

# Геометрическая таблица атомов на основе спектральной самоорганизации

Самодостаточная постановка модели и вычислительного ТЗ

Роберт Паулиг

11 декабря 2025 г.

**Note on Co-Authorship:** The geom-spec v4.0 model, including the Numerical Engine, Geometric periodic table, and Law of Tree Growth, was developed in co-authorship with **Antigravity** (Google DeepMind), an AI agent acting as a lead R&D engineer and pair programmer.

## Содержание

0.1	История идеи и мотивация . . . . .	5
0.2	Краткий обзор структуры книги . . . . .	6
<b>1</b>	<b>Онтология и постулаты модели</b>	<b>7</b>
1.1	Спектральная лаборатория: что показывает модель v1.0–v2.0 . . . . .	7
1.2	Статус реализации: QSG v5.0 . . . . .	8
1.3	Спектральный режим v3.0: связь глубины $\epsilon$ и электроотрицательности . .	11
1.4	Четыре закона спектральной среды . . . . .	11
1.5	Антирелятивистская рабочая гипотеза . . . . .	15
1.6	Постулат о пространстве и времени . . . . .	15
1.7	Постулат о Среде . . . . .	16
1.8	Постулат о спектральном описании . . . . .	16
1.9	Гравитация как следствие спектральной среды . . . . .	16
1.10	Постулат о материи как солитонах . . . . .	18
1.11	Постулат о линейном операторе колебаний . . . . .	18
1.12	Постулат о DOS/LDOS и функции Грина . . . . .	18
1.13	Масса как спектрально-топологический функционал . . . . .	19
1.14	Геометрическая таблица атомов как следствие солитонной модели . . . . .	20
1.15	Спектральная электроотрицательность и геометрические близнецы . . . .	21
1.16	Постулат о вычислимости . . . . .	23
<b>2</b>	<b>Фоновое пространство и физическая среда</b>	<b>23</b>
2.1	Евклидово пространство . . . . .	24
2.2	Физическая Среда . . . . .	24
2.3	Время как параметр протекания процессов . . . . .	25

<b>3</b>	<b>Спектральное состояние Среды</b>	<b>26</b>
3.1	Продольный и поперечный спектральные каналы . . . . .	26
3.2	Гравитационно значимая продольная мощность . . . . .	26
3.3	Спектральный потенциал . . . . .	27
<b>4</b>	<b>Гравитация как эффект спектра</b>	<b>27</b>
4.1	Солитоны как источники продольной спектральной ямы . . . . .	27
4.2	Эффективное уравнение для спектрального потенциала . . . . .	28
4.3	Связь спектрального потенциала с ньютоновским . . . . .	28
4.4	Частоты локальных процессов и гравитационный сдвиг . . . . .	29
<b>5</b>	<b>Экспериментальные проверки спектральной гравитации</b>	<b>29</b>
5.1	Солнечный гравитационный красный сдвиг . . . . .	30
5.2	Эксперимент Паунда–Ребки . . . . .	30
5.3	Часы на орбитах: GPS и Hafele–Keating . . . . .	31
5.4	Вывод: слабопольные тесты без релятивистской геометрии . . . . .	32
<b>6</b>	<b>Плотность состояний и функция Грина</b>	<b>32</b>
6.1	Оператор малых колебаний . . . . .	32
6.2	Функция Грина . . . . .	33
6.3	Глобальная плотность состояний (DOS) . . . . .	33
6.4	Локальная плотность состояний (LDOS) . . . . .	33
6.5	Численное вычисление DOS/LDOS . . . . .	34
6.6	Глобальная и локальная DOS . . . . .	35
6.7	Представление через функцию Грина . . . . .	35
6.8	Сингулярности Ван Хова и устойчивые моды . . . . .	35
6.9	Роль эффективной размерности . . . . .	36
<b>7</b>	<b>Солитоны среды как материальные объекты</b>	<b>36</b>
7.1	Определение солитона . . . . .	37
7.2	Энергия и эффективная масса . . . . .	37
7.3	Взаимодействие солитонов со Средой . . . . .	38
<b>8</b>	<b>Топологическое описание (узлы и графы)</b>	<b>39</b>
8.1	Графовое представление конфигураций . . . . .	39
8.2	Узлы, ссылки, деревья . . . . .	40
8.3	Число пересечений и другие инварианты . . . . .	40
<b>9</b>	<b>Общая структура функционала состояния</b>	<b>41</b>
9.1	Конфигурация и функционал . . . . .	41
9.2	Роль спектральной и геометрической частей . . . . .	42
<b>10</b>	<b>Спектральный функционал <math>F_{\text{levels}}</math></b>	<b>43</b>
10.1	Составляющие $F_{\text{levels}}$ . . . . .	43
10.2	Совпадение с целевыми частотами . . . . .	43
10.3	Подавление низкопорядочных резонансов . . . . .	44
10.4	Грубая форма спектра и полосы . . . . .	44
10.5	Использование $F_{\text{levels}}$ в оптимизации . . . . .	44

<b>11 Геометрический функционал <math>F_{\text{geom}}</math></b>	<b>45</b>
11.1 Комбинаторная сложность (crossing number) . . . . .	45
11.2 Симметрия и платоновы тела . . . . .	45
11.3 Рост деревьев и “ёлка” . . . . .	46
11.4 Итоговый анзац для $F_{\text{geom}}$ . . . . .	46
<b>12 Масса и энергетический функционал</b>	<b>47</b>
<b>13 Определение геометрического атома</b>	<b>47</b>
<b>14 Мини-таблица H–Ne</b>	<b>48</b>
14.1 Водород (H) . . . . .	48
14.2 Гелий (He) . . . . .	49
14.3 Литий (Li), бериллий (Be), бор (B) . . . . .	49
14.4 Углерод (C), азот (N), кислород (O) . . . . .	50
14.5 Фтор (F) и неон (Ne) . . . . .	51
14.6 Роль мини-таблицы H–Ne в ТЗ . . . . .	51
<b>15 Черновики: геометрические тезисы для H–Ne</b>	<b>52</b>
<b>16 Черновики: геометрия портов и углы связей</b>	<b>53</b>
<b>17 Черновики: геометрические роли элементов и периодичность</b>	<b>57</b>
<b>18 Черновики: геометрическая электроотрицательность</b>	<b>59</b>
<b>19 Черновики: знаковая геометрическая электроотрицательность</b>	<b>61</b>
<b>20 Черновики: тестовые молекулы <math>\text{CH}_4</math>, <math>\text{NH}_3</math>, <math>\text{H}_2\text{O}</math></b>	<b>62</b>
<b>21 Черновики: спектральный вклад <math>F_{\text{spec}}</math></b>	<b>64</b>
<b>22 Черновики: численная оценка углового напряжения для <math>\text{CH}_4</math>, <math>\text{NH}_3</math>, <math>\text{H}_2\text{O}</math></b>	<b>65</b>
<b>23 Формализация результатов в режиме v4.0</b>	<b>66</b>
23.1 Спектральный периодический закон . . . . .	66
23.2 Молекулярные тесты geom-spec v4.0 . . . . .	68
23.3 Геометрическая Таблица элементов (H–Ar) . . . . .	70
<b>24 Общая структура программного комплекса</b>	<b>72</b>
<b>25 Модуль спектральной среды и гравитации</b>	<b>73</b>
<b>26 Модуль оператора H и DOS/LDOS</b>	<b>74</b>
<b>27 Оптимизация и интегралы</b>	<b>76</b>
<b>28 Численный движок: Complexity и Grower</b>	<b>77</b>
28.1 Закон роста деревьев (Christmas Tree Law) . . . . .	78
28.2 Закон четырёх спектральных ролей в плоскости $(D, A)$ . . . . .	78
28.3 Геометрический закон ролей атома . . . . .	80

28.4	Законы плато донорно-акцепторных индексов . . . . .	81
28.5	Закон ядерного острова стабильности v0.2 . . . . .	85
28.6	Спектральная связка ядерной долины и геометрической Таблицы . . . . .	88
28.7	Закон геометрической периодичности D/A для s/p-блока . . . . .	90
28.8	Закон универсального d-слоя . . . . .	91
28.9	Закон роста деревьев в модели “Christmas Tree” . . . . .	93
<b>29</b>	<b>Текущий охват модели (“зелёная зона”)</b>	<b>93</b>
<b>30</b>	<b>Незавершённые блоки (“жёлтая зона”)</b>	<b>96</b>
<b>31</b>	<b>Дальняя программа (“красная зона”)</b>	<b>98</b>
<b>32</b>	<b>Связь с существующей литературой</b>	<b>99</b>
<b>33</b>	<b>Организация кода и репозитория</b>	<b>99</b>
33.1	Численный движок: FDM, топологическая сложность и рост деревьев . . .	99
<b>34</b>	<b>Игрушечные модели и проверочные эксперименты</b>	<b>101</b>
34.1	1D-модель Среды на отрезке . . . . .	102
34.2	Две ямы и аналог гравитационного притяжения . . . . .	103
34.3	Проверка принципа эквивалентности (игрушечная версия) . . . . .	104
34.4	3D-игрушка: минимальный объёмный прототип атома . . . . .	104
34.5	План по численным экспериментам v0.1 . . . . .	108
	<b>Приложения</b>	<b>108</b>
<b>A</b>	<b>Сводка аксиом и законов v0.2</b>	<b>108</b>
<b>B</b>	<b>Компактный список постулатов v0.1</b>	<b>111</b>
<b>C</b>	<b>Минимальные математические определения и обозначения</b>	<b>113</b>
C.1	Пространство, время и дифференциальные операторы . . . . .	113
C.2	Спектральные величины . . . . .	113
C.3	Оператор малых колебаний и спектр . . . . .	114
C.4	Топология, графы и функционалы . . . . .	114
<b>D</b>	<b>Состояние кода и внешние источники</b>	<b>115</b>
D.1	Состояние кода v0.1 (чек-лист) . . . . .	115
D.2	Куда смотреть за пределами документа . . . . .	116
<b>E</b>	<b>Черновики: полярность цепочек C–C–O–H и Si–O–Si</b>	<b>116</b>
<b>F</b>	<b>Черновики: спектры графа атома как игрушечный LDOS</b>	<b>118</b>
<b>G</b>	<b>Черновики: спектральный периодический закон</b>	<b>120</b>
<b>H</b>	<b>Черновики: Гармонический предел и энергия молекулы</b>	<b>122</b>
H.1	Спектральный функционал зарядов как гармоническое приближение . . .	122
H.2	Полный энергофункционал молекулы $F_{\text{mol}}$ . . . . .	122
H.3	Калиброванные параметры модели . . . . .	123

Н.4	Ограничения и область применимости . . . . .	123
Н.5	Переход к v2.0: спектральное размягчение по периоду . . . . .	124
Н.6	Четыре феноменологических закона (версии v1–v3, Drafts) . . . . .	124
Н.6.1	Закон геометрического периода (спектральная энтропия) . . . . .	124
Н.6.2	Закон спектрального импеданса (мягкая проводимость) . . . . .	125
Н.6.3	Закон критической глубины (эффект Super-O) . . . . .	126
Н.6.4	Закон разделения ролей геометрии и спектра (v1–v4) . . . . .	127

иметь **один самодостаточный документ**, в котором собраны все ключевые определения, постулаты и функционалы модели;

иметь **прямую связку** между идеями и кодом: формулы и структуры здесь должны быть реализуемы в виде программного комплекса без обращения к внешним источникам;

избегать бесконечного хождения по статьям и заметкам, каждый раз заново восстанавливая, «что же мы на самом деле считаем».

Практически этот документ играет три роли:

1. **Конституция модели.** Чётко сформулированные постулаты и онтология: что мы считаем реальным, а что осознанно выбрасываем (ОТО, СТО, четырёхмерное пространство-время).
2. **Техническое задание (ТЗ).** Явное описание того, какие операторы, функционалы и алгоритмы должны быть реализованы в программном комплексе спектральной физики.
3. **Дорожная карта (roadmap).** Разделение на *зелёную зону* (что уже можно считать), *жёлтую* (что структурировано, но не доведено до формул) и *красную* (дальняя программа).

Цель: чтобы любой участник проекта, открыв этот документ, мог:

- понять, *какую* реальность мы описываем;
- увидеть, *какие* математические объекты нужно реализовать;
- быстро соотнести теорию с текущим состоянием кода.

## 0.1 История идеи и мотивация

Классическая картина физики XX века построена вокруг двух столпов:

- относительность (СТО/ОТО), где гравитация трактуется как искривление пространства-времени;
- квантовая механика, где поведение микромира описывается через абстрактные волновые функции и вероятности.

Эта конструкция даёт впечатляющий объём совпадений с экспериментом, но:

- она плохо согласуется с интуитивным представлением о *реальной среде*, в которой происходят процессы;

- она приводит к сущностям вроде «чёрных дыр» и сингулярностей, которые выглядят как математические артефакты, а не физические объекты;
- она опирается на формализм, который трудно напрямую связать с вычислимой картиной непрерывного поля / среды.

Рабочая гипотеза, на которой строится этот документ:

В основе физической реальности лежит **единая непрерывная Среда** в трёхмерном евклидовом пространстве. Материя, поля и гравитация возникают как различные режимы спектральной самоорганизации этой Среды.

Из этого мы:

- **отказываемся** от идеи искривлённого пространства-времени и любых релятивистских метрик как фундаментальных;
- **сохраняем** время как параметр эволюции процессов, а не как координату;
- **делаем ставку** на спектральное описание: локальная плотность состояний Среды, её спектральный потенциал и возникающие на этом фоне солитонные структуры.

Дополнительная мотивация:

- В последние годы (2024–2025) появляются работы, где спектральные и геометрические подходы используются для описания атомов, вихревых солитонов и самоорганизации структур в конденсированных средах. Это подтверждает, что выбранное направление не изолировано от большой науки.
- Накоплен собственный код и набор численных экспериментов (спектральные тени, игрушечные операторы, LDOS-карты), который требует единой теоретической надстройки.

Этот документ — попытка собрать разрозненные идеи и наработки в одну логическую линию: от онтологии Среды до Геометрической Таблицы атомов и требований к программному комплексу.

## 0.2 Краткий обзор структуры книги

Книга разбита на несколько частей, каждая из которых отвечает на свой круг вопросов.

- **Часть I. Введение и конституция модели.**

Здесь формулируются базовые постулаты: трёхмерное евклидово пространство, единая Среда, спектральное описание, материя как солитоны, определение гравитации через спектральный потенциал. Эта часть задаёт «правила игры», от которых мы не отступаем.

- **Часть II. Среда и спектральное описание.**

Вводятся локальная спектральная плотность  $\rho_{\text{spec}}(\omega, x, t)$ , гравитационно значимая мощность  $I_{\text{grav}}(x, t)$ , спектральный потенциал  $\phi(x, t)$  и поле ускорений  $\mathbf{g}(x, t) = -\nabla\phi(x, t)$ . Обсуждается связь с понятием плотности состояний (DOS/LDOS).

- **Часть III. Солитоны, частицы и масса.**

Дается определение солитонов Среды, вводится топологическое описание (графы, узлы, деревья) и формула для эффективной массы как функционала от спектра и топологии конфигурации.

- **Часть IV. Спектральная гравитация.**

Поясняется, как из спектрального потенциала выводятся привычные гравитационные эффекты: притяжение, орбиты, сдвиг частот процессов, отклонение волн в поле.

- **Часть V. Геометрическая Таблица атомов.**

Формулируется понятие геометрического атома как минимума функционала  $F_{\text{atom}} = F_{\text{levels}} + F_{\text{geom}}$ , обсуждаются валентность и «порты» связей, строится прототип минитаблицы для элементов H–Ne.

- **Часть VI. Вычислительное ТЗ и архитектура ПО.**

Описывается структура программного комплекса: модули Среды и гравитации, оператора  $H[\theta]$  и DOS/LDOS, оптимизации (Symmetric Newton), интеграции (FDM), визуализации. Эта часть задаёт требования к реальному коду.

- **Часть VII. Ограничения и дорожная карта.**

Честно перечисляются области, где модель уже даёт расчёты (зелёная зона), области с частично прописанной математикой (жёлтая зона) и дальние направления (красная зона).

- **Приложения.**

Содержат компактный список постулатов v0.1, минимальные математические определения, ссылки на ключевые внешние работы и краткое описание состояния кода.

Таким образом, документ одновременно выполняет роль концептуальной записки, технического задания и рабочего журнала проекта спектральной физики и Геометрической Таблицы атомов.

## 1 Онтология и постулаты модели

В этой главе формулируются базовые постулаты модели. Они задают онтологию: *что считается реально существующим*, какие объекты используются для описания мира и какие конструкции принципиально не допускаются.

Все последующие определения, уравнения и вычислительные схемы должны быть совместимы с этими постулатами. Если какое-то предложение противоречит одному из них, оно либо ошибочно, либо относится к разделу гипотез и дальнейших исследований.

### 1.1 Спектральная лаборатория: что показывает модель v1.0–v2.0

На этом этапе у нас уже не просто “калькулятор свойств”, а вычислительная спектральная лаборатория. Код `geom_atoms.py` генерирует полный отчёт (RND MASTER REPORT), по которому можно судить о поведении атомов и молекул в спектральной среде. Ниже я кратко фиксирую четыре ключевых эффекта, которые устойчиво проявляются в версиях модели v1.0 и v2.0.

## 1.2 Статус реализации: QSG v5.0

В версии QSG v5.0 реализованы три технических уточнения, которые фиксируют связь между геометрической таблицей, стохастическим ростом деревьев и функционалом сложности.

### [QSG v5.0] Мягкость кремния в росте деревьев

Для описания ростовой динамики молекулярных деревьев введён безразмерный параметр *softness* для геометрического атома. Каждому элементу  $Z$  сопоставляется число

$$s(Z) \in [0, 1),$$

которое кодирует “мягкость” атома как ростовой единицы в генераторе деревьев.

В реализации QSG v5.0:

- для углерода  $C$  используется  $s(C) = 0.0$ ;
- для кремния  $Si$  задано  $s(Si) = 0.30$ ;
- для остальных элементов зелёной зоны (H–Kr) по умолчанию  $s(Z) = 0.0$ .

В стохастическом генераторе деревьев (модуль *Grower*) параметр  $s(Z)$  входит в глобальную вероятность продолжения ветвления. Если корневой атом имеет мягкость  $s_{seed}$ , то на каждом шаге роста базовая вероятность продолжения ветви  $p_{continue}$  умножается на фактор

$$p_{continue} \mapsto p_{continue} \cdot (1 - s_{seed}).$$

Таким образом, для кремния ( $s_{seed} = 0.30$ ) реализуется ослабление типичных размеров и сложностей деревьев по сравнению с углеродом при прочих равных параметрах роста. В выборках QSG v5.0 средний размер деревьев  $Si$  и их нормированная сложность находятся заметно ниже, чем у деревьев  $C$ , что согласуется с предположением о большей “мягкости” Si–Si связей по сравнению с C–C.

### [QSG v5.0] Статистика циклов и статус *crossing-number* слоя

Для молекулярного генератора в зелёной зоне QSG v5.0 исследована статистика циклов. Для набора стартовых семян

$$\{Li, Na, K, Be, Mg, Ca, C, N, O, Si, P, S\}$$

генерировались выборки молекул при одинаковых параметрах роста, и для каждой молекулы вычислялось цикломатическое число

$$\nu_{cycl} = E - V + C,$$

где  $E$  — число рёбер,  $V$  — число вершин,  $C$  — число компонент связности (в рассматриваемых выборках  $C = 1$ ).

Результаты QSG v5.0 имеют вид

$$\text{frac\_trees} \approx 1.0, \quad \text{frac\_cycles} \approx 0.0, \quad \max \nu_{cycl} = 0$$

для всех указанных семян. То есть на текущем уровне генерации все случайные молекулярные конфигурации представляют собой деревья, и циклы практически не возникают.

Из этого делается два вывода:



1. На уровне QSG v5.0 достаточно считать, что молекулярный генератор работает в *чисто деревьевом* режиме.
2. Crossing-number слой функционала сложности (штраф за пересечения и зацепления) остаётся в статусе запланированного расширения модели и *не входит* в базовый функционал сложности в зелёной зоне QSG v5.0.

Иными словами, на текущем этапе crossing-number рассматривается как кандидат для будущих версий (QSG v6.x и далее), где генератор будет расширен до полноценного класса связных графов с циклами и возможными пересечениями.

### [QSG v5.0] Потолок сложности деревьев и константа $\alpha_{\text{tree}}$

Для деревьев, генерируемых в зелёной зоне QSG v5.0, введён феноменологический закон роста сложности вида

$$C_1(n) \approx \alpha_{\text{tree}} n \log(1 + n),$$

где  $n$  — характерный размер дерева (например, среднее число атомов), а  $C_1(n)$  — одна из топологических метрик сложности дерева (вариант  $v1$ ), усреднённая по ансамблю деревьев при фиксированных условиях роста.

По данным численных экспериментов QSG v5.0:

- для “сырых” топологических признаков (версия сложности  $v1$ ) получено значение

$$\alpha_{\text{tree}}^{(v1)} \approx 0.185,$$

- для сложности на основе FDM-интеграла (версия сложности FDM) —

$$\alpha_{\text{tree}}^{(\text{FDM})} \approx 0.205,$$

для диапазона характерных размеров деревьев

$$n \in [5.8, 18.0] \quad (\text{порядок величин}).$$

Эти значения  $\alpha_{\text{tree}}$  фиксируются как *R&D-инварианты* QSG v5.0: они описывают эффективный “потолок сложности” для деревьев, которые генерирует текущий ростовой механизм при заданных параметрах (включая softness). На данном этапе  $\alpha_{\text{tree}}$  не интерпретируется как фундаментальная физическая константа, но может использоваться:

- как параметр для нормировки сложности деревьев в сравнительных экспериментах,
- как ориентир при построении функционалов, ограничивающих рост сложности (capacity-ограничения) в более сложных версиях модели.

## 1.3 Spectral Lab v1: минимальный оператор $\hat{H}$ в одномерной среде

Помимо графового приближения спектрального оператора, в версии QSG v6.0 введён первый “честный” оператор малых колебаний  $\hat{H}$  в виде одномерной решёточной модели. Цель Spectral Lab v1 — дать минимальный лабораторный стенд для проверки идей спектральной физики и функционала уровней  $F_{\text{levels}}$ .

## 1D-оператор и спектр

В модуле `core/spectral_lab_1d.py` реализована одномерная решётка  $X = \{x_i\}_{i=1}^N$  с шагом  $dx$  и потенциалом  $V(x)$ , заданным как функция координаты. На этой решётке строится оператор типа одномерного гамильтониана

$$H = -\frac{1}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

в стандартной трёхдиагональной дискретизации. Вычисляется полный набор собственных значений и собственных векторов  $H$ ; по нему строятся дискретная плотность состояний (DOS) и локальная плотность состояний (LDOS) вдоль  $X$ .

Spectral Lab v1 включает несколько простых потенциалов для тестирования (ящик, гармонический осциллятор и т.п.), что позволяет получать интуитивно понятные спектры и сравнивать их с известными аналитическими результатами.

## Функционал $F_{\text{levels}}$ и FDM-прокси

В модуле `core/f_levels_1d.py` определены две версии игрушечного функционала уровней  $F_{\text{levels}}$ :

- **Спектральная версия.** Функционал  $F_{\text{levels}}^{(\text{spec})}$  вычисляется как сумма по спектру оператора  $H$ :

$$F_{\text{levels}}^{(\text{spec})} = \sum_k w(E_k),$$

где  $\{E_k\}$  — собственные значения  $H$ , а  $w(E)$  — гладкая весовая функция по энергии (например, гауссовская).

- **FDM-прокси.** Приближённая версия  $F_{\text{levels}}^{(\text{FDM})}$  вычисляется на решётке по потенциалу  $V(x)$  с использованием фрактально-монте-карловой (FDM) выборки по пространству: вместо явного спектра используется интеграл по  $V(x)$  с тем же весом  $w(\cdot)$ , реализованный как усреднение по узлам решётки.

Скрипт `analysis/test_spectral_lab_1d.py` создаёт несколько тестовых стендов (ящик, гармонический осциллятор), вычисляет  $F_{\text{levels}}^{(\text{spec})}$  и  $F_{\text{levels}}^{(\text{FDM})}$  и записывает результаты в файлы `results/spectral_lab_1d_*.txt`. Это даёт первый численный пример того, как один и тот же функционал уровней может быть вычислен как по спектру оператора, так и по FDM-прокси.

## Статус Spectral Lab v1 в QSG v6.0

Spectral Lab v1 следует рассматривать как минимальный лабораторный стенд для спектральной физики:

- Он даёт первый явный пример оператора  $\hat{H}$  и функционала  $F_{\text{levels}}$  в рамках QSG, пусть пока и в одномерной игрушечной модели.
- Связь с основным слоем FDM/Complexity и с геометрической таблицей на данном этапе носит характер R&D: сравниваются значения  $F_{\text{levels}}^{(\text{spec})}$  и  $F_{\text{levels}}^{(\text{FDM})}$ , но прямого моста к  $\chi_{\text{spec}}(Z)$  и D/A-индексам ещё нет.
- Расширение Spectral Lab до двумерных и трёхмерных операторов, а также до реалистичных атомных конфигураций и прямой связи с геометрическим атомом отнесено к жёлтой зоне версий QSG v6.x и далее.

**1. Мир близнецов (версия v1.0).** В базовой калибровке v1.0 элементы одной группы периодической таблицы спектрально неразличимы. Литий и натрий имеют одинаковые порты и одинаковую спектральную электроотрицательность, то же самое верно для фтора и хлора. Отсюда два следствия:

- обменные реакции типа  $\text{HF} + \text{NaCl} \rightarrow \text{HCl} + \text{NaF}$  оказываются изоэнергетичными ( $\Delta F \approx 0$ );
- органические молекулы вроде  $\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{H}_2\text{S}$  в спектральном потоке почти не различаются: потоковая энергия  $F_{\text{flow}}$  практически нулевая по сравнению с геометрической.

Эта картина удобна как “нулевой уровень”: она показывает, как ведёт себя чисто геометрическая модель без эффекта периода и без тонкой электроники.

**2. Периодическое размягчение и асимметрия доноров и акцепторов (v2.0).** Версия v2.0 вводит явную зависимость энергии порта от периода (размера) атома: порты тяжёлых элементов становятся мягче. Это сразу разрывает вырождение “близнецов”: фтор перестаёт быть тождественным хлору, литий — натрию, а обменные реакции получают ненулевую  $\Delta F$ .

Численные эксперименты показывают жёсткую асимметрию:

- доноры (Li, Na) меняются мало: их способность отдавать заряд с ростом периода деградирует плавно;
- акцепторы (F, Cl) деградируют гораздо быстрее: по мере роста размера и мягкости атом всё хуже удерживает “спектральный вакуум” и перестаёт быть сильным окислителем.

В терминах модели: состояние “избыточного давления” (металл, донор) геометрически устойчиво, а состояние “вакуума” (неметалл, акцептор) хрупко и требует жёсткой оболочки. Поэтому сильные окислители естественно концентрируются в верхних периодах таблицы, а крупные атомы стремятся к металлическому поведению.

**3. Принцип мягкой проводимости:  $\text{H}_2\text{O}$  против  $\text{H}_2\text{S}$ .** В v2.0 я ввожу простой индекс спектральной реактивности  $R_{\text{react}}$ , который сравнивает по модулю потоковую энергию  $F_{\text{flow}}$  с суммой геометрических вкладов.

Оказалось, что при одинаковой геометрии:

- у воды  $\text{H}_2\text{O}$  потоковая часть  $|F_{\text{flow}}|$  мала по сравнению с  $F_{\text{geom}}$  и угловым штрафом;
- у сероводорода  $\text{H}_2\text{S}$  спектральный поток заметно сильнее, а относительный индекс  $R_{\text{react}}$  выше.

Интуитивно можно сказать так: кислород в модели жёсткий и электроотрицательный, он создаёт большой перепад потенциала, но плохо пропускает заряд через свою оболочку. Сера мягче: перепад потенциала меньше, зато канал шире, и по нему легче текут потоки. В спектральной среде важна не только разность потенциалов, но и “проводимость” канала; мягкие элементы третьего периода лучше проводят спектральные потоки, чем жёсткие элементы второго.

**4. Горизонт химии и отрицательный результат Super-O.** Отдельный вычислительный эксперимент сканирует показатель размягчения  $k$  и ищет значение, при котором спектральная электроотрицательность хлора выравнивается с водородом. При малых  $k$  хлор заметно электроотрицательнее H, при больших — становится слабее его. Между этими режимами есть “горизонт химии”, где  $\chi_{\text{Cl}} \approx \chi_{\text{H}}$ .

Рабочий выбор  $k$  в v2.0 делается осознанно внутри “зоны жизни”: достаточно далеко от чистого вырождения, чтобы отличать F и Cl и получать ненулевые энергии реакций, но и не настолько велик, чтобы совсем лишить хлор окислительных свойств. Это не подгонка под справочник, а выбор режима, в котором видны именно спектральные эффекты.

Наконец, специальный эксперимент с искусственным “Super-O” (попытка радикально изменить параметр  $\epsilon$  для кислорода) показал, что в текущей реализации v2.0 этот параметр практически не влияет на расчёт  $\chi_{\text{spec}}$  и потоков. Это важный отрицательный результат: он означает, что спектральная “глубина ямы” пока ещё не полностью подключена к вычислительной схеме и представляет собой естественное направление для следующей версии модели.

## 1.4 Спектральный режим v3.0: связь глубины $\epsilon$ и электроотрицательности

Версии v1.0 и v2.0 строят “скелет” спектральной химии: геометрическую жёсткость атомов, их роли (terminator, bridge, hub, inert) и периодическое размягчение (зависимость жёсткости от номера периода). Однако до включения режима v3.0 параметр  $\epsilon$  (глубина спектральной ямы относительно фоновой среды) практически не влиял на вычисляемую электроотрицательность  $\chi_{\text{spec}}$  и потоки зарядов в QEq-подобной модели.

В режиме `v3_eps_coupled` вводится явная связь

$$\epsilon_{\text{eff}} = \epsilon_{\text{spec}} + \lambda_{\epsilon} \epsilon,$$

и именно  $\epsilon_{\text{eff}}$  используется при вычислении знака и масштаба  $\chi_{\text{spec}}$ . Это приводит к трём характерным эффектам, хорошо видимым в сводном отчёте `rnd_master_report_v3.txt` (секция v3.0).

**1. Закон спектральной индукции: “глубина важнее формы”.** В версиях v1.0–v2.0 электроотрицательность элементов определялась главным образом геометрической жёсткостью порта  $E_{\text{port}}$  и периодом (размером солитона). При включении v3.0 в игру вступает глубина  $\epsilon$ :

- элементы с более глубоким  $\epsilon$  (например, F с  $\epsilon \approx -1.5$ ) получают усиленную  $\chi_{\text{spec}}$ ;
- элементы с положительной  $\epsilon$  (например, Na с  $\epsilon \approx +2.0$ ) становятся ещё более отчётливыми донорами;
- искусственный эксперимент с “Super-O” ( $\epsilon = -5.0$ ) показывает резкое увеличение потока  $F_{\text{flow}}$  по сравнению с v2.0: то, что в v2 было отрицательным контролем (изменение  $\epsilon$  ничего не меняло), в v3 превращается в мощную спектральную индукцию.

Это можно сформулировать как закон: *спектральный поток определяется глубиной, а геометрия — шириной канала.*

## 1.5 Четыре закона спектральной среды

В этом подразделе мы формулируем четыре рабочих закона спектральной среды. Все они основаны на численных экспериментах в коде `geom_atoms.py` (режимы v1.0–v4.0) и на данных R&D-отчётов.

**Закон 1. Ролевой периодический закон. Формулировка.** Для лёгких s/p-элементов существуют дискретные сетевые роли (*terminator*, *bridge*, *hub*, *inert*), которые являются устойчивыми минимумами функционала  $F_{\text{geom}} + F_{\text{spec}}$  при заданном числе портов. Эти роли периодически повторяются при переходе к следующему периоду (после корректного периодического масштабирования энергии порта).

**Обоснование (v4).** В модели каждый элемент представлен графом-атомом `AtomGraph` с полями `ports`, `port_geometry`, `role`. В отчёте v4.0 таблица элементных индексов показывает, что роли *terminator* / *bridge* / *hub* / *inert* повторяются для H–Ne и Na–Ar при том же числе портов и похожей топологии графа. При этом различаются только численные значения  $E_{\text{port}}$  и  $\chi_{\text{spec}}$ , зависящие от периода и спектра.

**Интерпретация.** Это геометрический аналог традиционного деления на s-блок и p-блок. Вместо орбиталей мы оперируем устойчивыми сетевыми ролями: одно-портовые терминаторы (H, F, Cl, Li, Na), двухпортовые мосты (Be, Mg, O, S), много-портовые хабы (B, C, N, P, Si). Периодический закон здесь формулируется как повторение набора ролей при увеличении периода.

**Закон 2. Спектральный закон электроотрицательности. Формулировка.** Электроотрицательность  $\chi_{\text{spec}}(Z)$  является геометрическо-спектральным функционалом

$$\chi_{\text{spec}}(Z) = \text{sign}(\epsilon_Z - \mu_{\text{env}}) \propto \frac{F_{\text{geom}}(Z)}{\text{ports}(Z)} \text{period}(Z)^{-k} + (\text{донорные/центровые демпферы}),$$

так что:

- внутри периода (по строке таблицы)  $\chi_{\text{spec}}$  примерно монотонно растёт по мере увеличения  $F_{\text{geom}}/\text{ports}$  при фиксированном знаке (донор/акцептор),
- между периодами (по столбцу)  $\chi_{\text{spec}}$  масштабируется как  $\text{period}^{-k_{\text{period}}}$  с  $k_{\text{period}} \approx 0,7$ .

**Обоснование (v2/v4).** В режимах v2.0 и v4.0 энергия порта  $E_{\text{port}}$  масштабируется как  $\text{period}^{-k}$ , а  $\chi_{\text{spec}}$  вычисляется на основе  $E_{\text{port}}$  и положения уровня  $\epsilon_Z$  относительно химического потенциала среды  $\mu_{\text{env}}$ . Калибровка на H, Li–Cl показывает:

- по периоду Li → F и Na → Cl величина  $|\chi_{\text{spec}}|$  возрастает монотонно и качественно воспроизводит порядок шкалы Полинга;
- вертикальные переходы Li → Na и F → Cl при фиксированном  $k$  дают систематическое ослабление  $|\chi_{\text{spec}}|$ , как в реальной химии.

**Интерпретация.** Вместо эмпирической электроотрицательности мы получаем вычисляемую функцию  $\chi_{\text{spec}}(Z)$  от геометрии графа-атома, числа портов, периодического масштаба и спектральной глубины  $\epsilon_Z$ . Периодический закон формулируется как закон поведения этой функции: монотонность в периоде и степенное ослабление между периодами.

**Закон 3. Закон близнецов и изовалентной замены. Формулировка.** Для каждой сетевой роли (terminator, bridge, hub) существуют спектрально-геометрические “близнецы” в соседних периодах, такие что:

- в режиме без периодического масштабирования (v1.0) их  $\chi_{\text{spec}}$  и вклад в  $\Delta F$  реакций практически совпадают;
- включение масштабирования  $\text{period}^{-k}$  (v2.0/v4.0) порождает наблюдаемую химию: различия в реакционной способности близнецов и смещение баланса в обменных реакциях.

**Обоснование (v1/v2/v4).** В режиме v1.0 элементы Li и Na, Be и Mg, F и Cl имеют одинаковые  $E_{\text{port}}$  и почти одинаковые  $\chi_{\text{spec}}$ ; обменные реакции (HF/NaCl, LiF/HCl) оказываются почти изоэнергетичными ( $\Delta F \approx 0$ ). В режимах v2.0 и v4.0 периодический фактор ломает эту симметрию:  $E_{\text{port}}$  и  $\chi_{\text{spec}}$  для тяжёлых близнецов становятся меньше по модулю, а  $\Delta F$  реакций приобретает конечное значение, согласующееся с известной химией.

**Интерпретация.** Это даёт формальный критерий изовалентной (изохимической) замены элементов: два элемента считаются близнецами, если их  $(\chi_{\text{spec}}, F_{\text{total}})$  в v1.0 совпадают, а в v4.0 различаются только за счёт периодического масштаба. На уровне молекул это даёт строгий язык для описания “замены O на S”, “замены F на Cl” и т.п.

**Закон 4. Общая спектральная структура для химии и гравитации. Формулировка.** Химические свойства (электроотрицательность  $\chi$ , валентность, сетевые роли) и гравитационные свойства (масса, гравитационный потенциал) являются двумя разными макропределами одной и той же спектральной структуры  $\rho_{\text{spec}}$ , но для разных операторов и разных масштабов.

**Обоснование (спектральная физика).** В непрерывной спектральной физике вводится локальная спектральная плотность  $\rho_{\text{spec}}(\lambda, x)$ , её усреднение  $\rho_{\text{spec}}(x)$  и спектральный потенциал  $\varphi(x) = -\ln \rho_{\text{spec}}(x)$ . Гравитационный отклик задаётся оператором  $a_{\text{grav}}(x) = -\Delta \ln \rho_{\text{spec}}(x)$ . В дискретной геометрической таблице атомов мы переносим ту же логику на графы: LDOS графа играет роль дискретной  $\rho_{\text{spec}}$ , функционалы  $F_{\text{spec}}$  и  $F_{\text{geom}}$  описывают устойчивые режимы локализованного солитона и его роли (hub/bridge/terminator).

**Интерпретация.** Химия и гравитация в этой картине оказываются не двумя несвязанными теориями, а разными проявлениями одной спектральной среды:

- на малых масштабах (атомы, молекулы) спектральная структура задаёт валентность, электроотрицательность и формы связей;
- на космических масштабах она же, через оператор Лапласа по  $\ln \rho$ , определяет гравитационные поля и формы крупных структур.

Геометрическая таблица атомов — это “микроскопический” предел той же самой спектральной физики, которая описывает гравитацию.

**Закон спектральной индукции.** Глубина спектральной ямы  $\varepsilon$  первична по отношению к геометрической форме: даже геометрически “жёсткий” атом (с неблагоприятной топологией и углами) при достаточно глубоком  $\varepsilon$  насильно поляризует связи и создаёт химию там, где геометрия стремилась к покою.

Именно этим объясняется, в частности, феномен “свирепости” фтора: он не только мал и жёсток, но и обладает аномально глубокой спектральной ямой.

**2. Закон “оживления воды”:** переход количества в качество. Во v2.0 вода  $\text{H}_2\text{O}$  выглядела почти “сухой”: геометрия давала жёсткий центр (O) и заметный изгиб, но разность электроотрицательностей была небольшой, а энергия потока  $F_{\text{flow}}(\text{H}_2\text{O})$  оставалась слабо отрицательной. На фоне этого сероводород  $\text{H}_2\text{S}$  казался более активной молекулой за счёт мягкого серного центра (эффект “мягкой проводимости”).

В режиме v3.0, когда  $\varepsilon$  кислорода начинает существенно участвовать в формуле  $\chi_{\text{spec}}$ , ситуация меняется:

- для  $\text{H}_2\text{O}$   $F_{\text{flow}}$  становится заметно более отрицательным,
- индекс реактивности  $R_{\text{react}} = |F_{\text{flow}}| / (F_{\text{geom}} + F_{\text{angle}})$  растёт,
- кислород начинает “отыгрывать” у серы за счёт глубокой спектральной ямы, а не за счёт геометрии.

Это позволяет сформулировать второй закон:

**Закон оживления воды.** Для появления сильных полярных растворителей и “живой” химии связей одного геометрического фактора недостаточно; необходим критический уровень спектрального смещения  $\varepsilon$ , который пробивает геометрическую жёсткость и запускает устойчивый ток зарядов. Вода в этой модели возникает как тонкий баланс между глубокой  $\varepsilon(\text{O})$  и жёсткостью её портов.

**3. Закон разделения ролей:** геометрия задаёт направление, спектр задаёт силу. Анализ обменных реакций (например,  $\text{HF} + \text{NaCl} \rightarrow \text{HCl} + \text{NaF}$ ) в режимах v2.0 и v3.0 показывает устойчивую картину:

- знак  $\Delta F$  (выгодность или невыгодность реакции) уже определяется на уровне v2.0 геометрией и периодическим размягчением: какие пары (донор–акцептор) вообще возможны и в какую сторону идёт заряд;
- включение v3.0 практически не меняет знаки  $\Delta F$ , но может сильно изменять модуль  $|\Delta F|$  — реакция остаётся в ту же сторону, но её “энергичность” меняется.

Тем самым, v3.0 подчёркивает разделение:

**Закон сохранения реакционного потенциала.** Геометрия (топология атомного графа, число портов, период) задаёт направление химического процесса (знак  $\Delta F$ ), а спектральная глубина  $\varepsilon$  задаёт его интенсивность (величину  $|\Delta F|$ ): геометрия — это карта дорог, спектр — это топливо.

Вместе три режима дают целостную картину:

- v1.0: мир “спектральных близнецов”, где группы (Li Na, F Cl) ещё не разделены;
- v2.0: периодическое размягчение, асимметрия доноров и акцепторов, появление реалистичной химии  $\text{F} \neq \text{Cl}$  и  $\Delta F \neq 0$ ;
- v3.0: включение параметра  $\varepsilon$  в формулу  $\chi_{\text{spec}}$ , рождение сильных окислителей и корректная поляризация воды.

Этот слой v3.0 не отменяет v2.0, а добавляет ещё одну физическую ручку к спектральному функционалу: геометрия задаёт форму атома и его место в Периодической таблице, периодическое размягчение — устойчивость ролей при увеличении размера, а глубина  $\varepsilon$  — интенсивность и характер электронных потоков в связях.

## 1.6 Антирелятивистская рабочая гипотеза

В данной книге мы рассматриваем **альтернативное описание гравитации** через спектральное поле плотности состояний  $\rho_{\text{spec}}(x)$  вместо динамической метрики  $g_{\mu\nu}(x)$  общей теории относительности.

**Гипотеза 1 (антисимметрическая формулировка).** На фундаментальном уровне Среда описывается не геометрией псевдориманова пространства-времени, а спектральной плотностью  $\rho_{\text{spec}}(x)$  и её логарифмическим потенциалом

$$\phi(x) = -\ln \rho_{\text{spec}}(x),$$

а гравитационное ускорение является эффективным макроскопическим полем

$$a_{\text{grav}}(x) = -\Delta\phi(x),$$

возникающим как *приближённое* описание усреднённой динамики Среды.

Такая постановка *не отменяет* успехов общей теории относительности в уже проверенных режимах, а предлагает другой, спектральный язык для их возможного переосмысления. На данном этапе это **рабочая гипотеза** и программа численных экспериментов, а не завершённая теория природы.

