

Геометрическая таблица атомов на основе спектральной самоорганизации

Самодостаточная постановка модели и вычислительного ТЗ

Роберт Паулиг

10 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

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;

избежать 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 существам 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.**

Даётся 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 мини-таблицы 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. 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 H_2O и H_2S в спектральном потоке почти не различаются: потоковая энергия F_{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 ΔF .

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: H_2O против H_2S . В v2.0 я ввожу простой индекс спектральной реактивности R_{react} , который сравнивает по модулю потоковую энергию F_{flow} с суммой геометрических вкладов.

Оказалось, что при одинаковой геометрии:

- у воды H_2O потоковая часть $|F_{\text{flow}}|$ мала по сравнению с F_{geom} и угловым штрафом;
- у сероводорода H_2S спектральный поток заметно сильнее, а относительный индекс R_{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 Н, 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 ϵ для кислорода) показал, что в текущей реализации v2.0 этот параметр практически не влияет на расчёт χ_{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.

1.2 Спектральный режим v3.0: связь глубины ε 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 ε (глубина спектральной ямы относительно фоновой среды) практически не влиял на вычисляемую электроотрицательность χ_{spec} и потоки зарядов в QE_q-подобной модели.

В режиме v3_eps_coupled вводится явная связь

$$\varepsilon_{\text{eff}} = \varepsilon_{\text{spec}} + \lambda_{\varepsilon} \varepsilon,$$

и именно ε_{eff} используется при вычислении знака и масштаба χ_{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_{port} и периодом (размером солитона). При включении v3.0 в игру вступает глубина ε :

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

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

1.3 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_{port} и χ_{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: однопортовые терминалы (H, F, Cl, Li, Na), двухпортовые мосты (Be, Mg, O, S), многопортовые 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

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

так что:

- внутри периода (по строке таблицы) χ_{spec} примерно монотонно растёт по мере увеличения $F_{\text{geom}}/\text{ports}$ при фиксированном знаке (донор/акцептор),
- между периодами (по столбцу) χ_{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_{port} масштабируется как period^{-k} , а χ_{spec} вычисляется на основе E_{port} и положения уровня ϵ_Z относительно химического потенциала среды μ_{env} . Калибровка на H, Li–Cl показывает:

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

Интерпретация. Вместо эмпирической электроотрицательности мы получаем вычислимую функцию $\chi_{\text{spec}}(Z)$ от геометрии графа-атома, числа портов, периодического масштаба и спектральной глубины ϵ_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 χ_{spec} и вклад в ΔF реакций практически совпадают;
- включение масштабирования 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_{port} и почти одинаковые χ_{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_{port} и χ_{spec} для тяжёлых близнецов становятся меньше по модулю, а ΔF 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 χ , валентность, сетевые роли) и гравитационные свойства (масса, гравитационный потенциал) являются двумя разными макропределами одной и той же спектральной структуры ρ_{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 ρ_{spec} , функционалы F_{spec} и F_{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 ε первична по отношению к геометрической форме: даже геометрически “жёсткий” атом (с неблагоприятной топологией и углами) при достаточно глубоком ε насиливо поляризует связи и создаёт химию там, где геометрия стремилась к покоя.

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 H_2O 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 H_2S казался более активной молекулой за счёт мягкого серного центра (эффект “мягкой проводимости”).

В режиме v3.0, когда ε кислорода начинает существенно участвовать в формуле χ_{spec} , ситуация меняется:

- для H_2O F_{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 ε , который пробивает геометрическую жёсткость и запускает устойчивый ток зарядов. Вода в этой модели возникает как тонкий баланс между глубокой $\varepsilon(O)$ и жёсткостью её портов.

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

- знак ΔF (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 ΔF , 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 ΔF), а спектральная глубина ε 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 $F \neq Cl$ и $\Delta F \neq 0$;
- v3.0: включение параметра ε в формулу χ_{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 ε — интенсивность и характер электронных потоков в связях.

1.4 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 (антиметрическая 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 переосмыслиния. На данном этапе это **рабочая гипотеза** и программа численных экспериментов, а не завершённая теория природы.

1.5 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 δ_{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.

1.6 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.

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

1.8 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_{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_{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 ϕ_∞ — 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.

1.9 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 θ (масштаб, ориентации, внутренние доли и т.п.);
- *топологией* — графом или узлом G_θ , 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 $F_{\text{sol}}[\theta]$.

1.10 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 θ 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 «жёсткость» 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.

1.11 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 Хова), а структура $\rho(\omega, x; \theta)$ определяет пространственную форму «орбиталей» и локальных полей.

1.12 Масса как спектрально-топологический функционал

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

Определение полной массы солитона. Для солитонной конфигурации θ вводится эффективная масса

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

где

- M_{spec} — спектральный вклад, зависящий от плотности состояний $\rho(\omega; \theta)$ через интеграл с весовой функцией $w_M(\omega)$;
- M_{top} — топологический вклад, зависящий от дискретных инвариантов графа/узла G_θ (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 Φ_N — ньютоновский потенциал, связанный со спектральным потенциалом ϕ .

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 μ_i — соответствующие «массы квантов» этих инвариантов.

При непрерывных деформациях солитона, не меняющих топологический класс G_θ и сохраняющих локализованность спектра, величины K_i и, следовательно, M_{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.).

1.13 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 геометрико-спектральной классификации устойчивых конфигураций Среды.

Определение геометрического атома. Для элемента с атомным номером Z рассматривается множество солитонных конфигураций \mathcal{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_{levels} — функционал, сравнивающий спектральные линии оператора $\hat{H}[\theta]$ с экспериментальными уровнями данного элемента;
- F_{geom} — функционал геометрической/топологической структуры ядра (сложность, симметрия, дерево связей и др.).

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

Закон валентных портов. Валентность элемента определяется числом устойчивых портов в конфигурации θ_Z : локальных направлений в θ_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_{θ_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 θ_{Z_1} и θ_{Z_2} имеют одинаковый набор портов и близкие значения функционалов F_{levels} и F_{geom} , то их валентное поведение и роль в сетях Среды практически совпадают, несмотря на различие в Z . Такие элементы образуют пары (или кластеры) геометрических близнеццов 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 *эмержентным следствием* солитонного описания Среды и вариационного принципа для функционала F_{atom} .

1.14 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 ε_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 χ_{spec} задаётся знаком Δ_Z^{spec} (донор/акцептор), а модуль связан с χ_{geom} с учётом донорного демпфирования.

Теорема 1 (масштабирование χ_{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

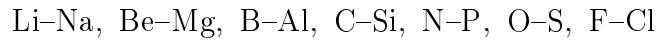
$$E_{\text{port}}(Z_i) = \frac{F_{\text{geom}}(Z_i)}{p_{Z_i}} n_i^{-k}, \quad i = 1, 2.$$

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 α , 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



выполняются условия теоремы: геометрический функционал F_{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 отличаются 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 ε_{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 χ_{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.

