

ЭЛЕМЕНТЫ ЖЕСТКОСТИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ ТВЕРДОГО ТЕЛА

© Голдобина Л.А.^{*}, Гусев В.П.[♦], Орлов П.С.[♥]

Санкт-Петербургский государственный университет сервиса и экономики,
г. Санкт-Петербург

Ярославский филиал Московского института инженеров транспорта,
г. Ярославль,

Ярославская государственная сельскохозяйственная академия, г. Ярославль

Предложена уточненная модель кристаллической решетки твердого тела, объясняющая высокую прочность и устойчивость твердого тела.

Из курса геометрии любой школьник знает, что неизменяемой и жесткой плоской конструкцией является только треугольник. Любой четырехугольник не может сохранить неизменным свои очертания, если в его конструкцию не включена диагональ и не может остаться плоским, если отсутствует вторая диагональ. Теоретическая и строительная механики прочно закрепляют это в сознании любого студента. Но школьник, изучая физику, не видит в строении кристаллической решетки элементов жесткости, не видит их и студент при изучении кристаллографии и материаловедения, а современная физика не может убедительно объяснить высокой прочности кристаллов, не обладающих для этого никакими физическими возможностями.

В соответствии с современными взглядами атомы и ионы в узлах кристаллической решетки связаны между собой прочными межатомными связями, но если внимательно рассмотреть модели предлагаемых систем (сингоний) кристаллических решеток, то становится очевидным, что подавляющее их большинство (в том числе и решетка алмаза – одного из самых прочных материалов современности) не может самостоятельно сохранять свою форму, так как пространственный каркас подавляющего большинства предлагаемых кристаллографией решеток, не имеет элементов жесткости, которыми в строительной механике являются диагональные связи плоских и пространственных рам.

Простейшей кристаллической решеткой, предлагаемой кристаллографией является кубическая решетка галита – каменной соли NaCl , представленной ионной решеткой, в которой ионы одновалентных натрия Na^+ и хло-

^{*} Профессор кафедры Технической механики Санкт-Петербургского государственного университета сервиса и экономики, доктор технических наук.

[♦] Старший преподаватель кафедры Технической механики Ярославского филиала Московского института инженеров транспорта, кандидат технических наук.

[♥] Заведующий кафедрой Электрификации Ярославской государственной сельскохозяйственной академии, доктор технических наук, доцент.

ра Cl^- попеременно располагаются в углах кубов, из которых состоит массив галита (рис. 1) [1].

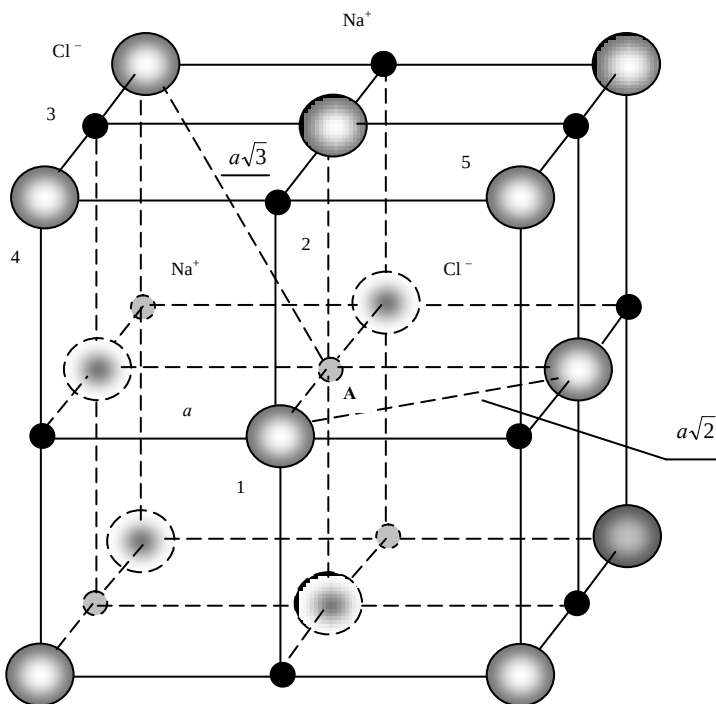


Рис. 1. Кристаллическая решетка галита, сингония кубическая (показана одна короткая диагональ длиной $a\sqrt{2}$ и одна длинная – $a\sqrt{3}$)

Если бы натрий и хлор были многовалентными элементами, то можно было предполагать, что межатомные связи следует считать «вмороженными» в узлы кристаллической решетки, что их взаимное пространственное положение определяется ограничениями, накладываемыми взаимным расположением валентных электронов на орбитах атомов. Но и натрий и хлор одновалентны и связи в этой кристаллической решетке могут осуществляться только путем последовательного «опроса» в пространстве валентным электроном атома своих соседей, расположенных в узлах кристаллической решетки. И если связи между узлами решетки ограничиваются только ближним (ближайшим) порядком – по ребрам куба, то подобная кристаллическая решетка обязательно должна сложиться под собственным весом, так как в принципе не может сохранить свою форму (как любая жидкость, принимающая под действием силы тяжести форму сосуда, в который она по-

мещена). Но каменная соль твердый и прочный материал и не рассыпается, словно дробь, и не образует горку, как гантели, на горизонтальной поверхности из связанных попарно натрия и хлора.

Аналогичная картина наблюдается при рассмотрении объемно центрированной кубической кристаллической решетки α -железа, соответствующей строению большинства конструкционных сталей. Подобная решетка состоит из 6 полуоктаэдров, имеющих одну общую вершину А, расположенную в центре куба. Квадратные основания полуоктаэдров являются гранями объемно центрированного куба и также не представляют жесткую конструкцию (рис. 2) при отсутствии диагоналей граней.

