A.: J. Chem. Phys. **47**, 3707 (1967).
- [15] Le Rouzo, H. and Silvi, B.: Intern. J. Quantum Chem. **13**, 297, 311 (1978). Nguyen, T.T., Raychowdhury, P.N. and Shillady, D.D.: J. Comput. Chem. **5**, 640 (1984).

- [16] Shavitt, I.: *Methods in Computational Physics*, B. Alder, (ed.), Academic Press, New York, (1963).
- [17] Shillady, D.D. and Talley, D.B.: *J. Computational Chem.* **3**, 130 (1982). Shillady, D.D. and Richardson, F.S.: *Chem. Phys. Lett.* **6**, 359 (1970).
- [18] Ditchfield, R., Hehre, W.J. and Pople, J.A.: *J. Chem. Phys.* **52**, 5001 (1970).
- [19] Davis, K.B., Mewes, M.O., Andrews, M.R., van Druten, N.J., Durfee, D.S., Kurn, D.M. and Ketterle, W.: *Phys. Rev. Lett.* **75**, 3969 (27 November 1995). Ketterle, W. and van Drutten, N.J.: *Phys. Rev.* **A54** 656 (1996).
- [20] Hylleras, E.: *Z. Physik* **54**, 347 (1929).
- [21] Yip S.K. and Sauls, J.A.: *Phys. Rev. Lett.* **69** 2264 (1992). Xu, D., Yip, S.K. and Sauls, J.A.: *Phys. Rev.* **B51** 16233 (1995); see also the levels of "normal"  $H_2$  in *Symmetry and Spectroscopy*, by D.C. Harris and M.D. Bertolucci, p. 345, Oxford Univ. Press. New York (1978).
- [22] Boys, S.F. and Cook, G.B.: *Rev. Mod. Phys.* **45**, 226 (1960). Reeves, C.M.: *Commun. Assoc. Comput. Mach.* **9**, 276 (1966); Lengsfeld, B. and Liu, B.: *J. Chem. Phys.* **75**, 478 (1981); Walch, S.P., Bauschlicher, C.W. Jr., Roos, B.O. and Nelin, C.J.: *Chem. Phys.* **103**, 175 (1983).
- [23] Pople, J.A., Krishnan, R., Schlegel, H.B. and Binkly, J.S.: *Int. J. Quantum Chem.* **14**, 545 (1978). Krishnan R. and Pople, J.A.: *Int. J. Quantum Chem.* **14**, 91 (1978).
- [24] Cizek, J.: *J. Chem. Phys.* **45**, 4256 (1966); Paldus, J., Cizek, J. and Shavitt, I.: *Phys. Rev.* **A5**, 50 (1972). Bartlett, R.J. and Purvis, G.D.: *Int. J. Quantum Chem.* **14**, 561 (1978). Purvis, G.D. and Bartlett, R.J.: *J. Chem. Phys.* **76**, 1910 (1982).
- [25] Schaefer, H.F.: *The Electronic Structure of Atoms and Molecules*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1972).
- [26] Kelly, H.P.: *Phys. Rev.* **131**, 684 (1963).

- [27] Goodgame, M.M. and Goddard, W.A.: Phys. Rev. Lett. **54**, 661 (1985).
- [28] Mosier, C. and Shillady, D.D.: Math. of Computation **26**, 1022 (1972);  
cf. program LOBE140 described by D.D. Shillady and Sheryl Baldwin,  
Int. J. Quantum Chem., Quantum Biology Symposium **6**, 105 (1979).
- [29] Bender, C.F. and Davidson, E.R.: Phys. Rev. **183**, 23 (1969). Alston,  
P.V., Shillady, D.D. and Trindle, C.: J. Am. Chem. Soc. **97**, 469 (1975).
- [30] Hammond, B.L., Lester, W.A. Jr., and Reynolds, P.J.: Monte Carlo  
Methods, in: *Ab Initio Quantum Chemistry*, World Scientific Lecture  
and Course Notes in Chemistry, Vol. **1**, World Scientific, New Jersey, p.  
67 (1994).
- [31] Miehlich, B., Savin, A., Stoll, H. and Preuss, H.: Chem. Phys. Lett.  
**157**, 200 (1989). Becke, A.D.: J. Chem. Phys. **88**, 1053 (1988). Lee,  
C.L., Yang, W. and Parr, R.G.: Phys. Rev. **B37**, 785 (1988).
- [32] Dunning, T.H.: J. Chem. Phys. **55**, 716 (1971).
- [33] Luchow, A. and Anderson, J.B.: J. Chem. Phys. **105**, 7573 (1996).
- [34] Kolos, W. and Wolniewicz, L.: J. Chem. Phys. **49**, 404 (1968).
- [35] Boyd, R.J. and Yee, M.C.: J. Chem. Phys. **77**, 3578 (1982).
- [36] Fois, E.S., Selloni, A., Parinello, M. and Car, R.: J. Phys. Chem. **92**,  
3268 (1988).
- [37] Xia, P. and Bloomfield, L.A.: Phys. Rev. Lett. **70**, 1779 (1993).
- [38] Burnett Collaboration, <http://eve.physics.ox.ac.uk/intense/>
- [39] Moore, C.: Phys. Rev. Lett. **70**, 3675 (1993). Chenciner, A. and  
Montgomery, R.: Annals of Math., 2001, in press. Montgomery, R.:  
Notices of the Am. Math. Soc. **48**, 471 (2001).

## Глава 5

# Изохимическая модель молекулы воды

### 5.1 Введение

Вода является чрезвычайно важной составляющей планеты Земля и в биологическом, и в геофизическом смысле. Как следствие, были проведены исчерпывающие исследования воды, начиная с количественных измерений, с выдающимися научными достижениями (см., например, [1]). Тем не менее, несмотря на все усилия, множество фундаментальных вопросов связанных со структурой молекулы воды все еще остаются открытыми, например, такие как:

1) Полная электростатическая сила между атомными составляющими молекулы воды, в полуклассическом приближении, равна нулю, в то время как используемые в настоящее время силы (обменные, ван-дер-ваальсовские и другие [1]) известны в ядерной физике как "слабые", поэтому имеется недостаток в полноте объяснения "сильной" связи между составляющими (где слова "слабый" и "сильный" не относятся, здесь и в дальнейшем, к соответствующим взаимодействиям в физике элементарных частиц). Другими словами, воспроизведение ядерной структуры требовало введения "сильной ядерной силы", так как сила обменных, ван-дер-ваальсовских и других сил была недостаточна. Оказалось, что современные модели молекулы воды не имеют эквивалента "сильной ядерной силы" для достижения полного воспроизведения молекулярных структур.

2) Квантовая химия не обеспечивает строгого объяснения причины, почему молекула воды имеет только *два* атома водорода. Это является очевидным следствием принятия обменных и другого типа сил, которые были построены в ядерной физике для *произвольного* числа составляющих, черта, которая очевидно сохраняется во всей своей полноте в молекулярных структурах.

3) Квантовая химия оказывается неспособной достигнуть точного воспроизведения энергии связи молекулы воды при строгом сохранении ее основных аксиом, таких как закон Кулона. Действительно, исторические 2% все еще теряются, несмотря на все усилия предпринятые в 20-м веке.

4) Более точные воспроизведения были достигнуты недавно, но только через использование гауссовских экранирований кулоновского закона, которые, однако, выходят из класса эквивалентности квантовой химии, так как они связаны с законом Кулона *неунитарными* преобразованиями.

5) Квантовая химия не может обеспечить осмысленного воспроизведения термодинамических свойств воды. Действительно, значение 2% ошибки в воспроизведении энергии связи соответствуют около 950 Kcal/mole, в то время как простые термодинамические реакции требуют около 50 Kcal/mole. Следовательно, использование квантовой химии в термодинамических расчетах подразумевало бы ошибку в 20 раз большую самой рассматриваемой величины.

6) Квантовая химия оказывается неспособной достигнуть точного воспроизведения электрических и магнитных дипольных и мультипольных моментов молекулы воды, причем до такой степени, что, временами, модели приводят даже к *неверному знаку* (см. например, [1a], стр. 22). Этот недостаток обычно объясняют недостаточностью принимаемого базиса, хотя не следует вводить дополнительные члены без глубокого анализа.

7) Компьютерные вычисления в квантовохимических расчетах требуют чрезвычайно много времени. Это связано с медленной сходимостью обычных квантовых рядов и сохраняется по сей день, несмотря на возросшие мощности компьютеров.

8) Квантовая химия оказывается неспособной объяснить "энергию корреляции", которая считается ответственной за потерю нескольких процентов в воспроизведении энергии связи. Орбитальные теории хорошо работают на качественном и полуэмпирическом уровнях, но продолжают страдать неразрешенными проблемами, такими как корреляция между многими электронами, в противоположность тому факту, что *корреляции осуществляются для электронных пар*.

9) Квантовая химия предсказывает, что молекула воды является ферромагнетиком, в драматическом разногласии с экспериментальными данными. Это предсказание является следствием квантовой электродинамики, которая утверждает, что во внешнем магнитном поле, орбиты валентных электронов должны быть поляризованы таким образом, чтобы иметь полярность противоположную внешнему однородному полю. Как это хорошо известно, отдельные атомы молекулы воды сохраняют свою индивидуальность в современных моделях химических связей. Как результат, квантовая электродинамика предсказывает, что все валентные электроны отдельных атомов молекулы воды приобретают одинаковую магнитную поляризацию в достаточно сильном внешнем магнитном поле, что приводит к их одновременной магнитной полярности Север-Юг.

В частности, коварными являются вариационные методы, так как они создают впечатление достижения точных воспроизведений в контексте квантовой химии, в то время как легко доказать, что эти методы *не* относятся к квантовой химии. Для начала, стопроцентное воспроизведение экспериментальных данных имеет место при введении большого числа *эмпирических параметров*, которые не имеют физического или химического смысла. Более того, легко доказать, что *вариационные решения не могут быть решениями квантовохимических уравнений*, тривиально, потому что первые обеспечивают 100% воспроизведения, в то время как последние – нет. В действительности, вспомогательные параметры, вводимые в вариационных и других исчислениях, являются мерами *отклонений от основных аксиом квантовой химии*.

При переходе от структуры молекулы воды к более общим молекулярным структурам, число открытых, принципиальных, неразрешимых проблем возрастает. Например, общеизвестно, что квантовая химия неспособна обеспечить систематическую теорию жидкого состояния вообще, не говоря уже о воде в частности [1].

Опять же, химические реакции, в общем, *необратимы*, в то время как аксиоматическая структура квантовой химии является *строго обратимой*, так как теория строго гамильтонова и все известные потенциальные силы обратимы. Эти результаты совершенно непримиримы между очень аксиоматической структурой квантовой химии и химическими реакциями вообще, и связанными с водой в частности. Действительно, аксиоматически согласованное воспроизведение необратимости подразумевают эффекты, которые просто невероятны для квантовой химии, очевидно потому, что они выходят за рамки ее структуры.

При рассмотрении воды, как составляющей биологических организмов, ограничения квантовой химии достигают своей вершины. Действительно, биологические структуры (такие как соты) не только необратимы (так они растут, стареют и умирают), но и имеют такую сложную структуру, что требуют многозначных теорий (известных также в математике, как гиперструктуры). Ожидание, что квантовая химия, с ее обратимой и однозначной структурой, сможет эффективно воспроизводить биологические системы и их эволюцию выходит за рамки науки.

В виду вышеперечисленных многих и принципиальных ограничений, в предыдущих работах [2], Сантилли и другие ученые сконструировали покрытие квантовой механики, под названием "адронная механика" (Раздел 1.8). По концепции и конструкции, квантовая и адронная механики совпадают всюду, исключая области маленькой сферы радиуса порядка 1 фм ( $= 10^{-13}$  см), называемой *адронным горизонтом*, внутри которой (только) проявляет себя расширение теории.

Адронная механика, в конце концов, пришла к форме "завершения" квантовой механики, во многом в соответствии с историческим аргументом Эйнштейна-Подольского-Розена, хотя это было достигнуто через добавление контактных, негамильтоновых, нелинейных, нелокальных и непотенциальных сил, обусловленных глубоким перекрытием волновых пакетов частиц.

На более технических основаниях, адронная механика базируется на *новых математиках*, называемых *изо-, гено- и гипер-математикой* [2c] (см. Главу 2) для характеристик обратимых, необратимых и многозначных систем, соответственно, которые обладают чертами не воспроизводимыми через гамильтониан.

Эти новые математики характеризуются прогрессивными обобщениями тривиальной единицы  $I$  квантовой механики до обобщенных единиц  $\hat{I}$  эрмитового однозначного, неэрмитового однозначного и неэрмитового многозначного характера, соответственно, впервые предложены Сантилли в 1978 г. [2],

$$I \rightarrow \hat{I} = \hat{I}^\dagger, \quad I \rightarrow \hat{I} \neq \hat{I}^\dagger, \quad I \rightarrow \{\hat{I}\} = \{\hat{I}_1, \hat{I}_2, \hat{I}_3, \dots\} \neq \{\hat{I}\}^\dagger. \quad (5.1)$$

Новые математики появляются с помощью реконструкции обычной математики квантовой механики таким образом, чтобы допустить  $\hat{I}$ , а не  $I$ , как корректную левую и правую единицу на всех уровнях.

Изо-, гено- и гипер-математика характеризуют соответствующие вет-

ви адронной механики, называемые *изо-, гено- и гипер-механика*, которые были сконструированы для соответствующих воспроизведений:

- 1) замкнуто-изолированных, обратимых, однозначных систем с гамильтоновыми и негамильтоновыми внутренними силами;
- 2) открыто-неконсервативных, необратимых, однозначных систем с неотбрасываемыми взаимодействиями с внешними системами; и
- 3) открыто-неконсервативных, необратимых, многозначных систем произвольной структуры.

Впоследствии, Анималу и Сантилли [6] сконструировали *адронную сверхпроводимость*, с соответствующими *изо-, гено- и гипер-ветвью* (Раздел 1.9) для воспроизведения *структуры* (не ансамбля) куперовских пар, путем, находящимся в замечательном соответствии с экспериментальными данными.

В 1999 г., Сантилли и Шиллади [3a] сконструировали *адронную химию* (Глава 3), с соответствующими ветвями, называемыми *изо-, гено- и гиперхимия*. Так как молекулы рассматриваются изолированными от остальной Вселенной и обратимы во времени, они изучаются через *изохимию*.

Сантилли и Шиллади [3a] сконструировали также *новую изохимическую модель молекулы водорода* (Глава 4), основанную на предположении, что *пары валентных электронов от различных атомов соединяются друг с другом в синглетное квази-частичное состояние, называемое изоэлектрониумом*.

Как показано в Главе 4, было доказано, что новая модель разрешает по крайней мере главные недостатки квантовохимической модели молекулы водорода, например: объясняет, почему молекула имеет только два Н-атома; воспроизводит энергию связи с точностью до седьмого порядка; позволяет ускорить компьютерные вычисления по крайней мере в 1000 раз по отношению к тем же вычислениям в квантовой химии; и дает другие преимущества.

Главной темой этой главы является изучение *новой изохимической модели молекулы воды*, впервые предложенной Сантилли и Шиллади в работе [3b], через аккуратное расширение результатов, полученных для молекулы водорода.

Главное предположение заключается в том, что когда валентные электроны молекулы воды связываются друг с другом в синглетные пары, в соответствии с принципом запрета Паули, появляются *новые взаимодействия, чья структура не оставляет никакой надежды на воспроизведение*



через квантовую механику или квантовую химию, тривиально, из-за ее негамильтоновости.

В частности, новые взаимодействия являются сильно притягивающими, — этим впервые вводится молекулярная связь достаточно "сильная" чтобы воспроизводить действительность. Эта и другие черты модели, такие как существование только парных связей, устраняют все недостатки 1)–9) отмеченные ранее, как мы увидим в дальнейшем.

В этих вводных строках, позвольте напомнить, что главная функция изоединицы  $\hat{I}$  (здесь и в дальнейшем принимаемая как эрмитова, однозначная и положительно определенная) отвечает за воспроизведение всех взаимодействий, характеристик и эффектов находящихся вне воспроизводящих возможностей гамильтониана. Что включает в себя воспроизведение контактных, непотенциальных и негамильтоновых взаимодействий при глубоком перекрытии волновых пакетов валентных электронов.

Помня о том, что является ли единица обычной или обобщенной, она фундаментальный инвариант любой теории, и воспроизведение новых взаимодействий через обобщенную единицу гарантирует инвариантность, то есть, предсказание тех же чисел для тех же величин и при тех же условиях, но для различных моментов времени.

Воспроизведение негамильтоновых эффектов через величины иные, чем обобщенная единица, вполне допускается, *при условии, что они обладают отмеченной инвариантностью*, что необходимо для избежания катастрофических несогласованностей Раздела 1.7.

Самым фундаментальным математическим, физическим и химическим понятием новой модели структуры молекулы воды, изучаемой в этой Главе, является, следовательно, обобщение тривиальной единицы +1 современных моделей до изоединицы.

На прагматичной основе, изохимия может быть легко сконструирована через последовательное применение неунитарного преобразования

$$\hat{I} = 1/\hat{T} = U \times U^\dagger > 0, \quad (5.2)$$

ко всем аспектам квантовой химии (Раздел 3.6). В частности, мы примем, что вышеприведенная единица перекрывает обычную единицу вне адронного горизонта, и ее среднее значение много больше 1,

$$\lim_{r \gg 1 \text{ фм}} \hat{I} = I. \quad (5.3a)$$

$$|\hat{I}| \gg 1. \quad (5.3b)$$

Предположение (5.3a) будет обеспечивать совместимость обобщенной дисциплины, для связи валентных электронов, с квантовой механикой, для структуры отдельных атомов составляющих молекулу воды. Предположение (5.3b) будет обеспечивать сходимость пертурбативных расширений и другие свойства.

В заключение, новая изохимическая модель молекулы воды [3b], изученная в этой главе, может быть сконструирована через следующие шаги:

1) Выбор неунитарного преобразования в соответствии с правилами (5.2) и (5.3), которое воспроизводит контактные, нелинейные, нелокальные и непотенциальные эффекты при глубоком волновом перекрытии, который, в сущности, схож с использованными для молекулы водорода [3a] предыдущей Главы;

2) Приложение выбранного неунитарного преобразования ко всем понятиям, уравнениям и операциям обычной квантовохимической модели молекулы воды; и

3) Реконструкция всей математики обычной модели таким образом, чтобы допустить  $\hat{I}$ , а не  $I$ , как корректную левую и правую единицу на всех уровнях, без каких-либо известных исключений. Этот лифтинг необходим, чтобы избежать катастрофических несогласованностей Раздела 1.7 (например, для достижения инвариантности), поэтому требуется изотопический лифтинг чисел и полей, декартовых и тригонометрических функций, обычных дифференциальных уравнений и частных производных и т.д.

Аксиоматически корректная изохимическая модель молекулы водорода формулируется на изопространствах над изополями. Однако, на прагматичной основе, можно изучать ее *проекцию* на обычные пространства над обычными числами, *при условии*, что результаты будут интерпретироваться с осторожностью.

Например, в отмеченной проекции появляется *потенциал*, который может привести к мнению, что модель обладает *потенциальной энергией* и/или может быть *истрактована* через обычную *потенциальную яму*. Такие интерпретации корректны если и только если потенциал хорошо определен на изопространствах над изополями. Напротив, если такой потенциал появляется только в проекции, тогда он имеет чисто математический смысл без какой-либо связанной с ним энергии.

Лучшей иллюстрацией вышеуказанных кажущихся противоречий может служить изоэлектронииум Раздела 4.3, в чьей структуре появляется халтеновский потенциал, хотя эта квазичастица не имеет энергии связи. Причиной этого является то, что энергии связи хорошо определены на изопространствах над изополями через изошредингеровское уравнение и связанные с ним изособственные значения, в то время как халтеновский потенциал не существует на изопространствах, и появляется только в проекции изошредингеровского уравнения на обычные гильбертовы пространства.

Для иллюстрации этого важного пункта, рассмотрим изотопии обычного уравнения Шредингера через неунитарное преобразование отмеченное выше,

$$\begin{aligned}
U \times (H \times |\psi\rangle) &= (U \times H \times U^\dagger) \times (U \times U^\dagger)^{-1} \times (U \times |\psi\rangle) = \\
&= \hat{H} \times \hat{T} \times |\hat{\psi}\rangle = \hat{H} \hat{\times} |\hat{\psi}\rangle = U \times (E \times |\psi\rangle) = \\
&= [E \times (U \times U^\dagger)] \times (U \times U^\dagger)^{-1} \times (U \times |\psi\rangle) = \hat{E} \times \hat{T} \times |\hat{\psi}\rangle = \\
&= E \times |\hat{\psi}\rangle,
\end{aligned} \tag{5.4}$$

с соответствующим лифтингом чисел и гильбертовых пространств,

$$U \times n \times U^\dagger = n \times (U \times U^\dagger) = n \times \hat{I}, \quad \hat{n} \in \hat{\mathbb{R}}, \tag{5.5a}$$

$$U \times \langle \psi | \times | \psi \rangle \times U^\dagger = \langle \hat{\psi} | \times \hat{T} \times |\hat{\psi}\rangle \times (U \times U^\dagger) = \langle \hat{\psi} | \hat{\times} |\hat{\psi}\rangle \times \hat{I} \in \hat{\mathbb{C}}. \tag{5.5b}$$

Как можно видеть, энергии связи  $\hat{E} = E \times \hat{I}$  полностью определены на изогильбертовых пространствах  $\hat{\mathcal{H}}$  над изополями  $\hat{\mathbb{R}}$ , и действительно приобретают обычное значение  $E$ , следуя упрощению  $\hat{E} \times \hat{T} \times |\hat{\psi}\rangle = (E/\hat{T}) \times \hat{T} \times |\hat{\psi}\rangle = E \times |\hat{\psi}\rangle$ .

Однако, халтеновский потенциал не существует на изопространствах над изополями, тривиально, потому, что не существует в гамильтониане  $\hat{H}$ , который полностью обычен.

Халтеновский потенциал изоэлектронииума Раздела 4.3 появляется только когда мы проектируем реальную систему, то есть, систему на изогильбертовых пространствах с уравнением  $\hat{H} \hat{\times} |\hat{\psi}\rangle = E \times |\hat{\psi}\rangle$  на обычные гильбертовы пространства. Раз так, то не следует ожидать, что халтеновский потенциал обязательно порождает действительную энергию связи.

Читатель должен в равной степени упражняться в осторожности на других аспектах и, в общем, воздерживаться от формулирования мнений

для адронной химии основываясь на квантовохимических концепциях и понятиях.

## 5.2 Основные характеристики воды

Вода является смесью нескольких различных видов молекул в различном процентном соотношении и с различными молекулярными весами. Действительно, нам известны три различных изотопа водорода,  $^1\text{H}$ ,  $^2\text{H}$  и  $^3\text{H}$ , и *шесть* различных изотопов кислорода, начиная с  $^{14}\text{O}$  до  $^{19}\text{O}$ . В этой монографии, мы будем изучать только молекулу  $^1\text{H}_2-^{16}\text{O}$ , и будем ее обозначать  $\text{H}_2\text{O} = \text{H}-\text{O}-\text{H}$ , где черточка обозначает молекулярную связь. Такая молекула воды будет изучаться здесь и в дальнейшем при следующих условиях: 1) при абсолютном нуле температуры; 2) в отсутствии каких-либо вращений, колебаний, перемещений и других движений; 3) со всеми атомами в их основном состоянии (см. [1] для всех деталей пропущенных в этом разделе).

Электроны отдельных Н-атомов принимаются находящимися в основном состоянии  $1s$ . Из восьми электронов кислорода, два электрона с противоположно направленными спинами находятся в наинизшем  $1s$  состоянии и прочно связаны с ядром, два электрона в следующем возможном состоянии  $2s$  и оставшиеся четыре электрона находятся в  $2p$  состоянии.

Используя трехмерную декартову систему координат, будем считать, что  $y$ - $z$  плоскость содержит ядра Н и О-атомов, причем последний находится в начале координат,  $1s$  и  $2s$  электроны имеют сферическое распределение, в то время как  $2p$  электроны находятся на орбитали перпендикулярной  $yz$  плоскости и обозначенной как  $2p_x$ ; оставшиеся два электрона находятся на орбиталях перпендикулярных  $xz$  и  $xy$  плоскостям и обозначенных как  $2p_y$  и  $2p_z$  соответственно.

И еще, энергия образования молекулы воды из водорода и кислорода  $-9.511$  эВ; энергия связи  $-10.086$  эВ; сумма энергий основных состояний трех отдельных атомов  $-2070.46$  эВ; полная энергия молекулы при  $0^\circ\text{K}$  равна  $-2080.55$  эВ, как результат сложения кинетической энергии  $+2080.6$  эВ и потенциальной энергии  $-4411.4$  эВ; энергия отталкивания ядер  $+250.2$  эВ; полная электростатическая энергия  $-2330.8$  эВ; энергия диссоциации О-Н равна  $5.11$  эВ и отделения одного Н-атома равна  $4.40$  эВ.

Опять-таки, при  $0^\circ\text{K}$  и для всех атомов в основном состоянии, длина связи димера Н-О равна  $0.95718 \times 10^{-8}$  см, причем два димера Н-О и О-Н формируют характеристический угол  $104.523^\circ$ . Следовательно, никоим образом запись Н-О-Н не означает, что вода имеет линейную структуру.

Очевидно, что когда отдельные атомы находятся в возбужденных состояниях, длина связи и характеристический угол изменяются. Действительно, для возбужденных состояний, измерения показывают возрастание характеристического угла на  $8.5^\circ$ . Тот же характеристический угол ожидается изменяющимся под действием достаточно сильных электрических и магнитных полей, хотя у нас нет точных данных для этих условий.

Молекула воды обладает электрическим дипольным моментом  $1.83 \times 10^{-8}$  e.s.u. cm и средний квадрупольный момент  $-5.6 \times 10^{-26}$  e.s.u. cm. Следует напомнить, что ненулевое значение электрического дипольного и квадрупольного моментов исключает линейную структуру воды Н-О-Н в обычных изолированных условиях (т.е., структуру с характеристическим углом  $180^\circ$ ).

Вода является *диамагнитной* субстанцией, с магнитной поляризуемостью (называемой также восприимчивостью)  $(2.46, 0.77 \text{ и } 1.42) \times 10^{-6}$  e.m.u./mol для соответствующих трех пространственных измерений  $xx$ ,  $yy$  and  $zz$ , соответственно.

В первом приближении, молекула воды может быть воспроизведена через два отдельных Н-О димера с волновой функцией молекулярных орбиталей (м.о.),

$$\psi_1 = \lambda \phi(\text{H}', 1s) + \mu \phi(\text{O}, 2p_z), \quad (5.6a)$$

$$\psi_2 = \lambda \phi(\text{H}'', 1s) + \mu \phi(\text{O}, 2p_y), \quad (5.6b)$$

где  $\lambda$  и  $\mu$  – параметры.

Однако, вышеуказанная простая модель предсказывает характеристический угол равный  $90^\circ$ . Как следствие, модель в целом модифицирована примесью электронов из  $2p$  и  $2s$  состояний называемой также *гибридизацией*. Все это подтверждает, что любая модель молекулы воды, с зарядовым распределением валентных электронов в Н-О-Н плоскости, является недостаточной для воспроизведения экспериментальных данных. В свою очередь, такая смесь порождает две известные вытянутости с боков атома кислорода, в сторону от атомов водорода, выше и ниже молекулярной плоскости. Это приводит к модели типа

$$\psi_1 = \lambda [\cos \epsilon \psi(\text{O}, 2s) + \sin \epsilon \phi((\text{O}, 2p))] + \mu \phi(\text{H}', 1s), \quad (5.7a)$$

$$\psi_2 = \lambda [\cos \varepsilon \psi(O, 2s) + \sin \varepsilon \phi((O, 2p)] + \mu \phi(H'', 1s), \quad (5.7b)$$

где  $\varepsilon$  – параметр гибридизации с характерным значением порядка  $\cos \varepsilon = 0.093$ , подтверждающим, что валентные электроны находятся, в основном, в  $2p$  состояниях.

Следует отметить, что точная конфигурация, расположение и функция двух отдельных вытянутостей, соответствующих спаренным электронам, не устанавливается в этой работе, поэтому они очевидно зависят от выбранной теоретической модели. К тому же, электрический и магнитный диполи отдельных вытянутостей не могут быть измерены (измеримы только их полные значения), поэтому подразумевается отсутствие непосредственных экспериментальных данных по отдельным вытянутостям.

Мы должны также отметить, что отдельные Н-О и О-Н связи не независимы друг от друга, что подтверждается различными значениями энергий диссоциации.

Вода является одновременно и кислотой, и основанием согласно диссоциации  $H_2O$  в  $H^+$  и  $O-H^-$  до тех пор пока концентрации  $[H^+][O-H^-]$  не достигнут равновесия, чье постоянное значение равно  $1.0 \times 10^{-14}$ , которое является хорошо известной рН шкалой уравнений

$$pH = -\log_{10}[H^+], \quad pOH = 14 - pH. \quad (5.8)$$

В нейтральной воде, ионная концентрация  $[H^+] = [O-H^-] = 1.004 \times 10^{-7}$  моль/литр.

Молекулы воды достаточно полярны, с дипольным моментом от 1.84 до 1.834 Дебаев и объемной диэлектрической константой 80 при 20 °С. Это подразумевает, что чистая вода является плохим проводником, с проводимостью для постоянного тока только  $5.7 \times 10^{-8} \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$ .

Однако, хорошо известно, что небольшие примеси сильных кислот, таких как HCl или  $H_2SO_4$ , могут превратить воду в отличный проводник, из-за легкости с которой  $H^+$  может присоединяться к  $H_2O$  образуя  $H_3O^+$ , что приводит тогда к эффекту домино, когда один  $H^+$  "выбивает" с другой стороны  $H_3O^+$  другой  $H^+$ , и этим обеспечивается весьма эффективный механизм проводимости [4]. В действительности, хорошо известно, что в водном растворе, токи образуемые анионами и катионами не равны, так как до 70% заряда переносится  $H^+$ . Хотя,  $OH^-$  отвечает за гораздо меньший ток, чем  $H^+$  (согласно большим размерам и отсутствию эффекта домино, отмеченного ранее для  $H^+$ ), течение тока начинается

дополнительными ионами возникающими в следствии столкновений в растворе.

Важным аспектом является известное существование равновесия между  $\text{H-O-O-H}$  и  $\text{HO}^-$  около 11.63 рН [5] с вольтажной зависимостью  $1.363 \pm 0.0293$  рН, как дано М. Поурбаксом (M. Pourbaix) для водного равновесия включающего в себя  $\text{H}^+$ ,  $\text{O-H}^-$ ,  $\text{H}^-$ ,  $\text{H-O-O-H}$  и  $\text{H-O}^-$ . Поэтому, нет сомнений в существовании небольшой примеси  $\text{H-O-O-H}$  в воде при высоком рН.

При больших токах, поток  $\text{H}^+$  будет много больше, чем поток  $\text{OH}^-$ , так что при электролизе  $\text{H}_2\text{O}$  в  $2\text{H}_2$  и  $1\text{O}_2$ , локальные концентрации/флуктуации слегка повышают рН (локальное истощение  $\text{H}^+$ ) и поэтому возникает предрасположение к существованию  $\text{H-O-O-H}$ .

Мы должны, в заключение, отметить неспособность квантовой химии достигнуть научно-количественного воспроизведения (или по крайней мере понимания) *различных типов воды при воздействиях магнитных полей*, как это установлено экспериментальными данными, например, растения растут быстрее при поливе водой подвергнутой действию одного магнитного поля, и они быстро умирают при воздействии другим типом магнитного поля. Действительно, квантовая химия допускает только *один* тип воды, –  $\text{H}_2\text{O}$ .

Легко видеть, что этот дополнительный недостаток квантовой химии является прямым следствием использования, в настоящее время, обменных, ван-дер-ваальсовских и других сил ядерного происхождения, при которых отдельные Н и О атомы в молекуле  $\text{H}_2\text{O}$  сохраняют свою индивидуальность, что приводит к существованию только одной единственной конфигурации.

Напротив, изохимия вводит реальную, сильную связь для валентных электронов через понятие изоэлектроннума. В этом последнем случае, различные типы воды, то есть, молекул воды с различными физическими характеристиками, действительно весьма возможны, как мы увидим в дальнейшем.

### 5.3 Точно решаемая модель молекулы воды со стабильным изоэлектрониумом

В предыдущей Главе 3 [3a], мы ввели главные гипотезы *изохимической молекулярной модели*, согласно которой, два электрона от двух различных атомов связываются друг с другом в синглетное квази-стабильное и квази-частичное состояние называемое *изоэлектрониумом*, который описывает орбиту *oo* - формы вокруг ядер, как это происходит с планетами в некоторых бинарных звездных системах (Рис. 4.3). Главные характеристики изоэлектрониума, в первом нерелятивистском приближении, были вычислены в Разделе 4.3 и являются следующими:

$$\begin{aligned}
 & \text{заряд } -2e, \quad \text{спин } 0, \quad \text{магнитный дипольный момент } 0, \\
 & \text{масса } 1.022 \text{ MeV}, \quad \text{радиус } = r_c = b^{-1} \approx \\
 & \approx (\hbar^2/m \times V)^{1/2} = (\hbar/m \times \omega)^{1/2} = 6.8432329 \times 10^{-11} \text{ cm} = \\
 & = 0.015424288 \text{ бор} = 0.006843 \text{ \AA}.
 \end{aligned} \tag{5.9}$$

При вышеуказанном нерелятивистском приближении, среднее время жизни оказывается бесконечным (полная стабильность, с пониманием того, что релятивистские поправки, возможно, ограничат время жизни (неполная стабильность)). Все обычные силы, используемые в настоящее время (обменные, ван-дер-ваальсовские и т.д.), сохраняются тогда, когда валентные электроны находятся на взаимных расстояниях больших радиуса адронного горизонта.

В этой главе мы изучаем *изохимическую модель молекулы воды*  $\text{H}_2\text{O}=\text{H}-\text{O}-\text{H}$ , впервые введенную Сантилли и Шиллади [3b], при предположении, что молекула рассматривается при абсолютном нуле температуры и в отсутствии какого-либо вращательного, колебательного или другого движения. Основная гипотеза заключается в том, что каждый электрон от двух H-атомов соединен в синглет с одним  $2p$  электроном от O-атома, что приводит к образованию *двух изоэлектрониумов*, по одному на каждый H-O димер как на Рис. 5.1.

В этом Разделе мы изучим адронное/изошредингеровское уравнение для молекулы воды при вышеуказанных предположениях. Это уравнение является, очевидно, аппроксимированным, но *точно решаемым*, что имеет место впервые. Затем мы покажем, что модель вполне расширяема на все остальные димеры содержащие атом водорода, такие как H-C.



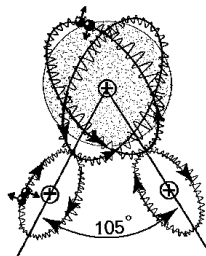


Рис. 5.1: Схематический вид предложенной *изохимической модели молекулы воды*, изображенной здесь при абсолютном нуле температуры и при отсутствии какого-либо движения, для случая полностью стабильного изоэлектронииума. Следует подчеркнуть, что, при обычной температуре, вращательные движения снова обретают обычное пространственное распределение, поэтому снова возвращается "Мики Маус" конфигурация молекулы воды. Модель опять представлена в терминах *орбит валентных электронов* (она отличается от модели в терминах *распределения плотности*) Фундаментальное предположение заключается в том, что два валентных электрона, по одному на каждую пару атомов, коррелируют друг с другом на близком расстоянии в два связанных синглетных состояния, которые мы называем *изоэлектронииумами*, по одному на каждый димер Н-О, чьи состояния принимаются в основном стабильными (см. текст для в основном нестабильного случая). Молекула воды сводится тогда к двум пересекающимся Н-О димерам с общим О-атомом. Единственными орбитами производящими стабильную молекулу воды являются такие, на которых изоэлектронииум описывает орбиту *oo*-формы вокруг соответствующих двух ядер Н- и О-атомов. Тогда изоэлектронииумы ответственны за *притягивающую силу* между атомами. *Энергия связи*, характеризуемая орбитами изоэлектронииумов *oo* - формы вокруг соответствующих двух ядер, концептуально воспроизведена на этой фигуре через стоячую волну для частицы со спином 0 и зарядом  $-2e$ . Заметим, что в отсутствии молекулярных движений, орбиты двух изоэлектронииумов перпендикулярны Н-О-Н плоскости, поэтому подтверждается характеристика молекулы воды рассмотренная в Разделе 5.2. Обычные обменные, ван-дер-ваальсовские и другие силы остаются допускаемыми моделью, когда изоэлектронииумы по большей части нестабильны. Модель позволяет воспроизведение: 1) "сильного" значения молекулярной связи; 2) причины почему молекула  $H_2O$  имеет только два атома водорода и один атом кислорода; 3) энергии связи, электрического и магнитного моментов с точностью до седьмого порядка; и многое другое, изученное в этой работе. Вышеприведенная модель Н-О димера расширяема до других димеров с Н, таких как Н-С.

С этой целью мы аппроксимируем молекулу Н-О-Н как составленную из двух пересекающихся Н-О димеров с, очевидно, только одним атомом кислорода. Это требует первой поправки согласно отсутствию независимости упомянутых димеров, рассмотренной в Разделе 5.2. Кроме того, в каждом Н-О димере мы будем предполагать, что кислород воспринимается изоэлектронием как имеющий только один, чисто положительный заряд  $+e$ , локализованный в ядре. Очевидно, это требует второй поправки, которая, по существу, отвечает за экранирование множества электронов кислорода. Дополнительные поправки сформулированы в работе [1].

Изучение этих поправок приводит к тому факту, что все они могут быть воспроизведены через одно единственное гауссовское экранирование закона Кулона типа [3b]

$$\frac{+e}{r} \rightarrow \frac{+e(1 \pm e^{-\alpha r^2})}{r}, \quad (5.10)$$

где  $\alpha$  – положительные параметры, определяемые из экспериментальных данных, знак "–" применяется для экранированного О-ядра при взаимодействии с электроном (из-за отталкивания осуществляемого электронным облаком кислорода), в то время как знак "+" применяется для экранированного О-ядра при взаимодействии с Н-ядром (из-за притяжения осуществляемого упомянутым электронным облаком).

Результирующая модель структурно эквивалентна изохимической модели молекулы водорода Главы 3 [3a], за исключением отмеченных выше модификаций, и может быть очерчена следующим образом.

С обозначением нижним индексом 1 и  $a$  водорода, 2 и  $b$  кислорода, без отмеченного экранирования и в отсутствии всех адронных эффектов, обычное шредингеровское уравнение Н-О димера, с ядром кислорода считающимся имеющим только элементарный заряд  $+e$ , дается следующим:

$$\left( \frac{1}{2\mu_1} p_1 \times p_1 + \frac{1}{2\mu_2} p_2 \times p_2 - \frac{e^2}{r_{1a}} - \frac{e^2}{r_{2a}} - \frac{e^2}{r_{1b}} - \frac{e^2}{r_{2b}} + \frac{e^2}{r_R} + \frac{e^2}{r_{12}} \right) \times |\psi\rangle = E \times |\psi\rangle, \quad (5.11)$$

Как и в случае молекулы водорода  $H_2$ , наша задача заключается в том, чтобы подвергнуть вышеприведенную модель преобразованию, которое является неунитарным только на малых взаимных расстояниях

$r_c = b^{-1} = r_{12}$  валентных электронов ( $r_c$  принято здесь в качестве адронного горизонта) и становится унитарным на больших расстояниях  $\hat{I}_{r \leq 10^{-10} \text{ см}} \neq I$ ,  $I_{r \gg 10^{-10} \text{ см}} = I$ .

Мы принимаем, что состояние и связанное с ним гильбертово пространство системы (5.11) может быть факторизовано в знакомой форме (в которой каждый член должным образом симметризован или антисимметризован)

$$|\Psi\rangle = |\Psi_{12}\rangle \times |\Psi_{1a}\rangle \times |\Psi_{1b}\rangle \times |\Psi_{2a}\rangle \times |\Psi_{2b}\rangle \times |\Psi_R\rangle, \quad (5.12a)$$

$$\mathcal{H}_{\text{Tot}} = \mathcal{H}_{12} \times \mathcal{H}_{1a} \times \mathcal{H}_{1b} \times \mathcal{H}_{2a} \times \mathcal{H}_{2b} \times \mathcal{H}_R. \quad (5.12b)$$

Мы ищем неунитарное преобразование, которое будет действовать только на переменную  $r_{12}$ , характеризующую изоэлектрониум, и оставляющее неизменными все остальные переменные. Наиболее простым решением может быть

$$U(r_{12}) \times U^\dagger(r_{12}) = \hat{I} = e^{[\Psi(r_{12})/\hat{\Psi}(r_{12})] \int d\mathbf{r}_{12} \hat{\Psi}^\dagger(r_{12})_{1\uparrow} \times \hat{\Psi}(r_{12})_{2\uparrow}}, \quad (5.13)$$

где  $\Psi$  воспроизводит обычную волновую функцию и  $\hat{\Psi}$  воспроизводит изоволновую функцию, для которой мы вновь имеем фундаментальное условие быстрой сходимости

$$|\hat{T}| = |(U \times U^\dagger)^{-1}| \ll 1. \quad (5.14)$$

Теперь мы конструируем изохимическую модель преобразованием контактных членов (изохимия) и добавлением непреобразованных дальнедействующих членов (химия), что приводит к радиальному уравнению

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2 \times \mu_1} \times \hat{T} \times \nabla_1 \times \hat{T} \times \nabla_1 - \frac{\hbar^2}{2 \times \mu_2} \times \hat{T} \times \nabla_2 \times \hat{T} \times \nabla_2 + \right. \\ \left. + \frac{e^2}{r_{12}} \times \hat{T} - \frac{e^2}{r_{1a}} - \frac{e^2}{r_{2a}} - \frac{e^2}{r_{1b}} - \frac{e^2}{r_{2b}} + \frac{e^2}{R} \right) \times |\hat{\Psi}\rangle = E |\hat{\Psi}\rangle. \quad (5.15)$$

Учитывая, что халтеновский потенциал ведет себя на малых расстояниях подобно кулоновскому, уравнение (5.15) принимает вид

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2 \times \mu_1} \times \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2 \times \mu_2} \times \nabla_2^2 - V \times \frac{e^{-r_{12} \times b}}{1 - e^{-r_{12} \times b}} - \right.$$

$$\left( -\frac{e^2}{r_{1a}} - \frac{e^2}{r_{2a}} - \frac{e^2}{r_{1b}} - \frac{e^2}{r_{2b}} + \frac{e^2}{R} \right) \times |\hat{\psi}\rangle = E \times |\hat{\psi}\rangle. \quad (5.16)$$

Вышеприведенная модель может быть подвергнута важному упрощению. В первом приближении, при рассмотренных здесь предположениях, Н-О димер (5.16) может быть сведен к *ограниченной задаче трех тел*, подобно тому как это возможно для обычного  $\text{H}_2^+$  иона [1] (но не для обычной молекулы  $\text{H}_2$ ), согласно уравнению

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu_1} \times \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu_2} \times \nabla_2^2 - V \times \frac{e^{-r_{12b}}}{1 - e^{-r_{12b}}} - \frac{2e^2}{r_a} - \frac{2e^2}{r_b} + \frac{e^2}{R} \right) \times |\hat{\psi}\rangle = E \times |\hat{\psi}\rangle. \quad (5.17)$$

Отмеченные поправки – экранирование множества электронов кислорода и другие поправки необходимые для "чувствования" О-ядра изоэлектрониумом, а также Н-ядром – приводят к нашей окончательной модели

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu_1} \times \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu_2} \times \nabla_2^2 - V \times \frac{e^{-r_{12b}}}{1 - e^{-r_{12b}}} - \frac{2e^2}{r_a} - \frac{2e^2(1 - e^{-\alpha r_b})}{r_b} + \frac{e^2(1 + e^{-\alpha R})}{R} \right) \times |\hat{\psi}\rangle = E \times |\hat{\psi}\rangle, \quad (5.18)$$

где  $\alpha$  – положительный параметр;  $E$  – половина энергии связи молекулы воды; и, как это было в случае модели (4.35), масса изоэлектрониума, межъядерное расстояние и размер изоэлектрониума могут быть подобраны из значения энергии связи и других данных.

При последней аппроксимации, модель допускает точное аналитическое решение, как нам известно впервые, которое однако существует только для случая *полностью стабильного изоэлектрониума*. Действительно, для нестабильного изоэлектрониума, модель становится *структурой четырех тел*, которая не допускает точного решения.

Кроме наличия точного решения, модель (5.18) вводит *новую явно притягивающую "сильную" силу между нейтральными атомами Н-О димера*, которая отсутствует в обычной квантовой химии; уравнение объясняет также причины, почему молекула воды допускает только два Н-атома.

Как мы увидим в оставшихся разделах, модель позволяет существенно более точное воспроизведение энергии связи, электрического и магнитного моментов, приводит к более быстрой сходимости рядов с существенным сокращением компьютерного времени и разрешает другие недостатки обычных моделей.

И наконец, модель является очевидно расширяемой, с небольшой корректировкой, до точного решения других димеров включающих водород, таких как H-S. В добавок, она позволяет идентификацию электрической и магнитной поляризаций, которые являются непредсказуемыми квантовой химией (Глава 8).

## 5.4 Гауссовская аппроксимация изохимической модели молекулы воды с нестабильным изоэлектрониумом

Решение точно решаемой модели (5.18) не приводится в данной работе и предлагается для самостоятельного изучения. В этом разделе, мы делаем обзор исследований [3b] по гауссовской аппроксимации изохимической модели молекулы воды, с халтеновским потенциалом аппроксимированным до определенной гауссовской формы.

Мы должны сразу же отметить, что такая аппроксимация подразумевает очевидное ослабление халтеновского притяжения между двумя изоэлектронами изоэлектрониума, которое, в свою очередь, подразумевает нестабильность изоэлектрониума, таким образом получающаяся модель является чем-то средним между полностью изохимической моделью и обычной квантовомеханической моделью воды.

Несмотря на приближенный характер, результаты этого раздела являются весьма значительными, так как показывают способность изохимии достигнуть существенно более точного воспроизведения энергии связи, электрического и магнитного моментов и других характеристик молекулы воды.

Результаты этого исследования могут быть охарактеризованы следующим. Так как, при принятых условиях, HOON допускается немного больше, столкновения  $\text{HO}^-$  с нейтральной молекулой  $\text{H}_2\text{O}$  и внутреннее отталкивание между анионами могут создать условия для образования квазичастицы с зарядом  $-2e$  с формированием  $\text{OH}^+$ . Столкновения  $\text{OH}^+$

с  $\text{OH}^-$  будут продолжать повышение концентрации  $\text{HOON}$ , и перенос  $-2e$  будет давать вклад в электрический ток.

Остается открытым вопрос о том, что служит "спусковым механизмом" (Рис. 4.6) для создания синглетных пар электронов (изоэлектрониев) внутри молекулы воды в случаях форсированной проводимости, при которой, дополнительный вклад в ток будет обеспечиваться механизмом аналогичным таковому для куперовских пар электронов в твердых сверхпроводниках.

Так как энергетическая глубина  $V_0$  халтеновского потенциала для изоэлектрониев, в оригинальном выводе Сантилли [6] 1978 года, неизвестна, а также неизвестно насколько гауссовское воспроизведение подходит к халтеновской форме, мы можем только подбирать радиус двух потенциалов и вычислять имеющиеся энергетические отличия с помощью модели "слипающихся электронов", в которой может иметь место временная форма изоэлектрониев (гауссовская потенциальная яма не достаточно глубока для обеспечения перманентно связанного состояния изоэлектрониев).

Модель "слипающихся электронов" является параметрической моделью, которая включает в себя дипольное притяжение между синглетно-спаренными электронами, а также нелокальное слияние волновых пакетов всех электронов на близком расстоянии. Радиус гауссовского экранирования определяется тогда эмпирически, подбором вычисляемой энергии по возможности близко к известным точным значениям.

Следует подчеркнуть, что, как было здесь использовано, вне-осевые расположения базисных наборов гауссовских вытянутых функций [7-9] гарантируют, что угловые поправки включают в себя также радиальную зависимость и могут включать магнитное дипольное притяжение противоположно направленных электронных спинов, так же как и слияние волновых пакетов.

Радиальный параметр экранирования, используемый вне-осевым базисным набором, параметрически покрывает все формы контактного притяжения, которые могут иметь угловую зависимость. Поэтому представленная модель может дать нам приближенную разницу энергий требуемую для освобождения электронной пары из  $\text{OH}^-$ .



Ниже будет видно, что разница энергий между  $\text{OH}^-$  и  $\text{OH}^+$ , как показывают расчеты, позволяющая временную форму изоэлектрониев,

вполне достижима при использовании объемного электрического разряда сквозь воду. Такой механизм, который позволил бы  $-2e$  частицам проходить сквозь воду, не является сверхпроводимостью в обычном смысле, так как свободно двигающиеся молекулы и ионы не закреплены на своих местах, как в твердом теле, так что нагревание согласно  $I^2R$  по прежнему будет иметь место.

Это в основном благодаря тому факту, что проводимость в жидкостях осуществляется подвижными и анионами, и катионами всех размеров, любых поляризаций, и всеми особыми механизмами, такими как "эффект домино" для переноса  $H^+$ . В проводимости твердого тела участвуют только электроны, двигающиеся игнорируя покоящиеся фононные осцилляции, так как атомы не могут перемещаться от одного электрода к другому.

Несмотря на отмеченное отсутствие сверхпроводящего характера, следует отметить, что все-таки, по существу нулевой магнитный момент  $-2e$  частицы будет подразумевать действительное снижение сопротивления.

Видимое движение положительно заряженных "дырок" также происходит из-за движения электронов, в то время как атомы просто колеблются около своих мест в кристаллической решетке. Решение имеет два противоположных направления движения – для положительных и для отрицательных ионов, двигающихся с разными скоростями, что приводит к резистивному нагреванию воды (вплоть до испарения) и высокой вероятности ионных столкновений.

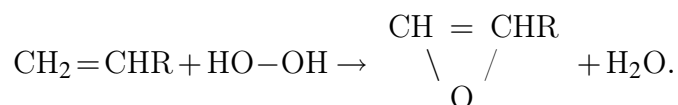
Следует отметить, что в недавней работе Ашоори (Ashoori) и др. [10] измерена миграция спаренных электронов к квантовым точечным ямам в GaAs, в то время как Бойд (Boyd) и Ёи (Yee) [11] наблюдали "биполяронные" электронные пары в alkali halide решеточных вакансиях. Расчеты привели к неожиданным биполаронам в вакансиях кристаллической решетки, наблюдавшихся также с использованием метода Кара (Car) и Паринелло (Parinello) [12]. Эти находки в области физики твердого тела подтверждают концепцию электронной пары как отдельной частицы, называемой авторами изоэлектронием.

Приведенные здесь вычисления не доказывают наличие изоэлектронных частиц при прохождении сквозь воду сильных электрических токов; они только отмечают необходимый энергетический порог для формирования изоэлектрониема при этих условиях двойной ионизации  $OH^-$ .

Не легко вообразить себе эксперимент, который мог бы анализировать компоненты данного тока, из-за ионных зарядов кратных заряду  $-2e$

частиц, он здесь и не предлагается. Однако для проверки этого механизма может быть предложен химический тест. Раз  $\text{OH}^-$  является дважды ионизированным для образования  $\text{OH}^+$ , столкновения с  $-2e$  частицами будут регенерировать  $\text{OH}^-$  ионы, точно также как столкновения  $\text{H}^+$  с  $\text{OH}^-$  будут восстанавливать  $\text{H}_2\text{O}$ , и отсутствие новых составляющих будет очевидным.

Однако, если  $\text{OH}^-$  сталкивается с  $\text{OH}^+$ , будет формироваться новая химическая компонента  $\text{HO-OH}$ , которая может находиться в воде очень долго и вести себя как сильно окисляющий агент. Поэтому, органические соединения с двойными связями (алкены), имеющие ничтожную проводимость, могут быть добавлены в воду при прохождении через нее сильного электрического тока, для получения гидроокисления этих соединений [13], (то есть, превращения алкенов в эпоксид, который затем легко поддается гидролизу при наличии  $\text{H}^+$  для диолиза). Возрастающая концентрация эпоксидов и диолов могла бы косвенно свидетельствовать о двойной ионизации  $\text{OH}^-$ , согласно выражению



Если бы изоэлектронииум мог быть детектирован косвенным химическим методом, это само по себе было бы важным выводом о существовании двойных электронов, с нулевыми спинами. И, что еще более важно, "изохимические реакции" могли бы проводиться в среде высокопроводящей "жидкой плазмы", которая обладает повышенной концентрацией изоэлектронииумов.

Другим интересным случаем являются водные смеси нерастворимых органических соединений, формирующих маслянистую пленку над поверхностью воды в сильном магнитном поле порядка нескольких Тесла. При комнатной температуре,  $kT \cong RT$  на моль, основной формой энергии будет являться энергия броуновского движения.

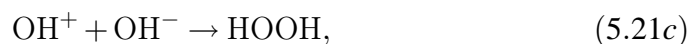
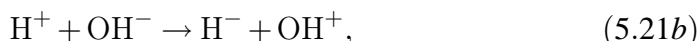
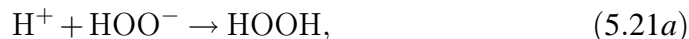
Однако, в присутствии сильного магнитного поля  $\text{HO}^+$  и  $\text{HO}^-$  будут принуждаться к циркулирующим движениям из-за "циклотронного эффекта", но это не является очевидным источником появления  $\text{HO}^+$ .

Так как ионы с зарядами противоположного знака будут иметь предрасположение к столкновению, обусловленное и электрическим притяжением и противоположно направленными вращениями в магнитном поле,



будет наблюдаться возрастание концентрации  $\text{HOON}$  из-за столкновений  $\text{H}^+$  с  $\text{HOO}^-$ , с учетом того, что образующиеся ионы являются естественным результатом  $\text{H}^+$ ,  $\text{OH}^-$ ,  $\text{H}^-$ ,  $\text{H}_2\text{O}_2$ ,  $\text{HO}_2^-$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  равновесия системы, изученного Поурбо [5].

В добавок, имеется небольшой шанс, что  $\text{H}^+$  будут сталкиваться с  $\text{OH}^-$ , с достаточным выделением энергии для производства  $\text{OH}^+$  и  $\text{H}^-$ . Поэтому, наличие сильного магнитного поля способствует столкновениям положительных и отрицательных ионов, двигающихся по дугам направленным друг навстречу другу, таким образом, чтобы увеличить концентрацию  $\text{HOON}$ ,



что могло бы затем эпоксировать алкены, и последующий гидролиз привел бы к появлению диолов.

Непосредственное измерение этого эффекта могло бы определить возрастание растворимости алкенов в воде. Алкены только слегка растворимы в воде ("масло с водой не смешивается"), но алкены превращенные в диолы будут иметь измеримо большую растворимость в воде, согласно присоединению ими  $\text{OH}$ -группы. Опять-таки. Если бы возрастание растворимости алкенов в воде было бы следствием сильных магнитных полей, это было бы косвенным свидетельством существования электронной пары с зарядом  $-2e$ .

В описании нижеприведенных вычислений, ключом к вышеуказанной возможности является легкость вычисления энергии  $\text{OH}^-$  если сделать небольшое вычитание из членов описывающих отталкивание двух электронов в обычной  $\text{HFR-SCF}$  трактовке, согласно притяжению синглетно спаренных электронов в малой области порядка 1.0 пикометра.

В недавно выпущенном "Справочнике вычислительной квантовой химии" Кука (Cook) [14] (стр. 438) отмечено, что решения в  $\text{HFR-SCF}$  схеме не всегда могут существовать для анионов. Однако, в используемом здесь  $\text{HFR-SCF}$  методе сходимость была нормальная для  $\text{SCF}$  процесса, так как, так называемая ошибка "энергия самодействия" метода Хартри-Фока [15] (отталкивание электроном всех электронов включая себя) значительно снижается новым притягивающим членом используемым здесь. В результате, описание  $\text{OH}^-$  возможно благодаря легкой сходимости "коррелированного  $\text{SCF}$  процесса".

## 5.5 Метод

Модель, принятая в работе [3b], характеризуется обычными уравнениями самосогласованного поля Хартри-Фока-Рутаана [16] (которые имеют также формальные пороки, такие как самодействующие члены [15]) и неунитарным лифтингом кулоновского взаимодействия электронов.

Заметим, что понижение значений кулоновских интегралов будет понижать энергию понижением межэлектронного отталкивания, в то время как понижение обменных членов будет повышать энергию, но множитель 1/2 понижает эффект обменных членов. Поэтому понижение значения интегралов будет понижать энергию.

Заметим, что Годдард (Goddard) [15] уже рекомендовал понижение атомной энергии самодействия вычитанием 1.39 эВ из обменных интегралов Хартри-Фока в случаях Cr<sub>2</sub> и Mo<sub>2</sub>.

$$FC = ESC; F_{i,j} = H_{i,j} + \sum_{k,l} P_{k,l} [(i,j|k,l) - 1/2(i,k|j,l)], \quad (5.22a)$$

$$(i,j|k,l) = \iint \chi_i(l)\chi_j(l) \frac{1}{r_{12}} \chi_k(2)\chi_l(2) d\tau_1 d\tau_2, \quad (5.22b)$$

$$P_{i,j} = 2 \sum_n c_{n,i} c_{n,j} \quad (\text{суммирование } n \text{ только по занятым орбиталям}). \quad (5.22c)$$

В работе Анималу и Сантилли [6b] 1995 года, посвященной электронным парам, было предложено нелокальную адронную притягивающую силу, очевидную в  $\pi^0$ -мезоне Сантилли [6a], применить для описания пары синглетно связанных электронов, которые формируют бозонную квазичастицу. Однако, "коллапсирующий позитроний" быстро распадается, так как аннигиляция частицы-античастицы имеет место менее чем за пикосекунду.

В электрон-электронном случае можно надеяться, что это стабильная квазичастичная синглетная связь, которую мы называем изоэлектрониумом, может быть стабильной. После использования нелокального изотопического нелинейного преобразования, адронное притяжение проектировалось в действительное пространство и моделировалось халтеновским потенциалом.

Значительные усилия приложенные для оценки матричных элементов для халтеновского потенциала не оправдались. Тщательная провер-

ка оригинальной работы 1978 года Сантилли [6a], посвященной коллапсу позитрониума, вскрыла, что халтеновский потенциал не обязательно является единственным воспроизведением адронной силы. Действительно, линейная комбинация схожих потенциалов может быть использована для воспроизведения халтеновского потенциала, если матричные элементы этих других потенциалов могут быть оценены.

Глубина экранированного гауссовского приближения определяется тем требованием, чтобы ширина на половине высоты гауссовской функции равнялась значению  $b$  халтеновского горизонта (радиус, на котором кулоновское отталкивание аннулируется силами притяжения). Поэтому, экранированный гауссовский потенциал вероятно имеет весьма малую глубину, хотя параметр глубины  $V_0$  для халтеновского потенциала до настоящего времени неизвестен.

В этой работе принимается, что пока матричные элементы двухэлектронного взаимодействия для синглетных пар не могут быть найдены для случая халтеновского потенциала, гауссовски экранированный кулоновский потенциал может быть использован для описания действительной пространственной формы адронного притяжения и в качестве параметра, подбираемого к экспериментальным энергиям, экранирующая экспонента вероятно включает в себя другие эффекты, такие как магнитное дипольное взаимодействие двух электронов с противоположными спиновыми магнитными моментами. Эта форма обладает тем важным свойством, что может быть слита с общим случаем четырехцентрового кулоновского или обменного интеграла выведенного Шавиттом (Shavitt) [17] использованием известной техники гауссовского преобразования.

Гауссовское преобразование двухэлектронного интеграла для четырех гауссовских сфер было использовано во множестве базисов вытянутых гауссовских функций SCF программ написанных Шиллади [18, 19] и другими. Важно отметить, что формула полностью общая относительно ориентации четырех гауссовских сферически вытянутых орбиталей, как и относительно расстояния между двумя электронами.

Модифицированная для описания корреляции двух электронов, такая общая формула может описывать угловую корреляцию так же как и расстояние взаимодействия. Поэтому, матричные элементы экранированного кулоновского взаимодействия были вычтены из обычного  $1/r$  кулоновского отталкивания для моделирования действительной пространственной формы адронного притяжения двух электронов. Схема, обрисованная в этом разделе и впервые представленная в [3b], предполагает

добавление гауссовского экранирования как  $\exp[-\alpha r^2]/r$ , так что могут быть использованы специальные свойства гауссовских функций, особенно важными являются те свойства, что произведение двух гауссовских функций дает другую гауссовскую функцию (умножение на перецентрирующий множитель) и, что полярные координаты легко разделяются на перемноженные  $x$ ,  $y$ ,  $z$  компоненты.

Целью являлось оценить двухэлектронные четырехцентровые матричные элементы гауссовски экранированного кулоновского потенциала в выражении

$$Y(r) = \frac{1 - 2\exp[-\alpha r^2]}{r}. \quad (5.23)$$

Величина  $\alpha$  – обычно очень большое число, и эта работа предполагает его равным  $0.13441885 \times 10^7$ . С этого момента, обычное кулоновское взаимодействие прибегает к хорошо известной вспомогательной функции  $F_0$ , которая была изучена Шиллади [18] и другими.

Так как и  $s^{1/2}$ , и  $(s + \alpha)^{1/2}$  оказываются в знаменателе экранированной кулоновской формы, интеграл имеет два полюса. Замена переменной поглощает полюс связанный с  $(s + \alpha)^{-1/2}$  и сдвигает другой полюс связанный с  $s^{-1/2}$  к нижнему пределу интегрирования. Является очевидным гладкий пик на нижнем пределе численного интегрирования с использованием 70-точечного симпсоновского правила интегрирования (две области примыкающие к полюсу используют 20 точек и на остальную область приходится 50 точек).

Эта работа была проведена с использованием 64-битной арифметики двойной точности, которая обеспечивает 14 значащих цифр. Простой офсет  $\delta 1.0 \times 10^{-15}$ , используемый во избежания числового переполнения, обеспечил полезные результаты.

Несмотря на то, что этот полюс формально проблематичен, так как для интегрирования требуется непрерывная функция, численное интегрирование, применяемое к кулоновским интегралам, как известно, дает точность только до 12 значащих цифр. Область под пиком полюса оценивается как узкий треугольник на прямоугольнике  $1.0 \times 10^{-15}$  шириной, с высотой треугольного набора  $3.43207 \times 10^8$  умножить на высоту точечного набора  $1.0 \times 10^{-15}$  в области интегрирования (первая симпсоновская точка).

Представленный код для этого экранированного кулоновского интеграла в настоящее время является более медленным чем соответствующая функция  $F_0$  [17], используемая для кулоновских интегралов соглас-

но 70-точечному симпсоновскому интегрированию, но интеграл в районе плоского участка после пика в  $s = 0.0$  может быть оценен более быстро по нескольким точкам. Для представленных здесь результатов, простой офсет нижнего предела  $1.0 \times 10^{-15}$  является адекватным для этой монографии. Дальнейшие детали касающиеся вспомогательного интеграла могут быть найдены в предыдущей работе по молекуле  $H_2$  [20].

Работа, находящаяся стадии подготовки, показывает, что может быть будет возможно выразить новый вспомогательный интеграл через аналитическое выражение вовлечением  $\operatorname{erf}(x)$  функции (см. Главу 6), но пока нет окончательного подтверждения, используется симпсоновское интегрирование. Заметим, что этот интеграл является результатом упрощения двенадцатикратного интегрирования по объемным элементам двух электронов и сведения к одномерному интегрированию с умножением на необходимый множитель.

## 5.6 Главные результаты

Геометрия данная для  $H_2O$  Даннингом (Dunning) [21] была использована для проведения обычных HFR-SCF расчетов после того как дополнительная  $3d$  имитация орбитали была оптимизирована в [3b] для O атома и  $(2s, 2p)$  орбитали были добавлены для H атомов. Показатель для  $O3d$  орбиталей был оптимизирован до трех значащих цифр и  $(O3d, H2s, H2p)$  показатели были равны (2.498, 0.500, 1.000). Эти поляризованные орбитали были добавлены к базису Даннинга-Хазинаги ( $10s6p$ ) [20] с  $H1s$  орбиталями отградуированными к 1.2 и который давал более низкую энергию, чем базис  $6-31G^{**}$  используемый программой GAMESS. Длина связи  $OH^+$  составляла Ангстремы.