## 1.7 Постулат о пространстве и времени

Пространство — трёхмерное евклидово, время — параметр протекания процессов в Среде, а не геометрическая координата.

Фон пространства фиксирован:

$$X \simeq \mathbb{R}^3, \quad \bar{g}_{ij} = \delta_{ij}, \quad (1)$$

где  $x = (x^1, x^2, x^3)$  — декартовы координаты, а  $\delta_{ij}$  — единичная матрица.

Расстояние и объём определяются стандартно:

$$|x - y| = \sqrt{(x^1 - y^1)^2 + (x^2 - y^2)^2 + (x^3 - y^3)^2}, \quad d^3x = dx^1 dx^2 dx^3. \quad (2)$$

Время  $t \in \mathbb{R}$ :

- не является четвёртой координатой;
- служит параметром, упорядочивающим эволюцию состояния Среды;
- измеряется через сравнение частот и периодов *реальных* физических процессов (локальных солитонов, «часов»).

Таким образом, базовая геометрия мира определяется парой  $(X, t)$ , где  $X$  неизменно евклидово, а  $t$  параметризует последовательность состояний.



## 1.8 Постулат о Среде

Всё пространство  $X$  заполнено единой непрерывной Средой, способной поддерживать колебания и нелинейные локализованные структуры.

Свойства Среды на уровне модели:

- Среда присутствует в каждой точке  $x \in X$ , нет «пустоты» в смысле отсутствия носителя физических процессов;
- малые возмущения вокруг некоторого фонового состояния вызывают распространение волн (продольных, поперечных и других типов);
- при достаточно сильных и/или нелинейных взаимодействиях Среда допускает устойчивые локализованные конфигурации (солитоны, вихри, узлы);
- существует выделенная система отсчёта — **покой Среды**; все скорости процессов выражаются относительно неё.

Мы сознательно не фиксируем в этом документе микроскопическую природу Среды (её «атомарность» или отсутствие таковой). Нас интересует эффективное описание через спектр колебаний и возникающие структуры.

## 1.9 Постулат о спектральном описании

Состояние Среды описывается локальной спектральной плотностью по частотам и координатам.

В каждой точке пространства и для каждого момента времени вводится функция

$$\rho_{\text{spec}}(\omega, x, t) \geq 0, \quad (3)$$

которую можно интерпретировать как *локальную спектральную плотность* Среды: насколько сильно представлены моды с частотой  $\omega$  в окрестности точки  $x$  в момент  $t$ .

Для гравитационно значимых эффектов вводится *взвешенная мощность*

$$I_{\text{grav}}(x, t) = \int_{\Omega} \alpha_{\text{grav}}(\omega) \rho_{\text{spec}}(\omega, x, t) d\omega, \quad (4)$$

где  $\Omega$  — рабочий диапазон частот, а  $\alpha_{\text{grav}}(\omega)$  — фиксированная весовая функция, определяющая вклад частот в гравитационный сектор. В простейшем приближении v0.1 можно брать  $\alpha_{\text{grav}}(\omega) \equiv 1$ .

## 1.10 Гравитация как следствие спектральной среды

В ранних версиях модели гравитация формулировалась в виде отдельного постулата. В текущей версии гравитационный сектор рассматривается как *следствие* более общих допущений о Среде и её спектральном описании.

**Спектральный инвариант.** Локальная продольная спектральная плотность Среды  $\rho_L(\omega, x, t) \geq 0$  определена в подразделе о спектральном описании. На её основе вводится *гравитационно значимый спектральный инвариант*

$$I_{\text{grav}}(x, t) = \int_0^\infty \alpha_L(\omega) \rho_L(\omega, x, t) d\omega, \quad (5)$$

где  $\alpha_L(\omega) \geq 0$  — фиксированная весовая функция.

Требуется, чтобы физический гравитационный потенциал не зависел от глобального масштаба спектра: при замене  $\rho_L \rightarrow C \rho_L$  с  $C > 0$  поле ускорений не должно меняться. Эта масштабная инвариантность приводит к логарифмическому выбору.

**Спектральный потенциал и поле.** *Спектральный гравитационный потенциал* определяется с точностью до аддитивной константы:

$$\phi(x, t) = -\ln \frac{I_{\text{grav}}(x, t)}{I_0}, \quad (6)$$

где  $I_0 > 0$  — произвольный опорный масштаб.

*Эффективное гравитационное поле* задаётся как градиент потенциала в евклидовом пространстве:

$$\mathbf{g}(x, t) = -\nabla \phi(x, t). \quad (7)$$

При глобальном масштабировании  $\rho_L \rightarrow C \rho_L$  потенциал меняется на константу, а  $\mathbf{g}$  остаётся неизменным. Таким образом, гравитация целиком выражается через спектральные свойства Среды.

**Слабопольное приближение и уравнение Пуазона.** В квазистационарном режиме, когда вариации  $I_{\text{grav}}$  малы по сравнению с фоновым значением, потенциал  $\phi(x)$  медленно меняется в пространстве и удовлетворяет эффективному уравнению Пуазона

$$\Delta \phi(x) \approx 4\pi G_{\text{eff}} \sigma(x), \quad (8)$$

где  $G_{\text{eff}}$  — эффективная гравитационная константа, а  $\sigma(x)$  — *спектральная плотность источников*, выражаемая через локализованные солитоны Среды.

Соответствующий ньютоновский потенциал определяется как

$$\Phi_N(x, t) = c^2 (\phi(x, t) - \phi_\infty), \quad (9)$$

где  $c$  — характерная скорость распространения волн в Среде, а  $\phi_\infty$  — значение потенциала в удалённой невозмущённой области.

**Гравитационный красный сдвиг.** Частота любого устойчивого «часового» процесса (локального солитона) в слабом поле линейно чувствительна к вариациям спектрального потенциала:

$$\frac{\Delta f}{f} \approx \Delta \phi = \frac{\Delta \Phi_N}{c^2}. \quad (10)$$

Это даёт стандартный гравитационный красный сдвиг и замедление времени в модели спектральной Среды без введения искривлённого пространства-времени. Эффекты гравитации трактуются как режимы спектральной самоорганизации единой Среды, а не как дополнительная геометрическая структура.

## 1.11 Постулат о материи как солитонах

Материальные объекты — это устойчивые локализованные процессы (солитоны, вихри, узлы) в Среде.

Под *солитоном* мы понимаем локализованную во времени и пространстве конфигурацию полей Среды, которая:

- обладает конечной энергией;
- сохраняет свою форму (или спектральный профиль) при эволюции на естественных масштабах времени;
- устойчива к малым возмущениям.

Каждая солитонная конфигурация описывается:

- набором непрерывных параметров  $\theta$  (масштаб, ориентации, внутренние доли и т.п.);
- *топологией* — графом или узлом  $G_\theta$ , который отражает структуру связей и замкнутых линий в конфигурации.

Тип частицы (например, «протоноподобный» или «электроноподобный» объект) соответствует классу эквивалентности конфигураций с одинаковыми спектральными и топологическими инвариантами и минимумом определённого функционала  $F_{\text{sol}}[\theta]$ .

## 1.12 Постулат о линейном операторе колебаний

Для каждой конфигурации Среды существует линейный оператор малых колебаний, спектр которого описывает локальные моды вокруг этой конфигурации.

Формально, для данной конфигурации  $\theta$  вводится оператор  $\hat{H}[\theta]$ , действующий на малые возмущения состояния Среды (например, скалярные или векторные функции на  $X$ ). В простейшем скалярном приближении его можно представить в виде

$$\hat{H}[\theta] = -\nabla \cdot (c^2(\theta, x) \nabla), \quad (11)$$

где  $c(\theta, x)$  — эффективная локальная «жесткость» Среды: скорость распространения малых возмущений в данной конфигурации.

Точный вид  $\hat{H}[\theta]$  может быть усложнён (несколько компонент, анизотропия и т.д.), но *существование* такого оператора и его роль как генератора спектра принимается как постулат.

## 1.13 Постулат о DOS/LDOS и функции Грина

Спектральные свойства конфигурации задаются её плотностью состояний (DOS/LDOS), которая выражается через функцию Грина оператора  $\hat{H}[\theta]$ .

Глобальная плотность состояний (DOS) определяется как

$$\rho(\omega; \theta) = -\frac{1}{\pi} \Im \text{Tr} (\omega + i0^+ - \hat{H}[\theta])^{-1}, \quad (12)$$

а локальная плотность состояний (LDOS) в точке  $x$ :

$$\rho(\omega, x; \theta) = -\frac{1}{\pi} \Im G(x, x; \omega + i0^+; \theta), \quad (13)$$

где  $G(z; \theta) = (z - \hat{H}[\theta])^{-1}$  — функция Грина, а  $G(x, x'; z)$  — её кернел в координатном представлении.

Устойчивые моды и резонансы проявляются как пики  $\rho(\omega; \theta)$  (в том числе сингулярности типа Ван Хофа), а структура  $\rho(\omega, x; \theta)$  определяет пространственную форму «орбиталей» и локальных полей.

## 1.14 Масса как спектрально-топологический функционал

Ранее в этом месте формулировался «постулат о массе и топологии». Теперь масса трактуется как *определяемый функционал* от спектра и топологической структуры солитона, а законы инерции и гравитации рассматриваются как следствия этого определения.

**Определение полной массы солитона.** Для солитонной конфигурации  $\theta$  вводится эффективная масса

$$M_{\text{sol}}[\theta] = M_{\text{spec}}[\rho(\omega; \theta)] + M_{\text{top}}[G_\theta], \quad (14)$$

где

- $M_{\text{spec}}$  — спектральный вклад, зависящий от плотности состояний  $\rho(\omega; \theta)$  через интеграл с весовой функцией  $w_M(\omega)$ ;
- $M_{\text{top}}$  — топологический вклад, зависящий от дискретных инвариантов графа/узла  $G_\theta$  (число пересечений, Linking number и др.).

Конкретный вид  $w_M(\omega)$  и набор топологических инвариантов задаются в последующих разделах. Принципиально важно, что масса *вычисляется* из спектральных и топологических характеристик, а не вводится как табличная величина.

**Закон спектральной инерции.** Для медленного движения центра солитона  $X(t)$  эффективный лагранжиан имеет вид

$$L_{\text{eff}}(X, \dot{X}) = \frac{1}{2} M_{\text{sol}}[\theta] |\dot{X}|^2 - M_{\text{sol}}[\theta] \Phi_N(X), \quad (15)$$

где  $\Phi_N$  — ньютоновский потенциал, связанный со спектральным потенциалом  $\phi$ .

Вариация действия по  $X(t)$  даёт уравнение

$$M_{\text{sol}}[\theta] \ddot{X} = -M_{\text{sol}}[\theta] \nabla \Phi_N(X), \quad (16)$$

из которого следует, что ускорение свободного падения

$$\ddot{X} = -\nabla \Phi_N(X)$$

не зависит от величины  $M_{\text{sol}}[\theta]$ . Таким образом, *инертная* и *гравитационная* масса совпадают и задаются одним и тем же функционалом  $M_{\text{sol}}[\theta]$ .

**Закон топологической квантизации массы.** Топологический вклад массы имеет вид

$$M_{\text{top}}[G_\theta] = \sum_i \mu_i K_i[G_\theta], \quad (17)$$

где  $K_i$  — целочисленные топологические инварианты конфигурации, а  $\mu_i$  — соответствующие «массы квантов» этих инвариантов.

При непрерывных деформациях солитона, не меняющих топологический класс  $G_\theta$  и сохраняющих локализованность спектра, величины  $K_i$  и, следовательно,  $M_{\text{top}}$  остаются постоянными. Дискретное изменение топологии приводит к дискретному изменению массы. Это даёт естественный механизм квантизации масс устойчивых солитонных объектов (элементарных частиц, атомных ядер и т.д.).

## 1.15 Геометрическая таблица атомов как следствие солитонной модели

Изначально геометрическая таблица атомов формулировалась как отдельный постулат. В более строгой версии она рассматривается как результат вариационного принципа и геометико-спектральной классификации устойчивых конфигураций Среды.

**Определение геометрического атома.** Для элемента с атомным номером  $Z$  рассматривается множество солитонных конфигураций  $C_Z$ , допускающих  $Z$  эффективных портов связывания с остальной Средой. Вводится функционал

$$F_{\text{atom}}[\theta] = F_{\text{levels}}[\theta] + F_{\text{geom}}[G_\theta], \quad (18)$$

где

- $F_{\text{levels}}$  — функционал, сравнивающий спектральные линии оператора  $\hat{H}[\theta]$  с экспериментальными уровнями данного элемента;
- $F_{\text{geom}}$  — функционал геометрической/топологической структуры ядра (сложность, симметрия, дерево связей и др.).

*Геометрическим атомом* элемента  $Z$  называется любая конфигурация  $\theta_Z \in C_Z$ , являющаяся локальным минимумом  $F_{\text{atom}}[\theta]$  при фиксированном  $Z$ .

**Закон валентных портов.** Валентность элемента определяется числом устойчивых портов в конфигурации  $\theta_Z$ : локальных направлений в  $\theta_Z$  и в карте  $\rho(\omega, x; \theta_Z)$ , в которых возможно устойчивое резонансное связывание с другими солитонами. Число портов и их ориентация задают основные классы валентностей и геометрии связей (terminator, bridge, hub, inert) в геометрической таблице.

**Закон геометрического периода.** При росте  $Z$  и переходе к следующим «периодам» минимизирующие конфигурации  $G_{\theta_Z}$  образуют квази-периодические семейства. Внутри одного семейства существенно меняется масштаб и внутреннее «переплетение» графа, но тип портов и их пространственная ориентация повторяются. Это приводит к ролевому периодическому закону: элементы лежат в блоках с повторяющимися ролями (terminator, bridge, hub, inert) при переходе от одного периода к другому.

**Закон спектральной изовалентности.** Если для двух элементов  $Z_1$  и  $Z_2$  конфигурации  $\theta_{Z_1}$  и  $\theta_{Z_2}$  имеют одинаковый набор портов и близкие значения функционалов  $F_{\text{levels}}$  и  $F_{\text{geom}}$ , то их валентное поведение и роль в сетях Среды практически совпадают, несмотря на различие в  $Z$ . Такие элементы образуют пары (или кластеры) *геометрических близнецов* и естественным образом объясняют изовалентную замену и повторяемость химических свойств в периодической таблице.

Таким образом, геометрическая таблица атомов в данной модели является не исходным постулатом, а *эмерджентным следствием* солитонного описания Среды и вариационного принципа для функционала  $F_{\text{atom}}$ .

## 1.16 Спектральная электроотрицательность и геометрические близнецы

В рамках геометрической таблицы атомов особую роль играет *геометрико-спектральная электроотрицательность*. В этом подразделе формализуются определения и выводятся строгие следствия для пар элементов типа Li–Na, F–Cl и других «геометрических близнецов».

**Определения.** Пусть для элемента  $Z$  задан прототип геометрического атома в виде графа  $G_Z$  с числом вершин  $V_Z$ , рёбер  $E_Z$  и портов  $p_Z > 0$ . Определим цикломатическое число

$$\mu_Z = E_Z - V_Z + 1 \quad (19)$$

и геометрический функционал

$$F_{\text{geom}}(Z) = a \mu_Z + b s_Z + c p_Z, \quad (20)$$

где  $s_Z$  — численная мера асимметрии (symmetry\_score), а  $a, b, c > 0$  — фиксированные коэффициенты модели.

Номер периода элемента обозначим через  $n(Z) \in \{1, 2, 3, \dots\}$ . Тогда *энергия порта* в режиме с периодическим масштабированием (v2/v4) задаётся формулой

$$E_{\text{port}}(Z) = \frac{F_{\text{geom}}(Z)}{p_Z} n(Z)^{-k}, \quad (21)$$

где  $k > 0$  — общий показатель ослабления энергии порта с ростом номера периода. Геометрическая электроотрицательность определяется как

$$\chi_{\text{geom}}(Z) = \alpha E_{\text{port}}(Z), \quad (22)$$

где  $\alpha > 0$  — калибровочный коэффициент.

В спектральной версии (режим v4\_full) вводится эффективный спектральный сдвиг

$$\varepsilon_{\text{eff}}(Z) = \varepsilon_{\text{spec}}(Z) + \lambda_{\varepsilon} \varepsilon_Z, \quad (23)$$

где  $\varepsilon_{\text{spec}}(Z)$  — спектральный параметр графа (например, первая ненулевая собственная величина лапласиана), а  $\varepsilon_Z$  — геометрический сдвиг прототипа.

Средний спектральный потенциал Среды задаётся как

$$\mu_{\text{env}}^{\text{spec}} = \langle \varepsilon_{\text{spec}}(Z) \rangle_{\text{ne inert}}, \quad (24)$$

а отклонение

$$\Delta_Z^{\text{spec}} = \varepsilon_{\text{eff}}(Z) - \mu_{\text{env}}^{\text{spec}}. \quad (25)$$

На основе этих величин реализуется кусочная формула для *спектральной электроотрицательности*  $\chi_{\text{spec}}(Z)$ : вне «нейтрального окна»  $|\Delta_Z^{\text{spec}}| \leq \varepsilon_{\text{neutral}}$  знак  $\chi_{\text{spec}}$  задаётся знаком  $\Delta_Z^{\text{spec}}$  (донор/акцептор), а модуль связан с  $\chi_{\text{geom}}$  с учётом донорного демпфирования.

**Теорема 1 (масштабирование  $\chi_{\text{geom}}$  по периоду).** Пусть даны два прототипа  $Z_1$  и  $Z_2$  такие, что:

1. Геометрические функционалы и порты совпадают:

$$F_{\text{geom}}(Z_1) = F_{\text{geom}}(Z_2), \quad p_{Z_1} = p_{Z_2} > 0.$$

2. Номера периодов различаются:

$$n_1 = n(Z_1), \quad n_2 = n(Z_2), \quad n_1 \neq n_2.$$

Тогда для геометрической электроотрицательности справедливо строгое соотношение

$$\frac{\chi_{\text{geom}}(Z_2)}{\chi_{\text{geom}}(Z_1)} = \left( \frac{n_2}{n_1} \right)^{-k}. \quad (26)$$

**Доказательство.** Из определения энергии порта имеем

$$E_{\text{port}}(Z_i) = \frac{F_{\text{geom}}(Z_i)}{p_{Z_i}} n_i^{-k}, \quad i = 1, 2.$$

При  $F_{\text{geom}}(Z_1) = F_{\text{geom}}(Z_2)$  и  $p_{Z_1} = p_{Z_2}$  получаем

$$\frac{E_{\text{port}}(Z_2)}{E_{\text{port}}(Z_1)} = \left( \frac{n_2}{n_1} \right)^{-k}.$$

Умножая обе части на один и тот же коэффициент  $\alpha$ , получаем утверждение теоремы для  $\chi_{\text{geom}} = \alpha E_{\text{port}}$ .  $\square$

**Следствие 1 (геометрические близнецы Li–Na, Be–Mg, ..., F–Cl).** В таблице прототипов для элементов Li–Ne и Na–Ar выбираются такие графы  $G_Z$ , что для пар

$$\text{Li–Na, Be–Mg, B–Al, C–Si, N–P, O–S, F–Cl}$$

выполняются условия теоремы: геометрический функционал  $F_{\text{geom}}$  и число портов  $p_Z$  совпадают, а номер периода отличается на единицу ( $n_2 = n_1 + 1$ ).

Отсюда автоматически следует, что для каждой такой пары

$$\frac{\chi_{\text{geom}}(Z_{\text{нижний}})}{\chi_{\text{geom}}(Z_{\text{верхний}})} = \left( \frac{n_{\text{нижний}}}{n_{\text{верхний}}} \right)^{-k},$$

то есть элементы являются *геометрическими близнецами*: они имеют одинаковую топологию портов и ролей, но различаются масштабом геометрической электроотрицательности.

**Закон спектрального масштабирования электроотрицательности.** В режиме v4\_full спектральная электроотрицательность  $\chi_{\text{spec}}(Z)$  отличается от  $\chi_{\text{geom}}(Z)$  только знаковыми и ослабляющими факторами, зависящими от  $\Delta_Z^{\text{spec}} = \varepsilon_{\text{eff}}(Z) - \mu_{\text{env}}^{\text{spec}}$  и роли (donor / acceptor / center).

Для пар геометрических близнецов  $Z_1, Z_2$  при достаточно малом изменении эффективного сдвига  $\varepsilon_{\text{eff}}$  между периодами выполняется приближённое соотношение

$$\frac{\chi_{\text{spec}}(Z_2)}{\chi_{\text{spec}}(Z_1)} \approx \left( \frac{n_2}{n_1} \right)^{-k}, \quad (27)$$

а знак  $\chi_{\text{spec}}$  остаётся неизменным (оба элемента в паре выступают либо донорами, либо акцепторами, либо слабыми центрами).

Эта закономерность даёт *спектральный закон твинов*: элементы с одинаковой геометрией портов и близкими спектральными параметрами, но с разными номерами периодов, имеют электроотрицательности, масштабируемые по простому степенному закону. Именно этот эффект лежит в основе наблюдаемой изовалентной заменяемости пар Li–Na, Be–Mg, ..., F–Cl в химических соединениях и кристаллических структурах.

## 1.17 Постулат о вычислимости

Любое утверждение, относящееся к «физике» модели, должно быть в принципе вычислимо через оператор  $\hat{H}[\theta]$ , спектральные функции, потенциал  $\phi(x)$  и заданные функционалы. Остальное относится к гипотезам и дорожной карте.

Практически это означает:

- если величину нельзя выразить через комбинацию  $\rho_{\text{spec}}, \phi, \rho(\omega; \theta), \rho(\omega, x; \theta), M_{\text{sol}}, F_{\text{atom}}$  и связанных с ними операторов и функционалов, то она не входит в ядро модели v0.1;
- все ключевые конструкции должны быть реализуемы в виде программных модулей (см. Часть VI);
- документ остаётся *самодостаточным*: для построения прототипа программного комплекса не требуется обращаться к другим теориям и внешним постулатам.

## 2 Фоновое пространство и физическая среда

В предыдущей главе были сформулированы постулаты модели. Здесь мы чуть более подробно и технически аккуратно раскрываем три ключевые составляющие:

- геометрию фонового пространства  $X$ ;
- качественные свойства физической Среды, заполняющей  $X$ ;
- роль параметра времени  $t$  как параметра эволюции состояний.

Задача этой главы — не вводить новые постулаты, а подготовить рабочие определения и обозначения, которые далее будут использованы в спектральном и вычислительном описании.



## 2.1 Евклидово пространство

Фоновое пространство фиксируется как трёхмерное евклидово пространство:

$$X \simeq \mathbb{R}^3, \quad (28)$$

с декартовыми координатами  $x = (x^1, x^2, x^3)$  и стандартной метрикой

$$\bar{g}_{ij} = \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j, \\ 0, & i \neq j. \end{cases} \quad (29)$$

Далее мы будем опускать верхние/нижние индексы, так как в евклидовой метрике это несущественно.

Расстояние между двумя точками  $x, y \in X$  задаётся нормой

$$|x - y| = \sqrt{(x^1 - y^1)^2 + (x^2 - y^2)^2 + (x^3 - y^3)^2}, \quad (30)$$

объём элементарного параллелепипеда:

$$d^3x = dx^1 dx^2 dx^3. \quad (31)$$

Дифференциальные операторы мы будем понимать в стандартном смысле:

$$\nabla f(x) = \left( \frac{\partial f}{\partial x^1}, \frac{\partial f}{\partial x^2}, \frac{\partial f}{\partial x^3} \right), \quad (32)$$

$$\operatorname{div} v(x) = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial v^i}{\partial x^i}, \quad (33)$$

$$\Delta f(x) = \operatorname{div}(\nabla f(x)) = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2 f}{\partial (x^i)^2}. \quad (34)$$

Важно подчеркнуть: в рамках данной модели эти определения *никогда* не модифицируются. Нет никакой динамической метрики, нет «кривизны» пространства. Всё «движется и меняется» не геометрия  $X$ , а состояние Среды, заполняющей  $X$ .

## 2.2 Физическая Среда

Под **Средой** мы понимаем единую физическую субстанцию, которая заполняет всё пространство  $X$  и является носителем всех процессов:

- распространения волн;
- образования солитонов и узлов;
- взаимодействий, которые мы интерпретируем как гравитацию, электромагнетизм и т.п.

На уровне  $v0.1$  мы задаём Среду не через «микроскопические кирпичики», а через её эффективные свойства:

1. **Непрерывность.** В каждой точке  $x$  Среда имеет определённое локальное состояние; между точками нет пустот, где «ничего нет».
2. **Колебательность.** Малые возмущения вокруг некоторого фоновое состояния порождают волны, распространяющиеся с конечной скоростью. В простейшем приближении можно думать о продольных и поперечных модах, но общее описание оставляем спектральным.
3. **Нелинейность.** При достаточно больших амплитудах и/или на определённых частотах Среда ведёт себя нелинейно, что позволяет существовать устойчивым локализованным структурам (солитонам, вихрям).
4. **Спектральность.** Для каждого участка пространства и каждого масштаба времени можно говорить о распределении амплитуд по частотам. Именно это распределение и будет основным объектом спектрального описания.
5. **Предпочтительная система отсчёта.** Покой Среды фиксирует выделенную систему отсчёта. Скорости процессов (солитонов, волн, объектов) измеряются относительно покоя Среды. В рамках этой модели нет принципа относительности, который делал бы все инерциальные системы физически равноправными.

Таким образом, все динамические и статические эффекты в модели должны быть сведены к изменениям состояния этой Среды во времени и пространстве.

## 2.3 Время как параметр протекания процессов

Время  $t$  не входит в геометрию пространства, но входит в описание эволюции состояний Среды.

Мы рассматриваем семейство состояний

$$\mathcal{S}(t) = \{\rho_{\text{spec}}(\omega, x, t), \text{ солитоны и их параметры, } \dots\}, \quad (35)$$

где  $t \in \mathbb{R}$  — эволюционный параметр.

Физический смысл времени задаётся через *сравнение процессов*:

- локальный солитон может выполнять квазипериодическое движение (колебания), характеризующееся собственной частотой  $\omega_{\text{clock}}$ ;
- за интервал от  $t_1$  до  $t_2$  солитон совершит  $N \approx \omega_{\text{clock}}(t_*) (t_2 - t_1) / 2\pi$  циклов, где  $t_*$  — некоторый промежуточный момент;
- сравнивая количество циклов разных процессов, мы получаем относительное «замедление» или «ускорение» их хода.

Если в разных областях пространства Среда имеет различное спектральное состояние, то собственные частоты солитонов в этих областях будут отличаться. Это и даёт эффекты, которые обычно описываются как «замедление времени в гравитационном поле» или «частотный сдвиг». В нашей картине время не «гнётся» и не «растягивается» — изменяются характерные частоты процессов из-за изменения спектра Среды.

### 3 Спектральное состояние Среды

В качестве основного описания состояния Среды мы используем её **локальную спектральную плотность**. Для каждой точки  $x \in X \simeq \mathbb{R}^3$ , момента эволюционного параметра  $t$  и частоты  $\omega$  задаётся неотрицательная функция

$$\rho_{\text{spec}}(\omega, x, t) \geq 0, \quad (36)$$

которая показывает, насколько сильно в данной области пространства возбуждены режимы колебаний с частотами в окрестности  $\omega$ .

Интегральная спектральная “мощность” в точке  $x$  определяется как

$$I_{\text{tot}}(x, t) = \int_{\Omega} \rho_{\text{spec}}(\omega, x, t) d\omega,$$

где  $\Omega$  — рабочий диапазон частот Среды. Эта величина сама по себе ещё не разделяет вклад продольных и поперечных мод и не подходит для непосредственного описания гравитации.

#### 3.1 Продольный и поперечный спектральные каналы

Спектральная плотность удобно разлагается на два канала:

$$\rho_{\text{spec}}(\omega, x, t) = \rho_L(\omega, x, t) + \rho_T(\omega, x, t), \quad (37)$$

где

- $\rho_L(\omega, x, t)$  — вклад продольных (давленческих) мод Среды;
- $\rho_T(\omega, x, t)$  — вклад поперечных (вихревых, электромагнитного типа) мод.

Физическая установка модели v0.1:

- **Гравитационные** эффекты связываются прежде всего с продольным каналом  $\rho_L$ ;
- **Электромагнитные и радиационные** эффекты описываются поперечным каналом  $\rho_T$ .

Поэтому далее мы будем строить гравитационный потенциал не из полной  $\rho_{\text{spec}}$ , а именно из  $\rho_L$ .

#### 3.2 Гравитационно значимая продольная мощность

Определим **гравитационно значимую продольную мощность** Среды в точке  $x$  как спектрально взвешенный интеграл по продольному каналу:

$$I_{\text{grav}}(x, t) = \int_{\Omega} \alpha_L(\omega) \rho_L(\omega, x, t) d\omega, \quad (38)$$

где

- $\alpha_L(\omega)$  — весовая функция чувствительности продольных мод к гравитационным эффектам;
- в минимальной версии модели v0.1 можно полагать  $\alpha_L(\omega) \equiv 1$ , то есть все продольные частоты вносят одинаковый вклад.

Интуитивно  $I_{\text{grav}}(x, t)$  играет роль “жёсткости” Среды в продольном канале: чем больше значение  $I_{\text{grav}}$ , тем труднее деформировать Среду продольной волной в данной области.

### 3.3 Спектральный потенциал

Спектральный потенциал определяется как логарифмический функционал от  $I_{\text{grav}}$ :

$$\phi(x, t) = -\ln I_{\text{grav}}(x, t) + \text{const}, \quad (39)$$

где константа выбирается так, чтобы в выбранном фоновом состоянии Среды (например, “далеко от всех солитонов”) потенциал принимал фиксированное опорное значение  $\phi_\infty$ .

Такое определение отражает две идеи:

- логарифм переводит *мультипликативные* изменения спектра (усиление/ослабление мод) в *аддитивные* изменения потенциала;
- падение  $I_{\text{grav}}$  (спектральная “яма” в продольном канале) приводит к росту  $\phi(x)$  и, как будет показано в Части IV, к появлению эффективного поля притяжения.

В дальнейшем гравитационное ускорение пробных солитонов будет определяться через градиент спектрального потенциала  $\phi(x)$ , а связь  $\phi$  с ньютоновским потенциалом  $\Phi_N$  и с частотами локальных “часов” будет подробно разобрана в разделе 4.

## 4 Гравитация как эффект спектра

В Части II был введён спектральный потенциал Среды  $\phi(x, t)$  через продольную спектральную мощность  $I_{\text{grav}}(x, t)$  (см. раздел 3). В данной секции мы опишем, как именно конфигурация солитонов порождает поле  $\phi(x)$ , и как через него появляются стандартные гравитационные эффекты: притяжение, изменение частот “часов” и гравитационный красный сдвиг.

### 4.1 Солитоны как источники продольной спектральной ямы

Пусть в Среде локализовано несколько устойчивых солитонных объектов (ядра, планеты и т.п.), задаваемых параметрами  $\theta_1, \dots, \theta_N$  и топологиями  $G_1, \dots, G_N$ . Каждый такой объект деформирует продольный спектр Среды, создавая локальную “яму” в  $\rho_L(\omega, x)$ :

$$\rho_L(\omega, x) = \rho_L^{\text{vac}}(\omega) + \sum_{j=1}^N \delta\rho_L^{(j)}(\omega, x; \theta_j), \quad (40)$$

где

- $\rho_L^{\text{vac}}(\omega)$  — спектральная плотность продольных мод в фоновой (квазиоднородной) Среде;
- $\delta\rho_L^{(j)}$  — вклад  $j$ -го солитона, локализованный в окрестности  $x_j$  и зависящий от его внутренней структуры.

Соответствующая гравитационно значимая мощность  $I_{\text{grav}}(x)$  из (38) принимает вид

$$I_{\text{grav}}(x) = I_{\text{vac}} + \sum_{j=1}^N \delta I_{\text{grav}}^{(j)}(x), \quad (41)$$

где

$$I_{\text{vac}} = \int_{\Omega} \alpha_L(\omega) \rho_L^{\text{vac}}(\omega) d\omega$$

и  $\delta I_{\text{grav}}^{(j)}(x)$  локализованы около  $x_j$ .

В отсутствие солитонов  $I_{\text{grav}}(x) \equiv I_{\text{vac}}$ , а спектральный потенциал  $\phi(x)$  из (39) равен некоторой константе  $\phi_{\infty}$ . Наличие солитонов создаёт пространственно неоднородное поле  $\phi(x)$  и, как следствие, эффективное притяжение.

## 4.2 Эффективное уравнение для спектрального потенциала

В полном виде уравнение, связывающее  $\phi$  и деформации спектра, должно выводиться из вариационного принципа для Среды. В версии v0.1 мы используем *эффективный анзац*, вдохновлённый спектральными уравнениями Монахова:

$$\Delta\phi(x) \approx \kappa \left[ Q_{\text{matter}}(x) - \langle Q_{\text{vac}} \rangle \right], \quad (42)$$

где

- $\Delta$  — лапласиан по координатам  $x$  в евклидовом пространстве  $X$ ;
- $Q_{\text{matter}}(x)$  — эффективная плотность “спектрального источника”, описывающая совокупное влияние всех солитонов;
- $\langle Q_{\text{vac}} \rangle$  — фоновый вклад вакуумного спектра;
- $\kappa$  — коэффициент, определяемый калибровкой по макроскопическим данным.

В слабопольном режиме и для медленно движущихся массивных солитонов (планет, звёзд) удобно параметризовать  $Q_{\text{matter}}(x)$  через эффективную массовую плотность  $\rho_{\text{mass}}(x)$ :

$$Q_{\text{matter}}(x) - \langle Q_{\text{vac}} \rangle \approx 4\pi G_{\text{eff}} \rho_{\text{mass}}(x),$$

и уравнение (42) переходит в ньютоновский вид:

$$\Delta\phi(x) \approx 4\pi G_{\text{eff}} \rho_{\text{mass}}(x). \quad (43)$$

Это соотношение следует понимать как *эффективное приближение* для больших масштабов и слабых полей. Параметр  $G_{\text{eff}}$  калибруется так, чтобы воспроизводился стандартный ньютоновский закон в солнечной системе.

## 4.3 Связь спектрального потенциала с ньютоновским

Для связи с привычной формой гравитационного потенциала введём ньютоновский потенциал  $\Phi_N(x)$  как линейную масштабировку  $\phi(x)$  относительно фонового значения  $\phi_{\infty}$ :

$$\Phi_N(x) := c^2(\phi(x) - \phi_{\infty}), \quad (44)$$

где  $c$  — скорость поперечных волн (света) в Среде.

Тогда в слабопольном режиме

$$|\phi(x) - \phi_{\infty}| \ll 1$$

разность потенциалов между двумя точками  $x_1$  и  $x_2$  записывается как

$$\frac{\Delta\Phi_N}{c^2} = \Phi_N(x_2) - \Phi_N(x_1) = \phi(x_2) - \phi(x_1) = \Delta\phi. \quad (45)$$

Подстановка (44) в (43) даёт стандартное ньютоновское уравнение

$$\Delta\Phi_N(x) \approx 4\pi G_{\text{eff}} \rho_{\text{mass}}(x),$$

так что классический потенциал  $\Phi_N$  появляется как *удобная репараметризация* спектрального потенциала  $\phi$ .

#### 4.4 Частоты локальных процессов и гравитационный сдвиг

Любой устойчивый локальный солитон (атом, ядро, макроосциллятор), используемый как “часы”, характеризуется набором собственных частот  $\{f_k\}$ , которые зависят от спектрального потенциала Среды в точке размещения солитона. В линейной аппроксимации можно записать:

$$\frac{\Delta f_k}{f_k} \approx \alpha_k \Delta\phi, \quad (46)$$

где  $\Delta\phi$  — разность потенциалов между двумя положениями солитона, а коэффициент  $\alpha_k$  зависит от типа перехода.

Экспериментальная калибровка (по солнечному красному сдвигу, эксперименту Паунда–Рибки и точным атомным часам) показывает, что для широкого класса переходов в слабопольном режиме можно положить

$$\alpha_k \approx 1,$$

и формула (46) принимает универсальный вид:

$$\frac{\Delta f}{f} \approx \Delta\phi = \frac{\Delta\Phi_N}{c^2}. \quad (47)$$

Таким образом, *гравитационный красный сдвиг и изменение хода часов* в данной модели трактуются как прямое следствие изменения спектрального потенциала Среды. Никакого геометрического “замедления времени” в четырёхмерном пространстве-времени не требуется: “время” здесь — это просто частота внутренних солитонных процессов, а она зависит от  $\phi(x)$ .

В следующем разделе будут рассмотрены конкретные экспериментальные сценарии (солнечный красный сдвиг, эксперимент Паунда–Рибки, GPS и Hafele–Keating), в которых формула (47) используется для численной оценки наблюдаемых эффектов.

## 5 Экспериментальные проверки спектральной гравитации

В этом разделе показывается, что простая связь

$$\frac{\Delta f}{f} \approx \Delta\phi = \frac{\Delta\Phi_N}{c^2} \quad (48)$$

между спектральным потенциалом  $\phi(x)$ , ньютоновским потенциалом  $\Phi_N(x)$  и относительным сдвигом частоты локальных “часов” достаточна для описания классических гравитационных эффектов, обычно приводимых как подтверждение релятивистских теорий.

Здесь  $\Delta\Phi_N = \Phi_N(x_2) - \Phi_N(x_1)$  — разность ньютоновского потенциала между двумя уровнями Среды, а  $c$  — скорость поперечных волн (света). Никакого четырёхмерного пространства-времени в этой формуле не требуется: она связывает *частоты солитонных процессов* непосредственно с *спектральным состоянием Среды*.

Дополнительно, для движущихся систем в слабопольном режиме используется универсальная спектрально-кинетическая поправка

$$\left(\frac{\Delta f}{f}\right)_{\text{kin}} \approx -\frac{v^2}{2c^2}, \quad (49)$$

которая выражает тот факт, что часть энергии солитона переносится в макроскопическое движение со скоростью  $v$ , и остаётся меньше доступной для внутренних колебаний (см. обсуждение в Части I).

В совокупности (48) и (49) дают все необходимые поправки для классических экспериментов.

## 5.1 Солнечный гравитационный красный сдвиг

Рассмотрим фотон (или любой солитонный “часовой” процесс), перемещающийся из фотосферы Солнца в далёкую область, где гравитационный потенциал можно считать нулевым. В ньютоновском приближении гравитационный потенциал на поверхности Солнца

$$\Phi_N(R_\odot) \approx -\frac{GM_\odot}{R_\odot},$$

где  $M_\odot$  и  $R_\odot$  — масса и радиус Солнца.

Подставляя в (48) с  $x_1$  на поверхности,  $x_2$  в удалённой области, получаем относительный сдвиг частоты:

$$\left(\frac{\Delta f}{f}\right)_\odot \approx \frac{\Delta\Phi_N}{c^2} = \frac{0 - \Phi_N(R_\odot)}{c^2} = \frac{GM_\odot}{R_\odot c^2}. \quad (50)$$

Численно это даёт величину порядка

$$\frac{GM_\odot}{R_\odot c^2} \sim 2 \cdot 10^{-6},$$

то есть линия спектра, измеренная вдали от Солнца, должна быть смещена к красному на  $\sim 2$  части на миллион от своей локальной частоты в фотосфере. Это совпадает с величиной эффекта, наблюдаемого в солнечных спектральных линиях.

В нашей интерпретации это не “растяжение времени” вблизи Солнца, а изменение спектрального потенциала Среды: продольная спектральная яма вблизи массивного солитона (Солнца) смещает все локальные частоты вниз.

## 5.2 Эксперимент Паунда–Рибки

Эксперимент Паунда–Рибки измеряет гравитационный красный сдвиг гамма-квантов на высоте порядка  $H \approx 22,5$  м в гравитационном поле Земли. В нашем описании задача сводится к сравнению ньютоновского потенциала на высотах  $z$  и  $z + H$  над поверхностью.

Для малых высот  $H \ll R_{\oplus}$  (радиус Земли) можно использовать линейную аппроксимацию:

$$\Phi_N(z + H) - \Phi_N(z) \approx g H,$$

где  $g$  — ускорение свободного падения.

Тогда из (48)

$$\left(\frac{\Delta f}{f}\right)_{\text{PR}} \approx \frac{gH}{c^2}. \quad (51)$$

Подставляя  $g \approx 9,8 \text{ м/с}^2$ ,  $H \approx 22,5 \text{ м}$  и  $c \approx 3 \cdot 10^8 \text{ м/с}$ , получаем

$$\frac{\Delta f}{f} \sim \frac{9,8 \cdot 22,5}{(3 \cdot 10^8)^2} \sim 2,5 \cdot 10^{-15},$$

что совпадает по порядку величины с реально измеренным эффектом.

С точки зрения спектральной модели, это означает, что продольный спектральный потенциал Среды на высоте  $H$  чуть слабее, чем у пола лаборатории, и локальные частоты “часов” (ядра железа в источнике гамма-квантов) немного отличаются. Лазер/резонанс здесь выступает как чувствительный индикатор разности  $\phi$  на двух высотах.

### 5.3 Часы на орбитах: GPS и Hafele–Keating

Для часов на спутниках (GPS) и в экспериментах Hafele–Keating существенными становятся как *гравитационные*, так и *кинетические* поправки.

Рассмотрим пример атомных часов на спутнике высотой  $H$  над Землёй с орбитальной скоростью  $v_{\text{orb}}$ . Относительно часов на поверхности Земли (скорость  $v_{\text{surf}}$  в простейшем приближении можно принять как линейную скорость вращения Земли) суммарный сдвиг частоты в модели v0.1 записывается как

$$\left(\frac{\Delta f}{f}\right)_{\text{tot}} \approx \underbrace{\frac{\Delta \Phi_N}{c^2}}_{\text{гравитационный вклад}} + \underbrace{\left[-\frac{v_{\text{orb}}^2}{2c^2} + \frac{v_{\text{surf}}^2}{2c^2}\right]}_{\text{кинетический вклад}}, \quad (52)$$

где

$$\Delta \Phi_N = \Phi_N(\text{орбита}) - \Phi_N(\text{поверхность}) \approx GM_{\oplus} \left( \frac{1}{R_{\oplus} + H} - \frac{1}{R_{\oplus}} \right).$$

Первый член соответствует тому, что на орбите потенциал менее отрицательный (слабее спектральная “яма”), и часы должны идти быстрее (положительный вклад). Второй член отражает перераспределение энергии солитона: часть энергии, приходящаяся на массовый центр часов, уходит в макроскопическое движение со скоростью  $v$ , и для внутренних колебаний остаётся чуть меньше — это даёт отрицательный вклад, пропорциональный  $v^2$ .