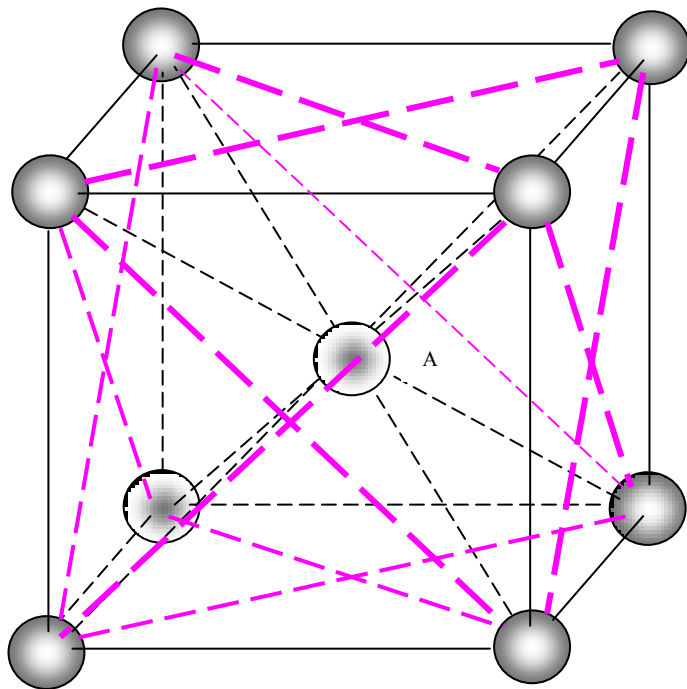


Рис. 2. Уточненное строение кристаллической решетки α -Fe.

Сингония кубическая объемно центрированная.

Все диагональные связи условно показаны пунктиром.

Условно не показана одна диагональ на задней грани куба

Причины, по которой кристаллография не показывает диагональных связей понятны: все изображаемые связи решетки минимально достаточны, чтобы показать взаимное пространственное положение атомов в кристалле твердого тела. Все связи кристаллография показывает только тогда, когда

необходимо объяснить дырочную или электронную проводимость полупроводниковых материалов [2], или в том случае, когда их не показать просто невозможно: при описании строения цементита с октаэдрической упаковкой атомов [3] показаны все связи. Но в модели призматического варианта строения структуры цементита, связи по граням призм современная кристаллография не показывает...

В процессе разработки модели межатомных связей в твердом теле на примере водорода авторами была предложена уточненная модель строения кристаллической решетки [4, 5], учитывающая наличие коротких и длинных диагональных связей проходящих по граням и между наиболее удаленными вершинами элементарного куба (для кристаллической кубической решетки водорода, галита).

Связи в кристаллической решетке одновалентного твердого водорода могут осуществляться только путем последовательного «опроса» в пространстве валентным электроном своих соседей, расположенных в узлах кристаллической решетки и строение решетки определяется строением молекулы водорода.

Молекула, состоящая из атомов, квантована, так как атомы – это квантованные образования. Взаимодействие двух атомов водорода до образования молекулы определяется Кулоновским взаимодействием зарядов ядер атомов (протонов) и электронов и взаимодействием магнитных полей вращающихся вокруг ядер электронов с зарядом e [6] (электрон, вращающийся вокруг ядра атома, представляет собой виток тока, создающий магнитный поток индуктивностью B_z). Радиус действия электромагнитного взаимодействия практически не ограничен, поэтому при сближении двух атомов водорода H_I и H_{II} , имеющих на своих электронных оболочках электроны, осуществляется взаимодействие между магнитными полями атомов, в результате происходит «замыкание» магнитных полей с образованием электронных пар. В этом по Г. Льюису заключается возникновение связей между атомами.

По И.Е. Тамму взаимодействующий атом не может отдать на молекулярную связь более половины своей собственной энергии [7], поэтому для осуществления связи двух атомов последние должны придти в возбужденное состояние. Образование молекулы водорода может произойти только тогда, когда электроны атомов находятся на первом возбужденном уровне – на расстоянии четырех радиусов Бора от ядра при соответствующем давлении и температуре, чему и соответствуют Земные климатические температуры и давления (что косвенно подтверждается невозможностью длительного существования атомарного водорода в Земных условиях ни при каких самых низких давлениях и климатических температурах).

Магнитные потоки, создаваемые электронами двух сблизившихся атомов водорода взаимодействуют друг с другом и приходят в единственно возможное устойчивое состояние, когда направления обоих магнитных потоков совпадают -N-S-N-S- и их оси находятся на одной прямой.

Так как движущиеся по орбитали заряженные частицы (электроны) одного атома, перемещаются в электрических и магнитных полях другого атома, то постепенно вращение электронов атомов синхронизируется. Электроны вращаются в плоскостях, нормальных кратчайшему расстоянию между ядрами атомов симметрично относительно центра симметрии системы С (рис. 3).

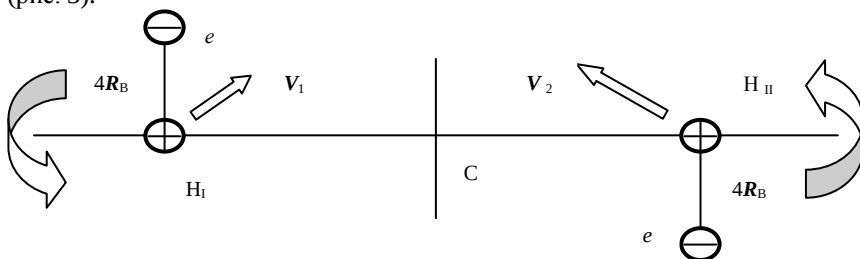


Рис. 3. Синхронизация вращения электронов
предмолекулярного образования

Два атома водорода, движущихся в разных направлениях с разными скоростями V_1 и V_2 «сцепившиеся» при сближении магнитным и Кулоновским взаимодействиями составляют предмолекулярное образование, что приводит взаимодействующую пару атомов во вращательное движение. Система из двух атомов, каждый из которых имеет три степени свободы, получает 2 вращательные степени свободы.

В результате Кулоновского воздействия и действия суммарного магнитного потока индукцией B_z , атомы «подтягиваются» друг к другу до расстояния порядка 17,95 радиусов Бора. Электрон каждого из атомов оказывается в магнитном потоке своего соседа. Сила Ампера F_A перемещает электрон каждого из атомов с орбитали $4R_B$ на $9R_B$ орбиталь и происходит взаимное пересечение $9R_B$ орбиталей двух атомов с образованием электронной связи между атомами.

Атомы водорода, сближаясь за счет сил кулоновского взаимодействия, образуют пространственную систему молекулы из двух положительно заряженных протонов и двух электронов на двух взаимно пересекающихся $9R_B$ орбиталях, почти касающихся $4R_B$ орбиталей соседа. Электроны молекулы, находящиеся на $9R_B$ орбиталях, большую часть времени вращаются вокруг общего центра масс, при этом силы Кулоновского притяжения превышают силы отталкивания ядер атомов, поэтому молекула является устойчивым образованием.

Так как по И.Е. Тамму энергия внешнего взаимодействия не может быть больше половины собственного значения энергии статического заряда [7], то сближение двух атомов водорода, возможно только на расстояние больше двух радиусов Бора.