Та же длина связи была использована для  $OH^-$ , так как расчеты для аниона с использованием обычного HFR-SCF процесса не осуществимы, и, в любом случае, его длина связи только немного больше чем для молекулы воды. Значение горизонта 0.00038 Ангстрем, оптимизированное для  $H_2O$ , также было использовано для  $OH^+$  и  $OH^-$ .

Пик в процедуре численного интегрирования был оптимизирован подбором значения обрезания  $R_c$  так, чтобы получить как можно более точное значение нерелятивистской энергии молекулы HF, полученное квантовым методом Монте-Карло [21]. Дипольные моменты ионов не очень полезны, так как ионные диполи зависят от начала координат, но они

были вычислены с использованием системы отсчета центра масс.

Таблица 5.1: Результаты по изоэлектронному для некоторых молекул [3b].

	ОН <sup>+</sup>	ОН <sup>-</sup>	H <sub>2</sub> O	HF
SCF-Energy <sup>a</sup>	-74.860377	-75.396624	-76.058000	-100.060379
Hartree-Fock <sup>b</sup>				-100.07185 <sup>b</sup>
Iso-Energy <sup>c</sup>	-75.056678	-75.554299	-76.388340	-100.448029
Horizon $R_c$ (Å)	0.00038	0.00038	0.00038	0.00030
QMC Energy <sup>b,d</sup>	-76.430020 <sup>d</sup>			-100.44296 <sup>b</sup>
Exact non-rel.				-100.4595
Iso-Dipole ( $D$ )	5.552581	8.638473	1.847437	1.8413778
Exper. Dipole			1.84	1.82

<sup>a</sup> Даннинг-Хазинага ( $10s/6p$ ), (6,2,1,1,1/4,1,1)+H2s1+H2p1+3d1.

<sup>b</sup> Изоэнергия откалиброванная для получения максимума корреляции для HF.

<sup>c</sup> Энергии Хартри-Фока и QMC Лучова и Андерсона [22].

<sup>d</sup> QMC энергии Хаммонда, Лестера и Рейнольдса [21].

Как мы видим в Таблице 5.1, разница энергий ОН<sup>-</sup> и ОН<sup>+</sup> равна 0.497621 Хартри (13.54 эВ) согласно скоррелированным SCF вычислениям. Из стандартного значения SCF энергии для H<sub>2</sub>O ясно, что этот базис является весьма хорошим, но недостаточным на пределе энергии Хартри-Фока. В добавок, подбор пиков в численном интегрировании, как можно ближе к воспроизведению полной энергии HF, не является точным.

Эти два артефакта вносят неопределенность по энергии порядка 0.0115 Хартри, но это меньшая неопределенность чем для энергии Лучова и Андерсона [22] полученной квантовым методом Монте-Карло (QMC). Заметим, что изодиполи для H<sub>2</sub>O и HF очень близки к экспериментальным значениям, что говорит о том, что вычисленные волновые функции имеют высокое качество.

Эти вычисления показывают, что возможно увеличение проводимости при достижении потенциала более 13.7 вольт на ячейку воды и увеличение концентрации HOON может быть измеримо при потенциале более 13.7 вольт. Стоит повторить, что эта оценка вероятно завышена, согласно легкой сходимости скоррелированного SCF процесса для отрицательных

ионов; процесса, который формально не определен при обычном процессе Хартри-Фока-Рутаана (14), и большинство исследователей в области квантовой химии знакомы с трудностями в трактовке отрицательных ионов при использовании стандартного метода Хартри-Фока-Рутаана.

При допущении, что скоррелированные SCF уравнения являются параметрическим приближением к выводу Сантили халтеновского потенциала [6a] для связанной электронной пары, метод имеет преимущество легкого объединения в существующую программу Хартри-Фока-Рутаана с гауссовским базисом простым вычитанием малого "корреляционного интеграла" из обычных двухэлектронных интегралов.

После не долгих размышлений, можно сделать вывод, что подбор единственного параметра (гауссовского показателя экранирования,  $\alpha$ ) к экспериментальным энергиям, и/или результатам квантового метода Монте-Карло, будет объединять новое притяжение в форму взаимодействия магнитных диполей между спинорными моментами спаренных электронов. Включение магнитно-дипольного взаимодействия и замена гауссовской формы экспоненциальным халтеновским потенциалом оставляет только моделирование связанной электронной пары – изоэлектрониума. Поэтому, эти результаты имеют место для модели в которой обычный HFR-SCF метод подправлен для, по крайней мере, двух взаимодействий притяжения электронов, что приводит к тому, что при приближении друг к другу они как бы "слипаются"; отсюда термин "модель слипающихся электронных пар".

## 5.7 Заключение

В Главе 3, мы представили покрытие квантовой химии под названием *адронная химия*. В Главе 4, мы применили новую дисциплину к конструированию новой модели молекулярных структур, основанной на связывании пары валентных электронов от различных атомов в синглетное квази-частичное состояние, называемое *изоэлектрониумом*.

Затем, мы применили модель к структуре молекулы водорода, с достижением результатов явно невозможных в квантовой химии, таких как: воспроизведение энергии связи и других характеристик молекулы водорода с точностью до *седьмого порядка*; объяснение причины почему молекула водорода имеет только *два* атома; снижение компьютерного времени по крайней мере в 1000 раз; и многое другое.

В этой главе, мы приложили изохимическую модель молекулярных связей к молекуле воды и другим, со схожими результатами. Действительно, *изохимическая модель воды и других молекул поддерживается следующими концептуальными, теоретическими и экспериментальными данными:*

- 1) она вводит новую сильную связывающую силу (которая отсутствует в современных моделях), способную объяснить силу связи и стабильность молекул;
- 2) она объясняет причину почему молекула воды имеет только два атома водорода и один атом кислорода;
- 3) она позволяет воспроизведение энергии связи воды и других молекул с высокой точностью;
- 4) она воспроизводит электрический и дипольный моменты и другие характеристики воды и других молекул, также с высокой точностью;
- 5) она позволяет снижение компьютерного времени затрачиваемого на вычисления по крайней мере в 1000 раз; а также позволяет другие достижения, схожие с полученными для молекулы водорода.

Более того, как это имело место для молекулы водорода в Главе 4, значение радиуса изоэлектронума (5.9) вычисленное через динамические уравнения было полностью подтверждено независимыми вычислениями для воды и других молекул, проведенными через базисный набор гауссовских вытянутых функций.

Эмиссия электронных пар в сверхпроводимости была тщательно рассмотрена в Главе 3. В Главе 4 мы также отметили *предварительное, но уже непосредственное подтверждение изохимической модели молекулярных связей предлагаемое проводящимися экспериментами по фотоэффекту валентных электронов в гелии, свидетельствующими о том, что электроны испускаются парами [23].* Здесь мы рекомендуем систематическое повторение этих экспериментов *специально для воды.* Статистическое соотношение электронных пар и полного числа вылетевших электронов даст информацию о том, является ли изоэлектронум полностью стабильным или нет.

Мы должны наконец отметить, что *воспроизведение энергии связи, электрического и магнитного моментов и других характеристик молекулы воды и других молекул, имеющее точность до нескольких порядков, впервые достигнутую в работах [3], является нагляднейшим экспериментальным фактом подтверждающим недостаточность квантовой механики и возможности покрывающей адронной механики при воспроизведе-*



нии нелинейных, нелокальных и непотенциально-неунитарных эффектов, связанных с глубоким перекрытием "протяженных волновых пакетов" электронов с точечной зарядовой структурой.

Новая изохимическая модель молекулы воды, очерченная в этой главе, имеет множество новых интригующих применений. Например, коррелированный-SCF метод использовался для легкого получения энергии ОН-аниона в воде, в то время как ОН<sup>+</sup> ион легко трактуется и в стандартном, и в модифицированном методе. Разница энергий между ОН<sup>+</sup> системой, имеющей 8 электронов, и ОН<sup>-</sup> системой, имеющей 10 электронов, оказывается равной 13.54 эВ. Это дает энергию, необходимую для того, чтобы изъять  $(2e)^{-2}$  из ОН<sup>-</sup>. Это говорит о возможном наличии порога около 13.6 эВ при протекании тока в водной среде, обусловленного квазичастицами  $(2e)^{-2}$ . Этот вольтаж также будет поддерживать Н<sup>+</sup> в растворе в той же степени. Органические алкены в растворе должны превращаться в эпоксид согласно сольволизации до диолов при условии большого количества  $(2e)^{-2}$ .

Другим интересным результатом является то, что естественное количество НООН в воде может быть повышено простым помещением образца в сильное магнитное поле. Положительные и отрицательные ионы будут двигаться по дугам, обусловленным магнитным полем и простым броуновским движением, таким образом, что это приведет к повышению количества столкновений противоположно заряженных ионов. В частности, ОН<sup>-</sup> и ОН<sup>+</sup> могут подвергаться более частым столкновениям, приводящим к росту количества НООН.

Это дополнительное количество НООН будет способно реагировать с алкенами, формируя эпоксиды, которые затем будут подвергаться гидролизу с формированием диолов. Такие диолы были бы гораздо более растворимыми в воде, чем изначальные алкены. Это приводит к важной возможности простым наложением магнитного поля осуществлять реакции превращения нерастворимых алкенов в модифицированные составляющие, хорошо растворимые в воде. Другими словами, органические масла, содержащие некоторое количество двойных связей, могут быть сделаны более растворимыми в воде просто механической эмульсификацией масел в воде при условии наложения сильного магнитного поля.

Поэтому смеси масел и воды могут быть механически перемешаны в магнитном поле в несколько Тесла для производства новых масел, которые химически схожи с изначальными маслами (предполагается большая органическая структура), но более растворимы в воде после нало-

жения магнитного поля (детали см. в Главе 8).

Схожим образом, легко видеть, что в то время как обычная квантовохимическая модель молекулы воды предсказывает одну и только одну конфигурацию, наша изохимическая модель предсказывает множество физически неэквивалентных конфигураций, в зависимости от ориентации двух орбит *oo* формы, и другие свойства, которые исследуются отдельно.

Промышленная значимость исследований очерченных в этой главе будет представлена в Главах 7 и 8.



# Литература

- [1] Eisenberg, D. and Kauzmann, W.: *The Structure and Properties of Water*, Oxford University Press, New York (1969).
- [2] Santilli, R.M.: *Elements of Hadronic Mechanics*, Vols. **I** and **II**, Ukraine Academy of Sciences, Kiev, 2-nd ed. (1995); Found. Phys. **27**, 625 (1998); Rendiconti Circolo Matematico Palermo, Suppl. **42**, 7 (1996); Algebras, Groups and Geometries **10**, 273 (1993); *Isotopic, Genotopic and Hyperstructural Methods in Theoretical Biology*, Ukraine Academy of Sciences, Kiev (1996). Sourlas, D.S. and Tsagas, G.T.: *Mathematical Foundations of the Lie-Santilli Theory*, Ukraine Academy of Sciences, Kiev, (1993). Lôhmus, J., Paal, E. and Sorgsepp, L.: *Nonassociative Algebras in Physics*, Hadronic Press, Palm Harbor, FL (1994).
- [3] Santilli, R.M. and Shillady, D.D.: Intern. J. Hydrogen Energy **24**, 943 (1999) [3a]; Intern. J. Hydrogen Energy **25**, 173 (2000) [3b].
- [4] Barrow, G.M.: *Physical Chemistry*, 6th Edition, McGraw-Hill, New York (1996), Chapter 8.
- [5] Pourbaix, M.: *Atlas of Electrochemical Equilibria in Aqueous Solutions*, National Assoc. Corrosion Engr., Houston, Texas, USA, p. 99. (1974).
- [6] Santilli, R.M.: Hadronic J. **1**, 574 (1978); Animalu, A.O.E. and Santilli, R.M.: Int. J. Quantum Chem. **29**, 175 (1995).
- [7] Boys, S.F.: Proc. Roy. Soc. (London), **A200**, 542 (1950).
- [8] Whitten, J.L.: J. Chem. Phys. **39**, 349 (1963); Sambe, H.: J. Chem. Phys. **42**, 1732 (1965); Preuss, H.: Z. Naturforsch. **11a**, 823 (1956); Whitten, J.L. and Allen, L.C.: J. Chem. Phys. **43**, S170 (1965); Harrison, J.F.:

- J. Chem. Phys. **46**, 1115 (1967); Frost, A.A.: J. Chem. Phys. **47**, 3707 (1967).
- [9] Le Rouzo, H. and Silvi, B.: Int. J. Quantum Chem. **13**, 297, 311 (1978); Nguyen, T.T., Raychowdhury, P.N. and Shillady, D.D.: J. Comput. Chem. **5**, 640 (1984).
- [10] Zhitenev, N.B., Ashoori, R.C., Pfeiffer, L.N. and West, K.W.: Phys. Rev. Lett. **79**, 2308 (1997).
- [11] Boyd, R.J. and Yee, M.C.: J. Chem. Phys. **77**, 3578 (1982).
- [12] Fois, E.S., Selloni, A., Parinello, M. and Car, R.: J. Phys. Chem. **92**, 3268 (1988).
- [13] March, J.: *Advanced Organic Chemistry*, 3rd ed., John Wiley and Sons, New York, p. 733 (1985),
- [14] Cook, D.B.: *Handbook of Computational Quantum Chemistry*, Oxford Science Publications, Oxford New York, pp. 285-295 and 438-441 (1998).
- [15] Goodgame, M.M. and Goddard, W.A.: Phys. Rev. Lett. **54**, 661 (1985).
- [16] Schaefer, H.F.: *The Electronic Structure of Atoms and Molecules*, Addison-Wesley, Reading, Mass. (1972).
- [17] Shavitt, I.: *Methods in Computational Physics*, B. Alder (ed.), Academic Press, New York (1963).
- [18] Mosier, C. and Shillady, D.D.: Math. of Computation, **26**, 1022 (1972): Program LOBE140 described by D.D. Shillady and Sheryl Baldwin, Int. J. Quantum Chem., Quantum Biology Symposium **6**, 105 (1979).
- [19] Shillady D.D. and Talley, D.B.: J. Computational Chem. **3**, 130 (1982); Shillady D.D. and Richardson, F.S.: Chem. Phys. Lett. **6**, 359 (1970).
- [20] Dunning, T.H.: J. Chem. Phys. **53**, 2823 (1970), J. Chem. Phys. **55**, 716 (1971), J. Chem. Phys. **55**, 3958 (1971).
- [21] Hammond, B.L., Lester, W.A. Jr., and Reynolds, P.J.: Monte Carlo Methods, in: Ab Initio Quantum Chemistry, World Scientific Lecture and Course Notes in Chemistry, Vol. **1**, World Scientific, New Jersey, p. 67 (1994).

- [22] Luchow, A. and Anderson, J.B.: J. Chem. Phys. **105**, 7573 (1996).
- [23] Burnett Collaboration, <http://eve.physics.ox.ac.uk/INTENSE/zz>.
- [24] USMagneGas, Inc., <http://www.santillimagas.com>.



## Глава 6

# Вариационные расчеты ИЗОХИМИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ МОДЕЛЕЙ

### 6.1 Введение

В работе [1a], очерченной в Главе 4, Сантилли и Шиллади ввели ограниченную изохимическую модель трех тел молекулы водорода, допускающую точное решение, и полную изохимическую модель четырех тел молекулы водорода, которая уже не допускает точного решения.

В работе [1b], очерченной в Главе 5, Сантилли и Шиллади ввели две соответствующие изохимические модели воды и других молекул, одна основана на ограниченной модели трех тел НО димера и допускает точное решение, и вторая основана на изохимической модели четырех тел.

Как также рассмотрено в Главах 4 и 5, вариационный метод Шиллади SASLOBE [1] показывает способность изохимических моделей достигнуть существенно более точного воспроизведения экспериментальных данных касающихся молекул водорода, кислорода и других, так же как разрешения некоторых дефектов и несогласованностей обычных квантовохимических молекулярных моделей.

Весьма детальная независимая проверка моделей [1a,1b] была проведена А.К. Арынгазиным и М.Г. Кучеренко [2a] через точное решение и А.К. Арынгазиным [2b] через вариационный метод Ритца (Ritz), с подтверждением всех числовых результатов работы [1].



В этой главе мы очерчиваем работы [2], так как в них приводятся новые важные данные и результаты изохимии, довольно общего характера, и возможные приложения изохимии к различным молекулам.

## 6.2 Исследования Арынгазина-Кучеренко ограниченной изохимической модели трех тел молекулы водорода

В этом разделе мы рассматриваем исследования Арынгазина и Кучеренко [2a] точно решаемой, ограниченной изохимической модели трех тел молекулы  $H_2$  Сантили-Шиллади [1a], (4.35),  $r_{12} \simeq 0$ , то есть,

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{ab}^2 \psi + \left( -\frac{2e^2}{r_a} - \frac{2e^2}{r_b} + \frac{2e^2}{R} \right) \psi = E \psi. \quad (6.1)$$

Как читатель помнит из Главы 4, модель (6.1) является предельным случаем, в котором два валентных электрона принимаются перманентно связанными вместе в стабильное квази-частичное состояние со свойствами (4.25), то есть,

$$\text{масса} \simeq 1 \text{ МэВ}, \quad \text{спин} = 0, \quad \text{заряд} = 2e, \quad \text{магнитный момент} \simeq 0,$$

$$\begin{aligned} \text{радиус} = r_c = b^{-1} &= 6.8432329 \times 10^{-11} \text{ см} = \\ &= 0.015424288 \text{ бор} = 0.006843 \text{ \AA}, \end{aligned} \quad (6.2)$$

которое мы называем *изоэлектрониумом*.

Предположение стационарности ядра (или, эквивалентно, ядро имеет бесконечную массу), превращает тогда молекулу водорода  $H_2$  в ограниченную систему трех тел, которая, раз так, допускает точное решение.

Читатель должен также помнить, что предполагаемая энергия покоя изоэлектрониума, принимаемая как удвоенная масса электрона, является только верхней границей и равна ей только когда внутренние силы имеют чисто непотенциальный тип. В действительности, возможна полная притягивающая сила чисто потенциального типа, так как магнитостатическое притяжение может быть больше, чем электростатическое отталкивание, как проиллюстрировано на Фиг. 4.4. Очевидно, что

последняя связь подразумевает отрицательную энергию связи сказывающуюся на значении массы изоэлектрониума

$$M_{\text{изоэлектрониум}} < 2m_{\text{электрон}}, \quad (6.3)$$

которая неизвестна и должна быть подобрана исходя из экспериментальных данных.

Как можно видеть, вышеуказанная ограниченная модель молекулы  $\text{H}_2$  схожа с обычной ограниченной моделью трех тел  $\text{H}_2^+$  иона. Во избежание путаницы, мы будем обозначать изохимическую модель трех тел "шляпкой",  $\hat{\text{H}}_2$ , и обычную модель (четырёх тел) без "шляпки",  $\text{H}_2$ .

Более конкретно, исследования [2a] были проведены при следующих условиях:

- 1) изоэлектрониум стабилен;
- 2) эффективным размером изоэлектрониума пренебрегается в сравнении с межъядерным расстоянием  $\text{H}_2$ ;
- 3) два ядра  $\text{H}_2$  считаются покоящимися;
- 4) энергия покоя изоэлектрониума принимается неизвестной и определяется подбором энергии связи молекулы;
- 5) межъядерное расстояние  $R$  для  $\text{H}_2$  также принимается неизвестным и подбирается исходя из условия стабильности решения и затем сравнивается с экспериментальным значением.

Главный результат работы [2a] заключается в том, что ограниченная модель трех тел  $\hat{\text{H}}_2$  Сантилли-Шиллади может быть подогнана к экспериментальному значению энергии связи при значении массы изоэлектрониума

$$M = 0.308381m_e, \quad (6.4)$$

хотя условие стабильности достигается для межъядерного расстояния

$$R = 1.675828 \text{ а.у.}, \quad (6.5)$$

которое примерно на 19.6% больше, чем обычное экспериментальное значение  $R[\text{H}_2] = 1.4011 \text{ а. е.} = 0.742 \text{ \AA}$ .

Эти результаты подтверждают, что изохимическая модель (6.1) действительно применима, но только в первом приближении, в соответствии с целью оригинального предложения [1a].

В приближении Борна-Оппенгеймера, то есть, при фиксированных ядрах, уравнение для системы типа иона  $\text{H}_2^+$  с частицей массы  $M$  и за-

рядом  $q$  дается как

$$\nabla^2 \psi + 2M \left( E + \frac{q}{r_a} + \frac{q}{r_b} \right) \psi = 0. \quad (6.6)$$

В сфероидальных координатах,

$$x = \frac{r_a + r_b}{R}, \quad 1 \leq x \leq \infty; \quad y = \frac{r_a - r_b}{R}, \quad -1 \leq y \leq 1; \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi, \quad (6.7)$$

где  $R$  – расстояние между двумя ядрами  $a$  и  $b$ , мы имеем

$$\begin{aligned} \nabla^2 = & \frac{4}{R^2(x^2 - y^2)} \left( \frac{\partial}{\partial x}(x^2 - 1) \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y}(1 - y^2) \frac{\partial}{\partial y} \right) + \\ & + \frac{1}{R^2(x^2 - 1)(1 - y^2)} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \end{aligned} \quad (6.8)$$

Тогда (6.1) принимает вид

$$\begin{aligned} \left[ \frac{\partial}{\partial x}(x^2 - 1) \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y}(1 - y^2) \frac{\partial}{\partial y} + \frac{x^2 - y^2}{4(x^2 - 1)(1 - y^2)} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \right. \\ \left. + \frac{MER^2}{2}(x^2 - y^2) + 2MqRx \right] \psi = 0, \end{aligned} \quad (6.9)$$

где

$$\frac{1}{r_a} + \frac{1}{r_b} = \frac{4}{R} \frac{x}{x^2 - y^2}. \quad (6.10)$$

Использование выражения

$$\psi = f(x)g(y)e^{im\varphi}, \quad (6.11)$$

позволяет тогда разделение переменных

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \left( (x^2 - 1) \frac{d}{dx} f \right) - \left( \lambda - 2MqRx - \frac{MER^2}{2} x^2 + \frac{m^2}{x^2 - 1} \right) f = 0, \\ \frac{d}{dy} \left( (1 - y^2) \frac{d}{dy} g \right) + \left( \lambda - \frac{MER^2}{2} y^2 - \frac{m^2}{1 - y^2} \right) g = 0, \end{aligned} \quad (6.12)$$

где  $\lambda$  – постоянная разделения. Точные решения для  $f(x)$  и  $g(y)$  даются тогда угловой и радиальной кулоновскими сфероидальными функциями (CSF) содержащими бесконечные рекуррентные соотношения.

Арынгазин и Кучеренко [2a] вычисляли энергетические уровни через использование рекуррентных соотношений типа

$$Q_{k+1} = Q_k \bar{\kappa}_{N-k} - Q_{k-1} \bar{\rho}_{N-k} \bar{\delta}_{N-k+1}, \quad Q_{-1} = 0, \quad Q_0 = 1, \quad (6.13)$$

где коэффициенты

$$\begin{aligned} \rho_s &= \frac{(s+2m+1)[b-2p(s+m+1)]}{2(s+m)+3}, \\ \kappa_s &= (s+m)(s+m+1) - \lambda, \\ \delta_s &= \frac{s[b+2p(s+m)]}{2(s+m)-1}. \end{aligned} \quad (6.14)$$

В работе [2a] использовалось значение  $N = 16$  для хорошего приближения и радиальной, и угловой компонент. Два полинома имеют 16 корней для  $\lambda$ , из которых только один имеет нужное асимптотическое поведение при  $R \rightarrow 0$ . Численное решение уравнения

$$\lambda^{(x)}(p, a) = \lambda^{(y)}(p, b), \quad (6.15)$$

дает ряд значений электронных основных энергетических состояний,

$$E(R) = E_{1s\sigma}(R), \quad (6.16)$$

которые соответствуют  $1s\sigma_g$  члену системы подобной иону  $H_2^+$ , как функции расстояния  $R$  между ядрами. Отметим, что термин "точное решение" относится к тому факту, что беря большие значения  $N$ , например  $N = 50$ , можно достигнуть любой желаемой точности (например, двенадцать десятичных знаков и т.д.).

Также, метод скейлинга, основанный на уравнении Шредингера был разработан, чтобы связать окончательные  $E(R)$  зависимости различных систем подобных иону  $H_2^+$  друг с другом.

Таблица 6.1 представляет результаты вычислений *минимальной полной энергии* и соответствующего *оптимального расстояния*, при варьированном значении массы изоэлектроннума как параметра

$$M = \eta m_e, \quad (6.17)$$

где  $M = \eta$ , в атомных единицах.

Таблица 6.1: Минимальная полная энергия  $E_{min}$  и оптимальное межъядерное расстояние  $R_{opt}$  ограниченной изохимической модели  $\hat{H}_2$  Сантилли-Шиллади как функции массы  $M$  изоэлектроннума<sup>a</sup>.

$M, \text{ а.у.}$	$E_{min}, \text{ а.у.}$	$R_{opt}, \text{ а.у.}$	$M, \text{ а.у.}$	$E_{min}, \text{ а.у.}$	$R_{opt}, \text{ а.у.}$
0.10	-0.380852	5.167928	0.32	-1.218726	1.614977
0.15	-0.571278	3.445291	0.33	-1.256811	1.566041
0.20	-0.761704	2.583964	0.34	-1.294896	1.519981
0.25	-0.952130	2.067171	0.35	-1.332982	1.476553
0.26	-0.990215	1.987664	0.40	-1.523408	1.291982
0.27	-1.028300	1.914050	0.45	-1.713834	1.148428
0.28	-1.066385	1.845688	0.50	-1.904260	1.033585
0.29	-1.104470	1.782044	0.75	-2.856390	0.689058
0.30	-1.142556	1.722645	1.00	-3.808520	0.516792
0.307	-1.169215	1.683367	1.25	-4.760650	0.413434
0.308	-1.173024	1.677899	1.50	-5.712780	0.344529
0.308381	-1.174475	1.675828	1.75	-6.664910	0.295310
0.309	-1.176832	1.672471	2.00	-7.617040	0.258396
0.31	-1.180641	1.667073			

<sup>a</sup> См. также Рис. 6.1 and 6.2.

Арынгазин и Кучеренко [2a] составили 27 таблиц, каждую с идентификацией минимума полной энергии, вместе с соответствующим оптимальным расстоянием  $R$ . Затем, они собрали все полученные энергетические минимумы и оптимальные расстояния в Таблицу 6.1.

После интерполяции/экстраполяции четвертого порядка, графическое воспроизведение Таблицы 6.1 (см. Фигуры 6.1 и 6.2) показывает, что минимальная полная энергия ведет себя как

$$E_{min}(M) \simeq -3.808M, \quad (6.18)$$

и оптимальное расстояние ведет себя как

$$R_{opt}(M) \simeq 0.517/M. \quad (6.19)$$

Можно видеть, что при  $M = 2m_e$  мы имеем

$$E_{min}(M) = -7.617041 \text{ а.е.}, \quad R_{opt}(M) = 0.258399 \text{ а.е.}, \quad (6.20)$$

Таблица 6.2: Основные данные и результаты по основному энергетическому состоянию  $E$  и межъядерному расстоянию  $R$ .

	$E, a.u.$	$R, a.u.$
$H_2^+$ ion, exact theory, $N=16$ [2a]	-0.6026346	1.9971579
$H_2^+$ ion, experiment [3]	-0.6017	2.00
3-body $\hat{H}_2, M=2m_e$ , exact theory [2a]	-7.617041	0.258399
3-body $\hat{H}_2, M=2m_e$ , var. theory [1a]	-7.61509174	0.2592
3-body $\hat{H}_2, M=0.381m_e$ , exact theory [2a]	-1.174475	1.675828
4-body $H_2, r_c=0.01125$ a.u., $V_g$ var. theory [1a]	-1.174474	1.4011
4-body $H_2, r_c=0.01154$ a.u., $V_e$ var. theory [2b]	-1.144	1.4011
4-body $H_2, r_c=0.08330$ a.u., $V_e$ var. theory [2b]	-1.173	1.3184
$H_2$ , experiment	-1.174474	1.4011

что воспроизводит значения, полученные в работе [1a],

$$E_{min} = -7.61509174 \text{ a.e.}, \quad R_{opt} = 0.2592 \text{ a.e.}, \quad (6.21)$$

с замечательной точностью.

Вывод, сделанный Арынгазиным и Кучеренко сводится к тому, что ограниченная изохимическая модель трех тел молекулы водорода Сантили-Шиллади действительно применима, как и предполагалось, как первое приближение. Основные данные и результаты по  $E_{min}$  и  $R_{opt}$  собраны в Таблице 6.2.

Важным заключением работы [2a] является, следовательно, то, что *два валентных электрона молекулы водорода не могут быть перманентно связаны внутри адронного горизонта с радиусом один Ферми.*

Совершенно понятно, как подчеркнуто в Главе 4, что изоэлектронием должен продолжать существовать вне адронного горизонта, иначе, если этого не будет, мы имели бы нарушение принципа запрета Паули.

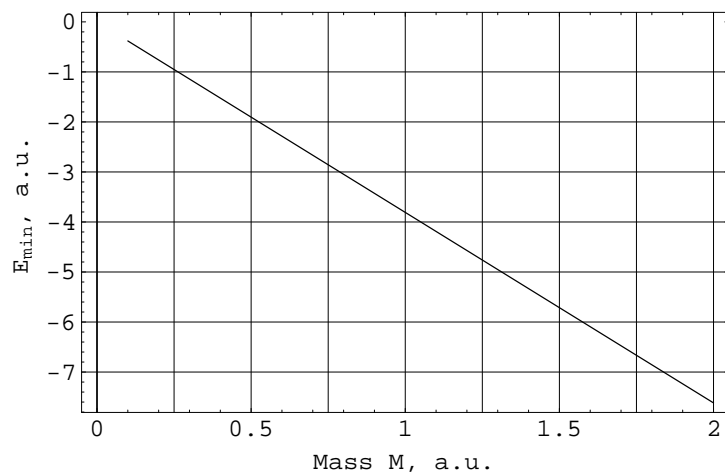


Рис. 6.1: Минимальная полная энергия  $E_{min}(M)$  системы  $\hat{H}_2$  как функция массы изоэлектроннума  $M$ .

### 6.3 Вариационное исследование Арынгазиным изохимической модели четырех тел молекулы водорода

В последующей работе [2b] Арынгазин применил вариационный метод Ритца к изохимической модели четырех тел молекулы водорода Сантилли-Шиллади (4.33), то есть,

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 - V_0 \frac{e^{-r_{12}/r_c}}{1 - e^{-r_{12}/r_c}} + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{1a}} - \frac{e^2}{r_{2a}} - \frac{e^2}{r_{1b}} - \frac{e^2}{r_{2b}} + \frac{e^2}{R} \right) |\psi\rangle = E |\psi\rangle, \quad (6.22)$$

без ограничения, что изоэлектроннум имеет постоянный размер около одного Ферми.

В частности, целью Арынгазина было определить основное энергетическое состояние и длину связи молекулы  $H_2$  в приближении Борна-Оппенгеймера через гауссовское экранирование кулоновского потенциа-

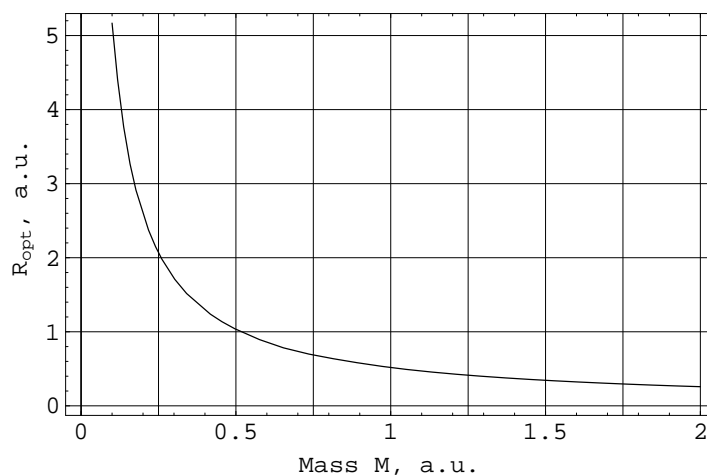


Рис. 6.2: Оптимальное межъядерное расстояние  $R_{opt}(M)$  системы  $\hat{H}_2$  как функция массы изоэлектроннума  $M$ .

ла,  $V_g$ , экспоненциальное экранирование кулоновского потенциала,

$$V_e = -\frac{Ae^{-r_{12}/r_c}}{r_{12}}, \quad (6.23)$$

а также оригинальный халтеновский потенциал  $V_h$  модели (6.22). Окончательный анализ является довольно сложным и не может быть рассмотрен здесь во всех необходимых деталях. Читателям, всерьез заинтересованным этой проверкой новой изохимической модели молекулы водорода, предлагается обратиться к оригинальной работе Арынгазина [2b].

Кулоновский и обменный интегралы были вычислены только для  $V_e$ , в то время как для  $V_g$  и  $V_h$  Арынгазин получил аналитические результаты только для кулоновских интегралов, из-за отсутствия для последних потенциалов разложений типа Гегенбауера (Gegenbauer).

Закключение сводится к тому, что вариационная трактовка Ритца, модели (6.22) с потенциалом (6.23), может обеспечить точное воспроизведение экспериментальных данных молекулы водорода, в подтверждение результатов полученных Сантили и Шиллади [1a] через вариационный подход SASLOBE к модели гауссовского  $V_g$ -типа. Основные данные и результаты по основному энергетическому состоянию  $E_{min}$  и межъядерному



расстоянию  $R_{opt}$  собраны в Таблице 6.2.

Заметим, что в вариационном подходе [2b] Арынгазин использовал *дискретную* вариацию адронного горизонта  $r_c$  и приближенный обменный интеграл, что привело к приблизительному подбору энергии и расстояния, как показано в Таблице 6.2.

В добавок, в работе [2b] вычислен вес фазы изоэлектрониума, который оказывается порядка от 1% до 6% для случая  $V_e$  модели. Однако, следует отметить, что этот результат не соответствует оригинальной модели Сантилли-Шиллади, которая базируется на халтеновском потенциале  $V_h$ .

Интересным результатом является то, что для избежания расходимости кулоновского интеграла для  $V_h$  *корреляционный параметр* длины  $r_c$  должен пробегать дискретные значения, согласно уравнению (6.27). Это условие было использовано в  $V_e$ -модели, хотя это и не необходимо в схеме этой модели.

Как упомянуто ранее, Арынгазин [*loc. cit.*] предположил, что изоэлектрониум испытывает возрастание длины вне адронного горизонта, и в результате, два электрона оказываются на достаточно большом расстоянии. Это приводит нас к проблеме вычисления *эффективного времени жизни* изоэлектрониума.

Для оценки порядка величины этого времени жизни, использовалась обычная формула для радиоактивного  $\alpha$ -распада, так как полный потенциал  $V(r)$  имеет ту же форму, что и рассматриваемый здесь, с очень сильным понижением при  $r < r_{max}$  и кулоновским отталкиванием при  $r > r_{max}$ , где  $r_{max}$  соответствует максимуму потенциала.

Эта квазиклассическая модель является грубым приближением, так как в действительности, электроны не покидают молекулы. Более того, два асимптотических режима действуют одновременно, с некоторым распределением и вероятностью, и более правильным было бы обратиться к частоте процессов распада (то есть, туннелирование сквозь адронный горизонт), а не к времени жизни изоэлектрониума.

Однако, согласно предположению малых размеров изоэлектрониума по сравнению с размерами молекулы, мы можем изучать элементарный процесс распада отдельно, и использовать понятие времени жизни. Результаты расчетов Арынгазина представлены в Таблице 6.3.

В вариационном подходе Ритца, главной проблемой является аналитическое вычисление так называемых *молекулярных интегралов*. Вариационная молекулярная энергия, в которой мы заинтересованы, выра-

Таблица 6.3: Результаты вычислений Арынгазина [2b] времени жизни изоэлектроннума, где  $E$  относительная кинетическая энергия электронов, на большом расстоянии,  $r \gg r_{max}$ , в системе отсчета центра масс.

<i>Energy E, a.u.</i>	<i>eV</i>	<i>Lifetime, D<sub>0</sub>·sec</i>
2	54.4	$2.6 \cdot 10^{-18}$
1	27.2	$1.6 \cdot 10^{-17}$
0.5	13.6	$2.2 \cdot 10^{-16}$
0.037	1	$5.1 \cdot 10^{-6}$
0.018	0.5	4.0
0.0018	0.1	$3.1 \cdot 10^{+25}$

жается в терминах этих интегралов. Эти интегралы возникают при использовании некоторых волновых функций, обычно водородоподобных волновых функций основного состояния, как бесконечное разложение асимптотического решения, в уравнении Шредингера для двухатомных молекул. Главная идея подхода Ритца заключается в введении параметров в волновую функцию и вариации их совместно с параметром разделения  $R$  для достижения минимума полной молекулярной энергии, которая трактуется как результирующая энергия основного состояния.

В изучаемом случае, Арынгазин [*loc. cit.*] использует два параметра,  $\gamma$  и  $\rho$ , где  $\gamma$  входит в водородоподобную волновую функцию основного состояния

$$\psi(r) = \sqrt{\frac{\gamma^3}{\pi}} e^{-\gamma r}, \quad (6.24)$$

и  $\rho = \gamma R$  является мерой межъядерного расстояния. Эти параметры должны варьироваться, *аналитически или численно*, в окончательном выражении молекулярной энергии после вычислений связанных с ним молекулярных интегралов.

Однако, модель четырех тел Н<sub>2</sub> Сантили-Шиллади предполагает дополнительный халтеновский потенциал взаимодействия между электронами, который содержит два параметра  $V_0$  и  $r_c$ , где  $V_0$  – общий множитель и  $r_c$  – корреляционный параметр длины, характеризующий адронный горизонт. Поэтому, должны варьироваться четыре параметра:  $\gamma$ ,  $\rho$ ,  $V_0$  и  $r_c$ .

Введение халтеновского потенциала приводит к модификации некоторых молекулярных интегралов, а именно, кулоновского и обменного

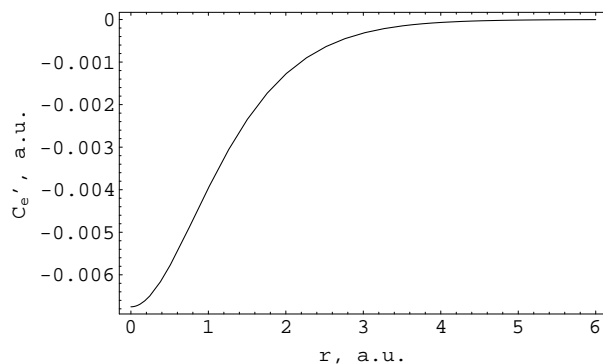


Рис. 6.3: Кулоновский интеграл  $C_e'$  как функция  $\rho$ , при  $\lambda = 1/37$ , где  $\rho = \gamma R$ ,  $R$  – межъядерное расстояние,  $\lambda = 2\gamma r_c$  и  $r_c$  – адронный горизонт.

интеграла. Остальные молекулярные интегралы остаются теми же как и в случае обычной модели  $\text{H}_2$ , с хорошо известными аналитическими результатами. Обычно, кулоновский интеграл, который может быть вычислен в бисферических координатах, решается много легче чем обменный интеграл, который вычисляется в бисферических координатах.

Вычисления кулоновского интеграла для халтеновского потенциала  $V_h$  оказываются довольно нетривиальными [2b]. А именно, в используемых бисферических координатах, в процессе вычисления, появляются несколько специальных функций, таких как полилогарифмическая функция, риманова дзета-функция, дигамма функция и функция Лерча (Lerch).

Для того чтобы продолжить подход Сантили-Шилади, Арынгазин [2b] обратился к двум разным *упрощенным* потенциалам: экспоненциально экранированному кулоновскому потенциалу  $V_e$  и гауссовски экранированному кулоновскому потенциалу  $V_g$ , вместо халтеновского потенциала  $V_h$ . Первые два потенциала хорошо аппроксимируют халтеновский потенциал в близкой и дальней асимптотических областях, и каждый содержит по два параметра, обозначенных как  $A$  и  $r_c$ .

Чтобы воспроизводить асимптотики халтеновского потенциала на коротких расстояниях, параметр  $A$  должен иметь значение  $A = V_0 r_c$  для обоих потенциалов. Кулоновские интегралы для этих двух потенциалов были вычислены *точно*, благодаря тому факту, что они намного проще

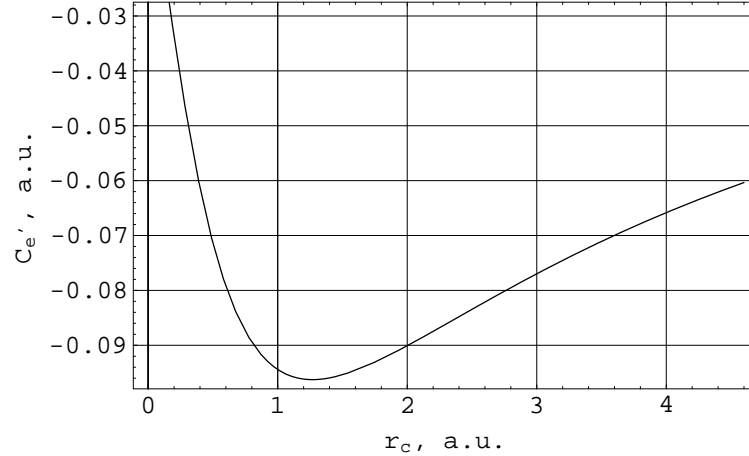


Рис. 6.4: Кулоновский интеграл  $C'_e$  как функция  $r_c$ , при  $\rho = 1.67$ . Для  $r_c > 0.2$  а.у. здесь представлены регуляризованные значения.

халтеновского потенциала.

В частности, мы отметим, что окончательное точное выражение кулоновского интеграла для  $V_g$  содержит только одну специальную функцию, – функцию ошибок  $\text{erf}(z)$ , в то время как для  $V_e$  интеграл вообще не содержит специальных функций. Этим путем, Арынгазин [2b] получил точное выражение

$$C'_e = -\frac{A\lambda^2}{8(1-\lambda^2)^4} \frac{\gamma e^{-2\rho}}{\rho} \left[ -(\rho + 2\rho^2 + \frac{4}{3}\rho^3) + 3\lambda^2(5\rho + 10\rho^2 + 4\rho^3) - \right. \\ \left. -\lambda^4(15\rho + 14\rho^2 + 4\rho^3) + \lambda^6(8 + 11\rho + 6\rho^2 + \frac{4}{3}\rho^3 - 8e^{2\rho - \frac{2\rho}{\lambda}}) \right], \quad (6.25)$$

где  $\lambda = 2\gamma r_c$ . Этот кулоновский интеграл изображен на Рис. 6.3 и 6.4.

Наиболее трудной частью вычислений [2b] является обменный интеграл. Обычно, для его вычисления следует использовать бисферические координаты и необходимо разложение потенциала в некоторых ортогональных полиномах, таких как полиномы Лежандра в бисферических координатах. В работе [2b], только экспоненциально экранированный потенциал  $V_e$ , как известно, имеет такое разложение, но формулировка сделана, однако, в терминах бисферических координат (так называемое разложение Гегенбауера). Соответственно, обменный интеграл  $E'_e$  для  $V_e$  при

нулевом межъядерном расстоянии,  $R = 0$  (в этом случае можно использовать бисферические координаты), был вычислен точно. После этого,  $R$ -зависимость, с использованием стандартного результата для обменного интеграла для кулоновского потенциала  $E'_C$  (известный результат Сугиуры (Sugiura)), была частично восстановлена,

$$E'_e \simeq \frac{A\lambda^2}{(1+\lambda)^4} \left( \frac{1}{8} + \frac{1}{2}\lambda + \frac{5}{8}\lambda^2 \right) \frac{8}{5} E'_C, \quad (6.26)$$

где  $\lambda = 2\gamma r_c$  (см. Фиг. 6.5). Поэтому, было получено только некоторое приближительное выражение для обменного интеграла для случая  $V_e$ . Таким образом, все последующие результаты применяются к приближительной модели, основанной на  $V_e$ .

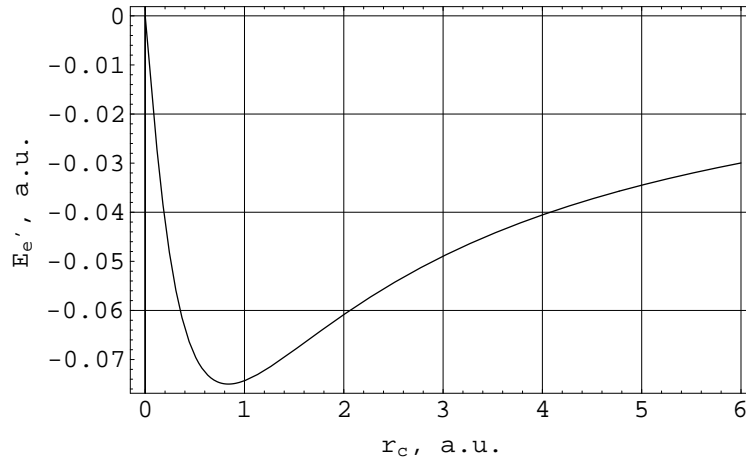


Рис. 6.5: Обменный интеграл  $E'_e$  как функция  $r_c$ , при  $\rho = 1.67$ .

Вставляя полученные таким образом, основанные на  $V_e$ , кулоновский и обменный интегралы в выражение для полной молекулярной энергии, получаем окончательное аналитическое выражение содержащее четыре параметра  $\gamma$ ,  $\rho$ ,  $A$  и  $r_c$ . При отдельном рассмотрении случая халтеновского потенциала, существование связанного состояния двух электронов (которое присуще изоэлектрониуму) приводит к следующему соотношению между параметрами для случая энергетического уровня системы электрон-электрон:  $V_0 = \hbar^2/(2mr_c^2)$ . Поэтому, используя соотношение  $A = V_0 r_c$ , получаем  $A = 1/r_c \equiv 2\gamma/\lambda$ , в атомных единицах ( $\hbar = m_e = c = 1$ ).

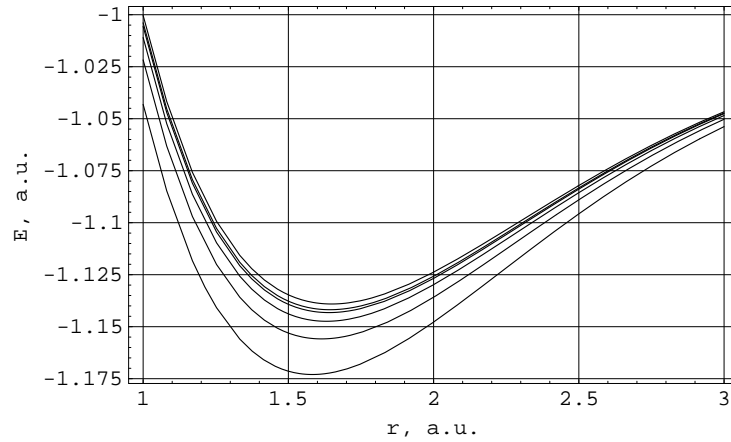


Рис. 6.6: Полная энергия  $E = E_{mol}$  как функция  $\rho$ , при  $\lambda = 1/60, 1/40, 1/20, 1/10, 1/5$ . Нижнее изображение соответствует  $\lambda = 1/5$ .

Заметим, что Арынгазин [2b] ввел *одноуровневый изоэлектроний*, характеризующийся тем фактом, что условие

$$\lambda^{-1} = \text{целые числа} > 0, \quad (6.27)$$

следует из анализа кулоновского интеграла для халтеновского потенциала.

При вышеприведенном условии может быть сделана минимизация молекулярной энергии в модели, основанной на  $V_e$ . Численный анализ показывает, что  $\lambda$ -зависимость не обнаруживает какого-либо минимума в интересующем нас интервале,

$$4 \leq \lambda^{-1} \leq 60, \quad (6.28)$$

в то же время имеется минимум энергии для некоторых значений  $\gamma$  и  $\rho$  при фиксированном  $\lambda$ .

Исходя из этого, было вычислено 56 таблиц, для обнаружения минимума энергии и оптимальных расстояний для различных значений  $\lambda$  в интервале (6.28).

Полученные результаты собраны в Табл. 6.4, 6.5, и Рис. 6.6. Можно видеть, что энергия связи понижается с увеличением параметра  $r_c$ , который соответствует эффективному радиусу изоэлектрония.

В заключение, расчеты проведенные Арынгазиным [2b], рассмотренные в этой Главе, не определяют времени жизни изоэлектрониума, принимаемого как квазичастица с зарядовым радиусом  $r_c$  около 1 фм. Как можно видеть из Таблицы 6.3, предсказываемое время жизни варьируется в достаточно большой области значений.

Получение точного времени жизни изоэлектрониума, с зарядовым радиусом 1 фм, может быть сделано только после получения точного значения его энергии покоя. Как читатель помнит из Главы 4, значение 1 МэВ должно рассматриваться только как верхняя граница энергии покоя изоэлектрониума, так как было принято из расчета отсутствия внутренних потенциальных сил, в то время как последние не могут быть исключены. Следовательно, действительное значение энергии покоя изоэлектрониума, на сегодняшний день, остается в общем то неизвестным.

Читатель должен также помнить, что термины "время жизни изоэлектрониума при зарядовом радиусе около 1 фм" относятся к промежутку времени проведенному двумя валентными электронами на взаимном расстоянии 1 фм, который ожидается довольно малым. Такое понимание объясняется в Главе 3 тем, что когда ограниченный зарядовый радиус 1 фм изменяется, и орбитальные взаимные расстояния допускаются, изоэлектрониум должен иметь бесконечное время жизни (для стабильности молекулы), так как любое ограниченное время жизни, при указанных условиях, будет подразумевать допущение двух электронов с одинаковыми характеристиками на одной орбите и, следовательно, нарушение принципа запрета Паули.

Интересным результатом вариационного подхода Ритца к халтеновскому потенциалу, изученному Арынгазиным [2b], является то, что зарядовый радиус изоэлектрониума  $r_c$ , входящий в халтеновский потенциал и вариационную энергию, в процессе вариации, должен пробегать дискретный ряд значений.

Другими словами, это означает, что только некоторые фиксированные значения эффективного радиуса одноуровневого изоэлектрониума допускаются моделью Сантилли-Шиллади, когда она трактуется через подход Ритца.

Этот результат был полностью неожиданным и может означать вид "адронной тонкой структуры" изоэлектрониума, чье происхождение и смысл пока неизвестны. Следует отметить, что такая "адронная тонкая структура" изоэлектрониума относится только к случаю, когда  $r_c$  ограничено 1 фм или менее. Вопрос о том, сохраняется ли такая "адронная

тонкая структура" для значений  $r_c$  вплоть до орбитальных расстояний, также пока остается открытым. Следует также отметить, что это замечательное свойство специфично для халтеновского потенциала  $V_h$ , в то время как оно *отсутствует* для  $V_e$  и  $V_g$  моделей.

Кроме того, Арынгазин [2b] получил оценку *веса фазы изоэлектронума* для случая  $V_e$  модели, которая оказалась имеющей порядок от 1% до 6%. Этот вес был оценен из вклада энергии связанного с экспоненциально экранированным потенциалом  $V_e$ , по сравнению с вкладом связанным с обычным кулоновским межэлектронным потенциалом отталкивания.

В заключение, важным результатом вариационной модели четырех тел Ритца, исследованной Арынгазиным [2b], является возможность подбора под экспериментальные данные и энергии связи  $E$ , и длины связи  $R$  молекулы водорода, чем обеспечивается прекрасное независимое подтверждение результатов полученных Сантилли и Шиллади [1].



Таблица 6.4: Полная минимальная энергия  $E_{min}$  и оптимальное межъядерное расстояние  $R_{opt}$  как функции корреляционной длины  $r_c$  для экспоненциально экранированного кулоновского потенциала  $V_e$ .

$\lambda^{-1}$	$r_c, a. e.$	$R_{opt}, a. e.$	$E_{min}, a. e.$
4	0.10337035071618050	1.297162129235449	-1.181516949656805
5	0.08329699109108888	1.318393698326879	-1.172984902150024
6	0.06975270534273319	1.333205576478603	-1.167271240301846
7	0.05999677404817234	1.344092354783681	-1.163188554065554
8	0.05263465942162049	1.352417789644028	-1.160130284706318
9	0.04688158804756491	1.358984317233049	-1.157755960428922
10	0.04226204990365446	1.364292909163710	-1.155860292450436
11	0.03847110142927672	1.368671725082009	-1.154312372623724
12	0.03530417706681329	1.372344384866235	-1.153024886026671
13	0.03261892720535206	1.375468373051375	-1.151937408039373
14	0.03031323689615631	1.378157728092548	-1.151006817317425
15	0.02831194904031777	1.380497017045902	-1.150201529091051
16	0.02655851947236431	1.382550255552670	-1.149497886394651
17	0.02500959113834722	1.384366780045693	-1.148877823925501
18	0.02363136168905809	1.385985219224291	-1.148327310762828
19	0.02239708901865092	1.387436244558651	-1.147835285349041
20	0.02128533948435381	1.388744515712491	-1.147392910500336
21	0.02027873303335994	1.389930082626193	-1.146993041730378
22	0.01936302821907175	1.391009413196452	-1.146629840949675
23	0.01852644434336641	1.391996158084790	-1.146298491232105
24	0.01775915199935013	1.392901727808297	-1.145994983116511
25	0.01705288514774330	1.393735733699196	-1.145715952370148
26	0.01640064219648127	1.394506328745493	-1.145458555325045
27	0.01579645313764336	1.395220473843219	-1.145220372020229
28	0.01523519631632570	1.395884147817973	-1.144999330178493
29	0.01471245291356761	1.396502514589167	-1.144793644973560
30	0.01422439038752817	1.397080057337240	-1.144601770891686

Таблица 6.5: Продолжение Таблицы 6.4.

$\lambda^{-1}$	$r_c, a. u.$	$R_{opt}, a. e.$	$E_{min}, a. e.$
31	0.01376766836566138	1.397620687025853	-1.144422362947838
32	0.01333936209977966	1.398127830817745	-1.144254245203342
33	0.01293689977547854	1.398604504597664	-1.144096385030938
34	0.01255801083612469	1.399053372836414	-1.143947871939897
35	0.01220068312791624	1.399476798299823	-1.143807900045981
36	0.01186312715793131	1.399876883556063	-1.143675753475045
37	0.01154374612489787	1.400255505817128	-1.143550794143290
39	0.01095393745919852	1.400954915288619	-1.143320213707519
40	0.01068107105944273	1.401278573036792	-1.143213620508321
41	0.01042146833640030	1.401586548200467	-1.143112256673494
42	0.01017418516195214	1.401879953246168	-1.143015746732479
43	0.00993836493541500	1.402159797887369	-1.142923750307661
44	0.00971322867044429	1.402427000676349	-1.142835958109381
45	0.00949806639934841	1.402682399061957	-1.142752088467028
46	0.00929222969498477	1.402926758144872	-1.142671884314343
47	0.00909512514431396	1.403160778323019	-1.142595110561057
48	0.00890620863525624	1.403385101987775	-1.142521551794315
49	0.00872498034101540	1.403600319405678	-1.142451010262626
50	0.00855098030451296	1.403806973898863	-1.142383304102633
51	0.00838378454080327	1.404005566419838	-1.142318265775268
52	0.00822300158793934	1.404196559601683	-1.142255740683024
53	0.00806826944722482	1.404380381352424	-1.142195585944305
54	0.00791925286251402	1.404557428052374	-1.142137669304475
55	0.00777564089552400	1.404728067404676	-1.142081868166104
56	0.00763714476025456	1.404892640982100	-1.142028068723488
57	0.00750349588477794	1.405051466507240	-1.141976165188595
58	0.00737444417302681	1.405204839898059	-1.141926059097351
59	0.00724975644291090	1.405353037106507	-1.141877658686723
60	0.00712921502024112	1.405496315774223	-1.141830878334298



# Литература

- [1] Santilli, R.M. and Shillady, D.D.: Intern. J. Hydrogen Energy **24**, 943 (1999) [1a]; Intern. J. Hadronic Energy **25**, 173 (2000) [1b].
- [2] Aringazin, A.K. and Kucherenko, M.G.: Hadronic J. **23**, 1 (2000). e-print physics/0001056 [2a]. Aringazin, A.K.: Hadronic J. **23**, 57 (2000). e-print physics/0001057 [2b].
- [3] Flugge, Z.: *Practical Quantum Mechanics*, Vols. **1**, **2**, Springer-Verlag, Berlin (1971).



## Глава 7

# Применение адронной ХИМИИ К НОВЫМ ЧИСТЫМ ЭНЕРГИЯМ И ТОПЛИВАМ

### 7.1 Введение

Без сомнения самой серьезной проблемой современного общества является внушающее тревогу разрушение нашей окружающей среды из-за диспропорционального сжигания около 74 миллионов баррелей природных топлив каждый день (см. Раздел 7.2).

Первичной целью, ради которой была построена адронная химия, является теоретическое предсказание и промышленная разработка принципиально новых, приемлемых для окружающей среды, энергий и топлив.

Эта глава рассказывает об исследованиях начатых Сантили в 1998 году в *Toups Technologies Licensing, Inc.*, корпорации США в Ларго, Флорида, под президентством Леона Тоупса (Leon Toups). Исследования были затем продолжены в *USMagneGas, Inc.*, подразделении *EarthFirst Technologies, Inc.*, компании под президентством Джона Стэнтона (John Stanton).

Заметим, что просто не существует естественных ресурсов, которые могли бы обеспечить приемлемое для окружающей среды замещение природных топлив. Как следствие, новые чистые топлива должны быть синтезированы.

Чтобы быть приемлемыми, новые топлива должны отвечать следую-

щим основным требованиям:

1) Не создавать проблем с загрязнением окружающей среды, создаваемых сжиганием природных топлив;

2) Быть приемлемыми для использования в двигателях внутреннего сгорания; и

3) Быть конкурентоспособными по стоимости с доступными на сегодняшний день природными топливами.

Как скоро будет очевидно, квантовая химия не способна удовлетворить всем этим довольно трудным требованиям, поэтому становится необходимым изучение структурно новой химии.

Следует заметить из этих вводных строк, что здесь и в дальнейшем мы будем излагать *корпоративные*, а не академические исследования, согласно отмеченным целям. Это вызвано тем, что результаты имеют непосредственную *промышленную* значимость. Следовательно, будет лучше всего отметить различия между академическими, корпоративными и оборонными исследованиями, и затем приступить к изучению новых энергий и топлив как это необходимо исходя из промышленной ориентации.

Как это хорошо известно, оборонная промышленность США в 1970-х годах была существенно приторможена, и все финансирования передовых исследований в США были академическими. Первой причиной для этого решения была неспособность секретных служб Соединенных Штатов Америки отдавать должное внимание академическим теориям.

Сегодня в общем допускается, что физические и химические исследования, проводящиеся в оборонных исследовательских центрах, таких как *Scandia Laboratories*, драматически более продвинуты чем исследования проводящиеся в академических институтах. Это несоответствие обусловлено печально известным *ограничением* академических исследований, равняющихся на привилегированные теории, такие как специальная теория относительности Эйнштейна, релятивистская квантовая механика и квантовая химия, в противоположность общему *отсутствию* таких ограничений в оборонных исследованиях, с последующими продвижениями, которые в другом случае были бы невозможны.

Менее известно, что схожее расхождение в передовых исследованиях в промышленности США и академическими исследованиями имеет место в настоящее время по существу по тем же причинам.

Во первых, фундаментальные новшества являются известным врагом в академических институтах, в то время как такие новшества явля-

ются необходимой предпосылкой для заинтересованности промышленности, как это и должно быть. Следовательно, академические исследования имеют своей целью все более и более утонченные исследования в хорошо установленных доктринах, с последующей все меньшей и меньшей связью с промышленностью, в то время как промышленные исследования имеют своей целью принципиально новые исследования, как необходимое условие удовлетворения новых общественных нужд и создания новых рынков.

Как следствие этого сценария, растет разрыв между промышленностью США и академическими институтами в самой концепции передовых исследований, которая оказывается такой же непреодолимой как и разрыв между оборонными и академическими исследованиями.

Кроме того, промышленность имеет тенденцию все более и более избегать распространения своих результатов в академических кругах, как вполне понятно, во избежание довольно предсказуемых убытков, что приводит к секретности, напоминающей таковую в оборонных исследованиях.

Если обратиться к специфическим техническим следствиям, то расхождение в подходах, методах и значениях, между промышленными и академическими исследованиями становится более видимым.

Как иллюстрация, будет очевидно в этой и оставшейся главах, что кластеры играют довольно фундаментальную роль в синтезе и промышленном производстве новых топлив отвечающих отмеченным требованиям. Действительно, академические и промышленные исследования кластеров значительно возросли в последние десятилетия (см. работы [1] и цитируемую там литературу).

Однако, ожидания от этих исследований вскоре показали драматические различия в концепциях и реализациях исследований. Академические исследования, в общем, проводятся без каких-либо количественных определений истинно фундаментальных понятий, *сила притяжения* допускается самим существованием кластеров. Как результат, эти исследования не имеют ясного промышленного применения, очевидно потому, что отсутствие точной идентификации связывающей силы препятствует промышленному воспроизводству и оптимизации упомянутых кластеров. По этой причине, промышленные исследования были в первую очередь сосредоточены на идентификации силы притяжения, создающей кластеры, и затем на описании их свойств.

Сначала, вышеуказанная разница во взглядах не была важной. Рас-



хождение сказалось во всей полноте, когда началась техническая идентификация упомянутой связывающей силы, которая обычно трактуется в академических кругах путем совместимым с существующими доктринами, что приводит к терминологиям не входящим в действующую модель, таким как предположение "ковалентных связей" (когда связь, как известно, не валентного типа), или "ионные связи" (когда, как известно, ионы *отталкиваются*, а не притягиваются друг к другу, потому что они имеют электрические заряды одного знака) и другие абстрактные предположения совместимые с уже существующими направлениями исследований.

Как мы увидим в этой и следующей главах, количественная, численная и правдоподобная идентификация силы *притяжения* ответственной за существование кластеров непосредственно применимых для новых чистых топлив, требует допущения существования *принципиально новых химических соединений*. Это как раз тот момент, когда расхождение между корпоративными и академическими исследованиями становится видимым, опять таки, потому что академические институты, в общем, *отвергают* истинно новое, хотя, конечно, не без исключений.

Драматически большие расходимости существуют между промышленными и академическими исследованиями в области химии, где они могли бы ожидаться наименьшими: экспериментальные измерения с помощью газовой масс-спектральной хроматографии (GC-MS). Действительно, это оборудование обычно используется в академических исследованиях без связанного с ним инфракрасного детектора (IRD), в то время как только измерения с помощью GC-MS снабженного IRD обычно используются в промышленности.

Причина этого несоответствия заключается в общем неприятии академическими институтами возможности существования новых химических соединений, поэтому подразумевается, что все пики, детектируемые GC-MS, должны принадлежать той или иной молекуле.

Напротив, промышленность имеет в виду тот факт, что только в редких случаях полной сферической симметрии (такой как в случае водорода), молекулы должны давать ИК сигнал, как *необходимое* условие своего существования. Следовательно, для промышленности, истинная экспериментальная идентификация молекулы, вне уровня персональных мнений, в общем то, требует *и* ее идентификацию как пик в масс-спектрометре, *и* независимое подтверждение ИК сигналом того же самого рассматриваемого пика (а не других).

Как мы увидим, принципиально новые, приемлемые для окружающей среды энергии и топлива решающим образом зависят от существования новых химических соединений составляющих тяжелые кластеры, детектируемые через большие MS пики, с высоким атомным весом, которые не могут быть идентифицированы MS сканированием и не имеют ИК сигнала. Так как невозможно чтобы большие кластеры были все идеально симметричны, совместное использование IRD предотвращает персональные мнения относительно традиционных интерпретаций, поэтому позволяется действительно научное измерение.

Ввиду вышеозначенного аспекта, эти последние Главы посвящены продолжающимся промышленным усилиям по решению острых социальных проблем, связанных с необходимостью создания новых, приемлемых для окружающей среды, энергий и топлив, без какого-либо рассмотрения предпочтительных на сегодняшний день направлений академических исследований.