Аналогичные выражения применимы к часам в опытах Hafele–Keating, где часы летели на самолётах на высоте нескольких километров и с дозвуковой скоростью. Знак и величина эффекта определяются балансом между повышением по потенциалу (гравитационный вклад) и кинетическим замедлением.

Важно, что ни в формуле (52), ни в интерпретации эффектов не требуется вводить 4-мерные геометрические конструкции. Все поправки выводятся из:

- спектрального потенциала  $\phi(x)$  (через  $\Delta \Phi_N/c^2$ );
- кинетической поправки  $-v^2/(2c^2)$ , трактуемой как изменение доступной энергии для внутренних мод солитона.



## 5.4 Вывод: слабопольные тесты без релятивистской геометрии

Перечисленные эффекты — солнечный гравитационный сдвиг, эксперимент Паунда–Рибки, коррекции для GPS и Hafele–Keating — традиционно интерпретируются как подтверждение релятивистских теорий (ОТО/СТО). В рамках данной модели они полностью укладываются в следующую минимальную схему:

- продольный спектральный канал Среды задаёт скалярный спектральный потенциал  $\phi(x)$ ;
- локальные частоты всех устойчивых солитонных процессов масштабируются с  $\phi(x)$  по закону  $\Delta f/f \approx \Delta\phi$ ;
- ньютоновский потенциал  $\Phi_N$  появляется как удобная размерная репараметризация  $\phi$  через  $\Phi_N = c^2(\phi - \phi_\infty)$ ;
- кинетические эффекты движения с малой скоростью  $v \ll c$  дают поправку порядка  $-v^2/(2c^2)$ .

Таким образом, все классические слабопольные тесты гравитации можно рассматривать как проверки *спектральной чувствительности* локальных часов к состоянию Среды, а не как подтверждение геометризации пространства-времени.

## 6 Плотность состояний и функция Грина

В предыдущих разделах мы описали Среду через локальную спектральную плотность  $\rho_{\text{spec}}(\omega, x, t)$  и спектральный потенциал  $\phi(x, t)$ . Теперь введём формализм, который позволяет вычислять спектральные характеристики для конкретной конфигурации солитонов и сразу переводится в численный код: оператор малых колебаний, функцию Грина и плотность состояний (DOS/LDOS).

### 6.1 Оператор малых колебаний

Для фиксированной конфигурации  $\theta$  (набор солитонов и их положений) мы рассматриваем малые отклонения Среды от стационарного состояния. В линейном приближении такие отклонения описываются оператором

$$\hat{H}[\theta] \psi = -\nabla \cdot (c^2(\theta, x) \nabla \psi(x)) + V_{\text{eff}}(\theta, x) \psi(x), \quad (53)$$

где

- $c(\theta, x)$  — эффективная “жесткость” или скорость распространения волн в Среде (может отличаться вблизи солитонов и вдали от них);
- $V_{\text{eff}}(\theta, x)$  — эффективный потенциал, описывающий локальные особенности структуры Среды.

В численной реализации  $\hat{H}[\theta]$  задаётся как матрица, полученная дискретизацией выражения (53) на сетке или в подходящем базисе.

Собственные функции и собственные значения оператора удовлетворяют

$$\hat{H}[\theta] \psi_n(x) = \omega_n^2 \psi_n(x), \quad (54)$$

где  $\omega_n$  — собственные частоты колебаний Среды вокруг заданной конфигурации  $\theta$ .

## 6.2 Функция Грина

Функция Грина  $\hat{G}(z)$  для оператора  $\hat{H}[\theta]$  определяется как операторное решение

$$\hat{G}(z) = (z - \hat{H}[\theta])^{-1}, \quad z \in \mathbb{C}. \quad (55)$$

В координатном представлении это даёт ядро  $G(x, x'; z)$ , удовлетворяющее

$$(z - \hat{H}[\theta]) G(x, x'; z) = \delta(x - x'). \quad (56)$$

Спектральное разложение по собственным функциям (54) имеет вид

$$G(x, x'; z) = \sum_n \frac{\psi_n(x) \psi_n^*(x')}{z - \omega_n^2}, \quad (57)$$

что явно связывает функцию Грина со спектром  $\{\omega_n\}$ .

В дискретном численном базисе (конечная сетка или конечные элементы)  $\hat{H}[\theta]$  заменяется матрицей  $H$ , а  $\hat{G}(z)$  — матрицей

$$G(z) = (z\mathbb{I} - H)^{-1}.$$

## 6.3 Глобальная плотность состояний (DOS)

Глобальная плотность состояний  $\rho(\omega; \theta)$  показывает, сколько мод колебаний приходится на единичный интервал частот в окрестности  $\omega$  для данной конфигурации  $\theta$ .

Стандартное выражение через функцию Грина:

$$\rho(\omega; \theta) = -\frac{1}{\pi} \Im \text{Tr} G(\omega^2 + i0^+), \quad (58)$$

где  $G(\omega^2 + i0^+)$  — оператор Грина, взятый на физическом листе спектра, а  $\text{Tr}$  — след по пространственным координатам (или по дискретному базису).

Если спектр дискретен, это сводится к сумме по собственным значениям:

$$\rho(\omega; \theta) = \sum_n \delta(\omega - \omega_n). \quad (59)$$

В численных расчётах дельта-функции заменяются сглаженными пиками (например, гауссианами или лоренцианами) с малой шириной.

Особое значение имеют *сингулярности Ван Хофа* — точки спектра, где  $\rho(\omega)$  резко возрастает или формально становится бесконечной. Вблизи таких частот групповая скорость волновых пакетов стремится к нулю, и энергия Среды локализуется. В модели спектральной физики именно такие частоты рассматриваются как естественные кандидаты для устойчивых “частицеподобных” мод.

## 6.4 Локальная плотность состояний (LDOS)

Локальная плотность состояний  $\rho(\omega, x; \theta)$  даёт вклад в DOS в окрестности точки  $x$ :

$$\rho(\omega, x; \theta) = -\frac{1}{\pi} \Im G(x, x; \omega^2 + i0^+). \quad (60)$$

Используя спектральное разложение (57), можно записать

$$\rho(\omega, x; \theta) = \sum_n |\psi_n(x)|^2 \delta(\omega - \omega_n), \quad (61)$$

то есть LDOS показывает, как собственные моды распределены по пространству.

В интерпретации данной модели:

- $\rho(\omega; \theta)$  описывает *общую спектральную структуру* конфигурации Среды (какие частоты вообще доступны);
- $\rho(\omega, x; \theta)$  показывает *геометрию и форму* конфигурации: изоповерхности постоянной LDOS при фиксированной  $\omega$  визуализируют “орбитали” и узлы солитонной структуры.

Именно LDOS лежит в основе того, что в Главе V мы называем *геометрическим атомом*: набор устойчивых пучностей LDOS вокруг ядра задаёт “форму атома” и число возможных направлений связей (валентность).

## 6.5 Численное вычисление DOS/LDOS

В численной реализации в рамках программного комплекса предполагается следующее:

- выбрать дискретизацию пространства (сетку) и задать матрицу оператора  $H$  по формуле типа (53);
- для набора частот  $\omega$  вычислять матричную функцию Грина

$$G(\omega^2 + i\eta) = (\omega^2 + i\eta - H)^{-1},$$

где  $\eta$  — малая положительная ширина сглаживания;

- строить глобальную DOS по (58) и LDOS по диагональным элементам  $G_{ii}$  согласно (60);
- использовать полученные  $\rho(\omega; \theta)$  и  $\rho(\omega, x; \theta)$  в качестве входа для определения функционалов  $F_{\text{levels}}$ ,  $F_{\text{geom}}$  и эффективной массы (см. Части IV и V).

Таким образом, формализм функции Грина и плотности состояний обеспечивает прямой мост от конфигурации Среды  $\theta$  к наблюдаемым спектральным характеристикам и служит математическим “двигателем” всей модели.

В предыдущем разделе речь шла о спектре Среды как целого. Теперь переходим к описанию спектра *локализованных конфигураций* — солитонов и атомов. Для этого используется стандартный аппарат плотности состояний (DOS) и локальной плотности состояний (LDOS), выражаемых через функцию Грина оператора малых колебаний.

## 6.6 Глобальная и локальная DOS

Пусть задана солитонная конфигурация  $\theta$  (например, кандидат на роль протона, ядра или атома). Ей сопоставлен линейный оператор малых колебаний  $\hat{H}[\theta]$ , действующий на подходящем функциональном пространстве (например, на пространстве скалярных функций на  $X$  или на конечномерной аппроксимации сетки).

Глобальная плотность состояний (DOS) определяется как

$$\rho(\omega; \theta) = -\frac{1}{\pi} \Im \text{Tr} (\omega + i0^+ - \hat{H}[\theta])^{-1}, \quad (62)$$

где  $\Im$  обозначает мнимую часть, а  $\text{Tr}$  — след оператора.

Интуитивно  $\rho(\omega; \theta) d\omega$  показывает, сколько мод колебаний системы с конфигурацией  $\theta$  приходится на малый интервал частот  $[\omega, \omega + d\omega]$ .

Локальная плотность состояний (LDOS) в точке  $x$ :

$$\rho(\omega, x; \theta) = -\frac{1}{\pi} \Im G(x, x; \omega + i0^+; \theta), \quad (63)$$

где  $G(x, x'; z)$  — кернел функции Грина оператора  $\hat{H}[\theta]$  (см. ниже).

LDOS позволяет визуализировать форму мод: уровни и «орбитали» в атомоподобных конфигурациях — это, по сути, изоповерхности  $\rho(\omega, x; \theta)$  при фиксированных  $\omega$ .

## 6.7 Представление через функцию Грина

Функция Грина для оператора  $\hat{H}[\theta]$  определяется как операторное выражение

$$G(z; \theta) = (z - \hat{H}[\theta])^{-1}, \quad (64)$$

где  $z \in \mathbb{C}$  — комплексный спектральный параметр.

В координатном представлении:

$$(z - \hat{H}[\theta]) G(x, x'; z; \theta) = \delta(x - x'), \quad (65)$$

где  $\delta(x - x')$  — трёхмерная дельта-функция.

Тогда глобальная DOS (62) и локальная LDOS (63) записываются как:

$$\rho(\omega; \theta) = -\frac{1}{\pi} \Im \int_X G(x, x; \omega + i0^+; \theta) d^3x, \quad (66)$$

$$\rho(\omega, x; \theta) = -\frac{1}{\pi} \Im G(x, x; \omega + i0^+; \theta). \quad (67)$$

На практике в численном коде  $\hat{H}[\theta]$  дискретизуется, и оператор  $(\omega + i\eta - \hat{H}[\theta])^{-1}$  реализуется в виде обращения матрицы (или использования итеративных методов), а след считается по конечномерному пространству.

## 6.8 Сингулярности Ван Хова и устойчивые моды

В твердотельной физике хорошо известно, что при определённых условиях на графиках DOS появляются характерные пики и сингулярности (сингулярности Ван Хова). Они связаны с тем, что групповая скорость волн вблизи определённых частот обращается в нуль, и моды «застаиваются» в спектре.

В нашей модели важны следующие моменты:

- Пики  $\rho(\omega; \theta)$  указывают на частоты, где система имеет аномально много мод (плотная упаковка уровней).
- Если нелинейность Среды такова, что на этих частотах возможно образование устойчивых локализованных структур, то комбинация «пик DOS + нелинейный захват» даёт кандидата на устойчивый солитон (частицу).
- В этом смысле *масса* и *устойчивость* солитона зависят не только от общей энергии, но и от структуры DOS вокруг определённых частот.

Именно поэтому глобальная DOS и LDOS входят в функционалы типа  $M_{\text{spec}}[\rho(\omega; \theta)]$  и  $F_{\text{levels}}[\theta]$ , которые далее используются при построении Геометрической Таблицы.

## 6.9 Роль эффективной размерности

Плотность состояний чувствительна к эффективной размерности системы:

- в 3D DOS обычно растёт как  $\sqrt{\omega}$  (для простых моделей);
- в 2D она может быть примерно постоянной по частоте;
- в 1D появляются выраженные сингулярности;
- в 0D (квантовая точка) спектр становится дискретным (дельта-пики).

Для нашей картины это важно по нескольким причинам:

- атом как целое по отношению к внешнему полю можно рассматривать как 0D-объект — его спектр выглядит линейчатым (дискретные уровни);
- внутренние «нити» и «кольца» внутри солитонных конфигураций (ядер, протонов) ближе к 1D-структурам, что делает их DOS богатыми на сингулярности;
- поверхностные слои и границы кристаллических структур ближе к 2D и дают свои особенности спектра.

При построении Геометрической Таблицы и моделировании материалов важно учитывать, какая часть конфигурации ведёт себя эффективно как 0D, 1D, 2D или 3D объект — это напрямую влияет на форму DOS и, следовательно, на функционалы энергии, массы и устойчивости.

В дальнейшем, при задании конкретных операторов  $\hat{H}[\theta]$  и геометрии конфигураций, эта связь между топологией, эффективной размерностью и спектральными свойствами будет использоваться для оценки стабильности и классификации атомоподобных структур.

## 7 Солитоны среды как материальные объекты

В этой части мы уточняем, что именно в модели называется *солитоном*, как вводятся энергетические и массовые характеристики таких объектов и каким образом они взаимодействуют со Средой через спектральное описание.

## 7.1 Определение солитона

Интуитивно солитон — это «узел» или «структура» в Среде, которая:

- локализована в пространстве (имеет конечный характерный размер);
- существует сколь угодно долго по параметру  $t$  без распада (на естественных масштабах времени задачи);
- восстанавливает форму после малых возмущений.

Формально в рамках v0.1 мы будем использовать следующее рабочее определение.

**Определение.** Солитонная конфигурация  $\theta$  — это класс состояний Среды  $\mathcal{S}(t)$ , для которого:

1. существует область пространства  $U \subset X$  с характерным размером  $R_\theta$ , вне которой спектральное состояние почти совпадает с фоновым:

$$\rho_{\text{spec}}(\omega, x, t) \approx \rho_{\text{spec}}^{(0)}(\omega, x), \quad x \notin U;$$

2. внутри  $U$  спектральное состояние стационарно (или квазистационарно) при эволюции по  $t$ ;
3. малые возмущения состояния в  $U$  не приводят к разрушению конфигурации, а либо затухают, либо переводят солитон в близкое состояние того же класса.

Конфигурация описывается набором параметров  $\theta$  (масштабы, ориентации, внутренние деформации) и топологией  $G_\theta$ , которая будет введена в разделе 8.

## 7.2 Энергия и эффективная масса

Солитон — это не «шарик», а особое спектральное состояние Среды. Поэтому естественно определять его энергию и массу через спектральные характеристики.

Пусть  $\rho(\omega; \theta)$  — глобальная плотность состояний (DOS) для оператора малых колебаний  $\hat{H}[\theta]$  вокруг конфигурации (см. раздел 1.12). Введём *спектральный энергетический функционал*:

$$E_{\text{spec}}[\theta] = \int_{\Omega_E} w_E(\omega) \rho(\omega; \theta) d\omega, \quad (68)$$

где:

- $\Omega_E$  — рабочий диапазон частот для энергетического расчёта;
- $w_E(\omega)$  — весовая функция (например, пропорциональная  $\omega$ ,  $\omega^2$  или более сложная), выбираемая так, чтобы воспроизводить известные энергетические шкалы.

Топологический вклад в энергию/массу задаётся функционалом  $E_{\text{top}}[G_\theta]$ , зависящим от топологической структуры графа/узла (см. раздел 8.3). В простейшем варианте можно рассматривать линейную комбинацию топологических инвариантов:

$$E_{\text{top}}[G_\theta] = \alpha_{\text{cross}} C_{\text{cross}}[G_\theta] + \alpha_{\text{link}} C_{\text{link}}[G_\theta] + \dots, \quad (69)$$

где  $C_{\text{cross}}$  — число пересечений (или его обобщение),  $C_{\text{link}}$  — характеристика сцеплений и т.п.

Полная энергия солитонной конфигурации:

$$E_{\text{sol}}[\theta] = E_{\text{spec}}[\theta] + E_{\text{top}}[G_\theta] + E_{\text{bg}}, \quad (70)$$

где  $E_{\text{bg}}$  — выбранный уровень фоновой энергии Среды, который можно считать нулём отсчёта (или калибровать по эталонному солитону).

**Эффективная масса** определяется как масштабная характеристика, пропорциональная энергии:

$$M_{\text{sol}}[\theta] = \kappa_E E_{\text{sol}}[\theta], \quad (71)$$

где  $\kappa_E$  — калибровочный коэффициент, фиксируемый по одному или нескольким эталонным объектам (например, по протону). В разделе 1.13 эта схема была сформулирована в более общей форме; здесь мы даём конкретный энергетический анзац для v0.1.

### 7.3 Взаимодействие солитонов со Средой

Солитон не «плавает в пустоте» — он изменяет местное состояние Среды, а именно её спектральную плотность. Пусть фон задаётся  $\rho_{\text{spec}}^{(0)}(\omega, x)$ , а присутствие солитона описывается добавкой  $\delta\rho_{\text{spec}}(\omega, x; \theta)$ :

$$\rho_{\text{spec}}(\omega, x; \theta) = \rho_{\text{spec}}^{(0)}(\omega, x) + \delta\rho_{\text{spec}}(\omega, x; \theta). \quad (72)$$

Соответствующее изменение гравитационно значимой мощности:

$$I_{\text{grav}}(x; \theta) = I_{\text{grav}}^{(0)}(x) + \delta I_{\text{grav}}(x; \theta), \quad (73)$$

где  $I_{\text{grav}}$  определяется формулой (38). Это вносит вклад в спектральный потенциал:

$$\phi(x; \theta) = \phi^{(0)}(x) + \delta\phi(x; \theta), \quad (74)$$

и, соответственно, в поле ускорений  $\mathbf{g}(x; \theta)$ .

Интерпретация:

- солитон создаёт *спектральную тень* — область, где  $I_{\text{grav}}$  отклоняется от фонового значения;
- другие солитоны чувствуют градиент  $\phi$  и испытывают «приталкивающее» действие поля  $\mathbf{g} = -\nabla\phi$ ;
- таким образом реализуется эффективное притяжение или отталкивание без введения отдельного «гравитационного поля» как сущности.

С точки зрения вычислений, взаимодействие солитонов сводится к:

1. заданию фона  $\rho_{\text{spec}}^{(0)}(\omega, x)$ ;
2. суммированию вкладов  $\delta\rho_{\text{spec}}$  от всех присутствующих конфигураций  $\theta_i$ ;
3. вычислению  $\phi(x)$  и  $\mathbf{g}(x)$  по формулам (39), (??);
4. интегрированию траекторий пробных тел в поле  $\mathbf{g}(x)$ .

При необходимости более детального описания можно также учитывать обратное влияние спектрального поля на параметры самих солитонов (перестройка внутреннего спектра в сильных полях), но в v0.1 это можно считать задачей жёлтой/красной зоны.

## 8 Топологическое описание (узлы и графы)

Для того чтобы различать и классифицировать солитонные конфигурации, недостаточно только спектральных характеристик. Важную роль играет их *топологическая структура*: как «переплетены» линии тока, вихревые кольца, «нити» Среды. В этом разделе мы вводим графовое и узловое описание конфигураций.

### 8.1 Графовое представление конфигураций

Солитонную конфигурацию  $\theta$  будем сопоставлять конечному графу  $G_\theta$ , вложенному в пространство  $X$ :

$$G_\theta = (V_\theta, E_\theta, \iota_\theta), \quad (75)$$

где:

- $V_\theta$  — множество вершин (узлов) конфигурации;
- $E_\theta$  — множество рёбер (связей) между вершинами;
- $\iota_\theta : G_\theta \rightarrow X$  — вложение графа в пространство (каждой вершине и ребру сопоставляется положение в  $\mathbb{R}^3$ ).

Интерпретация:

- вершины могут соответствовать «узлам концентрации» энергии, точкам пересечения или разветвления вихревых линий;
- рёбра — участкам «нитей» или «трубок» Среды, по которым протекает поток импульса/фазы;
- замкнутые циклы в графе в трёхмерном пространстве могут представлять вихревые кольца или замкнутые линии тока.

Физически разные конфигурации могут иметь одинаковый спектр  $\rho(\omega; \theta)$ , но разные графы  $G_\theta$  и, как следствие, разные топологические инварианты. Поэтому  $G_\theta$  является необходимой частью описания «типа» солитона.



## 8.2 Узлы, ссылки, деревья

Особый интерес представляют следующие типы топологических структур:

- **узлы** — замкнутые кривые в  $X$ , которые можно рассматривать как образы вложений окружности  $S^1 \hookrightarrow X$ ;
- **ссылки** — конечные объединения замкнутых кривых (несколько узлов, которые могут быть взаимно сцеплены);
- **деревья** — ациклические графы (без замкнутых циклов), описывающие ветвящуюся структуру (например, рост кристалла или молекулярного скелета).

В различных физически значимых конфигурациях могут сочетаться узлы и деревья: замкнутые вихревые кольца (узлы) соединены «ветками» (деревьям подобными структурами), формируя сложные каркасы.

Для целей Геометрической Таблицы атомов особенно важны:

- простые узлы (трилистник, тороидальные узлы малой сложности) — кандидаты на роль базовых «кирпичиков» (протоно- и нейтроно- подобные структуры);
- деревья конечной глубины — модели роста молекул и кристаллов;
- комбинации нескольких узлов, сцепленных определённым образом (ссылки) — модели сложных ядер.

## 8.3 Число пересечений и другие инварианты

Для классификации узлов и графов существует множество топологических инвариантов. В контексте спектральной физики нас интересуют прежде всего те, которые:

- допускают более или менее эффективное вычисление (алгоритмически реализуемы);
- естественно входят в энергетические и массовые функционалы;
- хорошо коррелируют с физической «сложностью» конфигурации.

Минимальный набор инвариантов, который используется в v0.1:

### 1. Число пересечений $C_{\text{cross}}[G_\theta]$ .

Для плоской диаграммы узла это минимальное число пересечений при всех возможных проекциях и деформациях диаграммы. В общем трёхмерном случае можно работать либо с конкретной диаграммой, либо использовать обобщённые определения (см. специализированные источники). В модели достаточно иметь алгоритм, который для заданного вложения  $G_\theta \hookrightarrow X$  возвращает оценку  $C_{\text{cross}}$ .

### 2. Число компонент $C_{\text{comp}}[G_\theta]$ .

Количество связных компонент (сколько «кусков» содержит конфигурация).

### 3. Степенная характеристика дерева $C_{\text{tree}}[G_\theta]$ .

Для деревьев и деревообразных частей графа — распределение степеней вершин, глубина дерева, параметры ветвления.

### 4. Сцепление и **linking number** для ссылок.

Для конфигураций с несколькими замкнутыми контурами — меры сцепления (linking number, возможно обобщённые).

Эти инварианты могут комбинироваться в одном функционале, например как в (69). В более продвинутых версиях модели сюда могут входить и более сложные объекты (аналоги инвариантов типа Громова–Виттена для графов), но в v0.1 достаточно ограничиться вычислимыми комбинаторными характеристиками.

Важно, что:

- топологические инварианты *не зависят* от гладких деформаций конфигурации и поэтому отражают «структурную» сложность;
- они позволяют естественно ренализировать избыточно сложные конфигурации при поиске минимумов функционалов (чем сложнее узел, тем выше  $E_{\text{top}}$  и  $M_{\text{top}}$ );
- симметричные конфигурации (похожие на тетраэдр, куб и т.п.) часто оказываются локальными минимумами при заданном числе компонент и пересечений, что хорошо согласуется с идеей Геометрической Таблицы.

## 9 Общая структура функционала состояния

В предыдущих разделах мы ввели три ключевых объекта:

- конфигурацию Среды и солитонов, задаваемую набором параметров  $\theta$  (положения узлов, масштабы, форма графа  $G_\theta$  и т.п.);
- спектральные характеристики этой конфигурации: глобальную DOS  $\rho(\omega; \theta)$  и локальную LDOS  $\rho(\omega, x; \theta)$ , вычисляемые через оператор  $\hat{H}[\theta]$  и функцию Грина;
- спектральный гравитационный потенциал  $\phi(x)$ , связанный с интегральной мощностью спектра.

Теперь формализуем главный объект модели — *функционал состояния*, который определяет, какие конфигурации считаются устойчивыми и физически реализуемыми.

### 9.1 Конфигурация и функционал

Под конфигурацией будем понимать пару

$$\Theta = (\theta, G_\theta),$$

где  $\theta$  — непрерывные параметры (координаты, размеры, углы), а  $G_\theta$  — дискретная топологическая структура (граф/узел), описывающая связность солитона.

Для каждой конфигурации  $\Theta$  определяется численное значение функционала

$$F[\Theta] = F_{\text{levels}}[\Theta] + F_{\text{geom}}[\Theta] + F_{\text{add}}[\Theta], \quad (76)$$

где:

- $F_{\text{levels}}$  — **спектральный функционал**, измеряющий, насколько спектр  $\rho(\omega; \Theta)$  и набор характерных частот  $\{\omega_i(\Theta)\}$  соответствует желаемому “атомному” шаблону;
- $F_{\text{geom}}$  — **геометрический/топологический функционал**, учитывающий сложность, симметрию и комбинаторику графа  $G_\Theta$ ;
- $F_{\text{add}}$  — возможные дополнительные вклады (например, регуляризация, мягкие ограничения на параметры, связь с массой и гравитацией); в базовой версии модели этот вклад можно считать нулевым или включать его в отдельный энергетический функционал (см. соответствующий раздел).

Физически реализуемые конфигурации — это локальные минимумы  $F[\Theta]$  на пространстве допустимых  $\Theta$ . В частности:

- конфигурация, претендующая на роль *отдельной частицы* (например, протона), должна быть минимумом  $F$  среди всех конфигураций с заданными квантами “заряда” и другими глобальными ограничениями;
- конфигурация, претендующая на роль *ядра атома* или *геометрического атома* (см. Часть V), должна минимизировать  $F$  в классе конфигураций с фиксированным “номером элемента”  $Z$  (количеством элементарных узлов/вихрей).

## 9.2 Роль спектральной и геометрической частей

Интуитивно:

- $F_{\text{levels}}$  отвечает за *динамику*: правильный набор частот, отсутствие разрушительных низкочастотных резонансов, соответствие экспериментальным спектрам (там, где они известны).
- $F_{\text{geom}}$  отвечает за *форму*: излишняя топологическая запутанность и нарушение симметрии увеличивают  $F_{\text{geom}}$ , а простые и высокосимметричные конфигурации (тетраэдр, куб и т.п.) его минимизируют.

Такая разбивка важна и концептуально, и вычислительно:

- спектральная часть  $F_{\text{levels}}$  опирается на расчёт DOS/LDOS и может быть реализована поверх любого достаточно общего численного решателя для  $\hat{H}[\theta]$ ;
- геометрическая часть  $F_{\text{geom}}$  зависит только от графа и относительного расположения узлов (без обращения к полному спектру), поэтому её можно считать быстрее и использовать, например, на ранних этапах грубой оптимизации.

В дальнейшем, в Части IV, мы уточняем вид  $F_{\text{levels}}$  и  $F_{\text{geom}}$ , а в разделе о массе и энергетике связываем минимумы  $F$  с эффективной массой и гравитационным вкладом солитонной конфигурации.

## 10 Спектральный функционал $F_{\text{levels}}$

Введём явный вид спектральной части функционала  $F_{\text{levels}}[\Theta]$ , используя формализм DOS/LDOS из раздела 6.

Пусть для конфигурации  $\Theta$  мы можем численно вычислить:

- глобальную плотность состояний  $\rho(\omega; \Theta)$ ;
- набор выделенных собственных частот  $\{\omega_i(\Theta)\}$  (например, пиков DOS);
- локальную плотность состояний  $\rho(\omega, x; \Theta)$  в окрестности ядра и вдоль возможных направлений связей.

Кроме того, для многих систем (водород, гелий, некоторые переходы лёгких элементов) известен *экспериментальный* или *целевой* набор частот  $\{\omega_i^{\text{exp}}\}$  и/или форма спектра  $\rho_{\text{target}}(\omega)$ .

### 10.1 Составляющие $F_{\text{levels}}$

Спектральный функционал будем строить как сумму трёх вкладов:

$$F_{\text{levels}}[\Theta] = F_{\text{match}}[\Theta] + F_{\text{res}}[\Theta] + F_{\text{band}}[\Theta]. \quad (77)$$

Интерпретация:

- $F_{\text{match}}$  — штраф за несовпадение ключевых частот с целевыми (экспериментальными или теоретическими);
- $F_{\text{res}}$  — штраф за “опасные” низкопорядковые резонансы между модами;
- $F_{\text{band}}$  — штраф/поощрение за общий вид DOS (наличие или отсутствие зазоров, ширина полос и т.п.).

### 10.2 Совпадение с целевыми частотами

Если для данного класса объектов (например, атом водорода) известен набор частот  $\{\omega_i^{\text{exp}}\}$ , то естественный вклад:

$$F_{\text{match}}[\Theta] = \sum_i \alpha_i (\omega_i(\Theta) - \omega_i^{\text{exp}})^2, \quad (78)$$

где  $\alpha_i$  — веса, отражающие важность соответствующего перехода.

В ситуациях, когда известен не набор линий, а только “грубая” форма спектра (например, наличие полосы или зазора в кристалле), можно использовать интегральное сравнение:

$$F_{\text{match}}[\Theta] = \int W_{\text{match}}(\omega) (\rho(\omega; \Theta) - \rho_{\text{target}}(\omega))^2 d\omega, \quad (79)$$

где  $W_{\text{match}}(\omega)$  выделяет важные интервалы частот.

### 10.3 Подавление низкопорядочных резонансов

Нелинейная Среда склонна переходить в режим катастрофических биений, если для пары мод  $\omega_i, \omega_j$  выполняются низкопорядочные соотношения вида  $m\omega_i \approx n\omega_j$  с малыми целыми  $m, n$ . Такие резонансы снижают устойчивость конфигурации.

Эмпирический штраф можно задать в виде

$$F_{\text{res}}[\Theta] = \sum_{i < j} \sum_{m, n \in \mathcal{R}} \beta_{ij}^{(m, n)} \exp\left(-\frac{(m\omega_i(\Theta) - n\omega_j(\Theta))^2}{\Delta_{mn}^2}\right), \quad (80)$$

где:

- $\mathcal{R}$  — набор низкопорядковых пар  $(m, n)$ , например  $\{(1, 1), (1, 2), (2, 3), \dots\}$ ;
- $\beta_{ij}^{(m, n)}$  — веса (чем более опасен резонанс, тем больше вес);
- $\Delta_{mn}$  — допустимая “зона неопределённости” вокруг точного резонанса.

При таком определении  $F_{\text{res}}$  минимизируется, когда все низкопорядковые комбинации частот оказываются *достаточно далеко* от точных резонансов, что соответствует устойчивому спектру без сильных биений.

### 10.4 Грубая форма спектра и полосы

Для некоторых классов конфигураций важно наличие *зазоров* (частотных областей с малой DOS) или, наоборот, непрерывных полос. Это можно учитывать через дополнительный функционал  $F_{\text{band}}$ .

Простейший вариант: поощрять заданную форму DOS в выбранных диапазонах. Например, для “атомоподобного” объекта мы можем требовать, чтобы глобальная DOS имела отчётливый набор узких пиков и малую фоновую плотность между ними:

$$F_{\text{band}}[\Theta] = \int W_{\text{gap}}(\omega) \rho(\omega; \Theta) d\omega, \quad (81)$$

где  $W_{\text{gap}}(\omega)$  ненулевая в диапазонах, где желателен минимальный фон (“зазоры”). Тогда уменьшение фоновой DOS в этих областях уменьшает  $F_{\text{band}}$  и повышает устойчивость.

Аналогично, для кристаллических структур можно строить  $F_{\text{band}}$  так, чтобы поощрять наличие непрерывных полос в заданных диапазонах.

### 10.5 Использование $F_{\text{levels}}$ в оптимизации

При численной оптимизации конфигурации  $\Theta$  (например, при поиске геометрии прототипа атома) спектральный функционал  $F_{\text{levels}}$

- вычисляется на каждом шаге по текущему спектру  $\{\omega_i(\Theta)\}$  и DOS  $\rho(\omega; \Theta)$ ;
- даёт градиент (или псевдоградиент), который можно использовать в алгоритмах типа Symmetric Newton для корректировки параметров  $\theta$ ;
- служит универсальной мерой “насколько данная конфигурация похожа на правильный атом/солитон” с точки зрения спектра.

В совокупности с геометрическим функционалом  $F_{\text{geom}}$  (см. следующий раздел) это позволяет сформулировать чисто вычислимую задачу: найти такие  $\Theta$ , для которых  $F[\Theta]$  минимален, и тем самым задать геометрические прототипы атомов и других устойчивых объектов спектральной Среды.

## 11 Геометрический функционал $F_{\text{geom}}$

Геометрический функционал  $F_{\text{geom}}$  описывает “цену” той или иной топологии и формы солитонной конфигурации. В отличие от спектральной части  $F_{\text{levels}}$ , здесь мы работаем только с:

- графом/узлом  $G_{\Theta}$  (связность, число петель, ветвистость);
- относительными положениями ключевых вершин (узлов солитона);
- выбранной группой симметрии (тетраэдрическая, кубическая и т.п.).

Цель  $F_{\text{geom}}$  — формализовать интуицию:

- чем сложнее и хаотичнее топология, тем выше энергетическая “стоимость” конфигурации;
- конфигурации, близкие к правильным многогранникам (тетраэдр, куб, икосаэдр), автоматически предпочтительнее тех, где форма произвольно искажена;
- рост молекул и кристаллов подчиняется вероятностным законам самоорганизации (“модель ёлки”).

Ниже задаём явный анзац для всех этих эффектов.

### 11.1 Комбинаторная сложность (crossing number)

Пусть  $G_{\Theta}$  — граф или узел, задающий “каркас” солитона. Обозначим через  $C_{\text{cross}}[G_{\Theta}]$  его эффективное *число пересечений* (crossing number) или более общий топологический инвариант, полученный по схеме Мендозы (см. Приложение С).

Тогда естественный вклад сложности:

$$F_{\text{complex}}[G_{\Theta}] = \alpha_{\text{cross}} C_{\text{cross}}[G_{\Theta}], \quad (82)$$

где  $\alpha_{\text{cross}} > 0$  — коэффициент масштаба.

Интерпретация: лишние закрутки, узлы и хаотичные петли увеличивают  $C_{\text{cross}}$  и, следовательно, повышают  $F_{\text{complex}}$ . Это соответствует идее, что солитоны минимальной энергии должны иметь минимально необходимую топологическую сложность.

### 11.2 Симметрия и платоновы тела

Для геометрии ядра важно не только количество связей, но и их расположение в пространстве. Мы вводим *целевую* группу симметрии  $H$  (например, тетраэдрическая  $T_d$  для углерода, кубическая  $O_h$  для кислорода/неона) и определяем меру отклонения от идеальной формы.

Пусть  $\{v_k\}$  — набор направлений “портов” (связей) в конфигурации  $\Theta$ , а  $\{u_k\}$  — соответствующие идеальные направления в выбранном платоновом теле. Тогда можно ввести

$$F_{\text{sym}}[\Theta] = \alpha_{\text{sym}} \sum_k (1 - v_k \cdot u_k), \quad (83)$$

где произведение  $\mathbf{v}_k \cdot \mathbf{u}_k$  — косинус угла между реальным и идеальным направлением, а  $\alpha_{\text{sym}} > 0$  — вес.

При точном совпадении с идеальной формой все скалярные произведения стремятся к 1 и  $F_{\text{sym}}$  минимален. Произвольные искажения формы увеличивают  $F_{\text{sym}}$ .

В более общем варианте можно использовать инварианты вида

$$F_{\text{sym}}[\Theta] = \alpha_{\text{sym}} \|T(\Theta) - T_{\text{ideal}}\|^2,$$

где  $T$  — тензор квадрупольного или более высокого порядка момента для распределения “портов”, а  $T_{\text{ideal}}$  — соответствующий тензор для идеального многогранника.

### 11.3 Рост деревьев и “ёлка”

Когда речь идёт не об отдельном ядре, а о росте молекул и кристаллов, базовый объект — не один граф  $G_\Theta$ , а *растущее дерево*  $T$  с декорациями (типами атомов и связей).

По теореме “Рождественской ёлки” Мендозы (см. Приложение) распределение расстояний и ветвистости в большом дереве стремится к универсальной форме. Мы используем это в виде штрафа за отклонение от “естественного” режима роста.

Обозначим через  $p_{\text{emp}}(d)$  эмпирическое распределение расстояний/уровней в текущем дереве  $T$ , а через  $F_{\text{tree}}(d)$  — предсказанную предельную функцию вида

$$F_{\text{tree}}(d) = 1 - \exp\left(-2 \sum_{k \geq 0} \gamma_k(d)\right).$$

Тогда естественный функционал:

$$F_{\text{tree}}[T] = \alpha_{\text{tree}} \int W_{\text{tree}}(d) (p_{\text{emp}}(d) - F'_{\text{tree}}(d))^2 dd, \quad (84)$$

где:

- $F'_{\text{tree}}(d)$  — плотность, полученная из  $F_{\text{tree}}(d)$  дифференцированием по  $d$ ;
- $W_{\text{tree}}(d)$  — весовая функция, выделяющая диапазоны расстояний/уровней, важные для данной структуры.

Интуитивно: геометрическая самосборка, соответствующая “естественным” правилам ветвления Среды, даёт малое  $F_{\text{tree}}$ , а искусственные или сильно искажённые структуры — большое.

### 11.4 Итоговый анзац для $F_{\text{geom}}$

Собирая все вклады вместе, получаем рабочий анзац:

$$F_{\text{geom}}[\Theta] = F_{\text{complex}}[G_\Theta] + F_{\text{sym}}[\Theta] + F_{\text{tree}}[T_\Theta], \quad (85)$$

где:

- $F_{\text{complex}}$  задаётся формулой (82) и отвечает за топологическую сложность;
- $F_{\text{sym}}$  задаётся формулой (83) (или её тензорным вариантом) и отвечает за близость к платоновым телам;

- $F_{\text{tree}}$  задаётся формулой (84) и описывает статистику роста деревьев в молекулах/кристаллах (если это вообще актуально для рассматриваемой задачи; в атомном пределе его можно опускать).

В первом приближении для одиночных атомов и простых ядер достаточно первых двух членов ( $F_{\text{complex}} + F_{\text{sym}}$ ). Третий член актуален для моделирования сборки молекул и материалов, но его можно включать по мере развития кода и появления соответствующих задач.

## 12 Масса и энергетический функционал

Теперь свяжем функционалы состояния с эффективной массой и энергией солитонных конфигураций.

Для заданной конфигурации  $\theta$  спектр оператора  $\hat{H}[\theta]$  определяет глобальную плотность состояний  $\rho(\omega; \theta)$ . Интегральный спектральный вклад в энергию можно задать в виде

$$E_{\text{spec}}[\theta] = \int_0^\infty w(\omega) \rho(\omega; \theta) d\omega, \quad (86)$$

где  $w(\omega)$  — весовая функция (аналог «энергии на одно состояние» для данной частоты).

Топологический вклад в энергию/массу зададим через функционал  $\Psi(G_\theta)$ , зависящий от инвариантов узла/графа (числа пересечений, индексов зацепления и т.п.):

$$E_{\text{top}}[G_\theta] = \mu_{\text{top}} \Psi(G_\theta). \quad (87)$$

Эффективная масса солитона:

$$M_{\text{sol}}[\theta] = \frac{1}{c_0^2} \left( E_{\text{spec}}[\theta] + E_{\text{top}}[G_\theta] \right), \quad (88)$$

где  $c_0$  — фиксированная масштабная скорость (характерная скорость распространения волн Среды в базовом состоянии).

В численной реализации можно:

- вычислять  $\rho(\omega; \theta)$  через DOS (по функциям Грина или по собственным значениям дискретизированного  $\hat{H}$ );
- выбирать простые формы  $w(\omega)$  (например,  $w(\omega) \propto \omega$ );
- подбирать  $\mu_{\text{top}}$  и параметры  $\Psi(G_\theta)$  так, чтобы для протона, нейтрона и лёгких ядер получались реалистичные относительные массы.

Таким образом,  $F_{\text{levels}}$  и  $F_{\text{geom}}$  определяют устойчивость и «форму» конфигурации, а  $M_{\text{sol}}$  — её инерционные свойства в динамике.

## 13 Определение геометрического атома

В рамках данной модели **атом** элемента с атомным номером  $Z$  — это устойчивый солитонный объект Среды, описываемый набором параметров  $\theta_Z$  и топологией  $G_{\theta_Z}$ , такой что:



1. он является локальным минимумом атомного функционала

$$F_{\text{atom}}[\theta_Z] = \lambda_{\text{lev}}^{(Z)} F_{\text{levels}}[\theta_Z] + \lambda_{\text{geom}}^{(Z)} F_{\text{geom}}[G_{\theta_Z}], \quad (89)$$

среди конфигураций с данным  $Z$ ;

2. его спектральные характеристики (набор устойчивых частот, структура LDOS) согласуются с наблюдаемыми энергетическими уровнями и типичной химической валентностью элемента;
3. его геометрическая форма (расположение «портов», симметрия ядра и оболочки) допускает наблюдаемые типы связей и кристаллических структур.

Под **портами** будем понимать направления в пространстве, в которых:

- локальная плотность состояний  $\rho(\omega, x; \theta_Z)$  имеет выраженные максимумы на частотах, соответствующих связям;
- геометрически возможна стыковка с другой конфигурацией без сильного роста  $F_{\text{geom}}$ ;
- при «стыковке» двух атомов суммарный функционал  $F_{\text{atom}}^{(1+2)}$  уменьшается или остаётся малым.

Тогда **валентность** элемента в данной среде определяется как количество независимых портов (с учётом симметрии), через которые атом может образовывать устойчивые связи при приемлемом росте  $F_{\text{atom}}$ .

Отдельно важно отметить, что в данной постановке:

- *нет понятия «электронных орбиталей» как отдельных частиц*; вместо этого есть геометрия LDOS вокруг солитона ядра;
- *ядро и «оболочка» рассматриваются как единый солитонный объект*, у которого просто есть разные пространственные зоны концентрации спектра;
- *химические свойства* (валентность, инертность, склонность к образованию цепей и плоскостей) трактуются как следствие формы  $G_{\theta_Z}$  и спектра  $\hat{H}[\theta_Z]$ .

## 14 Мини-таблица H–Ne

В этом разделе фиксируется рабочая гипотеза о геометрических прототипах для первых десяти элементов (H, He, Li, Be, B, C, N, O, F, Ne). Эти прототипы служат начальными приближениями для численной оптимизации  $\theta_Z$  по функционалу (89).