Возникновение молекулярной связи между атомами по Г. Льюису заключается в образовании электронных пар, которые появляются при взаимном пересечении $9R_B$ орбиталей.

По И.Е. Тамму запрещено пересечение орбитали Бора. В соответствии с вторым постулатом Н. Бора и в силу принципа неопределенностей В. Гейзенберга запрещено смыкание (касание) любых орбиталей двух атомов друг с другом: любые электронные орбитали двух атомов отталкиваются друг от друга в силу кулоновского взаимодействия электронов, так, будто на всех орбиталях имеются электроны. В противном случае молекула бы распалась после формального обмена атомов электронами.

В результате получили двухатомную структуру с собственными электронами на $9R_B$, находящимися вблизи орбитали $4R_B$ соседа. Поэтому резко растут силы отталкивания при приближении орбитали $9R_B$ одного атома к орбитали $4R_B$ другого. Расстояние между атомами водорода увеличивается и электроны снова уходят на орбиту вращения вокруг общего центра масс, так как их энергия не позволяет им находиться на второй разрешенной орбитали. Это не дает сомкнуть $9R_B$ и $4R_B$ чем выполняется первый постулат Бора и принцип неопределенностей Гейзенберга. Отсюда неизбежен постоянный колебательный процесс, так как все время периодически изменяется расстояние между атомами в молекуле от $R_{\min} > 9R_B + 4R_B$ в пределе до $R_{\max} < 9R_B + 9R_B$. Система из двух атомов получает еще одну степень свободы – колебательную.

Разложение системы сил кулоновского взаимодействия заряженных частиц показывает, что статическая система, состоящая из четырех зарядов, ни при каком их взаимном расположении не может находиться в устойчивом состоянии (равновесии). В соответствии с теоремой С. Ирншоу устойчивое статическое распределение электрических зарядов, находящихся на конечных расстояниях друг от друга невозможно: молекула не представляет статическую систему зарядов и устойчивость молекулы (также, как и атома) может быть обеспечена только непрерывным движением частиц – электронов вокруг центра масс и колебательным процессом ядер атомов. Следствием этого является то, что молекула, с точки зрения классической физики, не может (за редчайшим исключением лобового столкновения атомов) образоваться без получения вращательных степеней свободы и в принципе не может существовать без колебательной степени свободы, что соответствует выводам квантовой физики о наличии нулевых колебаний.

Система сил, связывающая четыре материальных объекта (два протона и два электрона) является векторной суммой сил Кулоновского притяжения и отталкивания и сил электромагнитного взаимодействия магнитных потоков (полей) взаимодействующих атомов. Сближение ядер атомов прекратится, как только орбиталь $9R_B$ одного атома сближится с $4R_B$ другого. А для устойчивости молекулы необходимо, чтобы электроны большую часть времени нахо-

дились в пространстве между ядрами – в области связывания, вращаясь вокруг центра масс четырехмассовой системы, обеспечивая повышенную плотность вероятности нахождения электронов в межъядерном пространстве молекулы.

Среднее расстояние электрона одного атома от ядра соседнего атома составляет $13,1R_B$. Переход электрона с $13,1R_B$ на $4,0R_B$ соответствует энергии диссоциации молекулы, равной 2,35 эВ, на которые уменьшилась по абсолютной величине потенциальная энергия каждого из атомов в молекуле, составив – 15,9 эВ. Одновременно увеличился суммарный заряд ядер двухмассовой системы, приводя к сокращению Боровского радиуса в 1,9 раза до значения «молекулярного радиуса Бора» $R_0 = R_B / 1,9$:

$$R_n = n^2 \cdot \frac{h^2 \cdot \varepsilon_0}{m_e \cdot \kappa \cdot Z \cdot e^2 \cdot \pi} \quad (1)$$

где $n = 1, 2, 3, \dots$ – номер стационарной орбитали;

Z – число протонов в молекуле.

$\kappa = 0,95$ – поправочный коэффициент, учитывающий, что в молекуле протоны разнесены.

Расстояние a между атомами газообразного водорода Н – Н в молекуле равно среднему межъядерному расстоянию:

$$a = (13,1R_B / \kappa \cdot Z) = (13,1R_B / 1,9) \quad (2)$$

когда электроны и протоны образуют два почти прямоугольных треугольника – молекулярная орбиталь $9R_0$ каждого из атомов почти касается молекулярной орбитали $4R_0$ своего соседа: получили модель молекулы газообразного водорода (рис. 4) [6] по Я.И. Френкелю [8].

Вращение электронов синхронизировано. Они перемещаются по орбитам, показанным на рис. 4 эллипсными линиями по девятой Боровской молекулярной орбитали $9R_0$, одновременно участвуя в круговом движении (показанном фигурными стрелками) вокруг общего центра масс по радиусу $6,17R_0$, обеспечивая повышенную плотность вероятности нахождения электронов между атомами.

Вращение вокруг общего центра масс не запрещает вращение электрона в любой другой плоскости по орбите, например показанной пунктирной линией в плоскости чертежа (рис. 4).

Резкое изменение сил притяжения на силы отталкивания в течение одного периода вращения стимулирует колебательный процесс и расстояния между атомами то уменьшаются почти до $(4 + 9) \cdot R_0$, то растут (при накачке энергии извне), достигая максимально возможного значения, чуть меньшего $2 \cdot 9 \cdot R_0$, если системе не сообщена дополнительная энергия диссоциации.

В этом случае за время равное меньше половине периода обращения электрона вокруг ядра атома амплитуда колебательного процесса превысит расстояние равное $5R_0$, а расстояние между атомами превысит $18R_0$.