## 7.2 Внушающие тревогу проблемы окружающей среды, обусловленные сжиганием бензина и угля

Как это хорошо известно, горение бензина требует атмосферного кислорода, который затем превращается в CO<sub>2</sub> и различные углеводороды (HC). В свою очередь, CO<sub>2</sub> перерабатывается растениями через хорошо известную реакцию



которая восстанавливает кислород в атмосфере. Это был существенный сценарий для окружающей среды в начале 20-го века.

Тот же сценарий в начале 21-го века драматически другой, так как леса быстро исчезают в то время как мы достигли следующего не успокаивающего ежедневного потребления сырой нефти, согласно официальным публикациям Департамента Энергетики США (см. Дополнение 7.A для перевода единиц),

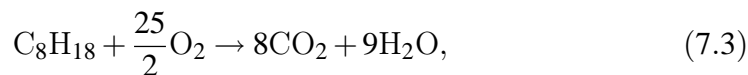
$$\begin{aligned} 74.18 \times 10^6 \text{ баррелей в день} &= 4.08 \times 10^9 \text{ галлонов в день} = \\ &= 9.4984 \times 10^{10} \text{ молей n-октана в день,} \end{aligned} \quad (7.2)$$

(см., например, [2]), где мы заменили, для простоты, неочищенную нефть правильной цепочкой *n*-октанов  $\text{CH}_3-(\text{CH}_2)_6-\text{CH}_3$  обладающей известной плотностью  $0.7028 \text{ г/см}^3$  при  $20^\circ \text{ С}$ .

Следует отметить, что данные (7.2) *не* включают в себя дополнительное огромное потребление угля и природного газа, которое поднимает ежедневное потребление природного топлива до отметки эквивалентной сжиганию около *сто двадцати миллионов баррелей сырой нефти в день*. Первопричины проблем связанных с окружающей средой, вызванных несоразмерным потреблением природных топлив в день, являются следующими:

1) *Чрезмерное выделение в атмосферу канцерогенных и других токсичных веществ*. Экспертам хорошо известно, что при горении бензина, в атмосферу выделяется, в процентном соотношении, наибольшее количество канцерогенных и других токсичных веществ по сравнению с другими топливами. Термин "атмосферное загрязнение" является эвфемизмом для весьма канцерогенных выбросов. В качестве известной, хотя и замалчиваемой иллюстрации, можно привести тревожное возрастание случаев рака легких и других типов раков, которое напрямую связывается медицинскими исследованиями с выбросами канцерогенных веществ при сгорании природного топлива.

2) *Чрезмерный выброс в атмосферу углекислого газа*. Очевидно, что при огромном ежедневном сжигании (7.2), растения не в состоянии целиком переработать все произведенное количество  $\text{CO}_2$ , что приводит к тревожному возрастанию  $\text{CO}_2$  в нашей атмосфере, известное как *парниковый эффект*. Действительно, используя известную реакцию



мы получаем следующее *внушающее тревогу ежедневное выделение  $\text{CO}_2$  из-за сгорания природного топлива*:

$$7.5987 \times 10^{11} \text{ моль } \text{CO}_2 \text{ в день} = 3.3434 \times 10^7 \text{ тонн в день}. \quad (7.4)$$

Очевидно, что растения не способны переработать такое несоразмерное количество ежедневного выделения  $\text{CO}_2$ . Это подразумевает значительное возрастание  $\text{CO}_2$  в нашей атмосфере, которое может быть измерено любым желающим, серьезно интересующимся состоянием окружающей среды, с помощью приобретения простого дозиметра  $\text{CO}_2$ , при-

меняемого сейчас на многих производствах, за невысокую цену, и последующим сравнением современных данных по  $\text{CO}_2$  со стандартными значениями прошлого, например,

$$\begin{aligned} &\text{Процентное содержание } \text{CO}_2 \text{ в нашей атмосфере} \\ &\text{на уровне моря в 1950 г.: } 0.033 \pm 0.01\% \end{aligned} \quad (7.5)$$

(см., например, *Британскую Энциклопедию* того периода).

Между прочим, в лаборатории *USMagneGas, Inc.*, во Флориде, мы зарегистрировали *тридцатикратное* повышение концентрации  $\text{CO}_2$  в нашей атмосфере по сравнению с указанными стандартами. Мы предполагаем, что возможно читатель уже знаком с недавними сообщениями о появлении *небольших озер на Северном полюсе*, вызванных потеплением климата и никогда не зарегистрированных ранее. Возрастающее количество климатических катастроф известно каждому.

3) *Чрезмерное изъятие из нашей атмосферы непосредственно используемого кислорода*, – проблема окружающей среды связанная с сжиганием природного топлива, называемая здесь, по видимому впервые, *кислородным истощением*, которая менее известна чем парниковый эффект, даже для специалистов по окружающей среде, но потенциально более катастрофичная. Проблема связана с разницей между потребностями в кислороде для горения природных топлив и меньшим его количеством, восстанавливаемым растениями, а также некоторым количеством, выбрасываем через выхлопную трубу.

С использованием реакции (7.3) и данных (7.4), легко получить оценку следующего, дополнительного, внушающего тревогу, *ежедневного изъятия кислорода из нашей атмосферы при сжигании природных топлив*:

$$1.1873 \times 10^{12} \text{ моль } \text{O}_2 \text{ в день} = 3.7994 \times 10^7 \text{ тонн в день.} \quad (7.6)$$

Опять-таки, этот большой объем кислорода превращается сжиганием в  $\text{CO}_2$ , из которого только *неизвестная часть* восстанавливается растениями обратно в кислород.

Следует подчеркнуть, что *само существование парникового эффекта является неоспоримым проявлением кислородного истощения*, так как мы имеем дело именно с тем количеством  $\text{O}_2$  в  $\text{CO}_2$  парникового эффекта, которое не восстанавливается растениями.

Кроме смертности, обусловленной раковыми болезнями от вдыхания чрезмерного количества канцерогенных веществ, являющихся продукта-

ми горения природных топлив, и дополнительной смертности обусловленной климатическими катастрофами, вызванными парниковым эффектом, сжигание природного топлива является причиной дополнительной смертности обусловленных сердечными приступами, связываемыми медицинскими исследованиями с локальными недостатками кислорода.

Кислородное истощение может быть сегодня измерено любым желающим, серьезно заинтересованным состоянием окружающей среды, стоит только приобрести кислородный дозиметр, который сегодня стоит не так дорого даже в весьма портативных версиях, измерить локальное процентное содержание кислорода и затем сравнить со стандартами прошлого, например,

$$\begin{array}{l} \text{Процентное содержание кислорода в нашей атмосфере} \\ \text{на уровне моря в 1950 г.: } 20.946 \pm 0.02\% \end{array} \quad (7.7)$$

(см., опять, *Британскую Энциклопедию* того периода). В лаборатории *USMagneGas, Inc.*, во Флориде, мы получили *локальное кислородное истощение* на уровне от 3% до 5%. Очевидно, большее кислородное истощение ожидается для густонаселенных районов, таких как Манхэттен, Лондон и Токио, или высоко над уровнем моря.

Мы предполагаем, что читатель в курсе недавнего решения авиакомпаний США *снизить* высоту полетов, несмотря на очевидное повышение, в этом случае, стоимости полетов. Это решение было мотивировано кислородным истощением, являющимся причиной случаев кратковременных обмороков пассажиров из-за недостатка кислорода, испытываемого при полетах на больших высотах.

Вышеописанные проблемы окружающей среды, вызванные чрезмерным ежедневным сжиганием (7.2) природных топлив, являются настолько серьезными, чтобы быть потенциально катастрофичными. Раз так, они оправдывают свое изучение без всякого рассмотрения персональных интересов, академических или нет.

### 7.3 Внушающие тревогу проблемы окружающей среды связанные с сжиганием природного газа

Обычно считается, что замена бензина природным газом подразумевает снижение вредных выбросов с соответствующими выгодами для окружающей среды.

Для исследователей и промышленников, серьезно заинтересованных состоянием окружающей среды, важно знать, что это *не* так. Действительно, современные транспортные средства, использующие бензин и оснащенные каталитическими конверторами, по существу выделяют те же углекислый и угарный газы, как транспортные средства потребляющие сжатый природный газ (СПГ). Однако, мало кому известно, что *СПГ транспорт выделяет большее количество углекислого газа, чем машина работающая на бензине, что способствует дальнейшему серьезному углублению уже внушающей опасения проблемы парникового эффекта.*

Как иллюстрация, сравнительные ЕРА тесты отмечают, что автомобиль марки Honda Civic снабженный газовым двигателем (1600 куб. см.) выделяет (см. затем Раздел 7.9)

$$646.35 \text{ грамм } \text{CO}_2 \text{ на милю,} \quad (7.8)$$

в то время как такой же автомобиль, работающий на бензине, выделяет

$$458.65 \text{ грамм } \text{CO}_2 \text{ на милю.} \quad (7.9)$$

Как результат, *при одинаковом исполнении, машина сжигающая природный газ имеет на 40% больший выброс углекислого газа, что делает природный газ неприемлемым для окружающей среды.*

Следует отметить, что выбросы (7.8) и (7.9) *не* относятся к работе двигателя на холостом ходу, а были получены в ходе формальной тестовой ЕРА процедуры, которая включала в себя и движение в городских условиях, и движение в гору.

Очевидно, верным является и то, что использование природного газа на электростанциях, вместо угля или других природных топлив без каталитических конвертеров, подразумевает снижение выбросов продуктов горения с соответствующими канцерогенными и другими токсичными выбросами, но в сущности, выделение углекислого газа и кислородное истощение остаются внушающими тревогу.

## 7.4 Внушающие тревогу проблемы, связанные с сжиганием водорода, топливными ячейками и электромобилями

Водород обычно признается как наичистейшее и самое неистощимое по запасам топливо, пригодное для человечества, обычно из-за того, что при его горении образуется просто водяной пар и он может производиться из воды.

Важно отметить то, что неважно, сжигается ли он непосредственно, или в топливных ячейках, производится водород методами регенерации (например, из природного газа) являющимися причинами *больших* проблем окружающей среды, чем возникающих из-за сжигания природного топлива, как это недавно изучено, например, П. Спатом и М. Манном в *U.S. National Renewable Energy Laboratory* [3].

Это происходит из-за того факта, что производство водорода регенерационными методами требует использования электрической энергии, производимой, по большей части, с использованием природных топлив. Так как эффективность заводов по регенерации водорода очевидно меньше единицы и электростанции, работающие на природных топливах, дают более грязные отходы по сравнению с бензином, становится очевидным, что использование водорода в качестве топлива является более загрязняющим, по глобальной шкале, чем использование бензина.

Более того, как отмечено в предыдущем Разделе,  $\text{CO}_2$ , производимый из природного топлива, частично восстанавливается растениями в  $\text{O}_2$ , в то время как *сжигание водорода постоянно понижает количество, необходимого для дыхания кислорода, на нашей планете, что ведет к внушающему тревогу кислородному истощению*, так как разделение воды, производимой при горении, для восстановления изначального кислородного баланса (опять таки, для водорода, на регенерирующих заводах) весьма дорого.

Предположим, что бензин состоит только из одного октана  $\text{C}_8\text{H}_{18}$ , то есть будем игнорировать остальные изомеры. Сжигание одного моля  $\text{H}_2$  дает 68.32 Ккал, в то время как сжигание одного моля октана производит 1302.7 Ккал. Поэтому, нам требуется  $19.07 = 1302.7/68.32$  моль  $\text{H}_2$ , для производства той же энергии, что выделяется при сгорании одного моля октана.

В свою очередь, сжигание 19.07 моль  $\text{H}_2$  требует 9.535 моль  $\text{O}_2$ , в то

время как сжигание одного моля октана требует 12.5 моль  $O_2$ . Следовательно, для производства одной и той же энергии, сжигание водорода требует меньше кислорода чем бензин (около 76% от потребляемого октаном).

Внушающее тревогу кислородное истощение является следствием, опять таки, того факта, что сгорание водорода обращает кислород в воду, тем самым постоянно изымая, поддерживающий дыхание кислород с нашей планеты. Используемое в небольших масштабах, сжигание водорода не создает ощутимых проблем для окружающей среды. Однако, *крупномасштабное использование водорода как топлива, производимого методами регенерации, является потенциально катастрофичным для окружающей среды, так как кислород является основой жизни.*

В пределе, глобальное сжигание водорода регенерационного происхождения, при полной замене природных топлив, подразумевало бы постоянное изъятие из нашей атмосферы 76% кислорода, потребляемого на сегодняшний день природными топливами, то есть, из (7.6), мы имели бы следующее *постоянное кислородное истощение, вызванное сжиганием водорода:*

$$\begin{aligned} 76\% \text{ кислорода, используемого для сжигания природного топлива} = \\ = 2.8875 \times 10^7 \text{ тонн } O_2 \text{ истощения в день.} \end{aligned} \quad (7.10)$$

В добавление следует принять во внимание количественно аналогичное кислородное истощение, вызванное производством электроэнергии, приводящее к действительно катастрофическому кислородному истощению, которое может подразумевать полное уничтожение жизни на Земле в течении нескольких лет.

На вышеуказанные, внушающие тревогу следствия сжигания кислорода уже обращалось внимание исследовательскими группами, занимающимися проблемами окружающей среды, рабочими коллективами и другими искушенными людьми. Как иллюстрация, расчеты показывают, что даже в случае замены всех видов топлива в Манхэттэне водородом, кислородное истощение будет приводить к сердечным несчастным случаям, с очевидными большими выплатами страховок и привлечением к судебной ответственности поставщиков водорода и пользователей.

Следует отметить, что в дополнение к углекислому газу, растения перерабатывают также и воду, как ясно показано главной реакцией вызванной хлорофиллом, (7.1). Однако, нет оснований считать, что пробле-



ма кислородного истощения решается этим процессом, потому что: 1) кислород получаемый из воды в (7.1) составляет только треть от его изначального количества; 2) сильное кислородное истощение происходит из-за выделения углекислого газа при процессах преобразования; и 3) наибольшее кислородное истощение создается сжиганием природного топлива при производстве необходимой электроэнергии.

Еще одним, вводящим в заблуждение аспектом является то, что сжигание одного моля водорода требует только 78% кислорода от необходимого для сжигания одного моля бензина. Это несущественно для проблемы кислородного истощения, так как сравнение должно производиться при одинаковых условиях, поскольку около 400 кубических футов водорода необходимо для выделения энергии даваемой одним галлоном бензина.

В заключение, при наложении требования сравнимых условий между бензиновыми и водородными двигателями и в виду того факта, что водород обладает меньшей теплотой сгорания, становится ясно, что драматическое возрастание кислородного истощения при сжигании водорода, происходящая из-за процессов преобразования, находится вне всяких сомнений. К несчастью, численное значение упомянутого возрастания не может быть точно вычислено на данный момент, из-за большого количества все еще неизвестных последствий, начиная с неизвестного ежедневного количества выделяемого  $\text{CO}_2$ , которое больше не перерабатывается растениями, и содержание  $\text{O}_2$  в котором точно соответствует кислородному истощению.

Сжигание водорода производимого электролитическим разделением воды при помощи электричества получаемого с электростанций имеет схожие проблемы связанные с окружающей средой. Действительно, изначальное разделение воды и ее последующее воспроизводство при сжигании действительно сохраняет изначальный кислородный баланс в нашей атмосфере. Однако, кислородное истощение большее чем это следует из (7.10) происходит из-за сжигания природных топлив при производстве электроэнергии необходимой для разделения воды.

Напомним, что сжигание природных топлив на электростанциях подразумевает выделение большого количества канцерогенных веществ и углекислого газа, плюс кислородное истощение. Как результат, *автомобили работающие на водороде, производство которого требует электроэнергии производимой на электростанциях, являются более загрязняющими атмосферу, чем современный бензиновый транспорт.*

Подобным же образом, вопреки общепринятому мнению, широкое использование топливных ячеек для водорода, производимого на регенерационных заводах, неприемлемо для сохранения окружающей среды, так как диспропорциональное кислородное истощение будет вызываться топливными ячейками, а также диспропорциональные проблемы связанные с окружающей средой будут возникать из-за электростанций, производящих электроэнергию необходимую для производства водорода.

Другими словами, ограниченный анализ только проблемы выхлопных газов является подходом относящимся к прошлому веку, так как ударение теперь следует делать на глобальных проблемах окружающей среды. Следовательно, транспорт с топливной ячейкой, работающий на водороде полученном регенерационным или электролитическим способом является более загрязняющим атмосферу, чем современный бензиновый транспорт, опять-таки, потому что природные топлива, используемые для выработки электроэнергии необходимой для производства водорода, загрязняют атмосферу больше, чем бензиновые выхлопы при производстве той же энергии.

Подобным же образом, электромобили, чьи перезаряжаемые батареи используют электроэнергию, получаемую с электростанций, признаются, на сегодняшний день, более загрязняющими атмосферу, чем бензиновый транспорт, опять-таки, потому что электростанции более загрязняют атмосферу, чем автомобили, работающие на бензине.

Мы должны отметить, что использование водорода в качестве автомобильного топлива, например, в водородном автомобиле марки BMW [4], имеет следующие принципиальные недостатки:

1) Водород не обладает достаточной теплотой сгорания, чтобы использоваться в сжатом виде в практически важных областях, поэтому требуется его сжижение. Все читатели знают технические трудности сжижения водорода, требующего понижения температуры до минус  $253^{\circ}$  С, плюс дополнительные сложности с транспортировкой жидкого водорода и дальнейшие проблемы содержания жидкого водорода в автомобильном топливном баке.

2) При использовании как топлива в двигателе внутреннего сгорания, водород подразумевает потерю до 35% мощности, по сравнению с использованием бензина для того же двигателя. Эта проблема очевидным образом связана с предыдущей и возникает из-за недостаточности теплоты сгорания.

3) Использование на современном этапе водорода как автомобильно-

*го топлива является гораздо более дорогим, чем использование бензина.* Это связано с необходимостью производства водорода на низкоэффективных (under-unity) электролитических заводах; необходимостью сжижения водорода; необходимостью транспортировки и хранения водорода в жидком состоянии; и другими дорогостоящими процедурами.

Следовательно, в дополнение к разработке приемлемого для окружающей среды метода получения водорода, практическое, конкурентоспособное использование водорода как топлива требует принципиальных химических разработок, способных разрешить три вышеуказанные замечания.

Следует отметить, что производители водородного транспорта рекомендуют производить водород с использованием возобновляемых источников энергии, таких как солнце, ветер или гидроэлектростанции. Однако, такие источники драматически недостаточны для производства водорода в количестве, которое могло бы быть ощутимым на фоне ежедневных потребностей эквивалентных 120 миллионам баррелей сырой нефти в день.

Все возможные исследования, основанные на квантовой химии, давно исчерпаны. В любом случае, шансы открытия действительно новых энергий или топлив с помощью квантовой химии, после почти целого века исследований огромным количеством ученых, практически равны нулю. Необходимость обобщения квантовой химии для достижения существенного продвижения становится очевидной, как мы увидим более детально в оставшейся части этой главы.

## **7.5 Необходимость в новых, приемлемых для окружающей среды первичных источниках электроэнергии**

Вышеуказанный сценарий свидетельствует со всей ясностью, что наиболее серьезные проблемы окружающей среды, существующие на сегодняшний день, обязаны своим происхождением *первичным источникам энергии*, которые используются для производства электроэнергии, в то время как *вторичные источники энергии*, – топлива используемые для транспорта и для других нужд, – имеют вторичное значение.

Как отмечено ранее, идеальный выбор энергии, для окружающей сре-

ды, это использование возобновляемых первичных источников энергии, таких как солнце, ветер и другие, и использование, в качестве топлива, водорода получаемого разделением воды. С таким принятым сценарием, производство электроэнергии перестало бы влиять на окружающую среду; разделение воды, с целью получения водорода, будет иметь своим следствием выделение в атмосферу необходимого для дыхания кислорода; в то время как сжигание водорода будет требовать точно того количества кислорода, которое выделилось при разделении воды, не выделяя при этом никаких токсичных субстанций, поэтому не происходило бы никаких изменений в нашей атмосфере.

Как результат огромной недостаточности отмеченной возобновляемой первичной энергии, основные людские и финансовые ресурсы должны быть направлены на наиболее серьезные проблемы окружающей среды, которые связаны с производством электроэнергии, и только дополнительные усилия должны быть направлены на вторичные источники энергии.

К несчастью, современный сценарий является прямо противоположным, так как основные усилия посвящены созданию топлива, при общем близоруким игнорировании, что производство электроэнергии для синтеза топлив является более загрязняющим атмосферу, чем современное использование бензина.

## **7.6 Недостатки квантовой механики, сверхпроводимости и квантовой химии для решения современных проблем окружающей среды**

Те исследования, что привели к созданию адронной механики, адронной сверхпроводимости и адронной химии, очерченные в этой монографии, установили, что *квантовая механика, сверхпроводимость и квантовая химия являются структурно недостаточными чтобы обеспечить решение наших, внушающих тревогу, проблем окружающей среды.*

В качестве иллюстрации, напомним из Главы 1, что современная ошибка квантовой химии в 2%, при воспроизведении молекулярных энергий связи, является обманчиво малой, тогда как в действительности, она

соответствует, примерно, 950 Ккал/моль, поэтому подразумевается 20-ти кратная ошибка при термодимических вычислениях, так как последние имеют величины порядка 50 Ккал/моль. Следовательно, любое исследование проблем окружающей среды через квантовую химию является неправильным, не говоря уже о их неэффективности, пока основные недостатки квантовой химии ясно не идентифицированы и не разрешены через расширенную теорию.

Переполнение дополнительными недостатками вышеозначенных дисциплин было отмечено в Главе 1 и цитированной литературе. Независимо от этого, хорошо известно, что исследования всех предполагаемых энергий, предсказываемых или допускаемых этими дисциплинами, были исчерпаны в 20-м веке. В любом случае, шансы обнаружить действительно новые источники чистых энергий совместимых с вышеуказанными уже установленными доктринами тождественно равны нулю, поэтому и не стоят серьезного рассмотрения.

Легко видеть, что даже при предположении наличия первичных чистых источников энергии для производства водорода, квантовая химия неспособна разрешить недостатки 1), 2) и 3) Раздела 7.5 для его практического эффективного использования, конкурентоспособного с бензином.

Более точно, несмотря на большие инвестиции промышленности (см., например, [4]), квантовая химия была неспособна найти форму водорода допускающую его использование в автомобилях в сжатом виде, с теплотой сгорания сравнимой с теплотой сгорания бензина и с конкурентоспособной стоимостью. Учитывая эти обстоятельства, предпринимаются попытки создания смесей водорода с другими горючими газами с сохранением приемлемости для окружающей среды. Легко видеть, что этот вопрос не допускает приемлемого для промышленности и окружающей среды ответа через использование квантовой химии.

Например, смесь CO с H<sub>2</sub> в соотношении 50% на 50% оставляет нерешенной проблему кислородного истощения. Действительно, каждая из двух реакций  $H_2 + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow H_2O$ , и  $CO + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow CO_2$ , требует 1/2 моля O<sub>2</sub>. Следовательно, смесь 50% на 50% H<sub>2</sub> и CO также будет требовать 1/2 моля O<sub>2</sub>, так же как и в случае чистого H<sub>2</sub>.

После многолетнего изучения вопроса, единственным решением, известным автору, для разрешения трех отмеченных трудноустраняемых недостатков водорода как топлива является теоретическое предсказание, количественное исследование и промышленная реализация *новых химических соединений не относящихся к молекулам*, как это обрисова-

но позднее в этой Главе и Главе 8.

## 7.7 Новые чистые первичные энергии, предсказываемые адронной механикой, адронной сверхпроводимостью и адронной химией

С самого своего создания Р.М. Сантилли в 1978 г., поддерживаемого Департаментом Энергетики США (U.S. Department of Energy), *адронная механика была задумана, сконструирована и подтверждена со специальной целью предсказания новых чистых источников первичной энергии, как кратко изложено в работе [5].*

Все энергии предсказываемые адронной механикой подходят для чистого производства электроэнергии, которое, в свою очередь, может быть использовано для производства приемлемых для окружающей среды чистых топлив.

Эта монография посвящена молекулярным аспектам и, следовательно, мы не можем входить в техническое рассмотрение новых энергий на более глубоких ядерном уровне и уровне элементарных частиц. Несмотря на это, может оказаться полезным, для читателя всерьез интересующегося проблемами окружающей среды, сделать по крайней мере концептуальный обзор.

Как показано в предыдущей главе, адронная механика, адронная сверхпроводимость и адронная химия совпадают с обычными теориями всюду, за исключением малых расстояний порядка  $10^{-13}$  см, на которых первые теории позволяют аксиоматически строгие и инвариантные трактовки новых сил и эффект, который просто не существует в последних, непотенциально-негамильтонового взаимодействия согласно взаимному перекрытию волновых пакетов частиц.

Так как эти эффекты непотенциальны по определению, они должны воспроизводиться через *что-нибудь еще кроме гамильтониана*. Сантилли, в 1978 г., предложил воспроизводить эти новые эффекты через обобщенную основную единицу квантовой механики, которая записывается

в форме

$$\begin{aligned} I = \text{Diag.}(1, 1, 1, 1) &\rightarrow \hat{I}(t, r, p, \psi, \partial\psi, \dots) = 1/\hat{T} = \\ &= \text{Diag.}(n_1^2, n_2^2, n_3^2, n_4^2) \times \exp \left\{ N \int dv \psi_1^\dagger(r) \times \psi_1(r) \right\}, \end{aligned} \quad (7.11)$$

где  $n_1^2, n_2^2, n_3^2$ , воспроизводят форму распределения рассматриваемого заряда,  $n_4^2$  воспроизводит его плотность и экспонента воспроизводит нелинейные, нелокальные и непотенциальные взаимодействия.

В частности, воспроизведение негамильтоновых эффектов через обобщенную единицу является единственно известным воспроизведением гарантирующим инвариантность, то есть, предсказание тех же чисел для тех же эффектов при тех же условиях, но в разные моменты времени.

Как читатель вспомнит из Глав 1, 2 и 3, специфичные приложения адронной механики могут быть сконструированы подчинением любой данной квантовой модели неунитарному преобразованию, которое, для согласованности, должно быть применено ко всей, целиком, оригинальной формулировке. Тогда, этот простой метод производит все формулировки адронной механики, например,

$$U \times U^\dagger \neq I, \quad U \times U^\dagger > 0, \quad (7.12a)$$

$$I \rightarrow \hat{I} = U \times I \times U = 1/\hat{T}, \quad (7.12b)$$

$$\begin{aligned} A \times B \rightarrow A \hat{\times} B = A' \times \hat{T} \times B' = U \times (A \times B) \times U^\dagger, \\ A' = U \times A \times U^\dagger, \quad B' = U \times B \times U^\dagger, \end{aligned} \quad (7.12c)$$

$$\langle \psi | \times | \psi \rangle \times I \rightarrow \langle \hat{\psi} | \hat{\times} | \hat{\psi} \rangle \times \hat{I} = U \times (\langle \psi | \times | \psi \rangle), \quad (7.12d)$$

$$\begin{aligned} H \times | \hat{\psi} \rangle = E \times | \psi \rangle \rightarrow H' \hat{\times} | \hat{\psi} \rangle = U \times (H \times | \psi \rangle) = \\ = E' \times | \hat{\psi} \rangle = U \times (E \times | \psi \rangle), \quad | \hat{\psi} \rangle = U \times | \psi \rangle. \end{aligned} \quad (7.12e)$$

Результирующие теории называются адронной механикой, адронной сверхпроводимостью и адронной химией. Предположение, что  $U \times U^\dagger$  отличается от единицы только на малых расстояниях позволяет покрывать квантовую механику на больших расстояниях. И в физике элементарных частиц, и в ядерной физике, и в молекулярных структурах, этот тип неунитарного завершения квантовой механики существенным образом дополняет их характеристиками, чертами и эффектами, находящимися вне воспроизводящих способностей квантовой механики. Новые чистые энергии и топлива допускаются именно упомянутыми неунитарными контактными эффектами.

Свойством новых контактных эффектов, имеющим наибольшую важность для новых чистых энергий и топлив, но отсутствующим в обычных дисциплинах, является то, что *негамильтоновы взаимодействия, согласно глубокому взаимному перекрытию волновых пакетов частиц в синглетном соединении, являются не только притягивающими, но настолько притягивающими, чтобы преодолеть отталкивающее кулоновское взаимодействие.*

Другим важным свойством новых взаимодействий является, по самой их концепции, полное отсутствие для них энергии связи, так как последняя возможна только для потенциальных взаимодействий.

Еще одним свойством новых взаимодействий является то, что они подразумевают, в общем, мутацию внутренних характеристик частиц, которые характеризуются неприводимыми представлениями изосимметрии Пуанкаре-Сантилли. Например, деформация распределения заряда протонов и нейтронов, которая невозможна для квантовой механики (так как эти частицы рассматриваются как точечные), без труда воспроизводима адронной механикой через изоединицу (7.11) и допускает, впервые, точное численное воспроизведение ядерных магнитных моментов [5].

Притягивающий характер новых взаимодействий, плюс отсутствие для них обменной энергии, и возможность изменения внутренних характеристик частиц, позволяют предсказание, количественную трактовку и экспериментальную проверку действительно новых и чистых энергий.

Читатель должен иметь в виду, что вышеперечисленные новые свойства находятся вне не только квантовой механики, но также специальной теории относительности Эйнштейна.

Действительно, специальная теория относительности строго линейна, локальна и потенциальна по концепции и аксиоматической структуре. Следовательно, все нелинейные, нелокальные и непотенциальные эффекты ускользают от специальной теории относительности.

Главным образом, *внутренние* характеристики частиц являются вечными и неизменяемыми согласно специальной теории относительности. Следовательно, изменение внутренних характеристик, которое неотемлемо в непотенциальных взаимодействиях (так как они обеспечивают новую форму перенормировки), несовместимо со специальной теорией относительности.

По этим причинам, Сантилли было разработано в деталях обобщение специальной теории относительности через изоматематику, названное *изоспециальной теорией относительности* [6], и подвергнуто большо-



му количеству проверок в различных областях (см. [5]).

Систематические и длительные исследования, основанные на изоматематике и изоотносительности, позволили установление *основных физических законов*, которые были подтверждены новыми энергиями, а также *геометриями* и *объединениями* для их практической реализации.

Эти систематические исследования, проводящиеся на протяжении двух десятилетий, привели к идентификации различных принципиально новых, чистых энергий, задуманных специально для производства электроэнергии приемлемым для окружающей среды способом.

Эти новые чистые энергии могут быть классифицированы и охарактеризованы следующим образом [5]:

**1) Новые чистые энергии Класса I, которые появляются на уровне элементарных частиц.**

Нейтрон, согласно следующему, является огромнейшим и наиболее неисчерпаемым резервуаром чистой энергии доступной для человечества. Действительно, нейтрон по природе нестабилен, со спонтанным распадом



при котором появляются электроны с кинетической энергией до 0.8 МэВ, то есть, энергией, которая по крайней мере в 100000 раз большая, чем энергия электронов, вызывающих свечение компьютерного монитора. Исследования по производству и использованию этой энергии было проведено в работах [7].

Захват электронов возникающих в ходе распада нейтрона с помощью проводящего экрана обеспечивает *дуальный* источник энергии, называемый *адронной энергией* [7d],, создающий, во первых, разность электрических потенциалов и, во вторых, выделяющий большое количество теплоты (см. Рис. 7.1).

Вышеуказанный источник энергии является чистым, так как не испускает опасных излучений (так как электроны могут быть легко остановлены металлическим экраном, в то время как нейтрино, как известно, безвредны) и не оставляет вредных отходов, как это показано ниже.

Адронная энергия существенным образом основана на следующих предсказаниях [7d]:

1) Периферийный нейтрон, принадлежащий определенной группе легких, естественных, стабильных элементов  $N(A, Z)$ , называемых *адронными топливами*, может быть подвергнут *стимуляции* к распаду потоком

фотонов  $\hat{\gamma}$  с резонирующей частотой, соответствующей 1.294 МэВ,

$$\hat{\gamma} + n \rightarrow p^+ + e^- + \bar{\nu}; \quad (7.14)$$

2) Результирующие ядра  $N(A, Z + 1)$  естественно нестабильны, со спонтанным бета распадом

$$\hat{\gamma} + N(A, Z) \rightarrow N(A, Z + 1) + e_1^- + \bar{\nu}_1 \rightarrow N(A, Z + 2) + e_2^- + \bar{\nu}_1 + \bar{\nu}_2; \quad (7.15)$$

3) Окончательные ядра  $N(A, Z + 2)$  класса адронных топлив являются легкими, естественными и стабильными элементами, поэтому не остается вредных отходов.

Характерными примерами адронных топлив являются  $Zn(70, 30)$ ,  $Mo(100, 42)$  и некоторые другие [7a]. Заметим, что энергия 1.294 МэВ изначального резонирующего фотона *не теряется*, но остается в составе окончательной полезной энергии; на каждый резонирующий фотон приходится два вылетевших электрона и связанная с ними кинетическая энергия; и процесс существенным образом трансформирует оригинальные ядра в ядра с меньшей массой, в то время как произведенное количество энергии, по крайней мере, в семь раз превосходит энергию резонирующего фотона, поэтому гарантируется положительный энергетический выход, даже после учета энергии необходимой для производства  $\hat{\gamma}$  квантов.

Процесс (7.15) сильно экзоэнергетический. Действительно, расчеты показывают, что несколько грамм адронного топлива, при уровне эффективности реакции (7.15) на  $10^{10}$  ядер, должны производить энергию достаточную для питания автомобиля в течении года.

Приемлемость адронной энергии для окружающей среды очевидна. Отметим, в частности, *двойное* ядерное превращение без выделения нейтронов или других вредных излучений.

Следует подчеркнуть, что адронная энергия *невозможна* для квантовой механики, так как сечение реакции (7.15) очень мало, поэтому не имеет практического значения. Следовательно, академические круги, поддерживая квантовую механику как окончательную теорию, отклоняют существование адронной энергии, несмотря на доступность первой экспериментальной проверки.

Однако, сечение реакции (7.14) *не измерялось* при 1.294 МэВ. Следовательно, утверждение, что сечение реакции (7.15) очень мало при 1.294 МэВ, является сугубо персональным мнением отдельных ученых, а не физической истиной.

Адронное покрытие  $\gamma$ - $n$  рассеяния неунитарным преобразованием, которое отлично от тождественного только внутри нейтрона, плюс остальные условия (защищено патентом), покрывает предсказание, что сечение для фотонов очень мало при низких энергиях, за исключением появления острого пика при 1.294 МэВ, который является чем-то вроде реминисцентного пика, в 1960-м предсказавшим  $\Omega^-$  гиперон.

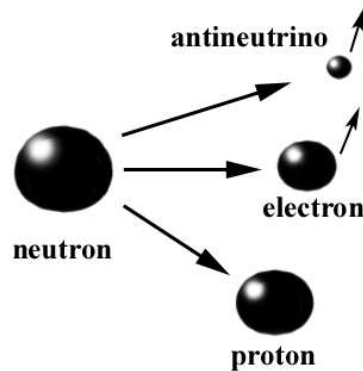


Рис. 7.1: [7] Схематическая иллюстрация того факта, что изолированный нейтрон в состоянии покоя является нестабильным и спонтанно распадается на покоящийся протон, высокоэнергетический электрон и антинейтрино. Спонтанный характер распада позволяет изучение механизма его стимуляции, с последующим производством чистой энергии. Следует отметить, что, в противоположность общепринятому мнению, нейтрон имеет *варьируемое* среднее время жизни зависящее от характеристик окружающей среды. Действительно, в составе определенных ядер, нейтрон имеет среднее время жизни только несколько наносекунд; в вакууме, изолированный нейтрон имеет среднее время жизни около 15 минут; в составе других ядер, нейтрон имеет среднее время жизни до нескольких лет; и в составе легких, естественных, стабильных ядер, нейтрон имеет бесконечное среднее время жизни. Таким образом, варьируемый характер среднего времени жизни нейтрона обеспечивает дополнительное подтверждение существования механизма стимуляции его распада. Заметим, что примирение конечного среднего времени жизни в одних ядрах с прекрасной стабильностью в других лучше всего разрешается предположением того, что нейтрон является связанным состоянием протона и электрона, как изначально предполагалось Резерфордом и как впервые допускается адронной механикой (см. Рис. 1.18).

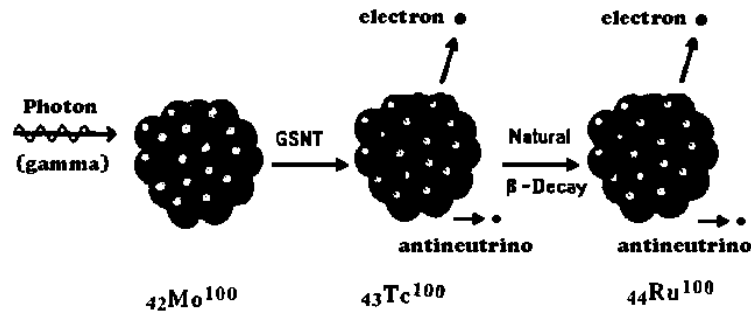


Рис. 7.2: [7] Схематический вид *адронной энергии*, предложенной Сан-тилли [7d] (патент заявлен). По крайней мере один периферийный нейтрон, принадлежащий определенным ядрам (так называемым "адронным топливам") может быть вынужден к распаду через фотон с резонирующей частотой, соответствующей 1.294 МэВ, плюс установка варьируемая от ядра к ядру. Рисунок иллюстрирует случай адронного топлива Mo(42,100), который трансформируется одним резонирующим фотоном в нестабильный Tc(43, 100), который, в свою очередь, путем бета распада, превращается в стабильный Ru(44, 100), что приводит к излучению двух электронов с большими энергиями в области от 5 до 7 МэВ. Другие случаи адронных топлив даются Zn(30, 70), различными "зеркальными ядрами" и другими. Заметим, что реакции этой фигуры *запрещены* адронной механикой. Заметим также, что получаемая адронная энергия является чистой, так как не испускается опасных излучений (так как электроны могут быть легко задержаны, а антинейтрино безвредно) и не остается вредных отходов.

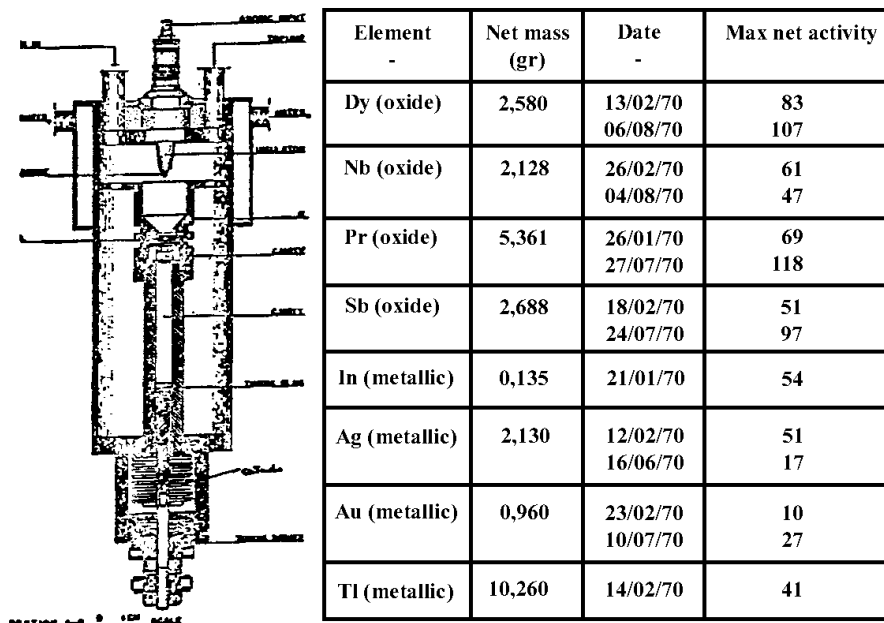


Рис. 7.3: [7] Схематический вид эксперимента, проведенного в Бразилии итальянским физиком Дон Борги и его коллегами [7e], по синтезу нейтрона только из протонов и электронов. Эксперимент, отличавшийся замечательной простотой, состоял в поддержании, при помощи электрического разряда, газа протонов и электронов при обычной температуре внутри металлической камеры, называемой клистроном и показанной слева. Различные вещества приложенные к внешней стороне камеры показывали явную ядерную трансмутацию, которая могла объясняться только потоком нейтронов из внутренней области клистрона. Квантовая механика запрещает отмеченный синтез на многочисленных основаниях. Напротив, адронная механика позволяет согласованное и инвариантное воспроизведение всех характеристик нейтрона, как связанного состояния протона и электрона [7a, 7b, 7c], поэтому допускается и рассматриваемый здесь синтез. Следует напомнить, что синтез нейтрона из протонов и электронов возможен только когда электроны достигают порога энергии 0.80 МэВ и выполняются другие условия, такие как синглетное соединение. Стоит ли говорить, что эксперимент нуждается в большом количестве независимых проверок.

Еще одним, более серьезным возражением против адронной энергии является то, что кварковая теория не позволяет вынужденный распад нейтрона и, в частности, фотоны с энергией 1.294 МэВ не обладают, для кварков, резонансными свойствами вообще.

Вышеуказанное иллюстрирует *необходимость новой структурной модели адронов, с физическими составляющими для предсказания новых чистых энергий*. Действительно, адронная энергия может существовать только при новой структурной модели нейтрона, как адронного состояния протона и электрона (Рис. 1.18). Только при предположении, что электрон является действительной составляющей нейтрона (хотя и в видоизмененной форме по отношению к той, что обычно регистрируется в вакууме), существует резонансная частота, или другой механизм, допускающий существование указанного структурного электрона, с очевидным последующим распадом.

На действительных научных основаниях, использование теории кварков для отвержения адронной энергии неубедительно, из-за хорошо известных нерешенных проблем кварковой теории, таких как отсутствие строгого конфайнмента с тождественно нулевой вероятностью обнаружения свободных кварков. Кроме того, предположение кварков как имеющих композитную структуру, отмеченное в Разделе 1.8, снимает некоторые проблемы, так как новая структурная модель адронов с физическими составляющими воспроизводит кварковые структуры как первое приближение. Интересно, что композитные кварки воспроизводятся через использование *гиперматематики*. Действительно, согласно адронной механике, *адроны имеют различные изоединицы*. Триплеты, октеты и другие  $SU(3)$  мультиплеты *изоморфно* воспроизводятся из соответствующих мультиплетов с изоединицами.

Экспериментальными обоснованиями адронной энергии являются следующие. Во первых, необходимо экспериментально подтвердить, что электрон действительно является физической составляющей нейтрона. Эта цель может быть достигнута через *синтез нейтронов исключительно из протонов и электронов*. Если такой синтез будет экспериментально подтвержден, то существование адронной энергии будет следовать само собой. Заметим, что кварковые теории подразумевают веру в то, что *перманентно стабильные частицы*, такие как электрон, могут поглощаться и испускаться обратно гипотетическими кварками, что само по себе находится вне рамок науки. Читатель должен иметь в виду, что синтез нейтронов действительно был экспериментально подтвержден группой

итальянских экспериментаторов в Бразилии [7e]. Этот опыт теперь ждет независимого подтверждения или опровержения.

Во вторых, инверсный процесс к синтезу, стимуляция нейтронов к распаду, так же был экспериментально подтвержден в лаборатории ядерной физики в Греции [7f]. Этот второй эксперимент тоже нуждается в независимом подтверждении или опровержении.

Отметим необходимость экспериментального подтверждения обоих экспериментов, и синтеза нейтрона из протонов и электронов, и его стимулированный распад в адронных топливах. Заметим также, что новая чистая энергия на уровне элементарных частиц предсказывается новой структурной моделью адронов, с физическими составляющими свободно выпускаемыми при спонтанном распаде, точно так же, как в случае для атомных и молекулярных энергий. Действительно, последние энергии позволяют именно возможностью отрыва составляющих.



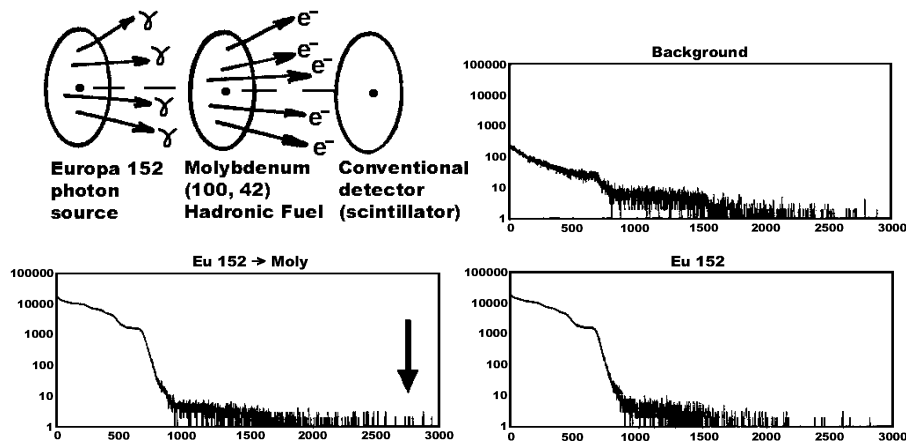


Рис. 7.4: [7] Схематический вид эксперимента по стимуляции распада нейтрона, проведенного Тсагасом (Tsagas) и его коллегами [7f] в Университете Трейса в Ксанти, Греция. Этот эксперимент очевидно является дополнительным к эксперименту по синтезу нейтрона, иллюстрированного на Рис. 7.3, и также отличается замечательной простотой. Эксперимент состоял в использовании диска Европия 52, как источника фотонов с необходимой резонансной частотой, соответствующей 1.294 МэВ, который располагался на диске Молибдена. Два сложенных диска затем совмещались с сцинтилляционным детектором, подходящим для измерения энергии испускаемых электронов. Как можно видеть, сравнение результатов измерений фона, когда источник (Европий) один, и при наличии обоих дисков Eu-Mo, действительно показывает излучение электронов с энергией более 2 МэВ, которая может иметь только ядерное происхождение, чем подтверждается идея стимулированного распада нейтрона, так как, максимально возможная энергия электронов, согласно комптоновскому рассеянию фотонов на периферийных атомных электронах, равна 1 МэВ. Не стоит говорить, что этот эксперимент тоже нуждается в большом количестве независимых подтверждений или опровержении. Следует принять во внимание, что экспериментаторы использовали природный Молибден, а не его изотоп Mo(42, 100), которого содержится в природном Молибдене только около 0.6%. Все другие изотопы Молибдена, как было доказано, не позволяют стимулированный распад нейтрона, из-за отсутствия подтверждения того или иного законов сохранения и/или правил суперотбора. Как результат, рекомендуется повторение того же эксперимента с использованием чистого изотопа Mo(42, 100), для получения лучших результатов, чем были достигнуты Тсагасом [7f].

В противоположность такому историческому учению на ядерном и атомном уровнях, кварковые теории, вместо этого, были развиты при предположении, что адронные составляющие не могут наблюдаться в свободном виде.

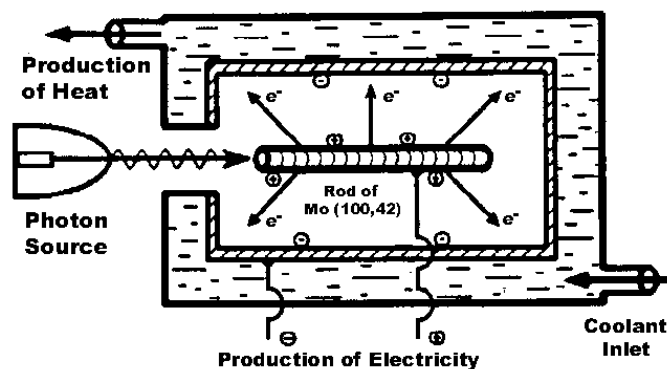


Рис. 7.5: [7] Пример индустриального применения адронной механики, разрабатываемого сейчас *Clean Energies Technologies, Inc.*, Палм Харбор, Флорида. Утилизация безотходной чистой энергии содержащейся в нейтроне через его стимулированный распад (патент заявлен). Предсказанный источник энергии является дуальным, в том смысле, что является источником и электричества (согласно создаваемой разности потенциалов между экраном, задерживающим электроны, и отходами адронного топлива), и тепла (которое может быть утилизировано через теплообменники).

Следовательно, как отмечено в Разделе 1.8, одним из наибольших *возражений* против новых чистых энергий на уровне элементарных частиц и ядерном уровне является то предположение, что гипотетические элементарные кварки при гипотетическом перманентном конфайнменте являются физическими составляющими адронов. Напротив, предположение композитности кварков, то есть *отрицание* окончательной элементарности кварков, действительно позволяет новые чистые энергии.

Несмотря на этот очевидный научный сценарий и несмотря на огромные следствия для окружающей среды, поставленных здесь на карту, было невозможно для Сантилли организовать ядерную физическую ла-

бораторию в США и Европе для повторения экспериментов по синтезу и стимулированному распаду нейтрона для подтверждения или опровержения экспериментов [7e, 7f].

Эта оппозиция в академических кругах, *но не в корпоративных*, очевидно, является следствием того факта, что подтверждение синтеза нейтрона и его стимулированного распада будет подразумевать ликвидацию окончательного характера квантовой механики и кварковой теории в пользу новых покрывающих теорий.

После десятилетий бесплодных усилий, автор не имеет надежды на переоценку взглядов в академических кругах, поэтому остается промышленность, как единственно возможный выход для основных исследований по идентификации истинных составляющих нейтрона.

## **2) Новые чистые энергии Класса II, имеющие место на ядерном уровне с вкладами новых энергий Класса I.**

Как это хорошо известно, квантовая механика не предсказывает возможности стимуляции ядерных превращений низкими энергиями, и, когда эти превращения допускаются, они предсказываются с испусканием вредных нейтронов. По существу, *отсутствие* испускания нейтронов, в академических кругах, в общем принимается как "очевидность" отсутствия самих ядерных превращений.

Следует подчеркнуть, что эта точка зрения не является чем-либо большим, чем *персональным мнением* отдельных ученых, сделавших ставку на квантовую механику, и *абсолютно не соответствует физической истине*.

Экспериментальное подтверждение стимуляции ядерных превращений низкими энергиями без испускания нейтронов, следовательно, было бы прямым экспериментальным поводом для ликвидации окончательного характера квантовой механики в пользу покрывающей теории.

В виду вышесказанного, организованные интересы в академической ядерной физике находятся в сильной оппозиции научным исследованиям в этой области. Живой иллюстрацией может служить публичное выступление физиков-ядерщиков против объявления Флейшманом и Понсом десятилетие назад о возможном существовании "холодного ядерного синтеза". Как результат этой публичной оппозиции, исследования по "холодному ядерному синтезу" до сих пор рассматриваются как "обман" со стороны бульварной прессы и других не информированных источников.

В действительности, можно напомнить, что исследования по "холод-

ному ядерному синтезу" имели *частное* финансирование, в то время как исследования предпочитаемые физиками-ядерщиками относятся к "термоядерному синтезу", который финансировался и продолжает финансироваться значительными суммами из *государственных* источников. Кроме того, возможность "холодного ядерного синтеза" рассматривается в этой работе как открытая, еще недостаточно разработанная научная проблема, в то время как практическая невозможность использования "термоядерного синтеза" была полностью доказана еще десятилетие назад. Все эти проблемы научной ответственности так и остались нерешенными.

Адронная механика и изоспециальная теория относительности предсказывают множество новых чистых форм первичного топлива Клас-са II, все с возможностью экспериментальной проверки и промышленного применения, некоторые из них описаны в работе [5] (см. следующие фигуры).

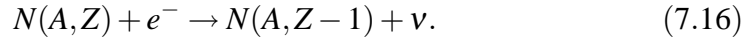
Необходимым условием этих предсказаний является новая структурная модель ядер, которая сводится адронной механикой к только протонам и электронам, хотя и в обобщенных состояниях, называемых *изопротонами* и *изоэлектронами*, в то же время воспроизводящая обычные ядерные структуры в терминах протонов и нейтронов как первое приближение.

Эти новые ядерные модели являются очевидным следствием структурной модели нейтрона как адронного связанного состояния протона и электрона, как изначально было предложено Резерфордом (Рис. 1.18). Как результат, новые чистые энергии Классов I и II глубоко взаимосвязаны, до такой степени, что экспериментальное подтверждение одного из них, является прямым экспериментальным подтверждением другого.

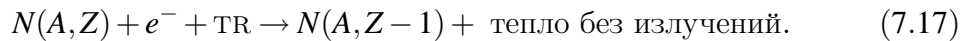
Адронной механикой предсказываются три типа новых чистых энергий Клас-са II. Они могут быть все концептуально идентифицированы внимательным исследованием и, самое главное, допущением физической реальностью.

Первый тип может быть идентифицирован напоминанием, что нейтрон синтезируется в природе из протонов и электронов в ядрах звезд. Возражения против этого эффекта, такие как требование для этого синтеза очень высоких давлений и температур в ядрах звезд, отменяются экспериментальным явлением электронного захвата (ЕС), а именно, спонтанным захватом электронов определенными ядрами при обычных земных условиях. Действительно, ЕС подразумевает синтез нейтронов из

протонов и электронов, приводящий к низкоэнергетическому ядерному превращению типа



Помня, что вышеуказанный ЕС происходит спонтанно, адронная механика позволяет количественную идентификацию физических законов и условий, при которых превращения (7.16) могут быть *стимулированы* с освобождением энергии (то есть, масса  $N(A, Z - 1)$  *меньше*, чем масса  $N(Z, A)$ ) путем выделения тепла, без какого-либо излучения (то есть,  $N(A, Z - 1)$  является стабильным) [5],



Эти условия многочисленны и не могут быть технически рассмотрены здесь (см. [5]). Мы просто заметим, что превращения (7.16) требуют синглетных соединений, электрон должен обладать энергией около порога синтеза нейтрона (0.80 МэВ), и превращение требует "спускового механизма" (TR), как и в случае в изохимии (Глава 4).

Вторая группа новых чистых энергий Класса II может быть выведена наблюдением и предположением, что Земля должна была достигнуть состояния с полностью замороженным ядром миллиарды лет назад, как доказано использованием законов сохранения для диссипации тепла. Тот факт, что земное ядро, вместо этого, такое же горячее, как и миллиарды лет назад, устанавливает существование внутренних источников тепла, которыми могут являться только ядерные превращения. Это заключение независимо подтверждается тем известным геофизическим фактом, что Земля *расширяется*.

Наблюдение и изучение геометрии земного ядра позволит тогда идентификацию специфически новых энергий Класса II (патент заявлен). Действительно, в земном ядре локально возникает сильное *магнитное поле*, которое подразумевает выравнивание ядерных спинов, которое, в определенных случаях, необходимо для соблюдения закона сохранения спина. Дополнительные наблюдения, подтвержденные адронной механикой, устанавливают, что ядерные превращения, ответственные за выделение тепла в недрах Земли, могут быть воспроизведены в наших атмосферных условиях, так как, в противоположность общепринятому мнению, они происходят только при наличии *пороговой энергии*, которая варьируется от случая к случаю.

Третья группа новых чистых энергий Класса II может быть идентифицирована тем замечанием, что химический анализ пузырьков воздуха, сохранившихся в янтаре, показывает, что *земная атмосфера, сто миллионов лет назад, содержала около 40% азота.*

Этот факт устанавливает существование, очевидно, медленного естественного процесса, который послужил причиной удвоения количества азота в нашей атмосфере за последние 100 миллионов лет.

Геологическое происхождение этого процесса исключается, так как вулканическая активность, как известно, не производит азота в достаточных для этого количествах. Астрофизическое происхождение этого процесса также исключается по множеству причин, таких как медленно возрастающая природа обмена по сравнению с огромным периодом времени, в течении которого сохраняется на одном уровне частота столкновений нашей планеты с кометами и другими телами.

Следовательно, наиболее вероятным, поэтому наиболее внушающим доверие, происхождением возрастания азота в нашей атмосфере является то, что *азот синтезируется в ней из других естественных элементов, посредством низкоэнергетического процесса без излучения радиации, то есть, именно посредством процесса запрещенного квантовой механикой, но разрешенного покрывающей адронной механикой.*

Рассмотрение всех возможных природных явлений приводит к выводу, что за синтез азота на Земле ответственна *молния*. Синтез должен, очевидно, производиться из естественных элементов имеющих на Земле. Наиболее вероятными кандидатами являются углерод (содержащийся во всех живых организмах) и дейтрон (содержащийся в обычной воде, хотя и в малых количествах), позволяющие *стимулированный синтез азота, предсказанный адронной механикой* [5],



где спусковым механизмом TR является, в этом случае, молния и сопутствующие явления (сильные магнитные поля, последующее выравнивание ядер и другие явления). Низкая интенсивность синтеза интерпретируется тогда, через низкую концентрацию тяжелой воды в нашей атмосфере.

Опять-таки, следует подчеркнуть, что синтез (7.18) *полностью запрещен* квантовой механикой, например потому, что она не допускает совместного испускания нейтронов. Напротив, синтез (7.18) предсказывается и количественно трактуется адронной механикой. Как это ни странно,

вторичное испускание нейтронов (или любого другого излучения) *запрещало бы синтез (7.18) в контексте адронной механики.*

Вновь, отсутствие синтеза (7.18) является *чисто персональным мнением и абсолютно не научная истина* для настоящей науки, которая единственно может быть основана на экспериментах, в частности, таких, которые могли бы опровергнуть существующие теории. Возражения против проверки существования синтеза (7.18) (так же, как и нескольких других, предсказываемых адронной механикой [5]), основанные единственно на персональных мнениях, являются ненаучными и нарушающими интересы общества.

Потенциально катастрофические проблемы окружающей среды нашего современного общества требуют отметания персональных мнений тем или иным путем, и проведения серьезных научных исследований, основанных на непосредственных экспериментальных подтверждениях или опровержениях.

Замечательно, что стимулированное ядерное превращение (7.18) является одним из простейших из предсказываемых адронной механикой, так как *ядро углерода  ${}^6\text{C}^{12}$  имеет нулевой спин, поэтому исключается необходимость в сложном оборудовании, подходящем для осуществления синглетных соединений, как это необходимо для ядер со спином.*

Мы имеем следующее сохранение момента импульса и четности для стимулированного ядерного превращения (7.18) (после выбора спускового механизма, здесь и далее подразумеваемого):

$$1^+ + 0^+ \rightarrow 1^+, \quad (7.19)$$

которое всегда выполняется для всех возможных спусковых механизмов со спином ноль. Ради краткости, для идентификации и подтверждения всех остальных адронных законов и геометрий, мы отсылаем заинтересованного читателя к работе [5].

Энергия, выделяющаяся при синтезе (7.18), впечатляюща. Масса ядра дейтерия

$$M_D = 1,876.122 \text{ MeV}/c_0^2. \quad (7.20)$$

Масса ядра углерода

$$M_C = (12.000 - 6 \times m_e - E) \text{ а.е.м.} \simeq 11,174.865 \text{ MeV}/c_0^2, \quad (7.21)$$

в то время как масса ядра азота

$$M_N = 13,040.137 \text{ MeV}/c_0^2. \quad (7.22)$$

Следовательно, энергия выделяющаяся при синтезе азота, приходящаяся на одну реакцию (7.18), равна

$$\Delta E = (M_D + M_C) - M_N = 14.850 \text{ MeV}/c_0^2. \quad (7.23)$$

Вспоминая, что

$$1 \text{ MeV} = 1.6021 \times 10^{-13} \text{ Джоуль}, \quad (7.24)$$

и что в одном моле содержится  $6.022 \times 10^{23}$  атомов, предельно низкая эффективность одной реакции (7.18) на  $10^{10}$  ядер в минуту производит весьма значительную величину энергии

$$\begin{aligned} & 14.8 \times 10^6 \times 1.6 \times 10^{-19} \text{ Джоуль} \times (6 \times 10^{23}) \times \\ & \times (10^6 \text{ реакций в минуту на моль}) = 1.42 \times 10^6 \text{ Дж/мин.} \end{aligned} \quad (7.25)$$



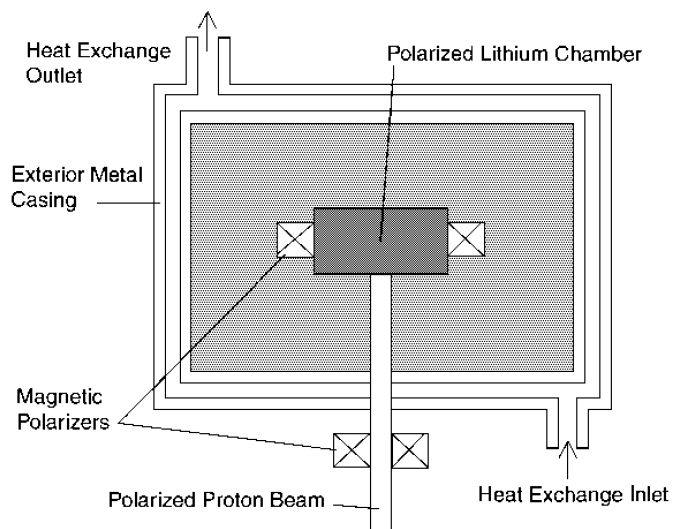


Рис. 7.6: [5] Еще один пример промышленного применения адронной механики, находящийся сейчас в стадии разработки в *Clean Energy Technologies, Inc.*, в Палм Харбор, Флорида. Литиевое усиление сгорания (патент заявлен). Аномально высокое выделение энергии при сгорании топлив обогащенного литием хорошо известно. Адронная механика установила физические законы, геометрии и условия на предельных микроскопических основаниях этой технологии. В частности, реакции выделяющие аномальную энергию могут происходить только для синглетных соединений (антипараллельный спин), и других условиях, реализуемых в настоящее время случайным образом. Объединение, отмеченное на этой фигуре, задумано для оптимизации упомянутых условий и, следовательно, значительного повышения энергетического выхода.

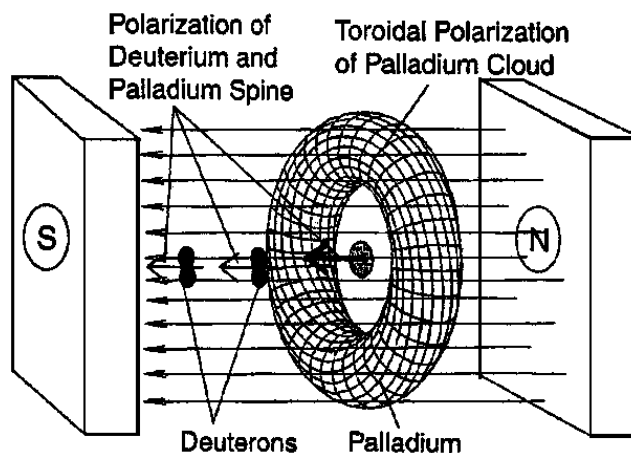


Рис. 7.7: [5] Еще одно промышленное применение адронной механики, находящееся сейчас в стадии разработки в *Clean Energies Technologies, Inc.* в Палм Харбор, Флорида. *Усиление выхода чистой энергии в электрохимических реакциях* (патент заявлен). Выделение аномального количества теплоты при электролитическом сжатии дейтрона в палладиевых электродах хорошо известно с первой половины 20-го века, хотя эффект, в общем, мал. Адронная механика установила физические законы, геометрии и условия, при которых выделяется теплота. Одним из них является синглетное соединение ядер палладия и дейтерия. Эти условия, в представленных опытах, реализуются случайным образом, поэтому производится совсем небольшое количество энергии. Объединение, отмеченное на этой фигуре, задумано для максимальной реализации этих условий, поэтому предсказывается увеличение выделения теплоты, пропорционально эффективности оборудования.

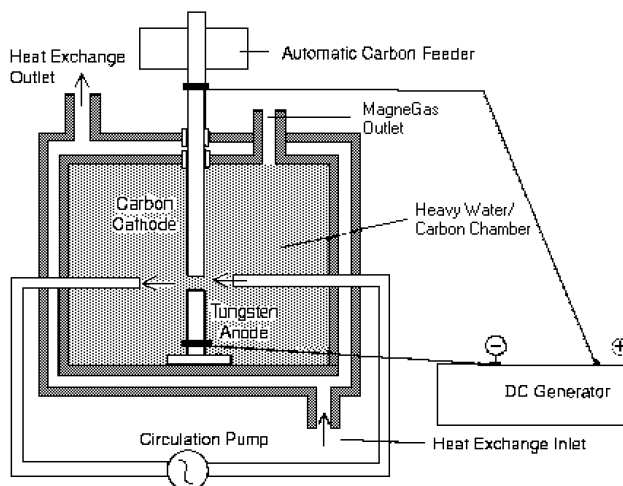


Рис. 7.8: [5] Еще одна новая чистая энергия Класса II, находящаяся в стадии разработки *Clean Energies Technologies, Inc.* в Палм Харбор, Флориды. Она имеет свое происхождение из изучения молнии и грома, и названа Адронным Азотным реактором (патент заявлен). Представленное здесь объединение задумано для существенной оптимизации геометрии и физических законов этого явления, в соответствии со стимулированным ядерным превращением (7.18), как описано в тексте, должной приводить к производству огромного количества теплоты (7.25), которая является чистой, в том смысле, что не испускается вредных излучений и не остается вредных отходов.