1.15 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 ρ_{spec} , ϕ , $\rho(\omega; \theta)$, $\rho(\omega, x; \theta)$, M_{sol} , F_{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:

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

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

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

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 фонового 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), характеризуемое собственной частотой ω_{clock} ;
- за интервал от t_1 до t_2 солитон совершил $N \approx \omega_{\text{clock}}(t_*)(t_2 - t_1)/2\pi$ 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 ω 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 ω .

Интегральная спектральная “мощность” в точке x определяется как

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

где Ω — 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 ρ_L ;
- **Электромагнитные и радиационные** эффекты описываются поперечным каналом ρ_T .

Поэтому далее мы будем строить гравитационный потенциал не из полной ρ_{spec} , а именно из ρ_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_{grav} , тем труднее деформировать Среду продольной волной в данной области.

3.3 Спектральный потенциал

Спектральный потенциал определяется как логарифмический функционал от I_{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 ϕ_∞ .

Такое определение отражает две идеи:

- логарифм переводит *мультипликативные* изменения спектра (усиление/ослабление мод) в *аддитивные* изменения потенциала;
- падение I_{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 ϕ с ньютоновским потенциалом Φ_N и с частотами локальных “часов” будет подробно разобрана в разделе ??.

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 ??). 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 (??) 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 (??) равен некоторой константе ϕ_∞ . 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 ϕ 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

- Δ — 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;
- κ — 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 (??) переходит в ньютонаовский 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_{eff} калибруется так, чтобы воспроизводился стандартный ньютонаовский 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 ϕ_∞ :

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

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 (??) в (??) даёт стандартное ньютоновское уравнение

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

так что классический потенциал Φ_N появляется как *удобная репараметризация* спектрального потенциала ϕ .

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 α_k зависит от типа перехода.

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

$$\alpha_k \approx 1,$$

и формула (??) 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–Ребки, GPS и Hafele–Keating), в которых формула (??) 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 (??) и (??) 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 (??) 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 ~ 2 части на миллион от своей локальной частоты в фотосфере. Это совпадает с величиной эффекта, наблюдавшегося 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–Ребки

Эксперимент Паунда–Ребки 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:

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

где g — ускорение свободного падения.

Тогда из (??)

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

Подставляя $g \approx 9,8$ м/с², $H \approx 22,5$ м и $c \approx 3 \cdot 10^8$ 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 ϕ 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_{orb} . Относительно часов на поверхности Земли (скорость v_{surf} в простейшем приближении можно принять как линейную скорость вращения Земли) суммарный сдвиг частоты в модели v0.1 записывается как

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

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 (??), 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–Ребки, 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 Φ_N появляется как удобная размерная репараметризация ϕ 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 θ (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 “жёсткость” 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 (??) 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 ω_n — собственные частоты колебаний Среды вокруг заданной конфигурации θ .

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 (??) 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 ω для данной конфигурации θ .

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 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 Хова* — 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 “частицоподобных” 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 (??), 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 ω 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 (??);
- для набора частот ω вычислять матричную функцию Грина

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

где η — малая положительная ширина сглаживания;

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

Таким образом, формализм функции Грина и плотности состояний обеспечивает прямой мост от конфигурации Среды θ 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 θ (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

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

где \Im обозначает мнимую часть, а Tr — след оператора.

Интуитивно $\rho(\omega; \theta) d\omega$ показывает, сколько мод колебаний системы с конфигурацией θ 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 ω .

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 делта-функция.

Тогда глобальная DOS (??) и локальная LDOS (??) 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-структурям, 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 атомо-подобных 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 θ — это класс состояний Среды $\mathcal{S}(t)$, для которого:

1. существует область пространства $U \subset X$ с характерным размером R_θ , 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 θ (масштабы, ориентации, внутренние деформации) и топологией G_θ , которая будет введена в разделе ??.

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 ??). Введём *спектральный энергетический функционал*:

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

где:

- Ω_E — рабочий диапазон частот для энергетического расчёта;
- $w_E(\omega)$ — весовая функция (например, пропорциональная ω , ω^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 ??). 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_{cross} — число пересечений (или его обобщение), C_{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_{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 κ_E — калибровочный коэффициент, фиксируемый по одному или нескольким эталонным объектам (например, по протону). В разделе ?? 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_{grav} определяется формулой (??). 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_{grav} отклоняется от фонового значения;
- другие солитоны чувствуют градиент ϕ и испытывают «притягивающее» 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 θ_i ;
3. вычислению $\phi(x)$ и $\mathbf{g}(x)$ по формулам (??), (??);
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, «нитки» Среды. В этом разделе мы вводим графовое и узловое описание конфигураций.

8.1 Графовое представление конфигураций

Солитонную конфигурацию θ будем сопоставлять конечному графу G_θ , вложенному в пространство X :

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

где:

- V_θ — множество вершин (узлов) конфигурации;
- E_θ — 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_θ и, как следствие, разные топологические инварианты. Поэтому G_θ 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, торoidalные 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_{cross} .

2. **Число компонентов** $C_{\text{comp}}[G_\theta]$.

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 (??). 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 вычислимymi комбинаторными характеристиками.

Важно, что:

- топологические инварианты *не зависят* от гладких деформаций конфигурации и поэтому отражают «структурную» сложность;
- они позволяют естественно penalизировать избыточно сложные конфигурации при поиске минимумов функционалов (чем сложнее узел, тем выше E_{top} и M_{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 θ (положения узлов, масштабы, форма графа G_θ 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 θ — непрерывные параметры (координаты, размеры, углы), а G_θ — дискретная топологическая структура (граф/узел), описывающая связность солитона.

Для каждой конфигурации Θ определяется численное значение функционала

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

где:

- F_{levels} — **спектральный функционал**, измеряющий, насколько спектр $\rho(\omega; \Theta)$ и набор характерных частот $\{\omega_i(\Theta)\}$ соответствует желаемому “атомному” шаблону;
- F_{geom} — **геометрический/топологический функционал**, учитывающий сложность, симметрию и комбинаторику графа G_Θ ;
- F_{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 Θ . 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_{levels} отвечает за *динамику*: правильный набор частот, отсутствие разрушительных низкопорядковых резонансов, соответствие экспериментальным спектрам (там, где они известны).

- F_{geom} отвечает за *форму*: излишняя топологическая запутанность и нарушение симметрии увеличивают F_{geom} , а простые и высокосимметричные конфигурации (тетраэдр, куб и т.п.) его минимизируют.

Такая разбиение важно и концептуально, и вычислительно:

- спектральная часть F_{levels} опирается на расчёт DOS/LDOS и может быть реализована поверх любого достаточно общего численного решателя для $\hat{H}[\theta]$;
- геометрическая часть F_{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_{levels} и F_{geom} , а в разделе о масце и энергетике связываем минимумы F с эффективной массой и гравитационным вкладом солитонной конфигурации.

10 Спектральный функционал F_{levels}

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

Пусть для конфигурации Θ 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_{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_{match} — штраф за несовпадение ключевых частот с целевыми (экспериментальными или теоретическими);
- F_{res} — штраф за “опасные” низкопорядковые резонансы между модами;
- F_{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 α_i — веса, отражающие важность соответствующего перехода.

