ХИМИЧЕСКИЙ ДИЗАЙН

(ОТДЕЛЬНЫЙ ОТТИСК)

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ МЕЗАХИМИИ В ПРОПЕДЕВТИКЕ МЕТАХИМИИ

Chem.Lab.NCD

Новосибирск, 2014

ХИМИЧЕСКИЙ ДИЗАЙН

(ОТДЕЛЬНЫЙ ОТТИСК)

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ МЕЗАХИМИИ В ПРОПЕДЕВТИКЕ МЕТАХИМИИ

Chem.Lab.NCD

Новосибирск, 2014

МАТЕРИАЛЫ

МЕЖДУНАРОДНОЙ АКАДЕМИИ

ЦЕНТРА НООСФЕРНОЙ ЗАЩИТЫ

И ежегодники "Химический Дизайн"

(1998-2014гг) смотри на сайтах:

http://kutol.narod.ru/webd.htm
http://kutolin.ucoz.ru
http://sak11.wmsite.ru
http://sak1.wmsite.ru
http://sgups.wmsite.ru/
http://kutol.narod.ru/PUBL/Retro_Publications.htm
http://kristall.lan.krasu.ru/Science/journals.html

Гипергеометрическое дифференциальное уравнение в модели «хаоса» - «порядка» мезаструктуры физико-химического материаловедения

Кутолин С.А.

профессор, доктор химических наук,

академик МАН ЦНЗ и РАТ.

Новосибирск, Россия

РЕФЕРАТ: Получено решение основного гипергеоматрического дифферен-циального уравнения (ГГ-ДФУ) в модели «хаоса» – «порядка», в котором совместимы макроскопические состояния (флюктуации) и микро-скопические (квантовые) эффекты. Такое уравнение второго рода, решаемое в среде «Mathcad» методом Рунге-Кутта четвертого порядка при заданных граничных условиях, вводимых интерпретацией коэффициентов по аналогии с водородоподобным атомом, позволило количест-венно установить корре-ляцию между решением основного дифференциального уравнения ГГ-ДФУ и решением уравнения Шредингера. Коэффициенты корреляции Пирсона для результирующей функции и ее первой производной между ГГ-ДФУ и уравнением Шредингера составляют:0.994 - 0.997. Показано с относительной ошибкой 4.5%, что численные значе-ния функцииШредингера и численные значения функциираспределения Пуассо- на-Смолуховского близки между собой.

Введение

Категории античной мифологии и философии «хаоса» - «порядка» [Философская энциклопедия,1970.] давно уже стали источником строгого, естественнонаучного описания: в теории вероятности [Колмогоров А.Н., 1986], в физике и теории информации [Хида Т.,1987],физической химии [Кобозев Н.И., 1971. Мезоструктура как любая промежуточная структура: будь то мезоатом, мезобласт, докристаллическая структура, в которой имеет место ближний порядок распределения частиц, а дальний полагается неопределенным по характеру своей упорядоченности, может служить идеальным примером рассмотрения химического дизайна "электрон □мезоструктура", физический характер которой требует уточнения в рамках решения проблемной ситуации, т.е. конкретизации технического задания самого объекта исследования. В этом смысле

система "электрон □мезоструктура" и органические, и, в частности, лекарственные, биологи-ческие [Ерофеев Б.В., Кутолин С.А., Лосев Ю.П., 1992; Ким А. М., Кутолин С.А., 1992], кристаллические и докристаллические состояния вещества в твёрдом, жидком и газообразном, плазмохимическом состоянии, поскольку фактором ориентации такой мезоструктуры является степень её дис-персности. И в этом смысле «наноструктура» есть одно из состояний «мезоструктуры», в которой электрон при взаимодействии с мезоструктурой проявляет себя как квантово – флуктуационное состояние! Вот почему неорганические, органические, биологические объекты физического материаловедения есть объекты системы " электрон □ мезоструктура". Объектом физико - математического доказателльства таких состояний, в частности, может служить обнаружение аналогии в установлении связи уравнения Шредингера и основного гипергеоматрического дифферен-циального уравнения (ГГ-ДФУ) в модели «хаоса» (флуктуации) и микро-скопические (квантовые) эффекты.