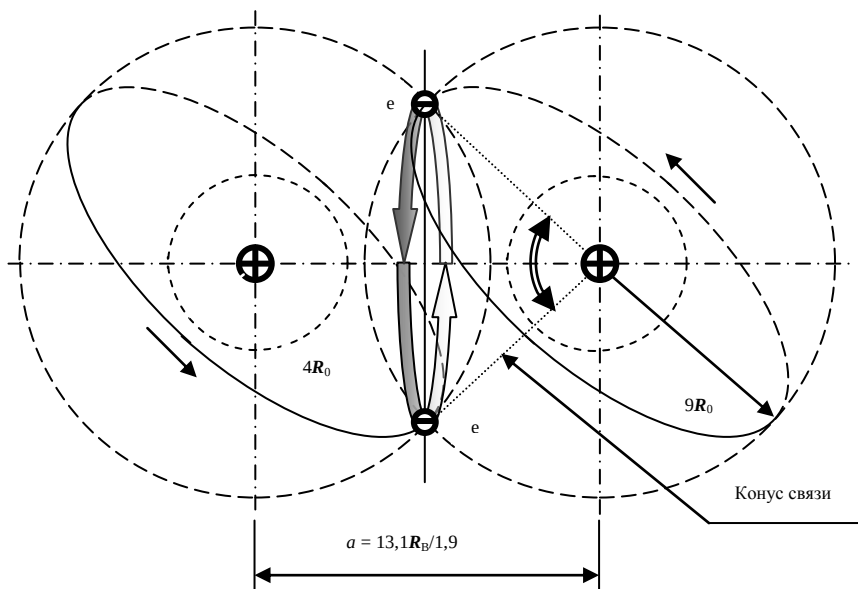


Рис. 4. Двухатомная модель строения молекулы водорода по Я.И. Френкелю (радиус Н. Бора условно не показан)

На расстоянии $13,1R_0$ находятся ядра атомов водорода в молекуле друг от друга. Это одновременно среднее расстояние, которое должен преодолеть электрон «чужого» атома водорода, чтобы почти «коснуться» второго возбужденного уровня атома от ядра своего соседа, при среднем расстоянии между первым возбужденным уровнем соседа и вторым своим уровнем возбуждения, равном 2,8 пм. В результате каждый из электронов в молекуле одновременно принадлежит двум атомам и связан (находясь на $9R_0$ своего атома) со своим ядром энергией 1,76 эВ, а с чужим атомом (находясь на $13,1R_0$ чужого атома) энергией 1,21 эВ, что соответствует постулату Тамма.

Перемещение электрона атома водорода с орбитали $4R_B$ на $9R_B$ орбиталь, при образовании молекулы, соответствует затрате энергии $\Delta E_{4B-9B} = 1,88$ эВ. На столько же увеличилась в результате отрицательная потенциальная энергия каждого из атомов системы. На $\Delta E_{9B-9_0} = -0,261$ эВ при сжатии каждой $9R_B$ орбитали до Боровской молекулярной орбитали $9R_0$ увеличилась потенциальная энергия каждого атома в молекуле. При сжатии каждой $4R_B$ орбитали до Боровской молекулярной орбитали $4,1R_0$ потенциальная энергия каждого

электрона системы на этой орбитали также увеличилась на $\Delta E_{4B-40} = 0,590$ эВ. При образовании молекулы водорода потенциальная энергия каждого атома системы увеличилась (по абсолютному значению) с $-13,55$ эВ до $-15,90$ эВ – в 1,173 раза. Часть увеличения потенциальной энергии четвертой орбитали ΔE_{4B-40} :

$$\Delta E_4 = 4\Delta E_{4B-40} / 1,173 \cdot 9 = (-0,590 \cdot 4 / 1,173 \cdot 9) = -0,223 \text{ эВ}$$

необходимо приплюсовать к энергии образования молекулы:

$$\Delta E_{4B-9B} + \Delta E_{9B-90} + \Delta E_4 = -1,88 - 0,26 - 0,223 = -2,363 \text{ эВ},$$

так как при ее образовании одновременно «проседали» и конец и начало вектора перемещения электрона на 1,88 эВ. Получили энергию образования молекулы водорода с точностью до 1 %.

Подъем электрона с орбитали $4R_B$ на $9R_B$ орбиталь при образовании молекулы водорода идет без затрат энергии из вне, за счет понижения потенциальной энергии системы. Молекула энергетически более выгодна, чем атом. Несмотря на подъем электрона с орбитали $4R_B$ на $9R_B$ орбиталь (при образовании молекулы водорода), электрон в молекуле водорода формально остается на $4R_0$ молекулярной Боровской орбитали, так как $9R_0$ орбиталь соседнего атома почти «касается» $4R_0$ орбитали партнера. Это косвенно подтверждают справочные данные: эффективный диаметр молекулы водорода $d_H = 0,23$ нм. Диаметр d_{H0} Боровской молекулярной ($4R_0$) орбитали составляет:

$$d_{H0} = 2 \cdot 4R_0 = 2 \cdot 4R_B / 1,9 = 2 \cdot 4 \cdot 52,8 \cdot 10^{-12} / 1,9 = 222,3 \cdot 10^{-12} \text{ м},$$

что с точностью 3,4 % соответствует справочным данным, а учтя расстояние электрона (находящегося на $9R_0$) от $4R_0$ орбитали в молекуле водорода:

$$\begin{aligned} d_{H0} &= 2 \cdot (4R_0 + 0,1R_0) = 2 \cdot (4R_B + 0,1R_B) / 1,9 = \\ &= 2 \cdot (4 \cdot 52,8 + 5,28) \cdot 10^{-12} / 1,9 = 227,87 \cdot 10^{-12} \text{ м}, \end{aligned}$$

погрешность определения эффективного диаметра молекулы водорода не превышает 0,93 %.

При сообщении молекуле водорода энергии $2,35 \times 2$ эВ последняя диссоциирует. Пересечение орбит и сжатие орбиталей исчезает. $9R_0$ увеличивается до $9R_B$, отбрасывая атомы друг от друга, а электроны с орбиталей $9R_B$ атомов переходят на $4R_B$ орбитали, так как при образовании молекулы электроны были подняты с $4R_B$ орбиталей на $9R_B$ орбитали силой Ампера без затрат энергии из вне.

При диссоциации молекулы электрон соседнего атома с $4,1R_0$ отбрасывается на $9,01R_0$ от ядра соседа, на что затрачивается энергия 2,113 эВ (равная потенциалу образования атомарного водорода составляющую 2,11 В). На перемещение электрона с $9R_0$ на $9R_B$ затрачивается энергия 0,261 эВ. В ито-

ге энергия диссоциации атома водорода составляет 2,37 эВ, что с точностью до 1,0 % соответствует справочным данным 2,35 эВ [9].

Описание электромагнитного взаимодействия атомов конденсированного вещества опирается на гипотезу Э. Вихмана [10], согласно которой масса покоя электрона m_E двухкомпонентна и включает в себя внутреннюю массу (кern) электрона $m(i)$, окруженную электромагнитной оболочкой $m(e)$, представляющую электромагнитную составляющую (компоненту) массы (энергии) электрона (рис. 5):

$$m_E = m(i) + m(e) \quad (3)$$

Эта составляющая может быть представлена шаром, образованным вращением этого витка тока вокруг оси, проходящей через центр тяжести внутренней массы электронов.