Заметим, что мгновенное наличие такого большого количества энергии обеспечивает единственно известное, научное объяснение грома. Все исследования, от начала физики, по происхождению грома не являлись научными, то есть, численными, интерпретируемыми исходя из величины необходимой энергии и ее мгновенного характера. Все "традиционные" интерпретации грома, пытающиеся сохранить старые доктрины, такие как обычные химические реакции, могут быть легко исключены на численной основе, из-за огромной недостаточности производства необходимого большого количества энергии в чрезвычайно малом объеме и в течении прохождения молнии.

Предполагается, что молния является экспериментальным подтверждением существования стимулированных низкой энергией ядерных пре-

вращений без выделения вредных излучений.

В заключение, следует отметить, что адронная механика обеспечивает единственно известное *инвариантное* воспроизведение всех остальных низкоэнергетических ядерных превращений, предсказываемых через *неунитарные* эффекты.

### 3) Новые чистые энергии Класса III, имеющие место на молекулярном уровне с вкладами энергий Классов I и II.

Адронные реакторы Класса I предназначены для получения энергии из адронов, например, через стимулированный распад нейтрона до более легкого протона и последующее использование энергетической разницы.

Адронные реакторы Класса II предназначены для получения энергии из ядер, например, через стимулированное превращение некоторых ядер в другие, меньшей массы, с последующим использованием энергетической разницы.

Адронные реакторы Класса III предназначены для получения энергии из молекул, например, через стимулированный переход от данных молекул к структурам с более низкой энергией, с последующим использованием энергетической разницы.

В качестве примера новых чистых энергий третьего класса, предсказываемых адронной механикой, можно привести *адронные реакторы молекулярного типа*, называемые также *PlasmaArcFlow<sup>TM</sup> реакторы*, в настоящее время промышленно производящиеся и продаваемые, которые описаны в последующих Разделах.

Адронные реакторы Классов I, II и III основаны на принципе стимулированного распада рассматриваемых связанных состояний через эффект резонанса, действующий на *непотенциальные* компоненты связывающих сил, наличие этого эффекта составляет главную новизну подхода по отношению к уже существующим квантовым разработкам.

Другими словами, основные физические принципы, лежащие в основе новых энергий Классов I, II и III, те же самые. Это существенным образом подразумевает, что подтверждение новой энергии одного данного класса поддерживает существование оставшихся двух типов энергий.

## 7.8 Использование PlasmaArcFlow реактора для переработки жидких отходов в магнегаз

Адронные реакторы молекулярного типа (Класса III), известные так же как

PlasmaArcFlow<sup>TM</sup> реакторы (защищено патентом с дополнительной международной патентной заявкой), впервые были построены Сантилли в 1998 г. в *Toups Technology Licensing, Inc.*, корпорации в Ларго, Флорида, под президентством Леона Тоупса. Промышленной разработкой реакторов занимаются теперь в *EarthFirst Technologies, Inc.* (новое название *Toups Technology Licensing, Inc.*) под президентством Джона Стантона, с помощью трех дочерних компаний, *USMagnegas*, *EuroMagnegas* и *AsiaMagnegas*. Последние компании имеют эксклюзивные права на новые технологии в соответствующих географических регионах [8].

PlasmaArcFlow реакторы используют внутрижидкостную электрическую дугу, постоянного тока, для достижения полного разложения радиоактивных жидких отходов на чисто сжигаемый горючий газ, называемый *магнегазом*<sup>TM</sup>, теплоту, отводимую с помощью теплообменников, и твердые осадки. Реакторы идеально подходят для переработки антифризных отходов, нефтяных, сточных вод и других загрязненных жидкостей, хотя они могут работать также на обычной пресной или морской воде. Однако, лучшей жидкостью для этих адронных реакторов является *сырая нефть*, которая перерабатывается в горючий газ, более чистый чем бензин и более дешевый, по сравнению со стоимостью очистки нефти (см. ниже).

Новая PlasmaArcFlow технология существенным образом основана на прохождении жидкостей через область погруженной электрической дуги постоянного тока, полученной с использованием, по крайней мере, одного углеродного электрода (см. Рис. 7.9). Электрическая дуга разлагает молекулы жидкости и углеродного электрода в плазму при температуре около 3500° К, которая состоит в основном из, по большей части, ионизированных атомов Н, О и С. Остальные, твердые субстанции, обычно выпадают в осадок на дно реактора, где они периодически собираются. Согласно технологии, плазма немедленно удаляется из области электрической дуги и затем контролируется рекомбинация Н, О и С в магнегаз, который пузырьками поднимается на поверхность, где собирается тем

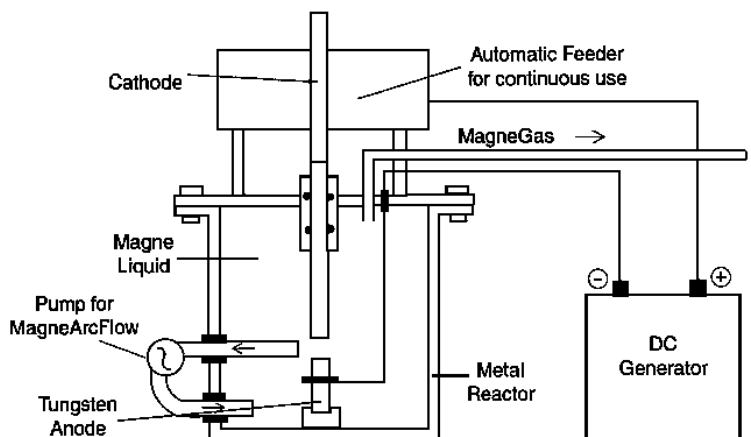


Рис. 7.9: [8] Схематический вид адронного реактора Сантилли. Эта фигура содержит схематический вид: источника постоянного тока; металлического резервуара, заполненного жидкостью предназначенной для переработки; погруженных электродов; потока жидкости сквозь электрическую дугу; выход пузырьков горючего газа на поверхность, где он скапливается. Тепло приобретаемое жидкостью утилизируется через теплообменники, не показанные на этой фигуре.

или иным способом.

Известное сродство С и О позволяет забрать кислород из плазмы, с образованием горючего СО. В свою очередь, изъятие СО из плазмы немедленно приводит к предотвращению его окисления до  $\text{CO}_2$ , поэтому содержание  $\text{CO}_2$  в газе сводится к незначительному количеству. Водород рекомбинирует в  $\text{H}_2$  и другие соединения (см. следующую Главу).

Для сравнения, следует напомнить, что другие методы, основанные на подводной электрической дуге, имеют стационарный характер плазмы, что подразумевает создание  $\text{CO}_2$  в большом процентном соотношении, приводящее к выбросу большего количества  $\text{CO}_2$ , чем это имеет место при использовании бензина или природного газа. То есть, получаемое таким образом топливо неприемлемо для окружающей среды.

Напомним, что первичным источником сильного нагрева создаваемого подводной электрической дугой является рекомбинация Н и О в  $\text{H}_2\text{O}$ , следующая за их разделением. Эта рекомбинация является причиной низкой эффективности подводной электрической дуги и, как следствие,

отсутствие промышленного применения до недавнего времени.

Напротив, в PlasmaArcFlow реакторе Н и О удаляются из области дуги немедленно после их образования, чем предотвращается их рекомбинация в  $H_2O$ , с вытекающим драматическим повышением эффективности, то есть, объемом горючего газа производимого на кВт·ч.



Рис. 7.10: [8] Изображение PlasmaArcFlow<sup>TM</sup> реактора с источником постоянного тока мощностью 75 кВт, который производит около 1000 куб. футов магнегаза в час, обладающего около 870 BTU на куб. фут, плюс около 500000 BTU тепла в час.

Важнейшей чертой PlasmaArcFlow реакторов является то, что они имеют большую эффективность, поэтому позволяет производство горючего газа по цене конкурентоспособной с ценами природных топлив, конечно, при рассмотрении сравнительно большого производства, включающего в себя доходы от переработки жидких отходов и утилизации выделяющегося тепла.

Феррари 308 GTSi и два автомобиля Honda Civic были переделаны корпорацией USMagnegas, Inc. для использования магнегаза в качестве топлива. Одна из этих машин была подвергнута EPA тестированию в сертификационной лаборатории на Лонг-Айленде, Нью-Йорк, подробно

описанному в Разделе 7.9, которое установило, что магнегазовый выхлоп удовлетворяет всем требованиям ЕРА, причем без каталитического конвертера, не содержит канцерогенных соединений, СО, или других токсичных веществ, содержание СО<sub>2</sub> снижено, по сравнению с бензиновыми выхлопами, примерно на 40% и в выхлопе содержится от 12% до 15% пригодного для дыхания кислорода.

В добавок к производству магнегаза как топлива, *PlasmaArcFlow* реакторы могут рассматриваться как весьма эффективное средство для производства новой формы водорода, называемой *MagH<sup>TM</sup>*, – безуглеродной версии магнегаза, с удельной теплотой сгорания много большей, чем у обычного водорода и более низкой ценой, чем у последнего.

При чтении этой главы, читатель должен, следовательно, иметь в виду, что, словами Джона Стантона, президента *EarthFirst Technologies, Inc.*, "новая технология *PlasmaArcFlow* реакторов эволюционна, а не революционна, так как создана, прежде всего, для нового использования сырой нефти, поршневых двигателей и водородных производств".

## 7.9 Выполнение для магнегаза требований ЕРА без каталитического конвертера

В то время как химический состав магнегаза остается пока неизвестным, из-за своей аномальности (см. оставшиеся разделы), химический состав продуктов сгорания магнегаза полностью обычен и был измерен с достаточной точностью.

Тестирование было произведено для автомобиля Honda Civic Natural Gas Vehicle (NGV) VIN, номер 1HGEN1649WL000160 (белая машина на Рис. 7.11), 1998 года выпуска, произведенной для использования в качестве топлива сжатого природного газа (СПГ). Машина была куплена новой в 1999 г. компанией *USMagnegas, Inc.*, в Ларго, Флорида, и переделана под использование сжатого магнегаза (СМГ) в начале 2000 г. Все тесты, упомянутые в этом разделе, были проведены с магнегазом полученным переработкой антифризных отходов. Переделка для перехода с СПГ на СМГ заключалась в следующем:

- 1) замена СПГ на СМГ в 100 литровом топливном баке при 3600 psi, который содержит около 1000 куб. футов магнегаза;
- 2) удаление кислородного датчика, так как магнегаз содержит при-



мерно в 20 раз больше кислорода в выхлопе, чем природный газ, поэтому данные выдаваемые компьютером, предназначенным для природного газа, являются ошибочными; и

3) установление многоискровой системы зажигания, для улучшения сгорания магнегаза.

Все остальные части машины были оставлены без изменений, включая ее компьютер.

Сравнительные тесты в различных режимах (ускорение, полная загрузка и т.д.) показали, что *мощность двигателя работающего на сжатом магнегазе полностью эквивалентна таковой для того же двигателя, работающего на сжатом природном газе.*

Сравнительные тесты по потреблению топлива также показали сходные результаты. Действительно, измерения потребления магнегаза в час, в обычных городских условиях, дали следующие результаты:

Вместимость топливного бака:	1096 куб. футов при 3500 psi,
Время движения:	около 2,5 часов,
Потребление:	около 7 куб. футов в минуту.

(7.26)

Как можно видеть, 1500 куб. футов магнегаза при 5000 psi, сжатые в топливном баке, обеспечивают время езды около 4 часов, которого вполне достаточно для регулярных поездок на работу и дальних путешествий. Измерения расхода магнегаза на единицу расстояния еще только проводятся, но ожидается, что они дадут те же результаты, что и для природного газа, а именно,

Эквивалент галлона бензина: 120 куб. футов магнегаза. (7.27)

Предварительные измерения выхлопа при сгорании магнегаза были проведены лабораторией *National Technical Systems, Inc.*, в Ларго, Флорида, и привели к следующему составу выхлопа при правильном сгорании:

Водяной пар:	50% - 60%,
Кислород:	10% - 12%,
Углекислый газ:	6% - 7%,
Баланс:	атмосферные газы,
Углеводороды, окись углерода, окись азота:	порядка одной миллионной (ppm).

(7.28)

Детальные измерения выхлопа магнегаза были затем проведены ЕРА-сертифицированной лабораторией *Liphardt & Associates*, Long Island, New York, под руководством Питера ди Бернарди (*Peter di Bernardi*), путем процедуры варьируемого теста (Varied Test Procedure, VTP) согласно правилу ЕРА 40-CFR, часть 86.

Эти ЕРА тесты состояли из трех отдельных и последовательных тестов проведенных на компьютеризированном динамометре. Первый и третий тесты проводились при смоделированной езде в гору при скорости 60 миль в час, в то время как второй тест состоял в моделировании обычного городского движения.

Были взяты три соответствующие пробы с продуктами выхлопа и четвертая проба содержала атмосферные загрязнения. Окончательные измерения, выраженные в граммах на милю (г/м), давались средним от измерений трех проб ЕРА теста, минус измерения атмосферного загрязнения в четвертой пробе.

*Liphardt & Associates* получили следующие три измерения:

**1) Измерение магнегазового выхлопа с каталитическим конвертером:**

Углеводороды:	0.026 г/м, или 0.063 ЕРА при стандарте 0.41 г/м;
Окись углерода:	0.262 г/м, или 0.077 ЕРА при стандарте 3.40 г/м;
Окиси азота:	0.281 г/м, или 0.28 ЕРА при стандарте 1.00 г/м;
Углекислый газ:	235 г/м, или около 6%; ЕРА не имеет стандарта по $\text{CO}_2$ в настоящее время;
Кислород:	от 9.5% до 10%; ЕРА не имеет стандарта для кислорода в настоящее время.

(7.29)

Вышеуказанные тесты установили важное свойство, что *магнегазовый выхлоп, с использованием каталитического конвертера, подразумевает снижение около 1/15 от ЕРА требований.*

**2) Измерения магнегазового выхлопа без каталитического конвертера для того же автомобиля и при тех же условиях,**

как и в случае (1):

Углеводороды:	0.199 г/м, или 0.485 ЕРА при стандарте 0.41 г/м;	
Окись углерода:	2.750 г/м, или 0.808 ЕРА при стандарте 3.40 г/м;	(7.30)
Окись азота:	0.642 г/м, или 0.64 ЕРА при стандарте 1.00 г/м;	
Углекислый газ:	266 г/м, или около 6%;	
Кислород:	от 9.5% до 10%.	

По результатам последних тестов, лаборатория *Liphardt & Associates* сделала заявление, что *выхлоп магнегаза отвечает требованиям ЕРА даже без каталитического конвертера*. Раз так, магнегаз может использоваться в *старых автомобилях*, на которых не устанавливался каталитический конвертер, с соблюдением всех норм ЕРА стандарта.

**3) Измерения выхлопа при использовании природного газа без каталитического конвертера, для той же машины и при тех же условиях как в случае (1):**

Углеводороды:	0.380 г/м, или 0.926 ЕРА при стандарте 0.41 г/м;	
Окись углерода:	5.494 г/м, или 1.615 ЕРА при стандарте 3.40 г/м;	(7.31)
Окиси азота:	0.732 г/м, или 0.73 ЕРА при стандарте 1.00 г/м;	
Углекислый газ:	646.503 г/м, или около 9%;	
Кислород:	от 0.5% до 0.7%.	

Последние тесты устанавливают важное свойство, что *при сгорании природного газа выделяется примерно в 2.5 раза больше CO<sub>2</sub>, чем при сгорании магнегаза без каталитического конвертера*. Заметим, что, как хорошо известно, *выхлоп природного газа без каталитического конвертера не удовлетворяет требованиям ЕРА*

Для дополнительного сравнения с вышеприведенными измерениями, приведем данные для подобного же автомобиля Honda использующего в качестве топлива индолин (версия бензина), полученные в той же лаборатории, после тех же ЕРА процедур:

**4) Измерения бензинового (индоленового) выхлопа, проведенные на двухлитровой Honda K1A:**

Углеводороды:	0.234 г/м равно 9 кратному магнегазовому выбросу;	
Окись углерода:	1.965 г/м равно 7.5 кратному магнегазовому выбросу;	
Окиси азота:	0.247 г/м равно 0.86 кратному магнегазовому выбросу;	(7.32)
Углекислый газ:	458.655 г/м равно 1.95 кратному магнегазовому выбросу,	
Кислород:	нет данных.	

Вышеприведенные данные устанавливают превосходство магнегаза над природным газом и бензином с точки зрения сохранения окружающей среды. Следует сделать следующие замечания:

1) Магнегаз не содержит (тяжелых) углеводородов, так как создается при температуре  $3500^{\circ}$  К. Следовательно, измеренные количества углеводородов появляются в следствии сгорания масла, поступающего из магнегазового компрессионного насоса или из двигателя.

2) Окись углерода является топливом для магнегаза (в то время как она же является продуктом сгорания бензина или природного газа). Следовательно, любое присутствие СО в выхлопе свидетельствует о неполном сгорании.

3) Наибольшее количество измерений получено из первой и третьей частей ЕРА теста при экстремальных условиях, так как, на протяжении обычной городской езды, магнегазовые выхлопы практически не содержат загрязняющих атмосферу веществ, как показано на Рис. 7.13.

4) Окислы азота не обязаны своим происхождением топливу (магнегазу или любому другому), но возникают из-за большой температуры двигателя и других факторов, поэтому могут свидетельствовать о качестве охлаждающей двигатель системы. Следовательно, для каждого данного топлива, включая магнегаз, количество окислов азота может быть понижено улучшением охлаждающей системы и другими мерами.

5) Упомянутые измерения для магнегазового выхлопа не относятся к лучшему из возможных способов сжигания магнегаза, а к случаю использования автомобилей оборудованных карбюраторной системой предназначенной для сжигания природного газа. В этом случае, изначально, преследовалась цель доказать взаимозаменяемость магнегаза и при-

родного газа, без каких-либо крупных переделок, сохраняя при этом те же характеристики и потребление. Измерения для двигателя специально рассчитанного на потребление магнегаза находятся в стадии подготовки.

Мы должны также отметить значительные усилия на пути дальнейшего понижения содержания  $\text{CO}_2$  в выхлопных газах, при сжигании магнегаза, использованием сменных губчатых картриджей абсорбирующих  $\text{CO}_2$ , располагающихся в выхлопной системе (патент заявлен). Дополнительные исследования ведутся в направлении *сжижения магнегаза каталитически* (а не обычным путем), ожидается, что жидкость при этом, будет обладать аномально высокой удельной теплотой сгорания, по сравнению с жидкостью полученной обычным способом, и, в следствии этого, ожидается понижение вредных выбросов. Как результат этих усилий, достижение выхлопов существенно более свободных от загрязнений и  $\text{CO}_2$ , хотя и богатых кислородом, оказывается в пределах технологической досягаемости.

## 7.10 Аномальный химический состав магнегаза

Как изучено в предыдущем разделе, химический состав продуктов сгорания магнегаза полностью известен. Однако, химический состав самого магнегаза остается неизвестным вплоть до настоящего времени (весна 2001 г.). Это неожиданное препятствие, особенно для такого *легкого* газа как магнегаз, возникает по ряду причин.

Для начала, множество тестов в различных аналитических лабораториях, рассмотренные в Главе 8, установили, что химический состав магнегаза не может быть определен через обычные газохроматографические масс-спектрометрические (GC-MS) измерения, так как этот газ, оказывается, характеризуется большими пиками с макроскопическим процентным содержанием, всюду, вплоть до молекулярного веса в 1000 а.м.у., и эти пики остаются индивидуально нераспознаваемыми MS компьютером после перебора всех известных молекул.

Как также отмечено в Главе 8, химическая структура магнегаза, равным образом, не проясняется с помощью ИК детекторов (IRD), так как новые пики характеризующие магнегаз вообще не дают ИК сигнала, поэтому предполагается наличие связей не валентного типа (так как пред-

ставляется невозможным, чтобы все эти огромные кластеры были бы симметричны).

Кроме того, ИК сигнал обычных молекул, таких как CO, оказывается *мутированным* (говоря языком адронной механики), что приводит к появлению новых пиков, которые очевидно свидетельствуют о *новых* внутренних связях в *обычных* молекулах.

В добавок к вышесказанному, существует драматическое несоответствие между предсказанием квантовой химии, об удельной теплоте сгорания магнегаза, и физической реальностью. Например, при производстве PlasmaArcFlow реакторами, электрической дугой с, по крайней мере, одним углеродным электродом и чистой водой, квантовая химия предсказывает, что магнегаз должен являться смесью 50% H<sub>2</sub> и 50% CO, со следами O<sub>2</sub> и CO<sub>2</sub>.

Это предсказание драматически опровергается тем фактом, что и CO, и CO<sub>2</sub> пики не появляются при MS сканировании в предсказываемом процентном соотношении, в то время как они появляются при ИК сканировании, хотя и в мутированной форме.

Кроме того, квантовая химия предсказывает, что отмеченный состав, содержащий 50% H<sub>2</sub> и 50% CO, должен иметь удельную теплоту сгорания около 315 BTU/куб. фут, то есть, не достаточную для того чтобы резать металл. Это предсказание также опровергается тем явлением, что магнегаз режет металл, по крайней мере, на 50% быстрее, чем ацетилен (который имеет удельную теплоту сгорания 2300 BTU/куб. фут).

Проявленные черты при резке металла более подходят плазменной резке, например резке металла плазмой ионизированных атомов водорода, которые рекомбинируют в H<sub>2</sub> при охлаждении поверхностью металла, отсюда высвобождается достаточное количество энергии для резки. Проблема заключается в том, что магнегаз имеет комнатную температуру, когда используется для резки металла, и горит в обычных условиях, поэтому требуются принципиально новые подходы для правильной интерпретации этого явления.

Тем не менее, черты плазменной резки указывают на присутствие в структуре магнегаза отдельных атомов и димеров, которые рекомбинируют при сгорании, поэтому проявляются черты сходные с плазменной резкой.

Действительно, как также показано далее, GC-MS сканирования отмечают присутствие в аномальных пиках *отдельных атомов водорода, кислорода и углерода*, очевидно, в добавок к отдельным молекулам.

В заключение, состав магнегаза по Н, С и О атомам может быть легко определен из типа жидкости используемой в реакторе. Например, когда магнегаз производится из воды, он состоит из 50% Н, 25% О, и 25% С, с соответствующими процентными содержаниями других жидкостей, таких как антифриз, сырая нефть и т.д.

Однако все попытки свести химический состав магнегаза к обычным молекулам, предпринятые автором, а также независимыми химиками, опровергались множеством экспериментальных данных.

В частности, любая уверенность, что магнегаз полностью состоит из обычных молекул, таких как Н<sub>2</sub> и СО, опровергается экспериментальными данными полученными с помощью GC-MS и ИК детекторов.

Единственно возможным научным заключением, на данный момент, является то, что *магнегаз состоит из новых химических соединений*, изученных в Главе 8.

## 7.11 Аномальный энергетический баланс адронных молекулярных реакторов

Как это хорошо известно, коэффициент полезного действия любого оборудования *меньше единицы*, в том смысле, что из принципа сохранения энергии и из-за неизбежных энергетических потерь, *отношение между полезной работой и полной энергией, затраченной на ее выполнение, меньше единицы*.

В случае производства магнегаза, полная произведенная энергия является суммой энергии содержащейся в магнегазе и теплоты приобретенной жидкостью, в то время как полная потребленная энергия является суммой электрической энергии, использованной для производства магнегаза, плюс энергия содержащаяся в перерабатываемой жидкости. Следовательно, из принципа сохранения энергии, мы имеем энергетический баланс:

$$\frac{\text{Полная произведенная энергия}}{\text{Полная потребленная энергия}} = \frac{E_{mg} + E_{heat}}{E_{electr} + E_{liq}} < 1. \quad (7.33)$$

Важной чертой адронных реакторов является то, что их *коммерческий КПД больше единицы*, а именно, отношение между полной произведенной энергией и только электрической энергией использованной на ее про-

изводство больше, чем один,

$$\frac{E_{mg} + E_{liq}}{E_{electr}} > 1. \quad (7.34)$$

В этом коммерческом расчете энергия содержащаяся в жидкости не учитывается, так как жидкие отходы подразумевают дополнительный доход, а не расход денег.

Как результат, адронные молекулярные реакторы Сантилли могут рассматриваться как реакторы способные добывать энергию из молекул жидкости, во многом тем же путем, каким ядерные реакторы могут добывать энергию из ядер. Важным отличием первых реакторов является то, что они не выделяют вредной радиации и не оставляют вредных отходов, в то время как последние реакторы обладают и тем, и другим свойством.

Энергия, используемая для производства угольных стержней, стали для корпуса реактора и т.д. игнорируется в коммерческом соотношении (7.34), так как ее численное значение на кубический фут производимого магнегаза несущественно.

Коммерческий КПД адронных реакторов, большой единицы, существенно важен для производства горючего магнегаза и магнито-поляризованного водорода ( $\text{MagH}^{TM}$ ) по ценам конкурентоспособными с обычными природными топливами.

Первая проверка коммерческого КПД, большого единицы, (7.34) была сделана 18 и 19 сентября, 1998 г., для самого первого, управляемого вручную, прототипа адронных реакторов, независимой лабораторией *Motorfuelers, Inc.*, Ларго, Флорида, и включала в себя (см. [8]):

1) Калибровочный кумулятивный ваттметр, обеспеченный компанией *WattWatchers, Inc.*, Манчестер, Нью-Гемпшир, который использовался для измерения электроэнергии получаемой от силовых линий на каждый кубический фут произведенного магнегаза;

2) Сверка всех размеров, включая объем колонны, используемой для производства газа, объем жидкости используемой в процессе и т.д.;

3) Повторение многочисленных измерений по производству магнегаза и его теплоты сгорания, вычисления средних значений, вычисления погрешностей и т.д.

В течении двух дней тестирования, техники *Motorfuelers* запускали электрогенератор постоянного тока и производили магнегаз, который затем перемещался по шлангу в прозрачную плексигласовую башню, за-



полненную чистой водой, с маркировкой отмечающей вытеснение одного кубического фута воды произведенным магнегазом.

После производства каждого кубического фута, газ откачивался из башни, башня снова наполнялась водой и производился новый кубический фут магнегаза. Процедура повторялась несколько раз, чтобы иметь достаточную статистику. Электроэнергия с электрического щита, требуемая для производства каждого кубического фута магнегаза, измерялась с помощью предварительно откалиброванного кумулятивного ваттметра.

В результате нескольких измерений, *Motorfuelers, Inc.* установили [8], что производство одного кубического фута магнегаза, на первом первом прототипе, требует, в среднем, количество энергии:

$$E_{electr} = 122 \text{ W/cf} = 416 \text{ BTU/cf} \pm 5\%. \quad (7.35)$$

Следует подчеркнуть, что это электроэнергия получаемая с электрического щита, поэтому включает в себя внутренние потери выпрямителя. Мы можем добавить, что дуга получаемая с использованием только 65% измеренной электроэнергии, соответствует

$$E_{electr} = 79.3 \text{ W/cf} = 270 \text{ BTU/cf}. \quad (7.36)$$

Теплота сгорания магнегаза была измерена в сравнении с теплотой сгорания природного газа (1,050 BTU/cf). С этой целью, техники *Motorfuelers, Inc.* использовали две одинаковые емкости, одна с природным газом и одна с магнегазом, при одинаковом начальном давлении 110 psi. Обе емкости использовались до понижения давления в них до 5 psi, при одинаковом газовом потоке, для повышения температуры одинакового количества воды в одном и том же резервуаре и при одной начальной температуре. Отношение разностей температур, очевидно, пропорционально отношению соответствующих теплот сгораний.

После нескольких измерений, *Motorfuelers, Inc.* сертифицировало [8], что магнегаз произведенный из антифризных отходов, используемых в реакторе, имеет теплоту сгорания около 80% от таковой для природного газа, соответствующую

$$E_{mg} = 871 \text{ BTU/cf} \pm 5\%. \quad (7.37)$$

Все другие, более научные, тестирования теплоты сгорания магнегаза, проведенные в различных академических и промышленных лабораториях, не дали выразительных результатов по множеству причин.

Несмотря на их эмпирический характер, измерения теплоты сгорания сделанные *Motorfuelers, Inc.* остаются наиболее правдоподобными.

Следует заметить, что значение 871 BTU/cf является нижней границей. Действительно, автомобильные тесты, рассмотренные в Разделе 7.9, установили, что энергетический выход двигателей внутреннего сгорания, питаемых магнегазом, полностью эквивалентен использованию природного газа, поэтому более реальным примерным значением является

$$E_{mg} = 1,000 \text{ BTU/cf.} \quad (7.38)$$

В ходе тестов было очевидно, что температура жидких отходов в реакторе быстро повышается, до такой степени, что тестирования должны были периодически прерываться, для охлаждения оборудования, чтобы предотвратить вскипание жидкости с последующим повреждением изоляционных прокладок.

После консервативных расчетов техники *Motorfuelers, Inc.* сертифицировали, что совместно с производством 1 cf магнегаза, жидкость приобретает 285 BTU/cf теплоты, плюс 23 BTU/cf теплоты приобретает металлическим корпусом реактора, итого

$$E_{heat} = 308 \text{ BTU/cf.} \quad (7.39)$$

В заключение, среднее значение электроэнергии  $122 \text{ W} = 416 \text{ BTU}$ , взятое с электрического щита, производит один кубический фут магнегаза с теплотой сгорания 871 BTU/cf, плюс количество теплоты на нагрев жидкости, скромно оцениваемое как 308 BTU/cf. Эти независимые сертификации устанавливают *коммерческий КПД, превосходящий единицу*, первого, с ручным управлением, адронного реактора, с возможной ошибкой в  $\pm 5\%$  :

$$\frac{871 \text{ BTU/cf} + 308 \text{ BTU/cf}}{416 \text{ BTU/cf}} = 2.83. \quad (7.40)$$

Заметим, что если рассматривать электроэнергию, используемую для получения дуги, соответствующую  $79.3 \text{ W/cf} = 270 \text{ BTU/cf}$ , то мы получим следующий коммерческий КПД, больший единицы:

$$\frac{871 \text{ BTU/cf} + 285 \text{ BTU/cf}}{270 \text{ BTU/cf}} = 4.36. \quad (7.41)$$

При проведении вышеуказанной сертификации, специалисты *Motorfuellers, Inc.* отметили, что электрическая дуга имела плохую эффективность, так как управлялась вручную, поэтому возникали большие перепады напряжения, временами процесс вообще прерывался и требовалось его восстановление.

Техники *Motorfuellers, Inc.* заметили также, что теплота сгорания магнегаза (7.37) является минимальной, так как измерялась в сравнении с природным газом, с форсункой не предназначенной для магнегаза, но легко доступной с коммерческой точки зрения, и то, что при этом выделялось большое количество углеродных соединений, свидетельствует о неоптимальном горении, в то время как горение природного газа было совершенно чистым.

Немедленно после вышеуказанной сертификации коммерческого КПД, было проведено множество измерений касающихся безопасности и влияния на здоровье адронных молекулярных реакторов, включая измерения возможных излучений нейтронов, жестких фотонов и других излучений.

Дэвид А. Эрнандес (David A. Hernandez), директор *Radiation Protection Associates*, Дейд Сити, Флорида, проводил обширные исследования с помощью множества детекторов излучения, расставленных вокруг реактора, уделяя особое внимание излучениям, которые могут проникнуть сквозь мощные металлические стенки реактора, нейтронам низких и высоких энергий и жесткому электромагнитному излучению.

В присутствии свидетелей, ни один из множества датчиков, расположенных в непосредственной близости к реактору, не зафиксировал какого-либо излучения вообще. Как результат, *Radiation Protection Associates* выдала официальный сертификат, устанавливающий, что:

"PlasmaArcFlow<sup>TM</sup> реакторы Сантilli совершенно удовлетворяют регулирующим правилам четвертого раздела Административного Кодекса Флориды, Глава 64-Е. Соответственно, реакторы декларируются как не дающие радиоактивных утечек".

Последующие сертификации, более поздних адронных реакторов, работающих при атмосферном давлении, при 50 kW и используемые для переработки антифризных отходов, сделанных, в настоящее время, полностью автоматизированными, дали следующие измерения:

$$E_{mg} = 871 \text{ BTU/cf}, \quad (7.42a)$$

$$E_{liq} = 326 \text{ BTU/cf}, \quad (7.42b)$$

$$E_{electr} = 100 \text{ W/cf} = 342 \text{ BTU/cf}, \quad (7.42c)$$

приводящие к следующему, превосходящему единицу, коммерческому КПД автоматизированных реакторов, перерабатывающих антифриз, при, примерно, 50 kW и атмосферном давлении:

$$\frac{871 \text{ BTU/cf} + 326 \text{ BTU/cf}}{342 \text{ BTU/cf}} = 3.5. \quad (7.43)$$

Когда в реакторе использовалась обычная пресная вода, различные измерения установили коммерческий КПД около 2.78.

Следует отметить, что превосходящий единицу коммерческий КПД адронных реакторов нелинейно возрастает с ростом мощности, давления и температуры. Адронные реакторы, рассчитанные на 250 kW, конструируются для работы при 250 psi и 400° F. Эти последние реакторы имеют коммерческий КПД значительно выше, чем (7.43).

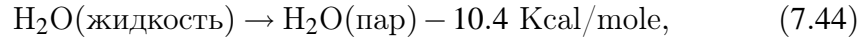
Происхождение превосходящего единицу коммерческого КПД (7.43) интригующе и полностью неизвестно до настоящего времени. Действительно, обычные химические структуры и реакции, изученные Арынгазиным и Сантилли [9], оказались недостаточными для количественного описания, поэтому требуется новая химия.

Следуя работе Арынгазина и Сантилли [9], нашей целью является расчет электроэнергии необходимой для создания одного кубического фута плазмы в PlasmaArcFlow реакторах, с использованием обычной квантовой химии. Только после фиксирования отклонений экспериментальных данных от предсказаний квантовой химии, полностью становится очевидной необходимость в покрывающей адронной химии.

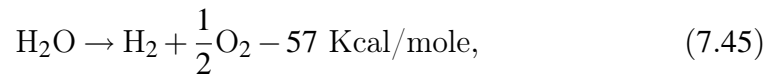
С этой целью, мы делаем следующие предположения. Во первых, мы рассматриваем PlasmaArcFlow реактор, работающий на дистиллированной воде, с электрической дугой постоянного тока между расходуемым чисто графитным катодом и не расходуемым вольфрамовым анодом. Как отмечено ранее, упомянутые реакторы обладают превосходящим единицу коммерческим КПД и при использовании чистой воды. Следовательно, квантовохимические предсказания могут быть эффективно изучены при сделанных предположениях, без особых усложнений. Мы предполагаем также, что вода и твердый графитный стержень имеют начальную температуру 300° K и, что плазма, создаваемая электрической дугой постоянного тока имеет температуру 3300° K.

Электрическая энергия, необходимая для создания одного кубического фута плазмы, должна представляться следующими переходами (см. Дополнение 7.А для основных единиц и их перевода):

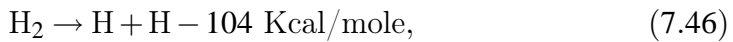
1) Испарение воды согласно известной реакции



2) Разделение молекулы воды,

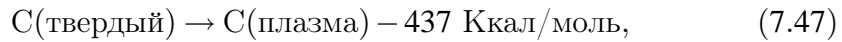


3) Разделение молекулы водорода,



4) Ионизация Н и О, требующая, в общем, 1197 Ккал.

Для испарения и ионизации угольного стержня мы имеем:



и полностью получаем 1634 Ккал на 4 моля плазмы, то есть

$$\begin{aligned} 408.5 \text{ Kcal/mol} &= 0.475 \text{ kWh/mol} = 1621 \text{ BTU/mol} = \\ &= 515.8 \text{ Kcal/cf} = 0.600 \text{ kWh/cf} = 2,047 \text{ BTU/cf}, \end{aligned} \quad (7.48)$$

к которой мы должны добавить электроэнергию необходимую для нагревания нерасходуемого вольфрамового анода, которая оценивается в 220 BTU/cf, что приводит к полной энергии 2267 BTU/cf. Эта полная энергия, однако, является только энергией необходимой для создания электрической дуги, но не включает а себя потерь, возникающих при выпрямлении переменного тока. Полагая, что выпрямление, такое как используемое в PlasmaArcFlow реакторах, имеет эффективность 70%, мы получаем полную, потребляемую от источника, электроэнергию, необходимую для производства одного кубического фута плазмы:

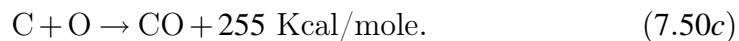
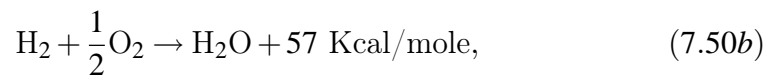
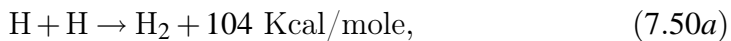
$$\text{Total Electric Energy} = 3,238 \text{ BTU/cf} = 949 \text{ W/cf}. \quad (7.49)$$

Вычислим теперь полную энергию, производимую PlasmaArcFlow реакторами, согласно квантовой химии. С этой целью, мы предположим,

что произведенный газ состоит из 50% водорода и 50% окиси углерода, с игнорированием следов углекислого газа. Последний действительно практически не производится PlasmaArcFlow реакторами, как это отмечено ранее. В добавок, CO<sub>2</sub> не горит. Следовательно, предложение игнорирования CO<sub>2</sub> в газе увеличивает предсказание энергетического выхода согласно квантовой химии, что и желательно.

Напомним, что накал подводной дуги, по большей части, обусловлен горением водорода и кислорода с превращением обратно в воду, которая смешивается с водой окружающей электрическую дугу, что вносит не поддающийся оценке вклад к пузырькам горючего газа поднимающимся на поверхность. Следовательно, любые расчеты полной произведенной энергии должны включать в себя предположение о процентном количестве изначальных H и O, которые рекомбинировали в H<sub>2</sub>O (очевидность этой рекомбинации устанавливается производством воды при переработке адронным реактором любого типа масла).

В заключение, расчеты производимой PlasmaArcFlow реакторами энергии требуют: рассмотрения охлаждения плазмы от 3300° К до 300° К с соответствующим выделением энергии; знакомые реакции

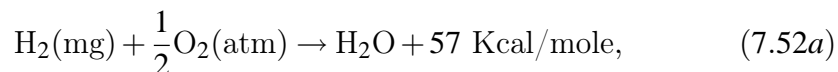


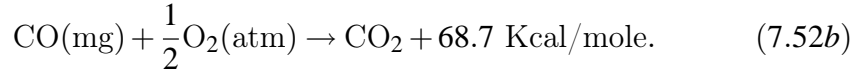
При предположении 100% эффективности (то есть, отсутствии рекомбинации воды), полная произведенная энергия дается как

$$398 \text{ Kcal/mole} = 1,994 \text{ BTU/cf}. \quad (7.51)$$

Предполагая, что вся энергия необходимая для нагревания нерасходуемого вольфрамового стержня поглощается жидкостью окружающей электрическую дугу, в виду его непрерывного охлаждения до температуры PlasmaArcFlow реактора, мы получаем полную тепловую энергию равной 2254 BTU/cf.

В добавок, мы имеем энергию произведенного газа. С этой целью мы напомним следующие известные реакции:





В следствии этого, 50%-50% смесь обычных газов  $\text{H}_2$  и  $\text{CO}$  дает:

$$\begin{aligned} &\text{Обычная теплота сгорания магнегаза полученного из воды} = \\ &= 62.8 \text{ Kcal/mole} = 249.19 \text{ BTU/mole} = 315 \text{ BTU/cf.} \end{aligned} \quad (7.53)$$

Следовательно, полный энергетический выход PlasmaArcFlow реакторов дается следующим:

$$E(\text{mg}) + E(\text{heat}) = 315 \text{ BTU/cf} + 2,254 \text{ BTU/cf} = 2,569 \text{ BTU/cf.} \quad (7.54)$$

Отсюда следует, что энергетическая эффективность PlasmaArcFlow реакторов ниже единицы для случая максимально возможной эффективности,

Энергетическая эффективность предсказываемая квантовой химией =

$$= \frac{\text{Total energy out}}{\text{Electric energy in}} = \frac{E_{\text{mg}} + E_{\text{heat}}}{E_{\text{electr}}} = \frac{2,569 \text{ BTU/cf}}{3,238 \text{ BTU/cf}} = 0.79. \quad (7.55)$$

Возможно показать, что для случая 50% эффективности (то есть, когда 50% изначальных  $\text{H}$  и  $\text{O}$  рекомбинируют в воду) полный энергетический выход, очевидно, понижается. Для деталей мы отсылаем заинтересованного читателя к работе Арынгазина и Сантилли [9].

## 7.12 Заключительные замечания

Наиболее важным экспериментальным результатом, представленным в этой главе, является независимая сертификация адронных реакторов молекулярного типа, как имеющими коммерческий КПД превосходящий единицу, то есть, отношение между полной произведенной энергией и электроэнергией, затраченной на ее производство, много больше единицы.

Из принципа сохранения энергии тогда следует, что дополнительная энергия черпается из перерабатываемых жидкостей, а именно, что упомянутые адронные реакторы могут добывать энергию из жидкостей, начиная с воды и продолжая затем более энергетически эффективными жидкостями богатыми  $\text{H}$ ,  $\text{C}$  и  $\text{O}$ , такими как природные топлива.

Вышеизложенные экспериментальные данные были получены корпорацией США *EarthFirst Technologies, Inc.*, после множества проверок независимыми лабораториями. Например, измерение электроэнергии, используемой для производства одного кубического фута магнегаза, было произведено при участии: компании производящей кумулятивные ваттметры, используемых при измерениях, *WattWatchers, Inc.*, Нью-Хэмпшир; независимой компании, которая проверяла калибровку упомянутых ваттметров, *Tampa Transformers, Inc.*; компании, которая производила трансформаторы, используемые для питания реакторов, *Miller Corporation*, для того, чтобы быть уверенными, что избранные измерения потребления мощности были точными; независимой лаборатории, которая действительно проводила все измерения, *Motorfuelers, Inc.*, Clearwater, Флорида; и ученых из *Institute for Basic Research*, Палм Харбор, Флорида, которые наблюдали организацию измерений и проверяли все результаты.

Наиболее важной информацией, представленной в предыдущем разделе, является то, что квантовая механика и квантовая химия не дают производство энергии путем переработки жидкости, – воды или какой-либо другой, – поэтому приводят к драматическому разногласию с экспериментальными данными, касающихся таких социальных проблем, как необходимость новой чистой энергии.

Дополнительное драматическое разногласие существует между предсказаниями квантовой механики и квантовой химии и экспериментальными данными относительно энергетической эффективности. Действительно, как в деталях проиллюстрировано в предыдущем разделе, квантовая механика и квантовая химия предсказывают необходимость  $3238 \text{ BTU/cf} = 949 \text{ W/cf}$  для производства одного кубического фута смеси  $\text{H}_2$  и  $\text{CO}$  в соотношении один к одному. Те же дисциплины предсказывают, что полная произведенная энергия будет равна  $2569 \text{ BTU/cf}$ .

Сравнение этих теоретических предсказаний с экспериментальными данными, полученными на *PlasmaArcFlow* реакторах, работающих на воде, установило следующие драматические отклонения:

- 1) предсказанная электроэнергия для производства одного кубического фута магнегаза,  $949 \text{ W/cf}$ , почти в десять раз превышает электроэнергию действительно замеренную на источнике, что дает десятикратную ошибку в сторону увеличения;

- 2) предсказанное количество теплоты, выделяющееся в процессе формирования магнегаза,  $1994 \text{ BTU/cf}$ , также примерно в десять раз боль-



ше, чем действительно измерено для реактора, что дает десятикратную ошибку в сторону уменьшения; и

3) предсказанная теплота сгорания магнегаза, произведенного из воды, 315 BTU/cf, по крайней мере, в два раза меньше действительно измеренной, что дает двукратную ошибку в сторону уменьшения.

Очевидно, что все эти отклонения являются слишком огромными, чтобы допускать внушающее доверие согласование экспериментальных данных с установленными доктринами. Следовательно, адронные реакторы молекулярного типа являются сильнейшими доказательствами необходимости в обобщающих теориях, адаптированных к реальности.

В частности, экспериментальные данные устанавливают необходимость в:

1) новой механике, сверхпроводимости и химии для количественной интерпретации разделения воды и других жидкостей с положительным энергетическим балансом. Принятым здесь направлением исследований являются адронные теории, как отмечено в Разделе 7.7, где особое внимание уделяется контактному, непотенциальному, негамильтоновому и неунитарным эффектам, так как, как отмечено ранее, положительный энергетический баланс невозможен для гамильтоновых теорий. Исследования в этом направлении продолжается и результаты будут изложены в ближайшее время.

2) новых химических соединений, способных объяснить аномальную теплоту сгорания магнегаза и его поведение. Этим исследованиям посвящена следующая глава.

3) новых технологиях сжигания, сжатия и сжижения магнегаза, которым посвящена работа [8].

Очевидно, что достижение более глубокого знания вышеуказанных аспектов позволит их оптимизацию, что приведет к значительным продвижениям в направлении удовлетворения социальных потребностей в новых чистых энергиях и топливах.

## Дополнение 7.А

Таблица 7.1: Основные единицы и их перевод.

1 kWh	860 Kcal = 3413 BTU	1 cf	28.3 liters
1 Kcal	3.97 BTU	1 cf <sup>a</sup>	1.263 mol
1 eV	$3.83 \times 10^{-23}$ Kcal	$N_A$	$6.022 \times 10^{23}$ mol <sup>-1</sup>
1 cal	4.18 J	$N_A k/2$	1 cal/(mol·K)
1 mole <sup>a</sup>	22.4 liters = 0.792 cf	$R$	8.314 J/(mol·K) = 1.986 cal/(mol·K)

<sup>a</sup> Для идеального газа, при нормальных условиях.

Таблица 7.2: Удельные теплоемкости.  $p = 1$  атм.,  $T = 25^\circ$  С.

H <sub>2</sub> (gas)	29.83 J/(mol·K)	7 cal/(mol·K)	
H <sub>2</sub> O (liquid)	4.18 J/(gram·K)	1 cal/(gram·K)	18 cal/(mol·K)
Graphite (solid)	0.71 J/(gram·K)	0.17 cal/(gram·K)	2 cal/(mol·K)
O <sub>2</sub> (gas)	29.36 J/(gram·K)	7 cal/(gram·K)	
H (gas)	14.3 J/(gram·K)	3.42 cal/(gram·K)	
O (gas)	0.92 J/(gram·K)	0.22 cal/(gram·K)	
Fe (solid)	0.45 J/(gram·K)	0.11 cal/(gram·K)	6 cal/(mol·K).

Таблица 7.3: Средние энергии связи, при  $T=25^\circ$  С.

	<i>Kcal/mol</i>		<i>Kcal/mol</i>		<i>Kcal/mol</i>
H-H	104.2 <sup>a</sup>	C=O	192.0 <sup>d</sup>	O=O	119.1 <sup>b</sup>
C-C	82.6	O-H	110.6	C=C	145.8
C-O	85.5	C≡C	199.6	C=O	255.8 <sup>c</sup>

<sup>a</sup> для H<sub>2</sub>; <sup>b</sup> для O<sub>2</sub>; <sup>c</sup> для окиси углерода; <sup>d</sup> для углекислого газа.

Таблица 7.4: Теплота парообразования и первые потенциалы ионизаций.

	<i>Kcal/mol</i>	<i>Atoms</i>	<i>eV</i>
Water	10.4	H	13.6
Graphite	171.7	C	11.26
		O	13.6



Рис. 7.11: [8] Изображение Феррари 308 GTSi 1980 г. и двух автомобилей Honda Civic, переоборудованных *USMagnegas, Inc.*, для использования магнегаза в качестве нового чистого топлива и без каталитического конвертера, хотя выполняются все требования ЕРА относительно чистоты выхлопа, в нем не содержатся канцерогенных или других токсических веществ, снижено количество  $\text{CO}_2$  на 50% по отношению к использованию бензина и в выхлопе содержится от 10% до 14% пригодного для дыхания кислорода.

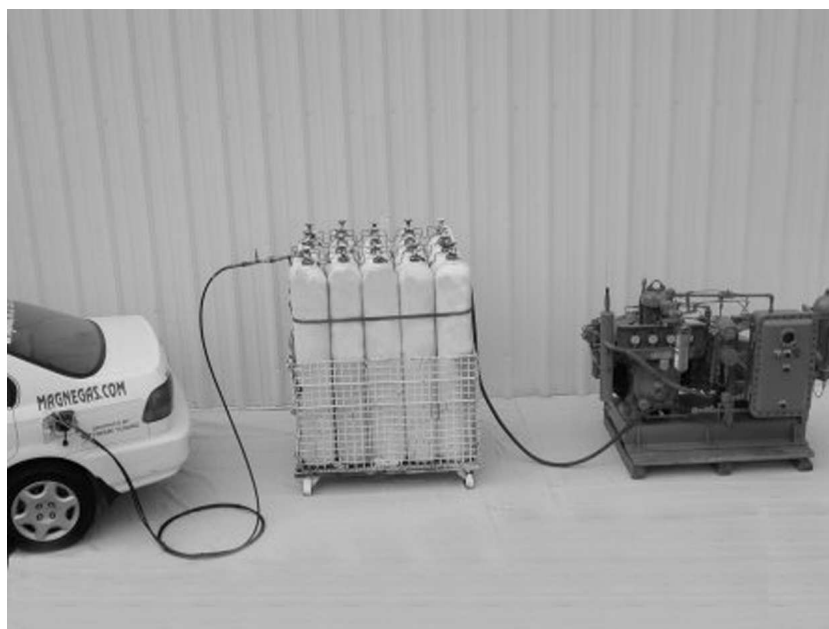


Рис. 7.12: [8] Изображение *магнегазовой производящей и заправочной станции*, содержащей реактор, такой как на Рис. 7.10, плюс стандартный компрессор, какой используется для природного газа. Простоту этой станции следует сравнить с крайне сложной станцией для жидкого водорода. Отметим, что станция изображенная, на этой фотографии, позволяет современным *дистрибьютерам топлива*, таким как газовые станции, стать *производителями топлива*.

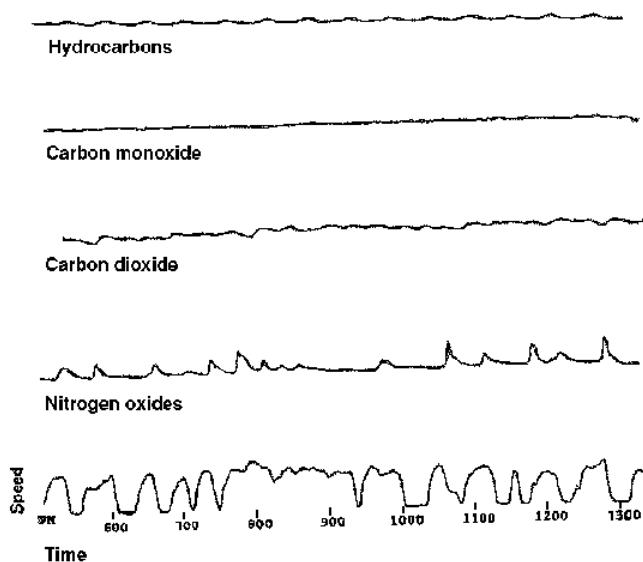


Рис. 7.13: Иллюстрация части EPA теста моделирующей езду в условиях города согласно Правилу 40-CFR, Часть 86, проведенного в Vehicle Certification Laboratory *Liphardt & Associates* на Лонг-Айленде, Нью-Йорк на для автомобиля Honda Civic Natural Gas Vehicle, переделанного под магнегаз компанией *USMagneGas, Inc.*, в Ларго, Флорида. Первые три диаграммы иллюстрируют очень низкое выделение выхлопных газов при использовании магнегаза в городских условиях, имея в виду, что большая часть измеренных выхлопов относится к тяжелым условиям подъема в гору согласно EPA тесту. Четвертая диаграмма по окислам азота показывает недостаток охлаждения двигателя. Нижняя диаграмма показывает изменение моделируемой скорости машины во времени, где плоские полосы соответствуют нерабочим периодам при остановке перед светофором.



Рис. 7.14: Изображение резки металла с использованием магнегаза. Независимые испытания различными пользователями установили, что: 1) время прогрева магнегазом, по крайней мере, в два раза меньше, чем ацетиленом (который используется для резки металла, в настоящее время, и имеет удельную теплоту сгорания 2300 BTU/куб. фут); 2) магнегаз режет металл, как минимум, на 50% быстрее, чем ацетилен; 3) резка, произведенная магнегазом, является гораздо более аккуратной, без зазубрин, по сравнению с ацетиленом; 4) продукты сгорания магнегаза не содержат канцерогенных или других токсических веществ, в то время как ацетилен является, возможно, самым канцерогенным и токсичным из всех топлив; 5) при резке магнегазом не возникает локальных взрывов искр из-за краски нанесенной на металл, что является типичным для ацетилена; 6) магнегаз драматически более безопасен, чем ацетилен, который нестабилен и является одним из самых опасных топлив из используемых сегодня; и 7) магнегаз примерно в два раза дешевле, чем ацетилен.



# Литература

- [1] Jena, P., Rao, B.K. and Khanna, S.N.: Physics and Chemistry of Small Clusters, in *NATO ASI Series, Series B: Physics*, Vol. **158**, Plenum Press (1986). Jena, P., Khanna, S.N., and Rao, B.K.: Physics and Chemistry of Finite Systems: From Clusters to Crystals, in *NATO ASI Series, Series C: Mathematical and Physical Sciences*, Vol. **374**, Vol. **1** and **2** (1991). Jena, P., Khanna, S.N., and Rao, B.K.: in *Proceedings of the Science and Technology of Atomically Engineered Materials*, World Scientific Press (1996).
- [2] <http://www.eia.doe.gov/emeu/international/energy.html>.
- [3] Spath, P. and Mann, M.: A Complete Look at the Overall Environmental Impact of Hydrogen Production, in *Proceedings of HY 2000 EFO Energy Forum*, GmbH, p. 523 (2000).
- [4] Frank, D., Wolf, J., and Pehr, K.: Visions Come True: BMW Hydrogen Vehicles lead the Way, in *Proceedings of HY 2000 EFO Energy Forum*, GmbH, p. 181 (2000).
- [5] Santilli, R.M.: The Physics of New Clean Energies and Fuels According to Hadronic Mechanics, *Journal of New Energy* **4**, Special Edition, No. 1 (1999), 318 pages.
- [6] Santilli, R.M.: *Nuovo Cimento Lettere* **37**, 545 (1983) [6a]; *J. Moscow Phys. Soc.* **3**, 255 (1998) [6b]; and *Intern. J. Modern Phys.* **D7**, 351 (1998) [6c].
- [7] Santilli, R.M.: *Hadronic J.* **13**, 513 (1990) [7a]. Santilli, R.M., *JINR Comm.* E4-93-352 (1993) [7b]. Santilli, R.M., *Chinese J. Syst. Eng. and Electr.* **6**, 177 (1995) [7c]. Santilli, R.M.: *Hadronic J.* **17**, 311



- (1994) [7d]. Borghi, C., Giori, C., and Dall’Oilio, A.: (Russian) J. Nucl. Phys. **56**, 147 (1993) [7e]. Tsagas, N.F., Mystakidis, A., Bakos, G., and Seftelis, L.: Hadronic J. **19**, 87 (1996) [7f]. Smith, S.: in *Proceedings of the International Symposium on New Energies*, ed. by M. Shawe *et al.*, Association of New Energy, Denver, Colorado (1996) [7g].
- [8] <http://www.magnegas.com>.
- [9] Aringazin, A.K. and Santilli, R.M.: A study of the energy efficiency of hadronic reactors of molecular type (2001), *in preparation*.

## Глава 8

# Новые химические соединения: Магнекулы

### 8.1 Введение

Единственным видом химических соединений, с вполне определенными связями, который был известен до появления адронной химии, являлись *молекулы*, с присущими им *валентными связями*, чья идентификация относится к девятнадцатому веку, благодаря работам Авогадро (Avogadro) (1811), Каниццаро (Canizzaro) (1858) и некоторых других, последующих за разработками методов определения атомных весов.

Известны, также, возможные дополнительные кандидаты на химические соединения, такие как делокализованные электронные связи. Однако, ни один из них не обладает явно выраженной притягивающей силой, явным образом отличающейся от валентности.

А также, как отмечено в Главе 7, совсем недавно были изучены различные молекулярные кластеры, хотя они являются либо нестабильными, либо не имеют точной идентификации их внутренней связи.

Пример нестабильного молекулярного кластера дается случаем, когда внутренняя связь обусловлена *электрической поляризацией* атомных структур, то есть, деформацией сферического распределения заряда, с полным зарядом равным нулю, в эллипсоидальное распределение, в котором имеется доминирование одного электрического заряда на одном конце и противоположного заряда на другом, вследствие чего атомы притягиваются друг к другу противоположными полярностями. Неста-

бильность таких кластеров следует из того известного свойства, что малейшие пертурбации ядер и периферийных электронов приводят к их естественной конфигурации, с соответствующей потерей поляризации и обусловленной ею связи.

Пример молекулярных кластеров без ясной идентификации их внутренней связи дается *ионными кластерами*. Действительно, ионизированные молекулы имеют *одинаковый положительный заряд* и, следовательно, они *отталкиваются* от друг друга. Следовательно, внутренняя связь ионных кластеров является, в общем то, не только неизвестной ко времени написания данной монографии, но также, после идентификации, она должна быть настолько сильной, чтобы превзойти отталкивающую силу между ионами, составляющими кластер.

В 1998 г. Р.М. Сантилли [1] предложил гипотезу нового типа стабильных кластеров составленных из молекул, димеров, и атомов, с новой, ясно определенной, внутренней связью, которая позволяет их промышленное и практическое использование. Новые кластеры были названы **магнекулами** (патент заявлен), из-за доминирования магнитных эффектов в их формации, а также из прагматичной необходимости отличать их от обычных молекул, с пониманием того, что технически более приемлемым названием могло бы быть **электромагнекулы**.

Благодаря неоценимой поддержке Леона Тоупса, президента *Toups Technologies Licensing, Inc.*, корпорации в Ларго, Флорида, магнекулы, как новые химические соединения, получили, опять-таки в 1998 г., множество экспериментальных подтверждений. Дополнительные экспериментальные подтверждения и промышленные разработки были проведены совсем недавно корпорацией *EarthFirst Technologies, Inc.* (новое название *Toups Technologies Licensing, Inc.*) (EFTI [2]), руководимой Джоном Стантоном, которая контролирует патентные права на новые технологии во всем мире, через свои дочерние компании во всех географических регионах: *USMagnegas, Inc.* (Ларго, Флорида), *EuroMagnegas, Ltd.* (Лондон, Англия) и *AsiaMagnegas, Lim.* (Гонконг), под руководством Леона Тоупса.

Эта глава посвящена обзору основных понятий лежащих в основе магнекул, новых химических соединений, их экспериментальному обнаружению, их промышленному применению и, в дальнейшем, *новой технологии магнитно поляризованных топлив* [2].

В дальнейшем будет использоваться следующая терминология:

1) Слово "атом" используется в его обычном смысле, как название

стабильной атомной структуры, такой как водород, углерод или кислород, независимо от того, – ионизирован атом или нет, парамагнитен он или нет;

2) Слово "димер" используется для обозначения части молекулы обладающей валентной связью, например: Н–О, Н–С и т.д., независимо от того, ионизирован димер или нет, относится он к парамагнитной молекуле или нет;

3) Слово "молекула" используется в ее общепринятом смысле, как название стабильных кластеров состоящих из атомов, с обычными, валентными, электронными связями, например: Н<sub>2</sub>, Н<sub>2</sub>О, С<sub>2</sub>Н<sub>2</sub> и т.д., независимо от того, ионизирована молекула или нет, парамагнитна или нет;

4) Слово "магнекула" используется для обозначения стабильных кластеров состоящих из двух или более молекул, и/или димеров, и/или атомов, и/или каких-либо их комбинаций, сформированных при помощи новой внутренней связи преимущественно магнитного типа, идентифицированной в деталях в этой главе; слово "магнекулярный" будет использоваться в отношении субстанций со структурой или чертами магнекул;

5) Выражение "химические соединения" используются для обозначения существенно однородного ансамбля стабильных кластеров, с одним видом внутренней связи, что подразумевает как молекулы, обычные химические соединения, так и магнекулы, при условии, что каждый вид соединений допускает игнорирование присутствия других соединений.

В этой главе мы изучаем теоретическое предсказание адронной механики и адронной химии новых химических соединений – магнекул, их экспериментальные подтверждения, которые были ясным образом представлены, впервые, Сантилли в работе [1] 1998 года.

## 8.2 Гипотеза магнекул

Главная гипотеза, подробно исследуемая в оставшейся части этой главы, может быть сформулирована следующим образом:

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ 8.2.1** (патент заявлен) [1]: *Магнекулы в газах, жидкостях и твердых телах состоят из стабильных кластеров составленных из обычных молекул, и/или димеров, и/или отдельных атомов, связанных друг с другом посредством противоположно направленных магнитных поляризаций орбит, по крайней мере периферийных, атомных*

электронов вследствие наложения достаточно сильных внешних магнитных полей, а также поляризаций внутренних магнитных моментов ядер и электронов. Ансамбль магнекул представляет собой химическое соединение в том случае, когда он существенно однороден, то есть, молекул или других соединений содержится в нем в очень малом количестве, неподдающемся определению. Магнекулы характеризуются, или могут быть идентифицированы, через следующие основные черты:

I) Прежде всего, магнекулы обладают неожиданно большими атомными весами, например, атомными весами которые в десятки и более раз превосходят максимальный атомный вес обычных молекулярных составляющих;

II) Магнекулы характеризуются большими пиками с макроскопическими процентными содержаниями в масс-спектрографе, причем они остаются неопределенными после сравнения с пиками всех существующих молекул;

III) Упомянутые пики не дают обычного регистрируемого инфракрасного сигнала для газа и ультрафиолетового сигнала для жидкостей, в отличии от обычных молекул и/или димеров, составляющих магнекулу;

IV) Упомянутые инфракрасный и ультрафиолетовый сигналы оказываются измененными (в дальнейшем мы будем говорить "мутированными") по сравнению с обычными версиями, поэтому, на обычную картину, свойственную димерам, накладываются дополнительные пики в инфракрасных и ультрафиолетовых областях (инфракрасные и ультрафиолетовые мутации), не существующие в обычных конфигурациях;

V) Магнекулы обладают аномальным притяжением к другим веществам, что приводит к появлениям фона (сплошного) в ходе проведения спектроскопических тестов, который часто напоминает первоначальное сканирование, а также подразумевает забивание тонкого подающего сопла, что препятствует детектированию наиболее важных магнекул;

VI) Магнекулы могут разбиваться на фрагменты, при достаточно энергичных столкновениях, с последующей рекомбинацией с другими фрагментами и/или другими молекулами, что приводит к вариации во времени спектрографических пиков (так называемые временные мутации молекулярных весов);

VII) Магнекулы могут увеличиваться или уменьшаться в процессе столкновений с отдельными атомами, димерами или молекулами;

VIII) Магнекулы обладают уникальной проникаемостью сквозь другие субстанции, что свидетельствует об уменьшении средних размеров

обычных молекул, как и ожидается при магнитной поляризации;

IX) Магнекулярный газ обладает аномальной растворимостью в жидкостях, благодаря новым магнитным связям между газом и молекулами жидкости, подвергнутым действию магнитного поля магнекул;

X) Магнекулы могут формироваться из молекул жидкостей, которые не обязательно растворимы друг в друге;

XI) Магнекулы имеют аномальные средние атомные веса, в том смысле, что они больше, чем любые молекулярные составляющие и любые комбинации из них;

XII) Магнекулярный газ не подчиняется законам идеального газа, так как число его составляющих (число Авогадро), или, эквивалентно, их средний атомный вес, несколько меняется с изменением давления;

XIII) Субстанции с магнекулярной структурой имеют аномальные физические характеристики, такие как аномальные плотность, вязкость, поверхностное натяжение и т.д., по сравнению с характеристиками обычных молекулярных составляющих;

XIV) В термодинамических реакциях магнекулы выделяют больше энергии, чем те же реакции с неполяризованными молекулярными составляющими;

XV) Все вышеперечисленные характеристики исчезают когда магнекулярную субстанцию нагревают до достаточно высокой температуры, которая меняется от вещества к веществу, называемой магнекулярной температурой Кюри; в частности, сгорание ликвидирует все магнитные аномалии, что приводит к тому, что продукты сгорания не обладают магнекулярными чертами.