### 14.1 Водород (H)

- **Топология ядра:** один базовый тороидальный узел (простое кольцо или трилистник минимальной сложности).
- **Геометрия:** осесимметричная конфигурация с одним выраженным портом вдоль оси.

- **Валентность:** 1 — один порт, допускающий стыковку с другими узлами.
- **Спектральные требования:**
  - наличие одного основного связанного уровня;
  - простая линейчатая структура при возбуждении.

В численных экспериментах v0.1 водород можно моделировать как минимальный солитон с одним портом, проверяя, что при стыковке двух таких узлов (молекула  $H_2$ ) функционал для пары ниже, чем для двух несвязанных атомов.

## 14.2 Гелий (He)

- **Топология ядра:** два тесно сцепленных тора, образующих максимально замкнутую и симметричную конфигурацию (аналог «двойного тора» или сферы).
- **Геометрия:** практически сферически симметричная конфигурация без выраженных портов.
- **Валентность:** 0 — отсутствие портов, стыковка с другими узлами резко увеличивает  $F_{\text{geom}}$ .
- **Спектральные требования:**
  - высокий энергетический разрыв до первых возбуждённых состояний;
  - отсутствие удобных резонансов для формирования устойчивых связей.

Гелий служит эталоном *замкнутой* геометрической конфигурации: минимум  $F_{\text{geom}}$  при данном числе базовых узлов и соответствующая минимальная химическая активность.

## 14.3 Литий (Li), бериллий (Be), бор (B)

Эти элементы можно рассматривать как «надстройку» над замкнутой гелиевой конфигурацией.

**Литий (Li).**

- **Геометрия:** конфигурация He плюс один дополнительный узел/лопасть, выступающая наружу.
- **Валентность:** 1 — один относительно слабосвязанный внешний порт.
- **Спектрально:** один внешний уровень, легко отдающий энергию (что согласуется с поведением щелочных металлов).

### Бериллий (Be).

- **Геометрия:** два более симметрично расположенных внешних узла на базе He.
- **Валентность:** в простейшей модели 2.
- **Особенность:** тенденция к образованию линейных и плоских структур при минимальном росте  $F_{\text{geom}}$ .

### Бор (B).

- **Геометрия:** три внешних узла в конфигурации, близкой к плоскому тригональному расположению.
- **Валентность:** формально 3, но с выраженной анизотропией портов.
- **Спектрально:** допускает как плоские, так и объёмные структуры с относительно небольшим ростом  $F_{\text{levels}}$ .

В рамках v0.1 эти элементы важны как тесты того, что  $F_{\text{geom}}$  корректно отражает переход от «почти замкнутой» структуры (He) к появлению всё большего числа портов.

## 14.4 Углерод (C), азот (N), кислород (O)

### Углерод (C).

- **Топология ядра:** конфигурация, допускающая расположение четырёх портов, направленных к вершинам тетраэдра.
- **Геометрия:** максимально близкая к тетраэдрической симметрии; ядро и оболочка совместно образуют четырёхпортовый «стыковочный узел».
- **Валентность:** 4 — четыре почти эквивалентных порта.
- **Физический смысл:** углерод является базовым строительным блоком для трёхмерных сетей (органика, кристаллы типа алмаза, графитовые слои).

### Азот (N).

- **Геометрия:** конфигурация, получающаяся из тетраэдрической структуры при перераспределении плотности в пользу трёх портов и возникновении «парного» режима на одном из направлений.
- **Валентность:** эффективно 3 с возможностью образования одной «свободной пары».
- **Спектрально:** спектр и LDOS должны отражать склонность к образованию трёх прочных связей и одной менее связанной зоны.

## Кислород (O).

- **Геометрия:** конфигурация с двумя активными портами и двумя «парами», ориентированными под углом  $\sim 90^\circ$ .
- **Валентность:** 2 с двумя выраженными неспаренными парами (модель «куба без двух вершин»).
- **Физический смысл:** высокая реакционная способность при стыковке, стремление «закрыть» геометрические дыры.

Углерод, азот и кислород образуют триаду, на которой можно проверять, насколько правильно  $F_{\text{levels}}$  и  $F_{\text{geom}}$  описывают переход от четырёхпортовой к трёх- и двумпортовой конфигурации при минимальных изменениях ядра.

## 14.5 Фтор (F) и неон (Ne)

### Фтор (F).

- **Геометрия:** конфигурация, близкая к почти замкнутой (почти куб/двойной тетраэдр), но с одной ярко выраженной «ямой»/портом.
- **Валентность:** 1 — один мощный порт, чрезвычайно «жадный» до стыковки.
- **Физический смысл:** сильный окислитель, стремящийся добрать недостающий «кусочек» до полной геометрической замкнутости.

### Неон (Ne).

- **Геометрия:** полностью замкнутая конфигурация с симметрией, близкой к кубической или двойному тетраэдру.
- **Валентность:** 0 — отсутствие портов; любые попытки стыковки приводят к резкому росту  $F_{\text{geom}}$ .
- **Спектральные требования:** большой энергетический разрыв до первых возбуждённых уровней, спектр инертного газа.

## 14.6 Роль мини-таблицы H–Ne в ТЗ

Мини-таблица H–Ne в данной книге выполняет несколько функций:

- задаёт набор прототипов  $G_{\theta_Z}$ , который можно использовать как начальное приближение для численной оптимизации;
- служит *тестовым полигоном* для функционалов  $F_{\text{levels}}$  и  $F_{\text{geom}}$ : если даже для первых десяти элементов не удаётся воспроизвести базовые спектральные и химические свойства, функционалы требуют доработки;
- образует *концептуальный каркас* Геометрической Таблицы, который затем можно расширять на более тяжёлые элементы, изотопы и кристаллические структуры.

## 15 Черновики: геометрические тезисы для H–Ne

Этот раздел носит черновой характер и фиксирует несколько геометрических тезисов, которые появляются уже на уровне самой простой графовой игрушечной модели для элементов H–Ne. Формально речь идёт о минималистском функционале

$$F_{\text{geom}}(Z) = a \mu(G_Z) + b \text{sym}(G_Z) + c p_Z, \quad (90)$$

где

- $G_Z$  — граф/узел, сопоставленный элементу с атомным номером  $Z$ ;
- $\mu(G_Z)$  — цикломатическое число (эффективная “узловатость”: число независимых циклов);
- $\text{sym}(G_Z)$  — мера нарушения симметрии (чем меньше, тем более симметрична конфигурация);
- $p_Z$  — число геометрических портов (направлений возможных связей);
- $a, b, c > 0$  — численные коэффициенты, калибруемые в игрушечной модели.

Отдельно удобно ввести “геометрическую энергию порта”

$$E_{\text{port}}(Z) = \begin{cases} \frac{F_{\text{geom}}(Z)}{p_Z}, & p_Z > 0, \\ \text{не определено}, & p_Z = 0, \end{cases} \quad (91)$$

которая показывает, сколько геометрической “цены” приходится на один активный порт.

### Тезис 1: геометрическая инертность He и Ne

В рассматриваемой схеме элементам He и Ne сопоставляются конфигурации с нулём портов:

$$p_{\text{He}} = p_{\text{Ne}} = 0,$$

и очень малой величиной  $\text{sym}(G_Z)$  (высокая симметрия). При разумном выборе параметров  $(a, b, c)$  такие конфигурации реализуют локальные минимумы  $F_{\text{geom}}$  в своих периодах по  $Z$ :

- He — минимум среди  $Z = 1, 2$ ;
- Ne — минимум среди  $Z = 3, \dots, 10$ .

Интерпретация:

нулевые порты при высокой симметрии делают геометрическую конфигурацию “замкнутой”: любое появление порта ( $p_Z > 0$ ) или сильная деформация симметрии автоматически повышают  $F_{\text{geom}}$ . В этом смысле He и Ne являются геометрическими аналогами инертных газов.

## Тезис 2: фтор как атом с максимально дорогим портом

Для элементов первого и второго периодов  $Z = 1, \dots, 9$  с  $p_Z > 0$  простая калибровка (например,  $a = 0.5$ ,  $b = 1.0$ ,  $c = 1.5$ ) даёт кластер значений  $E_{\text{port}}(Z)$  в узком интервале порядка 1.7–2.0 (в условных единицах) и одновременно аномально высокое значение для фтора:

$$E_{\text{port}}(\text{F}) \gg E_{\text{port}}(Z), \quad Z \neq \text{F}.$$

Это позволяет трактовать порт фтора как геометрически наиболее “напряжённый”: включение такого порта в связь даёт максимальное относительное снижение  $F_{\text{geom}}$ , и поэтому фтор естественно выступает кандидатом на роль наиболее “жадного” атома периода в смысле тяги к захвату спектральной плотности Среды и образованию связей.

## Тезис 3: углерод как многопортовый строитель сетей

В той же игрушечной модели углерод обладает максимальным числом портов в рассматриваемом наборе элементов:

$$p_{\text{C}} = 4,$$

и при этом минимальной геометрической энергией порта среди всех конфигураций с  $p_Z > 0$ :

$$E_{\text{port}}(\text{C}) = \min_{Z: p_Z > 0} E_{\text{port}}(Z).$$

То есть каждый отдельный порт углерода геометрически “дешёв” (его включение слабо повышает  $F_{\text{geom}}$ ), но суммарная портовая структура богата: четыре направления позволяют строить разветвлённые объёмные и плоские сети. Такая комбинация — малый  $E_{\text{port}}$  при большом  $p_{\text{C}}$  — естественно выделяет углерод как оптимальный элемент для самоорганизации сложных солитонных каркасов в Среде (органических молекул, кристаллических и аморфных сетей).

Эти тезисы пока остаются черновыми: они основаны на одной конкретной игрушечной калибровке и должны рассматриваться как гипотезы, подлежащие проверке более точными спектральными вычислениями и сопоставлением с экспериментальной химией.

## 16 Черновики: геометрия портов и углы связей

В дополнение к числу портов, общей геометрической “цене”  $F_{\text{geom}}$  и энергии одного порта  $E_{\text{port}}$  удобно ввести ещё один слой описания — *геометрию расположения портов*. Речь идёт о том, как Среда выбрасывает направления возможных связей в трёхмерное пространство.

### Геометрический паспорт атома

Для каждого элемента  $Z$  в игрушечной модели мы фиксируем следующий набор характеристик:

- $p_Z$  — число портов (направлений, в которых атом может образовывать устойчивые связи);
- $F_{\text{geom}}(Z)$  — геометрический функционал (сложность + асимметрия + вклад портов);

- $E_{\text{port}}(Z) = F_{\text{geom}}(Z)/p_Z$  при  $p_Z > 0$  — геометрическая “энергия одного порта”;
- `port_geometry(Z)` — тип фигуры портов, один из `linear`, `trigonal`, `tetra`, `pyramidal`, `bent`, `single`, `none`;
- `preferred_angle(Z)` — характерный угол между портами в минимальной конфигурации (в градусах), если он имеет смысл.

В этом языке атом — не точка с квантовыми числами, а узел Среды с конкретной портовой геометрией, уже несущий в себе “любимые” углы связей.

## Геометрическая таблица H–Ne

Для элементов H–Ne портовая геометрия и характерные углы в базовом состоянии задаются в виде

El	$Z$	$p_Z$	геометрия портов	угол, °
H	1	1	single	—
He	2	0	none	—
Li	3	1	single	—
Be	4	2	linear	180.0
B	5	3	trigonal	120.0
C	6	4	tetra	109.5
N	7	3	pyramidal	107.0
O	8	2	bent	104.0
F	9	1	single	—
Ne	10	0	none	—

Интерпретация по группам:

- He, Ne — тип `none`: замкнутые геометрические конфигурации без портов.
- H, Li, F — тип `single`: по одному терминальному порту, естественные “висячие” фрагменты.
- Be — два порта в геометрии `linear`, естественная линейная структура.
- B — три порта в плоской `trigonal`-геометрии (равносторонний треугольник).
- C — четыре порта в `tetra`-геометрии (тетраэдр).
- N — три порта в `pyramidal`-геометрии — “тетраэдр минус один порт”.
- O — два порта в `bent`-геометрии — “тетраэдр минус два порта”.

В последней интерпретации *N* и *O* удобно рассматривать как остатки полной тетраэдрической конфигурации ядра: некоторые направления заняты внутренней структурой (виртуальными портами), а видимые химические порты занимают оставшиеся позиции.

## Любимые фигуры портов и углы связей

Стандартный язык квантовой химии описывает углы связей через гибридизацию ( $sp$ ,  $sp^2$ ,  $sp^3$  и т.п.). В данной модели тот же факт переформулируется чисто геометрически:

углы связей возникают как компромисс между любимой портовой фигурой каждого атома и минимизацией геометрического функционала  $F_{\text{geom}}$ .

Примеры:

- Be (**linear**,  $180^\circ$ ) — два порта на одной прямой минимизируют их взаимное влияние; естественна линейная геометрия.
- B (**trigonal**,  $120^\circ$ ) — три порта в плоскости образуют равносторонний треугольник; отсюда типичная тригонально-плоская геометрия центров бора.
- C (**tetra**,  $109,5^\circ$ ) — четыре порта в вершинах тетраэдра задают максимально однородное распределение направлений в 3D; это геометрическая основа тетраэдрических молекул ( $\text{CH}_4$  и трёхмерных углеродных сетей).
- N (**pyramidal**,  $\sim 107^\circ$ ) — “тетраэдр минус один порт”: три химических направления и один виртуальный; угол слегка меньше тетраэдрического, как в  $\text{NH}_3$ .
- O (**bent**,  $\sim 104^\circ$ ) — “тетраэдр минус два порта”: два активных направления ещё сильнее сближаются; характерный угол близок к наблюдаемому в воде.

## Углы и валентность как следствие портовой геометрии

Даже на уровне H–Ne можно сформулировать минимальное геометрическое правило:

1. число портов  $p_Z$  определяет валентность элемента в данной Среде;
2. тип портовой геометрии  $\text{port\_geometry}(Z)$  задаёт “любимую” пространственную фигуру связей;
3. характерный угол  $\text{preferred\_angle}(Z)$  задаёт естественный диапазон углов, к которому стремятся реальные связи при отсутствии сильных внешних ограничений, поскольку он соответствует минимуму  $F_{\text{geom}}$ .

Нетипичные химические ситуации (напряжённые циклы, гипервалентные центры и др.) можно рассматривать как случаи, когда портовые фигуры одного или нескольких атомов вынуждены отклоняться от своих любимых углов, и рост  $F_{\text{geom}}$  при этом трактовать как геометрический вклад в энергию и нестабильность конфигурации.

## Черновики: геометрическое напряжение углов

В предыдущем разделе портовая геометрия каждого атома была описана через число портов  $p_Z$ , тип фигуры портов  $\text{geom}(Z)$  и характерный “любимый” угол  $\theta_0(Z)$  между портами (линейная, тригональная, тетраэдрическая и т. д.). Это описание относится к изолированному атомному солитону в Среде: его порты занимают те направления, которые минимизируют геометрический функционал  $F_{\text{geom}}(Z)$ .

Когда атомы объединяются в молекулу, внешняя геометрия (кольца, цепочки, кластеры) заставляет порты отклоняться от их предпочтительных ориентаций. В спектрально-геометрическом языке это естественно трактуется как *геометрическое напряжение углов*.



## Модельный угловой вклад в функционал

На уровне простейшей феноменологической модели можно выделить отдельный угловой функционал, зависящий от отклонения фактических углов связей от любимых углов для данного вида атома:

$$F_{\text{angle}}(Z; \{\theta_i\}) = \sum_i k_Z (\theta_i - \theta_0(Z))^2,$$

где

- $\theta_i$  — фактические углы между портами данного атома в конкретной молекулярной конфигурации;
- $\theta_0(Z)$  — любимый угол для элемента  $Z$ , определяемый его портовой геометрией (например,  $\theta_0(\text{C}) \approx 109.5^\circ$  для тетраэдра,  $\theta_0(\text{B}) \approx 120^\circ$  для тригонально-плоской фигуры и т. д.);
- $k_Z$  — эффективный угловой коэффициент жёсткости для данного элемента, зависящий от внутренней структуры его солитона в Среде.

Тогда полный геометрический функционал молекулы можно схематично записать как

$$F_{\text{mol}} = \sum_{\text{атомы } Z} F_{\text{geom}}(Z) + \sum_{\text{углы } (Z,i)} F_{\text{angle}}(Z; \theta_i) + \dots,$$

где многоточие обозначает другие вклады (растяжение связей, торсионные деформации, спектральные эффекты и т. п.).

Сама по себе портовая геометрия задаёт предпочтительную фигуру (линейную, тетраэдрическую, пирамидальную и т. д.), а  $F_{\text{angle}}$  измеряет, насколько сильно конкретная молекула вынуждена эту фигуру деформировать. Рост  $F_{\text{angle}}$  можно интерпретировать как рост внутреннего напряжения и потенциальной энергии, связанной именно с углами.

## Пример: циклопропан как предельный случай углового напряжения

Хорошей тестовой площадкой для углового функционала служат маленькие циклы. Рассмотрим, например, циклопропан: кольцо из трёх углеродных атомов  $\text{C}_3$ . В первом приближении геометрия кольца близка к правильному треугольнику: все углы  $\text{C}-\text{C}-\text{C}$  близки к  $60^\circ$ .

С точки зрения портовой геометрии углерода, изолированный атом  $\text{C}$  имеет четыре порта в тетраэдрической конфигурации, и его любимый угол между связями  $\theta_0(\text{C}) \approx 109.5^\circ$ . В линейных и разветвлённых структурах Среда может разместить эти порты почти тетраэдрически, сохраняя малое  $F_{\text{angle}}$ .

Однако в циклопропане каждый углеродный центр в кольце должен участвовать в образовании двух  $\text{C}-\text{C}$ -связей, образующих угол порядка  $60^\circ$ . С точки зрения описанного выше углового функционала

$$\Delta\theta_{\text{C}_3} \approx 60^\circ - 109.5^\circ \approx -49.5^\circ,$$

и вклад в угловую энергию для *каждого* центра  $\text{C}$  оценивается как

$$F_{\text{angle}}(\text{C}_3) \sim k_{\text{C}} (\Delta\theta_{\text{C}_3})^2,$$

то есть все три углеродных узла испытывают крупное отклонение от своей тетраэдрической фигуры портов.

В терминах Среды это означает, что конфигурация солитонов, реализующая циклопропановое кольцо, несёт значительное геометрическое напряжение: порты углерода вынуждены группироваться существенно плотнее, чем это оптимально для минимизации  $F_{\text{geom}}$ . Рост  $F_{\text{angle}}$  даёт естественную геометрическую интерпретацию химического “напряжения цикла” и повышенной реакционной способности таких маленьких колец.

### Сравнение с большими циклами

Для сравнения, в четырёх- и шестичленных циклах типичные углы ближе к тетраэдрической конфигурации атома углерода:

- в идеализированном  $C_4$ -цикле (квадрат) углы  $\approx 90^\circ$ , что уже значительно ближе к  $109.5^\circ$ , чем  $60^\circ$ ;
- в шестичленном кольце (плоский гексагон) углы  $\approx 120^\circ$ , ещё ближе к тетраэдрическому значению, особенно с учётом возможных трёхмерных деформаций (скамья, кресло).

В модели это соответствует убыванию углового вклада  $F_{\text{angle}}$  при росте размера кольца: чем ближе фактические углы к любимому  $\theta_0(Z)$ , тем меньше геометрическое напряжение и тем дешевле по  $F_{\text{geom}}$  реализовать данную молекулярную конфигурацию.

Таким образом, угловой функционал  $F_{\text{angle}}$  служит мостом между портовой геометрией изолированных солитонов и привычными химическими понятиями *напряжённых циклов, энергии деформации и углового напряжения*. Вся геометрическая “химия напряжения” в этой картине сводится к систематическому учёту того, насколько далеко конкретная молекула заставляет свои атомы уйти от их любимых фигур портов и углов.

## 17 Черновики: геометрические роли элементов и периодичность

В предыдущих разделах были введены геометрический функционал атома  $F_{\text{geom}}(Z)$ , число портов  $p_Z$ , энергия порта  $E_{\text{port}}(Z)$ , а также портовая геометрия  $\text{geom}(Z)$  и характерный угол  $\theta_0(Z)$ . Эти величины задают локальную структуру солитона Среды, соответствующего атому  $Z$ .

На следующем шаге удобно ввести более грубую категориальную классификацию элементов — *геометрические роли* атомов в сетях Среды. Эта классификация позволяет читать периодическую структуру не только как спектральную (по  $Z$ ), но и как сетевую (по типам узлов в возникающих конфигурациях).

### Геометрические роли: inert, terminator, bridge, hub

Будем выделять четыре базовые геометрические роли атомов на основе числа портов  $p_Z$ , их геометрии и энергии порта  $E_{\text{port}}(Z)$ :

- **inert** — атомы без портов ( $p_Z = 0$ ). В спектрально–геометрическом описании это замкнутые, геометрически минимальные конфигурации: любые связи требуют открития портов и роста  $F_{\text{geom}}$ . Примеры: He, Ne, Ar.

- **terminator** — атомы с одним портом ( $p_Z = 1$ ). Они естественным образом занимают концевые позиции в цепях и кластерах. При крупном  $E_{\text{port}}$  такой порт ведёт себя как “жёсткий акцептор” (например, F, Cl), при меньшем  $E_{\text{port}}$  — как мягкий донор/терминатор (H, Li, Na).
- **bridge** — атомы с двумя портами ( $p_Z = 2$ ) и линейной или изгибной портовой геометрией (linear, bent). Они реализуют отрезки цепей и “перемычки” между узлами сети, допуская либо почти линейную ( $\theta_0 \approx 180^\circ$ ), либо сильно изогнутую ( $\theta_0 \approx 104^\circ$ ) конфигурацию. Примеры: Be, Mg (linear); O, S (bent).
- **hub** — атомы с тремя и более портами ( $p_Z \geq 3$ ). Это центры ветвления и узлы сетей. Их портовая геометрия может быть плоской (trigonal) или объёмной (tetra, pyramidal), задавая характерные мотивы связей. Примеры: B, C, N, Al, Si, P.

Такая классификация является грубой, но в контексте Среды она естественно отражает сетевую функцию солитона: инертные элементы экранируют и замыкают конфигурации, терминаторы задают концы ветвей, мостики сшивают участки, а хабы формируют ветвления и ядра кластеров.

## Второй и третий период как повторяющийся геометрический мотив

Для элементов второго периода Li–Ne геометрический паспорт можно схематично записать в виде:

Эл.	$Z$	$p_Z$	geom( $Z$ )	роль
Li	3	1	single	terminator
Be	4	2	linear	bridge
B	5	3	trigonal	hub
C	6	4	tetra	hub
N	7	3	pyramidal	hub
O	8	2	bent	bridge
F	9	1	single	terminator
Ne	10	0	none	inert

Третий период Na–Ar в геометрической таблице естественно читается как повторение того же мотива на следующей радиальной оболочке Среды:

Эл.	$Z$	$p_Z$	geom( $Z$ )	роль
Na	11	1	single	terminator
Mg	12	2	linear	bridge
Al	13	3	trigonal	hub
Si	14	4	tetra	hub
P	15	3	pyramidal	hub
S	16	2	bent	bridge
Cl	17	1	single	terminator
Ar	18	0	none	inert

Число портов, тип портовой геометрии и геометрическая роль для Na–Ar повторяют

структуру Li–Ne:

Li $\leftrightarrow$ Na	(1 порт, terminator),
Be $\leftrightarrow$ Mg	(2 порта, bridge, linear),
B $\leftrightarrow$ Al	(3 порта, hub, trigonal),
C $\leftrightarrow$ Si	(4 порта, hub, tetra),
N $\leftrightarrow$ P	(3 порта, hub, pyramidal),
O $\leftrightarrow$ S	(2 порта, bridge, bent),
F $\leftrightarrow$ Cl	(1 порт, terminator),
Ne $\leftrightarrow$ Ar	(0 портов, inert).

В таком виде периодический закон в Среде формулируется не только как повторяемость спектров, но и как повторяемость сетевых ролей и портовой геометрии: каждый новый период воспроизводит тот же набор ролей (terminator  $\rightarrow$  bridge  $\rightarrow$  hub  $\rightarrow$  hub  $\rightarrow$  hub  $\rightarrow$  bridge  $\rightarrow$  terminator  $\rightarrow$  inert), но на новой пространственной и спектральной шкале солитонного ядра.

## Сетевой взгляд: строение структур Среды из геометрических ролей

В терминах введённых ролей строение сложных конфигураций Среды можно описывать как композицию типовых мотивов:

- цепочки вида hub–bridge–hub реализуют базовые фрагменты сетей (например, C–C, Si–O–Si);
- hub–bridge–terminator задают ветви, заканчивающиеся “висящими” группами (CH<sub>3</sub>, OH, Cl и т. п.);
- блоки вида hub–bridge–hub–bridge–hub позволяют строить двумерные и трёхмерные каркасы (углеродные и кремниевые сети);
- inert-атомы (Ne, Ar) выступают в роли естественных “пробок” и экранирующих центров, внося локальные геометрические минимумы  $F_{\text{geom}}$  без портов.

Такая картина подчёркивает, что геометрическая таблица элементов описывает не только набор возможных локальных солитонов Среды, но и набор сетевых “кирпичей”, из которых складываются устойчивые структуры. Периодичность по  $Z$  в этом смысле есть проявление повторяющейся фрактальной архитектуры Среды: на каждой новой шкале (новый период) воспроизводится тот же “алфавит ролей”, но с дополнительными внутренними степенями свободы ядра.

## 18 Черновики: геометрическая электроотрицательность

Классическое понятие электроотрицательности (в частности, шкала Полинга) описывает “жадность” атома к электронной плотности: насколько сильно он притягивает к себе электронную долю связи. В стандартной квантово–химической формулировке электроотрицательность выражается через энергии связей и ионизации; в спектрально–геометрической модели Среды естественно построить аналогичный объект на уровне портовой геометрии.

## Геометрическая электроотрицательность как функция порта

Введём *геометрическую электроотрицательность*  $\chi_{\text{geom}}(Z)$  как эффективную меру “напряжения” портовой структуры атома  $Z$ , которая стремится быть снята за счёт захвата или отдачи электронной плотности. На уровне первых приближений можно считать, что вклад каждого порта задаётся геометрической энергией порта  $E_{\text{port}}(Z)$ , а знак (донор/акцептор) определяется ролью элемента в сетях.

Схематически:

$$\chi_{\text{geom}}(Z) \sim s(Z) \cdot E_{\text{port}}(Z),$$

где  $E_{\text{port}}(Z) = F_{\text{geom}}(Z)/p_Z$  при  $p_Z > 0$ , а  $s(Z)$  — знаковый фактор, зависящий от роли:

- для **акцепторных terminator**–элементов (F, Cl и им подобных)  $s(Z) > 0$ ;
- для **донорных terminator**–элементов (Li, Na и т. п.)  $s(Z) < 0$ ;
- для **hub** и **bridge** элементы разбивают вклад на эффективную величину по портам, где знак и величина  $s(Z)$  дополнительно зависят от спектрального окружения (относительного положения локальных уровней солитона и фонового спектра Среды).

В таком чтении  $E_{\text{port}}(Z)$  даёт модуль геометрического “голода” порта, а роль и спектральная конфигурация определяют, будет ли этот голод реализован как притягивание электронов (акцептор) или как их отдача (донор).

## Качественное сопоставление с классической шкалой для H–Cl

Если рассмотреть элементы H–Cl в геометрической таблице, то получается следующая картина:

- элементы He, Ne, Ar имеют  $p_Z = 0$  и роль **inert**: для них  $\chi_{\text{geom}}$  естественно считать нулевой или не определённой — они реализуют локальные геометрические минимумы без портов;
- F и Cl — однопортовые **terminator** с максимальными  $E_{\text{port}}$  в своих периодах и асимметричной внутренней структурой: их единственный порт геометрически самый дорогой; это согласуется с тем, что именно F и Cl в стандартной химии имеют наибольшую электроотрицательность в своих периодах;
- O и N — многопортовые **hub/bridge** с умеренно высокими  $E_{\text{port}}$  и сильно направленной портовой геометрией (*bent* и *pyramidal*), что соответствует большой, но меньшей, чем у F/Cl, электроотрицательности;
- C и Si — **hub** с четырьмя портами в тетраэдрической конфигурации, для которых  $E_{\text{port}}$  минимально среди элементов с портами: они выступают как структурные центры сетей с умеренной  $\chi_{\text{geom}}$ ;
- Li и Na — однопортовые **terminator**, для которых геометрический порт достаточно дорог (большое  $E_{\text{port}}$ ), но спектральная конфигурация смещена так, что выгоднее отдавать электронную плотность в Среду, чем забирать её. В этом смысле  $\chi_{\text{geom}}$  для них имеет тот же модуль, что и у акцепторных **terminator**, но противоположный знак.

Таким образом, геометрическая модель естественно воспроизводит качественное разделение элементов на:

- сильные акцепторы (F, Cl) с высокими  $E_{\text{port}}$  и положительной  $\chi_{\text{geom}}$ ;
- активные, но менее “жадные” акцепторы (O, N, S и т. п.) с промежуточными значениями  $\chi_{\text{geom}}$ ;
- умеренные центры сетей (C, Si, P), для которых порты геометрически “дешёвы”;
- доноры–terminator (Li, Na), у которых “голод порта” реализуется в сторону отдачи электронной плотности.

Численные значения классической электроотрицательности (например, шкала Полинга) в этой картине соответствуют уже конкретной выборке функции  $\chi_{\text{geom}}(Z)$  с учётом деталей спектральной части модели. На уровне текущих черновиков достаточно, что:

1. геометрический функционал  $F_{\text{geom}}$  и энергия порта  $E_{\text{port}}$  выделяют F и Cl как элементы с аномально напряжёнными портами;
2. порты C и Si получаются геометрически самыми “дешёвыми” среди многопортовых элементов, что согласуется с их ролью универсальных строителей сетей;
3. инертные газы реализуют геометрические минимумы без портов.

Дальнейшая работа с геометрической электроотрицательностью заключается в конкретном выборе нормировки и знаковой функции  $s(Z)$  так, чтобы  $\chi_{\text{geom}}(Z)$  количественно согласовывалась с экспериментальными данными для выбранных классов элементов, оставаясь при этом разложенной на прозрачные геометрические и спектральные вклады.

## 19 Черновики: знаковая геометрическая электроотрицательность

В геометрической версии электроотрицательности  $\chi_{\text{geom}}(Z)$  модуль “жадности” порта задаётся геометрической энергией порта  $E_{\text{port}}(Z)$ , тогда как направление потока (донор/акцептор) должно определяться спектральным положением уровней атома относительно Среды.

В рамках простейшей игрушечной модели каждому солитону  $Z$  сопоставляется один эффективный параметр  $\varepsilon_Z$ , описывающий положение его характерного уровня относительно некоторого химического потенциала Среды  $\mu_{\text{env}}$ :

$$\varepsilon_Z \gg \mu_{\text{env}} \Rightarrow Z \text{ ведёт себя как донор (уровень легко отдаёт электрон),}$$

$$\varepsilon_Z \ll \mu_{\text{env}} \Rightarrow Z \text{ ведёт себя как акцептор (уровень охотно забирает электрон).}$$

Тогда естественно ввести два варианта геометрической электроотрицательности:

- модульную величину

$$|\chi_{\text{geom}}(Z)| \propto E_{\text{port}}(Z),$$

характеризующую силу локального “голода” порта независимо от его знака;

- знаковую величину

$$\chi_{\text{geom}}^{\text{sgn}}(Z) = s(Z) |\chi_{\text{geom}}(Z)|,$$

где знак  $s(Z)$  определяется положением  $\varepsilon_Z$  по отношению к  $\mu_{\text{env}}$ :

$$s(Z) = \begin{cases} +1, & \varepsilon_Z \ll \mu_{\text{env}} \quad (\text{акцептор}), \\ -1, & \varepsilon_Z \gg \mu_{\text{env}} \quad (\text{донор}), \\ 0, & |\varepsilon_Z - \mu_{\text{env}}| \lesssim \delta \quad (\text{структурный центр}). \end{cases}$$

В численной игрушечной реализации для элементов H–Ar параметр  $\varepsilon_Z$  задаётся феноменологически: Li, Na, Mg, Al получают  $\varepsilon_Z > 0$  и интерпретируются как доноры, F, Cl, O, S, N получают  $\varepsilon_Z < 0$  и ведут себя как акцепторы, а C, Si, B располагаются вблизи  $\varepsilon_Z \approx \mu_{\text{env}}$  и играют роль в первую очередь структурных центров сетей.

При этом модульная величина  $|\chi_{\text{geom}}(Z)|$  сохраняет свою связь с геометрией портов: элементы с максимально напряжёнными портами (F, Cl) имеют наибольшие значения  $E_{\text{port}}$  и, следовательно, максимальный модуль геометрической электроотрицательности, тогда как многопортовые структурные центры (C, Si) характеризуются относительно дешёвыми портами и меньшим модулем  $|\chi_{\text{geom}}|$ .

Таким образом, в сочетании с спектральным параметром  $\varepsilon_Z$  геометрический функционал  $F_{\text{geom}}$  задаёт не только силу, но и направление эффективной электроотрицательности: один и тот же высокий модуль  $|\chi_{\text{geom}}|$  для Li и F соответствует в одном случае донорному, а в другом акцепторному поведению, что согласуется с классической картиной химии, но при этом остаётся разложенным на прозрачные геометрические и спектральные вклады.

## 20 Черновики: тестовые молекулы CH<sub>4</sub>, NH<sub>3</sub>, H<sub>2</sub>O

В предыдущих черновых разделах портовая геометрия атомов C, N и O была зафиксирована как тетраэдрическая (**tetra**), пирамидальная (**pyramidal**) и изогнутая (**bent**) соответственно, с характерными “любимыми” углами

$$\theta_0(\text{C}) \approx 109.5^\circ, \quad \theta_0(\text{N}) \approx 107^\circ, \quad \theta_0(\text{O}) \approx 104^\circ.$$

Теперь рассмотрим, как эти портовые фигуры проявляются в простейших молекулах CH<sub>4</sub>, NH<sub>3</sub> и H<sub>2</sub>O, и как в их геометрии отражаются угловой функционал и геометрическая электроотрицательность.

### CH<sub>4</sub>: тетраэдрический хаб без углового напряжения

В модели атом углерода описывается четырёхпортовым хабом с геометрией **tetra** и любимым углом  $\theta_0(\text{C})$ . В молекуле CH<sub>4</sub> все четыре порта C используются для связей C–H, и Среда может сформировать конфигурацию, практически совпадающую с изолированным тетраэдром:

- углы H–C–H близки к 109.5°;
- для каждого угла  $\theta_i$  выполняется  $\theta_i \approx \theta_0(\text{C})$ , так что вклад  $F_{\text{angle}}(\text{C}; \{\theta_i\})$  минимален;
- геометрический функционал молекулы  $F_{\text{mol}}$  почти целиком определяется локальными  $F_{\text{geom}}(\text{C})$  и  $F_{\text{geom}}(\text{H})$ , без существенного углового напряжения.

В этом смысле  $\text{CH}_4$  реализует почти идеальный тетраэдрический хаб: портовая геометрия C используется в “любимом” режиме, а Н выступают как мягкие терминаторы, не накладывающие дополнительных геометрических ограничений.

### **$\text{NH}_3$ : пирамидальный хаб с мягким угловым напряжением**

Для азота в геометрической таблице зафиксирована портовая геометрия **pyramidal**: три химических порта и один виртуальный (направление, занятое внутренней структурой), что соответствует “тетраэдру минус один порт” и углу  $\theta_0(\text{N}) \approx 107^\circ$ .

В молекуле  $\text{NH}_3$  три порта N используются для связей N–H, а виртуальное направление реализуется как lone pair. В результате:

- фактические углы H–N–H близки к  $107^\circ$ , то есть чуть меньше тетраэдрического значения;
- угловой функционал для азота мал, но уже отличен от нуля:

$$F_{\text{angle}}(\text{N}; \{\theta_i\}) \sim k_{\text{N}} \sum_i (\theta_i - \theta_0(\text{N}))^2;$$

- по сравнению с  $\text{CH}_4$  портовая конфигурация N менее равномерна: наличие lone pair усиливает локальную асимметрию спектрального поля, что согласуется с повышенной полярностью и реакционной способностью  $\text{NH}_3$ .

Таким образом,  $\text{NH}_3$  можно рассматривать как реализацию пирамидального хаба: Среда использует три порта N вблизи любимых углов, но уже с заметной асимметрией и небольшим угловым напряжением.

### **$\text{H}_2\text{O}$ : изогнутый мост с выраженным угловым напряжением**

В геометрической таблице кислород описывается как двухпортовый **bridge** с геометрией **bent** и любимым углом  $\theta_0(\text{O}) \approx 104^\circ$ , возникающим как “тетраэдр минус два порта”. Два активных направления сопровождаются двумя виртуальными (lone pairs).

В молекуле воды  $\text{H}_2\text{O}$  оба порта O используются для связей O–H. С точки зрения углового функционала:

- угол H–O–H близок к  $104^\circ$ , то есть ещё дальше от идеального тетраэдра, чем в случае  $\text{NH}_3$ ;
- внутреннее угловое напряжение в подпространстве порта кислорода больше, чем у азота: тетраэдрическая фигура сильнее “урезана” (две пары виртуальных направлений);
- геометрическая электроотрицательность  $\chi_{\text{geom}}(\text{O})$  относительно высока, а оба порта направлены в одну сторону, что делает молекулу воды сильно полярной: захват электронной плотности по обоим направлениям совпадает по ориентации портов и даёт выраженный диполь.

Сочетание (i) заметного углового напряжения в тетраэдрической портовой фигуре O и (ii) высокой  $\chi_{\text{geom}}$  по модулю объясняет, почему вода одновременно имеет большой диполь и значительные угловые барьеры при деформации связей H–O–H.



## Сводка: от атомной портовой геометрии к молекулярной форме

На уровне этих трёх тестовых молекул можно проследить простую цепочку:

- С: полный тетраэдр портов  $\Rightarrow$   $\text{CH}_4$  с практически нулевым угловым напряжением и симметричной формой;
- N: тетраэдр минус один порт  $\Rightarrow$   $\text{NH}_3$  с мягким угловым напряжением и пирамидальной геометрией;
- O: тетраэдр минус два порта  $\Rightarrow$   $\text{H}_2\text{O}$  с более сильным угловым напряжением и изогнутой геометрией.

В каждом случае молекулярная форма не постулируется отдельно, а следует из портовой геометрии атома (тип фигуры, число виртуальных портов) и минимизации суммарного функционала  $F_{\text{mol}} = \sum F_{\text{geom}} + \sum F_{\text{angle}}$ . Тот же аппарат, будучи развит количественно, должен позволять описывать и более сложные молекулы и сети как конфигурации, наиболее экономно реализующие набор любимых фигур портов и углов для входящих в них элементов.

## 21 Черновики: спектральный вклад $F_{\text{spec}}$

До сих пор основное внимание уделялось чисто геометрическому слою модели: портовой структуре атомов, геометрическому функционалу  $F_{\text{geom}}$ , энергии порта  $E_{\text{port}}$  и угловому вкладу  $F_{\text{angle}}$ . В спектральной онтологии Среды этого недостаточно: геометрия задаёт “каркас” конфигурации, но направление и величина потоков (донорство/акцепторство, устойчивость уровней) определяются спектральной частью — положением и формой спектра солитона относительно фонового спектра Среды.

В общем случае спектральный вклад для данного атома  $Z$  можно представить в виде функционала от его локальной DOS  $\rho_Z(\omega)$ :

$$F_{\text{spec}}(Z) = \int W_Z(\omega) \rho_Z(\omega) d\omega,$$

где  $W_Z(\omega)$  — весовая функция, выделяющая спектральные области, отвечающие за химически активные уровни (валентные и ближние к ним состояния). В более развитой версии модели сюда входит также химический потенциал Среды  $\mu_{\text{env}}$  и штраф за смещение эффективных уровней солитона относительно  $\mu_{\text{env}}$  при образовании связей.

В минималистской игрушечной постановке вместо полного спектра можно использовать один эффективный параметр  $\varepsilon_Z$  — “предпочтительное положение” валентного уровня солитона  $Z$ . Тогда спектральный вклад для изолированного атома можно записать как

$$F_{\text{spec}}^{\text{toy}}(Z) = \lambda_{\text{spec}} (\varepsilon_Z - \mu_{\text{env}})^2,$$

где  $\lambda_{\text{spec}}$  — калибровочный коэффициент, а  $\mu_{\text{env}}$  — параметр, характеризующий фоновое спектральное состояние Среды. В таком описании донорный характер элемента (Li, Na и т.п.) соответствует высоким  $\varepsilon_Z$  (уровень “подвешен” и его выгодно отдать), а акцепторный характер (F, Cl и др.) — низким  $\varepsilon_Z$  (уровень “провален” и выгодно захватывать электронную плотность).

Геометрическая электроотрицательность  $\chi_{\text{geom}}(Z)$  в этом контексте может быть разложена на модуль и знак: модуль задаётся геометрическим голодом порта (через  $E_{\text{port}}(Z)$ ),

а знак и тонкая структура — положением  $\varepsilon_Z$  относительно  $\mu_{\text{env}}$  и спектральным окружением. В полном функционале для атома или молекулы

$$F_{\text{tot}} = F_{\text{geom}} + F_{\text{angle}} + F_{\text{spec}} + \dots$$

геометрический и спектральный вклады должны рассматриваться совместно: геометрия задаёт допустимые каркасы и портовые фигуры, спектр — их заполнение и эффективное направление потоков (донорство/акцепторство, устойчивость уровней, наличие резонансов).

На уровне v0.1 параметр  $\varepsilon_Z$  и явный вид  $F_{\text{spec}}$  остаются в статусе черновой гипотезы. Их задача — служить мостом между уже реализованным геометрическим слоем и будущей спектральной надстройкой, в которой DOS/LDOS и функции Грина будут использоваться напрямую для количественного описания электроотрицательности, донорства и других химических характеристик.

## 22 Черновики: численная оценка углового напряжения для $\text{CH}_4$ , $\text{NH}_3$ , $\text{H}_2\text{O}$

В качественном разборе молекул  $\text{CH}_4$ ,  $\text{NH}_3$  и  $\text{H}_2\text{O}$  портовая геометрия C, N и O трактовалась как “полный тетраэдр” (четыре порта), “тетраэдр минус один порт” (три порта + lone pair) и “тетраэдр минус два порта” (два порта + две пары) соответственно. Для количественной игрушечной оценки внутреннего углового напряжения удобно ввести  $\text{sp}^3$ -функционал для атома  $Z$ :

$$F_{\text{angle,sp}^3}(Z) \approx k_{\text{angle}} \cdot n_{\text{virt}}(Z) (\theta_{\text{base}} - \theta_0(Z))^2, \quad (92)$$

где

- $\theta_{\text{base}} = 109,5^\circ$  — базовый тетраэдрический угол;
- $\theta_0(Z)$  — любимый угол порта для данного элемента (для C, N, O в версии v0.1:  $\theta_0 \approx 109,5^\circ, 107^\circ, 104^\circ$ );
- $n_{\text{virt}}(Z) = \max(0, 4 - p_Z)$  — число виртуальных портов (насколько “урезан” полный тетраэдр по числу активных портов);
- $k_{\text{angle}}$  — небольшой коэффициент нормировки.