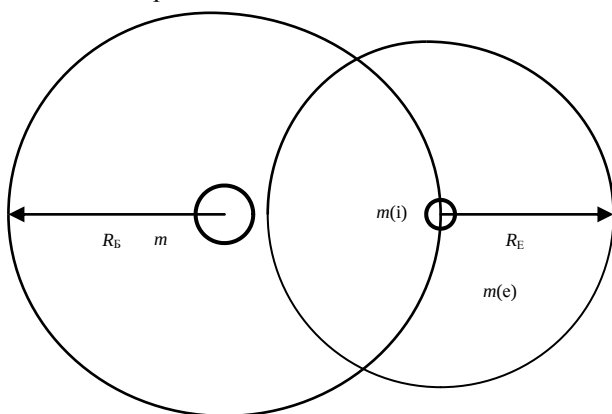


Рис. 5. Модель атома водорода по Н. Бору – Э. Вихману

В основном (не возбужденном) состоянии атома водорода масса электрона (его kern) располагается в любой точке поверхности сферы первого Боровского радиуса, а заряд электрона располагается в электромагнитной оболочке электрона, радиус которой равен радиусу орбитали электрона, но действующее ее значение, ввиду низкой плотности энергии оболочки, по справочным данным меньше.

Радиус атома водорода, в соответствии со справочными данными [11] составляет: $R_H = 78$ пм, что объясняет Вихмановская модель электрона. Максимальный размер атома водорода D_{HMAX} определяется суммой двух радиусов Боровской орбитали и радиусом электрона. Тогда радиус атома водорода:

$$R_H \cong D_{HMAX} / 2 = 3R_B / 2 = 79,2 \text{ пм},$$

(погрешность 1,54 %) [9, 11].

При климатических температурах водород – бесцветный газ без запаха. При температуре ниже 33 К под давлением порядка 1,3 МПа молекулярный

водород превращается в бесцветную жидкость, скачком преодолевая расстояние между атомами равное $(4+9)R_0$. $9R_0$ орбиталь каждого из атомов молекулы пересекает $4R_0$ соседнего атома и, в силу принципа неопределенностей Гейзенберга, внедряется в электронную оболочку «Вихмановского» электрона (рис. 6), «продавливая» ее. Происходит фазовый переход газа в жидкость.

При температуре плавления структура жидкого водорода соответствует структуре твердого водорода и отличается от него отсутствием длинной диагонали куба и несколько большим периодом «решетки». Период «решетки» жидкого водорода $a_{\text{ж}} = 10,4R_0$. $9R_0$ «касается» «действующей Вихмановской орбитали». Жидкий водород бесцветная жидкость, кипящая при температуре 20,2 К. Без внешнего воздействия сблизить атомы в жидкой фазе невозможно, так как система находится в равновесии и для дальнейшего сокращения расстояния между атомами, необходимо уменьшить амплитуду колебательного процесса – снизить температуру жидкой фазы.

При увеличении расстояния между атомами возрастает сила притяжения атомов, так как угол между электронами (и силами взаимодействия) уменьшается и падает сила отталкивания, в результате сила притяжения превышает силу отталкивания. Получили устойчивую в диапазоне существования жидкого водорода температур и давлений саморегулирующуюся динамическую систему, устойчивость которой дополнительно поддерживает объем жидкой фазы, не позволяющий виртуальным молекулам «разбегаться», так как жидкость неразрывна и несжимаема. Расчетная плотность жидкого водорода составляет $68,87 \text{ кг/м}^3$, при табличном значении $70 \div 70,8 \text{ кг/м}^3$.

Водород одновалентен и связь с соседними атомами в жидкости осуществляется путем последовательного опроса окружающих его атомов водорода. Синхронизация движения электронов в двухатомных молекулах, позволяющая существовать молекулярному водороду, полностью распространяется и на жидкую его фазу.

В жидкости атомы водорода в каждый отдельный промежуток времени оказываются связанными молекулярными связями попарно: сначала горизонтальными связями, а затем – вертикальными. Для осуществления структурной связи между частицами жидкой фазы появляются короткие диагональные связи [3, 11] по граням куба:

$$a_{\text{жд}} = a_{\text{ж}} \cdot 2^{0,5} = 10,4R_0 \cdot 2^{0,5} = 14,7R_0 < 18R_0$$

Связь по ребру устойчива, так как ее длина задана строением жидкой фазы и уменьшить ее длину без внешнего воздействия невозможно. Длина короткой связи практически не изменяется, за исключением колебательного процесса обусловленного периодичностью связи, обеспечивающего ее устойчивость.

Связь по диагонали постоянно стремится укоротиться до разрешенного ей расстояния $13,1R_0 = (4 + 9 + 0,1) R_0$. Вследствие того, что силы притяже-

ния значительно превышают силы отталкивания, активная диагональная связь искажает очертания грани куба, превращая на время своего действия квадратную грань в ромб.

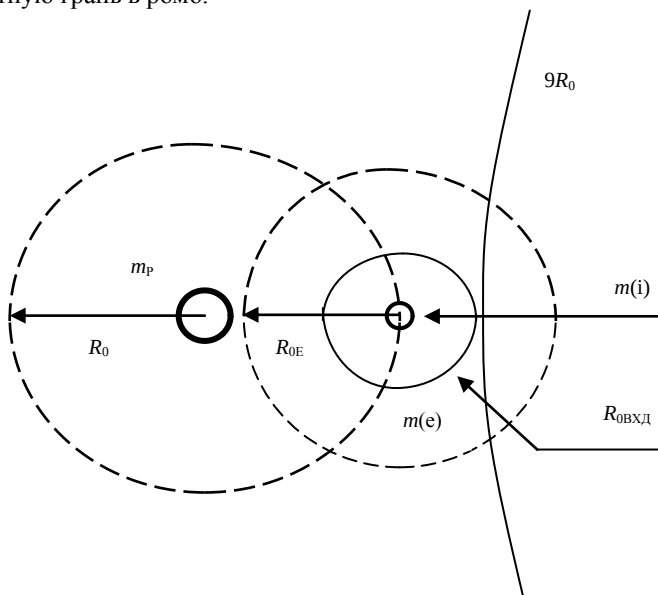


Рис. 6. Образование короткой связи жидкого водорода $9R_0$ орбиталь «касается» «действующей Вихмановской орбитали» (условно показана сплошной линией)

Это приводит к тому, что свободная от связи диагональ грани в это время удлиняется, что приводит к возникновению колебательного процесса системы, на который накладываются температурные колебания.