В ситуациях, когда известен не набор линий, а только “трубая” 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 ω_i, ω_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);
- Δ_{mn} — допустимая “зона неопределённости” вокруг точного резонанса.

При таком определении F_{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_{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 фоновой 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_{band} и повышает устойчивость.

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

10.5 Использование F_{levels} в оптимизации

При численной оптимизации конфигурации Θ (например, при поиске геометрии прототипа атома) спектральный функционал F_{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 θ ;
- служит универсальной мерой “насколько данная конфигурация похожа на правильный атом/солитон” с точки зрения спектра.

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

11 Геометрический функционал F_{geom}

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

- графом/узлом G_Θ (связность, число петель, ветвистость);
- относительными положениями ключевых вершин (узлов солитона);
- выбранной группой симметрии (тетраэдрическая, кубическая и т.п.).

Цель F_{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_Θ — 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 ??).

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_{cross} и, следовательно, повышают F_{complex} . Это соответствует идеи, 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 $\{\mathbf{v}_k\}$ — набор направлений “портов” (связей) в конфигурации Θ , а $\{\mathbf{u}_k\}$ — соответствующие идеальные направления в выбранном платоновом теле. Тогда можно ввести

$$F_{\text{sym}}[\Theta] = \alpha_{\text{sym}} \sum_k (1 - \mathbf{v}_k \cdot \mathbf{u}_k), \quad (83)$$

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_{sym} минимален. Произвольные искажения формы увеличивают F_{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_{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_Θ , 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 “естественному” правилам ветвления Среды, даёт малое F_{tree} , а искусственные или сильно искажённые структуры — большое.

11.4 Итоговый анзац для F_{geom}

Собирая все вкладки 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_{complex} задаётся формулой (??) и отвечает за топологическую сложность;
- F_{sym} задаётся формулой (??) (или её тензорным вариантом) и отвечает за близость к платоновым телам;
- F_{tree} задаётся формулой (??) 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 θ 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:

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

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 μ_{top} и параметры $\Psi(G_\theta)$ так, чтобы для протона, нейтрона и лёгких ядер получались реалистичные относительные массы.

Таким образом, F_{levels} и F_{geom} определяют устойчивость и «форму» конфигурации, а M_{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 θ_Z и топологией G_{θ_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 возможнастыковка с другой конфигурацией без сильного роста F_{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_{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_{θ_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 θ_Z по функционалу (??).

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, допускающийстыковку 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 пристыковке 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_{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_{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_{geom} .

Бор (B).

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

В рамках v0.1 эти элементы важны как тесты того, что F_{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 выражеными 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_{levels} и F_{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 «кусок» 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_{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_{θ_Z} , который можно использовать как начальное приближение для численной оптимизации;
- служит тестовым полигоном для функционалов F_{levels} и F_{geom} : если даже для первых десяти элементов не удается 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_{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_{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_{geom} , и потому 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:

$$p_C = 4,$$

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_{geom}), но суммарная портовая структура богата: четыре направления позволяют строить разветвлённые объёмные и плоские сети. Такая комбинация — малый E_{port} при большом p_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_{geom} и энергии одного порта E_{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”;
- $\text{port_geometry}(Z)$ — тип фигуры портов, один из `linear`, `trigonal`, `tetra`, `pyramidal`, `bent`, `single`, `none`;
- $\text{preferred_angle}(Z)$ — 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 терминалному 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_{geom} .

Примеры:

- В (linear, 180°) — два порта на одной прямой минимизируют их взаимное влияние; естественна линейная геометрия.
- В (trigonal, 120°) — три порта в плоскости образуют равносторонний треугольник; отсюда типичная тригонально-плоская геометрия центров бора.
- С (tetra, $109,5^\circ$) — четыре порта в вершинах тетраэдра задают максимально однородное распределение направлений в 3D; это геометрическая основа тетраэдрических молекул (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 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 портевой 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_{geom} .

Нетипичные химические ситуации (напряжённые циклы, гипервалентные центры и др.) можно рассматривать как случаи, когда портевые фигуры одного или нескольких атомов вынуждены отклоняться от своих любимых углов, и рост F_{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

- θ_i — фактические углы между портами данного атома в конкретной молекуларной 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_{angle} измеряет, насколько сильно конкретная молекула вынуждена эту фигуру деформировать. Рост F_{angle} можно интерпретировать как рост внутреннего напряжения и потенциальной энергии, связанной именно с углами.

Пример: циклопропан как предельный случай углового напряжения

Хорошой тестовой площадкой для углового функционала служат маленькие циклы. Рассмотрим, например, циклопропан: кольцо из трёх углеродных атомов C_3 . В первом приближении геометрия кольца близка к правильному треугольнику: все углы $\text{C}-\text{C}-\text{C}$ близки к 60° .

С точки зрения портовой геометрии углерода, изолированный атом С 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, сохранив малое F_{angle} .

Однако в циклопропане каждый углеродный центр в кольце должен участвовать в образовании двух $\text{C}-\text{C}$ -связей, образующих угол порядка 60° . 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 С оценивается как

$$F_{\text{angle}}(C_3) \sim k_C (\Delta \theta_{C_3})^2,$$

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_{geom} . Рост F_{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° , чем 60° ;
- 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_{angle} при росте размера кольца: чем ближе фактические углы к любимому $\theta_0(Z)$, тем меньше геометрическое напряжение и тем дешевле по F_{geom} реализовать данную молекулярную конфигурацию.

Таким образом, угловой функционал F_{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 открытия портов и роста F_{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_{port} такой порт ведёт себя как “жёсткий акцептор” (например, F, Cl), при меньшем E_{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	$\text{geom}(Z)$	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	$\text{geom}(Z)$	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:

- $\text{Li} \leftrightarrow \text{Na}$ (1 порт, terminator),
- $\text{Be} \leftrightarrow \text{Mg}$ (2 порта, bridge, linear),
- $\text{B} \leftrightarrow \text{Al}$ (3 порта, hub, trigonal),
- $\text{C} \leftrightarrow \text{Si}$ (4 порта, hub, tetra),
- $\text{N} \leftrightarrow \text{P}$ (3 порта, hub, pyramidal),
- $\text{O} \leftrightarrow \text{S}$ (2 порта, bridge, bent),
- $\text{F} \leftrightarrow \text{Cl}$ (1 порт, terminator),
- $\text{Ne} \leftrightarrow \text{Ar}$ (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–C, Si–O–Si);
- hub–bridge–terminator задают ветви, заканчивающиеся “висящими” группами (CH_3 , 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_{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 энергию 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 притяжение 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 χ_{geom} естественно считать нулевой или не определённой — они реализуют локальные геометрические минимумы без портов;
- F и Cl — однопортовые **terminator** с максимальными E_{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;

- О и N — многопортовые hub/bridge с умеренно высокими E_{port} и сильно направленной портовой геометрией (bent и pyramidal), что соответствует большой, но меньшей, чем у F/Cl, электроотрицательности;
- С и Si — hub с четырьмя портами в тетраэдрической конфигурации, для которых E_{port} минимально среди элементов с портами: они выступают как структурные центры сетей с умеренной χ_{geom} ;
- Li и Na — однопортовые terminator, для которых геометрический порт достаточно дорог (большое E_{port}), но спектральная конфигурация смешена так, что выгоднее отдавать электронную плотность в Среду, чем забирать её. В этом смысле χ_{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_{port} и положительной χ_{geom} ;
- активные, но менее “жадные” акцепторы (O, N, S и т. п.) с промежуточными значениями χ_{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_{geom} и энергия порта E_{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 разложённой 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 ε_Z , описывающий положение его характерного уровня относительно некоторого химического потенциала Среды μ_{env} :

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

$\varepsilon_Z \ll \mu_{\text{env}} \Rightarrow Z$ 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 ε_Z по отношению к μ_{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 ε_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, В 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_{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 ε_Z геометрический функционал F_{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 разложённым на прозрачные геометрические и спектральные вклады.