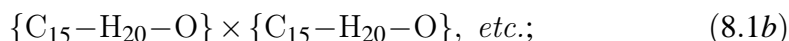
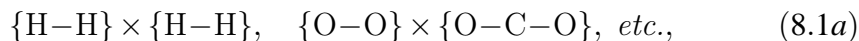
Магнекулы разделяются также на: **элементарные**, когда состоят только из двух молекул; **магнеплексы**, когда составлены из нескольких одинаковых молекул; и **магнекластеры**, когда составлены из нескольких различных молекул.

Первоначальной целью этой главы является, во первых, изучение характерных свойств магнекул, начиная с теоретического предсказания, и переходя затем к, по крайней мере, двум независимым экспериментальным подтверждениям для каждого свойства.

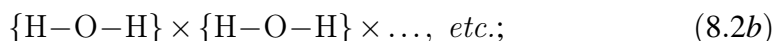
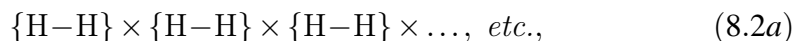
Читатель должен иметь в виду, что магнегаз – новый, чисто сгораемый газ, разработанный компанией *USMagnegas, Inc.* [2], Ларго, Флорида – имеет именно магнекулярную структуру, откуда он и получил свое название. Несмотря на это, мы идентифицируем в этой главе и другие

газы, жидкости и твердые тела с магнекулярной структурой.

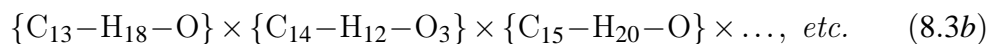
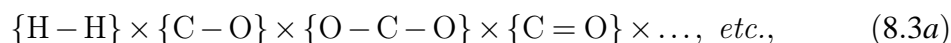
Обозначая обычную валентную связь черточкой и новую, магнитную связь символом " $\times$ ", примеры элементарных магнекул в газов и жидкостей даются соответственно следующим:



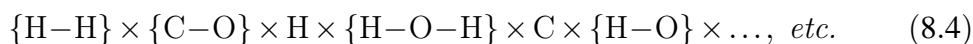
примеры магнеплексов газов и жидкостей соответственно даются следующим:



и примеры магнекластеров даются следующим:

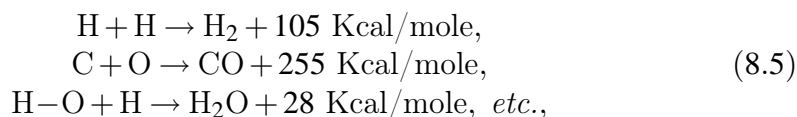


Вообще, воспроизведение магнекулярного газа требует наличия отдельных атомов и димеров, таких как:



Одной из наиболее важных черт магнекул является аномальное выделение энергии в термодинамических реакциях (Свойство XIV Определения 8.2.1), в виду очевидной важности для промышленных разработок новых чистых топлив, таких как магнегаз (Раздел 7.10 и 7.11).

Как мы позже увидим в деталях, эта черта сильнейшим образом зависит от наличия в магнекулах отдельных атомов, таких как H, C и O и/или отдельных неспаренных димеров, таких как H-O и H-C. Действительно, при разрушении магнекул в ходе сгорания, эти отдельные атомы и димеры соединяются друг с другом в обычные молекулы через известные экзотермические реакции, такие как:



с соответствующим выделением, в ходе сгорания, большого количества энергии, которое не свойственно топливам с обычной молекулярной структурой.

Читая эту главу, читатель должен иметь в виду, что в виду вышеуказанных, важных промышленных, потребительских приложений и следствий для окружающей среды, главное ударение в воспроизведении делается на изучение магнекул с возможно большим числом *неспаренных атомов и димеров*, а не молекул.

При изучении вышеупомянутого воспроизведения магнекул читатель должен также иметь в виду, что линейная формулировка в ряд используется главным образом для практических целей. Действительно, корректная формулировка должна была бы быть через *столбцы*, а не через строки, так как связь имеет место между одним атомом данной молекулы и атомом другой молекулы, как мы в деталях увидим позже.

## 8.3 Пять силовых полей существующих в атоме

Связь, ответственная за возникновение магнекул, имеет свои корни в структуре отдельных атомов. Следовательно, вполне естественно начать наше исследование с идентификации всех силовых полей, существующих в обычной атомной структуре.

Единственными полями в атомной структуре, изучаемыми химиками до появления работы [1], были внутренние электрические и магнитные поля электронов и ядер (см. Рис. 8.1.A). Примерно сто лет назад, было доказано, что эти поля могут производить только *валентные связи*, этим объясняется причина, почему молекулы были единственной формой атомных кластеров, с единственной связью, допускаемой химией до недавнего времени.

Главным вкладом Сантили [1] была идентификация *нового силового поля в атомной структуре*, которое является достаточно сильным, чтобы позволить новые химические соединения.

С самого появления атомной физики, электрон атома водорода (но не обязательно периферийные электроны более сложных атомов) принимался имеющим сферическое распределение, которое, в действительности, является случаем для изолированных и невозмущенных атомных



структур (см. также Рис. 8.1.А).

Однако, электроны являются заряженными частицами, и все заряды вращающиеся по плоской орбите создают магнитное поле в направлении перпендикулярном орбитальной плоскости, а направление "Север" определяется по правилу правого винта (см. Рис. 8.1.В).

Главным пунктом работы [1] является то, что распределение в пространстве электронных орбит изменяется достаточно сильным внешним магнитным полем. В частности, последнее вынуждает переход от обычного сферического распределения к новому распределению с цилиндрической симметрией внешнего поля, с противоположной к нему магнитной полярностью (Рис. 8.1.С).

Следовательно, магнитные поля атомов создаются не только внутренними магнитными полями периферийных электронов и ядер, так как, при наложении достаточно сильного внешнего магнитного поля, атомы приобретают дополнительный магнитный момент, обусловленный поляризацией электронных орбит. Это третье магнитное поле игнорировалось химиками до 1998 г. (но не физиками), так как отсутствует в обычном атомном состоянии.

На самом деле, следует напомнить, что *орбиты по своей природе являются плоскими, как устанавливается планетарными орбитами, и они приобретают сферическое распределение в атоме в силу различных квантовых эффектов, например, неопределенности*. Следовательно, в отсутствии этого, все атомы естественно демонстрировали бы *пять* силовых полей, а не только четыре поля, как принято сейчас в химии.

Ради исторической справедливости, следует упомянуть, что теоретические и экспериментальные исследования в физике атома водорода подвергнутого действию внешнего (однородного) магнитного поля относятся к временам Шредингера.

## 8.4 Магнекулярные внутренние связи

В предыдущем разделе мы отметили, что достаточно сильное внешнее магнитное поле поляризует орбиты периферийных атомных электронов, приводя к появлению магнитного поля, которого не существует при обычном сферическом распределении. Не говоря уже о том, что те же внешние магнитные поля поляризуют также внутренние магнитные моменты периферийных электронов и ядер, создавая тем самым *три чи-*

стые магнитные полярности, пригодные в атомной структуре для новой связи.

При рассмотрении молекул, мы сталкиваемся с другой ситуацией, так как валентные электроны связаны в синглетные соединения, чтобы удовлетворять принципу Паули, как следует из нашей гипотезы *изоэлектрониума* Главы 4. Как следствие, их чистые магнитные полярности могут быть приняты, в первом приближении, равными нулю. В этом случае, только две магнитные полярности пригодны для новых связей, а именно, магнитное поле создаваемое вращением спаренных валентных электронов в плоскости поляризованной орбиты, плюс внутреннее магнитное поле ядер.

Следует отметить, что вышеприведенные результаты имеют место, когда межэлектронное расстояние для изоэлектрониума принимает орбитальные значения. В этом случае, полный внутренний магнитный момент двух валентных электронов также в среднем примерно равен нулю, из-за антипараллельности спинов и, следовательно, антипараллельности магнитных моментов, в отсутствие чего нарушался бы принцип запрета Паули.

Расчет этих *поляризационных магнитных моментов при абсолютном нуле температуры* довольно элементарен [1]. С использованием рационализированных единиц, магнитный момент  $M_{e\text{-orb}}$  поляризованной орбиты одного атомного электрона дается главным квантовомеханическим законом:

$$M_{e\text{-orb}} = \frac{q}{2m} L\mu, \quad (8.6)$$

где  $L$  – момент импульса,  $\mu$  – рационализированная единица магнитного момента электрона,  $q = -e$  и  $m = m_e$ .

Легко видеть, что *магнитный момент поляризованной орбиты изоэлектрониума, с характеристиками (4.25), совпадает с магнитным моментом отдельного электрона*. В этом случае, это происходит потому, что в уравнении (8.6), заряд в числителе принимает удвоенное значение  $q = -2e$  и масса в знаменателе также принимает удвоенное значение,  $m = 2m_e$ , что оставляет значение (8.6) неизменным.

Подбирая различные числовые значения для основного состояния атома водорода, получаем:

$$M_{e\text{-orb}} = M_{\text{isoe-orb}} = 1,859.59\mu. \quad (8.7)$$

Вспоминая, что в принятых единицах протон имеет магнитный мо-

мент  $1.4107 \mu$ , мы получаем следующее значение [1]:

$$\frac{M_{e\text{-orb.}}}{M_{p\text{-intr.}}} = \frac{1,856.9590}{1.4107} = 1,316.33, \quad (8.8)$$

а именно, магнитный момент, создаваемый движением электрона по плоской орбите в атоме водорода, в 1316 раз больше, чем внутренний магнитный момент ядра, поэтому он является достаточно сильным для образования связи.

Очевидно, что поляризованные магнитные моменты при нормальной температуре являются меньшими, чем при абсолютном нуле. Это обусловлено тем, что при нормальной температуре, идеальная поляризация орбиты в плоскости более невозможна. В этом случае поляризация имеет вид *торойда*, что проиллюстрировано на Рис. 8.2, причем степень поляризации зависит от интенсивности внешнего поля.

Как иллюстрирующий пример, при наличии внешнего магнитного поля 10 Тесла, изолированный атом водорода имеет полный магнитный момент порядка следующей величины:

$$M_{H\text{-tot.}} = M_{p\text{-intr.}} + M_{e\text{-intr.}} + M_{e\text{-orb.}} \approx 3,000\mu, \quad (8.9)$$

тогда как тот же атом водорода, при тех же условиях, но являющийся компонентой молекулы водорода, имеет меньшее значение:

$$M_{H_2\text{-tot.}} = M_{p\text{-intr.}} + M_{\text{isoe-orb.}} \approx 1,500\mu, \quad (8.10)$$

опять-таки, из-за отсутствия довольно большого вклада внутреннего магнитного момента электронов, в то время как орбитальные вклады остаются неизменными.

Вышеуказанное свойство является весьма важным для изучения магнекул и их приложений, в связи с тем, что оно устанавливает теоретическую основу для присутствия изолированных атомов в структуре магнекул, так как магнитные связи изолированных атомов могут по крайней мере в два раза превосходить те же связи, тех же атомов, но состоящих в молекуле.

Точная независимая проверка вышеизложенных вычислений была проведена М.Г. Кучеренко (M.G. Kucherenko) и А.К. Арынгазиным (A.K. Aringazin) [3], которые получили следующее значение через использование альтернативных моделей:

$$\frac{M_{e\text{-orb.}}}{M_{p\text{-intr.}}} \approx 1,315\mu. \quad (8.11)$$

Нужно сказать, что квантовое значение момента импульса обычного (неполяризованного) атома водорода, в основном состоянии, равно нулю,  $L = 0$ , что подразумевает нулевой магнитный момент,  $M = 0$ . Это подтверждает то хорошо известное свойство, что магнитный момент орбиты периферийного электрона обычного (неполяризованного) атома водорода равен нулю.

Поэтому, выражения (8.6)-(8.11) нуждаются в некоторых пояснениях. Во первых, упомянутые выражения относятся к орбите периферийного электрона при наличии внешнего магнитного поля, которое подразумевает очевидную деформацию значения магнитного момента. Отметим, что это внешнее магнитное поле может быть как следствием электрического разряда, как в PlasmaArcFlow реакторах, так и обусловленным другим поляризованным атомом водорода, как в магнекуле. Это подтверждает главный аспект новых химических соединений, магнекул, а именно, плоская поляризация орбит периферийных атомных электронов является стабильной тогда и только тогда, когда упомянутая поляризация связана с другой, так как в изолированном состоянии поляризация мгновенно исчезает из-за вращений, с воспроизведением обычного сфероидального распределения орбит.

Кроме того, выражения (8.6)-(8.11) относятся к моменту импульса орбиты периферийного электрона *поляризованной в плоскости*, а не к сферическому распределению, как в основном состоянии атома водорода. Последнее условие, само по себе, достаточно для обеспечения ненулевого квантового орбитального магнитного момента.

Наконец, значение  $L = 1$  необходимое для выражений (8.6)-(8.11) может быть получено через *непосредственное квантование плоской поляризации классической орбиты*. Эти аспекты были изучены в деталях Кучеренко и Арынгазиным [2] и Арынгазиным [8] (см. Дополнение 8.A). Эти исследования высветили довольно интригующее свойство, по большей части игнорируемое на протяжении 20-го века, согласно которому, противоположность общепринятому мнению, *квантованный момент импульса основного состояния атома водорода не обязательно равен нулю, так как его значение зависит от возможных внешних полей*.

Важно отметить, что магнитные поляризации, рассматриваемые здесь, являются *физическими понятиями*, поэтому лучше всего выражаются и понимаются через *реальные орбиты*, как и делается выше, а не через *химические орбитали*. Это связано с тем, что *орбиты являются физическими объектами* действительно существующими в природе, и схема-

тически изображаются на рисунках, в полуклассическом приближении, стоячими волнами. И наоборот, орбитали являются чисто математическими понятиями, даваемыми плотностью вероятности. Как результат, магнитные поля могут быть более ясно ассоциированы с орбитами, чем с орбиталями.

Несмотря на вышеуказанные отличия, следует подчеркнуть, что магнитные поляризации могут быть также выведены через орбитали, обычно используемые в химии. Например, рассмотрим описание изолированного атома через обычное уравнение Шредингера,

$$H|\psi\rangle = \left(\frac{p^2}{2m} + V\right)|\psi\rangle = E|\psi\rangle, \quad (8.12)$$

где  $|\psi\rangle$  – состояние в гильбертовом пространстве. Орбитали выражаются в терминах плотности вероятности  $|\langle\psi|\times|\psi\rangle|$ . Плотность вероятности для электрона атома водорода имеет сферическое распределение, а именно, электрон изолированного атома водорода может быть найден на данном расстоянии от ядра с равной вероятностью для любого направления в пространстве.

Предположим теперь, что тот же атом водорода находится в сильном внешнем однородном и постоянном магнитном поле  $\mathbf{B}$ . Этот случай требует нового шредингеровского уравнения,

$$\left(\left(p - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2/2m + V\right)|\psi'\rangle = E'|\psi'\rangle, \quad (8.13)$$

где  $\mathbf{A}$  – векторный потенциал магнитного поля  $\mathbf{B}$ . Легко доказать, что в этом случае, новая плотность вероятности  $|\langle\psi'|\times|\psi'\rangle|$  обладает цилиндрической симметрией точно вышеописанного типа, что подтверждает результаты полученные на физической основе. Подобное же подтверждение может быть получено через использование уравнения Дирака, или других химических методов.

Детальное исследование шредингеровского уравнения для атома водорода во внешнем магнитном поле было проведено А.К. Арынгазиным [8], чье исследование подтвердило тороидальную конфигурацию электронных орбит, которая является основой для новых химических соединений, магнекул. Обзор исследований Арынгазина приведен в Дополнении 8.А. Как можно видеть, под действием внешних, сильных, однородных и постоянных магнитных полей, порядка  $10^{13}$  Гаусс =  $10^7$  Тесла,

решения уравнения Шредингера типа (8.13) подразумевают редукцию электронных орбит к единственной, небольшого размера, тороидальной конфигурации, в то время как возбужденные состояния воспроизводятся дважды расщепленной тороидальной конфигурацией, согласно аналогии.

Интересно то, что в этом случае, энергия связи основного состояния Н-атома много выше, чем в отсутствии внешнего магнитного поля, чем подтверждается еще одно важное свойство магнекул – допускается новое способ хранения энергии с помощью обычных молекул и атомов, что обсуждается в Разделе 8.9.

Для магнитных полей порядка  $10^9$  Гаусс, сферическая симметрия начинает конкурировать с тороидальной симметрией, и для магнитных полей порядка  $10^5$  Гаусс и менее, сферическая симметрия почти полностью восстанавливается, за исключением обычного эффекта Зеемана. Этот последний результат подтверждает, что создание магнекул в газах, в соответствии с Определением 8.2.1, требует очень сильных магнитных полей. С жидкостями ситуация иная, как показано в Разделе 8.10.

Магнитная поляризация атомов больших чем водород легко выводится из вышеизложенных расчетов. Рассмотрим, для примера, магнитную поляризацию отдельного атома кислорода. Для простоты предположим, что внешнее магнитное поле в 10 Тесла поляризует только два периферийных валентных электрона кислорода. Соответственно, полное магнитное поле поляризации орбитального типа будет примерно равно удвоенному значению (8.9), то есть, около  $6000\mu$ . Однако, когда тот же атом кислорода связан в молекуле воды, или в других молекулах, максимальный поляризованный магнитный момент равен примерно половине от предыдущего значения.

Отметим доминирование магнитных полей, обусловленных поляризацией электронных *орбит* над внутренними *ядерными* магнитными полями. Это происходит не только благодаря тому факту, что первые в 1316 раз больше чем последние, но также из-за того, что ядра находятся на относительно больших расстояниях от периферийных электронов, чем обеспечивается вклад в связь даже меньший, чем было отмечено. Это свойство объясняет существенную новизну магнекул, связанных с развитием магнитных технологий, таких как основанных на *ядерном магнитном резонансе*.

Отметим также, что главный механизм поляризации зависит от внешнего магнитного поля, и сила, действительно обеспечивающая связь, име-

ет магнитный тип. Несмотря на это, главным происхождением связи является вращение зарядов по атомной орбите. Это является иллюстрацией того, что, как отмечено в Разделе 8.1, название "магнекулы" было предложено исходя из их магнитного происхождения, а также, чтобы без многословия подчеркнуть их отличие от молекул, хотя технически более приемлемым названием было бы "электромагнекулы".

Естественно, что поляризация орбит не обязательно ограничивается валентными электронами, так как поляризация не чувствует квантовых чисел какой-либо данной орбиты, поэтому влияет на все атомные электроны, включая те, которые входят в заполненные внутренние оболочки, конечно, при условии достаточно сильного внешнего поля. Как следствие, *степень магнитной поляризации, в общем, возрастает с числом атомных электронов*, а именно, чем больше атом, тем больше, вообще говоря, его магнитная связь в магнекуле.

Ионизации не влияют на существование магнитной поляризации, и они могут сказываться на их *интенсивности* наилучшим образом. Ионизированный атом водорода это обнаженный протон, который приобретает поляризацию с направлением его магнитного момента при наложении внешнего магнитного поля. Следовательно, ионизированный атом водорода действительно может связываться с другими поляризованными структурами. Подобным же образом, ионизированный кислород, потерявший один из своих периферийных электронов, сохраняет свои оставшиеся электроны неизменными. Поэтому, при наложении сильного магнитного поля, такой ионизированный атом кислорода приобретает магнитную поляризацию, которая схожа с поляризацией неионизированного атома кислорода за исключением отсутствия вклада утраченного электрона. Ионизированные молекулы или димеры ведут себя схожим образом. Соответственно, следствия из того, являются ли отдельные атомы, димеры или молекулы ионизированными, не будут рассматриваться здесь.

Рассматриваемые здесь магнитные поляризации не зависят также от того, является рассматриваемая субстанция парамагнитной или нет. Это очевидно благодаря тому факту, что поляризация влияет на отдельные орбиты отдельных периферийных электронов, не зависимо от того, являются они спаренными или нет, относятся они к заполненной оболочке или нет. Следовательно, следствия из того, является данная субстанция парамагнитной или нет, не будут в дальнейшем рассматриваться.

Схожим образом, рассматриваемые здесь поляризации не требуют от

молекул иметь чистую полную магнитную полярность, которая может быть возможна только для парамагнитных субстанций, опять-таки, так как они действуют на отдельные орбиты отдельных атомных электронов.

Мы должны также отметить, что другим подтверждением нашей изохимической модели молекулярных структур является разрешение несогласованности обычной модели относительно парамагнетизма всех веществ, как проиллюстрировано на Рис. 1.4 и 1.5.

Напомним, что в обычной молекулярной модели атомы сохраняют свою индивидуальность, поэтому подразумевается *независимое* приобретение ими магнитной поляризации, с последующей чистой полной магнитной полярностью для всех молекул, что, очевидно, находится в серьезном разногласии с экспериментом.

Напротив, в изохимической молекулярной модели, валентные электроны действительно связаны друг с другом, с образованием совместной орбиты *oo*-формы вокруг соответствующих ядер. Это подразумевает, что направления вращений в *o*-ветвях противоположны друг другу. В свою очередь, это подразумевает, что магнитные поляризации также противоположны друг другу, что приводит к отсутствию чистой магнитной полярности при наложении внешнего поля, в полном согласии с действительностью (см. Рис. 4.5 и 8.3).

## 8.5 Производство магнекул в газах, жидкостях и твердых телах

Наипростейшим способом создание магнекул может быть понято через старый метод намагничивания парамагнитного металла магнитным полем. Рассмотрим парамагнитный металл, который, изначально, ненамагничен. После наложения постоянного внешнего магнитного поля, парамагнитный металл приобретает постоянную намагниченность, которая может быть разрушена нагреванием до достаточно высокой температуры, изменяющейся от металла к металлу и называющейся *температурой Кюри*.

Механизм вышеупомянутого намагничивания хорошо известен. В своем естественном невозмущенном состоянии, периферийные атомные электроны парамагнитного металла имеют пространственное распределение, что приводит к полному отсутствию намагниченности. Однако, после



наложения внешнего магнитного поля, орбиты одного, или более, неспаренных электронов поляризуются в виде торойда, с направлением полярности противоположным внешнему полю.

Этот механизм называется магнитной индукцией и приводит к устойчивой цепочке магнитно поляризованных орбит от одного конца металла к другому, с полярностями Север-Юг/Север-Юг/Север-Юг/... Эта цепочка поляризованностей настолько устойчива, что может быть разрушена только высокими температурами.

Создание магнекул может быть, по существу, понятым исходя из подобной же поляризации периферийных электронных орбит, с главными отличиями в следующем: не обязательна полная магнитная поляризация; поляризация действует на все электроны и не обязательно только на неспаренные; и вещество не обязано быть парамагнетиком.

Для иллюстрации этих различий рассмотрим диамагнитную субстанцию, такую как водород в его газообразном состоянии, при нормальных давлении и температуре. Как хорошо известно, молекула водорода является тогда идеальной сферой, чей радиус равен диаметру атома водорода, как это проиллюстрировано Рис. 8.5.А. Создание необходимой магнитной поляризации требует использования внешних магнитных полей, способных, во первых, изменить вращение атомов, как проиллюстрировано Рис. 8.4.В и затем изменить их внутренние вращения, приведя их к плоской конфигурации орбит, как проиллюстрировано Рис. 8.4.С.

Раз вышеупомянутая поляризация создается в двух или более молекулах водорода достаточно близко расположенных друг от друга, они притягиваются друг к другу противоположными магнитными полюсами, что приводит к образованию элементарных магнекул Рис. 8.5.А. Дополнительно, элементарные магнекулы могут затем связываться друг с другом, образуя кластеры с числом составляющих зависящим от рассматриваемых условий.

Наиболее эффективным способом промышленного производства магнекулярного газа и жидкости является использование *PlasmaArcFlow* реакторов, изученных в предыдущей Главе [2]. Как мы увидим, с помощью экспериментальных данных приведенных ниже, упомянутые реакторы могут производить довольно чистый магнекулярный газ и магнекулярную жидкость без ощутимых примесей молекул непосредственно детектируемых с помощью GC- или LC-MS.

Причиной этих результатов является внутренняя геометрия *PlasmaArcFlow* реакторов сама по себе. Со ссылкой на Рис. 7.9, напомним, что

эта технология имеет дело с электрической дугой постоянного тока, погруженной в жидкие отходы предназначенные для переработки. Дуга разлагает молекулы жидкости на атомные составляющие; ионизирует их; и создает плазму из сильно ионизированных атомов Н, С и О при температуре порядка  $3500^{\circ}$  К. Поток жидкости сквозь дугу непрерывно перемещает плазму от дуги. Затем, плазма, окруженная жидкостью, охлаждается и происходит множество химических реакций приводящих к формированию магнегаза, который пузырьками поднимается на поверхность жидкости, где собирается для промышленного и потребительского использования.

Чтобы понимать происхождение *новых химических соединений*, определенных согласно Разделу 8.1 как существенно чистый ансамбль *магнекул газа*, напомним, что магнитные поля обратно пропорциональны квадрату расстояния,

$$F_{\text{magnetic}} = \frac{m_1 m_2}{r^2}. \quad (8.14)$$

Следовательно, в непосредственной близости от дуги постоянного тока с параметрами 1,000 А и 30 V, атомы подвергаются воздействию магнитного поля, которое обратно пропорционально квадрату *орбитального* радиуса  $r = 10^{-8}$  см, что приводит к магнитному полю пропорциональному  $10^{16}$  единиц.

Обычное пространственное распределение периферийных атомных электронов не может существовать под воздействием таких чрезвычайно сильных магнитных полей, которое приводит к общей поляризации орбит всех атомных электронов, а не только валентных, и именно к плоской поляризации, а не тороидальной.

Как только две, или более, молекул обладающих такой сильной магнитной поляризацией оказываются друг возле друга, они связываются друг с другом противоположными магнитными полюсами, что приводит к возникновению элементарной магнекулы Рис. 8.3.А.

Кроме того, как показано ранее, отдельные атомы имеют магнитное поле с интенсивностью в два раза большей по отношению с атомом входящим в состав молекулы. Следовательно, после возникновения в непосредственной близости от электрической дуги, отдельные поляризованные атомы могут связываться с поляризованными молекулами, при этом не обязательно, чтобы эти атомы принадлежали какой-либо молекуле, как это иллюстрируется Рис. 8.5.С.

Наконец, напомним, что PlasmaArcFlow реактор предназначен для

разрушений молекул жидкостей, таких как вода. Следовательно, плазма может также содержать отдельные сильно поляризованные фрагменты, такие как димеры Н–О. Понятие магнекулярного газа, согласно Определению 8.2.1, относится тогда к стабильным кластерам молекул, и/или димеров, и/или отдельных атомов при наличии внутренней притягивающей связи между противоположными полюсами магнитно поляризованных орбит периферийных электронов, ядер и электронов, в случае, когда последние не участвуют в валентной связи.

Эффективным средством для создания существенно чистого ансамбля магнекул жидкости является все тот же PlasmaArcFlow реактор. Действительно, при прохождении сквозь электрическую дугу постоянного тока, сама жидкость подвергается воздействию сильных магнитных полей, как отмечено выше. Это приводит к созданию существенно чистого ансамбля магнекул жидкости, образованного из сильно поляризованных молекул, димеров и отдельных атомов все той же жидкости, как это установлено LC-MS/UVD тестами.

Одним из способов создания существенно чистого ансамбля магнекул твердого тела является замораживание новых химических соединений до жидкого состояния и затем проверка того, что последние сохраняют свои свойства после разморозки, что подтверждается множеством тестов. Поэтому, случай магнекул в твердом состоянии игнорируется здесь и в дальнейшем для простоты.

Обозначая стрелкой  $\uparrow$  вертикальную магнитную полярность Север-Юг и стрелкой  $\downarrow$  вертикальную полярность Юг-Север, и придерживаясь исследования при абсолютном нуле температуры, при наложении вышеотмеченных очень сильных магнитных полей, молекула водорода Н–Н может быть поляризована таким образом, чтобы орбита изоэлектрониума лежала в плоскости, с результирующей структурой  $H_{\uparrow} - H_{\downarrow}$  (Рис. 8.2).

Тогда, элементарная магнекула может быть записана в виде

$$\{H_{\uparrow}^a - H_{\downarrow}^b\} \times \{H_{\uparrow}^c - H_{\downarrow}^d\}, \quad (8.15)$$

где  $a$ ,  $b$ ,  $c$ ,  $d$  обозначают различные атомы; поляризованный атом водорода  $H_{\uparrow}^a$  связан магнитным образом с поляризованным атомом  $H_{\uparrow}^c$ , при этом Южный магнитный полюс атома  $a$  связан с Северным полюсом атома  $c$ ; и Северный полюс атома  $b$  связан с Южным полюсом атома  $d$  (см., опять, Рис. 8.5.A). Это приводит к сильной связи из-за плоской природы атомов, – соответствующее взаимное расстояние очень мало и

магнитные силы, соответственно, очень велики. Кроме того, в отличии от случая нестабильных кластеров образовавшихся вследствие электрической поляризации, обсужденного в Разделе 8.1, вышеуказанные магнитные связи являются очень стабильными, так как тепловое движение подразумевает движение связанного соединения (8.15) как целого.

Для других магнекул мы можем записать:

$$\{H_{\uparrow}-H_{\downarrow}\} \times \{C_{\uparrow}-O_{\downarrow}\}; \quad (8.16)$$

или, в более общем виде,

$$\{H_{\uparrow}-H_{\downarrow}\} \times H_{\downarrow} \times \{C_{\uparrow}-O_{\downarrow}\} \times \{H_{\uparrow}-O_{\downarrow}\} \times \{H_{\uparrow}-C_{\downarrow}-A-B-C\dots\} \times \dots, \quad (8.17)$$

где А, В, и С являются простыми атомами в обычной молекулярной цепочке, и атомы без отмеченной магнитной полярности могут быть действительно поляризованными, но они не обязательно связаны, что зависит от их геометрического распределения в пространстве.

Магнекулы могут также формироваться другими методами кроме использования внешних магнитных полей. Например, магнекулы могут создаваться электромагнитными полями с распределением имеющим цилиндрическую симметрию; или микроволнами способными подавлять вращательные степени свободы молекул и атомов, что приводит к магнитной поляризации. Схожим образом, магнекулы могут формироваться воздействием на материал достаточно высокого давления, способного повлиять на орбитальные вращения. Магнекулы могут также формироваться фибрацией или какими-либо другими способами, не обязательно наложением магнитного или электрического полей, способными подавить вращательные степени свободы отдельных атомных структур, что будет приводить к соответствующим магнитным поляризациям.

Следовательно, вполне возможно, что большое число веществ, которые числятся сегодня как имеющие неизвестную химическую связь, могут на самом деле иметь магнекулярную структуру.

Магнекулы типа (8.15) могли быть детектированы в прежних спектрометрических исследованиях, но принимались за гелий (так как их молекулярный вес очень близок к весу гелия). В действительности, то же самое могло иметь место и для "молекулы"  $H_3$ , которая, в реальности, могла быть магнекулой Рис. 8.5.С.

Разрушение магнекул происходит под воздействием температур более высоких, чем магнекулярная температура Кюри, которая меняется от магнекулы к магнекуле.

## 8.6 Новые молекулярные внутренние связи

Как отмечено в Разделе 8.2, и позднее подтверждено экспериментально, ИК сигналы обычных молекул, таких как  $\text{CO}_2$ , испытывают мутации, что выражается в появлении двух пиков, которых не существует для обычных молекул. Напомним, что пики ИК сигнала свидетельствуют о наличии связей, это очевидно говорит о способности молекулы  $\text{CO}_2$  приобретать новые внутренние связи, в дополнение к связям обычного валентного типа.

Магнитная поляризация на основе магнекул предсказывает существование этих новых внутренних связей и позволяет их количественное изучение. Напомним, что внешние магнитные поля могут поляризовать орбиту валентных электронов, но не могут разрушить или изменить валентные связи. Напомним, что, соответственно, достаточно сильные внешние магнитные поля могут поляризовать орбиты всех атомных электронов, а не только валентных.

Рассмотрим теперь обычную молекулу, такую как  $\text{C}=\text{O}$ . При наложении очень сильных магнитных полей, таких какие достигаются в PlasmaArc-Flow технологии, могут быть поляризованы орбиты всех внутренних электронов, отдельно, для углерода и кислорода, в дополнение к поляризации двух пар валентных связей. Отметим, что плоскости этих поляризаций не обязательно параллельны друг другу, так как их относительная ориентация зависит, в первую очередь, от геометрии.

Одной из различных возможных геометрий является такая, при которой плоскость поляризации внутренних электронов перпендикулярна плоскости поляризации двух пар валентных связей. В этом случае, мы получаем *новую связь магнитного происхождения внутри обычной молекулы*, которая, очевидно, дается выравниванием двух полярностей Север-Юг и Север-Юг в углероде и кислороде и последующим притяжением противоположных полярностей различных атомов, как иллюстрируется на Рис. 8.6.А.

Для случая молекулы  $\text{O}-\text{C}-\text{O}$ , мы можем, очевидно, иметь две внутренние связи магнитного типа в дополнение к валентным связям, которые также даются выравниванием магнитных полярностей, что приводит к одной новой связи для  $\text{O}-\text{C}$  димера и другой для  $\text{C}-\text{O}$  димера, как иллюстрируется на Рис. 8.6.В.

Как мы увидим позднее, вышеупомянутые новые внутренние молекулярные связи имеют наибольшие промышленные и потребительские

следствия, в виду того, что они позволяют производство топлив способных выделять при сгорании аномальное количество энергии, причем с пониженным содержанием вредных веществ в продуктах сгорания, что уже доказано магнегазом.

Естественно, что возникновение новых внутренних связей является крайним случаем ИК мутаций. В действительности, возможно множество других более слабых форм мутаций, без появления новых пиков, и их изучение оставляется заинтересованному читателю.

## 8.7 Главные признаки магнекул при их детектировании

Экспериментальное детектирование магнекулярного газа требует проверки большого числа характерных черт магнекул, перечисленных в Определении 8.2.1. В дальнейшем, мы будем фокусировать внимание читателя на основных признаках магнекулярного газа, которые могут быть определены через GC-MS тестирования. Оставшиеся признаки будут рассмотрены позднее.

### **Свойство 1: Появление неожиданно тяжелых MS пиков.**

Магнекулы газа обычно тяжелее самых тяжелых молекул данного газа. Следовательно, при GC-MS тестировании ожидается наличие пиков с макроскопическим содержанием соответствующих атомным весам большим, чем самая тяжелая молекула. Конкретный пример дается следующим. Самыми тяжелыми молекулами магнегаза с макроскопическим содержанием являются  $\text{CO}_2$ , с весом 44 а.м.у. Следовательно, GC-MS сканирования должны показывать только шумовой фон, если прибор настроен на веса большие, чем 44 а.м.у. Напротив, пики с макроскопическим содержанием детектируются в магнегазе постоянно вплоть до 1000 а.м.у.

### **Свойство 2: Неизвестный характер неожиданно тяжелых MS пиков.**

Чтобы обеспечить изначальные предпосылки для детектирования магнекул, все MS пики свойства 1 должны быть "неизвестными" после компьютерного поиска среди списка всех известных молекул, обычно вклю-

чающего в себя как минимум 150000 молекул. Очевидно, что отсутствие идентификации пиков, *per se*, не является гарантией наличия новых химических соединений.

**Свойство 3: Отсутствие ИК сигнала неизвестных MS пиков.**

Еще одним необходимым условием детектирования магнекул является отсутствие, для неизвестных MS пиков свойства 1, ИК сигнала иного, чем соответствующего молекулам и/или димерам составляющих. Эта черта гарантирует, что упомянутые тяжелые пики не могут соответствовать молекулам, чем устанавливается наличие новых химических соединений. Действительно, только очень немногие и очень легкие молекулы могут иметь настолько идеальную сферическую симметрию, чтобы избежать ИК детектирования, в то время как такие идеально сферические симметрии очевидно невозможны для больших кластеров. Что касается составляющих, мы получаем ИК сигнал, например, относительно CO<sub>2</sub> с 44 а.м.у. в кластере имеющем массу 458 а.м.у.

**Свойство 4: Мутация ИК сигнала.**

Инфракрасный сигнал обычных молекул составляющих магнекулы ожидается *мутированным*, в том смысле, что форма его пиков является необычной. Как отмечено в предыдущем разделе, мутации наиболее важные для промышленных приложений заключаются в появлении *новых ИК пиков*, отвечающих за наличие новых внутренних связей. Тем не менее, возможны и многие другие формы ИК мутаций.

**Свойство 5: Мутация магнекулярных весов.**

В то время как молекулы сохраняют свою структуру и связанный с ней атомный вес, при обычных температурах и давлениях, это не выполняется для магнекул газа, которые *мутируют* со временем, то есть, изменяется их атомный вес и, соответственно, меняется форма и расположение их MS пиков. Так как мы имеем дело с газом, чьи составляющие, как известно, сталкиваются друг с другом, магнекулы могут разрушаться в ходе таких столкновений на фрагменты, которые могут рекомбинировать с другими фрагментами или другими магнекулами с формированием новых кластеров.

**Свойство 6: Присоединение или отделение отдельных атомов, димеров или молекул.**

Как ожидается, магнекулы могут присоединять или терять отдельные атомы, димеры или молекулы, без обязательного расщепления на части. Это приводит к тому, что пики Свойства 1, как ожидается, не остаются теми же самыми на протяжении долгого периода времени для одного и того же газа при тех же условиях.

### **Свойство 7: Аномальное молекулярное притяжение.**

Магнитно поляризованные газы имеют аномальное молекулярное притяжение к стенкам несопоставимой с ними природы, не обязательно парамагнитного характера, в отличие от того, как это происходит для того же неполяризованного газа. Это имеет место из-за того свойства, что магнетизм может распространяться индукционно, то есть, магнитно поляризованная молекула с достаточно сильным магнитным моментом может вызвать соответствующую поляризацию валентных и/или других электронов в атомах составляющих поверхность стенки. В следствии этого, магнекулы могут иметь сильную магнитную связь с упомянутыми стенками. В свою очередь, это подразумевает, что фон GC-MS после сканирований магнекул и после обычных продувок весьма схож с самими результатами сканирований. В сущности, остающийся после обычных продувок фон часто используется для идентификации доминирующих магнекул. Заметим, что рассматриваемая здесь магнитная поляризация не требует того, чтобы стенки инструмента были парамагнитными, так как поляризация имеет место для орбит любых атомов.

Магнитно поляризованные газы, кроме всего, имеют мутированные характеристики и поведение, так как само понятие поляризации электронных орбит подразумевает физическое изменение множества характеристик, таких как средний размер. Отсюда следуют мутации других характеристик.

Мы должны наконец напомнить, что вышеприведенные черты должны исчезать под воздействием высокой температуры, очевидно, меняющейся от газа к газу (температура Кюри), и в то же время, эти черты, как ожидается, должны усиливаться при понижении температуры и повышении давления и сохраняться после перехода в жидкую фазу.



## 8.8 Необходимые условия для корректного детектирования молекул и магнекул

### 8.8.1 Выбор аналитических инструментов

Современные технологии предлагают впечатляющее многообразие аналитических инструментов (см., например, [4]), которое включает в себя: газовую хроматографию (GC), жидкостную хроматографию (LC), капиллярную электрофорезную хроматографию (CEC), сверхкритическую хроматографию (SCC), ионную хроматографию (IC), инфракрасную спектроскопию (IR), рамановскую спектроскопию (RS), ядерную магнитно-резонансную спектроскопию (NMRS), рентгеновскую спектроскопию (XRS), атомную абсорбционную спектроскопию (AAS), масс-спектрографию (MS), лазерную масс-спектрографию (LMS), пламенно-ионизационную спектроскопию (FIS) и т.д.

Только некоторые из этих инструментов подходят для детектирования магнекул и, при использовании, их настройка и использование существенно отличаются от тех, что обычно с большим успехом используются для молекул.

Среди всего доступного хроматографического оборудования, подходящим для детектирования магнекул газа является GC с колонной имеющей внутренний диаметр по крайней мере 0.32 мм, оперирующей согласно определенным критериям подчеркнутым в Разделе 8.8.3. Напротив, другие хроматографы, такие как CEC, как оказывается, не пропускают большие магнекулы, или потенциально могут разрушать магнекулы предназначенные для детектирования, например IC.

Среди всего доступного спектроскопического оборудования, наиболее предпочтительным является IR, с учетом того, что такой инструмент используется в *негативном* смысле, то есть, чтобы проверить, что рассматриваемые магнекулы не имеют ИК сигнала. RS также может быть полезен во многих случаях, в то время как другие инструменты, такие как NMRS оказываются непригодными для детектирования магнекул, несмотря на их магнитную природу, очевидно из-за того, что NMRS наиболее эффективен для детектирования микроскопических магнитных свойств H-ядер, а не больших структур. Другие спектроскопические инструменты не будут рассматриваться в этой работе.

Что касается спектрометрического оборудования, наиболее рекомен-

дуемым является слабо ионизирующий MS, из-за того, что другие инструменты, видимо, разрушают магнекулы при детектировании. Изучение другого спектрометрического оборудования оставляется заинтересованным исследователям. Химическо-аналитические методы (то есть, через химические реакции) для *детектирования* газовых магнекул являются, вероятно, не очень эффективными, так как они обязательно разрушают магнекулы в ходе химических реакций.

Как это хорошо известно, при своем отдельном использовании, вышеуказанные предложенные инструменты имеют значительные ограничения. Например, GC дает хорошее разрешение относительно составляющих данного вещества, но он имеет очень сильные ограничения в возможностях его идентификации. Напротив, MS имеет большие возможности в идентификации отдельных веществ, хотя и не имеет возможности разделять их.

По этим причинам, наилучшими аналитическими инструментами оказываются комбинации различных инструментов. Среди них, наиболее рекомендуемым следует считать GC совмещенный с MS, обозначаемый GC-MS. То же самое можно сказать относительно IR совмещенного с GC-MS. Как отмечено в начале этой Главы, лучшим инструментом для детектирования как молекул, так и магнекул газа является GC-MS снабженный IRD, обозначаемый GC-MS/IRD, в то время как для жидкостей лучшим является LC-MS снабженный UVD, обозначаемый LC-MS/UVD.

Среди большого многообразия GC-MS инструментов, только несколько являются действительно эффективными для детектирования магнекул газа, по определенным техническим причинам, изложенным ниже. Инструмент, который впервые позволил идентификацию магнекул и остающийся наиболее эффективным до сих пор (несмотря на значительный возраст по современным стандартам), это GC Hewlett-Packard (HP), модель 5890, совмещенный с MS HP, модель 5972, оборудованный колонной и подающей линией с большими внутренними диаметрами, работающий при самой низкой температуре допускаемой инструментом (около 10° C) и наибольшим временем сканирования (около 25 мин).

Второй функцией IRD является идентификация димеров составляющих магнекулу— задание которое по силам различным IRD. Тот, что использовался для оригинального открытия магнекул и все еще остается эффективным (опять-таки, несмотря на его возраст по современным стандартам), это IRD HP, модель 5965, работающий при определенных критериях, указанных ниже.

Наиболее тонким моментом в детектировании магнекул является калибровочное использование любого данного инструмента, и с большим успехом, для детектирования обычных молекул, после чего ожидается, что этот же инструмент должен так же хорошо работать и для детектирования магнекул, что приводит к анализу не имеющему действительного научного значения, так как:

i) детектируемые соединения могут даже и не попасть в инструмент, что является обычным случаем для тонких штуцеров и подающих линий, в частности, для магнекул жидкости (которые могут быть настолько большими, чтобы быть видимыми невооруженным глазом, как показывается в Разделе 8.10);

ii) детектируемые соединения могут разрушаться в процессе самого измерения, что является обычным случаем для инструментов использующих высокую температуру, или пламенно-ионизирующих инструментов, которые, при использовании для горючих газов с магнекулярной структурой, приводят к сгоранию магнекул во время из детектирования; или

iii) детектирование может, само по себе, создавать магнекулы, которые не существовали в изначальных соединениях, как это имеет место для пика 3 а.м.у., что обсуждено на Рис. 8.4.

В заключение, выбор между истинно научным измерением и персональным мнением экспериментатора требует предельной научной осторожности в выборе аналитического инструмента, его использовании и интерпретации результатов.

### 8.8.2 Однозначное детектирование молекул

Как хорошо известно, молекулы газа идентифицируются однозначными и недвусмысленными GC-MS пиками, которые ясно различаются для различных газовых молекул. В добавок, эта GC-MS идентификация может быть подтверждена IRD пиками и связанными с ними резонансными частотами, которые также четко различаются для различных молекул. Дополнительные подтверждения возможны с использованием аналитических методов, таких как основанных на определении среднего молекулярного веса, химических реакциях и других процедурах.

Открытие новых химических соединений предполагает пересмотр этих аналитических методов и процедур, так чтобы отделить персональные мнения от действительных научных идентификаций. Такой пересмотр

оправдывается тем фактом, что из-за повсеместного использования, требования специфических молекулярных идентификаций удовлетворяются сегодня через использование только одного аналитического детектора.

Как иллюстрация, самые современные аналитические лаборатории проводят химические анализы газов через использование одного только IRD. Однако, *инфракрасные детекторы не определяют состав молекул, так как они могут идентифицировать только связи их димеров*. Например, для случая  $H_2O$ , IRD не идентифицирует всей молекулы, но только ее димер Н–О.

Этот метод идентификации молекул определенно приемлем для газов, в которых отсутствие магнитной поляризации было подтверждено анализами. Однако, тот же метод является весьма сомнительным для газов неизвестного происхождения. Действительно, мы скоро приведем экспериментальные данные содержащие ясный ИК сигнал для молекул, которые не имеют MS идентификации вообще, в этом случае заявление о такой молекуле, очевидно, не имеет научного значения.

Обратная ситуация является сомнительной равным образом, а именно, заявление о данной молекуле по одной только MS идентификации, без подтверждения точно того же пика в IRD. Действительно, магнитно поляризованные газы дают несколько MS пиков, которые могут быть легко ассоциированы с той или иной молекулой, но которые не имеют ИК сигнала вообще в той области где расположены MS значения и в этом случае заявление о молекулярной идентификации, очевидно, не имеет научного значения.

Отметим, что огромные двусмысленности кроются в раздельном использовании GC-MS и IRD. Действительно, в этом случае нет гарантии или видимой очевидности, что именно один и тот же пик имеется в виду и MS, и, независимо, IRD. Действительно, данная молекула может быть пробно идентифицирована в MS как обладающая весом в столько-то а.п.у., в то время как та же молекула может быть в действительности идентифицирована и в IRD, хотя и с другим значением веса, и в этом случае, опять-таки, заявление о детектировании данной молекулы является персональным мнением, а не научной истиной.

В заключение, *серьезная научная идентификация любой данной молекулы требует совместного использования, по крайней мере, двух различных аналитических методов, дающих одинаковый результат для одного и того же пика однозначным и недвусмысленным образом, например, MS сканирование с недвусмысленной компьютерной идентифика-*

цией, однозначно подтвержденное IR сканированием, для чего требуется использование GC-MS снабженного IRD.

Дополнительные неясности возникают с широко распространенным мнением о невозможности существования в природе других химических соединений кроме молекул, что приводит к тому, что любые небольшие отклонения от точных идентификаций как правило игнорируются, со специальной целью адаптирования экспериментальных данных к уже существующим знаниям, вместо того, чтобы модифицировать старые интерпретации для удовлетворения новым экспериментальным данным. Эта широко распространенная тенденция является дополнительной причиной, почему магнекулы не были обнаружены раньше.

В качестве иллюстрации, представим себе, что: GC-MS, оборудованный IRD, детектирует пик соответствующий 19 a.m.u.; этот пик идентифицируется исследователем как молекула воды с 18 a.m.u.; и IRD подтверждает наличие HO-димера. При этих условиях, почти повсеместно принятых в современных аналитических лабораториях, упомянутый пик с 19 a.m.u. будет сопоставляться молекуле воды, и лишняя a.m.u. будет отнесена к "загрязнению" или чему-либо должному игнорироваться, в этом случае, однако, мы не имеем дела с истинной научной идентификацией соединения.

Действительно, вполне возможно, что пик при 19 a.m.u. обусловлен сильно поляризованной молекулой воды, магнитно связанной с отдельным атомом водорода, чья совместная структура дается следующим:



В этом случае, согласно нашей терминологии, пик при 19 a.m.u. является магнекулой, а не молекулой, даже хотя MS исследование дает коэффициент доверия 99.99% и IR дает 100%, что соединение является обычной молекулой воды. То есть, магнекулярная связь является невидимой для современного IR детектора, поэтому, последний подтверждает неверные выводы.

В любом случае, для пика при 19 a.m.u. не может быть истинно научного или внушающего доверия объяснения, пока не будет получено ясным и численным образом, без неясной терминологии, объяснение того, как единственная a.m.u. может присоединяться к молекуле воды.

Напомним, что валентная связь требует синглетных соединений для удовлетворения принципу запрета Паули. Как следствие, соединенные

пары валентных электронов находятся в бозонных состояниях со спином ноль. При этих условиях, не может быть внушающего доверие объяснения валентной связи одного Н атома с молекулой Н–О–Н, так как это подразумевало бы связь фермиона со спином 1/2 (валентный электрон водорода) с бозоном (соединенная пара валентных электронов воды), чья связь, как хорошо известно из физики элементарных частиц, невозможна. Напротив, магнекулярная гипотеза устанавливает притягивающий характер связи ясным и недвусмысленным образом и дает ее численное значение (8.9).

Детектирование молекул жидкости сталкивается с большими проблемами, чем существуют для газа, так как магнекулы жидкости могут быть настолько большими, чтобы быть видимыми даже невооруженным глазом, и в этом случае только обычные молекулярные составляющие могут попасть в используемый детектор, что вновь приводит к отсутствию реального детектирования.

В заключение, разделение в идентификации молекул между истинно научным процессом и персональным экспериментальным мнением требует крайней осторожности перед заявлением о принадлежности определенного пика к молекуле, так как возможные неопределенности существуют в любых случаях, от малых до больших атомных весов. В конечном анализе, как подчеркивалось выше, разница между молекулой и магнекулой может быть интерпретирована как шумы или неисправности прибора.

Наиболее проблематичным явлением является то, что все GC-MS оборудованные IRD, известные автору в США, расположены в исследовательских лабораториях относящихся к оборонным, правительственным, или криминологическим институтам, и ни одного из них нет в коммерческих или академических лабораториях. Следовательно, подавляющее большинство аналитических лабораторий не имеют инструмента необходимого для окончательной и однозначной идентификации обычных молекул, не говоря уже о магнекулах.

### 8.8.3 Однозначное детектирование магнекул

Первым возможным признаком газовых магнекул являются MS пики с большим атомным весом, которые не могут быть объяснены обычными молекулярными гипотезами. Вторым признаком магнекул является отсутствие идентификации упомянутых тяжелых пиков в MS после поиска

среди всех известных молекул. Третий признак появляется когда упомянутые неизвестные пики не дают ИК сигнала, за исключением сигнала соответствующего составляющим с много меньшими атомными весами, что свидетельствует об отсутствии валентной связи. Окончательная идентификация магнекул газа требует знания метода используемого для производства этого газа или других данных.

Также как и для молекул, серьезный спектрографический анализ магнекул требует GC-MS детектора обязательно снабженного IRD, так как только такой инструмент позволяет непосредственное тестирование тех же пиков и при MS, и при IR сканированиях. Опять-таки, если IRD работает отдельно от GC-MS, упомянутое совместное исследование становится невозможным; IRD может детектировать только обычные молекулярные димеры; экспериментальное убеждение, что MS пик должен соответствовать молекуле становится следствием.

Как конкретный пример последнего случая, рассмотрим спектрографический анализ магнегаза. Это легкий газ, чьей самой тяжелой молекулой, представленной в макроскопическом количестве, должна быть CO<sub>2</sub> с весом 44 а.м.у. Рассмотрим теперь MS пик магнегаза при 481 а.м.у. Очевидно, что в то время как небольшие отклонения могли бы быть объяснены квантовой химией, большие отклонения, порядка самой величины, не могут быть осмыслены в рамках известных знаний внушающим доверие образом, поэтому допускается гипотеза о том, что этот MS пик с 481 а.м.у. для легкого газа может относиться к магнекуле. MS сканирование такого пика скоро устанавливает, что компьютер не способен идентифицировать этот пик среди всех существующих молекул. Когда GC-MS снабжено IRD, аналитик может сканировать тот же пик с 481 а.м.у. с помощью IRD и констатировать отсутствие сигнала при значении 481 а.м.у., единственные ИК сигналы будут относиться к 44 а.м.у. CO<sub>2</sub>, а также к меньшим молекулам. Производство газа при наличии сильных магнитных полей окончательно подтверждает, что рассматриваемый здесь пик при 481 а.м.у. действительно относится к магнекуле, составленной из большого числа обычных легких молекул, димеров и отдельных атомов, в согласии с Определением 8.2.1.

Заметим, что IRD сканирование в вышеприведенном тестировании идентифицирует строго обычные молекулы, без каких-либо неизвестных дополнений. Однако, заключение о том, что рассматриваемый газ составлен только из молекул было бы ненаучным по множеству причин, таким как: 1) магнитные связи прозрачны для IR сканирований с используе-

мыми частотами; 2) нет IR детектирования специально для 481 а.м.у.; и 3) IRD не детектирует молекулы, а только димеры.

Следовательно, даже хотя IRD детектирует CO<sub>2</sub> в вышеприведенном тесте, реальное детектирование проводилось для C–O димера, таким образом утверждение о наличии полной молекулы CO<sub>2</sub> является персональным мнением, а не экспериментальным фактом.

Аномальная теплота сгорания, вес и другие характеристики магнегаза подтверждают вышеуказанное заключение, так как последние могут объясняться только предположением, что определенная часть IR сигналов действительно относится к полным молекулам, в то время как оставшаяся относится к неспаренным димерам захваченным магнекулами. Высвобождение димеров и атомов в ходе сгорания и их рекомбинация в молекулы, как описано уравнениями (8.5), объясняет тогда аномальную теплоту сгорания.

В добавок к основным требованиям, множество других предосторожностей в использовании GC-MS снабженного IRD являются необходимыми для детектирования магнекул, такие как:

i) MS оборудование должно позволять измерения пиков при обычной температуре, и следует избегать высоких температур GC-MS колонны, с успехом используемых для молекул;

ii) питающая линия должна быть охлаждена до криогенных температур;

iii) GC-MS/IRD должен быть оборудован питающими линиями с внутренним диаметром по крайней мере 0.5 мм;

iv) GC-MS должен быть установлен на детектирование пиков с очень большими атомными весами, обычно не ожидаемых; и

v) Время сканирования должно быть максимально возможным для данного инструмента, например, по крайней мере, 25 минут.

Следует подчеркнуть, что *не удовлетворение хотя бы одного из вышеперечисленных условий, в общем, подразумевает невозможность детектирования магнекул*. Например, использование питающей линии с внутренним диаметром 0.5 мм не является необходимым для обычных легких газов, но является необходимым для газа с магнекулярной структурой, такого как магнегаз. Это является следствием уникальной адгезии магнекул в отношении стенок питающей линии, что приводит к забиванию линий, которые перестают пропускать наиболее важные для детектирования магнекулы, то есть, с большими атомными весами.

Схожим образом, как правило, для тестирования обычных газов ис-



пользуют GC-MS с колоннами при высокой температуре, для получения как можно более короткого времени тестирования, так как обычные молекулы являются довольно стабильными при рассматриваемых температурах. Использование такого метода препятствовало бы детектированию новых соединений, так как, как отмечено ранее, магнекулы имеют характеристическую температуру Кюри, при которой исчезают все магнитные черты. Магнекулы являются стабильными при обычных температурах и, следовательно, должны исследоваться при обычных температурах.

Подобным же образом, напомним, что GC-MS с коротким временем сканирования, в общем, используется для скорейшего получения результата. Опять-таки, использование такой практики, которая после многочисленных апробаций оправдывается для молекул, препятствует хорошему детектированию магнекул. Если время сканирования меньше порядка 25 минут, например, порядка одной минуты, все пики магнекул совмещаются в один большой пик, как описано ниже. В этом случае аналитик, как правило, вынужден исследовать отдельный сектор упомянутого пика. Однако, таким образом, аналитик идентифицирует обычные молекулы составляющие магнекулу, а не саму магнекулу.

Когда эти детекторы с малым временем сканирования снабжены IRD, то последний фиксирует инфракрасные сигналы отдельных обычных молекул, составляющих упомянутой большой единственный пик и не фиксирует возможный ИК сигнал самого единственного большого пика. Следовательно, GC-MS с малым временем сканирования принципиально не подходит для детектирования магнекул, так как не может разделить все существующие соединения на отдельные пики.

В заключение, экспериментальные данные относительно вышесказанного убеждают необходимость, при детектировании магнекул, скорее *избегать, чем использовать, технологии и оборудования эффективные для магнекул*, то есть, избегать использовать GC-MS без IRD, с малым временем сканирования, высокими температурами колонны, микроскопическими подающими линиями и т.д. Напротив, должны быть разработаны новые специальные технологии для детектирования магнекул.

Условия для научных измерений *магнекул жидкости* через LC-MS/UVD являются еще более строгими, чем для газов, из-за большого возрастания, в общем, атомного веса магнекул жидкости, которые обычно намного больше, чем внутренний диаметр обычно используемых подающих линий, как показано ниже.

Это подразумевает возможность ошибочного вывода, что магнеку-

лы не существуют, так как они не детектируются LC-MS, в то время как в действительности, магнекулы предназначенные для детектирования просто вообще не могут попасть в инструмент.

#### 8.8.4 Очевидность магнекулярной структуры $H_3$ и $O_3$

Как это хорошо известно, химия зафиксировала, при GC-MS тестированиях, кластеры с весом 3 а.м.у., которые могут быть составлены только тремя H атомами,  $H_3$ , в то время как знакомый озон  $O_3$  был известен уже довольно давно. Эти структуры обычно принимаются как молекулы, то есть, имеющими валентную связь, согласно одной терминологии, или как то иначе, хотя автор не уверен в наличии глубоких теоретических или экспериментальных данных о том, что представляет собой связь третьего атома с обычной молекулой.

Имеются серьезные сомнения относительно того, как такая обычная молекулярная интерпретация выдержит испытания временем и научными данными. Для начала, фундаментальным свойством *валентных связей является корреляция электронов парами*. Так как структуры  $H_3$  и  $O_3$  содержат молекулы  $H_2$  и  $O_2$ , в которых все возможные валентные электроны уже связаны парами, то утверждение о том, что дополнительный третий валентный электрон может коррелировать с предыдущими нарушает основные химические понятия о валентности.

Кроме того, мы ранее подчеркивали, что предположение связи третьего валентного электрона с валентной парой является нарушением фундаментального физического вывода, так как это требовало бы связи фермиона (третий электрон имеет спин  $1/2$ ) с бозоном (синглетная валентная пара имеет спин 0), обладающими оба отрицательными зарядами. Такая гипотетическая связь в молекулярных условиях подразумевала бы нарушение различных законов физики элементарных частиц, например, это подразумевало бы обязательное нарушение принципа запрета Паули, так как предположение "триплета" электронов предполагает *два* идентичных электрона в одной структуре, с одинаковой энергией.

В виду вышеуказанных (а также остальных) несогласованностей, мы принимаем здесь, что *знакомые кластеры  $H_3$  и  $O_3$  являются магнекулами, содержащими третий, H и O, атом магнитносвязанным с обычными  $H_2$  и  $O_2$  молекулами, соответственно, согласно структуре Рис. 8.5.С*. Отметим, что это предположение полностью соответствует Определению 8.2.1, согласно которому, магнекулой также является единственный

атом связанный магнитным образом с совершенно обычной молекулой.

Правдоподобие вышепредложенной структуры легко иллюстрируется для случая  $O_3$ . Действительно, кислород, как известно, парамагнетик и озон, как хорошо известно, возникает при электрических разрядах. Это идеальные условия для создания магнитной поляризации орбит (по крайней мере) парамагнитных электронов. Отсюда следует притяжение противоположных магнитных полярностей и создание магнитной связи третьего атома кислорода с молекулой кислорода, что приводит к возникновению магнекулы  $O_2 \times O$ .

Вышеуказанная магнекулярная интерпретация  $O_3$  подтверждается различными GC-MS детектированиями пиков с 32 а.м.у. в магнитно обработанном газе, изначально состоявшего из чистого кислорода, и единственно возможной интерпретацией этого являются магнитно связанные молекулы кислорода, образующие магнекулу  $O_2 \times O_2$ .

Убедительность магнекулярной интерпретации менее тривиальна для  $H_3$  структуры, так как водород является диамагнетиком. Тем не менее предположение остается равно достоверным, если помнить, что главной чертой магнекул является *магнитная поляризация имеющая место на уровне каждого отдельного атома, а не на уровне диамагнитной молекулы, чей полный магнитный момент остается равным нулю, как проиллюстрировано на Рис. 8.2.*

В частности, магнекулярная интерпретация MS пиков при 3 а.м.у. является бесспорной и недвусмысленной. Напомним, что GC оборудование работает с ионизированными молекулами. При тестировании водорода, некоторое число молекул  $H_2$  разбиваются на отдельные H атомы самой ионизацией. Кроме того, ионизация производится через эмиссию электронов из нагретого катода, что очень схоже с работой PlasmaArcFlow реакторов производящих магнекулы. При этих условиях, нагретый катод GC может не только разбивать H-молекулы, но также поляризовать их, если они находятся в достаточной близости к катоду. Раз создается такая поляризация, то их связь подчиняется известному физическому закону, приводящему к образованию магнекулы Рис. 8.5.C, то есть,

$$\{H_{\downarrow} - H_{\uparrow}\} \times H_{\downarrow}. \quad (8.19)$$

Как можно видеть, связь в магнекулярной структуре явно притягивающая, очень сильная и численно определяется в (8.9). Другие интерпретации пика при 3 а.м.у., для своей правдоподобности, должны быть,

во первых, не валентного типа и объяснять внутреннюю связь ясным, недвусмысленным и численным образом.

Магнекулярная интерпретация  $H_3$  подтверждается множеством GC-MS детектирований кластеров с 4 а.м.у. в магнитно обработанном газе, который изначально состоял из чистого водорода, и при таких условиях упомянутый пик может быть создан только двумя молекулами водорода, связанными в магнекулу  $H_2 \times H_2$ , как проиллюстрировано на Рис. 8.5.А.

Напрашивается предположение, что множество пиков, детектируемых в современном GC-MS или LC-MS оборудовании, может нуждаться в магнекулярной переинтерпретации, так как, как отмечалось ранее, сам метод детектирования может создавать магнекулы. Типичным является случай, когда сравнение данного MS кластера с действительным пиком данной молекулы показывает наличие дополнительных линий.

Как характерный пример, когда пик воспроизводящий гексанальную молекулу (чей наибольший вес составляет 100 а.м.у.) содержит дополнительные линии соответствующие 133 а.м.у., 166 а.м.у. и 207 а.м.у., является очевидным, что последние линии не могут относиться к кластеру связанному с гексанальной молекулой валентной связью. Правдоподобность магнекулярной интерпретации, в этом случае, очевидна.

Для копий GC-MS сканирований, упомянутых в этом разделе, которые не приводятся для краткости, мы предлагаем заинтересованному читателю обращаться к автору.

### 8.8.5 Необходимость в новых аналитических методах

В заключение мы должны подчеркнуть, что методы для детектирования и идентификации магнекул находятся в своем зачаточном состоянии и множество вопросов еще остаются открытыми, к настоящему времени (весна 2001 г.). Один из открытых вопросов, связан с несколькими детектированиями ИК сигналов явно относящимися к сложным молекулам, таким как легкие гидрокарбонаты, в то время как такие молекулы не идентифицировались при MS сканированиях. Это предполагает реальную возможность того, что определенные сложные магнекулы действительно могут давать ИК сигнал в виду их размера. Другими словами, как отмечено ранее, магнекулы принимаются прозрачными для используемых в настоящее время IRD так как их внутриаомные расстояния предполагаются в  $10^4$  раз меньшими, чем внутриаомные расстояния в

молекулах, поэтому требуемые для тестирования частоты просто отсутствуют в используемых сейчас IRD.