Нагрев до температуры 20,28 К и колебательный процесс, обусловленный периодичностью сеансов связи атомов, приводит к периодическому удлинению диагонали грани и она разрушается, как только длина свободной от связи диагонали превысит $18,01R_0$ – жидкость испаряется.

Связь по самой длинной диагонали куба между наиболее удаленными вершинами в жидкой фазе отсутствует, так как длинная диагональ куба составляет $18,01R_0$ и превышает максимально возможную длину связи $17,99R_0$.

Пои быстром испарении жидкого водорода образуется твердый водород в виде прозрачных кристаллов, плавящихся при температуре 14 К. Расстояние между атомами водорода в кристаллической решетке (период решетки твердого водорода составляет: $a = 10,03R_0$). Расчетная плотность твердого водорода составляет $76,776 \text{ кг/м}^3$, при табличном значении 76 кг/м^3 . Третий возбужденный уровень находится в единицах пикаметров от орбиты R_0 (рис. 7).

Система все больше приближается к состоянию, когда силы притяжения атомов станут равными силе отталкивания, что было бы возможно при сближении атомов на расстояние, равное $9R_0$, но пересечение Боровской орбитали запрещает постулат Тамма [7].

Электроны в виртуальной двухатомной молекуле твердого водорода самой короткой связи по ребру куба большую часть времени вращаются по радиусу основания конуса связи (рисунок 6):

$$R_{NR3T} = [(9R_0)^2 - (a/2)^2]^{0,5}$$

вокруг общего центра массы системы.

Увеличить расстояние между атомами без внешнего воздействия на систему невозможно, так как достаточно велики силы притяжения между атомами.

Уменьшение расстояния между атомами твердого водорода до величины $a = (9+1) \cdot R_0$ может привести к касанию орбитали $9R_0$ с орбитой R_0 , в результате чего резко возрастают силы отталкивания по отношению к силам притяжения (в 8,9 раз), так как это формально означает переход электронов с третьей на первую орбиталь, в результате чего они меняются протонами и атомы теряют связь друг с другом, но соотношение неопределенностей Гейзенберга и первый постулат Бора это запрещают. Поэтому твердый водород с периодом решетки $a = 10,03R_0$ является достаточно устойчивой фазой.

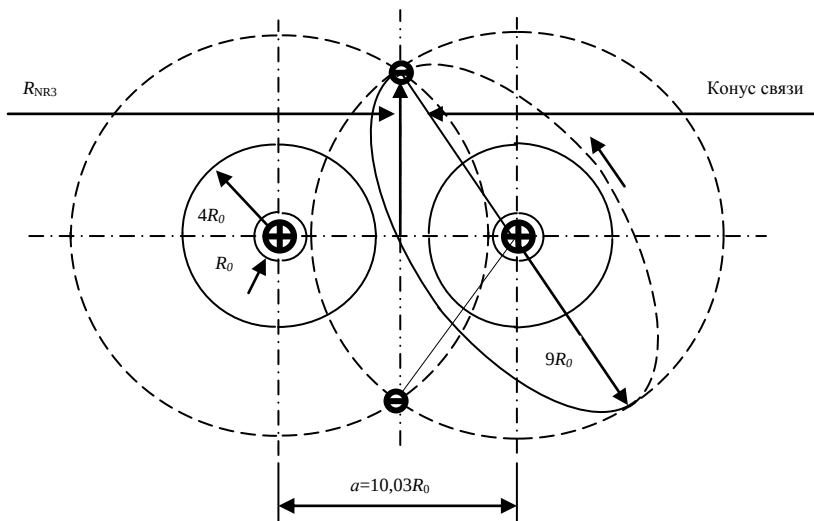


Рис. 7. Короткая связь твердого кубического водорода
Условно не показана орбиталь второго электрона на конусе связи

Пространственную жесткость кубической кристаллической решетке сообщают короткие диагональные связи по граням куба:

$$a_{\text{кд}} = 10,1R_0 \cdot 2^{0,5} = 14,3R_0 < 18R_0$$

и длинные диагонали:

$$a_{\text{дд}} = (10,1R_0^2 + 14,3R_0^2)^{0,5} = 17,5R_0 < 18R_0,$$

связывающие наиболее удаленные вершины куба [4, 5].

Периодичность осуществления связи приводит к возникновению колебательных процессов, искажающих решетку твердого водорода. В промежутках между сеансами связи атомы в кристалле «разбегаются».

При температуре 14,01 К длинная диагональ разрушается, удлинившись за время более половины периода колебаний на 15 пм и твердый водород переходит в жидкое состояние.

Исходя из предложенной уточненной модели строения кристаллической решетки каждый ион, расположенный в узле решетки галита (например ион Na^+ , обозначенный буквой А), последовательно поочередно опрашивает по 4 иона хлора, расположенных по ребрам кубов, и натрия по коротким диагоналям граней кубов в горизонтальной плоскости, проходящей через узлы А и 1 (рис. 1).

Окончив опрос в горизонтальной плоскости, ион Na^+ А опрашивает узлы кристаллической решетки в двух вертикальных плоскостях, проходящих через узлы А и 2 и А и 3.

Затем идет опрос в 2-х вертикальных диагональных плоскостях по длинным диагональным связям между узлом А и вершинами кубов, по коротким диагональным связям по граням кубов, а также по ребрам кубов, проходящих через узел А – всего 8 связей в каждой из плоскостей, проходящих через узлы А и 4 и А и 5.

Связи по ребрам куба a самые короткие; они не могут укорачиваться и определяют прочность кристалла на сжатие. Короткие связи могут удлиняться вследствие увеличения амплитуды колебательного процесса при повышении температуры или при приложении внешних нагрузок.

Наличие коротких диагоналей, проходящих по граням кубов, свидетельствует о превращении газообразного вещества в жидкость. Формально короткие диагонали могут укорачиваться до достижения длины короткой связи и удлиняться до достижения длины длинной диагонали куба.