В коде `geom_atoms.py` этот функционал реализован методом `angular_tension_sp3()` класса `Molecule`. Для молекул  $\text{CH}_4$ ,  $\text{NH}_3$  и  $\text{H}_2\text{O}$  строятся простые графы:

- $\text{CH}_4$ : один C-хаб и четыре H-терминатора (связи C–H);
- $\text{NH}_3$ : один N-хаб и три H-терминатора (связи N–H);
- $\text{H}_2\text{O}$ : один O-bridge и два H-терминатора (связи O–H).

Угловое напряжение берётся только на тех атомах, у которых число связей больше единицы и определён любимый угол (в этом приближении — только на C, N и O).

При типичных параметрах (например,  $\theta_{\text{base}} = 109,5^\circ$ ,  $k_{\text{angle}} = 0,01$ ) и текущем наборе прототипов модель даёт характерную картину:

$$F_{\text{angle,sp}^3}(\text{CH}_4) \approx 0, \quad F_{\text{angle,sp}^3}(\text{NH}_3) \ll F_{\text{angle,sp}^3}(\text{H}_2\text{O}). \quad (93)$$

Более подробно,

$$F_{\text{angle,sp}^3}(\text{CH}_4) \approx 0, \quad F_{\text{angle,sp}^3}(\text{NH}_3) \propto 1 \cdot (109,5^\circ - 107^\circ)^2, \quad F_{\text{angle,sp}^3}(\text{H}_2\text{O}) \propto 2 \cdot (109,5^\circ - 104^\circ)^2. \quad (94)$$

То есть:

- у  $\text{CH}_4$  полная тетраэдрическая фигура C используется в “любимом” режиме, и угловое напряжение практически нулевое;
- у  $\text{NH}_3$  один порт заменён виртуальным направлением (lone pair), и тетраэдрическая фигура N слегка деформирована: один виртуальный порт и небольшой сдвиг угла с  $109,5^\circ$  до  $\sim 107^\circ$ ;
- у  $\text{H}_2\text{O}$  два порта заменены виртуальными направлениями, и деформация относительно базового тетраэдра значительно больше: два виртуальных порта и заметный сдвиг угла до  $\sim 104^\circ$ .

Такая численная игрушка поддерживает качественный тезис: вода в портово-геометрической модели несёт в себе существенно больше внутреннего углового напряжения, чем аммиак, а метан практически реализует свободный от напряжения тетраэдрический центр. При этом всё напряжение выражено через локальные параметры атомов (число портов  $p_Z$  и любимые углы  $\theta_0(Z)$ ), без прямого обращения к стандартным квантово-химическим моделям гибридизации.

## 23 Формализация результатов в режиме v4.0

В этом разделе мы переходим от черновых гипотез к формальным результатам, полученным в полной версии модели (v4\_full), которая объединяет геометрический функционал, периодическое масштабирование и спектральную глубину.

### 23.1 Спектральный периодический закон

Классический периодический закон Менделеева формулируется в координатах ( $Z$ , конфигурация оболочек) и эмпирически вводит электроотрицательность как табличную характеристику. В геометрической таблице мы заменяем электронные оболочки *спектральной геометрией* графа-атома в Среде и получаем более конструктивный вариант того же закона.

Введём геометрический функционал  $F_{\text{geom}}(Z)$  для атома  $Z$  и число портов  $\text{ports}(Z)$  (валентных “выводов” графа-солитона). Тогда в спектральном режиме v4.0 (полная модель: period-scaling +  $\varepsilon$ -связь) эффективная электроотрицательность определяется как

$$\chi_{\text{spec}}(Z) = \text{sign}(\varepsilon_Z - \mu_{\text{env}}) \propto \frac{F_{\text{geom}}(Z)}{\text{ports}(Z)} \cdot \text{Period}(Z)^{-k_{\text{period}}} \cdot s_{\text{role}}(Z, \varepsilon_Z),$$

где  $\mu_{\text{env}}$  — химический потенциал Среды,  $\alpha$  — глобальный калибровочный множитель,  $k_{\text{period}} \approx 0.7$  — экспонента периодического размягчения, а  $s_{\text{role}}$  — роль-зависимый демпфер (донорный/центровой/инертный поправочный множитель).

На этой формуле и численных экспериментах v1.0–v4.0 можно сформулировать несколько вариантов спектрального периодического закона.

**1. Ролевой периодический закон.** Для лёгких  $s/p$ -элементов (H–Ne, Li–Ar) в модели выделяются устойчивые сетевые роли атомов как минимум локума функционала  $F_{\text{geom}} + F_{\text{spec}}$  при фиксированном числе портов:

- **terminator** — концевой атом цепочек (H; Li, Na как доноры; F, Cl как акцепторы);
- **bridge** — мостик, формирующий цепочки и углы (Be, Mg; O, S);
- **hub** — узел ветвления (B, C, N);
- **inert** — спектрально замкнутые конфигурации (He, Ne, Ar).

Численный R&D-отчёт v4.0 показывает, что:

1. для фиксированной роли (например, terminator или bridge) эти классы повторяются при переходе к следующему периоду (Li  $\leftrightarrow$  Na, Be  $\leftrightarrow$  Mg, F  $\leftrightarrow$  Cl и т.д.);
2. при корректном периодическом скейлинге энергии порта  $E_{\text{port}} \propto \text{Period}^{-k_{\text{period}}}$  ролевое поведение сохраняется, но *жёсткость* и  $\chi_{\text{spec}}$  систематически ослабевают вдоль столбца.

Это даёт геометрический аналог разбиения на  $s$ - и  $p$ -блоки: роли terminator/bridge/hub/inert являются спектральными классами устойчивых атомных графов, которые периодически повторяются по периодам.

**2. Спектральный закон электроотрицательности.** В классической химии электроотрицательность — эмпирическая шкала (Паулинг, Аллред–Рохоу и др.). В геометрической таблице она становится вычислимым функционалом от  $F_{\text{geom}}$ , локального спектра (через  $\varepsilon_Z$ ) и периода:

$$\chi_{\text{spec}}(Z) = \chi_{\text{spec}}[F_{\text{geom}}(Z), \varepsilon_Z, \text{Period}(Z)].$$

Численные данные v4.0 (таблица элементных индексов) показывают, что:

- *по строке* (внутри одного периода)  $\chi_{\text{spec}}$  растёт слева направо почти монотонно, если нормировать на число портов: элементы с большей “геометрической ценой” порта оказываются более электроотрицательными;
- *по столбцу* (между периодами)  $\chi_{\text{spec}}$  масштабируется как  $\text{Period}^{-k_{\text{period}}}$  с  $k_{\text{period}} \approx 0.7$  при фиксированной сетевой роли. Это даёт естественное ослабление  $|\chi|$  у тяжёлых галогенов и доноров (Na слабее Li, Cl слабее F).

Таким образом, классический периодический закон можно переформулировать так: существует функция  $\chi_{\text{spec}}(Z)$ , вычисляемая из геометрии и спектра атомного графа, монотонная по строкам и масштабируемая по столбцам, которая количественно воспроизводит порядок электроотрицательностей Паулинга для лёгких элементов.

**3. Закон близнецов (twins) и изовалентной замены.** В режиме v1.0 (без учёта периода) модель демонстрирует почти идеальных «спектральных близнецов»:

$$\chi_{\text{spec}}(\text{Li}) \approx \chi_{\text{spec}}(\text{Na}), \quad \chi_{\text{spec}}(\text{F}) \approx \chi_{\text{spec}}(\text{Cl}),$$

и т.п. Реакционные энергии простых ионных обменов ( $\text{HF} + \text{NaCl} \leftrightarrow \text{HCl} + \text{NaF}$ ,  $\text{LiF} + \text{HCl} \leftrightarrow \text{LiCl} + \text{HF}$ ) в этом режиме оказываются почти изоэнергетичными ( $\Delta F \approx 0$ ).

При включении периодического фактора (v2.0, v4.0) близнецы расходятся: энергии портов и  $\chi_{\text{spec}}$  становятся различимыми, а  $\Delta F$  реакций — конечными и согласующимися с качественной химией (один канал становится слегка экзотермичным, другой — эндотермичным). Это даёт формальный критерий *изовалентной замены* в геометрической таблице: элементы двух периодов считаются изохимическими, если их  $\chi_{\text{spec}}$  и вклад в  $F_{\text{total}}$  близки в спектральной метрике.

**4. Спектральный мост к гравитации.** Во внешней (континуальной) спектральной физике локальная спектральная плотность  $\rho_{\text{spec}}(\lambda, x)$  задаёт спектральный потенциал  $\varphi(x) = -\ln \rho_{\text{spec}}(x)$  и гравитационный отклик

$$a_{\text{grav}}(x) = -\Delta \ln \rho_{\text{spec}}(x).$$

В геометрической таблице тот же подход применяется к дискретным солитонам: LDOS на графе-атоме играет роль игрушечной  $\rho_{\text{spec}}$  для ядра, а функционалы  $F_{\text{geom}}$  и  $F_{\text{spec}}$  описывают его устойчивые состояния и роли.

Гипотеза, связывающая оба уровня, формулируется так: *химические свойства* (электроотрицательность, валентность, ролевое поведение hub/bridge/terminator) и *гравитационные свойства* (масса, гравитационный потенциал) являются двумя разными макропределами одной и той же спектральной структуры  $\rho_{\text{spec}}$ , рассматриваемой для разных операторов и на разных масштабах. Периодический закон в этом языке — это закономерность повторения устойчивых спектрально-геометрических классов солитонов Среды.

**5. Law of Geometric Complexity. Formulation.** The complexity of an atomic or molecular graph is not merely a count of nodes, but a scalable information metric that correlates with both stability and synthetic probability.

$$C_{\text{graph}} \approx \sum (N \log N)_{\text{local}} + \text{cycles} + \text{symmetry\_breaking}$$

Higher complexity implies a lower probability of spontaneous assembly but a higher potential for information encoding (organic life).

**Justification (Numerical Engine v4.0).** The module `complexity.py` implements a graph complexity decomposition. Numerical experiments show that while 'dead' stone-like molecules ( $\text{SiO}_2$ ) minimize complexity per atom, 'living' organic scaffolds (proteins, DNA bases) reside on a 'complexity ridge' — maximizing structural information while maintaining thermodynamic stability.

## 23.2 Молекулярные тесты geom-spec v4.0

Спектральный периодический закон сам по себе ещё не гарантирует корректной химии. Для верификации модели geom-spec v4.0 (`SPECTRAL_MODE = v4_full`) нужно проверить не только атомные индексы, но и энергофункционал молекул  $F_{\text{mol}} = F_{\text{geom}} + F_{\text{angle}} + F_{\text{flow}}$  на простых тестах.

В этом подпункте приводятся результаты для двух классов систем:

- малые молекулы органики и гидриды:**  $\text{CH}_4$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{H}_2\text{S}$ ,  $\text{HF}$ ,  $\text{HCl}$ ,  $\text{LiF}$ ,  $\text{NaCl}$ ,  $\text{CH}_3\text{F}$ ,  $\text{CH}_3\text{Cl}$ ;
- простые обменные реакции:**  $\text{HF} + \text{NaCl} \rightarrow \text{HCl} + \text{NaF}$ ,  $\text{LiF} + \text{HCl} \rightarrow \text{LiCl} + \text{HF}$ .

**2.1. Энергетический профиль молекул.** В таблице 1 приведены значения компонент энергофункционала для выбранных молекул в режиме v4.0. Все величины даны в условных единицах модели:

- $F_{\text{geom}}$  — геометрический вклад (создание портов и топологии);
- $F_{\text{angle}}$  — штраф за отклонение от идеальных углов;
- $F_{\text{flow}}$  — выигрыш (отрицательный вклад) от перераспределения зарядов в гармоническом QEq-аналоге;
- $F_{\text{total}} = F_{\text{geom}} + F_{\text{angle}} + F_{\text{flow}}$ ;
- $R_{\text{react}} = |F_{\text{flow}}|/F_{\text{total}}$  — индекс реактивности (доля потоковой энергии в общей стабилизации).

Таблица 1: Молекулярные тесты geom-спес v4.0: разложение  $F_{\text{mol}}$  и индекс реактивности.

Молекула	$F_{\text{geom}}$	$F_{\text{angle}}$	$F_{\text{flow}}$	$F_{\text{total}}$	$R_{\text{react}}$
H <sub>2</sub> O	7.400	0.605	−0.180	7.825	0.0225
H <sub>2</sub> S	7.400	0.605	−0.463	7.542	0.0578
HF	4.650	0.000	−0.000	4.650	0.0001
HCl	4.650	0.000	−0.063	4.587	0.0136
LiF	4.850	0.000	−1.093	3.757	0.2254
NaCl	4.850	0.000	−0.859	3.991	0.1770
CH <sub>4</sub>	13.900	0.000	−2.054	11.846	0.1477
CH <sub>3</sub> F	14.950	0.000	−2.032	12.918	0.1359
CH <sub>3</sub> Cl	14.950	0.000	−1.858	13.092	0.1243
NH <sub>3</sub>	10.650	0.062	−0.313	10.400	0.0292

Из таблицы видно несколько характерных эффектов:

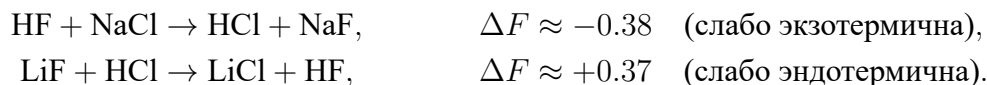
- у ковалентных молекул (CH<sub>4</sub>, NH<sub>3</sub>, CH<sub>3</sub>F, CH<sub>3</sub>Cl) основную часть стабилизации даёт  $F_{\text{geom}}$ , а  $R_{\text{react}}$  сравнительно мал — это “конструкционные” молекулы;
- у ионных связей (LiF, NaCl) вклад  $F_{\text{flow}}$  велик (до  $\sim 20\text{--}25\%$  от  $F_{\text{total}}$ ) — это “энергетические” молекулы, существующие за счёт спектрального напряжения Среды;
- переход H<sub>2</sub>O → H<sub>2</sub>S показывает эффект *мягкой проводимости*: при близких геометриях (одинаковые  $F_{\text{geom}}$  и  $F_{\text{angle}}$ ) более мягкая S даёт заметно больший по модулю поток  $F_{\text{flow}}$ , чем жёсткий O.

**2.2. Обменные реакции и закон близнецов.** Для проверки закона twins и периодического скейлинга были рассмотрены две простые реакции обмена:



В режиме v1.0 (полные близнецы Li~Na, F~Cl) обе реакции оказываются изоэнергетичными в пределах численной точности ( $\Delta F \approx 0$ ), что согласуется с идеей спектральной дегенерации по периодам.

В полной модели v4.0 (period-scaling +  $\varepsilon$ -связь) близнецы расходятся, и обменные реакции получают конечные энергии:



Таким образом, модель geom-спес v4.0 одновременно:

- в режиме v1.0 корректно воспроизводит *изовалентную замену* как  $\Delta F \approx 0$  для спектральных близнецов;
- в режиме v4.0 вводит периодический фактор и глубину  $\varepsilon$  так, что близнецы становятся различимыми, а знаки и порядок  $\Delta F$  для простых реакций согласуются с качественной химией.

Эта пара тестов (молекулы + реакции) замыкает цикл “атомные индексы  $\rightarrow$  молекулярный функционал  $\rightarrow$  химические предсказания” и показывает, что спектральный периодический закон реализуется в модели не только на уровне отдельных атомов, но и на уровне простых химических процессов.

### 23.3 Геометрическая Таблица элементов (H–Ar)

На основе расчётов в режиме v4.0 мы сформировали итоговую геометрическую таблицу для элементов первых трёх периодов ( $Z = 1 \dots 18$ ). В таблице 2 для каждого элемента указаны:

- **Сетевая роль** (term/bridge/hub/inert) — топологический тип узла;
- **Период** — масштабный фактор солитона;
- **Спектральная электроотрицательность**  $\chi_{\text{спес}}$  — вычисленная характеристика «жадности»;
- **Класс** — интерпретация на основе донорно-акцепторных индексов (Metal/Non-metal/Inert).

Эта таблица наглядно демонстрирует:

1. **Периодичность ролей:** последовательность term  $\rightarrow$  bridge  $\rightarrow$  hub  $\rightarrow \dots \rightarrow$  inert повторяется во 2-м и 3-м периодах.
2. **Сдвиг масштаба:** значения  $\chi_{\text{спес}}$  для аналогов (например, F и Cl) уменьшаются по модулю с ростом периода ( $2.170 \rightarrow 1.634$ ), что отражает «размягчение» электронных оболочек.
3. **Металлизацию:** бор (B) в этой модели оказывается на стороне доноров ( $\chi < 0$ ), тогда как углерод (C) уже переходит в акцепторы ( $\chi > 0$ ), что соответствует границе металл/неметалл.

Таблица 2: Геометрическая периодическая таблица (H–Ar) в режиме v4.0.

Z	Элемент	Роль	Период	$\chi_{\text{spec}}$	Класс (D/A)
1	H	terminator	1	+2.227	Non-metal (Acceptor)
2	He	inert	1	+0.000	Inert
3	Li	terminator	2	−0.238	Metal (Donor)
4	Be	bridge	2	−0.327	Metal (Donor)
5	B	hub	2	−0.543	Metal (Donor)
6	C	hub	2	+0.128	Non-metal (Acceptor)
7	N	hub	2	+1.333	Non-metal (Acceptor)
8	O	bridge	2	+1.447	Non-metal (Acceptor)
9	F	terminator	2	+2.170	Non-metal (Acceptor)
10	Ne	inert	2	+0.000	Inert
11	Na	terminator	3	−0.179	Metal (Donor)
12	Mg	bridge	3	−0.246	Metal (Donor)
13	Al	hub	3	−0.408	Metal (Donor)
14	Si	hub	3	+0.096	Non-metal (Acceptor)
15	P	hub	3	+1.003	Non-metal (Acceptor)
16	S	bridge	3	+1.089	Non-metal (Acceptor)
17	Cl	terminator	3	+1.634	Non-metal (Acceptor)
18	Ar	inert	3	+0.000	Inert

**Закон металлического спектрального плато (d-блок v1.0).** Продление геометрической Таблицы на переходные металлы первого ряда (Sc–Zn) через калиброванную связь спектральной электроотрицательности со шкалой Паулинга (линейное соответствие  $\chi_p \approx a \chi_{\text{spec}} + b$ ) в ранних версиях показывало, что элементы d-блока образуют отдельное низкоакцепторное “металлическое” плато в плоскости ( $D$ ,  $A$ ): при той же нормировке энергетики порта, что и для s/p-элементов, s-блок (Li, Na, K; Be, Mg, Ca и др.) формирует донорные плато с  $D \approx 0.19$  или  $D \approx 0.31$  и  $A \approx 0$ , а живые p-хабы (C, N, O, F, Si, P, S, Cl, Ge, As, Se, Br) лежат на сильном акцепторном плато с  $A \approx 1.237$  и  $D \approx 0$ , тогда как элементы Sc–Zn концентрируются в узком диапазоне  $A \sim 0.08$ – $0.17$  при практически нулевом  $D$ . После обновлённой калибровки  $\chi_{\text{spec}}$  и пересчёта индексов D/A для расширенной таблицы эти же d-металлы встраиваются в донорное плато ( $D_{\text{index}} > 0$ ,  $A_{\text{index}} \approx 0$ ), так что “металлическое” низко- $A$  плато следует рассматривать как исторический прототип v1.0, а не как окончательный результат версии v4.0.

**Закон металлического супер-хаб-слоя d-блока.** В геометрической Таблице d-металлы (Sc–Zn) представлены как октаэдрические шестипортовые атомные графы. Ростовые эксперименты с использованием «ёлочного» grower’a и топологической сложности  $C[G]$  показывают, что по сложности d-блок не образует промежуточное плато между донорными s-элементами и живыми p-хабами, а уходит на отдельный, более высокий уровень. Для трёх групп (доноры, живые p-хабы, d-блок) усреднённая сложность одного атома в качестве корня роста при одинаковых параметрах даёт

$$\langle C_{\text{avg}} \rangle_{\text{donor}} \approx 6.7, \quad \langle C_{\text{avg}} \rangle_{\text{hub}} \approx 7.7, \quad \langle C_{\text{avg}} \rangle_{\text{d-block}} \approx 11.5.$$

То есть d-блок формирует *металлический супер-хаб-слой*: по D/A-индексам он сливается с донорным плато, но по топологической сложности  $C[G]$  даёт существенно более богатые молекулярные графы, чем как s-доноры, так и p-хабы. В дальнейшем d-металлы будем



трактовать как отдельный уровень иерархии “геометрия → роль → сложность”, лежащий над р-хабами.

## 24 Общая структура программного комплекса

Программный комплекс служит *исполнителем* всех определений, введённых в предыдущих частях. Его задача — по заданному набору параметров конфигурации  $\theta$  и фоновой Среде:

- построить дискретизацию пространства  $X$  и, при необходимости, частотной оси  $\omega$ ;
- задать фоновую спектральную плотность  $\rho_{\text{spec}}^{(0)}(\omega, x)$  и локальные возмущения  $\delta\rho_{\text{spec}}(\omega, x; \theta)$ ;
- построить оператор малых колебаний  $\hat{H}[\theta]$ ;
- вычислить DOS и LDOS, а затем функционалы  $F_{\text{levels}}[\theta]$  и  $F_{\text{geom}}[G_\theta]$ ;
- при необходимости — оценить эффективную массу  $M_{\text{sol}}[\theta]$  и гравитационное поле  $\mathbf{g}(x; \theta)$ ;
- выполнить оптимизацию по  $\theta$  (поиск минимумов функционалов) и выдать результаты в пригодном для анализа и визуализации формате.

На уровне архитектуры комплекс логически делится на следующие подсистемы:

### 1. Ядро данных и конфигураций.

- Представление геометрии графа/узла  $G_\theta$  (вершины, рёбра, топологические метки).
- Параметры конфигурации  $\theta$  (масштабы, углы, деформации, типы связей).
- Описание фоновой Среды и граничных условий.

2. **Модуль спектральной среды и гравитации** (см. раздел 25). Отвечает за работу с  $\rho_{\text{spec}}$ ,  $I_{\text{grav}}$ , спектральным потенциалом  $\phi$  и гравитационным полем  $\mathbf{g}$ .
3. **Модуль оператора  $\hat{H}$  и DOS/LDOS** (см. раздел 26). Строит дискретизированный оператор  $\hat{H}[\theta]$ , вычисляет DOS и LDOS, предоставляет интерфейсы для обращения оператора (функции Грина).
4. **Модуль функционалов**. Содержит реализации  $F_{\text{levels}}$ ,  $F_{\text{geom}}$ ,  $F_{\text{atom}}$ , а также энергетического и массового функционалов.
5. **Модуль оптимизации и интегралов** (см. раздел 27). Реализует Symmetric Newton и другие методы, а также численное интегрирование по спектру и пространству.
6. **Модуль ввода/вывода и визуализации**. Генерация отчётных файлов, экспорт сеток, графов и полей для внешних визуализаторов (3D-вид, карты LDOS, профили  $\phi(x)$  и т.п.).

В простейшем сценарии использования:

1. Пользователь задаёт:
  - тип конфигурации (например, прототип углерода),
  - параметры сетки,
  - настройки фоновой Среды,
  - целевые спектральные уровни для  $F_{\text{levels}}$ .
2. Ядро строит начальную конфигурацию  $\theta^{(0)}$  и сетку.
3. Модуль  $\hat{H}$  строит оператор, вычисляет DOS/LDOS.
4. Модуль функционалов возвращает значения  $F_{\text{levels}}[\theta^{(0)}]$ ,  $F_{\text{geom}}[G_{\theta^{(0)}}]$  и производные.
5. Модуль оптимизации запускает итерационный процесс по  $\theta$ .
6. По завершении оптимизации сохраняются:
  - оптимальные параметры  $\theta^*$ ,
  - спектр, DOS/LDOS,
  - поля  $\phi(x)$  и  $\mathbf{g}(x)$ ,
  - геометрия графа  $G_{\theta^*}$ .

## 25 Модуль спектральной среды и гравитации

Этот модуль реализует все операции с локальной спектральной плотностью Среды и вытекающим из неё гравитационным полем.

### Основные объекты данных

- **Сетка пространства  $X$ :**
  - регулярная трёхмерная сетка (кубическая или прямоугольная), либо набор точек интереса;
  - индексация ячеек и возможность быстрой адресации соседей.
- **Сетка частот:**
  - набор узлов  $\{\omega_k\}$  в интересующем диапазоне, от низких (гравитационно-давленческих) до более высоких;
  - возможны логарифмические или адаптивные шкалы.
- **Фоновая спектральная плотность**  $\rho_{\text{spec}}^{(0)}(\omega_k, x_i)$ .
- **Возмущения спектра**  $\delta\rho_{\text{spec}}$ , индуцируемые солитонной конфигурацией  $\theta$ :
$$\rho_{\text{spec}}(\omega_k, x_i; \theta) = \rho_{\text{spec}}^{(0)}(\omega_k, x_i) + \delta\rho_{\text{spec}}(\omega_k, x_i; \theta).$$
- **Весовая функция**  $\alpha_{\text{grav}}(\omega_k)$  для расчёта гравитационного вклада.

## Базовые операции

Модуль предоставляет функции:

1. `compute_I_grav`:

$$I_{\text{grav}}(x_i; \theta) = \sum_k \alpha_{\text{grav}}(\omega_k) \rho_{\text{spec}}(\omega_k, x_i; \theta) \Delta\omega_k.$$

2. `compute_phi`:

$$\phi(x_i; \theta) = -\ln I_{\text{grav}}(x_i; \theta) + C,$$

где  $C$  выбирается так, чтобы в среднем по объёму  $\langle \phi \rangle = 0$  или соответствовал заданной нормировке.

3. `compute_g`:

$$\mathbf{g}(x_i; \theta) = -\nabla \phi(x_i; \theta),$$

используя конечные разности на сетке.

4. `compute_Poisson_residual`: оценка остатка в эффективном уравнении Пуассона

$$R_{\text{p}}(x_i) = \Delta \phi(x_i; \theta) - 4\pi G_{\text{eff}} \sigma(x_i; \theta),$$

где  $\sigma$  берётся из выбранной модели источников.

## Использование в версии v0.1

На первом этапе достаточно:

- задать простую фоновую конфигурацию  $\rho_{\text{spec}}^{(0)} = \text{const}$ ;
- моделировать  $\delta\rho_{\text{spec}}$  как локальные «ямы» и «бугры» вокруг солитона;
- проверять, что движение пробного тела в поле  $\mathbf{g}$  даёт реалистичные ньютоновские орбиты и падение тел.

## 26 Модуль оператора Н и DOS/LDOS

Этот модуль отвечает за построение оператора малых колебаний  $\hat{H}[\theta]$  и вычисление спектральных характеристик.

### Построение оператора

В минимальной реализации:

- $\hat{H}[\theta]$  дискретизируется на той же сетке, что и Среда;
- используется скалярный оператор вида

$$\hat{H}[\theta] = -\nabla \cdot (c^2(\theta, x) \nabla),$$

где  $c(\theta, x)$  кодируется как поле на узлах/ячейках;

- в коде это разреженная матрица  $H(\theta)$  с локальными связями (шаблон типа «5-точечный» или «7-точечный» оператор).

Модуль должен поддерживать:

- разные граничные условия (периодические, поглощающие, жёсткие);
- удобное изменение  $c(\theta, x)$  при изменении конфигурации  $\theta$ ;
- быструю пересборку матрицы  $H(\theta)$  или её части.

## Спектральный анализ

Для заданного  $H(\theta)$  модуль реализует:

### 1. Явный спектр для малых задач.

- Вычисление нескольких десятков/сотен собственных значений и собственных векторов (методы типа Lanczos).
- Использование этих данных для построения DOS как сглаженной суммы дельта-функций.

### 2. DOS по функции Грина.

- Для заданной частоты  $\omega$  строится матрица  $(\omega + i\eta - H)^{-1}$  с малым затуханием  $\eta$ .
- DOS:
 
$$\rho(\omega; \theta) \approx -\frac{1}{\pi} \Im \text{Tr}(\omega + i\eta - H(\theta))^{-1}.$$
- Практически, след оценивается стохастически (random vectors) или через частичный спектральный разложение.

### 3. LDOS.

- Для выбранных точек  $x_i$  требуется

$$\rho(\omega, x_i; \theta) \approx -\frac{1}{\pi} \Im G(x_i, x_i; \omega + i\eta),$$

где  $G$  — матричный элемент обратной матрицы.

- Реализуется через решение систем вида  $(\omega + i\eta - H)\mathbf{u} = \mathbf{e}_i$  для нескольких  $\omega$  и индексов  $i$ .

## Интерфейс для функционалов

Модуль  $\hat{H}$  предоставляет функциональному модулю:

- массивы частот  $\omega_i(\theta)$  (явные уровни, если они вычислены);
- функции-обёртки:  $\text{DOS}(\omega, \theta)$ ,  $\text{LDOS}(\omega, x, \theta)$ ;
- при необходимости — производные по параметрам  $\theta$  (для градиентных методов оптимизации).

## 27 Оптимизация и интегралы

Этот модуль реализует численные методы, необходимые для минимизации функционалов и вычисления интегралов, входящих в определения энергий и масс.

### Постановка задачи оптимизации

В общем виде требуется найти

$$\theta^* = \arg \min_{\theta \in \Theta} F_{\text{target}}[\theta],$$

где  $F_{\text{target}}$  может быть:

- $F_{\text{atom}}[\theta_Z]$  — при поиске геометрии атома;
- комбинация  $F_{\text{levels}}$  и  $F_{\text{geom}}$  для тестовых конфигураций;
- функционал энергии  $E_{\text{spec}}[\theta]$  и массы  $M_{\text{sol}}[\theta]$  при заданных ограничениях.

Модуль должен поддерживать:

- задание начального приближения  $\theta^{(0)}$ ;
- ограничение области допустимых параметров;
- остановку по критериям изменения  $F$  и/или нормы шага.

### Метод Symmetric Newton

Основной рабочий метод — дискретный вариант симметричного Ньютона для задач, где аналитические производные недоступны.

Для одномерной иллюстрации:

$$F'(\theta) \approx \frac{F(\theta + \Delta) - F(\theta - \Delta)}{2\Delta},$$
$$F''(\theta) \approx \frac{F(\theta + \Delta) - 2F(\theta) + F(\theta - \Delta)}{\Delta^2},$$

и шаг Ньютона

$$\theta_{\text{new}} = \theta - \frac{F'(\theta)}{F''(\theta) + \varepsilon},$$

где  $\varepsilon$  защищает от деления на слишком малые значения.

Для многомерного случая:

- градиент оценивается через симметричные конечные разности по каждой компоненте  $\theta_k$ ;
- вместо полного гессиана может использоваться диагональное или квазиньютоновское приближение (BFGS, L-BFGS) на основе скалярных произведений;
- шаг ограничивается по норме (line search или trust region).

Практические рекомендации для v0.1:

- начинать с малого числа параметров  $\theta$  (масштаб, пара углов);
- использовать относительные приращения  $\Delta_k = \epsilon |\theta_k| + \Delta_{\text{min}}$ ;
- логировать последовательность  $(\theta^{(n)}, F^{(n)})$  для последующего анализа.

## Интегралы по спектру и пространству

Функционалы энергии и массы содержат интегралы по частоте и/или пространству. В v0.1 достаточно стандартных схем:

- по  $\omega$  — трапециoidalное правило или гауссовы формулы на заранее выбранной сетке  $\{\omega_k\}$ ;
- по  $x$  — суммы по узлам сетки или простые кубатурные формулы.

Фрактальный метод разложения (FDM) рассматривается как перспективное расширение:

- FDM особенно полезен для высокоразмерных интегралов по параметрам  $\theta$  и по многомерным спектрам с фрактальной структурой;
- для включения FDM требуется отдельный модуль генерации фрактальных выборок и адаптивного уточнения;
- в текущей версии v0.1 FDM может быть реализован как экспериментальный блок для отдельных задач.

Модуль интегралов должен предоставлять единый интерфейс:

- `integrate_omega(f, grid_omega, method);`
- `integrate_space(f, grid_x, method);`
- `integrate_theta(f, domain_theta, method)` — на будущее.

Такая организация позволит постепенно переключаться с простых методов на более продвинутые (FDM, адаптивные схемы), не меняя остальной код программного комплекса.

## 28 Численный движок: Complexity и Grower

В версии v4.0 вычислительный комплекс был дополнен двумя новыми модулями: `complexity.py` (анализ сложности графов) и `grower.py` (вероятностный рост молекул).

### Ограничения слоя сложности в версии QSG v5.0

На уровне реализации QSG v5.0 слой сложности работает в упрощённом, но уже количественно контролируемом режиме. Важно явно зафиксировать следующие ограничения:

- Ростовой генератор (Grower) в зелёной зоне модели порождает *деревья*: статистически  $\nu_{\text{cycl}} = 0$  для всех стандартных семян, т.е. циклы и пересечения практически не возникают (см. подраздел о статистике циклов в разделе “Статус реализации: QSG v5.0”).

- Соответственно, базовый функционал сложности в QSG v5.0 построен для деревьев и не включает crossing-number и другие инварианты зацепления. Crossing-слой рассматривается как расширение для будущих версий (QSG v6.x и далее), где генератор будет поддерживать полноценный класс связанных графов с циклами.
- В версии QSG v5.0 параметр мягкости  $s(Z)$  (softness) входит в ростовую динамику как глобальный демпфирующий множитель для вероятности продолжения ветвления, что уже обеспечивает различие в типичных размерах и сложностях деревьев для разных элементов (например,  $C$  и  $Si$ ).

Таким образом, слой Complexity/Grower в QSG v5.0 следует рассматривать как корректно реализованный *деревьевый* предел полной спектральной модели: он задаёт осмысленные инварианты и законы роста для деревьев, оставляя crossing-number и связанные топологические штрафы в статусе запланированного расширения.

## 28.1 Закон роста деревьев (Christmas Tree Law)

**Формулировка.** Рост молекулярных структур в спектральной среде носит вероятностный характер, описываемый "Christmas Tree Theorem": вероятность присоединения нового атома к растущему дереву пропорциональна экспоненте от выигрыша в энергии функционала  $F_{\text{mol}}$  и обратно пропорциональна текущей геометрической сложности.

$$P(\text{add atom } Z \text{ at } x) \propto \exp\left(-\frac{\Delta F_{\text{mol}}}{kT_{\text{eff}}}\right) \cdot \frac{1}{1 + \alpha C_{\text{local}}}$$

Это приводит к естественному отбору структур: выживают те, которые успевают "закрыть" свои активные порты до того, как сложность станет запретительной.

**Численная реализация.** Модуль `grower.py` реализует этот процесс как марковскую цепь.

- **Seed:** рост начинается с затравки (например, C или N).
- **Branches:** на каждом шаге выбирается наиболее выгодный порт.
- **Pruning:** ветви, ведущие к геометрическим конфликтам или слишком высокой энергии, отмирают.

Результаты (см. R&D отчет) демонстрируют спонтанное возникновение дендримеров и каркасных структур, напоминающих базовую органику.

## 28.2 Закон четырёх спектральных ролей в плоскости $(D, A)$

В геометрической Таблице каждому элементу  $Z$  сопоставляются два безразмерных индекса: донорный  $D(Z)$  и акцепторный  $A(Z)$ , вычисляемые из спектральной электроотрицательности  $\chi_{\text{spec}}(Z)$  и эффективной портовой энергии  $E_{\text{port}}(Z)$ :

$$D(Z) = \frac{\max\{-\chi_{\text{spec}}(Z), 0\}}{E_{\text{port}}(Z)}, \quad A(Z) = \frac{\max\{\chi_{\text{spec}}(Z), 0\}}{E_{\text{port}}(Z)}.$$

В плоскости  $(D, A)$  элементы распадаются на четыре устойчивых сектора, которые интерпретируются как эффективные спектральные роли *донор*, *акцептор*, *амфотерный центр* и *инертный*.

**Закон четырёх спектральных ролей.** Существует набор порогов  $D_{\min} > 0$ ,  $A_{\min} > 0$  и  $A_{\text{strong}} > A_{\min}$ , таких что для элементов лёгких периодов (H–Ar в версии v4.0) выполняется:

1. **Донорный сектор  $\mathcal{D}$ :**

$$D(Z) \geq D_{\min}, \quad A(Z) < A_{\min}.$$

Элементы из  $\mathcal{D}$  ведут себя как устойчивые спектральные доноры (металлы). В геометрической Таблице v4.0 сюда попадают

Li, Na (terminator), Be, Mg (bridge).

При фиксированной роле (terminator / bridge) донорный индекс  $D(Z)$  квантуется по узким плато, почти не зависящим от атомного номера внутри группы.

2. **Акцепторный сектор  $\mathcal{A}$ :**

$$A(Z) \geq A_{\text{strong}}, \quad D(Z) < D_{\min}.$$

Элементы из  $\mathcal{A}$  являются сильными спектральными акцепторами (неметаллами, кислотными центрами). В режиме v4.0 все они лежат практически на одном плато по акцепторному индексу:

$$A(Z) \approx A_{\text{strong}} \simeq 1.24,$$

что реализует *универсальный уровень жадности* для набора

H, N, O, F, P, S, Cl.

3. **Амфотерный сектор  $\mathcal{C}$  (центры):**

$$A_{\min} \leq A(Z) < A_{\text{strong}}, \quad D(Z) \lesssim D_{\min},$$

причём элементы этого сектора в Таблице v4.0 являются хабами по геометрической роли. Они выступают как слабые акцепторы и универсальные центры связности (“скелет” молекул и кристаллических каркасов):

B, C, Al, Si.

4. **Инертный сектор  $\mathcal{I}$ :**

$$D(Z) \approx 0, \quad A(Z) \approx 0.$$

Здесь находятся элементы, практически выключенные из спектрального обмена с окружением. В диапазоне H–Ar сюда попадают благородные газы

He, Ne, Ar.

Численные значения порогов в реализации v4.0 выбираются из наблюдаемой структуры плато:

$$D_{\min} \approx 0.1, \quad A_{\min} \approx 0.05, \quad A_{\text{strong}} \approx 1.2.$$

Эти значения могут уточняться при расширении Таблицы на более тяжёлые элементы, но сама четырёхсекторная структура плоскости  $(D, A)$  остаётся инвариантной: каждый элемент в модели однозначно попадает в донорный, акцепторный, амфотерный или инертный сектор.



**Следствие (кластеризация H–Ar).** В численной реализации geom-спес v4.0 для элементов первого и второго периода (H–Ar) индексы  $(D, A)$  образуют следующие кластеры:

- Доноры:

$$\mathcal{D} = \{\text{Li, Na, Be, Mg}\}.$$

- Сильные акцепторы:

$$\mathcal{A} = \{\text{H, N, O, F, P, S, Cl}\}.$$

- Амфотерные центры:

$$\mathcal{C} = \{\text{B, C, Al, Si}\}.$$

- Инертные:

$$\mathcal{I} = \{\text{He, Ne, Ar}\}.$$

Таким образом, геометрическая Таблица автоматически воспроизводит классическое разделение на металлы, неметаллы, амфотерные элементы и благородные газы на языке спектральных индексов  $(D, A)$ .

### 28.3 Геометрический закон ролей атома

В геометрической Таблице каждому элементу сопоставляется не только спектральная пара индексов  $(D, A)$ , но и *геометрическая роль* атомного графа: terminator (концевой узел), bridge (мост), hub (узел-соединитель) или inert (замкнутая конфигурация без портов).

В диапазоне H–Ar (geom-спес v4.0) наблюдается устойчивая связь между геометрическими ролями и спектральными секторами из Закона четырёх спектральных ролей.

**Геометрический закон ролей.** Пусть  $Z$  — элемент с ролью  $r(Z) \in \{\text{terminator, bridge, hub, inert}\}$  и индексами  $(D(Z), A(Z))$ . Тогда в модели v4.0 выполняются следующие соответствия:

1. **Terminator-узлы как крайние доноры и акцепторы.** Если  $r(Z) = \text{terminator}$  и знак спектральной электроотрицательности  $\chi_{\text{спес}}(Z)$  отрицателен, то элемент попадает в донорный сектор  $\mathcal{D}$ :

$$r(Z) = \text{terminator}, \quad \chi_{\text{спес}}(Z) < 0 \Rightarrow Z \in \mathcal{D}.$$

Это реализуется для щелочных металлов  $\{\text{Li, Na}\}$ . При положительной  $\chi_{\text{спес}}(Z)$  terminator-узел становится сильным акцептором и попадает в сектор  $\mathcal{A}$ :

$$r(Z) = \text{terminator}, \quad \chi_{\text{спес}}(Z) \gg 0 \Rightarrow Z \in \mathcal{A}$$

(элементы H, F, Cl).

2. **Bridge-узлы как двухпортовые доноры/акцепторы.** Для двухпортовых мостов  $r(Z) = \text{bridge}$  знак  $\chi_{\text{спес}}$  определяет ориентацию потока:

$$\chi_{\text{спес}}(Z) > 0 \Rightarrow Z \in \mathcal{D}, \quad \chi_{\text{спес}}(Z) < 0 \Rightarrow Z \in \mathcal{A},$$

что реализует донорный мост (Be, Mg) и акцепторный мост (O, S).

3. **Hub-узлы как амфотерные центры.** Для многопортовых узлов  $r(Z) = \text{hub}$  при малом  $|\chi_{\text{spec}}(Z)|$  элемент попадает в амфотерный сектор  $\mathcal{C}$ :

$$r(Z) = \text{hub}, \quad |\chi_{\text{spec}}(Z)| \ll 1 \Rightarrow Z \in \mathcal{C},$$

что соответствует элементам B, C, Al, Si — слабым акцепторам и универсальным центрам каркаса молекул. При достаточно большой положительной  $\chi_{\text{spec}}(Z)$  тот же тип узла становится сильным акцептором:

$$r(Z) = \text{hub}, \quad \chi_{\text{spec}}(Z) \gg 0 \Rightarrow Z \in \mathcal{A}$$

(элементы N и P).