Однако такой аргумент приложим только для магнекул с малым атомным весом, таким как элементарные магнекулы Рис. 8.5. Напротив, магнекулы с большим атомным весом вполне могут давать ИК сигнал и, в любом случае, вопрос требует специального изучения.

Эта возможность подтверждается тем фактом, что магнегаз создается погруженной в жидкость электрической дугой, причем плазма может достигать температуры  $10000^{\circ}$  К. Требование, чтобы легкие гидрокарбонаты могли выжить в таких условиях, не говоря уже об их образовании, является довольно сомнительным. Непосредственное наблюдение подтверждается тем фактом, что гидрокарбонаты не были зафиксированы в продуктах сгорания магнегаза. Действительно, автомобили, потребляющие магнегаз (как рассматривалось в предыдущей Главе), не имеют каталитического конвертера. Непосредственный анализ их выхлопа показывает *отрицательное количество* гидрокарбонатов, то есть, выхлоп содержит меньше гидрокарбонатов чем в окружающей атмосфере, которая использовалась для калибровки инструмента.

В заключение, мы имеем случай, когда легкие гидрокарбонаты, вроде бы, фиксируются IR сканированиями как существующие в малом количестве в магнегазе, в то время как гидрокарбонаты никогда не идентифицировались при MS сканированиях, предполагается невозможным для гидрокарбонатов выжить при экстремальных температурах электрической дуги, используемой для их производства, и не зафиксировано присутствия гидрокарбонатов в продуктах сгорания.

Все это вновь является иллюстрацией того, что идентификация обычных молекул только с использованием IR сканирований или, эквивалентно, только с использованием MS сканирований, является, в общем, просто персональным мнением без научных оснований.

## 8.9 Экспериментальные данные по магнекулам газа

### 8.9.1 Обычный химический состав магнегаза используемого при тестированиях

Как хорошо известно, подводная дуга была разработана в середине 19-го века. Горючий характер газа, производимого подводной дугой, был открыт моряками в тот же период, которые поджигали пузырьки газа поднимающегося на поверхность от подводной дуги, используемой при сварке в море.

Впоследствии, было получено множество патентов на производство горючего газа производимого подводной дугой (см., например, патенты в США [5]). Их главное различие заключалось в эффективности производства, количестве  $\text{CO}_2$ , теплоте сгорания и в других аспектах. Эта технология достигла промышленной приемлемости только недавно, с появлением PlasmaArcFlow реактора (патент и патенты заявлены), как рассмотрено в предыдущей главе.

Как отмечено ранее в этой главе, эффективным способом для производства весьма чистого ансамбля магнекул газа является производство горючего газа электрической дугой между угольными электродами погруженными в жидкость.

Все эти газы называются "магнегазом", так как они имеют магнекулярную структуру независимо от жидкости и метода используемого для его производства.

Версия магнегаза, используемого для тестирований рассматриваемых в этом разделе, была произведена электрической дугой между угольными электродами погруженными в обычную водопроводную воду. Согласно нескольким химическим анализам, проведенным в лаборатории NASA и других лабораториях, такой газ имеет следующий *обычный химический состав*:

$$50\% \text{ H}_2, \quad 40\% \text{ CO}, \quad 9\% \text{ CO}_2, \text{ traces of O}_2 \text{ and H}_2\text{O}. \quad (8.20)$$

Следовательно, максимальной химической составляющей в макроскопическом количестве, в этом частном типе магнегаза, дается  $\text{CO}_2$  с 44 a.m.u.

В отношении предыдущих публикаций непосредственных относящихся к детектированию магнекул, мы напомним, что, как отмечено ранее,

"Н<sub>3</sub>" структура постоянно детектируется при GC-MS анализах водородосодержащих газов. Некоторые из этих недавних химических исследований могут быть найдены в работе [6] и цитированной там литературе. Однако, физические причины для невозможности наличия валентной связи и, соответственно, для новой структуры, как на Рис. 8.5.C не были отмечены только в [6].

Схожим образом, существует множество теоретических и экспериментальных исследований в химической литературе по молекулярным магнитным свойствам, таких как [7] и цитированная там литература. Эти исследования относятся к "глобальным" магнитным свойствам обычных "молекул" и там не появляется определение "новые химические соединения". Напротив, исследования представленные в этой Главе относятся к магнитным полям "отдельных атомов" и их способности формировать "новые химические соединения" не относящиеся к молекулам.

Автор (физик) был бы очень благодарен коллегам, если бы они прислали копии работ более непосредственно связанных с использованием магнитных полей "орбит периферийных атомных электронов" для создания "новых химических соединений" не относящихся к молекулам, для точного цитирования родственной литературы в возможном новом издании этой монографии.

### 8.9.2 GC-MS/IRD измерения магнегаза на базе BBC McClellan

Сантилли [1] предсказал, что газы произведенные с помощью подводной электрической дуги имеют новую химическую структуру магнекул, которая определяется как кластеры молекул, димеров и отдельных атомов, согласно Определению 8.2.1, и в этом случае, обычная химическая структура (8.20) действительна только как первое приближение.

После тяжелых поисков, Сантилли [*loc. cit.*] нашел GC-MS снабженный IRD, подходящий для измерения магнекул, на военно-воздушной базе *McClellan Air Force Base* в North Highland, недалеко от Сакраменто (Sacramento), Калифорния. Благодаря неоценимой помощи и финансовой поддержке Леона Тоупса, президента *Toups Technologies Licensing, Inc.*, Ларго, Флорида, GC-MS/IRD измерения были санкционированы для магнегаза с обычной химической структурой (8.20).

19 июня, 1998 г., Сантилли посетил аналитическую лабораторию *Natio-*

## 8.9. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ДАННЫЕ ПО МАГНЕКУЛАМ ГАЗА411

*nal Technical Systems* (NTS) расположенную на упомянутой базе *McClellan Air Force Base* и смог использовать ее оборудование. Измерения магнегаза проводились аналитиками: Луисом А. Дии (Louis A. Dee), директором лаборатории (Branch Manager), и Норманом Вейдом (Norman Wade), оператором *HP GC модели 5890, HP MS модели 5972, снабженных HP IRD модели 5965*. Исследование приборов по прибытии показало удовлетворение всем условиям отмеченным в предыдущем разделе, тогда и только тогда были произведены измерения.

Благодаря профессиональному сотрудничеству с аналитиками NTS, оборудование было настроено на все необычные условия отмеченные в Разделе 8.8.3. В частности, оборудование было настроено для аналитического метода VOC IRMS.M, использующего HP Ultra 2 колонну 25 м длины, с внутренним диаметром 0.32 мм и толщиной пленки 0.52  $\mu\text{m}$ . Это также требовалось для проведения анализа от 40 а.м.у. до инструментального предела 500 а.м.у. Это условие было необходимо для того, чтобы избежать ожидаемого большого СО пика магнегаза при 28 а.м.у.

Кроме того, GC-MS/IRD был установлен на низкую температуру 10°C; была установлена наибольшая из возможных подающих линий с внутренним диаметром 0.5 мм; сама подающая линия криогенно охлаждалась; оборудование было установлено на максимально большое время тестирования 26 минут; и линейная скорость потока была выбрана 50 см/сек. Множество других технических требований излагаются в полной документации к измерениям.

До измерений магнегаза, аналитики сняли *фоновые* показания инструмента (так называемый *бланк*). Измерения были начаты после того, как *все* необходимые условия были удовлетворены. Результаты, изложенные частью через воспроизведение сканирований, Рисунки 8.7–8.12 представляют собой первые непосредственные экспериментальные данные о существовании магнекул в газах.

После 26 минут ожидания, на MS экране появились шестнадцать больших пиков между 40 и 500 а.м.у., как показано на Рис. 8.7. Каждый из этих шестнадцати MS пиков оказался "неизвестным", согласно поиску в компьютерной базе данных *McClellan Air Force Base* среди всех известных молекул, как иллюстрируется Рис. 8.8. Пик соответствующий CO<sub>2</sub> в MS спектре, между 40 и 500 а.м.у., не был детектирован вообще, несмотря на присутствие 9% таких молекул в магнегазе согласно обычным анализам (8.20).

После завершения MS измерений, точно та же область, от 40 до



500 а.м.у., была подвергнута ИР детектированию. Как и ожидалось, ни один из шестнадцати пиков не давал инфракрасного сигнала вообще, как показано на Рис. 8.9. Более того, ИР сканирование для этих MS пиков показало только один пик, который относился к  $\text{CO}_2$ , с дополнительными маленькими пиками, возможно означающими следы присутствия других веществ.

Отметим, что ИК сигнал других компонент, таких как  $\text{CO}$  или  $\text{O}_2$  не мог быть детектирован при этом ИР тестировании, так как их атомные веса находятся за левым пределом сканирования. В добавок, сам ИК пик  $\text{CO}_2$  является мутированным по отношению к неполяризованной молекуле, как показано на Рис. 8.10. Заметим, что мутация выразилась в появлении *двух новых пиков*, которые отсутствуют в обычном ИК сигнале  $\text{CO}_2$ , точно как и ожидалось, чем подтверждается гипотеза новых внутренних связей, которая предложена в Рис. 8.6.

Отметим также, по поводу Рис. 8.10, что компьютер интерпретирует ИК сигнал, как относящийся к  $\text{CO}$ , что, очевидно, неверно, так как  $\text{CO}$  не может находиться в выбранной области атомных весов.

Все оставшиеся маленькие пики ИР сканирования, после компьютерного поиска в базе данных ИК сигналов всех известных молекул, оказываются "неизвестными", поэтому возможно они соответствуют магнекулам, как иллюстрируется Рис. 8.11.

После удаления магнегаза из GC-MS/IRD, фоновые измерения продолжали показывать те же аномальные пики Рис. 8.7 и приняли конфигурацию Рис. 8.12 только после прокаливании инертным газом. Отметим, что последний фон является аномальным сам по себе, так как склон должен быть направлен в противоположную сторону по сравнению с показанным. Фон, в конце концов, принял свою обычную форму только после продувания инструмента инертным газом при высокой температуре.

### 8.9.3 GC-MS/IRD тестирования магнегаза в лаборатории Pinellas County Forensic

Измерения на том же образце магнегаза, что использовался при тестированиях в NTS, были повторно проведены 25 июля, 1998 года, на GC-MS/IRD лаборатории *Pinellas County Forensic Laboratory* (PCFL), Ларго, Флорида, при поддержке *Toups Technologies Licensing, Inc.*

Оборудование состояло из *HP GC*, модели 5890, серии II; *HP MS*,

## 8.9. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ДАННЫЕ ПО МАГНЕКУЛАМ ГАЗА413

модели 5970; и HP IRD, модели 5965B. Хотя и очень схожее с оборудованием используемым в NTS, оборудование PCFL значительно отличается, так как температура выросла с 10°C до 55°C и время сканирования понизилось с 26 до 1 минуты. Последнее понижение подразумевало сжатие всех пиков Рис. 8.7 в один большой пик, что подтвердилось в дальнейшем всеми соответствующими GC-MS тестированиями с малым временем сканирования.

Несмотря на эти отличия, тестирование в PCFL, результаты которого изложены вместе с воспроизведениями сканирований на Рисунках 8.13–8.18, подтвердили все свойства магнекул, впервые детектированных в NTS. В добавок, тестирования дали информацию о дополнительных свойствах.

По предложению Сантилли [1], аналитики провели два MS теста того же магнегаза в различное время, а именно с интервалом в 30 минут. Как можно видеть из Рис. 8.13 и 8.14, тестирования в PCFL обеспечили первые экспериментальные данные относительно мутации во времени атомного веса магнекул. Действительно, пик на Рис. 8.13 сильно отличается от того же пика на Рис. 8.14.

Это различие показывает очевидность того, что, при столкновениях, магнекулы могут распадаться на обычные молекулы, атомы и фрагменты магнекластеров, которые затем рекомбинируют с другими молекулами, атомами и/или магнекулами с формированием новых кластеров. Это же сканирование дает первые экспериментальные данные о присоединении или утрате магнекулами отдельных атомов, димеров и молекул, что обсуждается ниже.

Рисунок 8.15 иллюстрирует невозможность для GC-MS/IRD идентифицировать пики Рис. 8.13 и 8.14 после поиска в базе данных, содержащей все известные молекулы.

Рисунок 8.16 дает независимое подтверждение результатов ИК сканирования Рис. 8.9, а именно, что MS пики, на этот раз относящиеся к Рис. 8.13 и 8.14, не имеют ИК сигнала, за исключением единственного сигнала CO<sub>2</sub>. Однако, последнее соединение не было детектировано при упомянутых MS сканированиях вообще. Следовательно, детектированное при упомянутом IR сканировании CO<sub>2</sub> является составляющей новых соединений детектированных на Рис. 8.13 и 8.14. Отсутствие ИК сигнала MS пиков подтверждает, что упомянутые пики не относятся к молекулам.

Рисунок 8.17 полностью подтверждает мутацию ИК сигнала CO<sub>2</sub>, от-

меченную ранее на Рис. 8.10, включая важное наличие двух новых пиков, с единственным различием, что, на этот раз, компьютер правильно идентифицирует ИК сигнал как двуокись углерода.

Рисунок 8.18 представляет фон инструмента после стандартной продувки инертным газом, после чего фон по существу сохраняет пики MS сканирований, чем подтверждается уникальная адгезия магнекул к стенкам инструмента.

#### 8.9.4 Интерпретация результатов

Для правильной интерпретации результатов следует сделать несколько комментариев. Во первых, заметим, что при GC-MS/IRD сканированиях, детектируемый в IRD  $\text{CO}_2$  не имеет аналога в MS сканированиях, а также MS пики не имеют аналогов в IR сканированиях. Другими словами, детектируемый при IR сканированиях  $\text{CO}_2$  пик, отмеченный на Рис. 8.10 и 8.17, не соответствует какому-либо пику при MS сканированиях, отмеченных на Рис. 8.7, 8.13 и 8.14. Следовательно, упомянутый IR пик соответствует *составляющей* MS кластера, а не отдельной молекуле.

Кроме того, IR сканирование было сделано для всей области от 40 до 500 а.м.у., отсюда следует, что упомянутый ИК пик является единственной обычной составляющей с макроскопическим количеством в указанной массовой области всех MS пиков, а именно, единственная составляющая идентифицированная IRD является составляющей всех пиков.

Следует также отметить, что, как сказано выше, IRD детектирует только *димеры*, такие как C–O, H–O и т.д., и не детектирует полные молекулы. Следовательно, пик, детектируемый IRD, не достаточен для установления присутствия полной молекулы  $\text{CO}_2$ , пока последняя не будет независимым образом идентифицирована в MS. В то же время, MS сканирование не регистрирует каких-либо пиков молекулы  $\text{CO}_2$ , как отмечено ранее. Несмотря на это, присутствие среди MS пиков соответствующих полным молекулам  $\text{CO}_2$  не может быть отвергнуто. Следовательно, наиболее достоверным заключением является то, что MS пики отвечают за кластеры составленные из некоторого количества димеров C–O и некоторого количества молекул  $\text{CO}_2$ , плюс другие димеры, и/или молекулы, и/или атомы с атомным весом меньшим, чем 40 а.м.у., поэтому не входящие в границы рассматриваемых сканирований.

Как отмечено ранее, присутствие димеров и отдельных атомов в магнегазе является существенным для количественной интерпретации силь-

## 8.9. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ДАННЫЕ ПО МАГНЕКУЛАМ ГАЗА415

но повышенной теплоты сгорания нового топлива, по крайней мере в три раза по сравнению со значением предсказываемым квантовой химией. Допущение димеров и атомов как составляющих магнекул без труда объясняет эту аномальную теплоту сгорания, так как упомянутые димеры и атомы отделяются во время сгорания, и могут в это время формировать молекулы согласно экзотермическим реакциям типа (8.5). В случае, если бы магнекулы не содержали димеров и атомов, их единственными составляющими были бы молекулы, и в этом случае, избыток энергии при сгорании был бы невозможен.

Большие различия между MS пиками в двух тестированиях в NTS и PCFL лабораториях, для одного и того же газа в одной и той же области от 40 до 500 a.m.u., хотя с разным GC-MS/IRD оборудованием, иллюстрирует важность использования времени сканирования порядка 26 минут. Действительно, при MS времени сканирования 26 минут появляются шестнадцать различных пиков, как иллюстрируется Рис. 8.7, в то время как все эти пики сжимаются в один единственный пик на сканированиях Рис. 8.13 и 8.14, так как последние были сделаны при времени сканирования около 1 минуты. Следовательно, *сжатие шестнадцати пиков Рис. 8.7 в один большой пик Рис. 8.13 и 8.14 не свойственно магнекулам, а является следствием малого времени сканирования инструмента.*

### 8.9.5 Заключительные замечания

Тестирования магнегаза проведенные на базе *McClellan Air Force Base* и в лаборатории *Pinellas County Forensic Laboratory*, представленные сканированиями Рис. 8.7–8.18, представляют собой два независимых подтверждения всех характеристик магнекул газа согласно Определению 8.2.1, которые могут быть обнаружены с помощью GC-MS оборудованного IRD, оставшиеся характеристики требуют отдельных измерений представленных в следующем разделе.

Первым, и возможно самым важным, результатом, впервые достигнутым в ходе этих тестирований является то, что сканирования Рис. 8.7, 8.13 и 8.14 представляют собой независимые экспериментальные данные о магнекулах, новых химических соединениях, согласно терминологии Раздела 8.1, так как они относятся не просто к довольно чистому, но к действительно чистому ансамблю магнекул, согласно полному отсутствию молекул в непосредственно детектируемом количестве.

Более обще, упомянутые независимые тестирования, плюс множество дополнительных тестирований, не рассматриваемых здесь для краткости, подтверждают следующие черты Определения 8.2.1:

I) Магнекулы были зарегистрированы при MS сканированиях в области больших атомных весов, где не ожидалось никаких молекул рассматриваемого газа. Действительно, наибольшей молекулой тестируемого магнегаза, произведенного из водопроводной воды, с обычным химическим составом (8.20), с макроскопическим процентным содержанием, является  $\text{CO}_2$  с 44 а.м.е., в то время как детектировались пики с макроскопическим процентным содержанием соответствующие весам в *десять* и более раз большим.

II) MS пики, характеризующие магнекулы, остались не идентифицированными после компьютерного поиска среди всех известных молекул. Это свойство было независимо подтверждено для *каждого* из шестнадцати пиков Рис. 8.7, для всех пиков Рис. 8.13 и 8.14, как, в частности, проиллюстрировано Рис. 8.8 и 8.15, плюс для всех дополнительных MS сканирований, не приведенных здесь из соображений краткости.

III) Вышеупомянутые MS пики, характеризующие магнекулы, не дают ИК сигнала, чем подтверждается отсутствие в них валентных связей. Действительно, ни один из рассмотренных здесь пиков не дает какого-либо ИК сигнала, как, в частности, иллюстрируется Рис. 8.9 и 8.16, чем подтверждается наличие существенно чистого ансамбля магнекул.

IV) ИК сигнал, единственной молекулы, детектированной с большим процентным содержанием, то есть  $\text{CO}_2$ , мутирован, что каждый раз отражается в появлении двух новых пиков, как показано на Рис. 8.10 и независимо подтверждается Рис. 8.17. Так как любой пик в ИК сигнале соответствует внутренней связи, рассматриваемая здесь мутация подтверждает создание PlasmaArcFlow технологией новых внутренних магнитных связей между обычными молекулами, согласно Рис. 8.6.

V) Аномальная адгезия магнекул подтверждается обоими тестированиями, а именно, тем фактом, что фоновые измерения (бланк) в конце тестирований, после обычной продувки, продолжают показывать присутствие тех же магнекул, которые детектировались в процессе тестирований, как проиллюстрировано Рис. 8.12 и 8.18.

VI) Атомный вес магнекул мутирует со временем, так как магнекулы могут разбиваться на фрагменты в ходе столкновений и, затем, формировать новые магнекулы с другими фрагментами. Эта черта ясно проиллюстрирована макроскопическими различиями двух сканирований на

## 8.9. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ДАННЫЕ ПО МАГНЕКУЛАМ ГАЗА 417

Рис. 8.13 и 8.14 на том же инструменте, с тем же газом, при тех же условиях, только с интервалом в 30 минут.

VII) Магнекулы могут присоединять или терять отдельные атомы, димеры или молекулы. Это дополнительное свойство доказано сканированиями Рис. 8.13 и 8.14, в которых можно видеть, что: пик при 286 а.м.у. первого Рисунка превращается в пик при 287 а.м.у. на последнем, что свидетельствует о присоединении одного атома водорода; пик при 302 а.м.у. на первом Рисунке переходит в пик при 319 а.м.у. на последнем, что свидетельствует о присоединении Н–О димера; пик при 328 а.м.у. на первом Рисунке переходит в пик при 334 а.м.у. на последнем, что свидетельствует о присоединении одной молекулы  $O_2$ ; пик при 299 а.м.у. на первом Рисунке становится пиком при 297 а.м.у. на последнем, что свидетельствует о потере одной молекулы  $H_2$ ; и т.д. Следует отметить, что эти черты подтверждаются всеми последующими GC-MS/IRD сканированиями, не приведенными здесь из соображений краткости.

Другие свойства Определения 8.2.1 требуют измерений с помощью другого оборудования, чем GC-MS/IRD, и поэтому они будут обсуждаться в следующем разделе.

Отметим, что, как иллюстрируется Рис. 4.5 и 8.3, нет необходимости в полной магнитной полярности в кластерах составляющих магнегаз. По существу, *отсутствие этой необходимости* является необходимой во избежание несогласованного предсказания о парамагнетизме всех кластеров. Общее ожидание, что кластер может иметь магнитный момент если и только если он свойственен кластеру как целому является, может быть, причиной отсутствия предсказаний и детектирований магнекул до настоящего времени.

Схожим образом, ионные кластеры должны быть исключены из возможной интерпретации пиков Рис. 8.7–8.18, согласно тому факту, что ионы имеют одинаковый заряд и, следовательно, они отталкиваются, а не притягиваются друг к другу.

Так как экспериментальные данные исключают возможное валентное или электрическое происхождение связи, то единственной оставшейся возможностью является то, что сила притяжения ответственная за пики имеет магнитный характер, а именно, упомянутые пики соответствуют магнекулам.

В заключение, автор хотел бы подчеркнуть, что вышеприведенные данные, даже несмотря на многократные независимые подтверждения, должны рассматриваться как предварительные и нуждающиеся в до-

полнительных независимых проверках, которые должны проводиться при следующих предположениях:

1) Изначально должны рассматриваться только пики с макроскопическим процентным содержанием, чтобы избежать сдвига рассмотрения вопросов первой важности к вопросам вторичного значения.

2) Внутренняя сила притяжения, необходимая для самого существования кластера, должна идентифицироваться в ясных численных членах без неясных терминов, несоответствующих действительной физической реальности, или запрещенных физическими законами; и

3) Принятая терминология должна использоваться с осторожностью. Слово "магнекула" является просто названием принятым для обозначения химических соединений обладающих определенными специфическими характеристиками от I) до XV) Определения 8.2.1, которые существенным образом отличаются от характеристик молекул. Следовательно, было бы некорректно новые соединения называть молекулами. Важные свойства являются совершенно новыми характеристиками и не имеют еще своих унифицированных названий.

## 8.10 Экспериментальные данные о магнекулах жидкости

### 8.10.1 Приготовление магнекулярной жидкости используемой при тестированиях

В начале 1998 года, Сантилли [1] получил большое количество образцов *ароматических масел* от *Givaudan-Roure Corporation* (GR), с главным офисом в Тинеке (Teaneck), Нью-Джерси. Около 50 cc различных образцов идеально прозрачных масел были размещены в отдельных стеклянных контейнерах. Один из полюсов постоянного магнита с напряженностью 12000 G и размерами  $1/2'' \times 1'' \times 2''$  погружался в упомянутые масла.

Начиная с идеальной прозрачности, после нескольких дней стало заметно потемнение масла, совместно с заметно возросшей вязкостью, причем изменения заметно варьировались от образца к образцу. Впоследствии, в толще масел стали появляться темных гранулы, которые были заметны невооруженным глазом. И потемнение и вязкость прогрессивно нарастали в течении последующих дней, цвет, в определенных слу-

чаях, стал темно коричневым, образец стал полностью непрозрачным. Вязкость достигла такой степени, что масло совершенно утратило текучесть.

Следует подчеркнуть, что вышеуказанные видимые эффекты имеют чисто магнитное происхождение, так отсутствовало какое-либо другое вмешательство, например, полностью были исключены какие-либо примеси. После погружения постоянных магнитов, все образцы были оставлены невозмущенными при обычных комнатных условиях. Отмеченные эффекты остались неизменными по сей день, отсюда следует, что эти изменения стабильны при нормальных температуре и давлении.

Основная гипотеза Сантилли [1] относительно потемнения масел заключается в том, что их молекулы приобрели магнитную поляризацию орбит, по крайней мере, некоторых из их атомных электронов (называемых в химии *циклотронными резонансными орбитами*), что, в свою очередь, привело к их связыванию друг с другом согласно Определению 8.2.1, подобным образом, как это имеет место в газах.

Следует также заметить, что погружение одного полюса постоянного магнита в ароматические масла является, очевидно, элементарным способом для создания магнекул в детектируемом количестве, хотя и не существенно чистого ансамбля магнекул, как требуется для новых химических соединений (см. Раздел 8.1). Теперь доступно большое количество более утонченных техник магнитной поляризации, с довольно сложными геометриями. А также, как отмечено в Разделе 8.5, существенно чистые ансамбли жидких магнекул могут быть получаемы с помощью PlasmaArcFlow реакторов, описанных в предыдущей главе.

### 8.10.2 Данные фотографии о магнекулах в жидкости

Вышеуказанное изменение структуры ароматических масел было подтверждено фотографиями, сделанными в исследовательской лаборатории GR в Дубендорфе (Dubendorf), Швейцария, с помощью микроскопа с минимальным увеличением, как иллюстрируется на Рис. 8.19 и 8.20.



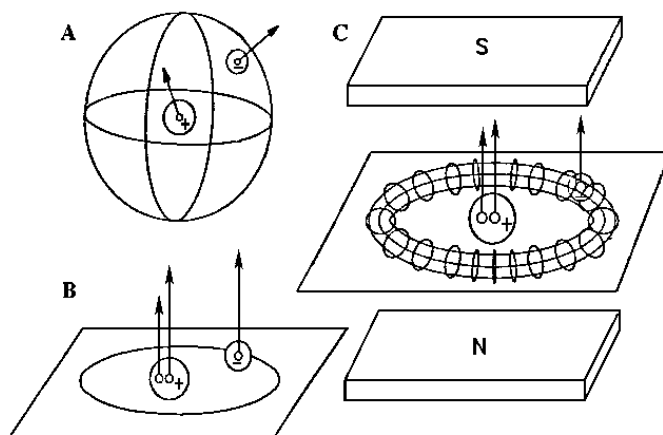


Рис. 8.1: Схематический вид силовых полей существующих в атоме водорода. Рис. 8.1.А изображает изолированный атом водорода в его обычной сферической конфигурации, при абсолютном нуле температуры, в которой единственные силовые поля создаются электрическими зарядами электрона и протона, а также внутренними магнитными полями тех же частиц. Рис. 8.1.В изображает тот же атом водорода, в котором орбита периферийного электрона поляризована в плоскости. В этом случае, появляется пятое поле, – магнитный дипольный момент создается вращением электрона по его плоской орбите. Рис. 8.1.С изображает тот же атом водорода под действием внешнего магнитного поля, которое служит причиной перехода от сферического распределения периферийного электрона, как на Рис. 8.1.А, к распределению с той же цилиндрической симметрией, которой обладает внешнее поле, и к такому, чтобы обладать магнитной полярностью противоположной полярности внешнего магнитного поля. В последнем случае, поляризация принимает вид тороида и приобретает идеально плоскую конфигурацию Рис. 8.1.В только при абсолютном нуле температуры, или под воздействием предельно сильного магнитного поля.

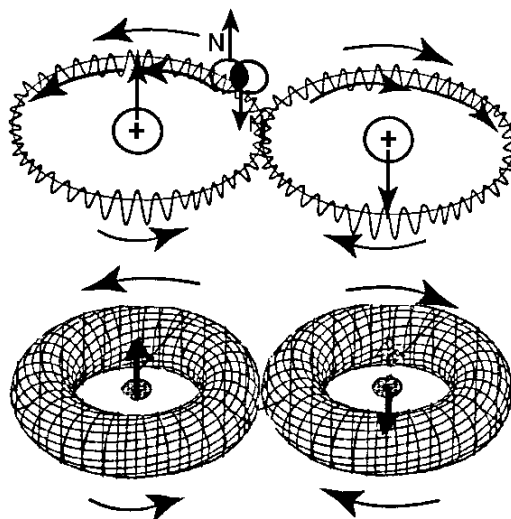


Рис. 8.2: Схематический вид магнитных полей изоэлектронной модели молекулы водорода, с изоэлектронием принятым стабильной квази-частицей. Верхнее изображение воспроизводит молекулу при абсолютном нуле температуры, с поляризованной в плоскости орбитой, тогда как нижнее изображение воспроизводит молекулу при нормальной температуре, с поляризацией орбиты в виде торойды. В обоих случаях исчезают *полные внутренние* магнитные моменты электронов, так как они соединены в изоэлектронием с антипараллельными спинами и магнитными моментами, согласно принципу запрета Паули. *Отсутствие* вклада внутренних магнитных моментов электронов сохраняется даже когда изоэлектронием имеет размеры много больше 1 фм, так как сохраняется антипараллельный характер спинов и магнитных моментов, что приводит к среднему значению полного внутреннего момента электронов равному нулю. Следовательно, наибольший магнитный момент молекулы водорода, который может быть получен поляризацией, обусловлен только электронными *орбитами*. Заметим, что, как сказано в Разделе 4.2, конфигурация *oo*-формы (называемой также восьмеркой), как недавно доказано в математике, является наиболее стабильным решением задачи *N*-тел.

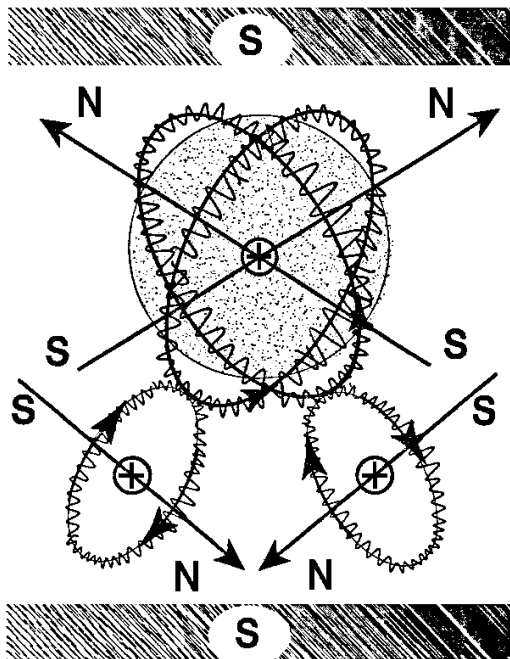


Рис. 8.3: Схематический вид, поясняющий способ, предлагаемый изохимической моделью Сантили-Шиллади (Глава 5), устранения несогласованности для молекулы воды относительно предсказания парамагнетизма обычной молекулярной теорией воды (Рис. 1.5). Как можно видеть, решение дается невозможностью для молекулы воды приобрести чистую магнитную полярность. Заметим сложность геометрии различных магнитных полей, которая, согласно продолжающимся исследованиям, впервые, дает ясное объяснение научных данных относительно величины угла в  $105^\circ$  между двумя Н-О димерами. Соответствующее решение для случая водорода дается Рис. 4.5.

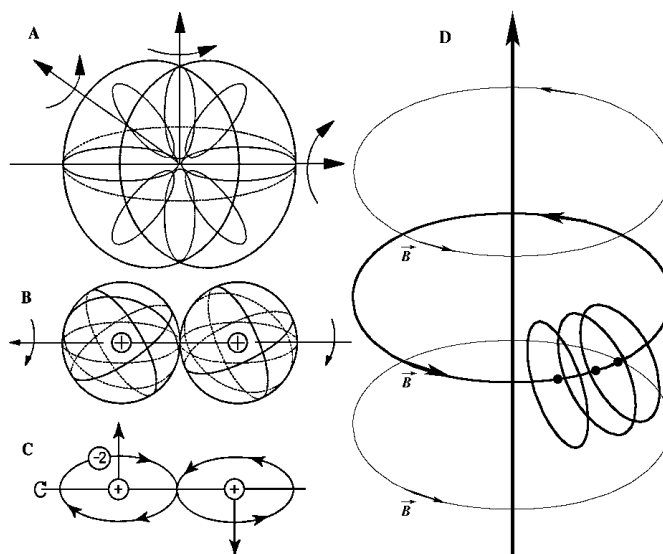


Рис. 8.4: Схематический вид главного механизма лежащего в основе создания магнекул, иллюстрируется здесь для случая молекулы водорода. Он заключается в использовании достаточно сильных внешних магнитных полей, которые могут прогрессивно исключать все вращения, что приводит молекулу водорода к конфигурации, которая, при абсолютном нуле температуры, может быть принята лежащей в плоскости. Плоская конфигурация электронных орбит подразумевает тогда появление магнитного момента, который раньше отсутствовал. Правая часть приведенного рисунка изображает геометрию магнитного поля в непосредственной близости от электрической дуги, как это и описано в тексте для случая адронных молекулярных реакторов (Глава 7). Отметим *круговую* конфигурацию силовых линий магнитного поля вокруг электрического разряда, *касательный* к силовым линиям характер осей магнитной поляризации атомов водорода и атомы водорода на *орбитальных расстояниях* от электрической дуги,  $10^{-8}$  см, что приводит к чрезвычайно сильным магнитным полям пропорциональным  $(10^{-8})^{-2} = 10^{16}$  Гаусс, поэтому достаточных для создания нужной поляризации (см. Дополнение 8.А).

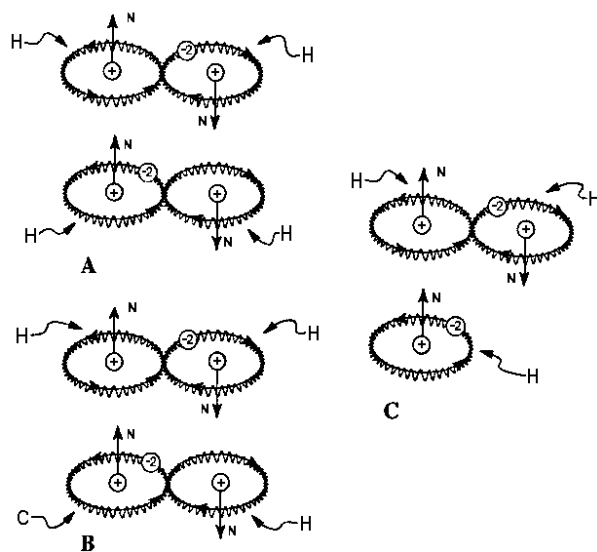


Рис. 8.5: Схематический вид простейшей из возможных связей обусловленных поляризацией орбит периферийных электронов. Случай А иллюстрирует элементарную магнекулу водорода, а именно, соединение двух молекул водорода упомянутой магнитной связью. Заметим, что магнекула имеет атомный вес очень близкий к весу гелия. Следовательно, пик соответствующий 4 а.м.у. при детектировании при помощи GC-MS сканирования, никоим образом не должен идентифицироваться как гелий, так как он может относиться к элементарной магнекуле водорода. Случай В иллюстрирует гипотезу этой монографии, что структура с весом 3 а.м.у., обычно интерпретируемая как обычная "молекула"  $H_3$ , может быть в действительности магнекулой, состоящей из молекулы водорода и отдельного атома водорода. Это имеет место из-за того, что раз два валентных электрона молекулы водорода коррелированно связаны, они не могут допускать такую же валентную связь с третьим электроном по множеству физических причин, таких как: связь не может быть стабильной, так как первые являются бозоном, а последний – фермионом; первые имеют заряд  $-2e$ , в то время как последний имеет заряд  $-e$ , что приводит к сильному отталкиванию; и т.д.

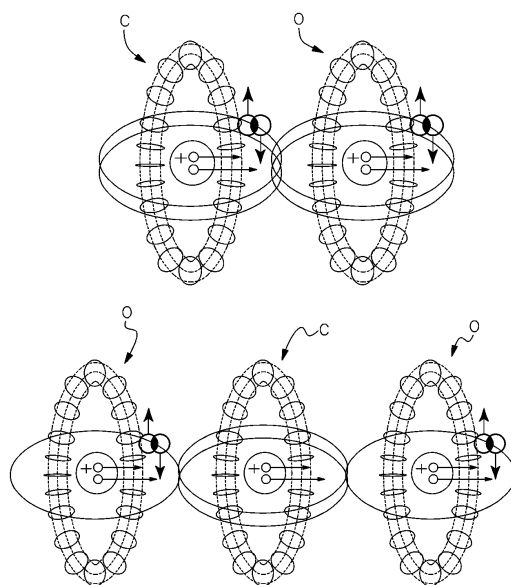


Рис. 8.6: Схематический вид поляризаций внутренних атомных электронов для случаев  $C=O$  и  $O-C-O$ , при сохранении обычных валентных связей, и создания новых связей не валентного типа в обычных молекулах, что позднее подтверждено экспериментально через ИР сканирования.

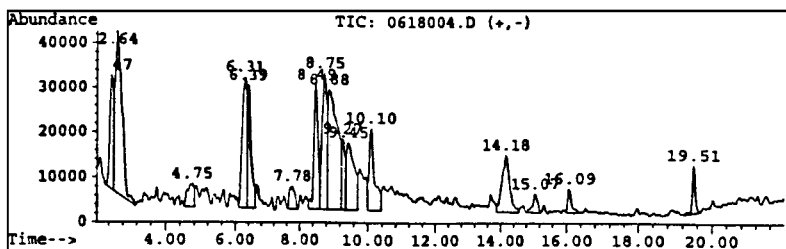
---

```

Information from Data File:
File       : C:\HPCHEM\1\DATA\0618004.D
Operator   : NAW
Acquired   : 18 Jun 98   3:01 pm using AcqMethod VOC_IRMS
Sample Name: TOUP'S TECH
Misc Info  : 1ML LOOP; 10C • ULTRA COLUMN
Vial Number: 1
CurrentMeth: C:\HPCHEM\1\METHODS\DEFAULT.M

```

---




---

Retention Time	Area	Area %	Ratio %
Total Ion Chromatogram			
2.474	1753306	5.386	32.724
2.644	5091514	15.641	95.030
4.754	641528	1.971	11.974
6.307	2737749	8.411	51.098
6.390	2211258	6.793	41.272
7.782	592472	1.820	11.058
8.490	2357396	7.242	43.999
8.754	2784829	8.555	51.977
8.882	5357812	16.460	100.000
9.265	1123809	3.452	20.975
9.448	2421234	7.438	45.191
10.098	1946292	5.979	36.326
14.177	2129791	6.543	39.751
15.073	435208	1.337	8.123
16.085	389822	1.198	7.276
19.509	577433	1.774	10.777

---

Рис. 8.7: Воспроизведение MS пиков обеспечивающих *первые экспериментальные данные о существовании магнекул*, идентифицированных 19 июня, 1998 года, аналитиками Луисом А. Дии и Норманом Вейдом в лаборатории *National Technical; Systems (NTS)* расположенной на базе *McClellan Air Force Base* в North Highland, недалеко от Сакраменто, Калифорния, при поддержке *Toups Technologies Licensing, Inc. (TTL)*, Ларго, Флорида. Сканирование ограничивалось от 40 а.м.и до 500 а.м.и. Пики относятся к магнегазу произведенному электрической дугой между потребляемыми угольными электродами, погруженной в обычную водопроводную воду. Его обычный химический состав дается (8.20). Следовательно, при сканировании в макроскопическом количестве должен был появиться только  $\text{CO}_2$  пик, в то время как никакого наличия  $\text{CO}_2$  при MS сканировании не было обнаружено вообще.

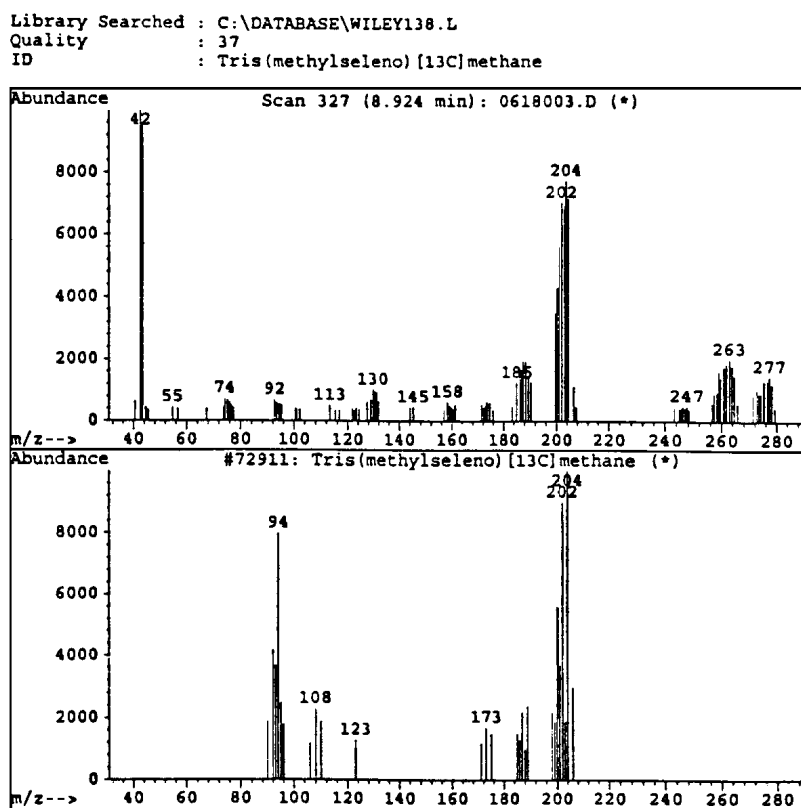


Рис. 8.8: Воспроизведение первых экспериментальных данных в NTS о том, что пики Рис. 8.7 являются "неизвестными". Верхний пик появился через 8.924 минуты, а нижний показывает отсутствие его идентификации после компьютерного поиска. Заметим, что наиболее схожий из найденных компьютером не подходит к рассматриваемому пику. Более того, идентифицированное вещество (метилселен) не может существовать в магнегазе, так как в нем не содержится необходимых элементов. Та же ситуация имеет место для всех остальных пятнадцати пиков Рис. 8.7.



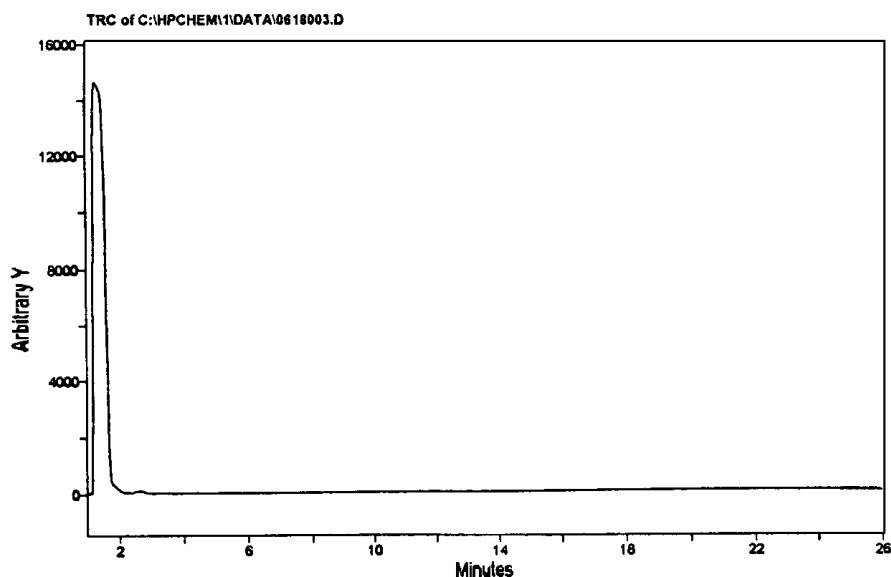


Рис. 8.9: Первые экспериментальные данные, полученные в NTS, об отсутствии ИК сигнала соответствующего MS пикам. Эти данные указывают существование больших MS пиков, не имеющих ИК сигнала вообще. Единственный зафиксированный сигнал, соответствующий  $\text{CO}_2$ , относится к составляющим пика Рис. 8.7. На приведенном рисунке имеется только ИК сигнал  $\text{CO}_2$ , так как сканирование проводилось от 40 а.м.у. до 500 а.м.у. и, раз так, не может быть ИК сигналов других молекул, таких как  $\text{O}_2$  и  $\text{CO}$  ( $\text{H}_2$  не дает ИК сигнала).

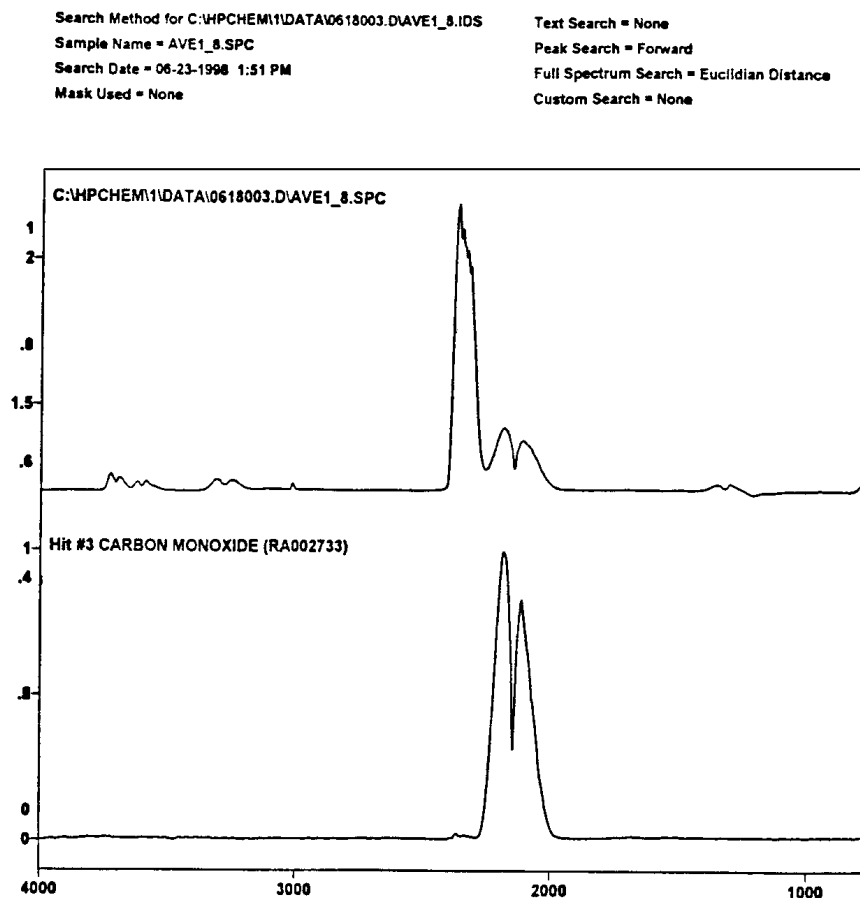


Рис. 8.10: Первые экспериментальные данные, полученные в NTS, о мутации ИК сигнала магнитно поляризованных обычных молекул, относящиеся здесь к  $\text{CO}_2$  (вверху), по сравнению с результатами компьютерного поиска (внизу). Заметим, что двухбугорчатый характер пика  $\text{CO}_2$  сохраняется в детектированном пике с правильной энергией, но только с понижением интенсивности. В то же время, появляются *два новых пика*, которые очевидно обусловлены *новыми внутренними связями с обычной молекулой  $\text{CO}_2$* . Это, очевидно, подразумевает возрастание теплоты сгорания, чем устанавливаются экспериментальные основы для новой технологии магнитно поляризованных топлив, таких как магнегаз [2]. Заметим, что компьютер интерпретирует ИК сигнал как относящийся к  $\text{CO}$ , что неверно, так как  $\text{CO}$  не входит в выбранную область детектирования.

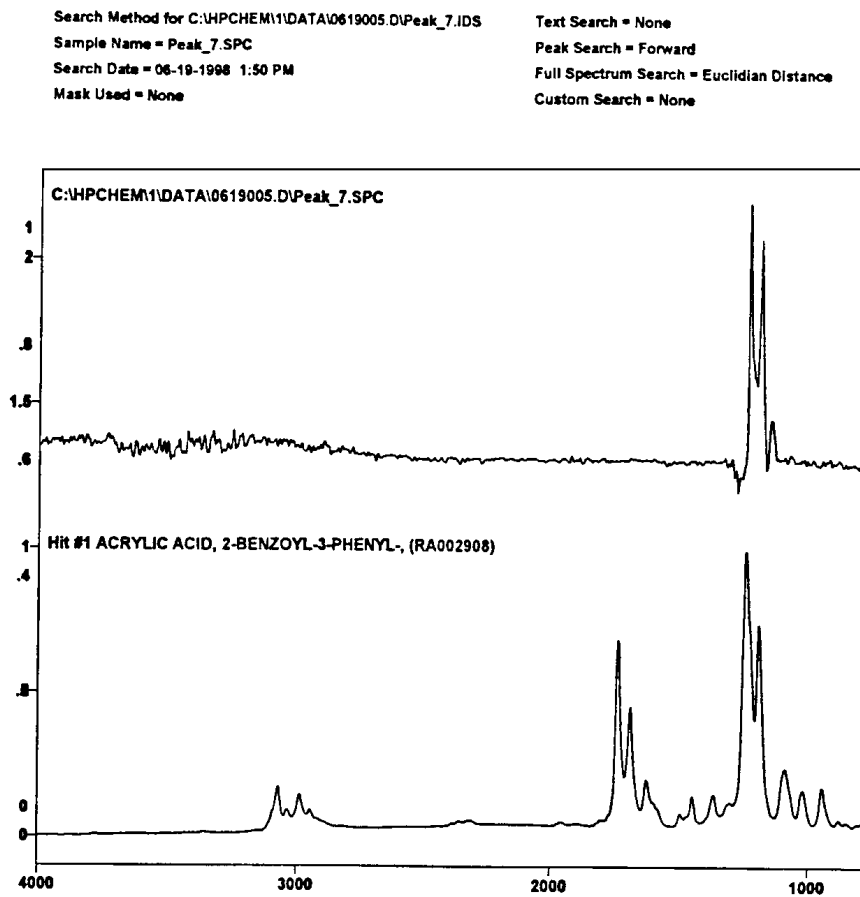


Рис. 8.11: Воспроизведение отсутствия идентификации, после поиска в компьютерной базе данных, малых пиков при IR сканировании, что, следовательно, может означать дополнительные магнекулы, или ИК сигналы магнекул появившихся в процессе MS сканирования.

File : C:\HPCHEM\1\DATA\0622005.D  
Operator : NAW  
Acquired : 22 Jun 98 1:16 pm using AcqMethod VOC\_MS  
Instrument : 5972A  
Sample Name: BLANK  
Misc Info : AFTER WEEKEND BAKEOUT  
Vial Number: 1

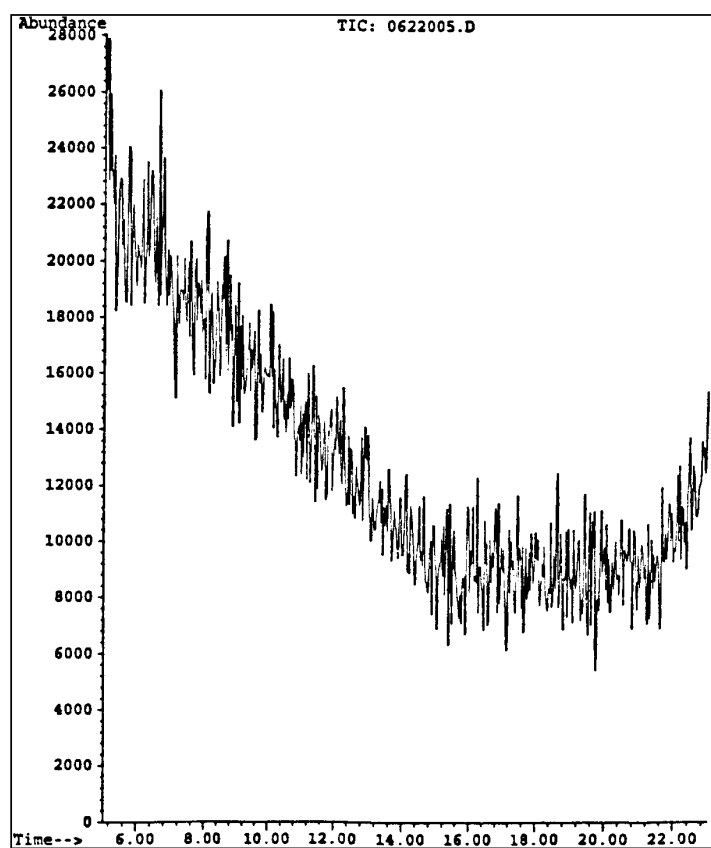


Рис. 8.12: Вид фона, полученного после предыдущих тестирований и продувки.

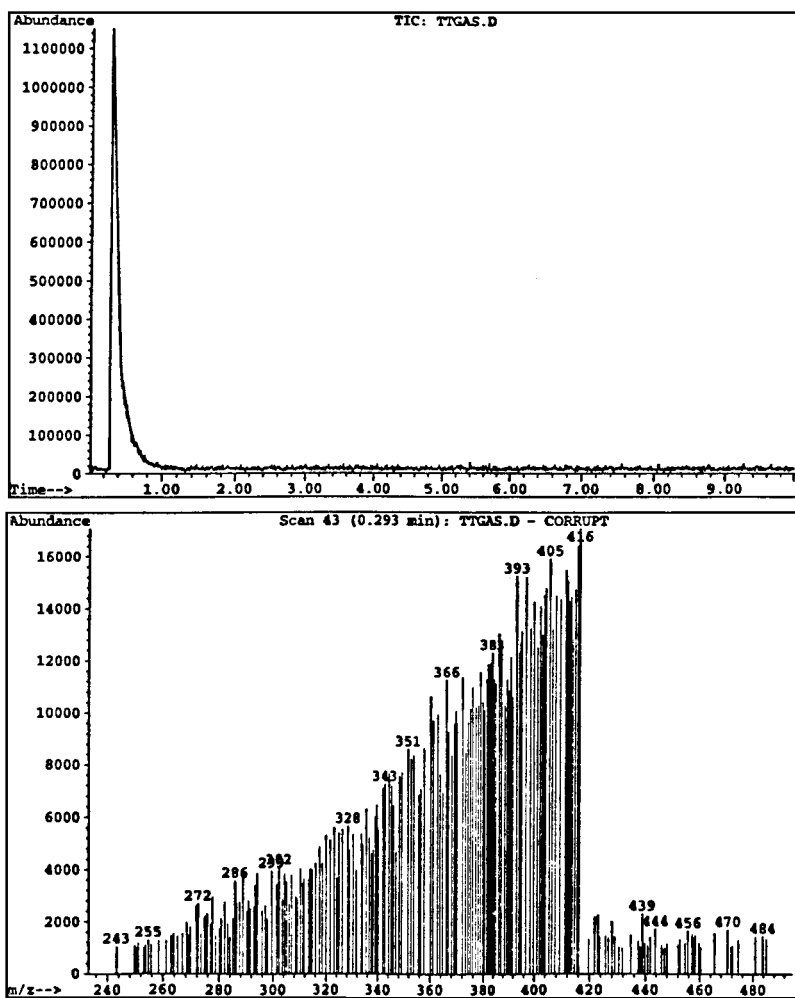


Рис. 8.13: Вид "Полного подсчета ионов" (вверху) и MS спектра (внизу) для магнегаза, полученных 25 июля, 1998 года, на HP GC-MS/IRD в лаборатории *Pinellas County Forensic Laboratory (PCFL)*, Ларго, Флорида, при поддержке *Toups Technologies Licensing, Inc. (TTL)*, Ларго, Флорида. Сканирование ограничено областью от 40 а.м.у до 500 а.м.у. и подтверждает все результаты полученные при предыдущих NTS тестированиях.

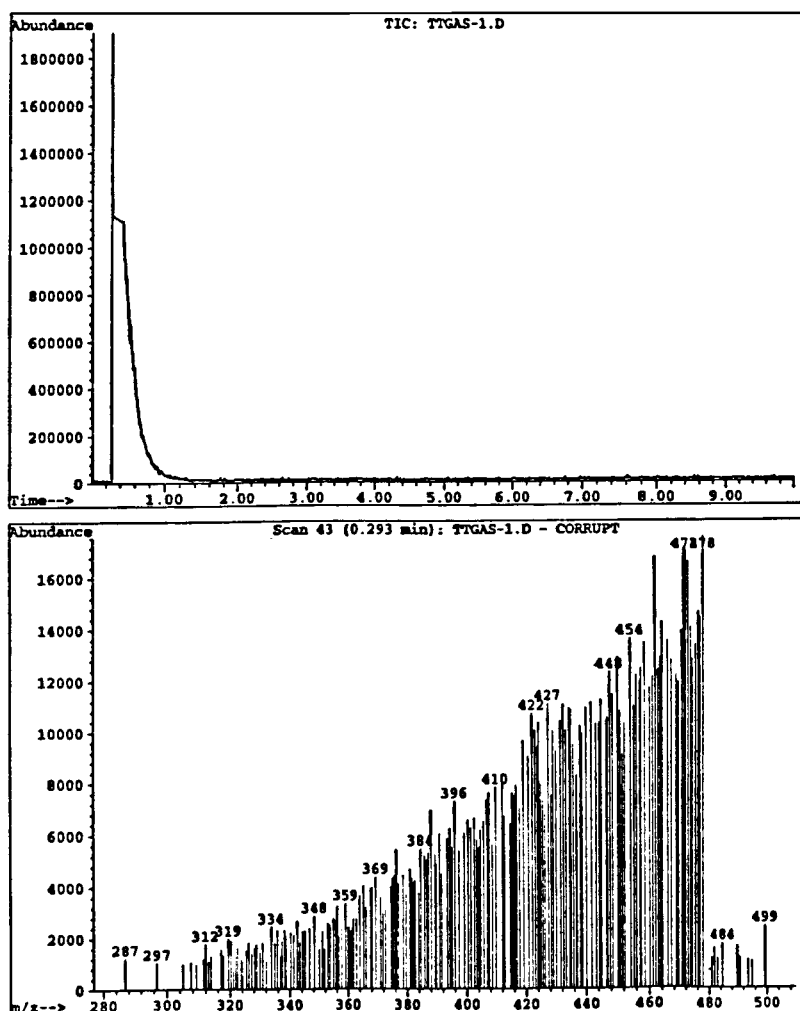


Рис. 8.14: Повтор сканирования из предыдущего рисунка, проведенный в РСFL, для того же образца магнетита, на том же инструменте и при тех же условиях, но спустя 30 минут. Сканирование дало *первые экспериментальные данные о мутации атомного веса магнекул*, как можно видеть из изменения пиков на этом рисунке по сравнению с пиками предыдущего рисунка.

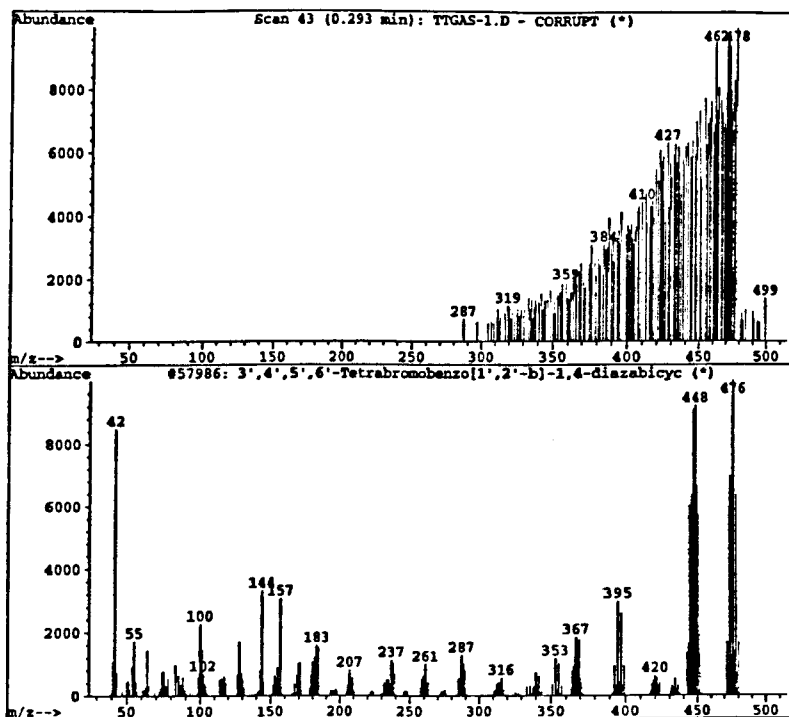


Рис. 8.15: Отсутствие идентификации компьютером GC-MS/IRD лаборатории PCFL MS пиков двух предыдущих сканирований после поиска в базе данных, содержащей все известные молекулы.

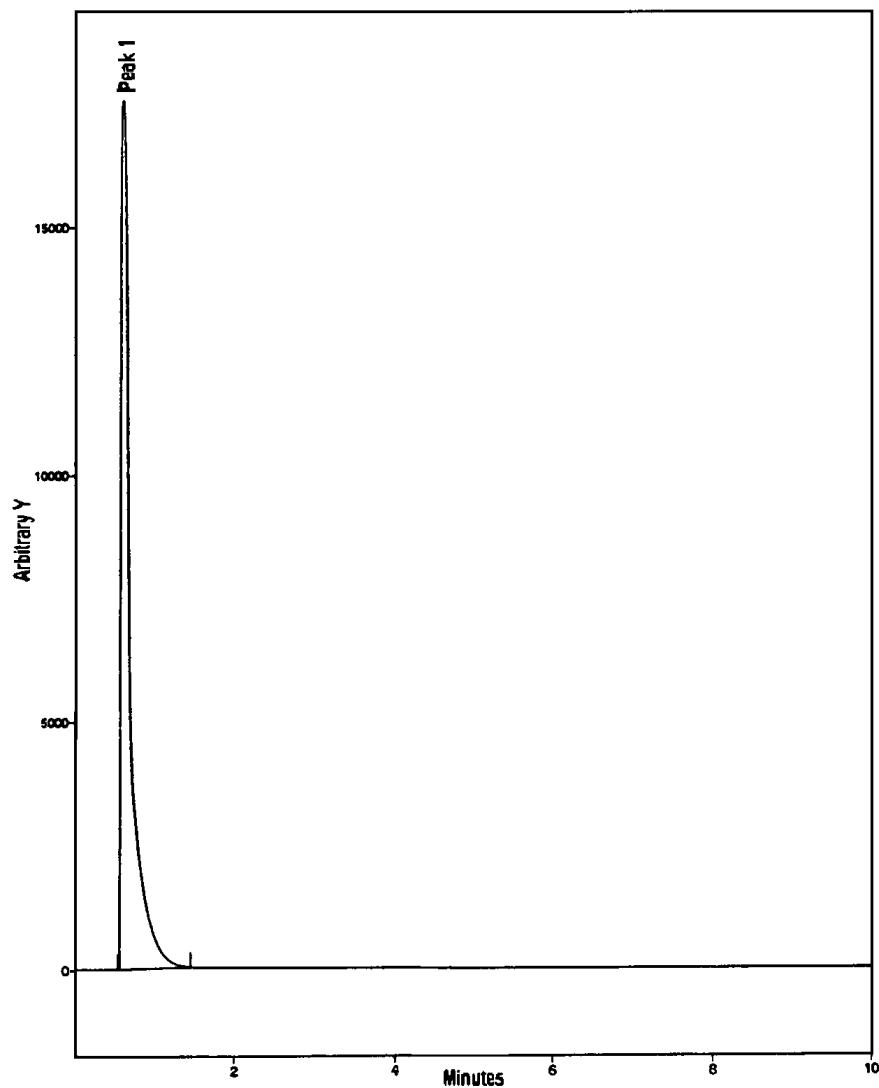


Рис. 8.16: Подтверждение отсутствия ИК сигнала пиков Рис. 8.13 и 8.14, подобно ситуации Рис. 8.9, которое говорит о том, что MS пики Рис. 8.13 и 8.14 не могут иметь валентной связи, поэтому представляют собой новые химические соединения.