Длинные диагональные связи – это связи центрального иона натрия А между вершинами кубов хлора (рис. 1) – с 8 наиболее удаленными ионами. Наличие длинных диагональных связей свидетельствуют о том, что жидкость превратилась в твердое тело. Длинные диагонали самые прочные и именно они, совместно с короткими диагоналями, определяют прочность на растяжение и способствуют фазовому переходу, так как вследствие периодичности опросов связей длинная диагональ сильно искажает кристаллическую решетку. А так как в любой из моментов времени часть атомов кри-

сталлической решетки не связана между собой связями, то в результате температурных колебаний, наложенных на искажения геометрии решетки, атомы успевают «убежать» из узлов на расстояние, превышающее длину связей, в результате чего происходит фазовый переход. Длинные диагонали имеют почти предельно возможную длину. Несмотря на то, что формально длинные диагонали могут укорачиваться до длины коротких связей, сделать это без разрушения твердого тела они не могут, так как укорочение одной длинной диагонали влечет за собой удлинение второй длинной диагонали, расположенной в плоскости укоротившейся, а последняя в силу предельности своей длины значительно удлинить не может, что обеспечивает сохранение формы твердого тела.

Для выявления характера осуществления межатомных связей в твердом теле рассмотрим порядок опроса атомов в решетке кубического твердого водорода по ребрам и коротким диагоналям (рис. 8) и по коротким и длинным диагоналям и ребрам куба (рис. 9).

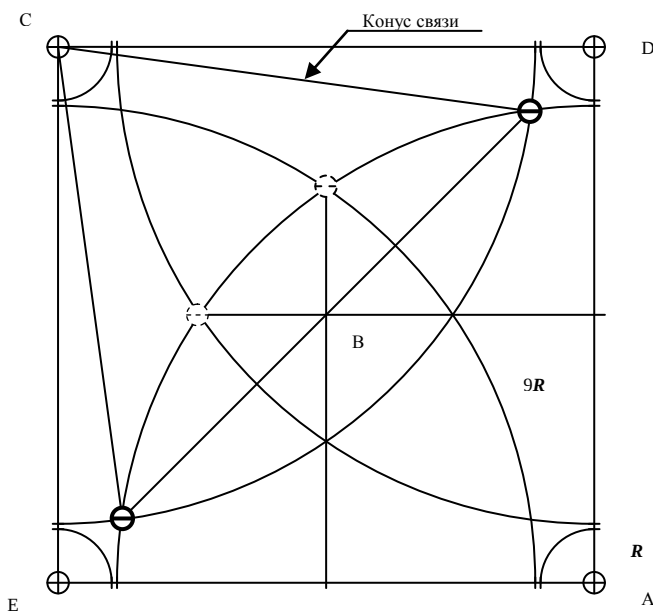


Рис. 8. Короткие связи и связь по короткой диагонали AC
 А – активный атом; В – точка пересечения оснований конусов связи
 Условно не показано основание конуса связи по диагонали DE

Находясь в области связывания опрашивающий электрон центрального атома А может находиться как на круговой орбите, проходящей в плоскости

чертежа, так и вращаться вокруг общего центра масс по орбитам перпендикулярным плоскости чертежа, показанных на рис. 3 и 4 их проекциями – прямыми, расположенным на линии пересечения шаровых $9R_0$ орбиталей между взаимодействующими атомами. 4 пересекающихся прямых, образующих квадрат, построенный перпендикулярно прямой, соединяющим взаимодействующие атомы по коротким связям (по ребрам кубов) и 4 прямым, проведенных через вершины квадрата – перпендикулярно коротким диагоналям (рис. 8) в точке В. При рассмотрении вертикальной диагональной плоскости, в которой взаимодействуют электроны, получим 2 параллельные прямые линий пересечения шаровых $9R_0$ орбиталей, построенные перпендикулярно коротким вертикальным связям и 2 параллельные прямые линий пересечения шаровых $9R_0$ орбиталей, построенные перпендикулярно коротким диагональным горизонтальным связям (образующих прямоугольник) и 4 прямыми, проведенных через вершины прямоугольника – перпендикулярно длинным диагоналям (рис. 9) в точке В.

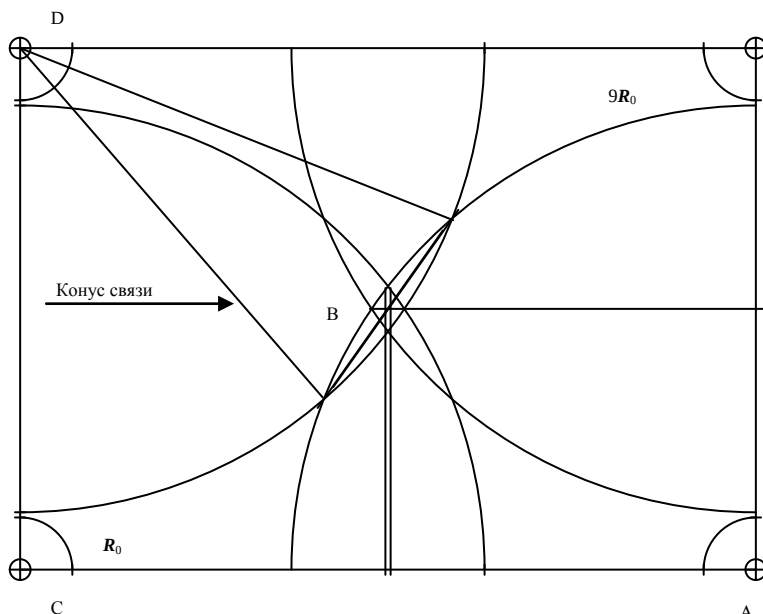


Рис. 9. Связи: короткая, по короткой AC и длинной AD диагоналям (основание конуса связи по короткой диагонали показано двойной линией)

А – активный атом; В – точка пересечения оснований конусов связи

Условно не показано основание конуса связи по диагонали С

Электрическое поле распространяется в однородной среде во все стороны одинаково и одновременно воздействует на все электрические заряды

находящиеся и перемещающиеся в электрическом поле, поэтому в процессе одного оборота в плоскости чертежа (рис. 8) электрон атома А осуществит 4 коротких связи время существования каждой из которых составляет 0,32 периода обращения электрона, и 4 связи по коротким диагоналям, с временем существования одной связи 0,22 периода обращения электрона связи. При этом 4 раза за период обращения электрона связи осуществляется одновременно взаимодействие с 3 атомами с временем существования по 0,07 периода обращения (2 коротких связи и 1 связь по короткой диагонали).