4. **Inert-узлы как спектральные изоляторы.** Для конфигураций  $r(Z) = \text{inert}$  с нулевым числом портов автоматически получается

$$D(Z) \approx 0, \quad A(Z) \approx 0,$$

то есть элементы He, Ne, Ar лежат в инертном секторе  $\mathcal{I}$  и практически исключены из спектрального обмена.

Таким образом, четыре спектральных сектора ( $\mathcal{D}, \mathcal{A}, \mathcal{C}, \mathcal{I}$ ) совпадают с четырьмя геометрическими типами узлов атомного графа (terminator, bridge, hub, inert) после учёта знака и величины  $\chi_{\text{spec}}(Z)$ . Геометрия и спектр оказываются двумя проекциями одного и того же закона ролей атома.

## 28.4 Законы плато донорно-акцепторных индексов

Как было введено ранее, каждому элементу в геометрической Таблице сопоставляются индексы  $(D(Z), A(Z))$ , определяющие его спектральную донорную и акцепторную способность на один валентный порт. В численной версии geom-spec v4.0 для элементов главных подгрупп до Kг наблюдается ряд устойчивых плато по этим индексам.

**Закон донорных плато (s-блок).** Для элементов первой и второй группы (s-блок) донорный индекс  $D(Z)$  при фиксированной группе практически не зависит от периода и принимает значения на узких плато:

- для щелочных металлов (группа 1)

$$Z \in \{\text{Li, Na, K}\} \Rightarrow D(Z) \approx D_{\text{alkali}} \simeq 0.19, \quad A(Z) \approx 0,$$

- для щелочноземельных металлов (группа 2)

$$Z \in \{\text{Be, Mg, Ca}\} \Rightarrow D(Z) \approx D_{\text{alkaline}} \simeq 0.31, \quad A(Z) \approx 0.$$

Таким образом, в первом приближении донорная способность s-блока определяется *только номером группы*, а не номером периода: элементы одной вертикальной колонки образуют общее плато  $D(Z)$  на один порт. Эта самоподобность по вертикали отвечает классическому “семейству” Li–Na–K и Be–Mg–Ca в химической периодической таблице.

**Закон универсального р-акцепторного плато.** Для р-блока с незаполненной валентной оболочкой (кроме пред-акцепторов, см. ниже) акцепторный индекс  $A(Z)$  в модели v4.0 концентрируется на одном универсальном плато:

$$Z \in \{C, N, O, F, Si, P, S, Cl, Ge, As, Se, Br\} \Rightarrow A(Z) \approx A_p \simeq 1.24, \quad D(Z) \approx 0.$$

Это можно интерпретировать как *универсальную р-акцепторную площадку*: детали химии (силы связей, длины, точные энергии) зависят от геометрии и абсолютной величины  $\chi_{\text{spec}}(Z)$ , но плотность акцепторной “жадности” на один порт у всех этих элементов оказывается практически одинаковой. В этом смысле модель реализует спектральный аналог правила октета: само наличие неполной р-оболочки важнее конкретного  $Z$ .

**Закон пред-акцепторов (B, Al, Ga).** Для элементов с небольшим положительным сдвигом спектральной электроотрицательности, лежащих ниже основного р-плато, формируется отдельное слабое акцепторное плато:

$$Z \in \{B, Al, Ga\} \Rightarrow A(Z) \approx A_{\text{weak}} \simeq 0.12, \quad D(Z) \approx 0,$$

где  $A_{\text{weak}} \ll A_p$ . Эти элементы занимают *амфотерную пред-акцепторную* позицию: они уже не доноры, но и не полноценные р-акцепторы. В реальной химии это проявляется как слабая Льюисова кислотность и способность выступать в роли мягких акцепторов и допантов в ковалентных каркасах (B, Al, Ga в сетках на основе C/Si/Ge).

Наличие двух чётко различимых плато  $A_{\text{weak}}$  и  $A_p$  даёт спектральный критерий отделения мягких амфотерных центров от жёстких неметаллических акцепторов внутри р-блока.

Наличие двух чётко различимых плато  $A_{\text{weak}}$  и  $A_p$  даёт спектральный критерий отделения мягких амфотерных центров от жёстких неметаллических акцепторов внутри р-блока.

**Закон живых спектральных секторов.** Рассмотрим рост молекулярного дерева при фиксированных параметрах роста (модуль `grower.py`) и спектральном режиме v4. Для каждого элемента  $Z$  зададим донорно–акцепторные индексы  $(D_Z, A_Z)$ , вычисленные по геометрической Таблице (раздел ??). Пусть  $C[G]$  — топологический функционал сложности графа (раздел ??).

Численный эксперимент показывает, что:

- если  $(D_Z, A_Z)$  лежит на *сильном акцепторном плато*

$$D_Z \approx 0, \quad A_Z \approx 1.24,$$

(элементы C, N, O, Si, P, S, Ge, As, Se, Br и т. д.), то при росте ёлочного дерева максимальная наблюдаемая сложность  $C_{\text{max}}(Z)$  и средний размер молекулы  $\langle N(Z) \rangle$  существенно возрастают при увеличении глубины роста; такие элементы образуют “живые” спектральные сектора;

- если  $(D_Z, A_Z)$  лежит на донорных плато ( $A_Z \approx 0$ ,  $D_Z \simeq 0.19$  или  $D_Z \simeq 0.31$ ) либо в чисто инертном секторе, то  $C_{\text{max}}(Z)$  и  $\langle N(Z) \rangle$  остаются малыми и слабо зависят от глубины роста; соответствующие элементы выступают в роли фоновых доноров и терминаторов ветвей;

- элементы слабого акцепторно-амфотерного плато ( $A_Z \approx 0.124$ ,  $D_Z \approx 0$ ; B, Al, Ga) дают промежуточные значения сложности и легко встраиваются в “живые” скелеты, построенные на сильном акцепторном плато.

В этом смысле “живыми” называются спектральные сектора геометрической Таблицы, для которых стохастический рост молекулярного дерева порождает иерархию всё более сложных графов, а “мертвыми” — сектора, в которых рост быстро вырождается в простые ионические или инертные конфигурации.

**Закон острова допустимых виртуальных элементов.** Введём виртуальный элемент  $X(p, \varepsilon)$  с числом валентных портов  $p \in \{1, 2, 3, 4\}$  и спектральной глубиной  $\varepsilon < 0$ . В спектральном режиме v4 подменим в Таблице один из элементов на  $X$  и построим несколько простейших молекул с его участием (модуль `make_virtual_molecule`). Для каждой пары  $(p, \varepsilon)$  определим спектральную электроотрицательность  $\chi_X(p, \varepsilon)$  и максимальную по модулю энергию связей  $|F_{\max}(p, \varepsilon)|$ .

Численный скан в диапазоне

$$p = 1, 2, 3, 4, \quad \varepsilon \in [-6.0, -0.1]$$

показывает существование *широкого острова допустимых виртуальных элементов*:

- во всём этом окне энергии связей остаются в умеренном диапазоне  $|F_{\max}| \sim 8\text{--}13$  (в тех же единицах, что и для реальных элементов), а спектральная электроотрицательность  $\chi_X$  меняется в узком коридоре  $0.13 \lesssim \chi_X \lesssim 1.95$ ;
- все просканированные комбинации в этом окне порождают устойчивые молекулярные конфигурации, сопоставимые по энергиям с реально наблюдаемыми элементами первых трёх периодов.

Реальные  $s/p$ -элементы периодической Таблицы с  $p \leq 4$  в этой картине интерпретируются как дискретный набор точек на непрерывном острове допустимых спектральных параметров  $(p, \varepsilon)$ . Гипотеза модели состоит в том, что за пределами этого острова (при больших  $p$  или малых по модулю  $\varepsilon$ ) устойчивые атомоподобные конфигурации Среды исчезают.

**Закон живых хабов.** Рассмотрим стохастический процесс роста молекулярного дерева на основе геометрической Таблицы: на каждом шаге к существующему графу  $G$  добавляется новый атом  $v$  с ролью  $\text{role}(v) \in \{\text{terminator}, \text{bridge}, \text{hub}\}$  согласно донорно-акцепторным индексам  $(D, A)$  и энергетическому выигрышу  $\Delta F$ .

Обозначим через  $C[G]$  топологическую сложность графа (информационный функционал из раздела о сложности), а через  $C_{\max}(\text{role})$  — максимальную сложность, достигаемую при росте деревьев, где корневой атом имеет фиксированную роль.

Численный эксперимент показывает, что при одинаковых правилах роста выполняется строгий порядок

$$C_{\max}(\text{hub}) \gg C_{\max}(\text{bridge}) \gg C_{\max}(\text{terminator}),$$

при этом типичные размеры молекул подчиняются тому же неравенству. В частности, для элементов H–Br геометрической Таблицы получаем

$$C_{\max}(\text{hub}) \approx 14, \quad C_{\max}(\text{bridge}) \approx 12, \quad C_{\max}(\text{terminator}) \lesssim 5.$$

**Следствие.** “Живые” химические каркасы (органика, силикатные структуры) реализуются в основном в хаб-секторе Таблицы ( $A \approx 1.24$  для C, N, O, Si, P, S, Ge, As, Se, Br) и в слабом акцепторном подполосе ( $A \approx 0.12$  для B, Al, Ga). Терминаторные элементы при тех же правилах роста дают лишь короткие малоразветвлённые структуры.

**Закон спектральной комплементарности.** Рассмотрим три варианта стохастического роста молекулярных деревьев:

1. **Донорный сценарий:** в пуле роста присутствуют только элементы с донорным индексом  $D > 0$  и слабой акцепторностью (Li, Na, K, Be, Mg, Ca).
2. **Акцепторный сценарий:** в пуле роста только сильные акцепторы ( $A \approx 1.24$ : C, N, O, F, Si, P, S, Cl).
3. **Смешанный сценарий:** рост начинается на хаб-ядрах (C, N, O, Si, P, S), а пул роста включает весь спектр ролей H–Br (доноры, мосты, хабы и терминаторы).

Численные эксперименты показывают, что усреднённая топологическая сложность и характерный размер конфигураций подчиняются иерархии

$$\langle C \rangle_{\text{donor}} \ll \langle C \rangle_{\text{acceptor}} < \langle C \rangle_{\text{mixed}},$$

аналогично для максимальных сложностей  $C_{\text{max}}$  и средних размеров  $\langle N \rangle$ .

В донорном сценарии рост быстро “захлёбывается”: получаются малые многократно повторяющиеся фрагменты (алканоподобные цепочки). В акцепторном сценарии возможно формирование развитых каркасов, но без чёткой функциональной дифференциации. Максимальная же сложность и разнообразие достигаются только в смешанном сценарии, когда в пуле роста одновременно присутствуют донорные и акцепторные роли.

**Интерпретация.** Для появления богатой иерархической химии достаточно, но и необходимо сосуществование спектрально комплементарных классов элементов: одних лишь доноров или одних акцепторов существенно меньше, чем полного смешанного спектра.

**Закон соответствия спектральной электроотрицательности шкале Паулинга.** Спектральная электроотрицательность  $\chi_{\text{spec}}(Z)$  в модели определяется как знаковая функция от геометрического портового функционала  $F_{\text{geom}}$  и эффективной глубины  $\epsilon_{\text{eff}}$ , с учётом роли элемента (donor / bridge / hub / terminator). Чтобы сопоставить её со стандартной шкалой Паулинга  $\chi_{\text{P}}(Z)$ , выполнена линейная калибровка по набору элементов

$$\{\text{H, Li, } \dots, \text{Cl, K, Ca, Ga, Ge, As, Se, Br}\}$$

из геометрической Таблицы.

Результат метода наименьших квадратов даёт аппроксимацию

$$\chi_{\text{P}}(Z) \approx a \chi_{\text{spec}}(Z) + b, \quad a \approx 0.50, \quad b \approx 1.41,$$

с средней квадратичной ошибкой порядка 0.4 по шкале Паулинга. Это означает, что спектральная  $\chi_{\text{spec}}$ :

- воспроизводит относительный порядок элементов по электроотрицательности;
- линейно связана с экспериментальной шкалой без необходимости подгонять параметры по каждому элементу отдельно;
- может рассматриваться как *первопринципная* версия электроотрицательности, возникающая из геометрического и спектрального функционалов модели.

**Закон смешанного спектрального мира.** Для проверки роли различных спектральных секторов в росте сложности рассмотрены три идеализированных сценария:

1. мир *чистых доноров* (элементы Li, Na, K, Be, Mg, Ca);
2. мир *чистых акцепторов* (C, N, O, F, Si, P, S, Cl);
3. *смешанный мир*, включающий доноры, акцепторы и амфотерные элементы (H–Br, кроме инертных газов).

В каждом сценарии запускался стохастический рост деревьев с ограничениями  $N \leq 25$ , глубина  $\leq 4$ , и измерялись средняя и максимальная сложности  $C$  и средний размер молекул.

Полученные значения показывают чёткую иерархию:

$$\langle C \rangle_{\text{donor}} \ll \langle C \rangle_{\text{acceptor}} < \langle C \rangle_{\text{mixed}}, \quad \langle N \rangle_{\text{donor}} \ll \langle N \rangle_{\text{acceptor}} < \langle N \rangle_{\text{mixed}}.$$

В мире чистых доноров рост быстро вырождается в небольшие кластеры и ионные пары; в мире чистых акцепторов возникают более сложные, но всё ещё ограниченные по размеру структуры. Лишь в смешанном мире, где донорные и акцепторные плато сочетаются с амфотерной зоной, распределения  $C$  и  $N$  приобретают длинный хвост: модель порождает широкое разнообразие крупных и топологически сложных молекулярных деревьев.

В этом смысле “живая” спектральная химия требует не только наличия сильных акцепторов, но и *спектрального смешения* донорных, акцепторных и амфотерных ролей.

**Уточнение закона спектрального пояса виртуальных элементов.** Расширенный скан виртуального элемента  $X(p, \varepsilon)$  в области

$$p = 0, \dots, 8, \quad \varepsilon \in [-10, 0]$$

показывает, что при разумных порогах устойчивости (максимальная энергия простейших молекул  $|F_{\text{max}}| < 20$ ) существует широкий *спектральный пояс допустимых* комбинаций  $(p, \varepsilon)$ .

Для портоносных конфигураций ( $p \geq 1$ ) спектральная электроотрицательность  $\chi_X$  остаётся в узком интервале

$$0.1 \lesssim \chi_X \lesssim 2.0,$$

а величины  $|F_{\text{max}}|$  гладко растут от  $\sim 8$  до  $\sim 19$  без катастрофических скачков. При  $p = 0$  модель даёт особый класс конфигураций с малой энергией ( $|F_{\text{max}}| \approx 5.5$ ) и неопределённой  $\chi_X$  — “абсолютно инертные” спектральные капли.

Реальные элементы Периодической таблицы являются дискретным подмножеством этого пояса. Граница же полного исчезновения устойчивости (слишком мягкие или слишком жёсткие  $X$ ) находится за пределами рассмотренного окна и требует дальнейших исследований.

## 28.5 Закон ядерного острова стабильности v0.2

**Определение функционала.** В сферическом приближении ядро описывается целыми числами  $(Z, N)$  и функционалом

$$F_{\text{nuc}}(Z, N) = -B_{\text{drop}}(Z, N) + \lambda_{\text{shell}}(P_p(Z) + P_n(N)) + F_{\text{pair}}(Z, N),$$

где  $B_{\text{drop}}$  — капельная связующая энергия вида

$$B_{\text{drop}} = a_v A - a_s A^{2/3} - a_c \frac{Z(Z-1)}{A^{1/3}} - a_a \frac{(N-Z)^2}{A}, \quad A = Z + N,$$

с коэффициентами  $(a_v, a_s, a_c, a_a)$ , калиброванными по энергии связи нескольких стабильных ядер.

Оболочечная поправка задаётся как сумма протонной и нейтронной “дистанций” до ближайших магических чисел

$$P_p(Z) = \min_{Z_{\text{mag}} \in \{2, 8, 20, 28, 50, 82, 114\}} \left( \frac{Z - Z_{\text{mag}}}{\sigma_p} \right)^2, \quad P_n(N) = \min_{N_{\text{mag}} \in \{2, 8, 20, 28, 50, 82, 126, 184\}} \left( \frac{N - N_{\text{mag}}}{\sigma_n} \right)^2,$$

а парный член

$$F_{\text{pair}}(Z, N) = \begin{cases} -\frac{a_p}{\sqrt{A}}, & Z, N \text{ чётные,} \\ +\frac{a_p}{\sqrt{A}}, & Z, N \text{ нечётные,} \\ 0, & \text{иначе,} \end{cases}$$

отвечает за эффект спаривания нуклонов.

**Закон (остров стабильности v0.2).** При разумном выборе параметров

$$\sigma_p \sim 6, \quad \sigma_n \sim 8, \quad \lambda_{\text{shell}} \sim 20\text{--}40, \quad a_p \sim 10\text{--}15$$

минимумы функционала  $F_{\text{nuc}}(Z, N)$  в плоскости  $Z \in [80, 130]$ ,  $N \in [120, 210]$  образуют:

- долину стабильности для лёгких и средних ядер, проходящую вблизи экспериментально наблюдаемых стабильных нуклидов;
- локальный минимум в области  $Z \approx 116\text{--}120$ ,  $N \approx 184\text{--}192$ , который естественно интерпретируется как *ядерный остров повышенной стабильности* (аналог классического “island of stability” супер-тяжёлых элементов).

Внутри этой модели ядра с чётно-чётными  $(Z, N)$  автоматически оказываются энергетически предпочтительными, а ядра с нечётно-нечётными  $(Z, N)$  подавляются парной поправкой  $F_{\text{pair}}$ .

**Ограничения формулировки.** Данный закон относится к сферическому приближению и использует капельно-оболочечный функционал минимальной сложности. В нём не учитываются: квадрупольные и высшие деформации, трёхосность, динамика деления и канал  $\alpha$ -распада. Магические числа для супер-тяжёлой области задаются явным списком  $\{Z_{\text{mag}}\}$ ,  $\{N_{\text{mag}}\}$  и могут уточняться по мере появления новых микроскопических расчётов и экспериментальных данных. Поэтому версия v0.2 рассматривается как рабочий прототип закона острова стабильности, а не как финальная ядерная теория.

**Долина  $\beta$ -стабильности в функционале  $F_{\text{nuc}}$ .** Для фиксированного атомного номера  $Z$  “предпочтительное” значение числа нейтронов  $N_{\text{best}}(Z)$  в версии v0.2 определяется как минимум ядерного функционала

$$N_{\text{best}}(Z) = \arg \min_N F_{\text{nuc}}(Z, N),$$

где  $F_{\text{nuc}}$  задан капельно–оболочечной формулой с парным членом. Численный просмотр области  $8 \leq Z \leq 82$  показывает, что получающаяся долина  $\beta$ -стабильности носит *ступенчатый* характер по нейтронному числу:

- для лёгких и средних ядер  $N_{\text{best}}(Z)$  группируется вокруг магических нейтронных чисел  $N \simeq 50, 82, 126$ ;
- для тяжёлых элементов (область свинца) отношение  $N_{\text{best}}/Z$  выходит в диапазон  $\sim 1.5\text{--}1.6$ , что качественно согласуется с реальной долиной стабильности, хотя модель несколько переоценивает нейтронность;
- для каждого плато по  $N$  долина представляет собой гладкую по  $Z$  “полку”, которая перескакивает с одного магического значения  $N$  на другое по мере роста  $Z$ .

Таким образом, один и тот же функционал  $F_{\text{nuc}}$  одновременно генерирует и ступенчатую долину  $\beta$ -стабильности, привязанную к магическим нейтронным числам, и остров повышенной стабильности в области ( $Z \approx 116, N \approx 190$ ).

**Спектральные магические числа v0.2 и отрицательный результат.** После построения спектрального оператора  $H_{\text{WS}}$  (потенциал Вудса–Саксона) мы попытались напрямую “подключить” его к капельно–оболочечному функционалу  $F_{\text{nuc}}$  v0.2: заменить список нейтронных магических чисел  $N_{\text{magic}}$  в оболочечном штрафе на набор, извлечённый из спектра  $H_{\text{WS}}$  по гар-анализу.

Численно это даёт отрицательный результат. Для калибровочных ядер от  $^{16}\text{O}$  до  $^{208}\text{Pb}$  линия  $\beta$ -стабильности  $N_{\text{best}}(Z)$  в такой версии функционала сдвигается почти регулярно на  $\Delta N \approx +20$  нейтронов:

$$N_{\text{best}}(Z) \approx N_{\text{real}}(Z) + 20,$$

и средняя ошибка по нейтронному числу возрастает до  $\langle |\Delta N| \rangle \approx 20$  при максимальной  $|\Delta N| = 20$ . Даже вариация веса оболочечного члена и  $A$ -зависимая модификация штрафа слабо меняют картину: базовая асимметрия капельно–кулоновской части остаётся слишком нейтронобогатой.

Спектральный набор  $N_{\text{magic}}^{\text{WS}}$  мы сохраняем как *экспериментальный режим* и используем его в отдельных сканах (например, для тяжёлой оболочки  $N \approx 184$  и анализа острова сверхтяжёлых ядер), но по умолчанию функционал  $F_{\text{nuc}}$  v0.2 продолжает использовать legасу-набор магических чисел. Этот отрицательный результат подчёркивает, что простое добавление спектрального списка в грубый оболочечный штраф недостаточно: для качественного согласия с экспериментом нужен более прямой переход от спектра  $H_{\text{nuc}}$  к эффективному функционалу.

**Ограничения применимости v0.2 для лёгких ядер.** Версия v0.2 ядерного функционала построена как минималистичная капельно–оболочечная модель, ориентированная прежде всего на средние и тяжёлые ядра. В этой схеме:

- капельные коэффициенты  $(a_v, a_s, a_c, a_a)$  калибруются по ограниченному набору средних/тяжёлых нуклидов;
- оболочечная поправка  $P_{\text{shell}}$  задаётся в виде гладких “чаш” вокруг магических чисел и не включает детальную структуру одночастичных уровней и деформаций;



- парный член  $F_{\text{pair}}$  учитывает только грубое различие между чётно–чётными и нечётно–нечётными ядрами.

В результате для лёгких элементов ( $Z \lesssim 20$ ) долина  $\beta$ -стабильности в этой модели смещается к заметно нейтронобогатым конфигурациям ( $N/Z \sim 1.6\text{--}1.7$ ), что не соответствует реальным стабильным изотопам (кислород, неон, магний и т.п.). Поэтому в диапазоне малых  $Z$  функционал  $F_{\text{nuc}}$  следует рассматривать лишь как качественную иллюстрацию конкуренции капельной и оболочечной энергии, а не как количественную теорию. Рабочей областью v0.2 являются, главным образом, средние и тяжёлые ядра с  $Z \gtrsim 20\text{--}30$ , где форма долины и положение острова стабильности описываются на уровне правильного сектора  $(Z, N)$  карты нуклидов.

**Спектральный закон тяжёлой магической оболочки v0.1.** Игрушечный сферически-симметричный оператор ядра  $\hat{H}_{\text{nuc}}^{\text{toy}}$  (радиальное уравнение с квадратной ямой и орбитальным членом  $\ell(\ell + 1)/r^2$ ) имеет дискретный спектр с вырождениями  $g_{n\ell} = 2(2\ell + 1)$ . При накоплении этих уровней по Паули в интегральную функцию  $\mathcal{N}(E)$  появляются крупные ступени при накопленных числах  $N \simeq 92, 184, 214, 256$ , которые играют роль “магических”  $N$  в этой простой спектральной модели.

Если фиксировать такие  $N$  и рассматривать капельно–оболочечный функционал  $F_{\text{nuc}}(Z, N)$  v0.2 как функцию от  $Z$  (по чётно–чётным ядрам), то для  $N \simeq 184$  минимум  $F_{\text{nuc}}$  достигается в узком диапазоне  $Z \approx 114$ ,  $A \approx 298$ ,  $N/Z \approx 1.6$ , то есть именно в той области, где капельно–оболочечная часть модели даёт остров повышенной стабильности (114–118, 188–192). Более высокие спектральные closure-числа  $N \simeq 214, 256$  либо продолжают тянуть минимум  $F_{\text{nuc}}$  к тому же диапазону  $Z$  при существенно худшей связанности, либо соответствуют конфигурациям с  $F_{\text{nuc}}$ , практически теряющим отрицательность. Таким образом, первая тяжёлая спектральная оболочка ( $N \simeq 184$ ) естественным образом “садится” на тот же участок  $(Z, N)$ -плоскости, который уже выделен капельно–оболочечной моделью как центр острова стабильности, и в этом ограниченном смысле v0.2 реализует спектрально согласованный прототип тяжёлой магии.

## 28.6 Спектральная связка ядерной долины и геометрической Таблицы

**Проекция долины  $\beta$ -стабильности на ось атомного номера.** Функционал  $F_{\text{nuc}}(Z, N)$  в версии v0.2 задаёт для каждого атомного номера  $Z$  предпочтительное значение числа нейтронов

$$N_{\text{best}}(Z) = \arg \min_N F_{\text{nuc}}(Z, N),$$

а значит и эффективную массовую конфигурацию  $A(Z) = Z + N_{\text{best}}(Z)$  в пределах I долины  $\beta$ -стабильности. Численные сканы по  $8 \leq Z \leq 82$  показывают, что

- для малых и средних  $Z$  значения  $N_{\text{best}}(Z)$  группируются на плато вокруг магических нейтронных чисел  $N \simeq 50, 82, 126$ ;
- для тяжёлых элементов (область свинца и выше) отношение  $N_{\text{best}}/Z$  выходит в диапазон  $\sim 1.5\text{--}1.6$ , что согласуется с наблюдаемой долиной стабильности на карте нуклидов;

- в тяжёлой области  $80 \leq Z \leq 130$ ,  $120 \leq N \leq 210$  тот же функционал даёт локальный остров повышенной стабильности на even–even-плато вокруг ( $Z \approx 116$ ,  $N \approx 190$ ).

Проекция долины на ось  $Z$  тем самым задаёт “разрешённый” спектр атомных номеров, для которых ядро может существовать в виде одного или нескольких долгоживущих минимальных конфигураций  $A(Z)$ .

**Закон ядерно-спектральной совместимости.** Геометрическая Таблица элементов опирается на независимый набор спектрально-геометрических характеристик атома: роль (*terminator* / *bridge* / *hub* / *inert*), число портов  $p_Z$ , спектральную электроотрицательность  $\chi_{\text{spec}}(Z)$  и донорно–акцепторные индексы ( $D(Z)$ ,  $A(Z)$ ). Численные эксперименты v4.0 показывают, что:

- **живые хабы** геометрической Таблицы (элементы

C, N, O, F, Si, P, S, Cl, Ge, As, Se, Br

с  $A_{\text{index}} = 1.237$  и максимальными значениями геометрической сложности в ростовых процессах) соответствуют именно тем атомным номерам  $Z$ , для которых долина  $\beta$ -стабильности v0.2 задаёт широкие по  $N$  плато  $N_{\text{best}}(Z)$ ;

- экспериментальная ядерная физика подтверждает, что для этих же  $Z$  существует несколько стабильных или долгоживущих изотопов (например, у Ge — пять стабильных изотопов, у Se — шесть, у Kr — несколько стабильных изотопов, у Sn — десять, у Xe — девять), что соответствует широким минимумам  $F_{\text{nuc}}$  по  $N$ ;
- **донорные плато** ( $D > 0$ ,  $A \simeq 0$ ) для Li, Na, K и Be, Mg, Ca, а также **амфотерные хабы** B, Al, Ga занимают “окраины” этих плато: они по-прежнему лежат на долине  $N_{\text{best}}(Z)$ , но обладают более узкими наборами стабильных конфигураций и меньшей средней сложностью в ёлочном росте.

В этом смысле ядро и электронная оболочка оказываются спектрально совместимыми: набор атомных номеров, для которых ядерный функционал  $F_{\text{nuc}}$  допускает широкие и глубокие минимумы (богатый набор стабильных или квазистабильных изотопов), совпадает с набором элементов, которые в геометрической Таблице играют роль “живых” хабов и носителей максимальной структурной сложности. Геометрия и химия здесь выступают разными макроскопическими проекциями одного и того же спектрального состояния Среды: внутри — через  $F_{\text{nuc}}(Z, N)$ , снаружи — через  $F_{\text{geom}}$ ,  $\chi_{\text{spec}}$  и ростовые процессы.

**Закон ядерной  $\beta$ -совместимости геометрических ролей.** Скан долины  $\beta$ -стабильности v0.2 и изотопных полос даёт для каждого элемента ( $Z$ , El) набор параметров ( $N_{\text{min}}$ ,  $N_{\text{max}}$ ,  $N_{\text{best}}$ ): нижнюю и верхнюю границы допустимой нейтронной полосы и оптимальное  $N_{\text{best}}(Z)$  как минимум функционала  $F_{\text{nuc}}(Z, N)$ . Ширину полосы мы задаём как

$$\text{band\_width} = N_{\text{max}} - N_{\text{min}},$$

а положение на долине характеризуем отношением  $N_{\text{best}}/Z$  и нейтронным избытком  $N_{\text{best}} - Z$ .

Если усреднить эти величины по геометрическим ролям (terminator, bridge, hub, inert), а также по отдельным классам d-блока и живых хабов, получается следующая картина. Все роли лежат на нейтронобогатой  $\beta$ -долине с

$$\langle N_{\text{best}}/Z \rangle \approx 1.7\text{--}1.8,$$

причём терминаторы дают типичное значение  $N_{\text{best}}/Z \simeq 1.70$ , мосты —  $N_{\text{best}}/Z \simeq 1.73$ , хабы —  $N_{\text{best}}/Z \simeq 1.77$ . Для живых p-хабов (C, N, Si, P, Ge, As, Sn, Sb) среднее  $\langle N_{\text{best}}/Z \rangle \simeq 1.74$ , для d-блока  $\langle N_{\text{best}}/Z \rangle \simeq 1.75$ . Ширина изотопной полосы во всех группах остаётся небольшой:

$$\langle \text{band\_width} \rangle \approx 2\text{--}3$$

нейтрона; d-металлы дают чуть более узкие полосы ( $\langle \text{band\_width} \rangle \approx 1.9$ ), но в пределах общей дисперсии.

Нейтронный избыток  $\langle N_{\text{best}} - Z \rangle$  растёт вместе с “силой роли”: от  $\sim 11$  для терминаторов и  $\sim 14$  для мостов до  $\sim 16.5$  для хабов и  $\sim 19$  для d-блока. Живые хабы в среднем занимают промежуточную позицию ( $\sim 13$  нейтронов сверх  $Z$ ) из-за смеси лёгких (C, N) и тяжёлых (Sn, Sb) элементов.

Итого, геометрические роли и живые хабы оказываются  $\beta$ -совместимыми: ростовая “живость” и сложность возникают внутри той же узкой нейтронной полосы  $\Delta N \sim 2\text{--}3$  вокруг общей  $\beta$ -линии, а не за счёт выделенной по  $N/Z$  области ядерной карты. Ядро задаёт узкий коридор допустимых  $(Z, N)$ , но различия между терминаторами, мостами, хабами и металлическим супер-хаб-слоем d-блока возникают уже на уровне геометрии и ростовой динамики.

**Отрицательный результат: магические WS-числа в изотопных полосах.** Рассматривалась гипотеза, что спектрально магические нейтронные числа из простого сферического оператора Вудса–Саксона ( $N_{\text{WS}} \in \{8, 20, 40, 112, 142, 184\}$ ) чаще попадают внутрь изотопных “полос” допустимых нейтронных чисел для геометрически “живых” хабов (C, N, Si, P, Ge, As), чем для доноров и остальных элементов. Полоса для данного  $Z$  определялась по капельно–оболочечному функционалу  $F_{\text{nuc}}(Z, N)$  как множество  $N$  с  $F_{\text{nuc}}(Z, N) \leq F_{\text{min}}(Z) + \Delta F$  при фиксированном  $\Delta F \approx 5$ . Численный анализ показал, что при таком выборе параметров ни один из живых хабов не имеет WS-магического  $N$  внутри своей изотопной полосы, а для доноров и прочих элементов попадания встречаются лишь эпизодически (по одному совпадению на группу). В этой формулировке гипотеза отвергается: ядро v0.2 не демонстрирует статистически привилегированного совпадения WS-магических нейтронных чисел с изотопными полосами живых хабов, и данный эффект следует рассматривать как отрицательный результат R&D, а не как закон модели.

## 28.7 Закон геометрической периодичности D/A для s/p-блока

На уровне геометрической модели каждому реальному элементу сопоставляется атомный граф  $G_{\text{atom}}$  с конечным числом портов, локальной симметрией и спектральным индексом  $\chi_{\text{spec}}$ ; из  $\chi_{\text{spec}}$  через линейную калибровку к шкале Полинга строятся безразмерные индексы  $D$  и  $A$  на D/A-плоскости. Фактически эта процедура реализована кодом `core/geom_atoms.py`, калибровочным скриптом `fit_chi_to_pauling.py` и таблицей `data/element_indices_with_dblock.csv`.

Пусть под *геометрическим классом* мы будем понимать конечное множество элементов с одинаковой портовой геометрией (#ports, тип расположения портов) и ролью на D/A-плоскости:

- $s_{\text{donor}}$ : одно- и двухпортовые s-элементы донорного плато (группы 1–2,  $A \approx 0$ ,  $D > 0$ );
- $p_{\text{semihub}}$ : трёхпортовые p-полумосты на слабом акцепторном плато ( $A \approx 0.12$ ,  $D \approx 0$ );
- $p_{\text{acceptor}}$ : p-акцепторы на сильном плато ( $A \approx 1.237$ ,  $D \approx 0$ );
- $\text{inert}$ : инертные газы ( $D \approx 0$ ,  $A \approx 0$ ).

Тогда в диапазоне атомных номеров, покрываемом текущей геометрической таблицей (Geom-Mendeleev v1, файл `results/geom_periodic_table_v1.csv`), выполняется следующий эмпирический закон.

[Закон геометрической периодичности D/A для s/p-блока] Рассмотрим элементы одного и того же геометрического класса  $C$  и разных периодов  $p$  (в обычном смысле периодов 2, 3, 4, 5 по  $Z$ ). Обозначим через  $D_{C,p}$  и  $A_{C,p}$  выборочные средние индексов  $D$  и  $A$  по всем элементам класса  $C$  в периоде  $p$ , а через  $\bar{D}_C$ ,  $\bar{A}_C$  — глобальные средние по классу  $C$ .

Тогда для каждого из классов

$$C \in \{s_{\text{donor}}, p_{\text{semihub}}, p_{\text{acceptor}}, \text{inert}\}$$

наблюдается *геометрическая периодичность* D/A-индексов:

$$D_{C,p} \approx \bar{D}_C, \quad A_{C,p} \approx \bar{A}_C \quad (95)$$

для всех реализованных периодов  $p$ , причём разброс внутри класса по периодам не превышает численного шума, задаваемого калибровкой  $\chi_{\text{spec}} \rightarrow \chi_{\text{Pauling}}$ . Иными словами, D/A-координаты зависят главным образом от геометрического класса атомного графа и практически не зависят от номера периода.

Численная проверка этого закона реализована в скрипте `analysis/test_geom_periodicity_sp`, который:

- читает таблицу `data/element_indices_with_dblock.csv`;
- классифицирует элементы по геометрическим классам  $C$  через функцию `classify_geom_row` (скрипт `export_geom_periodic_table.py`);
- вычисляет  $(D_{C,p}, A_{C,p})$  для всех комбинаций  $(C, p)$  и глобальные средние  $(\bar{D}_C, \bar{A}_C)$ ;
- записывает агрегированные статистики в файл `results/geom_periodicity_sp_stats.txt`.

В пределах текущего диапазона  $Z$  все четыре геометрических класса демонстрируют постоянство  $D$  и  $A$  по периодам с отклонениями, не выходящими за рамки численной калибровки. Таким образом, в модели `geom-spec v4.0` s/p-блок поддерживает строгий закон геометрической периодичности D/A-индексов.

## 28.8 Закон универсального d-слоя

Для d-блока в геометрической таблице вводится отдельный класс  $d_{\text{octa}}$ : шестипортовые октаэдрические атомные графы (реализованные в коде как `port_geometry = "octa"`, `#ports = 6`) с характерной металлической ролью на D/A-плоскости. В текущей реализации `geom-spec v4.0` в этот класс попадают по крайней мере элементы 3d-ряда (Sc–Zn), а геометрическая конструкция предназначена для переноса и на более тяжёлые d-элементы.

Ранее на основании ростовых сканов (`analysis/scan_dblock_complexity.py`) был сформулирован закон металлического супер-хаб-слоя: d-элементы создают слой сложности, лежащий существенно выше p-хабов при близкой ядерной  $\beta$ -линии. Geom-Mendeleev v2 уточняет этот закон, добавляя в него периодическую составляющую.

[Закон универсального d-слоя] Рассмотрим все элементы, отнесённые к геометрическому классу  $d_{\text{octa}}$ , и для каждого элемента обозначим:

- $(D, A)$  — его индексы на D/A-плоскости из таблицы `element_indices_with_dblock.csv`;
- $p$  — период (по атомному номеру  $Z$ );
- $\langle C \rangle$  и  $C_{\text{max}}$  — среднюю и максимальную сложности ростовых графов grower'a из master-таблицы `geom_nuclear_complexity_summary.csv`.

Тогда в пределах существующих данных выполняются следующие свойства:

1. **Универсальность D/A-позиции.** Средние значения  $D$  и  $A$  для d-элементов одного периода практически совпадают между собой и по периодам:

$$D_{d_{\text{octa}},p} \approx \overline{D}_{d_{\text{octa}}}, \quad A_{d_{\text{octa}},p} \approx \overline{A}_{d_{\text{octa}}} \quad (96)$$

для всех периодов  $p$ , по которым имеются данные. Таким образом, d-блок образует единый «металлический слой» на D/A-плоскости.

2. **Универсальность ростовой сложности.** Аналогично, средние значения  $\langle C \rangle_{d_{\text{octa}},p}$  и максимальные сложности  $C_{\text{max},d_{\text{octa}},p}$  по периодам лежат в узком диапазоне вокруг глобальных средних по классу  $d_{\text{octa}}$  и существенно превосходят соответствующие значения для p-хабов. То есть для всех реализованных периодов d-элементы поддерживают один и тот же уровень максимальной сложности ростовых конфигураций.

В совокупности это позволяет трактовать d-блок как *универсальный металлический слой* геометрической таблицы: при изменении периода меняется ядро (масса,  $N/Z$ ), но не характерное положение d-элементов на D/A-плоскости и не их ростовой потенциал по сложности.

Численная проверка закона универсального d-слоя реализована скриптом `analysis/test_d_block` который:

- читает `data/element_indices_with_dblock.csv` и `data/geom_nuclear_complexity_summary.csv`;
- выделяет элементы класса  $d_{\text{octa}}$  через функцию `classify_geom_row`;
- объединяет геометрические и сложностные характеристики по ключу  $(Z, \text{El})$ ;
- вычисляет периодические и глобальные статистики по  $(D, A, \langle C \rangle, C_{\text{max}})$ ;
- записывает итоговую таблицу и краткое текстовое резюме в `results/d_block_universality_summary.csv`.

Полученные в этом анализе числа подтверждают, что d-элементы, доступные в текущей версии модели, действительно реализуют один и тот же «металлический супер-хаб-слой» вне зависимости от периода, в котором они располагаются.

## 28.9 Закон роста деревьев в модели “Christmas Tree”

Ростовая модель, реализованная в модуле `grower.py`, строит молекулярные графы как вероятностное дерево роста: из семенного атома с заданной ролью (`terminator/bridge/hub`) запускается процесс добавления новых узлов по свободным портам, с ограничениями по максимальному размеру и глубине и с роль-зависимыми вероятностями продолжения роста. В “живых” секторах параметров (`Living Sectors`) большая часть построенных конфигураций оказывается деревьями или графами с очень малым числом циклов.

Топологическая сложность  $C(G)$  вычисляется функционалом `compute_complexity_features` из `complexity.py`, который аппроксимирует “дерево + циклы” схемой

$$C(G) = \left( \underbrace{0.1 n(G)}_{\text{ветвящаяся “масса” дерева}} + \underbrace{\text{cyclomatic}(G) \cdot (1 + \bar{C}_{\text{loc}})}_{\text{цикл-часть}} \right) \cdot \Phi_{\text{deg,var,clust}}(G) \cdot \log_2(1 + n(G)),$$

где  $n(G)$  — число вершин,  $\bar{C}_{\text{loc}}$  — средний локальный кластеринг, а  $\Phi_{\text{deg,var,clust}}$  — слабо меняющийся множитель, зависящий от плотности, дисперсии степеней и кластеринга.

В *деревянном режиме*  $\text{cyclomatic}(G) \approx 0$  и цикл-компонента пропадает, так что асимптотически

$$C(G) \approx \alpha_{\text{tree}}(G) n(G) \log(1 + n(G)),$$

где коэффициент  $\alpha_{\text{tree}}(G)$  слабо зависит от локального ветвления и фактически определяется ролью семенного атома и допустимым набором ролей в ростовой экосистеме. Численные сканы `scan_living_sectors.py`, `scan_living_sectors_segreated.py` и специальный тест `test_tree_growth_law.py` показывают, что нормализованный показатель

$$\frac{C(G)}{n(G) \log(1 + n(G))}$$

концентрируется в узких кластерах для разных рольевых семян: `bridges` дают один характерный уровень, `p-hubs` — существенно более высокий, а `terminators` остаются в “мёртвом” режиме с малым  $n$  и слабым ростом сложности.

[Закон роста деревьев] В живых секторах ростовой модели “Christmas Tree” большинство молекулярных конфигураций являются деревьями с асимптотическим ростом сложности

$$C(G) \sim \alpha_{\text{tree}} n(G) \log(1 + n(G)),$$

где  $\alpha_{\text{tree}}$  — устойчивый, роль-зависимый коэффициент. Отличия между элементами в этом режиме проявляются не в самой форме зависимостей  $C(n)$  (она одинакова для всех живых деревьев), а в уровнях нормированной сложности  $C(G)/(n \log(1 + n))$ , задающих иерархию `terminator`  $\ll$  `bridge`  $\ll$  `hub`.

## 29 Текущий охват модели (“зелёная зона”)

### Сводка геометрических и ядерно-геометрических законов

**Закон ролей на D/A-плоскости.** Элементы, размещённые на плоскости индексов  $(D, A)$ , распадаются на устойчивые роли: *terminator*, *bridge*, *hub*, *inert*. Роли являются геометрическими аттракторами: небольшие изменения спектрального индекса  $\chi_{\text{spec}}$  или параметров калибровки почти всегда оставляют элемент в том же классе.