20 Черновики: тестовые молекулы CH₄, NH₃, H₂O

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 CH₄, NH₃ и H₂O, и как в их геометрии отражаются угловой функционал и геометрическая электроотрицательность.

CH₄: тетраэдрический хаб без углового напряжения

В модели атом углерода описывается четырёхпортовым хабом с геометрией `tetra` и любимым углом $\theta_0(C)$. В молекуле CH₄ 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 θ_i выполняется $\theta_i \approx \theta_0(C)$, так что вклад $F_{\text{angle}}(C; \{\theta_i\})$ минимален;
- геометрический функционал молекулы F_{mol} почти целиком определяется локальными $F_{\text{geom}}(C)$ и $F_{\text{geom}}(H)$, без существенного углового напряжения.

В этом смысле CH₄ реализует почти идеальный тетраэдрический хаб: портовая геометрия C используется в “любимом” режиме, а H выступают как мягкие термины, не накладывающие дополнительных геометрических ограничений.

NH₃: 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 $\theta_0(N) \approx 107^\circ$.

В молекуле NH₃ 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°, то есть чуть меньше тетраэдрического значения;
- угловой функционал для азота мал, но уже отличен от нуля:

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

- по сравнению с CH₄ портовая конфигурация N менее равномерна: наличие lone pair усиливает локальную асимметрию спектрального поля, что согласуется с повышенной полярностью и реакционной способностью NH₃.

Таким образом, NH₃ можно рассматривать как реализацию пирамидального хаба: Среда использует три порта N вблизи любых углов, но уже с заметной асимметрией и небольшим угловым напряжением.

H₂O: изогнутый мост с выраженным угловым напряжением

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

В молекуле воды H₂O оба порта O используются для связей O–H. С точки зрения углового функционала:

- угол H–O–H близок к 104° , то есть ещё дальше от идеального тетраэдра, чем в случае 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 χ_{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:

- C: 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 болееенным 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_{spec}

До сих пор основное внимание уделялось чисто геометрическому слою модели: портовой структуре атомов, геометрическому функционалу F_{geom} , энергии порта E_{port} и угловому вкладу F_{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 μ_{env} и штраф за смещение эффективных уровней солитона относительно μ_{env} при образовании связей.

В минималистской игрушечной постановке вместо полного спектра можно использовать один эффективный параметр ε_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 λ_{spec} — калибровочный коэффициент, а μ_{env} — параметр, характеризующий фоновое спектральное состояние Среды. В таком описании донорный характер элемента (Li, Na и т.п.) соответствует высоким ε_Z (уровень “подвешен” и его выгодно отдать), а акцепторный характер (F, Cl и др.) — низким ε_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 ε_Z относительно μ_{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 ε_Z и явный вид F_{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 CH₄, NH₃, H₂O

В качественном разборе молекул CH₄, NH₃ и H₂O 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 sp³-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_{angle} — небольшой коэффициент нормировки.

В коде `geom_atoms.py` этот функционал реализован методом `angular_tension_sp3()` класса `Molecule`. Для молекул CH4, NH3 и H2O строятся простые графы:

- CH4: один C-хаб и четыре H-терминатора (связи C–H);
- NH3: один N-хаб и три H-терминатора (связи N–H);
- H2O: 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:

$$F_{\text{angle,sp3}}(\text{CH}_4) \approx 0, \quad F_{\text{angle,sp3}}(\text{NH}_3) \ll F_{\text{angle,sp3}}(\text{H}_2\text{O}). \quad (93)$$

Более подробно,

$$F_{\text{angle,sp3}}(\text{CH}_4) \approx 0, \quad F_{\text{angle,sp3}}(\text{NH}_3) \propto 1 \cdot (109,5^\circ - 107^\circ)^2, \quad F_{\text{angle,sp3}}(\text{H}_2\text{O}) \propto 2 \cdot (109,5^\circ - 104^\circ)^2. \quad (94)$$

То есть:

- у CH4 полная тетраэдрическая фигура С используется в “любимом” режиме, и угловое напряжение практически нулевое;
- у NH3 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 H2O 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 + ε –связь) эффективная электроотрицательность определяется как

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

где μ_{env} — химический потенциал Среды, α — глобальный калибровочный множитель, $k_{\text{period}} \approx 0.7$ — экспонента периодического размягчения, а s_{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 ($\text{Li} \leftrightarrow \text{Na}$, $\text{Be} \leftrightarrow \text{Mg}$, $\text{F} \leftrightarrow \text{Cl}$ 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 χ_{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–Роху и др.). В геометрической таблице она становится вычислимым функционалом от F_{geom} , локального спектра (через ε_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) χ_{spec} растёт слева направо почти монотонно, если нормировать на число портов: элементы с большей “геометрической ценой” порта оказываются более электроотрицательными;
- *по столбцу* (между периодами) χ_{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 χ_{spec} становятся различными, а ΔF 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 χ_{spec} и вклад в F_{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 ρ_{spec} для ядра, а функционалы F_{geom} и F_{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 ρ_{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 (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 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:

1. **малые молекулы органики и гидриды:** CH_4 , NH_3 , H_2O , H_2S , HF , HCl , LiF , NaCl , CH_3F , CH_3Cl ;
2. **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 ?? приведены значения компонент энергофункционала для выбранных молекул в режиме v4.0. Все величины даны в условных единицах модели:

- F_{geom} — геометрический вклад (создание портов и топологии);
- F_{angle} — штраф за отклонение от идеальных углов;
- F_{flow} — выигрыш (отрицательный вклад) от перераспределения зарядов в гармоническом QEeq-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).

Из таблицы видно несколько характерных эффектов:

- у *ковалентных* молекул (CH_4 , NH_3 , CH_3F , CH_3Cl) основную часть стабилизации даёт F_{geom} , а R_{react} сравнительно мал — это "конструкционные" молекулы;
- у *ионных* связей (LiF , NaCl) вклад F_{flow} велик (до $\sim 20-25\%$ от F_{total}) — это "энергетические" молекулы, существующие за счёт спектрального напряжения Среды;

Таблица 1: Молекулярные тесты geom-spec v4.0: разложение F_{mol} и индекс реактивности.