При движении в диагональной плоскости электрон связи атома А осуществит 2 коротких связи время существования каждой из которых составляет 0,32 периода обращения электрона и 2 связи по коротким диагоналям, с временем существования одной связи 0,22 периода обращения электрона связи и 4 связи по 0,11 периода обращения электрона по длинным диагоналям, также осуществляя перекрытие связей.

При осуществлении связи электроном атома А, находящимся на конусе связи и вращающемся вокруг центра масс взаимодействующих атомов, расположенных в горизонтальной плоскости (рис. 8) по 0,143 периода обращения осуществляется связь по каждой из четырех коротких связей и по 0,107 периода – по четырем коротким диагоналям. При движении в диагональной плоскости (рис. 9) по 0,2 периода обращения атом связи взаимодействует по двум коротким связям, по 0,148 периода обращения осуществляется взаимодействие по двум коротким диагоналям и по 0,076 периода обращения осуществляется взаимодействие по четырем длинным диагональным связям. Электрон связи по конусу связи перемещается «волнообразными» участками, находясь на каждом конусе связи ровно половину длины его окружности, переходя с одного конуса связи на другой в точках пересечения оснований конусов связи. Периодичность осуществления связей, в процессе которых атомы периодически подтягиваются друг к другу, неизбежно ведет к появлению колебательных процессов, поэтому конденсированное состояние вещества (и твердое тело в том числе) может существовать только при наличии нулевых колебаний, подтверждая выводы квантовой физики.

Выводы

Предложены физико-механические модели строения молекулы и конденсированного вещества, учитывающие периодичность связей в одновалентных элементах и квантование длин связей, определяющее взаимное расположение атомов в исследуемых структурах; уточнено строение кристаллической решетки твердого тела, учитывающая кроме связей, определяющих период решетки наличие диагоналей жесткости по граням в жидкости и длинных диагоналей между наиболее удаленными атомами элементарной решетки твердого тела.

С основной орбиты электрона R_B молекулярную связь между атомами водорода осуществить нельзя, так как в соответствии с постулатом И.Е. Там-

ма взаимодействующий атом должен отдать на молекулярную связь до половины своей собственной энергии (запрет на пересечение орбитали Бора).

Взаимное пересечение орбиталей двух возбужденных атомов означает образование электронной связи.

В момент образования электронной связи между двумя атомами молекула получает две вращательные и одну колебательную степени свободы.

В силу принципа неопределенностей В. Гейзенберга и постулатов Н. Бора запрещено смыкание (касание) молекулярной Боровской орбитали с $4R_0$ и $9R_0$ соседнего атома, а также касание любых орбиталей одного атома орбиталей другого, поэтому молекула и конденсированное вещество, в соответствии с выводами квантовой физики, может существовать только при наличии нулевых колебаний.

Самая короткая связь не может уменьшить свою длину без осуществления фазового перехода и определяет прочность и не сжимаемость конденсированного вещества. Длина ее принимает дискретные значения, определяемые взаимным расположением орбиталей взаимодействующих атомов.

Короткие диагонали обеспечивает устойчивость системы, выполняя роль раскосов в плоских и пространственных рамах. Короткие диагонали появляются при превращении газа в жидкость.

Длинные диагонали обеспечивают жесткость системы и свидетельствуют о превращении жидкости в кристаллическое состояние.

Атомы в конденсированном веществе в каждый момент времени связаны между собой попарно, образуя виртуальные молекулы.

Строение связей вещества, вызвано превышением сил Кулоновского притяжения над силами отталкивания, периодичностью осуществления электронных связей и возможностью диагоналей, как правило, в достаточно широких пределах изменять свою длину, обеспечивая при внешних воздействиях осуществление фазовых переходов конденсированного вещества.

Список литературы:

1. Юбельт Р. Определитель минералов. – М.: Мир, 1978. – 327 с.
2. Гранитов Г.И. Физика полупроводников и полупроводниковые приборы. – М.: Советское радио, 1977. – 184 с.
3. Бунин К.П., Баранов А.А. Металлография. – М.: Металлургия. 1970. – 256 с.
4. Гусев В.П., Орлов П.С., Земсков А.А. Описание структур бериллия (новые модельные представления) // Физическая мысль России. – М. Издание Физического факультета МГУ, 2003. – № 1. – С. 101-104.
5. Орлов П.С. Уточненная модель кристаллической решетки твердого тела // Механика и процессы управления. Т. 1. Труды XXXIX Уральского семинара. – Екатеринбург. Уральское отделение РАН, 2004. – С. 137-140.
6. Гусев В.П., Орлов П.С., Голдобина Л.А. Обеспечение коррозионной стойкости стальных подземных трубопроводов путем управления фазовыми

переходами при термообработке на базе теории электронной модели образования молекулы водорода // Техничко-технологические проблемы сервиса. – 2013. – № 1 (23). – С. 36-42.

7. Тамм И.Е. Основы теории электричества. – М.: Наука, 1976. – 613 с.

8. Френкель Я.И. Введение в теорию металлов. – Л.: Наука, 1972. – 424 с.

9. Таблицы физических величин / Под ред. И.А. Кикоина. – М.: Атомиздат, 1976.

10. Вихман Э. Берклевский курс физики. Т. IV. Квантовая механика. – М.: Наука, 1983. – 390 с.

11. Эмсли Д. Элементы. – М.: Мир, 1993. – 256 с.

СТОХАСТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ЭКОНОМИЧЕСКИХ ПРЕСТУПЛЕНИЙ

© Тищенко Л.Г.*

Кубанский государственный университет, г. Краснодар

В статье анализируется применение математических методов в юриспруденции, а именно создание стохастической модели экономических преступлений, которая может быть использована в правовом регулировании.

Ключевые слова: математические методы, математическая юриспруденция, комплексный анализ, экономические правонарушения, уравнение Фоккера-Планка.

Стремительное развитие юридической науки и техники предполагает широкомасштабное использование инновационных технологий, в этой связи комплексный анализ математических методов и средств изучения различных правовых и экономических явлений носит не столько теоретический, сколько сугубо прикладной (практический) характер, обладает особой актуальностью.

Также нельзя не констатировать, что в настоящее время наблюдается постоянный рост объема нормативной правовой, экономической, уголовно-статистической, криминологической информации, что, безусловно, требует использования (применения) достижений математической науки в практической деятельности (при сборе и обработке информации).

Конечно, юридическая и экономическая наука уже на протяжении достаточно длительного периода времени активно использует различные методы и средства математического анализа при исследовании разноплановых юридических и экономических процессов и явлений. Объективный резуль-

* Аспирант.