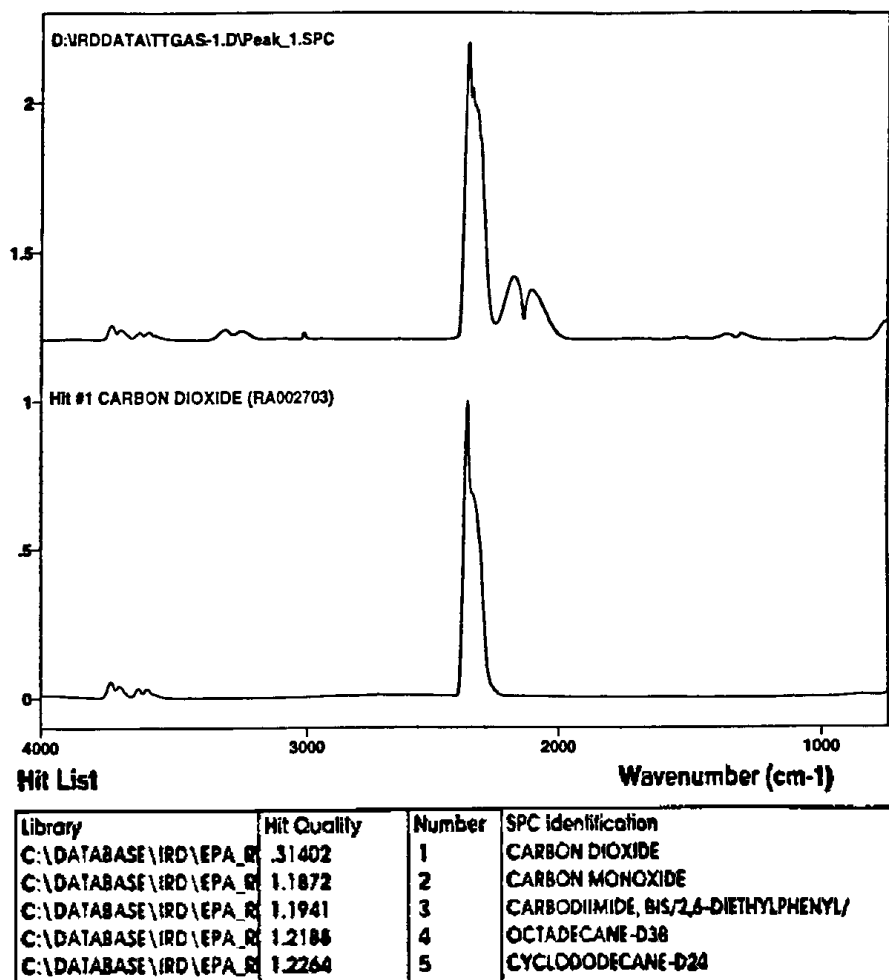


Рис. 8.17: Независимое подтверждение в лаборатории PCFL результатов Рис. 8.10 полученных в NTS, относительно мутирования ИК сигнала CO<sub>2</sub> в магнегазе. Отметим идентичные формы мутированного ИК пика на верхнем и нижнем Рисунках и что Рис. 8.10 получен с помощью другого инструмента. Отметим также появление, вновь, двух новых пиков в ИК сигнале CO<sub>2</sub>, которые говорят о наличии *новых внутренних связей*, не имеющих в *обычной* молекуле. Отметим, наконец, что инструмента теперь правильно идентифицирует сигнал как принадлежащий CO<sub>2</sub>.

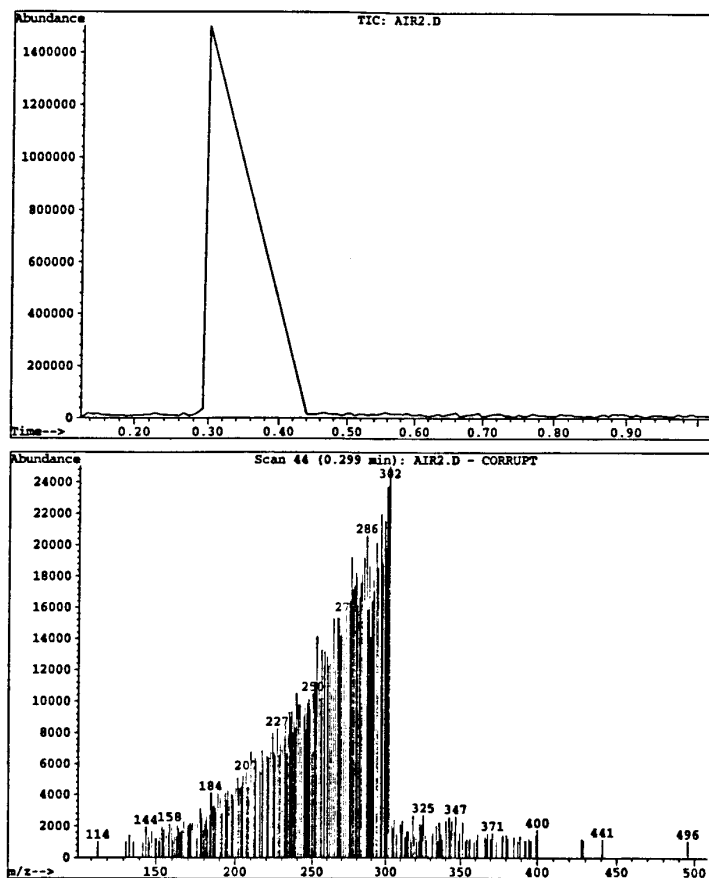


Рис. 8.18: Первое прямое экспериментальное подтверждение в лаборатории PCFL аномальной адгезии магнекул. Этот Рисунок воспроизводит фон инструмента после завершения измерений, удаления магнегаза и обычных продувок. Как можно видеть, фон оказывается очень схожим с MS сканированием в ходе тестирований, чем устанавливается тот факт, что часть газа сохранилась внутри инструмента. Это его поведение может быть объяснено только магнитной поляризацией атомов стенок инструмента, с последующей адгезией магнекул. Следует заметить, что эта аномальная адгезия была подтверждена всеми последующими тестированиями и для газообразного, и для жидкого состояний. Полное удаление магнекул из инструмента после тестирований требует продувки инертным газом при высокой температуре.

Изображения Рис. 8.19 относятся к ароматическому маслу GR, получившему код "ING258AIN, Test 2", подвергнутому элементарной магнитной поляризации отмеченной в предыдущем разделе, при соответствующих увеличениях в 10 и 100 раз.

Как можно видеть, эти фотографии ясно показывают, что после упомянутой магнитной обработки, масло приобретает структуру "кирпичной кладки", которая видима только после 10-ти кратного увеличения, и является *per se* весьма аномальной для жидкости, которая изначально была полностью прозрачной. Заметим, что магнекулы не образованы отдельными "кирпичиками", но темной субстанцией соединяющей упомянутые "кирпичики". Это является важным для понимания размера рассматриваемой здесь магнекулы, которая покрывает все 50 cc жидкости.

Фотографии на Рис. 8.20 были получены в университете Южной Флориды в Сент-Питерсберге при помощи микроскопа при тех же увеличениях в 10 и 100 раз, но относятся к другому ароматическому маслу GR, получившему код "Mixture 2", подвергнутому магнитной обработке до полной потери прозрачности и текучести. Как можно видеть, последнее изображение является подтверждением того факта, что вследствие действия магнитного поля в 12000 G, молекулы ароматического масла связываются вместе в довольно большой кластер, чей вес запросто может превышать 10000 а.м.у., то есть, его вес драматически больше веса самой тяжелой молекулы масла, что соответствует Свойству I) Определения 8.2.1.

Исследование различных фотографий показывает многообразие размеров магнекул, чем устанавливается отсутствие единой характеристики для любой данной жидкости. Это, очевидным образом, подтверждает отсутствие валентной связи. Исследование образцов показывает также способность магнекул увеличивать свой размер за счет присоединения других молекул.

Другие фотографии различных магнекул в жидкости подтверждают результаты Рис. 8.19 и 8.20.

### 8.10.3 Спектроскопические данные по магнекулам жидкости, полученные в Tekmar-Dohrmann Corporation

Первые экспериментальные данные о магнекулах в жидкостях были получены 5-го мая, 1998 г., аналитиками *Брайаном Уоллисом* (Brian Wallace) и *Майей Бернетт* (Mia Burnett) в *Tekmar-Dohrmann Corporation* (TDC) в Цинциннати, Огайо, работающими с *Tekmar 7000 HT Static Headspacer Autosampler* снабженным пламене-ионизационным детектором (FID). Тестирования были повторены 8-го и 11-го мая, 1998 г., с подтверждением предыдущих результатов. Следует заметить, что оборудование Tekmar не обладает возможностью компьютерного поиска, а также UV сканирования. А также, инструмент имеет ограниченные возможности в регистрации больших атомных весов. Наконец, FID было допустимо к использованию в данном случае, так как жидкости были негорючими.

Измерения были проведены на: Образце 1, чистое (не обработанное магнитным полем) масло GR "Fragrance Oil 2"; Образце 2, не обработанной магнитным полем водопроводной воде; и Образце 3, магнитно обработанная смесь воды и масла.

Несмотря на эти ограничения, результаты *Текмар* тестирований обеспечили первые непосредственные данные о существовании магнекул в жидкости, включая первые непосредственные экспериментальные данные относительно магнеплексов воды, согласно Определению 8.2.1. В частности, эти тестирования установили, что магнекулы в жидкостях имеют те же основные черты, что и магнекулы газов.

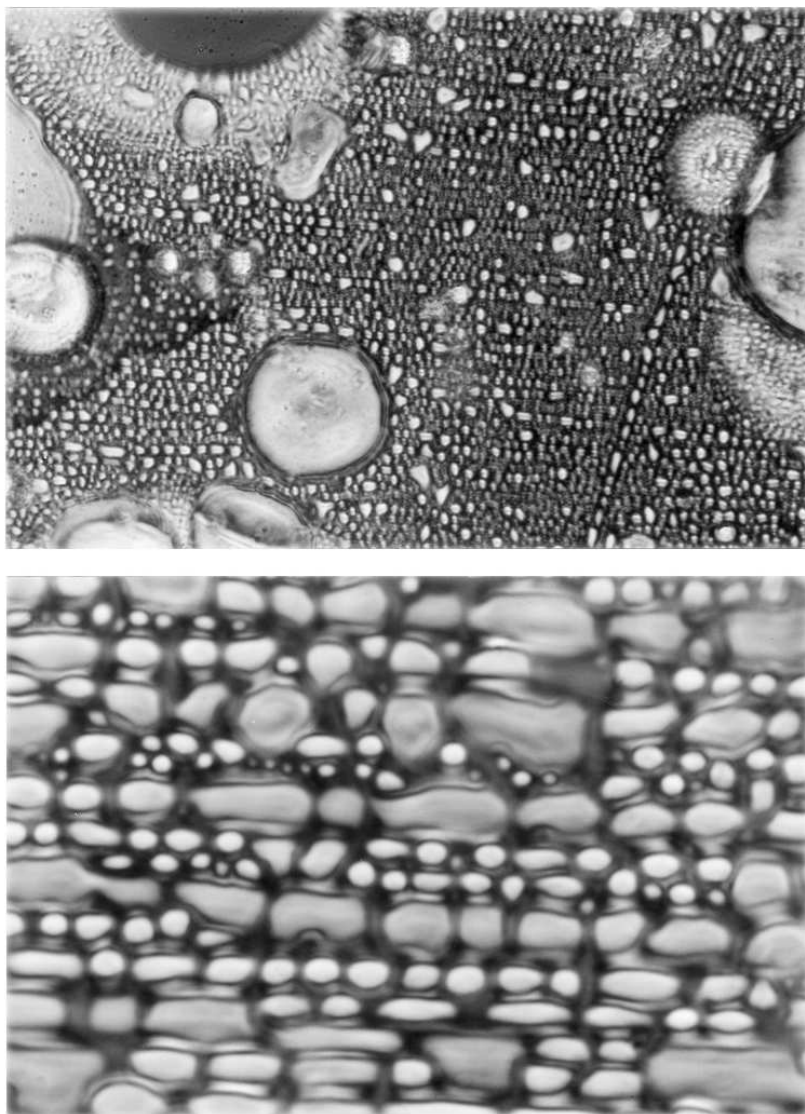


Рис. 8.19: Данные фотографии по магнекулам в жидкостях, полученные в лаборатории *Givaudan-Roure Research Laboratory* в Дубендорфе, Швейцария, в ароматическом масле GR "ING258IN Test 2" при увеличении в 10 и 100 раз [1].

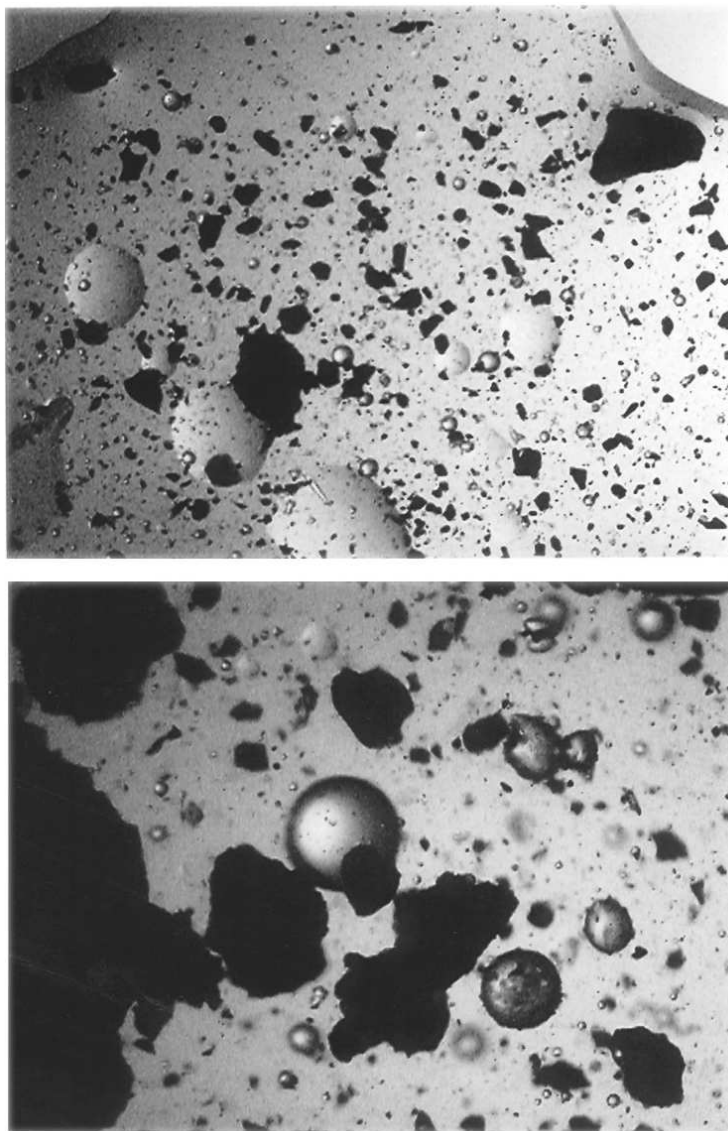


Рис. 8.20: Подтверждение существования магнекул в ароматическом масле GR "Mixture 2" при 10-кратном и 100-кратном увеличении, полученное в университете Южной Флориды (University of South Florida), Сент-Питерсберг. Отметим различие в размерах магнекул и их отличие от магнекул Рис. 8.19 [1].

442 Глава 8. НОВЫЕ ХИМИЧЕСКИЕ СОЕДИНЕНИЯ: МАГНЕКУЛЫ

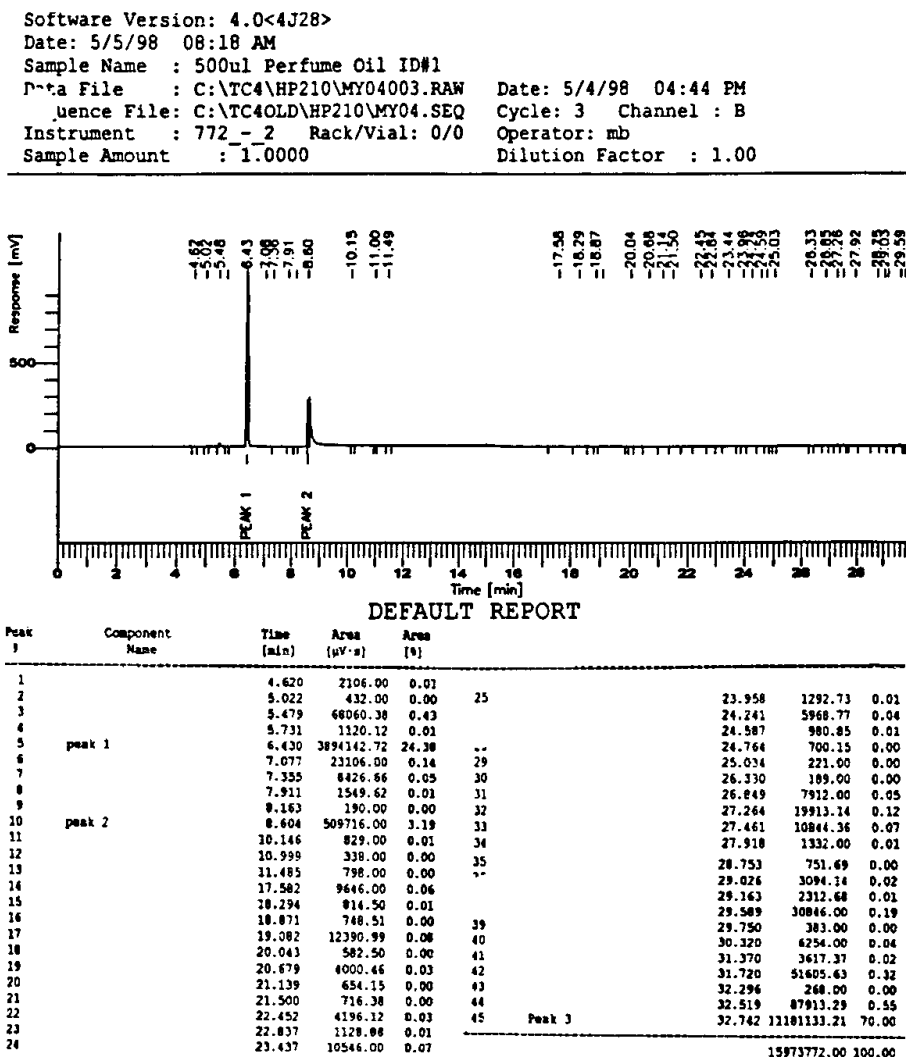


Рис. 8.21: Первое сканирование сделанное 5-го мая, 1998 г., в *Tekmar Dohrmann Company* (TDC), Цинциннати, Огайо, с помощью *Tekmar 7000 HT Static Headspace Autosampler* с пламенно-ионизационным детектором (FID).

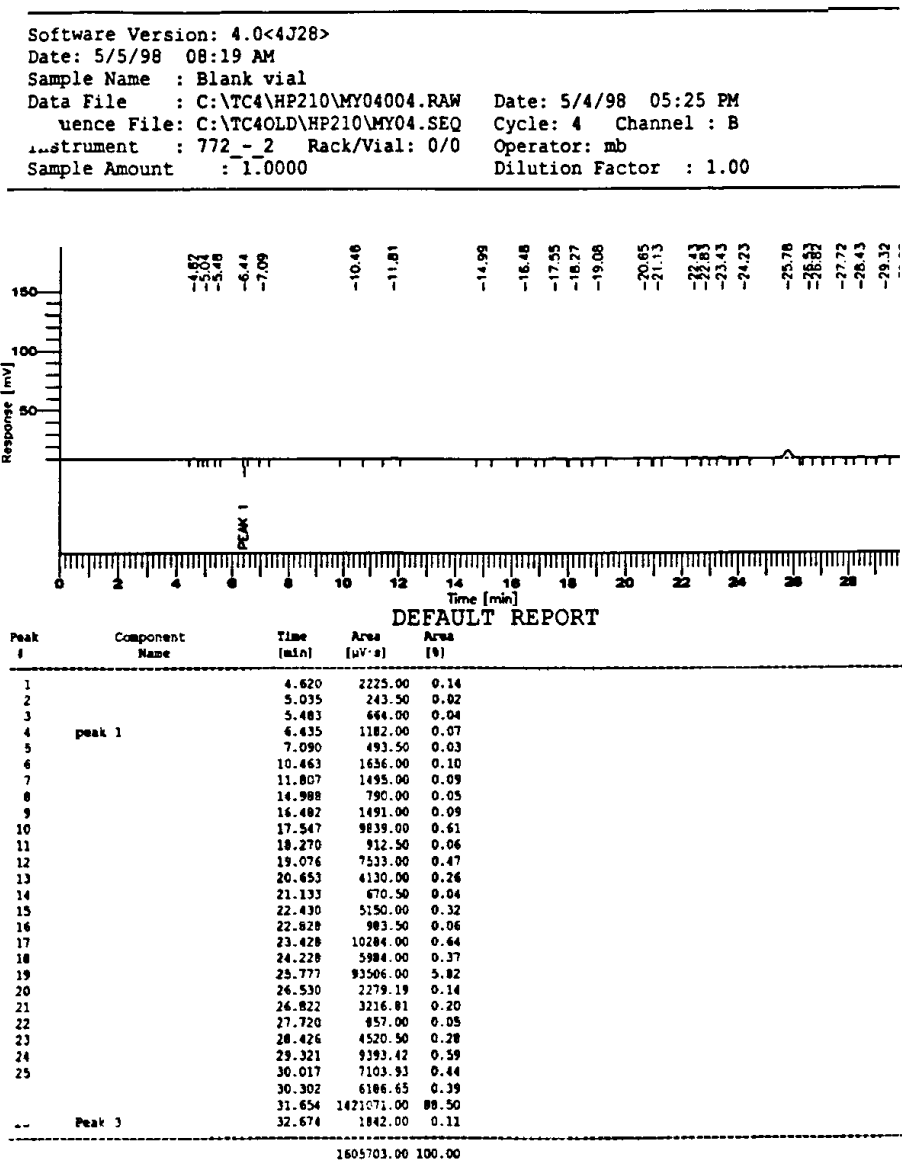


Рис. 8.22: Сканирование на TDC, в 8.19 утра 5/5/98, для проверки чистоты фона.



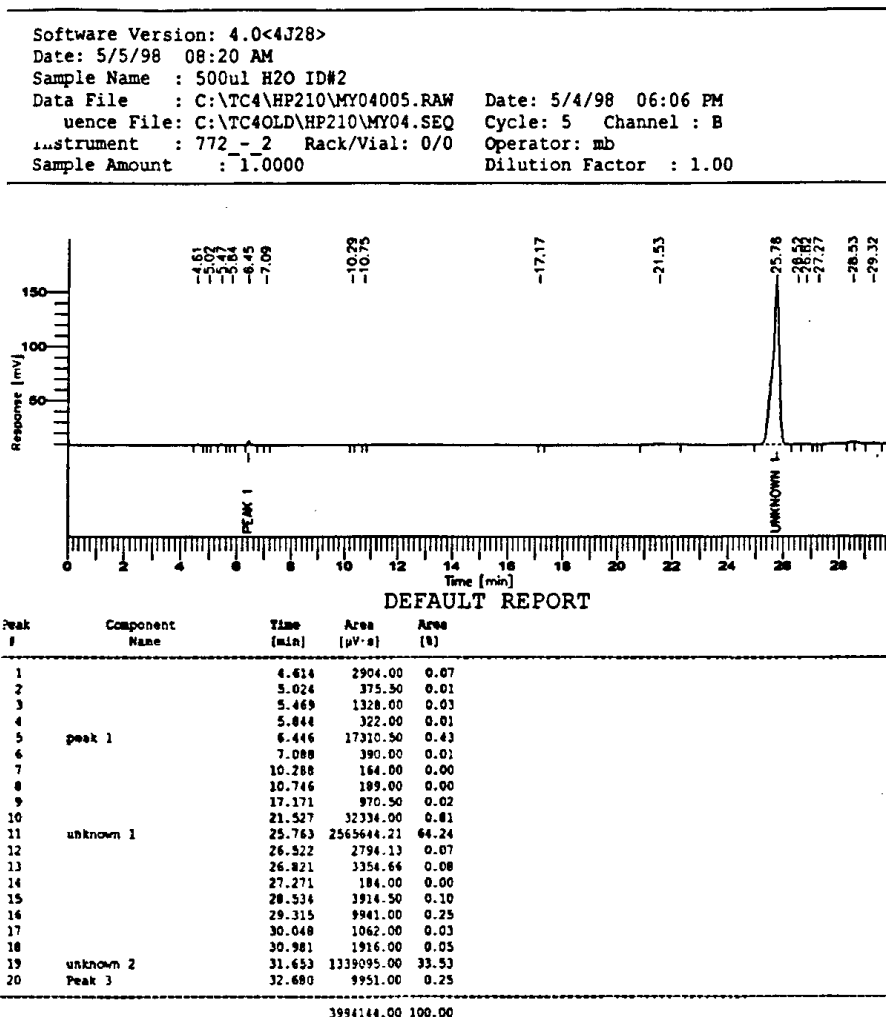


Рис. 8.23: Сканирование на ТДС, в 8.19 утра 5/5/98, обработанной магнитным полем воды, которое дало информацию о наличии магнекул в воде, зафиксировав большой неизвестный пик.

Во избежание чрезмерного объема монографии, мы воспроизвели на Рис. 8.21–8.25 только несколько типичных сканирований [1]. Рис. 8.21 воспроизводит начальное тестирование ароматического масла не подвергнувшегося магнитной обработке. Отметим доминирование трех молекул, обозначенных "Peak 1" с процентным содержанием 24.28%, "Peak 2" с 3.19% и "Peak 3" с 70.00%. Рис. 8.22 изображает фон таким, как он должен быть. Рисунок 8.23 воспроизводит сканирование воды подвергнутой магнитной обработке, с большими неизвестными пиками: "unknown 1" с 64.24% и "unknown 2" с 33.53%, что в сумме дает 97.78%. Эти данные свидетельствуют о наличии магнекул в воде, называемых также магнеплексами, согласно Определению 8.2.1. Рис. 8.24 воспроизводит сканирование обработанной магнитным полем комбинации воды и ароматического масла, с неизвестными пиками: "unknown 1" с 1.75% и "unknown 2" с 0.45%. Важной информацией этого сканирования является то, что изначальные пики – Peak 1 Рис. 8.21 с 24.28% и Peak 3 с 70.00% – понизились до значений 5.33% и 68.71%, соответственно. Очевидно, что утраченное количество молекул пошло на формирование магнекул. Рис. 8.25 воспроизводит фон после тестирований и обычной продувки. Как можно видеть, сканирование показывает макроскопическую часть от предыдущих сканирований, чем подтверждается аномальная адгезия, свойственная также магнекулам газа.

#### 8.10.4 Спектроскопические данные о магнекулах жидкости, полученные в Международном Университете Флориды

Дополнительные всеохватывающие тестирования с помощью современного оборудования для LC-MS, снабженного UVD, были проведены для ароматического масла GR "ING258IN Test 2" Рис. 8.19, 1-го декабря 1998 г., в химической лаборатории *Международного Университета Флориды* (FIU), Майами, Флорида. Тестирования были затем проведены повторно 17-го и 18-го декабря с подтверждением предыдущих результатов.

Тестирования были проведены после выбора большого числа технических характеристик, необходимых для детектирования магнекул, среди которых:

- 1) Полная ионная хроматограмма (TIC) собиралась в режиме поло-

жительного ионного электроспрея при атмосферном давлении.

2) Интегрированная ТИС с запоминанием времен и областей для наиболее богатых пиков;

3) Грубый масс-спектр для всех пиков идентифицированных в пункте 2;

4) HP LC хроматограммы собирались при фиксированной длине волны 254 см; и

5) UV-спектры снимались HPLC рядом диодном детектором 230–700 nm.

Тестирования были проведены для следующих образцов:

I) Образец GR331, необработанное магнитным полем, полностью прозрачное ароматическое масло GR "ING258IN Test 2";

II) Образец GR332, обработанное магнитным полем "ING258IN Test 2" с 10% дипропилен-гликоля (Dipropylene Glycol) (DPG);

III) Образец GR332S, донный осадок предыдущего образца;

IV) Образец GR335, обработанная магнитным полем смесь 4% ароматического масла GR "ING258IN Test 2", 0.4% DPG и 95% водопродонной воды; и

V) Образец GR335O, видимые темные кластеры предыдущего образца.

Во избежание чрезмерной длины этой монографии, на Рисунках 8.26–8.30 представлены только типичные сканирования [1]. Как можно видеть, эти сканирования обеспечивают второе экспериментальное подтверждение магнекул в жидкостях, что очевидно из сравнений пиков жидкости не подвергнутой магнитной обработке с пиками обработанной жидкости.

Следует сделать несколько комментариев. Для понимания измерений проведенных в FIU читатель должен иметь в виду, что они касаются жидкости Рис. 8.18. Следовательно, *тестируемые магнекулы видны невооруженным глазом. Следовательно, только мельчайшие фрагменты проходят сквозь капилляры питающих линий LC-MS/UVD инструмента.*

В заключение, читатель должен иметь в виду, что магнитная поляризация тестируемых образцов была минимальной и *жидкость не являлась чистым ансамблем магнекул в жидком состоянии.* Последний случай возможен с использованием PlasmaArcFlow реакторов Главы 7, но его изучение здесь опущено.

## 8.11 Экспериментальное подтверждение мутаций физических характеристик

В добавок к предыдущим *химическим* свойствам, существование магнекул подразумевает мутации *физических* характеристик, такие как возрастание плотности и вязкости. Это происходит благодаря тому факту, что магнитные связи между обычными молекулами подразумевают очевидное уменьшение межмолекулярных расстояний, что приводит к увеличению количества молекул на единицу объема, по сравнению с веществом не подвергнутом магнитной обработке. Отсюда следует возрастание плотности и вязкости.

Наиболее интригующей чертой магнекулярного газа, с весьма важными научными и промышленными следствиями, является то, что *число Авогадро газа с магнекулярной структурой не равно константе, или, эквивалентно, так называемая "газовая постоянная"  $R$  газа с магнекулярной структурой является (предположительно нелинейной) функцией  $P, V, T, R = R(P, V, T)$* , что приводит к обобщенному газовому закону:

$$\frac{PV}{T} = nR(P, V, T), \quad (8.21)$$

где вид явной зависимости  $R$  от  $P, V$  и  $T$  зависит от конкретного магнекулярного газа.

Вариация числа Авогадро для газа с магнекулярной структурой было доказано обычными тестами в компании *USMagnegas, Inc.*, Ларго, Флорида, которые установили, что:

1) Число составляющих газа с магнекулярной структурой понижается при достаточном повышении давления;

2) Пусть герметически закрытый сосуд, с постоянным объемом  $V$ , содержащий газ с магнекулярной структурой при данном давлении  $P$  и температуре  $T$ , будет доведен до достаточно высокой температуры  $T' > T$  и затем охлажден до начальной температуры  $T$ . Результирующее давление окажется не равным изначальному давлению  $P$ , но гораздо большим  $P' > P$ ;

3) Возрастание давления газа с магнекулярной структурой требует объема, который в общем возрастает вместе с самим давлением, то есть, если возрастание давления в данном сосуде от 100 psi до 200 psi требует  $V$  cf магнекулярного газа, то же возрастание давления в том же сосуде с тем

же газом, но на этот раз от 4000 psi до 4100 psi, при той же температуре, потребует не того же объема, а объема магнекулярного газа  $V'$ , большего, чем начальный объем,  $V' > V$ .

Вышеуказанные отклонения от обычного газового закона легко объясняются тем фактом, что *возрастание давления в газе с магнекулярной структурой, вообще говоря, подразумевает объединение магнекул в более крупные кластеры, с соответствующим понижением числа составляющих*. Схожим образом, *возрастание температуры, вообще говоря, подразумевает распад магнекул на более мелкие кластеры, с соответствующим возрастанием числа составляющих, что приводит к аномальному возрастанию давления*. Отсюда следует, что если возрастание температуры данного постоянного объема достигает магнекулярной точки Кюри (Определение 8.2.1), все магнитные поляризации уничтожаются с соответствующим повышением числа составляющих, из-за редукции магнекул к молекулам. Это подразумевает, что возвращение газа к начальной температуре не сопровождается возвратом к оригинальным магнекулам, и, соответственно, возвращение к начальной температуре, как правило, имеет место с возросшим давлением, вследствие возросшего числа составляющих.

Теперь мы предлагаем измерения плотности, вязкости и других характеристик жидких и газообразных сред с магнекулярной структурой, которые подтверждают вышеуказанные GC-MS/IRD и LC-MS/UVD тестирования, обеспечивая окончательные данные о существовании магнекул согласно Определению 8.2.1.

Все тестирования были проведены с использованием обычной водопроводной воды и большого числа ароматических масел GR. Все рассмотренные здесь образцы были приготовлены обычным смешиванием водопроводной воды и данного ароматического масла, после чего образцы подвергались воздействию магнитного поля довольно слабых постоянных магнитов, порядка 200 G (более слабые, чем те, что использовались для ароматических масел Рис. 8.18 и 8.19). Все образцы оказались весьма стабильными, без каких-либо измеримых изменений за период около года, и перенесли замораживание, с последующей разморозкой. Различные образцы были пронумерованы от 1 до 25.

Измерения плотности были проведены 9 марта 1998 г., компанией *U.S. Testing Company, Inc.* (USTC), Файрфилд (Fairfield), Нью-Джерси. Результаты тестирований представлены на Рис. 8.31 и 8.32.

Образец 1 это обычная необработанная магнитным полем водопро-

водная вода. Образец 2 это обычная водопроводная вода подвергнутая действию магнитного поля на 5 минут. Образцы 3 и 4 это водопроводная вода обработанная с помощью другого магнитного оборудования. Образец 5 это обычное необработанное магнитным полем ароматическое масло GR "APC Fragrance". Образцом 6 была смесь ароматического масла 5 с водопроводной водой, подвергнутой обработке магнитным полем в течении 5 минут. Смеси 7 и 8 были тем же самым, что и смесь 5, но обработанные с помощью другого оборудования. Образец 17 был магнитно обработанным маслом GR "Air Freshener 1". Смесь 19 это Fragrance 17 с водопроводной водой 16, обработанной магнитным полем в течении 5 минут. Заметим, что все измерения были сделаны с точностью до четвертого порядка. Следовательно, численные результаты с точностью до третьего порядка могут рассматриваться как точные.

При переходе от Образца 1 (необработанная вода) к Образцу 2 (магнитно обработанная вода) в макроскопическом отношении возрастает плотность, примерно на 0.86%, чем подтверждается отмеченная мутация плотности воды после магнитной обработки. В свою очередь, возрастание плотности свидетельствует о существовании магнеплексов в магнитно обработанной воде, в соответствии со сканированием Рис. 8.27.

Как хорошо известно, ароматические масла являются (обычно) более легкими, чем вода, например, плотность необработанного ароматического масла в Образце 5 меньше, чем плотность необработанной воды Образца 1. Согласно квантовой химии, плотность любой смеси вышеупомянутых двух жидкостей, неважно раствор это, суспензия или дисперсная система, должна быть между наименьшей и наибольшей плотностями.

Напротив, как можно видеть, *плотность магнитно обработанной смеси ароматического масла GR с водопроводной водой, Образец 6, оказывается большей, чем плотность наиболее плотной жидкости, воды.* Измерения дают дополнительное, довольно сильное, непосредственное экспериментальное подтверждение мутации физических характеристик жидкости вследствие воздействия на нее магнитного поля.

Замечательным является то, что *магнитные мутации плотности оказываются макроскопически большими.* Действительно, они были названы аналитиками "аномалиями UPS-типа", при этом имелось в виду, что транспортировка данного объема магнитно обработанной жидкости будет стоить дороже, по сравнению тем же объемом необработанной жидкости, из-за макроскопического возрастания веса.

Следующим предсказанием относительно магнитно поляризованных

жидкостей является возрастание их вязкости. Очевидно, это имеет место из-за произвольного размера отдельных магнекул, а также из-за их тенденции связываться с соседними молекулами, что приводит к их присоединению, не говоря уже об аномальной адгезии к стенкам сосуда, которая систематически регистрируется для всех магнитно поляризованных жидкостей.

Как отмечено ранее, в определенных случаях, возрастание вязкости является настолько большим, что становится заметным невооруженным глазом и, когда обработка достаточно продолжительна, вязкость возрастает настолько, что жидкость утрачивает свою обычную подвижность.

Обычные машинные масла особенно подходят для магнитной обработки, так как, при правильной обработке, возрастание их вязкости настолько драматично, что становится видимым невооруженным глазом, совместно с видимым изменением визуальных характеристик (цвет, текстура, прозрачность и т.д.)

Измерения вязкости представлены на Рис. 8.32. Выбранное машинное масло было обычным маслом 30-40 Castrol Motor Oil подвергнутым особому типу магнитной обработки, с помощью двух различных типов оборудования, называемых оборудованием Типа А и В. Все обработки были сделаны при нормальных условиях, без каких-либо добавок или замен любого типа. Как можно видеть, *измерение 2 показывает драматическое возрастание вязкости магнитно обработанного масла на 44.5%*.

Вышеуказанные экспериментальные результаты, очевидно, обеспечивают дополнительное свидетельство существования магнекул.

Тестирования обеспечили также данные об аномальной адгезии жидкостей с магнекулами, наличие и величина которой устанавливается, в данном случае, драматическим, макроскопическим возрастанием адгезии масла к стенкам стеклянного сосуда.

Та же макроскопическая аномалия подтверждается и на микроскопическом уровне. В ходе измерений вязкости наблюдалась настолько аномально сильная адгезия магнитно обработанных масел к стенкам инструмента, что упомянутое масло не поддавалось удалению обычной прочисткой ацетоном и требовало использования сильных кислот.

Эта аномальная адгезия является следующим экспериментальным подтверждением существования магнекул, согласно предсказанию о их способности наводить поляризацию орбит валентных электронов атомов стенок сосуда, что приводит к аномальной адгезии посредством магнитных связей магнекул с упомянутыми атомами.

Очевидно, что мутации плотности и вязкости подразумевают ожидаемую мутацию *всех* остальных физических характеристик рассматриваемой жидкости. Эти измерения оставлены заинтересованным исследователям.

Существование мутации *физических* характеристик подразумевает тогда мутацию *химических* свойств. На данный момент, мы можем отметить только визуальные данные, отмеченные аналитиками USTC, согласно которым, реакция магнитно обработанных масел с ацетоном драматически отличается от реакции обычных масел, включая мутации цвета, текстуры и другие проявления.





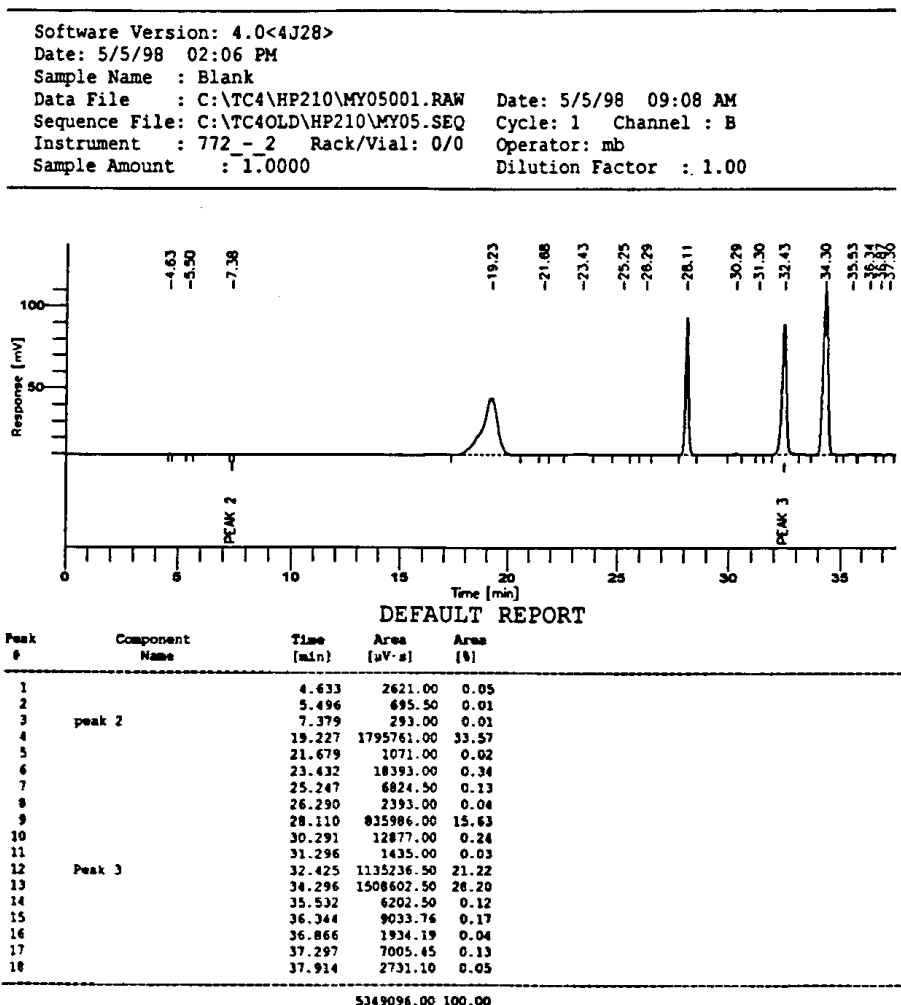


Рис. 8.25: Сканирование на TDC, в 2.26 дня 5/5/98, относительно фона обусловленного аномальной адгезией, подтверждающее соответствующий аномальный фон для магнекул газа.

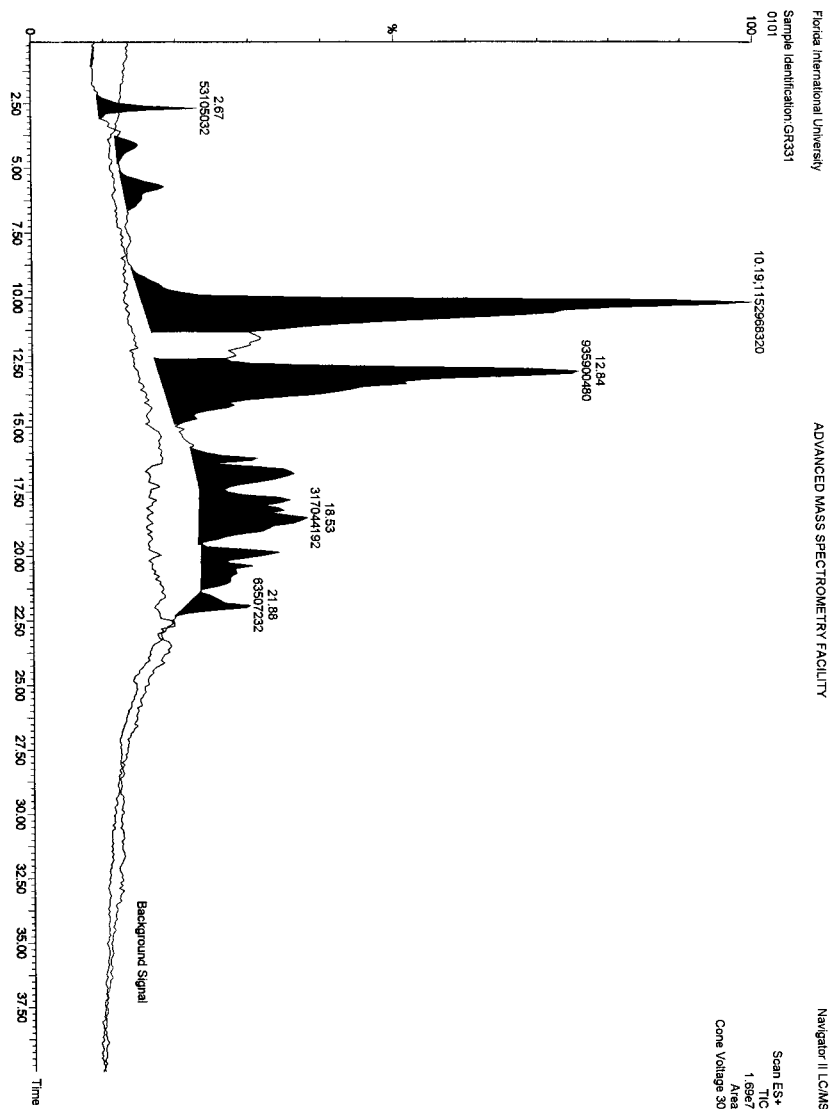


Рис. 8.26: Сканирование необработанного магнитным полем масла GR "ING258IN Test 2" (Рис. 8.18 (GR331 в тексте)) проведенное в Международном Университете Флориды (FIU).

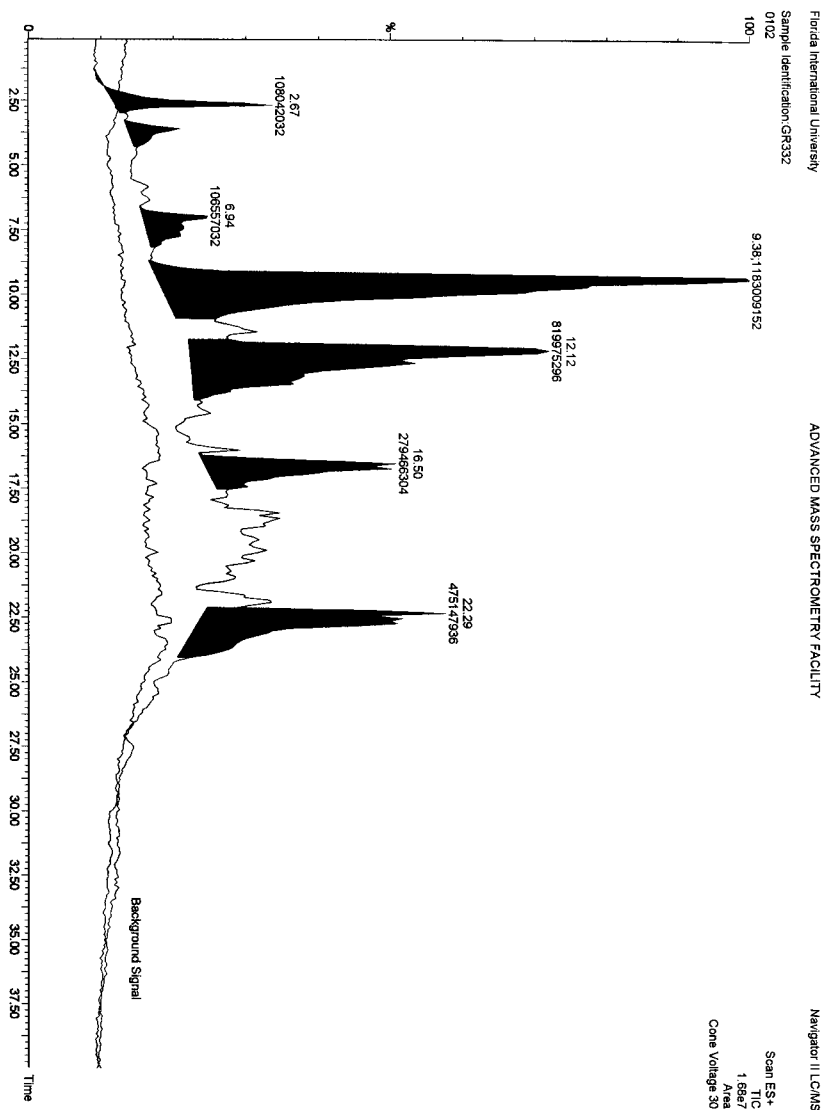


Рис. 8.27: Сканирование FIU Образца GR332.

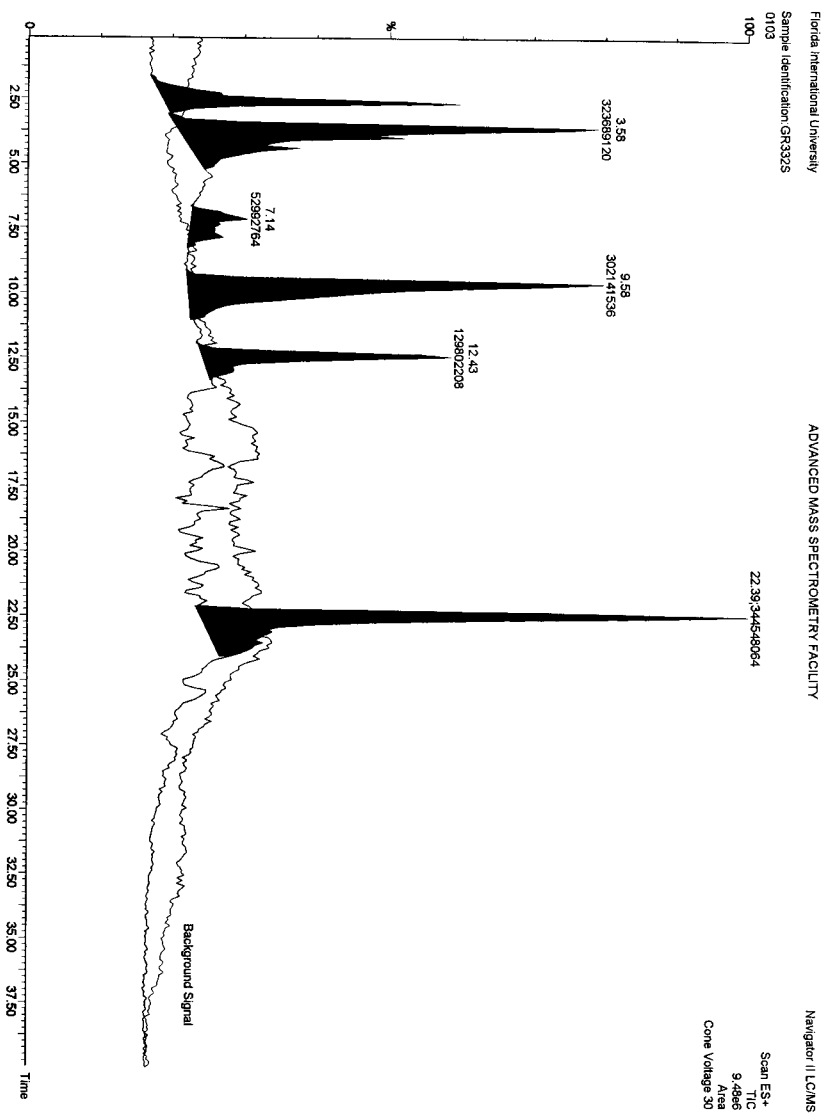


Рис. 8.28: Сканирование FIU Образца GR332S.

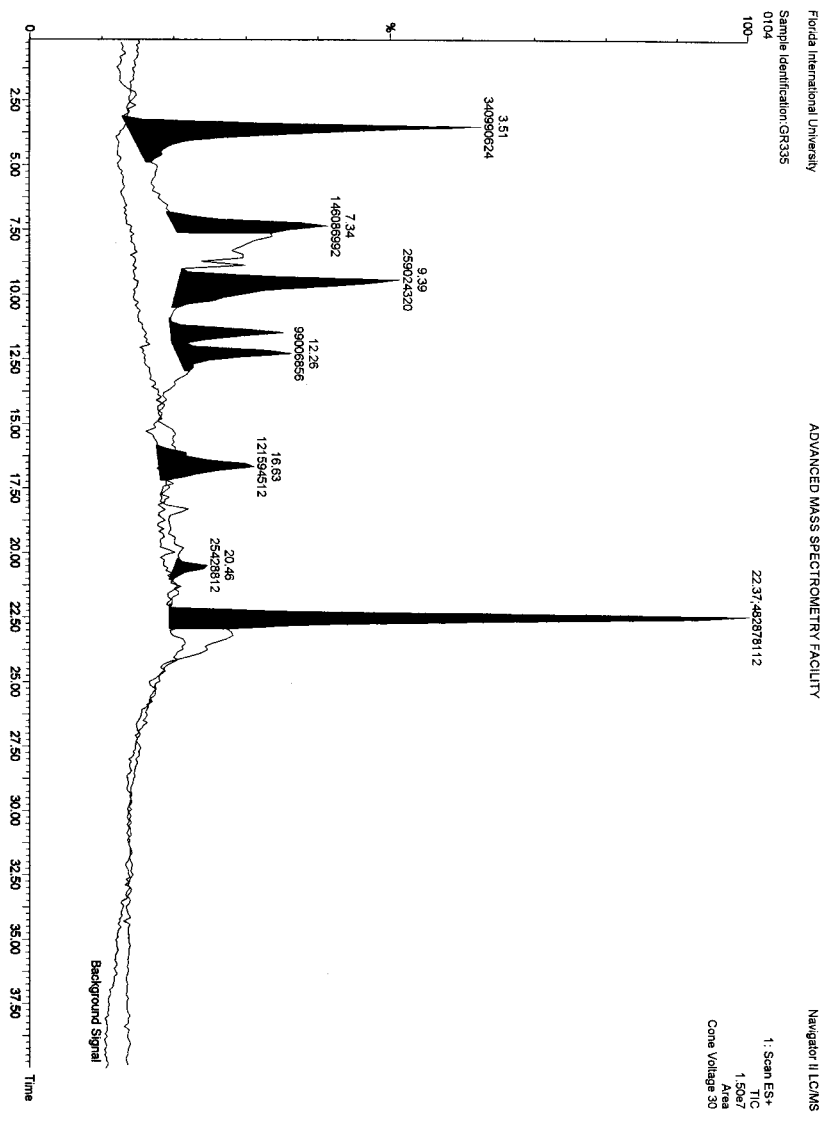


Рис. 8.29: Сканирование FIU Образца GR335.

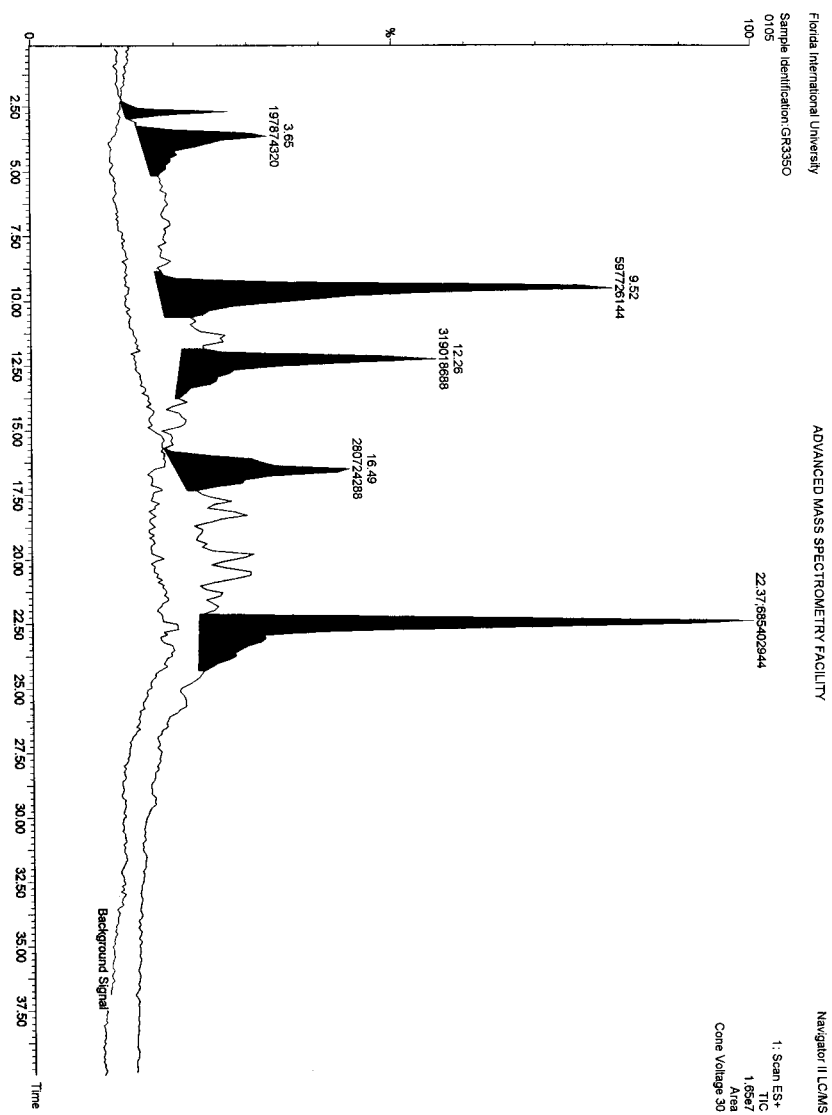


Рис. 8.30: Сканирование FIU Образца GR3350.

**REPORT OF TEST**

**SGS** SGS U.S. Testing Company Inc.  
 291 Fairfield Avenue  
 Fairfield, NJ 07004-3833  
 Tel: 973-575-5252  
 Fax: 973-244-1694

Report Number: 103947  
 Date: 03/09/98  
 Page: 1 of 1

**Millennium Results**

Density of	g/mL	% Change Density vs Ordinary Water
Sample #1	0.9805	0
Sample #2	0.9889	+0.86
Sample #3	0.9804	0
Sample #4	0.9853	+0.49
Fragrant #5	0.9720	NA
Mixture #6	0.9967	+1.65
Mixture #7	0.9982	+1.80
Mixture #8	0.9902	0.99
Treated Water #16	0.9893	0.89
Frag Treated # 17	0.9453	NA
Mixture #18	0.9902	0.99
Mixture #19	0.9929	1.28

Samples were transferred to a separatory funnel. The layers were allowed to separate. The water layer was withdrawn into a funnel with Whatman #4 filter paper. The filtrate was transferred to a preweighed 10 mL volumetric flask. The sample was weighed to 0.0001 grams and the density calculated.

When the samples were pure substances, they were transferred directly to preweighed 10 mL volumetric flasks.

Calculations:  
 Weight flask with sample - weight flask + volume of flask = g/mL

**Arlyn Sibille, Ph.D.**

Рис. 8.31: USTC измерения плотности жидкости, обработанной магнитным полем.



REPORT OF TEST



SGS U.S. Testing Company Inc.

291 Fairfield Avenue  
Fairfield, NJ 07004-3833  
Tel: 973-575-5252  
Fax: 973-244-1694

Report Number: 103947  
Date: 03/09/98  
Page: 1 of 1

**SUBJECT:** Three (3) samples received on 02/09/98 and identified by the client as:

**PURPOSE:** Determine the density and viscosity of the three samples.

**TEST DATE:** 02/25/98

**PROCEDURE:** Three 10 milliliter volumetric flasks were pre-weighed. One of the samples was transferred to each of the volumetric flasks with a pipet. The samples were weighed again. The density of each sample was calculated.

The three oil samples were measured for viscosity using a Kinematic viscometer (ASTM D-445).

**RESULTS:**

<u>Sample Identification</u>	<u>Density, g/mL</u>	<u>Viscosity (cps)</u>	<u>Increase Viscosity, %</u>
1) Motor Oil, "as is"	0.8682	199.8	0
2) Motor Oil, Treatment Type A	0.8714	288.7	44.5
3) Motor Oil, Treatment Type B	0.8689	302.0	51.2

SIGNED FOR THE COMPANY BY:

James R. Tyminski  
Laboratory Supervisor

Arlyn Sibille, Ph.D.  
Laboratory Director

/mo

Member of the SGS Group

ANALYTICAL SERVICES - PERFORMANCE TESTING - STANDARDS EVALUATION - CERTIFICATION SERVICES  
SGS U.S. TESTING COMPANY INC. REPORTS ARE FOR THE EXCLUSIVE USE OF THE CLIENT TO WHOM THEY ARE ADDRESSED. ANYONE RELYING ON SUCH REPORTS SHOULD UNDER-  
STAND ALL OF THE DETAILS OF THE ENGAGEMENT. REPORTS REFLECT RESULTS ONLY OF THE STANDARDS OR PROCEDURES IDENTIFIED TO THE TESTS CONDUCTED AND ARE LIMITED  
TO THE SAMPLES TESTED. TEST RESULTS MAY NOT BE INDICATIVE OF THE QUALITIES OF THE LOT FROM WHICH THE SAMPLE WAS TAKEN. SGS U.S. TESTING COMPANY INC. HAS NOT  
CONDUCTED ANY QUALITY CONTROL PROGRAM FOR THE CLIENT AND THE NAME, SEALS, MARKS AND INDICIA OF SGS U.S. TESTING COMPANY INC. MAY BE USED IN ANY MANNER  
WITHOUT THE PROMOTIONAL MATERIALS WITHOUT THE PRIOR WRITTEN APPROVAL OF SGS U.S. TESTING COMPANY INC. THIS REPORT SHALL NOT BE REPRODUCED EXCEPT IN FULL WITH  
THE ORIGINAL MATERIALS. SAMPLES NOT APPROVED BY TESTING ARE DISPOSED OF AFTER 30 DAYS.

Рис. 8.32: USTC измерения вязкости жидкостей, обработанных магнит-  
ным полем.

## 8.12 Заключительные замечания

Теоретические и экспериментальные данные представленные в этой Главе устанавливают, что молекулы как химические соединения, определенные как стабильные кластеры атомов с валентной связью, не охватывают все возможные химические соединения существующие в природе.

Это заключение доказано с исключением всех научных сомнений, например, макроскопическим наличием стабильных кластеров, с атомным весом в несколько сотен а.м.у., в легких газах без инфракрасного сигнала, где самой тяжелой детектируемой молекулой может быть  $\text{CO}_2$  с 44 а.м.у.; мутацией прозрачных масел в полностью непрозрачное вещество лишенное текучести; одновременным возрастанием плотности и для газов, и для жидкостей; и другими данными.

Не стоит и говорить, что окончательные *характеристики* и детектирование новых химических соединений, предложенных в [1] и рассмотренных в этой главе, потребуют значительных коллективных усилий, так как методы представленные в этой главе, очевидно, являются предварительными, с пониманием того, что, опять-таки, *существование* новых химических соединений находится вне всяких научных сомнений.

Фактически, предложенные новые химические соединения, магнекулы, которые, согласно Определению 8.2.1 включают в себя молекулы, не могут рассматриваться как окончательные химические соединения, исключаящие существование новых, как это доказано историей всех научных открытий.

Как пример, переформулировка магнекул через гиперструктурную ветвь адронной химии подразумевает предсказание более широкого класса химических соединений, *гипермагнекул*, которые, очевидным образом, более подходят для воспроизведения живых организмов, согласно своей внутренней необратимости, многозначной структуре, совместимой с нашим трехмерным сенсорным восприятием, и остальным чертам, необходимым для более адекватного воспроизведения сложности живых организмов. *Новизна* этих возможных соединений очевидна, в следствии их новых свойств. Их *необходимость* устанавливается тем фактом, что современные попытки расшифровать код ДНК через числа, используемые для молекул и магнекул и известные с библейских времен, имеют весьма малые шансы на успех, чем санкционируется использование новых расширенных чисел, таких как гиперчисла, и связанных с ними многозначных структур.

В заключение, мы можем совершенно определенно сказать, что наука является дисциплиной, которая никогда не допустит финальных теорий.

## Исследования Арынгазина тороидальных орбит атома водорода во внешнем магнитном поле

В основном тексте этой главы мы представили теоретические и экспериментальные обоснования новых химических соединений, магнекул, которые, главным образом, зависят от приобретений, по крайней мере, периферийными электронами отдельных атомов орбит тороидальной конфигурации, при наложении достаточно сильных внешних магнитных полей, как было предложено Сантилли [1] и рассмотрено в основном тексте этой Главы.

В этом Дополнении мы рассматриваем исследования Арынгазина [8] Шредингерского уравнения атома водорода в сильном, внешнем, постоянном и однородном магнитном поле, которые подтверждают приобретение электронными орбитами тороидальной конфигурации, в достаточной степени для существования новых химических соединений, магнекул.

Следует подчеркнуть, что при рассмотрении атомов и молекул в непосредственной близости (то есть, расстояния порядка орбитального радиуса –  $10^{-8}$  см) от электрической дуги адронного реактора (Глава 7), в области плазмы, на них накладывается магнитное поле, чья напряженность может быть достаточно высокой для наведения необходимой магнитной поляризации (см. Рис. 8.4.D).