Молекула	F_{geom}	F_{angle}	F_{flow}	F_{total}	R_{react}
H ₂ O	7.400	0.605	-0.180	7.825	0.0225
H ₂ 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 ₄	13.900	0.000	-2.054	11.846	0.1477
CH ₃ F	14.950	0.000	-2.032	12.918	0.1359
CH ₃ Cl	14.950	0.000	-1.858	13.092	0.1243
NH ₃	10.650	0.062	-0.313	10.400	0.0292

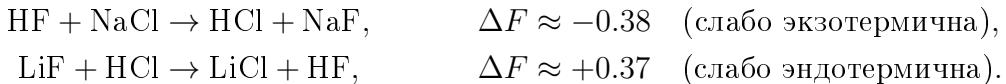
- переход H₂O → H₂S показывает эффект *мягкой проводимости*: при близких геометриях (одинаковые F_{geom} и F_{angle}) более мягкая S даёт заметно больший по модулю поток F_{flow} , чем жёсткий O.

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 + ε-связь) близнецы расходятся, и обменные реакции получают конечные энергии:



Таким образом, модель geom-spec 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 ε так, что близнецы становятся различимыми, а знаки и порядок ΔF для простых реакций согласуются с качественной химией.

Эта пара тестов (молекулы + реакции) замыкает цикл “атомные индексы → молекулярный функционал → 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 ?? для каждого элемента указаны:

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

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

Z	Элемент	Роль	Период	χ_{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

Эта таблица наглядно демонстрирует:

1. **Периодичность ролей:** последовательность term → bridge → hub → ... → inert повторяется во 2-м и 3-м периодах.
2. **Сдвиг масштаба:** значения χ_{spec} 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.

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 $A \sim 0.08\text{--}0.17$ при практически нулевом D . После обновлённой калибровки χ_{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

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

То есть d-блок формирует *металлический супер-хаб-слой*: по D/A-индексам он сливаются 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 \rightarrow роль \rightarrow сложность”, лежащий над p-хабами.

24 Общая структура программного комплекса

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

- построить дискретизацию пространства X и, при необходимости, частотной оси ω ;
- 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 θ (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_θ (вершины, рёбра, топологические метки).
 - Параметры конфигурации θ (масштабы, углы, деформации, типы связей).
 - Описание фоновой Среды и граничных условий.
2. **Модуль спектральной среды и гравитации** (см. раздел ??). Отвечает за работу с ρ_{spec} , I_{grav} , спектральным потенциалом ϕ и гравитационным полем \mathbf{g} .
 3. **Модуль оператора H и DOS/LDOS** (см. раздел ??). Строит дискретизированный оператор $\hat{H}[\theta]$, вычисляет DOS и LDOS, предоставляет интерфейсы для обращения оператора (функции Грина).
 4. **Модуль функционалов.** Содержит реализации F_{levels} , F_{geom} , F_{atom} , а также энергетического и массового функционалов.
 5. **Модуль оптимизации и интегралов** (см. раздел ??). 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_{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 θ .
6. По завершении оптимизации сохраняются:
 - оптимальные параметры θ^* ,
 - спектр, DOS/LDOS,
 - поля $\phi(x)$ и $\mathbf{g}(x)$,
 - геометрия графа G_{θ^*} .

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 аддитивные шкалы.
- Фоновая спектральная плотность $\rho_{\text{spec}}^{(0)}(\omega_k, x_i)$.
- Возмущения спектра $\delta\rho_{\text{spec}}$, индуцируемые солитонной конфигурацией θ :
$$\rho_{\text{spec}}(\omega_k, x_i; \theta) = \rho_{\text{spec}}^{(0)}(\omega_k, x_i) + \delta\rho_{\text{spec}}(\omega_k, x_i; \theta).$$
- 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 σ 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 H и DOS/LDOS

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

Построение оператора

В минимальной реализации:

- $\hat{H}[\theta]$ дискретизуется 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 θ ;
- 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 ω строится матрица $(\omega + i\eta - H)^{-1}$ с малым затуханием η .
- 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 ω и индексов i .

Интерфейс для функционалов

Модуль \hat{H} предоставляет функциональному модулю:

- массивы частот $\omega_i(\theta)$ (явные уровни, если они вычислены);
- функции-обёртки: DOS(omega, theta), LDOS(omega, x, theta);
- при необходимости — производные по параметрам θ (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_{target} может быть:

- $F_{\text{atom}}[\theta_Z]$ — при поиске геометрии атома;
- комбинация F_{levels} и F_{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 ε защищает от деления на слишком малые значения.

Для многомерного случая:

- градиент оценивается через симметричные конечные разности по каждой компоненте θ_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 θ (масштаб, пара углов);
- использовать относительные приращения $\Delta_k = \epsilon |\theta_k| + \Delta_{\min}$;
- 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 ω — трапецидное 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 θ 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).

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_{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, С 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 роли (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-spec 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-spec 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 $\chi_{\text{spec}}(Z)$ отрицателен, то элемент попадает в донорный сектор \mathcal{D} :

$$r(Z) = \text{terminator}, \quad \chi_{\text{spec}}(Z) < 0 \Rightarrow Z \in \mathcal{D}.$$

Это реализуется для щёлочных металлов {Li, Na}. При положительной $\chi_{\text{spec}}(Z)$ terminator-узел становится сильным акцептором и попадает в сектор \mathcal{A} :

$$r(Z) = \text{terminator}, \quad \chi_{\text{spec}}(Z) \gg 0 \Rightarrow Z \in \mathcal{A}$$

(элементы H, F, Cl).

2. **Bridge-узлы как двухпортовые доноры/акцепторы.** Для двухпортовых мостов $r(Z) = \text{bridge}$ знак χ_{spec} определяет ориентацию потока:

$$\chi_{\text{spec}}(Z) > 0 \Rightarrow Z \in \mathcal{D}, \quad \chi_{\text{spec}}(Z) < 0 \Rightarrow Z \in \mathcal{A},$$

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 выключены 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 Kr 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 щёлочных 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 щёлочноземельных 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 p-акцепторного плато. Для p-блока с незаполненной валентной оболочкой (кроме пред-акцепторов, см. ниже) акцепторный индекс $A(Z)$ в модели v4.0 концентрируется на одном универсальном плато:

$$Z \in \{\text{C, N, O, F, Si, P, S, Cl, Ge, As, Se, Br}\} \Rightarrow A(Z) \approx A_p \simeq 1.24, \quad D(Z) \approx 0.$$

Это можно интерпретировать как *универсальную p-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 p-оболочки важнее конкретного Z .

Закон пред-акцепторов (B, Al, Ga). Для элементов с небольшим положительным сдвигом спектральной электроотрицательности, лежащих ниже основного p-плато, формируется отдельное слабое акцепторное плато:

$$Z \in \{\text{B, Al, Ga}\} \Rightarrow A(Z) \approx A_{\text{weak}} \simeq 0.12, \quad D(Z) \approx 0,$$

где $A_{\text{weak}} \ll A_p$. Эти элементы занимают *амфотерную пред-акцепторную* позицию: они уже не доноры, но и не полноценные p-акцепторы. В реальной химии это проявляется как слабая Льюисова кислотность и способность выступать в роли мягких акцепторов и доноров в ковалентных каркасах (B, Al, Ga в сетках на основе C/Si/Ge).