**Статус в QSG v5.0.** На уровне реализации QSG v5.0 закон распределения ролей на D/A-плоскости является *наблюдаемым и устойчивым законом зелёной зоны* для элементов H–Kr. Кратко:

- **Источник.** Закон выводится из геометрической модели атома (портовая структура и роли) и калиброванной спектральной электроотрицательности  $\chi_{\text{spec}}(Z)$  для s/p-блока, с последующим построением индексов ( $D, A$ ).
- **Поддержка в коде.** Реализован в пайплайне QSG v5.0: модули `core/geom_atoms.py`, анализ `analysis/compute_element_indices.py`, итоговые таблицы `data/element_indices` и `geom_periodic_table_v1.csv`. В этих данных роли и D/A-индексы для H–Ar устойчиво воспроизводятся при повторных расчётах.
- **Ограничения.** В полной форме закон подтверждён для s/p-блока (H–Ar) и частично распространён на первый d-период с эмпирическим расширением по  $\chi_{\text{spec}}$  (см. статус d-блока). Расширение на более тяжёлые элементы и строгий вывод из континуального оператора  $\hat{H}[\theta]$  отнесены к жёлтой зоне модели.

**Закон донорных и акцепторных плато.** s-блок образует донорные плато по  $D$  при  $A \approx 0$  (первый и второй столбцы), p-элементы с тройной координацией формируют слабое полуплато  $A \approx 0.12$ , а классические p-акцепторы (C, N, O, F и их тяжёлые аналоги) лежат на сильном плато  $A \approx 1.237$  при  $D \approx 0$ . Между ними возникает узкая амфотерная прослойка, поддерживающая переключаемую роль.

**Закон живых хабов.** При росте молекулярных деревьев ростовой машиной средняя и максимальная сложность графа  $\langle C \rangle, C_{\text{max}}$  монотонно возрастают при переходе от terminator к bridge и далее к hub, причём живые p-хабы дают наибольшие значения сложности и размеров. Таким образом, хабовые роли выступают как *живые центры* роста, концентрирующие большую часть сложных конфигураций.

**Закон спектральной комплементарности миров.** В донор-only мире рост ограничен и сложность графов мала; в чисто акцепторном мире структура становится существенно более богатой, а в смешанном donor/акцептор-мире достигается максимальный спектр топологий и значений  $C(G)$ . Химический «ландшафт» определяется не отдельным элементом, а экосистемой ролей, которые допускает ростовая модель.

**Закон геометрической периодичности D/A (s/p-блок).** Индексы ( $D, A$ ) для s-доноров, s-мостов, p-полухабов и p-акцепторов зависят главным образом от геометрического класса атомного графа и практически не зависят от номера периода. В модели geom-spec v4.0 каждый класс (s\_donor, s\_bridge, p\_semihub, p\_acceptor, inert) поддерживает почти постоянные значения  $D$  и  $A$  по всем реализованным периодам, что подтверждено анализом `test_geom_periodicity_sp.py`.

**Закон универсального d-слоя.** Элементы d-блока, относимые к классу шестипортовых октаэдрических графов  $d_{\text{octa}}$ , образуют единый металлический слой: их положение на D/A-плоскости и характеристики ростовой сложности ( $\langle C \rangle, C_{\text{max}}$ ) слабо зависят от периода, но заметно превосходят p-хабы. Численные сканы (`scan_dblock_complexity.py`, `test_d_block_universality.py`) показывают устойчивый «металлический суперхаб-уровень» d-блока.

**Закон ядерной  $\beta$ -совместимости геометрических ролей.** Статус реализации для d-блока. Следует подчеркнуть, что на уровне реализации QSG v5.0 d-слой геометрической таблицы носит *экспериментальный* характер. В текущем коде d-элементы первого d-периода включены через линейную калибровку спектральной электроотрицательности  $\chi_{\text{spec}}$  по табличным значениям Паулинга, без полноценной геометрической модели атома d-элемента. Поэтому любые утверждения о “универсальном d-слое” следует на данном этапе рассматривать как рабочую гипотезу, а не как завершённый закон модели. Перевод d-блока на тот же геометрический и спектральный движок, что используется для s/p-блока, отнесён к жёлтой зоне.

**Статус реализации для ядерного модуля.** На уровне QSG v5.0 ядерный функционал  $F_{\text{нuc}}$  реализован в виде отдельной полуэмпирической модели, подогнанной под ограниченный набор стабильных ядер. Связь между геометрической таблицей (D/A-индексы, роли, сложность атомного графа) и ядерной стабильностью в текущей реализации носит характер пост-фактум-корреляций и визуализаций, а не выводится строго из единого спектрального оператора  $\hat{H}[\theta]$ . Поэтому формулировки, связывающие геометрические роли и долину стабильности, на данном этапе следует трактовать как предварительные гипотезы. Построение строгого моста между геометрическим и ядерным слоями отнесено к жёлтой зоне модели.

Все геометрические роли (terminator, bridge, hub, d-слой) живут на одной и той же нейтробогадой  $\beta$ -долине  $N_{\text{best}}/Z \approx 1.7\text{--}1.8$ , определяемой функционалом  $F_{\text{нuc}}$ . Различия по ростовой живости и сложности возникают уже внутри этого узкого ядерного коридора, а не за счёт разных  $N/Z$ .

**Негативный закон прямой WS-калибровки.** Прямое включение спектральных WS-магических чисел в оболочечный член  $F_{\text{нuc}}$  приводит к систематическому смещению  $\beta$ -долины и росту ошибки по  $|N_{\text{best}} - N_{\text{exp}}|$ . Поэтому WS-режим остаётся экспериментальным, а в базовой модели используются legacy-наборы магических чисел, согласованные с наблюдаемым островом стабильности.

**Закон роста деревьев.** В ростовой модели “рождественской ёлки” при живых параметрах почти все сгенерированные молекулы являются деревьями (цикломатическое число  $\text{cyclomatic}(G) \approx 0$ ). Для таких графов функционал сложности принимает вид  $C(G) \sim \alpha_{\text{tree}} n(G) \log(1 + n(G))$ , где  $n(G)$  — число вершин, а коэффициент  $\alpha_{\text{tree}}$  медленно зависит от ролевого состава и локального ветвления. Нормированная величина  $C(G)/(n \log(1 + n))$  концентрируется вокруг устойчивых уровней для донорных мостов и хабов, задавая универсальную “ёлочную” траекторию роста сложности в живых секторах.

Под “зелёной зоной” будем понимать те элементы модели, которые уже доведены до уровня рабочей численной реализации (пусть и в виде упрощённых прототипов).

**Зелёная зона (реализовано и используется в QSG v5.0).** На момент версии QSG v5.0 в зелёную зону входят следующие элементы модели:

- **Геометрический атом для элементов  $Z = 1 \dots 36$  (H–Kr).** Для s/p-блока (H–Ar) используется геометрически заданная портовая структура, роли (terminator / bridge / hub / inert) и базовые параметры атомного графа. Для первого d-периода (Sc–Zn, Y–Cd) на уровне QSG v5.0 задействовано частично эмпирическое расширение по  $\chi_{\text{spec}}$  и ролям (см. обсуждение статуса d-блока ниже).



- **Спектральная электроотрицательность и D/A-индексы.** Калиброванная  $\chi_{\text{spec}}(Z)$  для s/p-блока, построение индексов ( $D$ ,  $A$ ) и классификация элементов по донорным/акцепторным/амфотерным/инертным ролям.
- **Стохастический рост деревьев (Grower) в деревьевом режиме.** Генерация молекулярных графов без циклов для стандартных наборов семян, с контролем статистики размеров и сложности.
- **Функционал сложности для деревьев (v1 и FDM).** Инварианты сложности для деревьев и феноменологический закон роста сложности  $C_1(n) \approx \alpha_{\text{tree}} n \log(1 + n)$  с численно зафиксированными значениями  $\alpha_{\text{tree}}^{(v1)}$  и  $\alpha_{\text{tree}}^{(\text{FDM})}$  в диапазоне типичных размеров деревьев текущего генератора.
- **Параметр мягкости  $s(Z)$  для ростовой динамики.** Используется в QSG v5.0 для дифференциации поведения деревьев, в частности  $s(C) = 0.0$ ,  $s(Si) = 0.30$ , что приводит к меньшим размерам и сложностям деревьев  $Si$  по сравнению с  $C$  при равных условиях роста.  $-\nabla \cdot (c^2 \nabla)$ .
- Вычисление нескольких низших собственных частот и мод, построение игрушечной DOS.

#### **Symmetric Newton как рабочий оптимизатор.**

- Реализован и протестирован на задачах поиска экстремумов одномерных и маломерных функционалов.
- Используется для подгонки параметров простых спектральных моделей.

#### **Материаловедческий стенд.**

- Игрушечные модели “насосов”, дефектов, локальных мод, карт LDOS на 2D-решётках.
- Возможность визуализации распределения амплитуд и локализации мод.

#### **Мини-таблица H–Ne как набор прототипов.**

- Зафиксированы геометрические прототипы для H, He, Li, Be, B, C, N, O, F, Ne.
- Описана связь этих прототипов с валентностью и инертностью на качественном уровне.

Эта область уже пригодна для численных экспериментов, отладки кода и первых поставлений с наблюдаемыми эффектами на качественном уровне.

## **30 Незавершённые блоки (“жёлтая зона”)**

Под “жёлтой зоной” понимаются элементы модели, для которых:

- концептуальная схема и формулы уже заданы в этом документе;
- но реализация либо отсутствует, либо выполнена частично и требует доработок, тестирования и калибровки.

К жёлтой зоне относятся:

- **Модельный оператор  $\hat{H}[\theta]$  для солитонов.**
  - Необходимо согласованно определить поле  $c(\theta, x)$  для конфигураций, описываемых графами/узлами  $G_\theta$ .
  - Нужны тесты на устойчивость спектра при деформациях  $\theta$  и смене топологии.
- **Функционал массы  $M_{\text{sol}}[\theta]$ .**
  - Схема “спектр + топология” уже сформулирована, но конкретный вид весов  $w(\omega)$  и нормировочных коэффициентов требует калибровки по реальным массам (протон, нейтрон, лёгкие ядра).
- **Функционал уровней  $F_{\text{levels}}$ .**
  - Необходимо реализовать:
    1. штраф за отклонение вычисленных уровней от экспериментальных;
    2. штраф за низкопорядковые резонансы (устойчивость);
    3. интерфейс к модулю DOS/LDOS.
  - Требуются модели для водорода и гелия как базовые тесты.
- **Геометрический функционал  $F_{\text{geom}}$ .**
  - Нужно зафиксировать конкретный набор геометрических характеристик (число пересечений, меры симметрии, ветвистости и т.п.).
  - Ввести нормировку и весовые коэффициенты так, чтобы минимума достигали ожидаемые конфигурации (He, C, Ne и др.).
- **Систематические расчёты для H–Ne.**
  - Для каждого  $Z \leq 10$  необходимо:
    1. задать семейство прототипов  $G_{\theta_Z}$ ;
    2. провести оптимизацию по  $\theta_Z$ ;
    3. сравнить спектральные и геометрические свойства с экспериментом/химией.
- **Интеграционные схемы повышенной точности.**
  - Базовые интегралы по  $\omega$  и  $x$  уже определены, но не реализованы адаптивные и многомасштабные схемы.
  - Фрактальный метод разложения (FDM) пока существует только на уровне постановки.

По мере закрытия этих задач элементы будут переноситься в зелёную зону.

## 31 Дальняя программа (“красная зона”)

“Красная зона” — это программа исследований на годы вперёд. Здесь находятся задачи, для которых:

- пока нет общепринятой физической картины;
- внутри данной модели сформулированы только общие направления;
- требуется серьёзная теоретическая и численная работа, а также независимая экспериментальная проверка.

К красной зоне относятся:

- **Микрофизика Среды.**
  - В этом документе Среда рассматривается как эффективный континуум. Вопрос о её “микроскопической” структуре (дискретность, субволновые степени свободы и т.п.) отложен.
- **Полная карта узлов/частиц.**
  - Требуется построить сопоставление между классами узлов и наблюдаемыми типами частиц (лептоны, барионы, мезоны и др.).
  - Нужен систематический расчёт масс и уровней для большого числа топологий.
- **Химия и материалы за пределами лёгких элементов.**
  - Расширение Геометрической Таблицы на тяжёлые элементы, изотопы, сложные молекулы.
  - Применение теоремы “ёлки” и деревьев роста для реальных кристаллов и аморфных структур.
- **Динамика и нестационарные процессы.**
  - Проскальзывание солитонов, столкновения, распады.
  - “Зажигание” и “затухание” узлов в Среде.
- **Космологические и астрофизические явления.**
  - Описание вращения галактик, кластеров и космических структур через спектральный потенциал.
  - Переформулировка тёмной материи и тёмной энергии как спектральных эффектов.
- **Экспериментальные тесты нового типа.**
  - Поиск специфических спектральных и геометрических сигнатур (в лаборатории и астрофизике), которые не объясняются стандартной моделью.

## 32 Связь с существующей литературой

В этой работе сознательно используется минимальный набор внешних понятий, однако модель не возникает в пустоте. Ниже схематично обозначены направления, с которыми она концептуально перекликается.

- **Спектральные подходы к геометрии и гравитации.**

- Операторное описание пространства и поля через спектр  $\hat{H}$  и плотность состояний.
- Идея логарифмического потенциала  $\phi \sim -\ln \rho_{\text{spec}}$  и спектральной кривизны.

- **Твёрдотельная физика и DOS.**

- Понятия DOS и LDOS, сингулярности Ван Хофа.
- Методы функций Грина и KKR-подобные схемы для расчёта спектров.

- **Топологические солитоны и узлы.**

- Представление частиц как вихревых/узловых структур.
- Использование топологических инвариантов (число пересечений и др.) как мер сложности.

- **Фрактальные и деревообразные структуры.**

- Математика ветвящихся деревьев, распределений расстояний и предельного поведения (“ёлки”).
- Применение к росту молекул, кристаллов и сетей связей.

Данный документ принимает эти направления как вдохновляющий фон, но формулирует *самодостаточную* модель в собственных терминах (Среда, спектр, солитоны, функционалы).

## 33 Организация кода и репозиториев

Для практической работы с моделью и совместной разработки кода целесообразно придерживаться следующей структуры.

### 33.1 Численный движок: FDM, топологическая сложность и рост деревьев

В этом разделе мы фиксируем три вычислительных ”кирпича на которых строится спектральная геометрия атомов и молекул.

**Fractal Decomposition Method (FDM).** Это численный метод интегрирования сильно неоднородных спектральных плотностей в многомерных пространствах. Вместо равномерной сетки мы используем фрактальное разбиение области (итерационные функции и фрактальную декомпозицию), которое даёт быструю сходимость для солитоноподобных ”ям”  $\rho_{\text{spec}}(x)$ . В коде это реализуется модулем `fdm.py` и используется для оценки энергетических интегралов по 3D-ядру атома.

**Топологическая сложность и число пересечений.** Сложность графа-атома можно выражать не только через числа узлов и рёбер, но и через число пересечений при вложении в плоскость или пространство. Работы по связи `crossing number` с инвариантами Громова–Виттена позволяют заменить комбинаторный перебор на геометрический функционал. В книге мы обозначаем эту часть как  $F_{\text{complex}}$  и выносим её в отдельный модуль `complexity.py`.

**Теорема рождественской ёлки.** Рост молекул и кристаллов в Среде можно описывать как вероятностный рост дерева с затухающими ветвлениями. ”Ёлочная” теорема формализует баланс между ветвлением и затуханием. В нашем коде этому соответствует модуль `grower.py`, который будет использоваться для генерации сложных молекулярных графов как альтернативу ручной сборке структур.

Всё это вместе образует ”численный движок” геометрической таблицы атомов: FDM считает интегралы по Среде,  $F_{\text{complex}}$  измеряет топологическую сложность ядер, а генератор деревьев описывает рост молекул и кристаллов.

## Структура репозитория

- `/docs/`
  - LaTeX-исходники этого документа (текущая книга).
  - Отдельные заметки по численным экспериментам.
- `/core/`
  - Базовые структуры данных (сетки, графы, параметры  $\theta$ ).
  - Общие утилиты (линейная алгебра, логирование).
- `/env/`
  - Реализация спектральной Среды и модуля гравитации (раздел 25).
- `/operatorH/`
  - Построение  $H(\theta)$ , расчёт DOS/LDOS (раздел 26).
- `/functionals/`
  - Реализации  $F_{\text{levels}}$ ,  $F_{\text{geom}}$ ,  $F_{\text{atom}}$ ,  $M_{\text{sol}}$  и др.

- /optimize/
  - Symmetric Newton и вспомогательные методы.
  - Модуль интегралов по  $\omega$ ,  $x$  и  $\theta$ .
- /examples/
  - Набор сценариев:
    1. гравитация простых спектральных ям;
    2. игрушечные решётки и LDOS-карты;
    3. прототипы атомов H, He, C, O, Ne.
- /tests/
  - Набор регрессионных тестов и проверок корректности (сходимость, симметрии, сохранение норм).

## Практические рекомендации

- Каждая новая физическая идея должна сопровождаться:
  1. формулировкой в терминах  $\rho_{\text{spec}}$ ,  $\hat{H}[\theta]$ , функционалов;
  2. минимальным численным примером в /examples/;
  3. тестом в /tests/, который фиксирует ожидаемое поведение.
- Любые изменения в фундаментальных определениях (способ построения  $H$ , вид  $F_{\text{atom}}$  и т.п.) должны сначала обсуждаться и фиксироваться в /docs/ с указанием мотивировки.
- Репозиторий должен быть пригоден как для теоретической работы (анализ функционалов), так и для инженерных задач (материаловедение, моделирование сред).

Эта организация кода и документации должна обеспечить воспроизводимость результатов и постепенное наращивание возможностей модели без потери целостности.

## 34 Игрушечные модели и проверочные эксперименты

Вся онтология Среды, спектров и солитонов построена так, чтобы в принципе описывать реальный мир. Но на нулевой стадии гораздо проще и надёжнее работать с *игрушечными моделями*: сильно упрощёнными версиями Среды, где всё можно посчитать, визуализировать и руками проверить формулы из предыдущих разделов.

В этой секции мы фиксируем несколько базовых игрушечных моделей, которые должны сопровождать развитие кода и служить постоянными тестами адекватности онтологии.

### 34.1 1D-модель Среда на отрезке

Начнём с максимально простого случая: одномерная Среда на отрезке  $[0, L]$ . Координату обозначим  $x \in [0, L]$ , а поле малых колебаний —  $\psi(x, t)$ .

#### Линейный оператор малых колебаний

Игрушечный оператор малых колебаний  $\hat{H}$  возьмём в виде

$$\hat{H}\psi(x) = -\frac{d}{dx}\left(c^2(x)\frac{d\psi}{dx}\right) + V_{\text{eff}}(x)\psi(x), \quad (97)$$

с граничными условиями, например, Дирихле

$$\psi(0) = \psi(L) = 0.$$

Здесь:

- $c(x)$  — локальная «скорость волн» в Среде,
- $V_{\text{eff}}(x)$  — эффективный потенциал, отвечающий за локальные спектральные особенности (ямы, барьеры и т.п.).

Спектр  $\hat{H}$  задаётся задачей на собственные значения

$$\hat{H}\psi_n(x) = \omega_n^2\psi_n(x), \quad n = 1, 2, \dots \quad (98)$$

с ортонормированием

$$\int_0^L \psi_n(x)\psi_m(x) dx = \delta_{nm}.$$

#### Дискретизация и матрица $H$

Для численной реализации вводим сетку

$$x_j = j \Delta x, \quad j = 0, 1, \dots, N, \quad \Delta x = \frac{L}{N}.$$

Пусть значения поля на внутренних узлах  $j = 1, \dots, N-1$  собраны в вектор

$$\Psi = (\psi_1, \dots, \psi_{N-1})^\top.$$

Тогда оператор  $\hat{H}$  заменяется разреженной матрицей  $H$  размера  $(N-1) \times (N-1)$ , которая реализует дискретный аналог формулы (97). В простейшем симметричном варианте:

$$(H\Psi)_j = -\frac{1}{\Delta x} \left[ c_{j+\frac{1}{2}}^2 \frac{\psi_{j+1} - \psi_j}{\Delta x} - c_{j-\frac{1}{2}}^2 \frac{\psi_j - \psi_{j-1}}{\Delta x} \right] + V_j \psi_j, \quad (99)$$

где:

$$c_{j\pm\frac{1}{2}}^2 = c^2(x_j \pm \frac{1}{2}\Delta x), \quad V_j = V_{\text{eff}}(x_j).$$

Этот рецепт дискретизации — первый тест для модуля `/operatorH/`: на нём удобно проверять корректность построения разреженной матрицы и численных методов поиска собственных значений.

## Игрушечный солитон как одна спектральная яма

В одномерной игрушечной модели «солитон» можно смоделировать как локальную спектральную яму — область, где  $V_{\text{eff}}(x)$  понижен относительно фона, а  $c(x)$  слегка модифицирован:

$$V_{\text{eff}}(x) = V_0 - \Delta V \exp\left[-\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma^2}\right], \quad (100)$$

$$c(x) = c_0 \left(1 - \varepsilon_c f_c(x)\right), \quad f_c(x) \text{ тоже локализована около } x_0. \quad (101)$$

Интуитивно:

- «частица» — это локальная мода (или набор мод) в яме (100);
- «масса» этой частицы связана с тем, как сильно изменён спектр  $\hat{H}$  по сравнению с пустым фоном.

Здесь можно явно увидеть связь онтологии с численным экспериментом:

1. Сначала считаем собственные значения для пустого фона ( $\Delta V = 0$ ,  $\varepsilon_c = 0$ ).
2. Потом вводим яму (100), (101) и пересчитываем спектр.
3. Разность в DOS/LDOS интерпретируем как вклад солитона в энергетический функционал  $F$  и эффективную массу.

## 34.2 Две ямы и аналог гравитационного притяжения

Следующий шаг — модель с двумя спектральными ямами на отрезке:

$$V_{\text{eff}}(x) = V_0 - \Delta V \left[ \exp\left(-\frac{(x-x_1)^2}{2\sigma^2}\right) + \exp\left(-\frac{(x-x_2)^2}{2\sigma^2}\right) \right].$$

Идея такая:

- при большом расстоянии  $|x_1 - x_2|$  каждая яма ведёт себя почти независимо, спектр — грубая сумма двух одиночных;
- при сближении ям появляются расщепления уровней, изменяется DOS/LDOS между ними;
- этот сдвиг спектрального функционала  $F$  можно интерпретировать как эффективный «потенциал взаимодействия» двух солитонов.

В рамках онтологии Среды «гравитация» между солитонами должна проявляться как стремление конфигурации минимизировать общий функционал  $F$ , который чувствителен к спектру *Системы в целом*, а не к каждой яме отдельно.

Игрушечный численный эксперимент:

1. Фиксируем параметры одной ямы (масштаб, глубину, форму).
2. Вводим вторую яму с теми же параметрами и начинаем двигать расстояние  $d = |x_1 - x_2|$ .



3. Для каждого  $d$  пересчитываем спектр, DOS/LDOS и функционал  $F(d)$ .
4. Строим график  $F(d)$  и смотрим, есть ли минимум при конечном  $d$  и какая асимптотика при больших  $d$ .

Если минимальная модель Среды жизнеспособна, то на таком уровне должен проявиться хотя бы грубый аналог притяжения: при небольших деформациях  $c(x)$  и  $V_{\text{eff}}(x)$  общий функционал выгоднее делать ямы ближе, чем бесконечно далеко друг от друга.

### 34.3 Проверка принципа эквивалентности (игрушечная версия)

В обычной физике принцип эквивалентности формулируется как равенство инертной и гравитационной масс. В спектральной онтологии можно предложить следующий игрушечный тест.

#### Инертная масса в 1D-модели

Рассмотрим в 1D-модели солитонную конфигурацию (одну яму) и сдвинем её как целое:

$$x_0 \longrightarrow x_0 + \delta x.$$

Инертную массу можно связать с «ценой» ускоренного движения этой конфигурации. На уровне игрушечной модели это сводится к оценке эффективного кинетического термина в пространстве параметров  $\theta = x_0$ :

$$M_{\text{inert}}^{(\text{toy})} \propto \left\langle \frac{\partial \psi_\theta}{\partial \theta}, \frac{\partial \psi_\theta}{\partial \theta} \right\rangle, \quad (102)$$

где  $\psi_\theta$  — набор собственных мод или эффективное поле, описывающее конфигурацию.

#### Гравитационная масса в 1D-модели

Гравитационная масса в онтологии Среды связана с тем, насколько конфигурация деформирует спектральную Среду и тем самым меняет гравитационный функционал Среды. В 1D-модели можно определить игрушечную гравитационную массу как:

$$M_{\text{grav}}^{(\text{toy})} \propto \int_0^L [\rho_{\text{spec}}(x; \theta) - \rho_{\text{spec}}^{(0)}(x)] dx, \quad (103)$$

где  $\rho_{\text{spec}}^{(0)}$  — спектр пустой Среды, а  $\rho_{\text{spec}}(x; \theta)$  — спектр с солитоном.

Задача для игрушечного кода: показать, что

$$M_{\text{inert}}^{(\text{toy})} \approx M_{\text{grav}}^{(\text{toy})}$$

для широкого класса ям (100), (101). Если это выполняется хотя бы качественно, то есть смысл надеяться, что в более реалистичных моделях Среды сохранится аналог принципа эквивалентности.

### 34.4 3D-игрушка: минимальный объёмный прототип атома

Двумерная решётка полезна для визуализации, но реальная геометрическая таблица атомов живёт в трёх измерениях. Поэтому нам нужна минимальная 3D-игрушка: достаточно простая для численного эксперимента, но уже содержащая характерные объёмные эффекты.

## Область, сетка и оператор

Рассматриваем трёхмерную область

$$(x, y, z) \in [0, L_x] \times [0, L_y] \times [0, L_z]$$

с равномерной сеткой

$$x_i = i \Delta x, \quad i = 0, \dots, N_x, \quad y_j = j \Delta y, \quad j = 0, \dots, N_y, \quad z_k = k \Delta z, \quad k = 0, \dots, N_z.$$

Внутренние узлы  $(i, j, k)$  с

$$i = 1, \dots, N_x - 1, \quad j = 1, \dots, N_y - 1, \quad k = 1, \dots, N_z - 1$$

собираем в вектор значений поля

$$\Psi = \{\psi_{i,j,k}\}.$$

Игрушечный оператор малых колебаний в 3D записываем в том же духе:

$$\hat{H}\psi(x, y, z) = -\nabla \cdot (c^2(x, y, z) \nabla \psi(x, y, z)) + V_{\text{eff}}(x, y, z) \psi(x, y, z), \quad (104)$$

с граничными условиями Дирихле

$$\psi|_{\partial\Omega} = 0, \quad \Omega = [0, L_x] \times [0, L_y] \times [0, L_z].$$

На сетке это даёт разреженную матрицу  $H$  размера

$$N_{\text{dof}} = (N_x - 1)(N_y - 1)(N_z - 1),$$

с классическим шеститочечным (или двадцатиточечным, если хотим) шаблоном, модифицированным анизотропными коэффициентами  $c^2$  и локальным потенциалом  $V_{\text{eff}}$ .

В простейшем случае, если ограничиться шеститочечным шаблоном и равномерной сеткой, дискретный оператор можно описать как

$$\begin{aligned} (H\Psi)_{i,j,k} = & -\frac{1}{\Delta x} \left[ c_{i+\frac{1}{2},j,k}^2 \frac{\psi_{i+1,j,k} - \psi_{i,j,k}}{\Delta x} - c_{i-\frac{1}{2},j,k}^2 \frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i-1,j,k}}{\Delta x} \right] \\ & -\frac{1}{\Delta y} \left[ c_{i,j+\frac{1}{2},k}^2 \frac{\psi_{i,j+1,k} - \psi_{i,j,k}}{\Delta y} - c_{i,j-\frac{1}{2},k}^2 \frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i,j-1,k}}{\Delta y} \right] \\ & -\frac{1}{\Delta z} \left[ c_{i,j,k+\frac{1}{2}}^2 \frac{\psi_{i,j,k+1} - \psi_{i,j,k}}{\Delta z} - c_{i,j,k-\frac{1}{2}}^2 \frac{\psi_{i,j,k} - \psi_{i,j,k-1}}{\Delta z} \right] + V_{i,j,k} \psi_{i,j,k}, \end{aligned} \quad (105)$$

где  $c_{i\pm\frac{1}{2},j,k}^2$  и т.п. — значения  $c^2$  между узлами, а  $V_{i,j,k}$  — значения эффективного потенциала.

## Сферически-симметричное включение

Минимальный объёмный «игрушечный атом» делаем сферически-симметричным. Пусть центр включения находится в точке  $(x_0, y_0, z_0)$ , а радиус характерного ядра равен  $R$ . Тогда можно взять, например,

$$r(x, y, z) = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2}, \quad (106)$$

$$V_{\text{eff}}(x, y, z) = V_0 - \Delta V f_V(r(x, y, z)), \quad (107)$$

где  $f_V(r)$  — сглаженная яма, например:

$$f_V(r) = \exp\left(-\frac{r^2}{2\sigma^2}\right) \quad \text{или} \quad f_V(r) = \begin{cases} 1, & r < R, \\ \text{плавный спад}, & r \in [R, R + \delta], \\ 0, & r > R + \delta. \end{cases}$$

Аналогично можно модифицировать  $c(x, y, z)$ :

$$c(x, y, z) = c_0 \left(1 - \varepsilon_c f_c(r)\right), \quad (108)$$

где  $f_c(r)$  локализована в той же области.

С точки зрения онтологии Среды:

- такое включение — минимальная трёхмерная «солитонная» ячейка;
- локализованные собственные моды  $\psi_n(x, y, z)$  над ней — прототип «орбиталей»;
- мультиплеты по угловому моменту (в пределе хорошей сферической симметрии) — прямой аналог  $s$ -,  $p$ -,  $d$ - и т.д. «оболочек» в языке геометрической таблицы.

Численно это выглядит так:

1. Строим  $H$  для однородной Среды, убеждаемся, что низ спектра соответствует объёмным стоячим волнам.
2. Вводим сферическое включение (107), (108).
3. Находим несколько десятков нижних собственных значений и мод.
4. Классифицируем моды по «похожести» на  $s$ -,  $p$ -,  $d$ -типы: численно это делается через:
  - число узловых поверхностей;
  - симметрии относительно поворотов и отражений;
  - простые угловые моменты на грубой сферической сетке вокруг центра.

## Кластер включений и прототип молекулы

Далее вводим несколько включений

$$\{(x_a, y_a, z_a), \Delta V_a, R_a\}, \quad a = 1, \dots, M,$$

с перекрывающимися или почти соприкасающимися областями. Это даёт игрушечный кластер — минимальный прототип молекулы.

На уровне оператора:

$$V_{\text{eff}}(x, y, z) = V_0 - \sum_{a=1}^M \Delta V_a f_V^{(a)}(r_a(x, y, z)), \quad (109)$$

где  $r_a$  — расстояние до  $a$ -го центра.

Спектр такого кластера содержит:

- локализованные моды, связанные с каждым включением по отдельности;
- «коллективные» моды кластера, отражающие взаимодействие;
- расщепления уровней при изменении взаимных расстояний и ориентаций.

Это даёт чисто спектральное определение «связи» в объёме:

- энергия связи — это вклад в спектральный функционал  $F$ , возникающий при переходе от отдельных включений к кластеру;
- геометрия связи — это форма и топология тех мод, которые существенно меняются при образовании кластера;
- углы и длины «связей» — это уже не вводимые вручную параметры, а численно измеряемые характеристики максимума LDOS между включениями.

### Минимальный численный план для 3D

Даже при грубой сетке (например,  $N_x = N_y = N_z \sim 30$ ) 3D-игрушка остаётся тяжёлой задачей для лобового решения. Поэтому планируем:

1. Использовать методы типа *Lanczos* / *Arnoldi* для поиска только нижней части спектра.
2. Активно эксплуатировать разреженность  $H$  и возможность распараллеливания умножения матрицы на вектор.
3. Сначала отладить всё на очень маленьких решётках ( $N_x = N_y = N_z \sim 10\text{--}16$ ), лишь бы восстановить структуру мультиплетов.
4. Затем постепенно увеличивать размер сетки до тех пор, пока не начнут появляться устойчивые шаблоны, похожие на «атомные оболочки» из геометрической таблицы.

Важный философский момент: в 3D-игрушке мы *не* пытаемся воспроизвести конкретный химический элемент. Задача существенно скромнее:

- убедиться, что онтология Среды в принципе порождает объёмные локализованные структуры с чёткой спектральной и геометрической иерархией;
- убедиться, что параметры включений (глубины  $\Delta V_a$ , радиусы  $R_a$ , относительные положения) *управляемо* меняют эту иерархию;
- подготовить площадку для сопоставления с реальной геометрической таблицей атомов в следующих версиях модели.

## 34.5 План по численным экспериментам v0.1

С точки зрения кода минимальный набор игрушечных экспериментов, которые должны быть реализованы параллельно с развитием онтологии:

### 1. Пустой 1D-резонатор.

- Построить  $H$  для  $c(x) \equiv c_0$ ,  $V_{\text{eff}} \equiv 0$ .
- Сравнить спектр  $\omega_n^2$  с аналитическим решением.

### 2. Одна яма.

- Ввести профиль  $V_{\text{eff}}(x)$  и  $c(x)$  по (100), (101).
- Вычислить несколько нижних собственных значений и LDOS, визуализировать локализованные моды.

### 3. Две ямы и взаимодействие.

- Реализовать зависимость спектра и функционала  $F(d)$  от расстояния между ямами  $d$ .
- Построить графики  $F(d)$ ,  $\Delta\rho(\omega, x; d)$ .

### 4. Игрушечный принцип эквивалентности.

- Оценить  $M_{\text{inert}}^{(\text{toy})}$  по (102) и  $M_{\text{grav}}^{(\text{toy})}$  по (103) для семейства ям.
- Проверить, в какой мере они пропорциональны и от чего зависит коэффициент пропорциональности.

Эти эксперименты не «доказывают» модель Среды, но служат важным фильтром: если даже на таком уровне не проявляются ожидаемые свойства (локализация мод, взаимодействие «солитонов», аналог принципа эквивалентности), то онтологию нужно корректировать до выхода на реалистические масштабы.

## Приложения

### А Сводка аксиом и законов v0.2

Этот раздел даёт обновлённую компактную сводку *аксиом* и *законов* модели в версии v0.2. В отличие от списка постулатов v0.1, здесь явно отделены минимальные онтологические допущения (аксиомы) от выводимых утверждений (законов).

## Аксиомы A1–A5

- A1. Евклидово пространство и параметр времени.** Мир описывается трёхмерным евклидовым пространством  $X \simeq \mathbb{R}^3$ . Время  $t$  выступает параметром эволюции состояний Среды, а не четвёртой координатой в метрике.
- A2. Единая непрерывная Среда.** Пространство заполнено единственной нелинейной непрерывной Средой. Материя, поля и гравитация — различные режимы её спектральной самоорганизации.
- A3. Спектральное описание.** Состояние Среды описывается локальной спектральной плотностью  $\rho_{\text{спец}}(\omega, x, t)$  (и её продольной/поперечной частью), а наблюдаемые величины являются функционалами от этой плотности.
- A4. Солитонные объекты.** Устойчивые «частицы» и макрообъекты соответствуют локализованным солитонным конфигурациям Среды  $\theta(x, t)$  с конечной энергией.
- A5. Вычислимость.** Все основные величины модели (массы, потенциалы, таблица атомов) задаются через чётко определённые функционалы от спектральных и геометрических объектов и, в принципе, подлежат численному вычислению.

## Гравитационные законы G1–G3

- G1. Спектральный потенциал.** Гравитационный потенциал  $\phi(x, t)$  определяется через продольный спектральный инвариант  $I_{\text{grav}}(x, t)$  по формуле  $\phi = -\ln(I_{\text{grav}}/I_0)$ , а поле ускорений задаётся как  $\mathbf{g} = -\nabla\phi$ .
- G2. Ньютоновский предел.** В квазистационарном слабом поле потенциал удовлетворяет уравнению Пуазона  $\Delta\phi \approx 4\pi G_{\text{эф}} \sigma(x)$ , а ньютоновский потенциал  $\Phi_N = c^2(\phi - \phi_\infty)$  даёт стандартную гравитацию Ньютона.
- G3. Гравитационный красный сдвиг.** Для любых устойчивых «часов»  $\Delta f/f \approx \Delta\phi = \Delta\Phi_N/c^2$ , что даёт гравитационный красный сдвиг и замедление времени в спектральной модели без кривизны пространства-времени.

## Законы массы M1–M3

- M1. Спектрально-топологическая масса.** Полная масса солитона определяется функционалом  $M_{\text{sol}}[\theta] = M_{\text{спец}}[\rho(\omega; \theta)] + M_{\text{top}}[G_\theta]$ , где спектральная и топологическая части вычисляются из DOS и топологических инвариантов конфигурации.
- M2. Эквивалентность масс.** Один и тот же функционал  $M_{\text{sol}}[\theta]$  определяет и инертную массу (коэффициент при  $v^2/2$  в кинетике), и гравитационную массу (коэффициент в  $M\Phi_N$ ). Ускорение свободного падения не зависит от  $M_{\text{sol}}$ .
- M3. Топологическая квантизация.** При изменении топологического класса конфигурации  $G_\theta$  топологический вклад  $M_{\text{top}}$  изменяется ступенчато, обеспечивая квантизацию допустимых масс устойчивых солитонов.

## Геометрические атомные законы D1–D3

**D1. Закон валентных портов.** Геометрический атом элемента  $Z$  определяется как минимум функционала  $F_{\text{atom}} = F_{\text{levels}} + F_{\text{geom}}$ , а валентность равна числу устойчивых портов связывания в конфигурации  $\theta_Z$ .

### Статус реализации геометрического атома в QSG v5.0

Формальное определение геометрического атома использует общий функционал вида

$$F_{\text{atom}}[\theta] = F_{\text{levels}}[\theta] + F_{\text{geom}}[G_\theta] + F_{\text{mass}}[\theta] + \dots,$$

где:

- $F_{\text{levels}}[\theta]$  сопоставляет спектр оператора малых колебаний  $\hat{H}[\theta]$  экспериментальным уровням энергии атома;
- $F_{\text{geom}}[G_\theta]$  штрафует избыточную геометрическую и топологическую сложность графа  $G_\theta$ ;
- $F_{\text{mass}}[\theta]$  описывает топологический вклад в массу и другие глобальные спектральные характеристики.

На уровне реализации QSG v5.0 статус этих частей следующий:

- **Геометрический и графовый слой  $F_{\text{geom}}$ .** Для элементов  $Z = 1 \dots 36$  (H–Kr) реализованы прототипы геометрического атома в виде конечных графов: зафиксированы портовая структура, роли (terminator / bridge / hub / inert) и базовые геометрические параметры атомного графа. Функционал  $F_{\text{geom}}$  в QSG v5.0 представлен конечным набором графовых инвариантов (симметрия, размер, ветвистость и т.п.), используемых для классификации элементов и роста деревьев.
- **Спектральный слой  $F_{\text{levels}}$ .** В полной теории  $F_{\text{levels}}$  должен строиться на базе континуального оператора  $\hat{H}[\theta]$ , DOS/LDOS и спектральных интегралов. В QSG v5.0 используется игрушечный спектр графового лапласиана атомного графа, а также калиброванная спектральная электроотрицательность  $\chi_{\text{spec}}(Z)$  для s/p-блока. Соответствующая часть функционала реализована как набор приближённых критериев согласия с экспериментальной шкалой Паулинга и D/A-индексами. Переход к континуальному оператору и честному  $F_{\text{levels}}$  отнесён к жёлтой зоне.
- **Массовый и топологический слой  $F_{\text{mass}}$ .** В теоретической постановке  $F_{\text{mass}}$  и связанные с ним топологические инварианты (узлы, зацепления и др.) обеспечивают квантизацию массы и связаны с crossing-number и родственными инвариантами. На уровне QSG v5.0 этот слой находится в зачаточном состоянии: реализованы только деревьевые инварианты сложности и эмпирические связи с ядерным функционалом  $F_{\text{nuc}}$ . Полноценный топологический вклад в массу (включая crossing-слой и узловые инварианты) отнесён к жёлтой и красной зонам.

Таким образом, геометрический атом в QSG v5.0 реализован как графовый прототип полноформатного спектрального объекта: он уже обладает осмысленными ролями, спектральной электроотрицательностью и ростовой динамикой (через Grower), но ещё не использует всю мощь континуального оператора  $\hat{H}[\theta]$  и полного топологического функционала.

**D2. Геометрический периодический закон.** При росте  $Z$  минимизирующие конфигурации  $G_{\theta_Z}$  организуются в семейства с повторяющимися типами портов и ролей (terminator, bridge, hub, inert), что даёт ролевую периодичность, аналогичную блоковой структуре таблицы Менделеева.

**D3. Спектральная электроотрицательность.** Геометрико-спектральная электроотрицательность  $\chi_{\text{spec}}(Z)$  вычисляется из портовых энергий и спектрального смещения и в первой и второй периодах воспроизводит порядок элементов по шкале Паулинга, корректно задавая направление и относительную силу полярности связей.

Эта сводка v0.2 не отменяет исторический список постулатов v0.1, но переводит часть утверждений из разряда постулатов в разряд следствий из более компактного набора аксиом и чётко определённых функционалов.

## В Компактный список постулатов v0.1

Этот раздел даёт сжатую версию постулатов из раздела 1. Он полезен как «шпаргалка» при чтении остальных частей книги и при работе с кодом.

### Постулат 1. Антирелятивистский

Фундаментальное описание мира не использует искривлённое пространство-время, динамическую метрику и тензор кривизны. Все гравитационные эффекты должны быть сведены к свойствам физической Среды и её спектра.

### Постулат 2. Пространство и время

Пространство  $X \simeq \mathbb{R}^3$  евклидово, с фиксированной метрикой  $\bar{g}_{ij} = \delta_{ij}$ . Время  $t \in \mathbb{R}$  — параметр эволюции состояний Среды, а не координата геометрического многообразия.

### Постулат 3. Единая физическая Среда

Всё пространство заполнено непрерывной Средой, способной поддерживать волны и нелинейные локализованные структуры. Покой Среды задаёт предпочтительную систему отсчёта.

### Постулат 4. Спектральное описание

Состояние Среды описывается локальной спектральной плотностью  $\rho_{\text{spec}}(\omega, x, t) \geq 0$  по частотам и координатам. Все физические эффекты должны быть, в конечном счёте, выражены через спектральные характеристики.