Слабое, внешнее, постоянное и однородное магнитное поле  $B$  приводит к аномальному зеемановскому расщеплению энергетических уровней атома водорода, причем игнорируются малые эффекты связанные с распределением электронного заряда. В случае более сильного магнитного поля, которое достаточно сильное для преодоления спин-орбитального взаимодействия (в атомах),  $e\hbar B/2mc > \Delta E_{jj'} \simeq 10^{-3}$  eV, то есть, для  $B \simeq 10^5$  Gauss, наблюдается нормальный эффект Зеемана, опять-таки, при этом игнорируются малые деформации электронных орбит.

Более точно, в случае *слабого* внешнего магнитного поля  $B$ , может игнорироваться квадратичный член по полю  $B$ , так как его вклад является малым по сравнению с остальными членами уравнения Шредингера, так

что может быть использовано *линейное* приближение по полю  $B$ . В таком линейном приближении, волновая функция электрона остается невозмущенной, с единственно возникающим эффектом Зеемана расщепления энергетических уровней  $H$  атома. В обоих эффектах Зеемана, энергия взаимодействия электрона с магнитным полем принимается много меньше, чем энергия связи атома водорода,  $e\hbar B/2mc \ll me^4/2\hbar^2 = 13.6 \text{ eV}$ , то есть, интенсивность магнитного поля много меньше, чем некоторое характерное значение,  $B \ll B_0 = 2.4 \cdot 10^9 \text{ Gauss} = 240000 \text{ Тесла}$  (напомним, что  $1 \text{ Тесла} = 10^4 \text{ Gauss}$ ). Поэтому, действие слабого магнитного поля может быть истрактовано как малое возмущение атома водорода.

В случае *очень сильного* магнитного поля,  $B \gg B_0$ , квадратичный член по полю  $B$  дает очень большой вклад и не может быть проигнорирован. Вычисления показывают, что в этом случае имеет место значительная деформация распределения заряда электрона. Более точно, под влиянием очень сильного внешнего магнитного поля имеет место магнитное ограничение, то есть, в плоскости перпендикулярной направлению магнитного поля (см. Рис. 8.4.D), динамика электрона определяется, главным образом, действием магнитного поля, в то время как кулоновское взаимодействие электрона с ядром может рассматриваться как малое возмущение. Это адиабатическое приближение позволяет разделение переменных в соответствующем уравнении Шредингера [9]. В то же время, в направлении магнитного поля, движение электрона определяется и магнитным полем и кулоновским взаимодействием электрона с ядром.

Наибольшая интенсивность магнитного поля, достигнутая в макроскопических областях на больших расстояниях, в современных лабораториях имеет величину порядка  $10^5 - 10^6 \text{ Gauss}$  ( $\sim 50 \text{ Тесла}$ ), то есть, она много меньше  $B_0 = 2.4 \cdot 10^9 \text{ Gauss}$  ( $\sim 10^5 \text{ Тесла}$ ). Предельно сильные внешние поля,  $B \geq B_c = B_0/\alpha^2 = 4.4 \cdot 10^{13} \text{ Gauss}$ , соответствуют энергии взаимодействия порядка массы электрона,  $mc^2 = 0.5 \text{ MeV}$ , где  $\alpha = e^2/\hbar c$  – постоянная тонкой структуры. В этом случае, несмотря на тот факт, что предельно сильное магнитное поле характеризует стабильный вакуум в соответствии с рождением электронно-позитронных пар, следует принимать во внимание релятивистские и квантовоэлектродинамические (КЭД) эффекты и использовать уравнение Дирака или Бете-Солпитера (Bethe-Salpeter). Эти вклады весьма интересны в астрофизике, например, при изучении атмосферы нейтронных звезд и белых карликов, которые характеризуются полями  $B \simeq 10^9 \dots 10^{13} \text{ Gauss}$ .

Арынгазин [8] сфокусировал свои исследования на магнитных полях со значениями интенсивности порядка  $2.4 \cdot 10^{10} \leq B \leq 2.4 \cdot 10^{13}$  Gauss, при которых нерелятивистские исследования через шредингеровское уравнение могут быть проведены с хорошей точностью и могут быть сделаны адиабатические приближения.

Релятивистские и КЭД эффекты (петлевые вклады), так же как эффекты связанные с ограничением массы, размера и магнитного момента ядра, а также с ограничением электромагнитного радиуса электрона, проявляются даже при низких интенсивностях магнитного поля и могут быть учтены как очень малые возмущения. Дополнительные эффекты связаны с очевидным отклонением от КЭД сильно коррелированных валентных связей, как изучено в Главе 4. Эти эффекты находятся вне цели представленного исследования, хотя и являются важными для высокоточных исследований, таких как точные измерения Лэмбовского сдвига (Lamb shift).

Следует заметить, что локальные магнитные поля высокой интенсивности могут возникать в плазме, как результат нелинейных эффектов, которые приводят к появлению стабильных самосвязывающихся структур, имеющих нетривиальную топологию с узлами [10]. Фадеев (Faddeev) и Ниemi (Niemi) [10] недавно доказали, что статически равновесные конфигурации в плазме являются топологически стабильными решениями, описываемыми связанными и соединяющимися трубками потока спиральных магнитных полей. В области примыкающей к таким трубкам потока, мы предполагаем, что интенсивность магнитного поля может быть такой же высокой как  $B_0$ . В виду этого, изучение действия сильного магнитного поля и трубок потока магнитных полей атомов и молекул становится весьма интересным в теоретической и прикладной химии плазмы. Возможные приложения предполагаются для новых химических соединений, магнекул.

В результате действия очень сильного магнитного поля, атомы приобретают очень большую энергию связи, по сравнению со случаем нулевого магнитного поля. Даже при среднем  $B \simeq B_0$ , энергия связи атомов весьма сильно отклоняется от случая отсутствия поля и даже более слабые интенсивности поля могут существенно повлиять на химические свойства молекул тяжелых атомов. Это позволяет создание множества других связанных состояний из молекул, кластеров и более объемных соединений [9, 11, 12].

Работа Лайа (Lai) [12] посвящена очень сильным магнитным полям,

$B \gg B_0$ , направлена на астрофизические приложения и обеспечивает хороший обзор ранних и недавних исследований в этой области, включая исследования в промежуточной области,  $B \simeq B_0$ , многоэлектронных атомов и молекулы  $\text{H}_2$ .

Для того чтобы оценить напряженность магнитного поля, которое может значительно деформировать орбиту основного состояния  $\text{H}$  атома, можно формально сравнить боровский радиус  $\text{H}$  атома в основном состоянии, при нулевом внешнем магнитном поле,  $a_0 = \hbar^2/me^2 \simeq 0.53 \cdot 10^{-8}$  см = 1 а.е., с радиусом орбиты уединенного электрона, движущегося во внешнем постоянном однородном магнитном поле  $\vec{B}$ .

Средний радиус орбиты уединенного электрона, движущегося в постоянном однородном магнитном поле, может быть точно вычислен с использованием уравнения Шредингера и дается следующим:

$$R_n = \sqrt{\frac{n + 1/2}{\gamma}}, \quad (1)$$

где  $\gamma = eB/2\hbar c$ ,  $B$  – индукция магнитного поля вдоль оси  $z$ ,  $\vec{B} = (0, 0, B)$ ,  $\vec{r} = (r, \varphi, z)$  в цилиндрических координатах и  $n = 0, 1, \dots$  – главное квантовое число. Поэтому, радиус орбиты принимает *дискретный* ряд значений (1) и называется радиусом Ландау. Это принципиально отличается от хорошо известного *классического* движения электронов во внешнем магнитном поле, где радиус может принимать непрерывный набор значений.

Энергетические уровни  $E_n$  уединенного электрона, движущегося в указанном внешнем магнитном поле называются уровнями энергии Ландау,

$$E_n = E_n^\perp + E_{k_z}^\parallel = \hbar\Omega\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}, \quad (2)$$

где  $\Omega = eB/mc$  – так называемая циклотронная частота и  $\hbar k_z$  – проекция электронного импульса  $\hbar\vec{k}$  на направление магнитного поля,  $-\infty < k_z < \infty$ ,  $m$  – масса электрона и  $-e$  – заряд электрона.

Энергия уровней Ландау  $E_n^\perp$  соответствует дискретному набору круглых орбит электрона, которые спроектированы на поперечную плоскость. Энергия  $E_{k_z}^\parallel$  соответствует свободному движению электрона вдоль магнитного поля (*непрерывный* спектр), с сохраняющимся импульсом  $\hbar k_z$  вдоль магнитного поля.

Принимая во внимание вышеупомянутый обзор результатов Ландау, мы напоминаем, что в общем случае *однородного* магнитного поля координатная и спиновая компоненты полной волновой функции всегда могут быть разделены.

Соответствующая координатная компонента полной волновой функции электрона, получена как точное решение уравнения Шредингера для уединенного электрона, движущегося во внешнем магнитном поле с векторным потенциалом выбранным в виде  $A_r = A_z = 0$ ,  $A_\varphi = rB/2$ ,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \partial_r^2 + \frac{1}{r} \partial_r + \frac{1}{r^2} \partial_\varphi^2 + \partial_z^2 - \gamma^2 r^2 + 2i\gamma \partial_\varphi \right) \psi = E \psi, \quad (3)$$

и имеет следующую форму [9]:

$$\psi_{n,s,k_z}(r, \varphi, z) = \sqrt{2\gamma} I_{ns}(\gamma r^2) \frac{e^{il\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{ik_z z}}{\sqrt{L}}, \quad (4)$$

где  $I_{ns}(\rho)$  – функция Лагерра,

$$I_{ns}(\rho) = \frac{1}{\sqrt{n!s!}} e^{-\rho/2} \rho^{(n-s)/2} Q_s^{n-s}(\rho); \quad (5)$$

$Q_s^{n-s}$  – полином Лагерра,  $L$  – нормировочная константа,  $l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  – азимутальное квантовое число,  $s = n - l$  – радиальное квантовое число и  $\rho = \gamma r^2$ .

Спиновые компоненты полной волновой функции тривиальны и даются следующим:

$$\psi\left(\frac{1}{2}\right) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi\left(-\frac{1}{2}\right) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (6)$$

с соответствующими энергиями  $E_{spin} = \pm \mu_0 B$ , добавляемыми к энергии Ландау (2);  $\mu_0 = e\hbar/2mc$  – магнетон Бора.

Для *основного* уровня Ландау, то есть, при  $n = 0$ ,  $s = 0$  и нулевом импульсе электрона в направлении оси  $z$ , то есть  $\hbar k_z = 0$ , из (2) мы имеем:

$$E_0^\perp = \frac{e\hbar B}{2mc}, \quad (7)$$

и, согласно (4), соответствующая нормированная волновая функция *основного* состояния

$$\psi_{000}(r, \varphi, z) = \psi_{000}(r) = \sqrt{\frac{\gamma}{\pi}} e^{-\gamma r^2/2}, \quad (8)$$

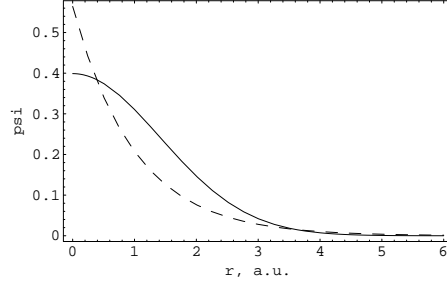


Рис. 33: Волновая функция Ландау основного состояния уединенного электрона,  $\Psi_{000}$  (сплошная кривая), (8), в сильном внешнем магнитном поле  $B = B_0 = 2.4 \cdot 10^9$  Гаусс, как функция расстояния  $r$  в цилиндрической системе координат, и (для сравнения) волновая функция атома водорода в основном состоянии (в *отсутствии* внешнего магнитного поля),  $(1/\sqrt{\pi})e^{-r/a_0}$  (пунктирная кривая), как функция расстояния  $r$  в сферических координатах. Связанные с ними функции плотности вероятности показаны на Рис. 34; 1 а.е. =  $a_0 = 0.53 \cdot 10^{-8}$  см.

$$\int_0^\infty \int_0^{2\pi} r dr d\phi |\Psi_{000}|^2 = 1.$$

Соответствующий (наименьший) радиус Ландау орбиты электрона

$$R_0 = \sqrt{\frac{\hbar c}{eB}} \equiv \sqrt{\frac{1}{2\gamma}}, \quad (9)$$

для которого  $\Psi_{000}$  имеет вид

$$\Psi_{000} = \sqrt{\frac{1}{2\pi R_0^2}} e^{-\frac{r^2}{4R_0^2}}. \quad (10)$$

Рисунок 33 изображает волновую функцию основного состояния Ландау уединенного электрона,  $\Psi_{000}$ , в сильном внешнем магнитном поле  $B = B_0 = 2.4 \cdot 10^9$  Гаусс ( $R_0 = 1$  а.е.), и (для сравнения) волновую функцию атома водорода, при *отсутствии* внешнего магнитного поля,  $(1/\sqrt{\pi})e^{-r/a_0}$ . Рис. 34 и 35 показывают связанные с ними плотности вероятности местопребывания электрона как функцию расстояния  $r$  от центра орбиты, радиус которой порядка 1 а.е.

Условие того, что радиус Ландау меньше, чем боровский радиус,  $R_0 < a_0$  (которое принимается здесь как условие значительной "деформации"



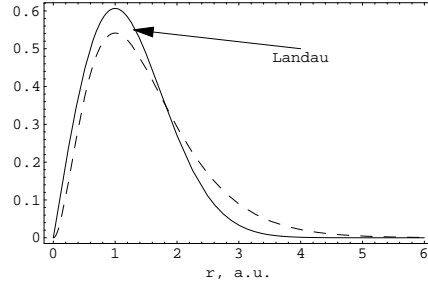


Рис. 34: Плотность вероятности для случая основного состояния Ландау уединенного электрона,  $2\pi r |\psi_{000}|^2$  (сплошная кривая), (8), в сильном внешнем магнитном поле  $B = B_0 = 2.4 \cdot 10^9$  Гаусс, как функция расстояния  $r$  в цилиндрических координатах, и (для сравнения) плотность вероятности для основного состояния атома водорода (в *отсутствии* внешнего магнитного поля),  $4\pi r^2 |(1/\sqrt{\pi})e^{-r/a_0}|^2$  (пунктирная кривая), как функция расстояния  $r$  в сферических координатах. Связанные с ними волновые функции показаны на Рис. 33; 1 а.е. =  $0.53 \cdot 10^{-8}$  см.

электронной орбиты Н атома) подразумевает тогда, что

$$B > B_0 = \frac{m^2 c e^3}{\hbar^3} = 2.351 \cdot 10^9 \text{ Gauss}, \quad (11)$$

где  $m$  – масса электрона. Эквивалентно, это условие деформации соответствует случаю, когда энергия связи Н атома,  $|E_0^{Bohr}| = | - m e^4 / 2 \hbar^2 | = 0.5$  а.е. = 13.6 эВ, меньше, чем основной уровень энергии Ландау  $E_0^\perp$ .

Вышеуказанное значение магнитного поля,  $B_0$ , дается естественным образом как *атомная единица* силы магнитного поля и соответствует случаю, когда чисто кулоновская энергия взаимодействия электрона с ядром равна энергии взаимодействия уединенного электрона с внешним магнитным полем,  $|E_0^{Bohr}| = E_0^\perp = 13.6$  эВ, или, эквивалентно, когда боровский радиус равен радиусу Ландау,  $a_0 = R_0 = 0.53 \cdot 10^{-8}$  см.

Здесь следует подчеркнуть, что характерные параметры, боровская энергия  $|E_0^{Bohr}|$  и боровский радиус  $a_0$ , Н атома имеют своей целью установление критерия для критической силы внешнего магнитного поля атома водорода при рассматриваемых здесь условиях. Очевидно, что для других атомов критическое значение магнитного поля может быть другим.

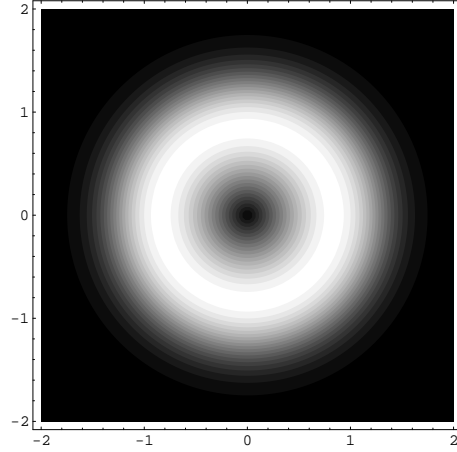


Рис. 35: Контурное изображение плотности вероятности  $(r, \varphi)$  для случая основного состояния Ландау уединенного электрона,  $2\pi r |\psi_{000}|^2$ , (8), в сильном внешнем магнитном поле  $B = B_0 = 2.4 \cdot 10^9$  Гаусс, как функция расстояния в а.е. (1 а.е. =  $0.53 \cdot 10^{-8}$  см). Более светлая область соответствует большей вероятности нахождения электрона. Набор максимальных значений плотности вероятности называется "орбитами".

После рассмотрения квантовой динамики уединенного электрона во внешнем магнитном поле, Арынгазин [8] обратился к рассмотрению Н атома во внешнем постоянном однородном магнитном поле.

В цилиндрической системе координат  $(r, \varphi, z)$ , в которой внешнее магнитное поле имеет вид  $\vec{B} = (0, 0, B)$ , то есть, магнитное поле направлено вдоль оси  $z$ , уравнение Шредингера для электрона движущегося вокруг фиксированного протона (приближение Бора-Опенгеймера) в присутствии внешнего магнитного поля имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \partial_r^2 + \frac{1}{r} \partial_r + \frac{1}{r^2} \partial_\varphi^2 + \partial_z^2 + \frac{2me^2}{\hbar^2 \sqrt{r^2 + z^2}} - \gamma^2 r^2 + 2i\gamma \partial_\varphi \right) \psi = E \psi, \quad (12)$$

где  $\gamma = eB/2\hbar c$ .

Главная проблема в нерелятивистском изучении атома водорода во внешнем магнитном поле заключается в решении вышеуказанного уравнения Шредингера и нахождении его энергетического спектра. Это уравнение не решается аналитическим путем и требует использования приближений.

В приближении очень сильного магнитного поля,  $B \gg B_0 = 2.4 \cdot 10^9$  Гаусс, кулоновское взаимодействие электрона с ядром в поперечном плоскости не столь важно, по сравнению со взаимодействием электрона с внешним магнитным полем. Следовательно, в соответствии с точным решением (4), для уединенного электрона можно найти приближенное решение (12) для основного состояния в форме факторизованных поперечных и продольных частей,

$$\psi = e^{-\gamma r^2/2} \chi(z), \quad (13)$$

где  $\chi(z)$  – продольная составляющая волновой функции, которую еще предстоит найти. Это так называемое *adiaбатическое приближение*. В общем, адиабатическое приближение соответствует случаю, когда поперечное движение электрона полностью определяется напряженностью магнитного поля, которое заставляет электрон "танцевать" на циклотронной частоте. В частности, радиус орбиты тогда *много меньше*, чем боровский радиус,  $R_0 \ll a_0$ . Оставшейся проблемой является, следовательно, нахождение продольного энергетического спектра, в направлении оси  $z$ .

Подстановка волновой функции (13) в уравнение Шредингера (12), умножение его на  $\psi^*$  и интегрирование по переменным  $r$  и  $\phi$  в цилиндрической системе координат приводят к следующему уравнению характеризующему  $z$ -зависимость волновой функции:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{\hbar^2 \gamma}{m} + C(z) \right) \chi(z) = E \chi(z), \quad (14)$$

где

$$C(z) = -\sqrt{\gamma} e^2 \int_0^\infty \frac{e^{-\rho}}{\sqrt{\rho + \gamma z^2}} d\rho = -e^2 \sqrt{\pi \gamma} e^{\gamma z^2} [1 - \operatorname{erf}(\sqrt{\gamma}|z|)] \quad (15)$$

и  $\operatorname{erf}(x)$  – функция ошибок.

Появившийся эффективный потенциал  $C(z)$ , имеющий нетривиальный вид не допускает аналитического решения уравнения (14), но он может быть аппроксимирован простыми потенциалами, для оценки энергии и волновой функции основного состояния Н атома.

При высокой напряженности магнитного поля,  $\gamma \gg 1$ , так что, при условии  $\gamma \langle z^2 \rangle \gg 1$ , можно игнорировать  $\rho$  под радикалом подынтеграль-

ной функции в уравнении (15). При этом интеграл сильно упрощается и сводится к виду

$$C(z) \simeq V(z) = -\frac{e^2}{|z|}, \quad \text{при } \gamma\langle z^2 \rangle \gg 1, \quad (16)$$

который оказывается описывающим чисто кулоновское взаимодействие электрона с ядром, в направлении оси  $z$ . Согласно точному решению (15),  $C(z)$  стремится к нулю при  $z \rightarrow \infty$ . Однако, замечательным свойством точного решения является то, что  $C(z)$  ограничено в точке  $z = 0$ , а именно,  $C(0) = -\sqrt{\pi\gamma}e^2$ , так что эффективный потенциал  $C(z)$  не может быть хорошо аппроксимирован кулоновским потенциалом.

Точный потенциал  $C(z)$  может быть хорошо аппроксимирован *модифицированным* кулоновским потенциалом,

$$C(z) \simeq V(z) = -\frac{e^2}{|z| + z_0}, \quad (17)$$

где  $z_0$  – параметр,  $z_0 \neq 0$ , который зависит от индукции поля  $B$ ,

$$z_0 = -\frac{e^2}{C(0)} = \frac{1}{\sqrt{\pi\gamma}} = \sqrt{\frac{2\hbar c}{\pi e B}}. \quad (18)$$

Аналитическое преимущество этого приближения заключается в том, что  $V(z)$  является *ограниченным* в точке  $z = 0$ , имея, при этом, кулоновскую форму. Следовательно, уравнение (14) сводится к *одномерному* предингеровскому уравнению для кулоно-подобного потенциала,

$$\left( \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{e^2}{|z| + z_0} + \frac{\hbar^2\gamma}{m} + E \right) \chi(z) = 0. \quad (19)$$

В атомных единицах ( $e = \hbar = m = 1$ ), с использованием обозначений

$$E' = \frac{\hbar^2\gamma}{m} + E, \quad n^2 = \frac{1}{-2E'}, \quad (20)$$

вводя новую переменную  $x = 2z/n$  и полагая  $x_0 = 2z_0/n$ , для упрощения записи, вышеуказанное уравнение может быть переписано как

$$\left[ \frac{d}{dx^2} + \left( -\frac{1}{4} + \frac{n}{x} \right) \right] \chi(x) = 0, \quad (21)$$

где принимается  $x > 0$ . Вводя новую функцию  $v(x)$ , определяемую через выражение  $\chi(x) = xe^{-x/2}v(x)$ , получаем окончательную форму уравнения,

$$xv'' + (2-x)v' - (1-n)v = 0. \quad (22)$$

Заметим, что оно является частным случаем уравнения Куммера (Cummer),

$$xv'' + (b-x)v' - av = 0, \quad (23)$$

общее решение которого дается следующим выражением

$$v(x) = C_1 {}_1F_1(a, b, x) + C_2 U(a, b, x), \quad (24)$$

где

$${}_1F_1(a, b, x) = \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(b-a)\Gamma(a)} \int_0^1 e^{xt} t^{a-1} (1-t)^{b-a-1} dt \quad (25)$$

и

$$U(a, b, x) = \frac{1}{\Gamma(a)} \int_0^\infty e^{-xt} t^{a-1} (1+t)^{b-a-1} dt \quad (26)$$

являются гипергеометрическими функциями,  $C_{1,2}$  – константы;  $a = 1 - n$  и  $b = 2$ . Отсюда, для  $\chi(x)$  имеем

$$\chi(x) = (|x| + x_0) e^{-(|x|+x_0)/2} [C_1^\pm {}_1F_1(1-n, 2, |x| + x_0) + \quad (27)$$

$$C_2^\pm U(1-n, 2, |x| + x_0)],$$

где восстановлен параметр  $x_0$  и " $\pm$ ", знак в  $C_{1,2}^\pm$ , соответствует положительным и отрицательным значениям  $x$ , соответственно (знак модуля используется для краткости).

Рассмотрим теперь первый случай  $x_0 = 0$ . Первая гипергеометрическая функция  ${}_1F_1(1-n, 2, x)$  конечна при  $x = 0$  для любого  $n$ . При больших значениях  $x$ , она расходится экспоненциально, если  $n$  не является целым числом,  $n = 1, 2, \dots$ , при которых функция расходится полиномиально. Вторая гипергеометрическая функция  $U(1-n, 2, x)$  ведет себя иначе, в чем-то, как зеркальное отражение первой. В пределе  $x \rightarrow 0$ , она конечна для целых чисел  $n = 1, 2, 3, \dots$  и расходится как  $1/x$  для нецелых  $n > 1$  и для  $0 \leq n < 1$ . В пределе  $x \rightarrow \infty$ , она расходится полиномиально для

целых  $n$ , стремится к нулю для нецелых  $n > 1$  и для  $n = 0$  и расходится для нецелых  $0 < n < 1$ .

В общем, из-за множителя  $xe^{-x/2}$  в решении (27), который нейтрализует некоторые расходимости происходящие из гипергеометрических функций, мы должны принять в расчет оба линейно независимых решения, чтобы получить наиболее общую форму нормируемой волновой функции.

Как следствие, для  $x_0 \neq 0$  получаемые собственные значения могут отличаться от собственных значений соответствующих  $n = 1, 2, \dots$  (которые являются аналогами главного квантового числа в обычной задаче атома водорода), так что  $n$  может принимать некоторые нецелые значения от 0 до  $\infty$ , обеспечивая нормируемость волновой функции.

Для четных состояний в соответствии с симметрией волновой функции относительно инверсии  $z \rightarrow -z$ , имеем

$$C_1^+ = C_1^-, \quad C_2^+ = C_2^-, \quad \chi'(0) = 0. \quad (28)$$

А также, так как  $n = 1$  дает  $E' = -1/(2n^2) = -1/2$  а.у., следует искать нормируемую волновую функцию для  $n$  в интервале  $0 < n < 1$ , для достижения наимизшего значения энергии. В случае успеха,  $n = 1$  действительно не характеризует основное состояние, а может соответствовать некоторому возбужденному состоянию.

Анализ показывает, что нормируемые волновые функции, как комбинации двух линейно независимых решений, для модифицированного кулоновского потенциала существуют для различных нецелых  $n$ . Сосредоточившись на решении для основного состояния, Арынгазин рассмотрел значения  $n$  в области от 0 до 1. Напомним, что  $E' = -1/2n^2$ , так что для  $n < 1$  энергия ниже, чем  $E' = -0.5$  а.у.

Для  $n < 1$ , первая гипергеометрическая функция не подавляется множителем  $xe^{-x/2}$  в решении (27) при больших  $x$ , так что мы отбрасываем его, как нефизическое решение, полагая  $C_1 = 0$ . Нормируемая волновая функция основного состояния для  $n < 1$  может поэтому даваться вторым слагаемым в решении (27). Действительно, условие  $\chi'(x)|_{x=0} = 0$  подразумевает

$$\frac{1}{2}e^{-(x+x_0)/2}C_2[(2-x-x_0)U(1-n, 2, x+x_0) - 2(1-n)(x+x_0)U(2-n, 3, x+x_0)]|_{x=0} = 0. \quad (29)$$

Левая часть этого уравнения зависит от  $n$  и  $x_0$ , так что может быть выбрана некоторая индукция поля  $B$ , рассчитана связанная с ней величина

$x_0 = x_0(B)$  и найдено  $n$ , которое даст энергию основного состояния  $E'$ . С другой стороны, для основного состояния, это условие может рассматриваться, *vice versa*, как уравнение для нахождения  $x_0$  для некоторого выбранного  $n$ .

Например, взяв нецелое значение  $n = 1/\sqrt{15.58} \simeq 0.253 < 1$ , Арынгазин нашел  $x_0 = 0.140841$ . Это значение согласуется с результатом  $x_0 = 0.141$  полученным Хейлом (Heyl) и Хернквистом (Hernquist) [14]. С другой стороны,  $x_0$ , согласно (18), связано с индукцией магнитного поля,  $x_0 = 2z_0/n$ , откуда получаем  $B \simeq 4.7 \cdot 10^{12}$  Гаусс. Следовательно, при этой индукции поля энергия атома водорода в основном состоянии определяется значением  $n = 1/\sqrt{15.58}$ .

Полная волновая функция основного состояния дается выражением

$$\psi(r, \varphi, x) \simeq \sqrt{\frac{1}{2\pi R_0^2}} e^{-\frac{r^2}{4R_0^2}} (|x| + x_0) e^{(|x| + x_0)/2} U(1 - n, 2, |x| + x_0), \quad (30)$$

где  $n$  определяется согласно вышеуказанной процедуре и связанная с ним трехмерная функция плотности вероятности схематически изображена на Рис. 36.

Можно видеть, что эта задача сильно отличается от обычной трехмерной задачи атома водорода, для которой главное квантовое число должно быть целым для получения нормированных волновых функций и значение  $n = 1$  соответствует наинижнему уровню энергии.

Подход через модифицированный кулоновский потенциал обеспечивает качественно правильное поведение и предлагает *единственную* орбиту Ландау-типа, показанную на Рис. 36 для распределения заряда в основном состоянии атома водорода. Это находится в полном согласии исследованиями атома водорода Сантилли [1, 11] в сильном магнитном поле.

Точные аналитические расчеты волновых функций основного и возбужденного состояний атома водорода, сделанные Хейлом и Хернквистом [14] в адиабатическом приближении, приводят к продольным частям волновых функций показанным на Рис. 37, который воспроизводит оригинальный Рис. 3 их работы;  $\zeta = 2\pi\alpha z/\lambda_e$ ;  $B = 4.7 \cdot 10^{12}$  Гаусс. Они использовали модифицированный кулоновский потенциал типа (17) и дополнительный набор линейно независимых решений одномерной мо-

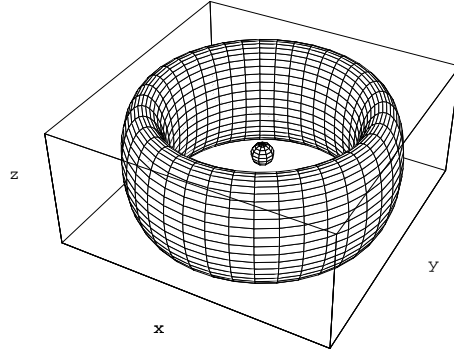


Рис. 36: Схематический вид Н атома в основном состоянии при наложении на него очень сильного внешнего магнитного поля  $\vec{B} = (0, 0, B)$ ,  $B \gg B_0 = 2.4 \cdot 10^9$  Гаусс, согласно модифицированному кулоновскому приближению изученному в этом разделе. Электрон движется по орбите Ландау малого радиуса  $R_0 \ll 0.53 \cdot 10^{-8}$  см, что приводит к тороидальной структуре используемой в новых химических соединениях магнекулах. Вертикальный размер атома сравним с  $R_0$ . Спин электрона антипараллелен магнитному полю.

дифицированной кулоновской задачи в форме

$$(|x| + x_m) e^{-(|x| + x_m)/2} {}_1F_1(1 - n, 2, |x| + x_m) \int^{x + x_m} \frac{e^t}{(t {}_1F_1(1 - n, 2, t))^2} dt, \quad (31)$$

где  $m = 0$  соответствует основному состоянию. Для основного состояния  $n = 1/\sqrt{15.58}$ , они нашли  $x_0 = 0.141$ , которое соответствует  $B = 4.7 \cdot 10^{12}$  Гаусс. Этот результат находится в согласии с вышеприведенным исследованием.

Из Рис. 37 можно видеть, что пик волновой функции основного состояния приходится на точку  $z = 0$ , в то время как наибольшие пики волновых функций возбужденных состояний отстоят от точки  $z = 0$  (как это и ожидалось). В результате, связанные с ними продольные распределения вероятности (квадраты модулей волновых функций умноженные на объемный множитель в выбранной системе координат) симметричны относительно замены  $z \rightarrow -z$ , и их максимумы расположены в центре  $z = 0$  для основного состояния и отстоят от центра для возбужденных состояний. Вычисленные энергии связи для основного состояния  $|000\rangle$



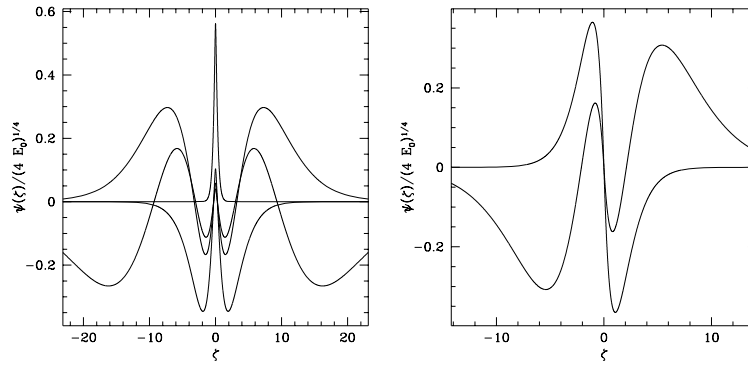


Рис. 37: Аксиальные волновые функции водорода в сильном магнитном поле (аналитические расчеты) для  $B = 4.7 \cdot 10^{12}$  Гаусс. Изображены первые четыре четные состояния с аксиальными возбуждениями,  $|000\rangle$  (основное состояние),  $|002\rangle$ ,  $|004\rangle$ , и  $|006\rangle$  (слева) и нечетные состояния  $|001\rangle$  и  $|003\rangle$  (справа);  $n = 1/\sqrt{15.58}$ ,  $\zeta = 2z/n$  соответствуют оси  $x$ , в используемых обозначениях;  $z$  в а.е., 1 а.е. =  $0.53 \cdot 10^{-8}$  см (воспроизведение Рис. 3 Хейла и Хернквиста из работы [14]).

атома водорода для различных напряженностей поля имеют следующие значения [14]:

Magnetic field $B$ (Gauss)	Binding energy, $ 000\rangle$ state (Rydberg)
$4.7 \times 10^{12}$	15.58
$9.4 \times 10^{12}$	18.80
$23.5 \times 10^{12}$	23.81
$4.7 \times 10^{13}$	28.22
$9.4 \times 10^{13}$	33.21
$23.5 \times 10^{13}$	40.75
$4.7 \times 10^{14}$	47.20

Хейл и Хернквист вычислили пертурбативные поправки первого порядка к вышеуказанным энергиям и получили значения, которые находятся в хорошем согласии с результатами Рудера (Ruder) и др. [9] и Лая (Lai) [12].

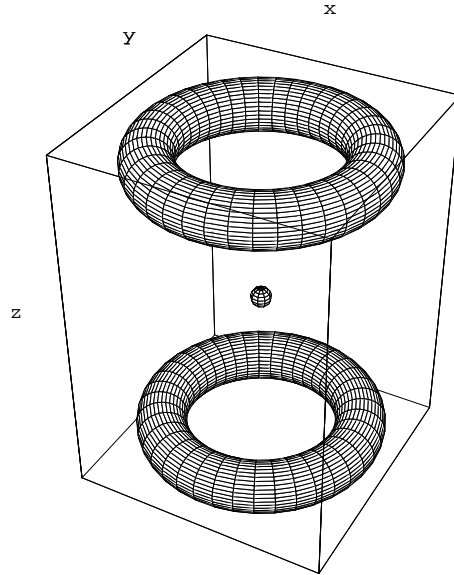


Рис. 38: Схематический вид Н атома в возбужденном состоянии при наложении очень сильного внешнего магнитного поля  $\vec{B} = (0, 0, B)$ ,  $B \gg B_0 = 2.4 \cdot 10^9$  Гаусс. Один электрон движется одновременно по двум торoidalным орбитам радиуса  $R_0$ , которые изображены схематически как торы в различных  $(x, y)$  плоскостях, один тор на уровне  $z = -L_z$  и другой на уровне  $z = +L_z$ , с ядром показанным в центре в  $z = 0$ . Каждый тор воспроизводит  $(x, y)$ -распределение вероятности, как показано на Рис. 35, но с меньшим радиусом Ландау,  $R_0 \ll a_0$ . Спин электрона ориентирован антипараллельно магнитному полю.

Связанная с вышеуказанными *возбужденными* состояниями плотность вероятности, очевидно, обладает цилиндрической (аксиальной) симметрией и может быть описана двумя орбитами Ландау радиуса  $R_0$  в различных  $(r, \varphi)$ -плоскостях, одной — на уровне  $z = -L_z$  и другой — на уровне  $z = +L_z$ , с ядром в точке  $z = 0$ , как схематически изображено на Рис. 38. Присутствие двух орбит Ландау имеет место в соответствии с возбужденными волновыми функциями, симметричными относительно преобразования инверсии,  $z \rightarrow -z$ , и наибольшими пиками отстоящими от центра  $x = 0$ . Электрон движется одновременно по этим двум орбитам Ландау.

Обзор приближенных, вариационных и численных решений может быть найден в работе Лая [12]. Точность численных решений составляет порядка 3%, для внешнего магнитного поля варьируемого от  $10^{11}$  до  $10^{15}$  Гаусс. В частности, согласно вариационным результатам [12], размер атома водорода вдоль оси  $z$  в основном состоянии хорошо аппроксимируется формулой  $L_z \simeq [\ln(B/B_0)]^{-1}$  а.у.; поперечный (Ландау) размер  $L_{\perp} \simeq (B/B_0)^{-1/2}$  а.у.; и энергия основного состояния  $E \simeq -0.16[\ln(B/B_0)]^2$  а.у., с точностью до нескольких процентов, для  $b \equiv B/B_0$  в районе от  $10^2$  до  $10^6$ . Можно видеть, для  $B = 100B_0$ , что вариационное исследование предсказывает энергию основного состояния  $E = -3.4$  а.у. =  $-92.5$  эВ, поперечный размер  $L_{\perp}$  около  $0.1$  а.у. =  $0.53 \cdot 10^{-9}$  см и  $z$ -размер  $L_z$  около  $0.22$  а.у. Это подтверждает результаты полученные модифицированным кулоновским аналитическим подходом.

Так как основное состояние Н атома в отсутствии поля характеризуется идеальным сферически симметричным распределением заряда электрона, средние напряженности магнитного поля, естественным образом, подразумевают искажение сферического распределения. Однако для магнитных полей средней напряженности требуется глубокий анализ, так как адиабатическое приближение в этом случае уже не применимо.

Что касается многоэлектронных атомов, интересной проблемой является изучение действия очень сильного внешнего магнитного поля на атом гелия (см., например, [12, 14]) и на многоэлектронные тяжелые атомы, с внешними электронами характеризуемыми *несферическим* распределением заряда, таким как  $p$ -электроны атома углерода, орбитали которых пронизывают орбитали внутренних электронов. Действительно, очень сильное магнитное поле будет принуждать такие внешние электроны двигаться по *маленьким круглым* тороидальным орбитам. В дополнение к непосредственному действию магнитного поля на внутренние электроны, видимо, происходят серии перестроек всей электронной структуры атома, вследствие вариации напряженности поля. Магнитное поле конкурирует с кулоновской энергией, которая различна для различных состояний электронов, и с электрон-электронными взаимодействиями, включая спинорные спаривания. Однако, очевидно, что при достаточно сильных полях, все электронные спины выравниваются антипараллельно магнитному полю — конфигурация полной спиновой поляризации — в то время как при более низких напряженностях поля возможны различные частично поляризованные спиновые конфигурации.

Согласно численным расчетам Джонсена и Ингвасона, основанным

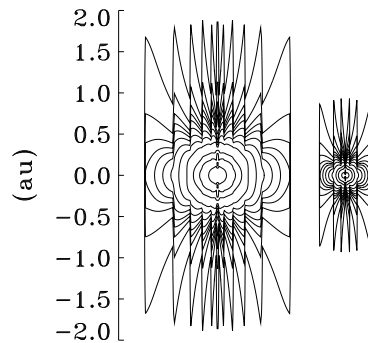


Рис. 39: Контурное изображение электронной плотности в  $(r, z)$ -плоскости для атома железа, согласно теории матрицы плотности при двух различных напряженностях магнитного поля,  $10^{11}$  Гаусс (слева) и  $10^{12}$  Гаусс (справа). Самый дальний контур содержит 99% отрицательного заряда, следующий – 90%, затем 80% и т.д., и два ближайших – 5% и 1%, соответственно (воспроизведение Рис. 5 Джонсена (Johnsen) и Ингвасона (Yngvason) [13]).

на теории матрицы плотности [13], которая находится в хорошем согласии с трактовкой Хартри-Фока очень сильного магнитного поля, внутренняя область атома железа (26 электронов) характеризуется слегка нарушенным сферически симметричным распределением, даже при сильных магнитных полях порядка  $B = 100B_0 \dots 1000B_0$ . Внутренняя область оказывается обладающей специфичным, сильно вытянутым распределением вдоль направления магнитного поля, как показано на Рис. 39. Возможная интерпретация, заключающаяся в том, что внутренние электроны остаются обладающими сферическим распределением, в то время как внешние электроны испытывают сжатие, по-видимому неправильна до тех пор пока не доказано, что спиновая конфигурация атома железа частично поляризована. Итак, мы можем заключить, что все электроны находятся в сильно магнитно поляризованном состоянии (состояние Ландау с небольшой примесью кулоновского взаимодействия), и эта электронная структура является видом *многоэлектронной цилиндрической оболочки Ландау*, со спинами всех электронов выровненных антипараллельно магнитному полю (конфигурация полной спиновой поляризации).

Другим замечанием относительно Рис. 39 является то, что контуры отмечающие ближайшее сферическое распределение будут появляться всегда, так как кулоновский центр (ядро) не полностью исключается из рассмотрения (неадиабатическое приближение), и это влияет на сферическое распределение, до некоторой степени, которая, очевидно, зависит от расстояния от центра (чем ближе к центру, тем больше выражена сферическая симметрия). Мы отметим, что внешние контуры на Рис. 39 находятся в качественном согласии с Рис. 38, в том смысле, что предсказывают зарядовое распределение обнаруживающее симметрию относительно инверсии  $z \rightarrow -z$ , с характерными, вытянутыми вдоль оси  $z$ , орбитами Ландау-типа.

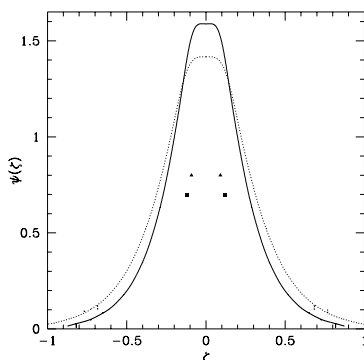


Рис. 40: Схематический вид основного и возбужденного до первого уровня состояний  $H_2^+$  иона. Сплошная линия соответствует  $|000\rangle$ , пунктирная соответствует  $|0-10\rangle$ . Треугольники указывают расположение протонов для основного состояния, квадраты – для возбужденного состояния. Магнитное поле  $B = 4.7 \cdot 10^{12}$  Гаусс направлено вдоль внутриядерной оси;  $\zeta = 2\pi\alpha z/\lambda_e$  обозначает  $z$  в а.е.; 1 а.е. =  $0.53 \cdot 10^{-8}$  см (воспроизведение Рис. 5 Хейла и Хернквиста [14]).

Интересной проблемой является изучение молекулы  $H_2$  под воздействием сильного внешнего постоянного однородного поля с использованием уравнения Шредингера. Однако, предваряя это исследование, было бы полезно исследовать более простой двухцентрковой ион  $H_2^+$ , так как это может дать ценную информацию о свойствах полной молекулы водорода под действием сильного магнитного поля. Мы отсылаем заинтересованного читателя к работам [12, 14, 15], касающихся исследований

иона  $H_2^+$  и молекулы  $H_2$  в сильном магнитном поле. Рис. 40 изображает волновые функции основного и возбужденного до первого уровня состояний  $H_2^+$  [14].



# Литература

- [1] Santilli, R.M.: *Hadronic J.* **21**, 789 (1998).
- [2] <http://www.magnegas.com>.
- [3] Kucherenko, M.G. and Aringazin, A.K.: *Hadronic J.* **21**, 895 (1998).
- [4] Settle, F.A.: Editor, *Handbook of Instrumental Techniques for Analytic Chemistry*, Prentice Hall, Upper Saddle River, New Jersey (1997).
- [5] Eldridge, H.: U.S. Patent no. 603,058, Spril [5a]; Dammann, W.A. and Wallman, D.: U.S. Patents nos. 5,159,900 (1992) and 5,417,817 (1995) [5b]; Richardson, W.H. jr.: U.S. Patents nos. 5,435,274 (1995), 5,692,459 (1997), 5,792,325 (1999) [5c]; See also for the Brown Gas Web Site <http://www.eagle-research.com> [5d],  
and for the SkyGas Web Site <http://www.mpmtech.com> [5e].
- [6] Sachse, T.I. and Kleinekathöfer, U.: "Generalized Heitler–London Theory for H<sub>3</sub>: A Comparison of the Surface Integral Method with Perturbation Theory", e-print arXiv: physics/0011058 (November 2000).
- [7] Kadomtsev, B.B. and Kudryavtsev, V.S.: *Pis'ma ZhETF* **13**, 15, 61 (1971); *Sov. Phys. JETP Lett.* **13**, 9, 42 (1971) (English Translation); *ZhETF* **62**, 144 (1972); *Sov. Phys. JETP* **35**, 76 (1972) (English Translation). Ruderman, M.: *Phys. Rev. Lett.* **27**, 1306 (1971); in: IAU Symposium 53, *Physics of Dense Matter*, C.J. Hansen (ed.), Dordrecht, Reidel (1974). Lai, D., Salpeter, E. and Shapiro, S.L.: *Phys. Rev.* **A45**, 4832 (1992). Lai, D. and Salpeter, E.: *Phys. Rev.* **A52**, 2611 (1995); *Phys. Rev.* **A53**, 152 (1996); *Astrophys. J.* **491**, 270 (1997).



- [8] Aringazin, A.K.: Toroidal configuration of the orbit of the electron of the hydrogen atom under strong external magnetic fields, *Hadronic J.* **24** (2001), in press.
- [9] Sokolov A.A., Ternov I.M., and Zhukovskii, V.Ch.: *Quantum mechanics*, Nauka, Moscow, 1979 (in Russian). Landau, L.D. and Lifshitz E.M.: *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory*, 3rd ed., Pergamon, Oxford, 1989. Ruder, H., Wunner, G., Herold, H. Geyer, F.: *Atoms in Strong Magnetic Fields*, Springer, Berlin-Heidelberg-New York, 1994. Kadomtsev, B.B.: *Soviet Phys. JETP* **31** 945 (1970). Kadomtsev, B.B. and Kudryavtsev, V.S.: *JETP* **13** 42 (1971); *JETP Lett.* **13** 9 (1971).
- [10] Faddeev, L. and Niemi, A.J.: Magnetic geometry and the confinement of electrically conducting plasmas, physics/0003083, April 2000. R. Battye, R., Sutcliffe, P.: *Phys. Rev. Lett.* **81**, 4798 (1998); and *Proc. R. Soc. Lond.* **A455**, 4305 (1999). Hietarinta, J, Salo, P.: *Phys. Lett.* **B451**, 60 (1999); and The ground state in the Faddeev-Skyrme model, University of Turku preprint, 1999; for video animations, see <http://users.utu.fi/hietarin/knots/index.html>
- [11] Santilli, R.M.: *The Physics of New Clean Energies and Fuels According to Hadronic Mechanics*, *Journal of New Energy* **4**, Special Edition, No. 1 (1999), 318 pages. Santilli, R.M. and Shillady, D.D.: *Intern. J. Hydrogen Energy* **24**, 943 (1999); *Intern. J. Hadrogen Energy* **25**, 173 (2000).
- [12] Lai, D.: Matter in strong magnetic fields, chem-ph/0009333, September 2000.
- [13] Johnsen, K. and Yngvason, J.: Density Matrix Functional Calculations for Matter in Strong Magnetic Fields: I. Atomic Properties, chem-ph/9603005, March 1996.
- [14] Heyl, J.S. and Hernquist, L.: Hydrogen and Helium Atoms and Molecules in an Intense Magnetic Field, chem-ph/9806040, June 1998. Jones, M.D., Ortiz, G., and Ceperley, D.M.: Spectrum of Neutral Helium in Strong Magnetic Fields, chem-ph/9811041, November 1998.
- [15] Lopez, J.C., Hess, P., and Turbiner, A.:  $H_2^+$  ion in strong magnetic field: a variational study, Preprint ICN-UNAM 97-06, chem-ph/9707050.

Turbiner, A., Lopez, J.C., and Solis, U.:  $H_3^{++}$  molecular ions can exist in strong magnetic fields, Preprint ICN-UNAM 98-05, chem-ph/9809298.  
Lopez, J.C. and Turbiner, A.: One-electron linear systems in a strong magnetic field, Preprint ICN-UNAM 99-03, chem-ph/9911535.

# Предметный указатель

- $\pi^0$  мезон, 56, 205
- $k$ -деформация, 31
- $q$ -деформация, 31
- $4\pi$ -спиновая симметрия, 44
- Сантили, Р.М., 222
- Шиллади, Д.Д., 270
- AsiaMagnegas, Ltd., 344, 374
- Baldwin, S., 235
- Castrol motor oil
  - мутированные характеристики, 450
- Clean Energy Technologies, Inc., 340
- Coloumb hole, 234
- Di Bernardi, Peter, 349
- EarthFirst Technologies, Inc., 305, 344, 363
- EPA
  - стандарты, 350
  - тесты, 349, 368
  - требования, 347
- EuroMagnegas, Ltd., 344, 374
- Florida International University, 445
- Givaudan-Roure Corporation, 418
- H атом, в сильном магнитном поле, 380, 469
- $H_2^+$ -подобные системы, 287
- isoelectronium, 190
- Lai, D., 464
- Liphardt & Associates, 349
- magnegas
  - exhaust, 349
- McClellan Air Force Base, 410
- Motorfuelers, Inc., 355, 363
- NASA лаборатория, 409
- PlasmaArcFlow
  - reactors, 343
  - реакторы, 344, 388
  - технология, 344
  - энергетический баланс, 363
- Radiation Protection Associates, 358
- SASLOBE, 225, 291
- Tampa Transformers, Inc., 363
- Tekmar-Dohrmann Corporation, 439
- Toups Technologies Licensing, Inc., 305, 344, 410
- U.S. Testing Company, Inc., 448
- under-unity, 318
- USMagnegas, Inc., 344, 374
- water

- characteristics, 255
- WattWatchers, Inc., 355
- Wiberg-Trindie bond indices, 241
  
- Авогадро, 373
- Адронный
  - горизонт, 289, 291
- Альберт А.А., 25
- Анималу А.О.Е., 56, 58, 60, 158
- Анималу изоединица, 58
- Анималу, А.О.Е., 200, 222, 269
- Арынгазин, А.К., 283, 289, 359, 382, 462
- Ашоори, Р.В., 266
  
- Бейтс, Д.Р., 219
- Бернетт, М., 439
- Биркгоффа
  - механика, 31, 147
  - уравнения, 148, 149, 155
- Блюмфилдом, Л.А., 234
- Бозе-Эйнштейна корреляции, 41
- Бойд, Д., 130
- Бойд, Р.Д., 234, 266
- Бойс, С.Ф., 220
- Бэйкера-Кемпбела-Хаусдорфа теорема, 97
  
- Вайнберг С., 33
- Вейд, Н., 410
- Время жизни
  - изоэлектрониума, 292
  
- Гамильтон, 12, 133, 135
- Гамильтона-Сантилли
  - геномеханика, 150
  - геноуравнения, 140, 150
  - гипермеханика, 152
  - изомеханика, 139, 155
  - изоуравнения, 140
  - механики, 137
- Гамильтона-Якоби-Сантилли
  - геноуравнения, 152
  - уравнения, 146, 157
- Гамильтона-Якоби-Сантилли уравнения, 157
- Гейзенберга
  - изоуравнение, 168
  - представление, 1
  - уравнение, 168
- Гильберта
  - бимодуль, 102
  - пространство, 1, 25, 30
- Годдард, У.А., 222
- Голдстоун-Брюкнер-Фейнмановские диаграммы, 220
  
- Даннинг, Т.Х., 272
- Дебая температура, 60
- Джианг, Ч.К., 80
- Джонсен, К., 479
- Дии, Л.А., 410
  
- Изохимическая модель
  - трех тел, 283, 285
  - четырёх тел, 283, 289
- Изоэлектрониум, 284
  - нестабильный, 290
- Иллерт К., 14
- Ингвасон, Дж., 479
- Ион  $H_2^+$ , 285
- Исследования Арынгазина-Кучеренко, 284
  
- Йи, М.К., 234, 266
  
- Каниццаро, 373
- Кар, Р., 234, 266

- Келли, Х.П., 220  
 Коррелированный SCF процесс, 273  
 Ксиа, П., 234  
 Кук, Д.Б., 268  
 Кулоновский интеграл, 294  
 Кулоновский потенциал гауссовски экранированный, 295  
 экранировки, 3  
 экспоненциально экранированный, 295  
 Куперовские пары, 56, 63  
 Кучеренко, М.Г., 283, 382  
  
 Лагранж, 12, 133, 135  
 Ледшем, К., 219  
 Ленгмюр, И., 130  
 Ли произведение, 2  
 Ли-Кенига теорема, 135  
 Ли-Сантилли геноалгебра, 104, 116  
 геногруппа, 104, 117  
 генотеория, 116  
 группа преобразований, 96  
 изоалгебра, 96  
 изогруппа, 97  
 изотеория, 95, 144, 160  
 произведение, 117  
 скобки, 143  
 Ли-допустимый, 29  
 Льюис, Г.Н., 130  
  
 $\text{MagN}^{TM}$ , 347  
 Маккей, 4  
 Модель Сантилли-Шиллади, 284, 289, 290  
 Молекула  $\hat{N}_2$ , 285  
  
 Ниemi, А., 464  
 Обменный интеграл, 294  
  
 Паринелло, М., 234, 266  
 Паули принцип запрета, 98  
 Подольский, 89, 129, 175  
 Поупл, Д.А., 220  
 Поурбакс, М., 258  
 Поурбо, М., 267  
 Принцип запрета Паули, 194  
 Принцип запрета Паули, 298  
 Пуассона скобки, 136, 144  
  
 Резерфорд, 327  
 Розен, 89, 129, 175  
 Рудер, Х., 476  
  
 Сантилли Р.М., 14, 25, 32, 56, 129, 186  
 Сантилли, Р.М., 283, 305, 321, 333, 344, 355, 359, 379  
 Сантилли-Соурласа-Тсагаса топология, 140  
 Селлони, А., 234  
 Стабильность изоэлектроннума, 285  
 Стантон, Джон, 344, 347  
 Стэнтон, Джон, 305, 374  
 Стюарт, А.Л., 219  
 Сугиура, 295  
  
 Тоупс, Леон, 305, 344, 374  
 Тсагас, 332  
  
 Уоллис, Б., 439  
  
 Фадеев, Л., 464  
 Фаза изоэлектроннума, 291

- Фойс, Е.С., 234
- Халтена потенциал, 23, 58, 61, 63, 202
- Халтеновский потенциал, 290, 294
- Хартри-Фок-Рутаан, 268
- Хартри-Фока-Рутан, 220
- Хартри-Фока-Рутана метод, 130
- Хейл, Дж.С., 474
- Хернквист, Л., 474
- Хиллераас, Е., 220
- Шавит, И., 223
- Шавитт, И., 270
- Шейфер, Х.Ф., 220
- Шиллади Д.Д., 186
- Шиллади, Д.Д., 129, 223, 283
- Шредингера  
    изоуравнение, 168  
    представление, 1  
    уравнение, 56, 157, 168
- Эддингтон, 123
- Эйнштейн, А., 89, 129, 135, 175
- Эрнандес, Д.А., 358
- Якоби, 12
- автомобиль Ferrari 308 GTSi, 346
- автомобиль Honda Civic, 346
- адронная  
    механика, 38, 322  
    сверхпроводимость, 55  
    химия, 75, 80, 83, 89, 94, 129, 131, 134, 148, 156, 179, 322  
    энергия, 324
- адронное  
    притяжение, 234
- адронные  
    топлива, 324
- адронный  
    горизонт, 250  
    молекулярный реактор, 343
- алгебра  
    Жордана, 26  
    Каца-Муди, 26, 32
- ароматическое масло, 419  
    мутированные характеристики, 449  
    обработанное магнитным полем, 438
- бензин, 313
- бимодуль, 101, 105
- валентная  
    связь, 373
- вариационный метод Ритца, 289
- внешние члены, 12, 133, 134, 136, 137, 139, 140, 142, 149, 153
- водородный автомобиль марки BMW, 317
- волновой пакет, 22  
    расширенный, 4
- вольфрамовый стержень, 360
- вытянутости, 256
- гауссовские  
    орбитали, 219  
    сферические функции, 218
- гауссовское  
    приближение, 217
- геогеометрия, 112
- геогильбертово пространство, 113, 114
- генодифференциальное исчисление, 113

- геноединица, 104, 108, 110, 114, 116  
     времени, 125  
 генолинейность, 115, 116  
 генолокальность, 115  
 геноматематика, 100, 101, 108, 114, 118  
 генополе, 109, 110, 114, 118  
 генопроизведение, 104, 110, 116  
 генопространство, 100, 111, 116, 118  
 генотопическая  
     ветвь, 36, 101  
 геноунитарность, 115  
 генохимия, 101, 116, 180  
 геночисло, 100, 109  
 геометрическая единица, 27  
 гибридизация, 256  
 гильбертово  
     пространство, 93  
 гипервремя, 125  
 гиперединица, 118  
 гипермагнекула, 461  
 гиперматематика, 118, 119, 125  
 гиперструктурная  
     ветвь, 36  
 гиперхимия, 180  
 графитный стержень, 359  
  
 дважды расщепленная конфигурация, 385  
 димер Н-О, 261  
  
 законы сохранения, 6  
 звездочная деформация, 31  
  
 изоволновая функция, 262  
 изовремя, 124  
  
 изогильбертово пространство, 87, 94  
 изодействия принцип, 145  
 изодифференциальное исчисление, 86  
 изодифференциал, 86, 96  
 изодуальная  
     математика, 122  
     сумма, 121  
     теория антиматерии, 122  
 изодуальное  
     отображение, 122  
     поле, 121  
     произведение, 121, 122  
 изодуальность, 121, 123  
 изоевклидово пространство, 81, 82, 85, 92  
 изоединица, 76, 78, 84, 88, 187  
 изоединица времени, 86  
 изокоординаты, 81, 83  
 изоматематика, 75, 323  
 изометрика, 81, 82, 84  
 изоминковская геометрия, 81  
 изопертурбационная теория, 89  
 изополе, 79, 82, 85, 93, 94, 98, 105  
 изополе кватернионов, 110  
 изопроизведение, 76, 79, 82, 103, 109  
 изопространство, 81–85, 92, 95, 98, 105  
 изопротон, 335  
 изосимметрия Пуанкаре-Сантилли, 323  
 изосимплектическая геометрия, 144  
 изосимплектическая геометрия, 82, 139  
 изосумма, 79, 80  
 изотопическая

- ветвь, 35, 75
- изотопический
  - элемент, 76, 89, 90, 97, 107, 149, 153, 166
- изоунитарность, 88, 94, 98
- изофазовое пространство, 139
- изофункциональный анализ, 91
- изохимическая модель
  - молекулы
    - воды, 259, 264
    - молекулы  $H_2$ , 210
    - молекулярные связи, 190
- изохимия, 75, 80, 83, 91
- изочисло, 79, 80
- изошредингеровское уравнение, 204
- изоэлектрон, 335
- изоэлектрониум, 381
  - нестабильный, 216
  - размер, 215
- изоэрмитовость, 87
- импримитивности теорема, 32
- инвариантность, 2, 187
- индолин, 350
- инфракрасный сигнал, 308
- кварковые теории, 333
- кластеры, 307
- коммерческий КПД превосходящий единицу, 362
- кулоновская дыра, 130
- кулоновский потенциал
  - гауссовская экранировка, 172
  - экранировки, 130
- куперовская пара, 207
- лаборатория National Technical Systems, 410
- лаборатория Pinellas County Forensic, 412
- магнегаз
  - GC-MS/IRD сканирования, 411
  - мутированные ИК сигналы, 413
- магнегаза адгезия, 413
- магнегазовая производящая и заправочная станция, 367
- магнегазовый выхлоп
  - с каталитическим конвертером, 349
- магнекластер
  - экспериментальное детектирование, 439
- магнекула, 374
  - в жидкости
    - LC-MS/UVD сканирования, 439, 445
  - экспериментальное детектирование, 438
  - элементарная, 378
- магнекулы
  - жидкости, 390
  - экспериментальное детектирование, 393
- магнекулярный газ, 389
- магнеплексы, 378
- магнитная поляризация, 375
- магнитное ограничение, 463
- магнитное поле, очень сильное, 376, 463
- магнитный



- момент, 381
- масс-спектроскопическое сканирование, 309
- масса
  - изоэлектроннума, 215
- метод скейлинга, 287
- модель Анималу-Сантilli, 232
- молекула
  - воды, 247
- молекула  $H_2$ , 190
- морская вода, 344
- мутация, 323
- негамильтоновы
  - взаимодействия, 321
- неизменяемые характеристики, 323
- нейтрон, 324
- неканоническая
  - реализация, 95
  - структура, 73, 148
  - теория, 73
  - эволюция, 74, 136
- неканонические
  - взаимодействия, 93
  - преобразования, 98, 153, 155
  - формулировки, 29
  - эволюции, 30
- неканоническое
  - представление, 74
- неквантования теорема, 33
- необратимость, 12
- необратимые процессы, 129, 132
- непотенциальные
  - взаимодействия, 94, 129, 161, 166, 194, 321
  - силы, 134, 137, 141, 159
  - системы, 163
- несамосопряженность, 147
- несамосопряженные системы, 138
- неунитарная
  - реализация, 95
  - структура, 73
  - теория, 73
  - эволюция, 74
- неунитарное
  - преобразование, 254, 322
- неунитарные
  - взаимодействия, 93
  - контактные эффекты, 322
  - преобразования, 99, 172
- новые и чистые энергии, 323
- окись углерода, 345
- определение
  - магнекулы, 376
- отдельные вытянутости, 257
- отходы, 344
  - антифриза, 359
- парниковый эффект, 311
- перекрытие, 4, 22
- перманентное кислородное истощение, 311
- пертурбация Моллера-Плессета, 220
- плазма, 344, 389
- поляризованные спиновые конфигурации, 478
- приближение Борна-Оппенгеймера, 285
- принцип запрета Паули, 214, 231
- природный газ, 313
- причинность, 28
- проблема окружающей среды, 311
- проекция, 202
- разложение Гегенбауера, 295

- резка металла
  - магнегазом, 353
- самосопреженность, 135, 138
- самосопреженные системы, 138
- связь
  - магнитного происхождения, 392
- сгорание
  - магнегаза, 347, 348
- сжатый природный газ, 313
- сжигание
  - магнегаза, 351
  - природных топлив, 310
- сжижение
  - магнегаза, 352
- симпсоновское интегрирование, 271
- спусковой механизм, 336
- стимулированный распад
  - нейтрона, 333
- стимулированный синтез азота, 337
- структура
  - биологическая, 14, 125
  - деформируемая, 13
  - неунитарная, 25
  - твердая, 13
- структурная модель
  - нейтрона, 330
- температура Кюри, 387
- теорема импримитивности, 4
- теплота сгорания
  - магнегаза, 356
- топлива
  - магнитно поляризованные, 374
- топливные ячейки, 317
- тороидальная конфигурация, 384, 462, 474
- уровни Ландау, 465
- условия
  - негамильтоновы, 22
  - нелинейные, 22
  - нелокальные интегральные, 22
  - непотенциальные, 22
  - неунитарные, 22
- химический состав
  - магнегаза, 352
- холодный ядерный синтез, 334
- циклотронная частота, 465
- чистые энергии, 320
  - Класс I, 324
  - Класс III, 343
  - Класса II, 334
  - литиевое усиление сгорания, 340
  - электрохимические реакции, 341
- электрическая дуга постоянного тока, 344, 389
- электролитическое разложение воды, 316
- электромобили, 317
- электронные
  - корреляции, 23, 234
  - пары, 11
- электронный захват, 335
- энергетический баланс
  - PlasmaArcFlow, 354
- энергия самодействия, 268
- эффект домино, 257
- ядерное превращение, 325
- ядерные превращения
  - стимулированные низкими энергиями, 334

стимулированные низкой энер-  
гией, 343