Наличие двух чётко различимых плато A_{weak} и A_p даёт спектральный критерий отделения мягких амфотерных центров от жёстких неметаллических акцепторов внутри p-блока.

Наличие двух чётко различимых плато A_{weak} и A_p даёт спектральный критерий отделения мягких амфотерных центров от жёстких неметаллических акцепторов внутри p-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 $C_{\max}(Z)$ 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 $C_{\max}(Z)$ 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 один из элементов на X и построим несколько простейших молекул с его участием (модуль `make_virtual_molecule`). Для каждой пары (p, ε) определим спектральную электротрицательность $\chi_X(p, \varepsilon)$ 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 электротрицательность χ_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, ε) . Гипотеза модели состоит в том, что за пределами этого острова (при больших p или малых по модулю ε) 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 ΔF .

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 терминалы).

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_{\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 знанкованная функция от геометрического портового функционала F_{geom} и эффективной глубины ϵ_{eff} , с учётом роли элемента (donor / bridge / hub / terminator). Чтобы сопоставить её со стандартной шкалой Паулинга $\chi_P(Z)$, выполнена линейная калибровка по набору элементов

$$\{\text{H}, \text{Li}, \dots, \text{Cl}, \text{K}, \text{Ca}, \text{Ga}, \text{Ge}, \text{As}, \text{Se}, \text{Br}\}$$

из геометрической Таблицы.

Результат метода наименьших квадратов даёт аппроксимацию

$$\chi_P(Z) \approx a \chi_{\text{spec}}(Z) + b, \quad a \approx 0.50, \quad b \approx 1.41,$$

с средней квадратичной ошибкой порядка 0.4 по шкале Паулинга. Это означает, что спектральная χ_{spec} :

- воспроизводит относительный порядок элементов по электроотрицательности;
- линейно связана с экспериментальной шкалой без необходимости подгонять параметры по каждому элементу отдельно;
- может рассматриваться как *первоначальная* 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 ≤ 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 $|F_{\max}| < 20$) существует широкий спектральный пояс допустимых комбинаций (p, ε) .

Для портоносных конфигураций ($p \geq 1$) спектральная электроотрицательность χ_X остаётся в узком интервале

$$0.1 \lesssim \chi_X \lesssim 2.0,$$

а величины $|F_{\max}|$ гладко растут от ~ 8 до ~ 19 без катастрофических скачков. При $p = 0$ модель даёт особый класс конфигураций с малой энергией ($|F_{\max}| \approx 5.5$) и неопределённой χ_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_{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_{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 α -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 β -стабильности в функционале F_{nuc} . Для фиксированного атомного номера Z “предпочтительное” значение числа нейtronов $N_{\text{best}}(Z)$ в версии v0.2 определяется как минимум ядерного функционала

$$N_{\text{best}}(Z) = \arg \min_N F_{\text{nuc}}(Z, N),$$

где F_{nuc} задан капельно-оболочечной формулой с парным членом. Численный просмотр области $8 \leq Z \leq 82$ показывает, что получающаяся долина β -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_{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_{nuc} одновременно генерирует и ступенчатую долину β -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_{nuc} (потенциал Вудса–Саксона) мы попытались напрямую “подключить” его к капельно–оболочечному функционалу F_{nuc} v0.2: заменить список нейтронных магических чисел N_{magic} в оболочечном штрафе на набор, извлечённый из спектра H_{nuc} по гар-анализу.

Численно это даёт отрицательный результат. Для калибровочных ядер от ^{16}O до ^{208}Pb линия β -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 остается 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_{nuc} v0.2 продолжает использовать legacy-набор магических чисел. Этот отрицательный результат подчёркивает, что простое добавление спектрального списка в грубый оболочечный штраф недостаточно: для количественного согласия с экспериментом нужен более прямой переход от спектра H_{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_{shell} задаётся в виде гладких “чаш” вокруг магических чисел и не включает детальную структуру одночастичных уровней и деформаций;
- парный член F_{pair} учитывает только грубое различие между чётно–чётными и нечётно–нечётными ядрами.

В результате для лёгких элементов ($Z \lesssim 20$) долина β -стабильности в этой модели смещается к заметно нейтронобогатым конфигурациям ($N/Z \sim 1.6$ – 1.7), что не соответствует реальным стабильным изотопам (кислород, неон, магний и т.п.). Поэтому в диапазоне малых Z функционал F_{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 $Z \gtrsim 20$ – 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_{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_{nuc} к тому же диапазону Z при существенно худшей связанности, либо соответствуют конфигурациям с F_{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 β -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 β -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_{best}/Z выходит в диапазон ~ 1.5 –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 β -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_{nuc} по N ;
- **донарные 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 совместными: набор атомных номеров, для которых ядерный функционал F_{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_{geom} , χ_{spec} и ростовые процессы.

Закон ядерной β -совместимости геометрических ролей. Скан долины β -стабильности v0.2 и изотопных полос даёт для каждого элемента (Z, El) набор параметров $(N_{\min}, N_{\max}, N_{\text{best}})$: 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

$$\text{band_width} = N_{\max} - N_{\min},$$

а положение на долине характеризуем отношением N_{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 β -долине с

$$\langle N_{\text{best}}/Z \rangle \approx 1.7\text{--}1.8,$$

причём терминалы 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 ~ 11 для терминаторов и ~ 14 для мостов до ~ 16.5 для хабов и ~ 19 для d-блока. Живые хабы в среднем занимают промежуточную позицию (~ 13 нейтронов сверх Z) из-за смеси лёгких (C, N) и тяжёлых (Sn, Sb) элементов.

Итого, геометрические роли и живые хабы оказываются β -совместимыми: ростовая “живость” и сложность возникают внутри той же узкой нейтронной полосы $\Delta N \sim 2\text{--}3$ вокруг общей β -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 $F_{\text{nuc}}(Z, N) \leq F_{\min}(Z) + \Delta F$ 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_{atom} с конечным числом портов, локальной симметрией и спектральным индексом χ_{spec} ; из χ_{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_{donor} : одно- и двухпортовые s-элементы донорного плато (группы 1–2, $A \approx 0$, $D > 0$);
- p_{semihub} : трёхпортовые p-полумосты на слабом акцепторном плато ($A \approx 0.12$, $D \approx 0$);
- p_{acceptor} : p-акцепторы на сильном плато ($A \approx 1.237$, $D \approx 0$);
- 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.py`, 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_{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 β -линии. Geom-Mendeleev v2 уточняет этот закон, добавляя в него периодическую составляющую.