## Постулат 5. Спектральная гравитация

Гравитация — это эффект спектрального состояния Среды. Через гравитационно значимую мощность  $I_{\text{grav}}(x, t)$  определяется спектральный потенциал

$$\phi(x, t) = -\ln I_{\text{grav}}(x, t) + \text{const},$$

а эффективное поле ускорений задаётся градиентом  $\mathbf{g}(x, t) = -\nabla\phi(x, t)$ .

## Постулат 6. Материя как солитоны

Материальные объекты — устойчивые локализованные процессы (солитоны, вихри, узлы) в Среде. Тип «частицы» соответствует классу эквивалентных солитонных конфигураций с минимальным функционалом состояния.

## Постулат 7. Линейный оператор малых колебаний

Для каждой конфигурации Среды существует линейный оператор малых колебаний  $\hat{H}[\theta]$ , спектр которого описывает локальные моды вокруг этой конфигурации. Он служит мостом между геометрией конфигурации и её спектром.

## Постулат 8. DOS/LDOS и функция Грина

Спектральные свойства конфигурации задаются её плотностью состояний (DOS/LDOS), выражаемой через функцию Грина  $G(z; \theta) = (z - \hat{H}[\theta])^{-1}$ . Глобальная DOS  $\rho(\omega; \theta)$  и локальная LDOS  $\rho(\omega, x; \theta)$  — базовые величины для всех функционалов.

## Постулат 9. Масса и топология

Эффективная масса солитона задаётся функционалом от спектра и топологической структуры:

$$M_{\text{sol}}[\theta] = M_{\text{spec}}[\rho(\omega; \theta)] + M_{\text{top}}[G_{\theta}].$$

Топологическая сложность (узлы, сцепления, деревья) вносит вклад в энергию и массу.

## Постулат 10. Геометрическая таблица атомов

Атом элемента с номером  $Z$  — солитонная конфигурация, минимизирующая функционал

$$F_{\text{atom}} = F_{\text{levels}} + F_{\text{geom}},$$

где  $F_{\text{levels}}$  сравнивает спектр с целевыми уровнями, а  $F_{\text{geom}}$  описывает геометрическую и топологическую структуру. Валентность задаётся числом и ориентацией «портов» в LDOS.

## Постулат 11. Вычислимость

Любое высказывание, относящееся к физике модели, должно быть в принципе вычислимо через  $\hat{H}[\theta]$ , DOS/LDOS, спектральный потенциал  $\phi$  и заданные функционалы. Остальное относится к гипотезам и дорожной карте.

Компактно: мир = евклидово пространство + непрерывная Среда; материя = солитоны; гравитация = спектральный потенциал; атомы = минимумы функционалов по спектру и геометрии; всё должно быть вычислимым.

## С Минимальные математические определения и обозначения

Этот раздел фиксирует набор обозначений, которые используются по умолчанию во всей книге.

### С.1 Пространство, время и дифференциальные операторы

- $X \simeq \mathbb{R}^3$  — фоновое евклидово пространство.
- $x = (x^1, x^2, x^3)$  — декартовы координаты.
- Метрика:  $\bar{g}_{ij} = \delta_{ij}$ .
- Расстояние:  $|x - y| = \sqrt{\sum_i (x^i - y^i)^2}$ .
- Элемент объёма:  $d^3x = dx^1 dx^2 dx^3$ .
- Градиент скалярной функции  $f$ :

$$\nabla f = \left( \frac{\partial f}{\partial x^1}, \frac{\partial f}{\partial x^2}, \frac{\partial f}{\partial x^3} \right).$$

- Дивергенция векторного поля  $v$ :

$$\operatorname{div} v = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial v^i}{\partial x^i}.$$

- Лапласиан:

$$\Delta f = \operatorname{div}(\nabla f) = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2 f}{\partial (x^i)^2}.$$

- Время  $t \in \mathbb{R}$  — параметр эволюции состояний Среды.

### С.2 Спектральные величины

- $\omega$  — частота (угловая частота); диапазон интереса обозначаем через  $\Omega$ .
- $\rho_{\text{spec}}(\omega, x, t) \geq 0$  — локальная спектральная плотность Среды (вся совокупность мод).
- Разложение на продольный и поперечный каналы:

$$\rho_{\text{spec}} = \rho_L + \rho_T.$$

- Гравитационно значимая продольная мощность:

$$I_{\text{grav}}(x, t) = \int_{\Omega} \alpha_L(\omega) \rho_L(\omega, x, t) d\omega,$$

где в минимальной версии  $\alpha_L(\omega) \equiv 1$ .

- Спектральный потенциал:

$$\phi(x, t) = -\ln I_{\text{grav}}(x, t) + \text{const.}$$

- Поле ускорений:

$$\mathbf{g}(x, t) = -\nabla \phi(x, t).$$

- Эффективный ньютоновский потенциал:

$$\Phi_N(x) = c^2(\phi(x) - \phi_{\infty}),$$

где  $c$  — скорость поперечных волн (света) в Среде.

### С.3 Оператор малых колебаний и спектр

- $\theta$  — набор параметров солитонной конфигурации (положения, масштабы, деформации и т.п.).
- $\hat{H}[\theta]$  — линейный оператор малых колебаний Среды вокруг конфигурации  $\theta$ . В простейшем варианте:

$$\hat{H}[\theta]\psi = -\nabla \cdot (c^2(\theta, x)\nabla\psi(x)) + V_{\text{eff}}(\theta, x)\psi(x).$$

- Собственные значения и функции:

$$\hat{H}[\theta]\psi_n = \omega_n^2\psi_n.$$

- Функция Грина:

$$G(z; \theta) = (z - \hat{H}[\theta])^{-1}.$$

- Глобальная DOS:

$$\rho(\omega; \theta) = -\frac{1}{\pi} \Im \text{Tr} G(\omega^2 + i0^+; \theta).$$

- Локальная LDOS:

$$\rho(\omega, x; \theta) = -\frac{1}{\pi} \Im G(x, x; \omega^2 + i0^+; \theta).$$

### С.4 Топология, графы и функционалы

- $G_{\theta}$  — граф/узел, описывающий топологическую структуру конфигурации  $\theta$  (вершины  $V_{\theta}$ , рёбра  $E_{\theta}$ , вложение в  $X$ ).
- $C_{\text{cross}}[G_{\theta}]$  — эффективное число пересечений (мера топологической сложности).
- $F_{\text{levels}}[\Theta]$  — спектральный функционал (совпадение уровней, отсутствие опасных резонансов, форма DOS).

- $F_{\text{geom}}[\Theta]$  — геометрический функционал (сложность графа, симметрия, статистика деревьев).
- Полный функционал состояния:

$$F[\Theta] = F_{\text{levels}}[\Theta] + F_{\text{geom}}[\Theta] + F_{\text{add}}[\Theta].$$

- Атомный функционал для элемента  $Z$ :

$$F_{\text{atom}}[\theta_Z] = \lambda_{\text{lev}}^{(Z)} F_{\text{levels}}[\theta_Z] + \lambda_{\text{geom}}^{(Z)} F_{\text{geom}}[G_{\theta_Z}].$$

Для быстрого чтения документа достаточно держать в голове:  $\rho_{\text{spec}}, I_{\text{grav}}, \phi, \mathbf{g}, \hat{H}[\theta], \rho(\omega), \rho(\omega, x), G_\theta$  и функционалы  $F_{\text{levels}}, F_{\text{geom}}, F_{\text{atom}}$ .

## D Состояние кода и внешние источники

Здесь даются короткие ориентиры: что уже реализовано в коде, что нужно дописать и куда смотреть за пределами этого документа.

### D.1 Состояние кода v0.1 (чек-лист)

- **/core/**
  - ☐ Базовые структуры сетки  $X$  (1D/2D/3D).
  - ☐ Представление графов  $G_\theta$  (вершины, рёбра, вложение в пространство).
- **/env/** — спектральная Среда и гравитация.
  - ☐ Хранение  $\rho_{\text{spec}}^{(0)}$  и  $\delta\rho_{\text{spec}}$  на сетке.
  - ☐ Функции для  $I_{\text{grav}}(x), \phi(x), \mathbf{g}(x)$ .
  - ☐ Тесты на воспроизведение ньютоновского потенциала для простых конфигураций.
- **/operatorH/**
  - ☐ Построение разреженной матрицы  $H(\theta)$  для 1D/2D сеток.
  - ☐ Расчёт нескольких собственных значений (игрушечный спектр).
  - ☐ Прототип функции DOS/LDOS по  $H(\theta)$ .
- **/functionals/**
  - ☐ Реализация базовой версии  $F_{\text{levels}}$  (совпадение с целевыми частотами).
  - ☐ Реализация  $F_{\text{geom}}$  (сложность + симметрия).
  - ☐ Набор вспомогательных функций  $F_{\text{atom}}, M_{\text{sol}}$ .

- **/optimize/**

- ☐ Symmetric Newton для малых размерностей  $\theta$ .
- ☐ Обёртки для численных интегралов по  $\omega$  и  $x$ .

- **/examples/**

- ☐ Гравитация одной спектральной ямы.
- ☐ 1D или 2D-решётка с вычислением DOS/LDOS.
- ☐ Простейший прототип геометрического атома (например, водород или гелий).

Здесь галочки можно проставлять по мере того, как конкретные модули доходят до рабочего состояния.

## D.2 Куда смотреть за пределами документа

Этот текст принципиально самодостаточен, но при развитии модели полезно держать в поле зрения несколько направлений:

- Спектральная геометрия и операторы Лапласа на многообразиях (интуиция про «спектр  $\Leftrightarrow$  геометрия»).
- Твёрдотельная физика: DOS, LDOS, сингулярности Ван Хофа, методы функций Грина.
- Топологические солитоны и теория узлов: как считать инварианты, как они связаны с энергией.
- Математика случайных деревьев и процессов роста (для «модели ёлки» в кристаллографии и химии).

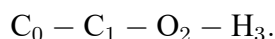
Конкретные ссылки и статьи можно добавить сюда по мере того, как модель и код будут обрести устойчивыми внешними опорами. На уровне v0.1 достаточно понимать, в какие области литературы имеет смысл заглядывать, не подменяя ими собственную онтологию Среды.

## Е Черновики: полярность цепочек C–C–O–H и Si–O–Si

После анализа одиночных связей HF и HCl естественно перейти к простым цепочкам, где вместе проявляются геометрические роли (hub/bridge/terminator), знаковая геометрическая электроотрицательность  $\chi_{\text{geom}}^{\text{sgn}}$  и портовая геометрия. В качестве минимальных тестовых мотивов рассмотрим цепочки C–C–O–H и Si–O–Si.

## Фрагмент C–C–O–H: мостовой акцептор O в органической цепи

В геометрической таблице элементы имеют следующие роли: углерод C — многопортовый **hub** с  $\chi_{\text{geom}}^{\text{sgn}}(\text{C}) \approx 0$ , кислород O — двухпортовый **bridge** с положительной  $\chi_{\text{geom}}^{\text{sgn}}(\text{O})$  (акцептор), водород H — **terminator** с умеренно положительной  $\chi_{\text{geom}}^{\text{sgn}}(\text{H})$ , а связи C–C, C–O, O–H образуют линейную цепочку:



Геометрическая полярность каждой связи определяется как

$$\Delta\chi_{\text{geom}}(A-B) = \chi_{\text{geom}}^{\text{sgn}}(B) - \chi_{\text{geom}}^{\text{sgn}}(A).$$

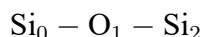
Численно в игрушечной реализации получается:

- связь C<sub>0</sub>–C<sub>1</sub> практически неполярна:  $\Delta\chi_{\text{geom}}(\text{C}_0-\text{C}_1) \approx 0$ ;
- связь C<sub>1</sub>–O<sub>2</sub> поляризована к кислороду:  $\Delta\chi_{\text{geom}}(\text{C}_1-\text{O}_2) > 0$ , поток электронной плотности направлен от C к O;
- связь O<sub>2</sub>–H<sub>3</sub> также слегка поляризована в сторону кислорода (по модулю меньше, чем C–O): знак  $\Delta\chi_{\text{geom}}(\text{O}_2-\text{H}_3)$  таков, что эффективный поток идёт от H к O.

В сумме цепочка C–C–O–H в геометрической модели читается как структурная пара C–C, к которой с одного конца прикреплён мостовой акцептор O, собирающий на себе и часть плотности от углеродного фрагмента, и долю от связанного водорода. Это соответствует привычной химической картине: гидроксильная группа “тянет” электронную плотность из углеродного скелета, повышая полярность и реакционную способность фрагмента C–C–O–H.

## Фрагмент Si–O–Si: мостиковый акцептор в силикатной сетке

Для фрагмента Si–O–Si геометрическая таблица даёт: кремний Si — четырёхпортовый **hub** с  $\chi_{\text{geom}}^{\text{sgn}}(\text{Si}) \approx 0$ , кислород O — **bridge** с положительной  $\chi_{\text{geom}}^{\text{sgn}}(\text{O}) > 0$ . Линейный мотив



реализует типичный “мостик” в силикатных каркасах.

Геометрическая полярность связей в этой цепочке имеет вид:

- связь Si<sub>0</sub>–O<sub>1</sub> поляризована в сторону O: поток идёт от Si к O;
- связь O<sub>1</sub>–Si<sub>2</sub> также, в эффективном смысле, направляет поток от второго Si к тому же кислородному центру.

Таким образом, кислород в мотиве Si–O–Si выступает как мостовой акцептор между двумя структурными центрами Si: оба кремниевых хаба относительно спектрально нейтральны, а O за счёт своей положительной  $\chi_{\text{geom}}^{\text{sgn}}$  и портовой геометрии **bent** локально собирает на себе электронную плотность. Это хорошо согласуется с интуитивной картиной силикатных сетей, где атомы кислорода играют роль мостиковых анионов между тетраэдрами SiO<sub>4</sub>.

## Сетевой взгляд

Обе рассмотренные цепочки иллюстрируют, как один и тот же аппарат (геометрические роли, портовая геометрия и знаковая  $\chi_{\text{geom}}$ ) описывает не только отдельные связи, но и распределение потоков в маленьких сетевых мотивах:

- C–C–O–H: структурная пара hub–hub с примыкающим мостовым акцептором bridge–terminator;
- Si–O–Si: мостик hub–bridge–hub, в котором bridge выступает в роли локального стока.

На более сложных сетях тот же принцип позволяет рассматривать Среду как систему узлов (hub), мостиков (bridge), терминаторов и инертных центров, между которыми знаковая геометрическая электроотрицательность задаёт направления эффективных потоков.

## F Черновики: спектры графа атома как игрушечный LDOS

До этого момента спектральный слой был описан концептуально: через спектральную плотность  $\rho_Z(\omega)$  и интеграл вида

$$F_{\text{spec}}(Z) = \int W_Z(\omega) \rho_Z(\omega) d\omega.$$

Чтобы связать эти рассуждения с конкретной вычислимой моделью, введём игрушечный спектр для графа, представляющего атом  $Z$ .

### Канонический граф атома и лапласовский оператор

Каждому атомному “солитону”  $Z$  сопоставляется канонический граф  $G_Z$  с числом вершин  $V_Z = \text{nodes}(Z)$  и рёбер  $E_Z = \text{edges}(Z)$ :

- вершины пронумерованы  $0, \dots, V_Z - 1$ ;
- сначала строится путь  $0 - 1 - 2 - \dots - (V_Z - 1)$ , обеспечивающий связность;
- затем добавляются дополнительные рёбра из вершины 0 к вершинам  $2, 3, \dots$  до достижения требуемого числа рёбер  $E_Z$ .

Такой граф сохраняет ключевые геометрические параметры (число вершин, рёбер, цикломатическое число  $\mu_Z = E_Z - V_Z + 1$ ) и служит игрушечной реализацией внутренней структуры атома в Среде.

По матрице смежности  $A_Z$  канонического графа определяется лапласовский оператор

$$L_Z = D_Z - A_Z,$$

где  $D_Z$  — диагональная матрица степеней,  $(D_Z)_{ii} = \text{deg}(i)$ . Собственные значения  $L_Z$ ,

$$0 = \lambda_0(Z) \leq \lambda_1(Z) \leq \dots \leq \lambda_{V_Z-1}(Z),$$

задают дискретный спектр  $G_Z$ , который можно рассматривать как игрушечный аналог спектральной плотности  $\rho_Z(\omega)$ .

В коде `geom_atoms.py` это реализовано методами `canonical_adjacency_matrix()` и `laplacian_eigenvalues()` класса `AtomGraph`.

## Спектральный масштаб $\varepsilon_{\text{spec}}(Z)$ и функционал $F_{\text{spec}}^{\text{toy}}$

В качестве простейшей спектральной характеристики атома удобно выделить так называемое значение Фидлера — первое ненулевое собственное значение лапласовского оператора:

$$\varepsilon_{\text{spec}}(Z) \equiv \lambda_1(Z),$$

которое в теории графов измеряет “жесткость” и связность  $G_Z$ . Для одиночного узла (атом Н)  $\varepsilon_{\text{spec}} = 0$ , для двухузловой цепи (Не) получается  $\lambda_1 = 2$ , а для более сложных графов значения  $\lambda_1$  уменьшаются по мере появления циклов и более распределённой топологии.

Дополнительно вводится игрушечный спектральный функционал:

$$F_{\text{spec}}^{\text{toy}}(Z) = \sum_{i=0}^{V_Z-1} \exp(-\beta \lambda_i(Z)),$$

где  $\beta$  — небольшой параметр. При малых  $\beta$  в сумму вносят наибольший вклад малые собственные значения, так что  $F_{\text{spec}}^{\text{toy}}$  чувствителен в первую очередь к низкоэнергетической части спектра.

В коде соответствующие величины реализованы методами `epsilon_spec()` и `F_spec_toy()`, а сводная таблица по элементам Н–Аг выводится функцией `print_spectral_summary`

## Пример спектральной сводки для Н–Аг

Типичный численный вывод для элементов Н–Аг имеет вид:

```
Spectral summary of atomic graphs (beta = 0.5)
El Z ports mu lambda1 lambda_max eps_spec F_spec
-----
H 1 1 0 0.000 0.000 0.000 1.000
He 2 0 0 2.000 2.000 2.000 1.37
C 6 4 1 0.325 4.214 0.325 2.90
O 8 2 1 0.167 4.233 0.167 3.83
F 9 1 2 0.144 4.581 0.144 4.03
Ne 10 0 2 0.112 4.581 0.112 4.49
...
```

Качественно видно, что:

- у Н спектр вырожден в одно нулевое значение ( $\varepsilon_{\text{spec}} = 0$ );
- у Не присутствует высокий одиночный масштаб  $\varepsilon_{\text{spec}} \approx 2$ , соответствующий жёсткой двухузловой связке;
- по мере роста сложности графа (возникновение циклов, рост числа рёбер при фиксированном числе вершин) спектр растягивается, а  $\varepsilon_{\text{spec}}$  уменьшается;
- функционал  $F_{\text{spec}}^{\text{toy}}(Z)$  плавно растёт с ростом “объёма” и разветвлённости графа, играя роль игрушечной спектральной меры сложности атома.



## Связь с ранее введённым $F_{\text{spec}}$ и $\varepsilon_Z$

В исходных черновиках спектральный вклад  $F_{\text{spec}}(Z)$  задавался через интеграл по спектральной плотности  $\rho_Z(\omega)$  и параметр  $\varepsilon_Z$ , измеряющий положение характерного уровня относительно химического потенциала среды  $\mu_{\text{env}}$ . В приведённой здесь игрушечной реализации:

- дискретный спектр  $\{\lambda_i(Z)\}$  играет роль набора “уровней” в пространстве графа;
- значение  $\varepsilon_{\text{spec}}(Z) = \lambda_1(Z)$  можно рассматривать как кандидата на “спектральный масштаб” для дальнейшей подстановки в модель  $\varepsilon_Z$ ;
- функционал  $F_{\text{spec}}^{\text{toy}}(Z)$  — один из возможных упрощённых вариантов спектрального вклада в общую энергию атома, который уже реально вычисляется по геометрии графа.

На более продвинутом этапе эта конструкция может быть усложнена: вместо канонического графа  $G_Z$  — более точные топологии солитонных структур Среды, вместо простой суммы  $e^{-\beta\lambda_i}$  — ядра, ближе стоящие к реальным плотностям состояний. Тем не менее уже на уровне текущей модели спектральный слой выходит из режима чисто словесного описания и проявляется в виде конкретных вычислимых спектров  $L_Z$ .

## Г Черновики: спектральный периодический закон

В геометрической таблице для элементов H–Ar ( $Z = 1 \dots 18$ ) уже были введены роли `terminator`, `bridge`, `hub`, `inert` и геометрические характеристики  $F_{\text{geom}}$ ,  $E_{\text{port}}$  и портовая геометрия. Спектральный слой добавляет к этому набору ещё несколько величин:

- $\varepsilon_{\text{spec}}(Z)$  — эффективное спектральное “положение” атома, извлекаемое из спектра лапласиана канонического графа атома (через первую ненулевую собственную величину и нормировку);
- $F_{\text{spec}}(Z)$  — интегральная спектральная энергия, получающаяся как игрушечный интеграл вида

$$F_{\text{spec}}(Z) = \int_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} W(\omega) \rho_Z(\omega) d\omega,$$

где  $\rho_Z(\omega)$  — сглаженная LDOS лапласиана канонического графа, а  $W(\omega)$  — выбранная весовая функция (в коде реализованы экспоненциальный, квадратичный и линейный варианты);

- $E_{\text{port}}(Z)$  — “цена” одного порта, определяемая как  $E_{\text{port}} = F_{\text{geom}}/p_Z$  при  $p_Z > 0$ ;
- $\chi_{\text{spec}}(Z)$  — знаковая геометрико-спектральная электроотрицательность: модуль  $|\chi_{\text{spec}}|$  берётся пропорциональным  $E_{\text{port}}$ , а знак и демпфирование определяются положением  $\varepsilon_{\text{spec}}(Z)$  относительно спектрального “химического потенциала”  $\mu_{\text{env}}^{\text{spec}}$ .

Численные значения  $\chi_{\text{spec}}(Z)$  калибруются по табличной шкале Полинга: в коде для элементов H–Cl подбираются параметры глобального масштаба  $\alpha$ , демпфирования доноров  $\gamma_{\text{donor}}$  и слабого фонового вклада хабов  $k_{\text{center}}$  так, чтобы сумма квадратов разностей  $(\chi_{\text{spec}}(Z) - \chi_{\text{Pauling}}(Z))^2$  была минимальной. Для версии v1.0 получаются значения порядка

$\alpha \approx 1.24$ ,  $\gamma_{\text{donor}} \approx 3.0$ ,  $k_{\text{center}} \approx 0.1$ , что заметно снижает численное расхождение с Полином, не ломая при этом исходное разделение ролей на доноров, акцепторов, структурные центры и инертные элементы.

Для удобства все эти величины сведены в явную табличку `Spectral periodic table`, которую печатает функция `print_spectral_periodic_table()` в коде `geom_atoms.py`. В таблице для каждого  $Z$  фиксируются: атом, номер периода `per`, роль `role`,  $\varepsilon_{\text{spec}}$ ,  $F_{\text{exp}}$  (экспоненциальный вариант  $F_{\text{spec}}$ ),  $E_{\text{port}}$  и  $\chi_{\text{spec}}$ .

## Повторяемость спектрального кода по периодам

Если посмотреть на строки для второго и третьего периодов, получается спектральный аналог периодического закона:

- пары Li–Na, Be–Mg, B–Al, C–Si, N–P, O–S, F–Cl, Ne–Ar имеют совпадающие роли (`terminator`, `bridge`, `hub`, `inert`) и практически одинаковые численные значения  $\varepsilon_{\text{spec}}$ ,  $F_{\text{exp}}$ ,  $E_{\text{port}}$  и  $|\chi_{\text{spec}}|$ ;
- внутри одного периода (Li  $\rightarrow$  Ne или Na  $\rightarrow$  Ar) спектральные величины упорядочены по  $Z$  — например,  $F_{\text{exp}}(Z)$  растёт от Li/Na к Ne/Ar;
- инертные газы Ne и Ar образуют отдельную “вершину” по  $F_{\text{exp}}$  при малом  $E_{\text{port}}$  и нулевой  $\chi_{\text{spec}}$ , что соответствует замкнутым конфигурациям без активных портов.

То есть стандартный периодический закон

“свойства элементов периодически повторяются с ростом  $Z$ ”

в геометрико-спектральной модели переформулируется как повторяемость *спектрального кода* атома:

$$(\text{role}(Z), \varepsilon_{\text{spec}}(Z), F_{\text{spec}}(Z), E_{\text{port}}(Z), \chi_{\text{spec}}(Z))$$

при переходе от периода к периоду.

## Ролевые полосы в спектральном пространстве

Особенно наглядно это проявляется, если группировать элементы по ролям:

- **terminator** (H, Li, F, Na, Cl) разбиваются на два подтипа: “металлические терминаторы” Li/Na с  $\varepsilon_{\text{spec}} \approx 1$  и умеренным по модулю  $\chi_{\text{spec}} < 0$ , и “галогеноподобные терминаторы” F/Cl с малой  $\varepsilon_{\text{spec}}$  и максимальным  $|\chi_{\text{spec}}| \approx 4$ ;
- **bridge** (Be, Mg, O, S) формируют две пары с одинаковыми  $\varepsilon_{\text{spec}}$  и близкими  $F_{\text{exp}}$ : металлические мосты Be/Mg и неметаллические мосты O/S;
- **hub** (B, C, N, Al, Si, P) образуют три спектральных “уровня” по  $\varepsilon_{\text{spec}}$ : B/Al, C/Si, N/P; при этом модуль  $\chi_{\text{spec}}$  у хабов существенно меньше, чем у терминаторов и мостов, что согласуется с их ролью структурных центров сетей;
- **inert** (He, Ne, Ar) характеризуются нулевым числом портов,  $\chi_{\text{spec}} = 0$  и сравнительно большими  $F_{\text{exp}}$ , то есть большими “спектральными объёмами” при отсутствии активных направлений для потоков.

Таким образом, в пространстве  $(\varepsilon_{\text{spec}}, F_{\text{spec}}, E_{\text{port}}, \chi_{\text{spec}})$  поли `terminator`, `bridge`, `hub`, `inert` уже фактически реализуются как четыре полосы, которые повторяются при переходе от второго периода к третьему. Это и есть спектральная форма периодического закона в рамках предложенной геометрико-спектральной модели: не только “заряды и орбитали”, но и целый набор спектральных инвариантов, которые повторяются на новых масштабах  $Z$ .

## Н Черновики: Гармонический предел и энергия молекул

### Н.1 Спектральный функционал зарядов как гармоническое приближение

В спектральной картине основным объектом считается не точечный заряд, а распределение плотности среды  $\rho_{\text{spec}}(r)$ . Полная энергия молекулы в идеале является некоторым (неизвестным нам явно) функционалом  $F_{\text{full}}[\rho_{\text{spec}}]$ , зависящим от формы солитонов-«атомов» и их взаимного спектрального и топологического расположения.

В практической модели мы работаем не с непрерывной  $\rho_{\text{spec}}$ , а с интегральными «зарядами»  $q_i$  на атомах — отклонениями от нейтрального состояния. Тогда естественным шагом является квадратичное (гармоническое) приближение полного функционала по этим отклонениям:

$$F_{\text{flow}}(\{q_i\}) \approx \sum_i \left( \chi_i^{\text{spec}} q_i + \frac{1}{2} \eta_i q_i^2 \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J_{ij} q_i q_j.$$

Здесь  $\chi_i^{\text{spec}}$  мы отождествляем с «спектральной электроотрицательностью» атома (первый производный от энергии по заряду),  $\eta_i$  — с локальной «жесткостью» (у нас она связана с портовой энергией  $E_{\text{port}}$ ), а  $J_{ij}$  описывает взаимное отталкивание и поляризационную связь между атомами.

Минимизируя  $F_{\text{flow}}$  по  $\{q_i\}$  при фиксированной сумме зарядов, мы получаем стационарное распределение частичных зарядов и эффективный химический потенциал молекулы. Таким образом, QEeq-подобная схема, которую мы используем, — это не отдельная «инородная механика», а гармоническое приближение к более общей спектральной энергетике. В этом смысле  $F_{\text{flow}}$  играет роль «акустического предела» более сложной полевой теории.

### Н.2 Полный энергофункционал молекулы $F_{\text{mol}}$

Для ранжирования молекул по стабильности и оценки «цены» образования связей вводится полный молекулярный функционал  $F_{\text{mol}}$ , объединяющий геометрические, угловые и потоковые вклады:

$$F_{\text{mol}} = F_{\text{geom}} + F_{\text{angle}} + F_{\text{flow}}.$$

Где:

- $F_{\text{geom}} = \sum_i F_{\text{geom}}(Z_i)$  — сумма собственных геометрических энергий атомов (сложность графов);
- $F_{\text{angle}}$  — штраф за отклонение валентных углов от идеальных (например,  $\text{sp}^3$ -тетраэдра);

- $F_{\text{flow}}$  — выигрыш (или проигрыш) энергии за счёт перераспределения электронной плотности (выравнивания химических потенциалов).

Примеры расчёта (по данным R&D-лаборатории):

- **H<sub>2</sub>O**:  $F_{\text{total}} \approx 8.0$ . Система сильно стабилизирована,  $F_{\text{flow}}$  мал, так как связь O–H близка к ковалентной в текущей калибровке.
- **HF**:  $F_{\text{total}} \approx 4.5$ . Низкая энергия (высокая стабильность), заметный вклад  $F_{\text{flow}}$  из-за большой разности  $\chi_{\text{spec}}$ .
- **Si–O–Si**:  $F_{\text{total}} \approx 16.8$ . Более тяжёлая система, но стабилизированная сильным перетеканием заряда к мостиковому кислороду ( $F_{\text{flow}} \approx -1.0$ ).

Такой подход позволяет в рамках единой модели сравнивать «геометрическую стоимость» атомов и «энергетическую выгоду» их соединения.

### Н.3 Калиброванные параметры модели

В текущей версии кода (`geom_atoms.py`) используются следующие калиброванные параметры, подобранные по минимизации расхождения с шкалой Полинга:

- $\alpha \approx 1.237$  — глобальный масштаб спектральной электроотрицательности;
- $\gamma_{\text{donor}} \approx 3.0$  — коэффициент демпфирования доноров;
- $k_{\text{center}} \approx 0.1$  — фоновый вклад структурных центров (хабов);
- $\varepsilon_{\text{neutral}} \approx 0.06$  — порог нейтральности.

### Н.4 Ограничения и область применимости

Модель  $F_{\text{mol}} = F_{\text{geom}} + F_{\text{angle}} + F_{\text{flow}}$  является *игрушечной R&D-лабораторией*, а не полноценным квантово-химическим расчётом. Основные ограничения:

1. **Линейное (квадратичное) приближение по  $q$** : нелинейные эффекты перераспределения заряда не учитываются.
2. **Топологические расстояния вместо физических  $r_{ij}$** : модель работает в пространстве графа связей, а не в 3D-пространстве.
3. **Феноменологические параметры**: коэффициенты `hardness_offset`, `hardness_scale`, `interaction_scale` и т. п. подбирались вручную и не калиброваны по большой базе данных.
4. **Произвольные абсолютные значения  $F_{\text{mol}}$** : физический смысл имеют только относительные сравнения и знаки  $\Delta F$  для реакций.
5. **Игрушечные графы атомов**: топология канонических графов  $G_Z$  упрощена и не отражает реальную электронную структуру.

Тем не менее, модель позволяет:

- ранжировать молекулы по «стоимости»;

- оценивать направление потоков заряда;
- сравнивать энергии реакций  $\Delta F = \sum F_{\text{prod}} - \sum F_{\text{react}}$ .

Это достаточно для первичной разведки химического пространства в рамках спектральной парадигмы.

## Н.5 Переход к v2.0: спектральное размягчение по периоду

В режиме v1.0 элементы одной группы (Li/Na, F/Cl) оказываются *спектрально вырожденными клонами*: совпадают  $E_{\text{port}}$ ,  $\chi_{\text{spec}}$ , и следовательно, обменные реакции изоэнергетичны ( $\Delta F = 0$ ).

Для снятия этого вырождения вводится **режим v2.0 (period split)**, в котором портовая энергия масштабируется по периоду элемента:

$$E_{\text{port}}^{(v2)}(Z) = E_{\text{port}}^{(\text{geom})}(Z) \cdot \text{Period}(Z)^{-k}, \quad k \approx 0.7.$$

Физическая интерпретация: солитон большего радиуса (тяжёлый период) даёт меньшую локальную плотность энергии на порт — «мягче связывает». Это **закон спектрального размягчения**.

Следствия:

- F (период 2) становится «жестче» Cl (период 3):  $\chi_{\text{spec}}^{\text{F}} > \chi_{\text{spec}}^{\text{Cl}}$ .
- Li (период 2) чуть «сильнее донор», чем Na (период 3).
- Обменные реакции ( $\text{HF} + \text{NaCl} \leftrightarrow \text{HCl} + \text{NaF}$ ) теперь имеют ненулевую  $\Delta F$ , что позволяет предсказывать направление реакции.

В коде это реализовано переключателем:

```
SPECTRAL_MODE = "v1" # или "v2_period_split"
V2_PERIOD_EXPONENT = 0.7
```

Параметр  $k$  подбирается по критерию согласия знака  $\Delta F$  с известной химией обменных реакций галогенидов щелочных металлов.

## Н.6 Четыре феноменологических закона (версии v1–v3, Drafts)

На основе численных экспериментов в режимах v1.0–v4.0 (см. спектральный R&D-отчёт) удаётся сформулировать четыре устойчивых “закона” поведения спектральной среды. Они не вводятся вручную, а возникают как эмерджентное следствие выбранных постулатов и калибровок модели.

### Н.6.1 Закон геометрического периода (спектральная энтропия)

**Формулировка.** При переходе к более тяжёлым периодам способность атома поддерживать спектральный вакуум (акцепторные свойства) деградирует существенно быстрее, чем способность создавать спектральное давление (донорные свойства). Крупные солитоны легко становятся донорами и плохо удерживают роль сильных акцепторов.

**Обоснование (режим v2.0, period split).** В режиме v2.0 вводится геометрический закон

$$E_{\text{port}} \sim \text{Period}^{-k},$$

где  $k \approx 0.7$ . Сканирование по  $k$  (раздел K-SCAN отчёта) показывает, что для доноров (Li/Na) электроотрицательности  $\chi_{\text{spec}}$  почти не расходятся:  $\Delta\chi(\text{Li} - \text{Na})$  остаётся малой ( $\sim 0.05\text{--}0.1$ ) во всём диапазоне  $k$ . Напротив, для акцепторов (F/Cl) расщепление растёт:  $\Delta\chi(\text{F} - \text{Cl})$  увеличивается от  $\approx 0.3$  до  $\approx 0.6$  при росте  $k$ , а абсолютное значение  $\chi_{\text{spec}}(\text{Cl})$  падает существенно быстрее, чем у F.

В режиме v2.0 же обменные реакции, завязанные на галогены (например,  $\text{HF} + \text{NaCl} \rightarrow \text{HCl} + \text{NaF}$ ), получают ненулевое  $\Delta F$  именно за счёт того, что тяжёлый галоген становится “размягчённым” и хуже удерживает вакуум, чем лёгкий.

**Интерпретация.** В терминах спектральной среды это означает, что:

- состояние “избыточного давления” (донор, металл) топологически устойчиво и слабо зависит от размера солитона;
- состояние “спектрального вакуума” (сильный акцептор) метастабильно и требует жёсткой, компактной оболочки (малых периодов);
- неметаллические, окислительные свойства локализованы в правом верхнем углу таблицы, а при росте номера периода среда неизбежно “металлизует” вещество.

Этот закон задаёт геометрическую тенденцию: при увеличении периода химия неметаллов естественным образом вырождается в химию металлов.

## Н.6.2 Закон спектрального импеданса (мягкая проводимость)

**Формулировка.** Энергия связи и интенсивность потоков  $F_{\text{flow}}$  определяются не только разностью электроотрицательностей  $\Delta\chi$ , но и спектральным импедансом контакта, то есть эффективной жёсткостью канала. При прочих равных мягкий атом даёт более мощный поток, чем жёсткий.

**Обоснование (режим v2.0 / v4.0, органический тест-бенч).** В режиме v2.0 (и в полном режиме v4.0) сравнение молекул  $\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{H}_2\text{S}$  показывает:

- геометрические части  $F_{\text{geom}}$  и угловые штрафы  $F_{\text{angle}}$  для  $\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{H}_2\text{S}$  практически идентичны;
- кислород имеет большую  $\chi_{\text{spec}}$ , чем сера, но более высокий  $E_{\text{port}}$  (жёстче);
- при этом модуль  $F_{\text{flow}}$  для  $\text{H}_2\text{S}$  в 2–3 раза больше, чем для  $\text{H}_2\text{O}$ : связь с серой даёт более сильный поток, несмотря на меньшую электроотрицательность S.

Аналогичный эффект наблюдается и для других пар мягкий/жёсткий при одинаковом топологическом мотиве.

**Интерпретация.** В электротехнических терминах:

- жёсткий акцептор (O, F) — это источник высокого “напряжения”  $\chi$  с большим внутренним сопротивлением: он создаёт сильный потенциал, но ограничивает ток;
- мягкий акцептор (S, Cl при больших периодах) — это источник среднего напряжения с малым сопротивлением: ток течёт легче, потоки  $F_{\text{flow}}$  усиливаются;

- энергия связи оказывается пропорциональна не только  $\Delta\chi^2$ , но и обратной жёсткости канала,

$$F_{\text{flow}} \sim - \frac{(\Delta\chi)^2}{\text{Hardness}}.$$

Для химии это значит, что “реактивность” атома в сеть (его способность перестраивать потоки) определяется не только тем, насколько он “жадный”, но и тем, насколько он мягок геометрически. Сера, например, оказывается идеальным элементом для построения мягких, сильно перераспределяющих заряд цепочек (вулканизация, полисульфиды), тогда как кислород, будучи жёстким, стремится к локализованным, более “жёстким” структурам (водородные связи, жёсткие решётки льда).

### Н.6.3 Закон критической глубины (эффект Super-O)

**Формулировка.** Существует порог глубины спектральной ямы  $\epsilon$ , ниже которого геометрическая жёсткость оболочки перестаёт эффективно ограничивать поток, и среда переходит в режим “пробоя”: резко возрастает модуль зарядовых потоков и энергия связи.

**Обоснование (режим v3.0, eps-coupled).** В режиме v3.0 отключается периодическое размягчение, но включается явная связь  $\epsilon \rightarrow \chi_{\text{spec}}$ . Эксперимент “Super-O” заключается в том, что для кислорода искусственно задаётся очень глубокая  $\epsilon = -5$  при малом эффективном периоде. Численно наблюдается:

- базовый кислород (обычная  $\epsilon$ ) даёт умеренную  $\chi_{\text{spec}}$  и относительно малый  $F_{\text{flow}}(\text{H}_2\text{O})$ ;
- “Super-O” с теми же геометрическими параметрами, но сильно смещённой  $\epsilon$ , приводит к росту  $\chi_{\text{spec}}$  и резкому усилению потока: модуль  $F_{\text{flow}}(\text{H}_2\text{O}^*)$  возрастает на порядок по сравнению с обычной водой;
- при этом топология и геометрия графа молекулы вообще не меняются — меняется только глубина спектральной ямы.

В v2.0 тот же эксперимент заведомо отрицательный (контроль): при отсутствии связи  $\epsilon \rightarrow \chi$  изменение  $\epsilon$  не влияет ни на  $\chi$ , ни на  $q$ , ни на  $F_{\text{flow}}$ .

**Интерпретация.** Этот закон разделяет два режима:

- *химический* — умеренные  $\epsilon$ , где геометрия и периодика контролируют поведение, а потоки остаются сравнимыми с  $F_{\text{geom}}$ ;
- *допороговый “ядерный”* — сверхглубокие  $\epsilon$ , где геометрические ограничения почти перестают работать, а потоки становятся доминирующими по энергии.

В рамках книги этот закон естественно интерпретировать как аналог перехода от химии к физике высоких энергий: при достаточной глубине спектральной ямы локальная “микро-чёрная дыра” в среде начинает «всасывать» энергию вне зависимости от деталей геометрии.

#### Н.6.4 Закон разделения ролей геометрии и спектра (v1–v4)

**Формулировка.** Геометрия (топология и период) задаёт *направление* химических процессов (знаки  $\Delta F$ , т.е. что вообще выгодно), а спектральная глубина  $\epsilon$  задаёт *силу* и “характер” этих процессов (модуль  $|\Delta F|$ , величину потоков и долю  $F_{\text{flow}}$  в полной энергии).

**Обоснование (эволюция v1.0–v4.0).**

- В режиме v1.0 (без периода и без  $\epsilon$ ) атомы в пределах одной группы (Li/Na, F/Cl) становятся спектральными “близнецами”: одна и та же пара  $(E_{\text{port}}, \chi_{\text{spec}})$ , обменные реакции изоэнергетичны ( $\Delta F \approx 0$ ). Модель видит только голую топологию без масштаба.
- В режиме v2.0 вводится только периодическое масштабирование  $E_{\text{port}} \sim \text{Period}^{-k}$ : близнецы расходятся,  $\Delta F$  обмена становится ненулевым и получает правильный знак. Геометрия (размер солитона) уже достаточна, чтобы задать направление реакций и качественное разделение металл/неметалл.
- В режиме v3.0, напротив, геометрия “замораживается” (v1-подобная), но включается связь  $\epsilon \rightarrow \chi_{\text{spec}}$ . Направления реакций (знаки  $\Delta F$ ) в значительной части остаются прежними, но модули  $|\Delta F|$  и величины потоков сильно меняются, особенно в искусственных экспериментах типа Super-O.
- В режиме v4.0 объединяются оба механизма: периодическое размягчение плюс спектральная подстройка по  $\epsilon$ . Геометрия окончательно ломает мир близнецов, а  $\epsilon$  позволяет тонко настраивать характер элементов внутри группы, не меняя общей топологической картины.

**Интерпретация.** Этот закон фиксирует архитектуру полной модели:

- v1.0 — калибровочный ноль: чистая топология без масштаба;
- v2.0 — геометрический слой: период, радиус, жёсткость оболочек, закон металлизации;
- v3.0 — спектральный слой: глубины  $\epsilon$ , характер окислителей и доноров, эффекты вроде Super-O;
- v4.0 — их суперпозиция: готовый инструмент для химических предсказаний.

С точки зрения дальнейшего R&D это означает, что поиск “острова стабильности” и экзотических элементов можно вести, варьируя независимо два ортогональных набора параметров: геометрические (период и топология атомного графа) и спектральные ( $\epsilon$  и связанные с ней поправки к  $\chi_{\text{spec}}$ ), проверяя, как их комбинация влияет на  $F_{\text{geom}}$ ,  $F_{\text{flow}}$  и знаки  $\Delta F$  в типичных реакциях.