[Закон универсального d-слоя] Рассмотрим все элементы, отнесённые к геометрическому классу d_{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_{\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:

$$D_{d_{\text{octa}},p} \approx \bar{D}_{d_{\text{octa}}}, \quad A_{d_{\text{octa}},p} \approx \bar{A}_{d_{\text{octa}}} \quad (96)$$

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 $C_{\max,d_{\text{octa}},p}$ по периодам лежат в узком диапазоне вокруг глобальных средних по классу d_{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_universality.py`, который:

- читает `data/element_indices_with_dblock.csv` и `data/geom_nuclear_complexity_summary.csv`;
- выделяет элементы класса d_{octa} через функцию `classify_geom_row`;
- объединяет геометрические и сложностные характеристики по ключу (Z, El);
- вычисляет периодические и глобальные статистики по $(D, A, \langle C \rangle, C_{\max})$;
- записывает итоговую таблицу и краткое текстовое резюме в `results/d_block_universality.csv`.

Полученные в этом анализе числа подтверждают, что d-элементы, доступные в текущей версии модели, действительно реализуют один и тот же «металлический суперхаб-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 графиками 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}_{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_segregated.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 α_{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 атTRACTорами: небольшие изменения спектрального индекса χ_{spec} или параметров калибровки почти всегда оставляют элемент в том же классе.

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 $\langle C \rangle, C_{\max}$ монотонно возрастают при переходе от terminator к bridge и далее к hub, причём живые р-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/acceptor-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_{octa} , образуют единый металлический слой: их положение на D/A-плоскости и характеристики ростовой сложности $(\langle C \rangle, C_{\max})$ слабо зависят от периода, но заметно превосходят p-хабы. Численные сканы (`scan_dblock_complexity.py`, `test_d_block_universality.py`) показывают устойчивый «металлический супер-хаб-уровень» d-блока.

Закон ядерной β -совместимости геометрических ролей. Все геометрические роли (terminator, bridge, hub, d-слой) живут на одной и той же нейтронобогатой β -долине $N_{\text{best}}/Z \approx 1.7\text{--}1.8$, определяемой функционалом F_{nuc} . 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_{nuc} приводит к систематическому смещению β -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 α_{tree} медленно зависит от рольевого 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).

На момент версии v0.1 в зелёную зону входят:

- **Статическая спектральная Среда.**

- Задание фоновой спектральной плотности $\rho_{\text{spec}}^{(0)}(\omega, x)$ на сетке.
- Введение локальных возмущений $\delta\rho_{\text{spec}}(\omega, x; \theta)$.

- **Спектральный потенциал и гравитация.**

- Расчёт $I_{\text{grav}}(x)$, $\phi(x) = -\ln I_{\text{grav}}(x)$ и поля $\mathbf{g}(x) = -\nabla\phi(x)$.
- Моделирование движения пробных тел в поле \mathbf{g} в ньютоновском приближении.

- **Простые дискретные операторы \hat{H} .**

- 1D и 2D решётки осцилляторов, дискретизация оператора вида $-\nabla \cdot (c^2 \nabla)$.
- 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 сопоставлений 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_θ .
 - Нужны тесты на устойчивость спектра при деформациях θ 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, нейtron, лёгкие ядра).
- **Функционал уровней F_{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_{geom} .**
 - Нужно зафиксировать конкретный набор геометрических характеристик (число пересечений, меры симметрии, ветвистости и т.п.).
 - Ввести нормировку и весовые коэффициенты так, чтобы минимум достигали ожидаемые конфигурации (He, C, Ne и др.).
- **Систематические расчёты для H–Ne.**
 - Для каждого $Z \leq 10$ необходимо:
 1. задать семейство прототипов G_{θ_Z} ;
 2. провести оптимизацию по θ_Z ;

3. сравнить спектральные и геометрические свойства с экспериментом/химией.

- **Интеграционные схемы повышенной точности.**

- Базовые интегралы по ω 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 (лентоны, 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 Хова.
- 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_{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 ветвленими. "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_{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 θ).
 - Общие утилиты (линейная алгебра, логирование).
- `/env/`

- Реализация спектральной Среды и модуля гравитации (раздел ??).
- `/operatorH/`
 - Построение $H(\theta)$, расчёт DOS/LDOS (раздел ??).
- `/functionals/`
 - Реализации F_{levels} , F_{geom} , F_{atom} , M_{sol} и др.
- `/optimize/`
 - Symmetric Newton и вспомогательные методы.
 - Модуль интегралов по ω , x и θ .
- `/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 ρ_{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_{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 Среды 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 (??). 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 (??);
- «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 (??), (??) 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 ψ_θ — 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 (??), (??). 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 двадцатишеститочечным, если хотим) шаблоном, модифицированным анизотропными коэффициентами c^2 и локальным потенциалом V_{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 (??), (??).
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 ($N_x = N_y = N_z \sim 10-16$), 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 ΔV_a , радиусы R_a , относительные положения) *управляют* менять 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 ω_n^2 с аналитическим решением.

2. Одна яма.

- Ввести профиль $V_{\text{eff}}(x)$ и $c(x)$ по (??), (??).
- 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 (??) и $M_{\text{grav}}^{(\text{toy})}$ по (??) 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

A 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 А1–А5

- А1. 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.
- А2. Единая непрерывная Среда.** Пространство заполнено единственной нелинейной непрерывной Средой. Материя, поля и гравитация — различные режимы её спектральной самоорганизации.
- А3. Спектральное описание.** Состояние Среды описывается локальной спектральной плотностью $\rho_{\text{spec}}(\omega, x, t)$ (и её продольной/поперечной частью), а наблюдаемые величины являются функционалами от этой плотности.
- А4. Солитонные объекты.** Устойчивые «частицы» и макрообъекты соответствуют локализованным солитонным конфигурациям Среды $\theta(x, t)$ с конечной энергией.
- А5. 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 $\Delta\phi \approx 4\pi G_{\text{eff}}\sigma(x)$, 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 $M_{\text{sol}}[\theta] = M_{\text{spec}}[\rho(\omega; \theta)] + M_{\text{top}}[G_\theta]$, 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_{sol} .
- M3. Топологическая квантизация.** При изменении топологического класса конфигурации G_θ топологический вклад M_{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 θ_Z .
- D2. Геометрический периодический закон.** При росте Z минимизирующие конфигурации G_{θ_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.

B Компактный список постулатов v0.1

Этот раздел даёт сжатую версию постулатов из раздела ???. Он полезен как «шпаргалка» при чтении остальных частей книги и при работе с кодом.

Постулат 1. Антирелиativистский

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_{levels} сравнивает спектр с целевыми уровнями, а F_{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 ϕ 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.

C Минимальные математические определения и обозначения

Этот раздел фиксирует набор обозначений, которые используются по умолчанию во всей книге.

C.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 \mathbf{v} :

$$\operatorname{div} \mathbf{v} = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial v^i}{\partial x^i}.$$

- 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.

C.2 Спектральные величины

- ω — частота (угловая частота); диапазон интереса обозначаем через Ω .
- $\rho_{\text{spec}}(\omega, x, t) \geq 0$ — 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.

C.3 Оператор малых колебаний и спектр

- θ — набор параметров солитонной конфигурации (положения, масштабы, деформации и т.п.).
- $\hat{H}[\theta]$ — линейный оператор малых колебаний Среды вокруг конфигурации θ . 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:

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

C.4 Топология, графы и функционалы

- G_θ — граф/узел, описывающий топологическую структуру конфигурации θ (вершины V_θ , рёбра E_θ , 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: ρ_{spec} , I_{grav} , ϕ , \mathbf{g} , $\hat{H}[\theta]$, $\rho(\omega)$, $\rho(\omega, x)$, G_θ и функционалы F_{levels} , F_{geom} , F_{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_θ (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 ньютонауского 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_{levels} (совпадение с целевыми частотами).
 - Реализация F_{geom} (сложность + симметрия).
 - Набор вспомогательных функций $F_{\text{atom}}, M_{\text{sol}}$.
- **/optimize/**
 - Symmetric Newton для малых размерностей θ .
 - Обёртки для численных интегралов по ω 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 самодостатчен, 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 Хова, 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 обрасти устойчивыми внешними опорами. На уровне v0.1 достаточно понимать, в какие области литературы имеет смысл заглядывать, не подменяя ими собственную онтологию Среды.

E 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 — много-портовый *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 C₀–C₁ практически неполярна: $\Delta\chi_{\text{geom}}(\text{C}_0-\text{C}_1) \approx 0$;
- связь C₁–O₂ поляризована к кислороду: $\Delta\chi_{\text{geom}}(\text{C}_1-\text{O}_2) > 0$, поток электронной плотности направлен от C к O;
- связь O₂–H₃ 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 Si₀–O₁ поляризована в сторону O: поток идёт от Si к O;

- связь O₁–Si₂ 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 мостикиовых анионов между тетраэдрами SiO₄.

Сетевой взгляд

Обе рассмотренные цепочки иллюстрируют, как один и тот же аппарат (геометрические роли, портовая геометрия и знаковая χ_{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, … 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, $(D_Z)_{ii} = \deg(i)$. 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 “жёсткость” и связность G_Z . Для одиночного узла (атом H) $\varepsilon_{\text{spec}} = 0$, для двухузлового пути (He) получается $\lambda_1 = 2$, а для более сложных графов значения λ_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 β — небольшой параметр. При малых β 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 H–Ar выводится функцией `print_spectral_summary()`.

Пример спектральной сводки для H–Ar

Типичный численный вывод для элементов H–Ar 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 H спектр вырожден в одно нулевое значение ($\varepsilon_{\text{spec}} = 0$);
- у He 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_{spec} и ε_Z

В исходных черновиках спектральный вклад $F_{\text{spec}}(Z)$ задавался через интеграл по спектральной плотности $\rho_Z(\omega)$ и параметр ε_Z , измеряющий положение характерного уровня относительно химического потенциала среды μ_{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 ε_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 .

G 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_{geom} , E_{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_{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 α , демпфирования доноров γ_{donor} и слабого фонового вклада хабов k_{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 Полингом, 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_{exp} (экспоненциальный вариант F_{spec}), E_{port} и χ_{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_{exp} , E_{port} и $|\chi_{\text{spec}}|$;
- внутри одного периода (Li → Ne или Na → 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_{exp} при малом E_{port} и нулевой χ_{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 терминалы” Li/Na с $\varepsilon_{\text{spec}} \approx 1$ и умеренным по модулю $\chi_{\text{spec}} < 0$, и “галогено-подобные терминалы” 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_{exp} : металлические мости Be/Mg и неметаллические мости 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 χ_{spec} у хабов существенно меньше, чем у терминалов 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_{exp} , то есть большими “спектральными объёмами” при отсутствии активных направлений для потоков.

Таким образом, в пространстве $(\varepsilon_{\text{spec}}, F_{\text{spec}}, E_{\text{port}}, \chi_{\text{spec}})$ роли **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 Чертежники: Гармонический предел и энергия молекулы

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 ρ_{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 χ_i^{spec} мы отождествляем с «спектральной электроотрицательностью» атома (первый производный от энергии по заряду), η_i — с локальной «жесткостью» (у нас она связана с портовой энергией E_{port}), а J_{ij} описывает взаимное отталкивание и поляризационную связь между атомами.

Минимизируя F_{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_{flow} играет роль «акустического предела» более сложной полевой теории.

H.2 Полный энергофункционал молекулы F_{mol}

Для ранжирования молекул по стабильности и оценки «цены» образования связей вводится полный молекулярный функционал F_{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_{angle} — штраф за отклонение валентных углов от идеальных (например, sp³-тетраэдра);
- F_{flow} — выигрыш (или проигрыш) энергии за счёт перераспределения электронной плотности (выравнивания химических потенциалов).

Примеры расчёта (по данным R&D-лаборатории):

- **H₂O**: $F_{\text{total}} \approx 8.0$. Система сильно стабилизована, F_{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_{flow} из-за большой разности χ_{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_{mol} :** физический смысл имеют только относительные сравнения и знаки ΔF 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_{port} , χ_{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:

$$E_{\text{port}}^{(\text{v2})}(Z) = E_{\text{port}}^{(\text{geom})}(Z) \cdot \text{Period}(Z)^{-k}, \quad k \approx 0.7.$$

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 «жёстче» 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 ΔF , 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 ΔF с известной химией обменных реакций галогенидов щелочных металлов.

H.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.

H.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 χ_{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 ≈ 0.3 до ≈ 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 ΔF 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.

H.6.2 Закон спектрального импеданса (мягкая проводимость)

Формулировка. Энергия связи и интенсивность потоков F_{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 H_2O и H_2S показывает:

- геометрические части F_{geom} и угловые штрафы F_{angle} для H_2O и H_2S практически идентичны;
- кислород имеет большую χ_{spec} , чем сера, но более высокий E_{port} (жёстче);
- при этом модуль F_{flow} для H_2S в 2–3 раза больше, чем для H_2O : 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” χ 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_{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).

H.6.3 Закон критической глубины (эффект Super-O)

Формулировка. Существует порог глубины спектральной ямы ϵ , 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 ϵ) даёт умеренную χ_{spec} и относительно малый $F_{\text{flow}}(\text{H}_2\text{O})$;
- “Super-O” с теми же геометрическими параметрами, но сильно смещённой ϵ , приводит к росту χ_{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 ϵ не влияет ни на χ , ни на q , ни на F_{flow} .

Интерпретация. Этот закон разделяет два режима:

- *химический* — умеренные ϵ , где геометрия и периода контролируют поведение, а потоки остаются сравнимыми с F_{geom} ;
- *допороговой “ядерный”* — сверхглубокие ϵ , 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.

H.6.4 Закон разделения ролей геометрии и спектра (v1–v4)

Формулировка. Геометрия (топология и период) задаёт *направление* химических процессов (знаки ΔF , т.е. что вообще выгодно), а спектральная глубина ϵ задаёт *силу* и “характер” этих процессов (модуль $|\Delta F|$, величину потоков и долю F_{flow} в полной энергии).

Обоснование (эволюция v1.0–v4.0).

- В режиме v1.0 (без периода и без ϵ) 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, ΔF 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 ΔF) 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 ϵ . Геометрия окончательно ломает мир близнецов, а ϵ 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 ϵ , 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 (ϵ и связанные с ней поправки к χ_{spec}), проверяя, как их комбинация влияет на F_{geom} , F_{flow} и знаки ΔF в типичных реакциях.