Установление количественной корреляции между гипергеоматрическим дифференциальным уравнением (ГГ-ДФУ) в модели «хаоса» – «порядка» и решением уравнения Шредингера.

Будем рассматривать некоторую область флюктуирующих (x) и связанных состояний (1-x) составляющих величину, равную: $x(1-x)Y''$.

Область скоростей флюктуации частиц, заполняющих уровни и подуровни, будет иметь вид: $[c-x(1+a+b)]Y'$, где: $x(1+a+b)$ — доля флюктуирующих состояний частиц в заданной области флюктуаций x, $[c-x(1+a+b)]$ — доля связанных состояний, $(1+a+b)$ — коэффициент области abY, смысл которого можно уяснить из дальнейшего.

Равновесие между областью abY, состоящей, предположим из незанятых флюктуирующими частицами уровней и подуровней, и областями такой флюктуации частиц, где имеет место распределение их скоростей: $[c-x(1+a+b)]Y'$ и ускорений: $x(1-x)Y''$ должно быть записано как уравнение:

$$x(1-x)Y''+[c-x(1+a+b)]Y'=abY$$

Полученное дифференциальное уравнение второго рода, основано лишь на представлении модели «хаоса» - «порядка».

Если полученное дифференциальное уравнение действительно является основным уравнением «мезоструктурной химии», т.е. молекулярной

химии и химии всего квази - конденсированного состояния вещества, то оно должно быть и основным квантово-химическим уравнением, поскольку объекты химической связи есть коллективизированные и локализованные электроны. Это, во-первых. Во-вторых, указанное уравнение есть квантово-флуктуациональное [Кутолин С.А., 1985] , поскольку его решение должно приводить к функции распределения Пуассона-Смолуховского, лежащего в основе расчета свойств как физико – органических, так и неорганических веществ в физическом материаловедении.

Тем самым, уравнение ГГ-ДФУ есть основное уравнение «мезоструктурной химии» и для макромолекулярных состояний, в котором макроскопические состояния (флюктуации) и микроскопические (кванто-вые) эффекты представляются совместимыми в той же мере, в какой, нап-ример, они совместимы в описании химических, физических и механи-ческих свойств макромолекул, например, и в полимерах.

Уравнение ГГ-ДФУ содержит параметры: a, b, которые можно интерпретировать как параметры квантовомеханические.

Пусть параметр a — означает половину числа пустых мест, занимаемых подуровнями, в которых могли бы оказаться, например, электроны.

Как известно максимальное число подуровней, занимаемых электронами равно: 2(21+1). Тогда для половины пустых мест имеем уравнение соотно-шение:

$$a= - [2(21+1)]/2= -(21+1)$$

Максимальное число электронов уровня X с главным квантовым числом n как известно есть удвоенный квадрат n, а собственное значение энергии электрона (E), движущегося в поле ядра с зарядом Z равно:

$$E= Z^2/2n^2=1/b^2X$$

Откуда смысл параметра b усматривается из формулы:

$$b=1/ Z$$

То есть, b — есть число, равное вероятности заполнения уровней частицами, например, электронами, численно равное обратной величине заряда ядра.

В этом случае смысл коэффициента (1+a+b) усматривается из следующих преобразований:

(1+a+ b) = [1+a+1/Z] = [1+Z(a+1)]/Z = i/Z = ib,

где i - изопараметрический коэффициент: i=[1+Z(a+1)]- мера распада уровней на подуровни (всегда, естественно, больше единицы), что приводит к соотношению: (1+a+b)=ib.

Осуществим с помощью среды Mathcad решение уравнения второго рода ГГ-ДФУ методом Рунге-Кутта четвертого порядка, выбрав следующие пара-метры a, b, c, l, Z: Z=2, l=1, a=-3, b=0.5 ,c=0.

Полученное дифференциальное уравнение «хаоса-порядка» ГГ-ДФУ есть обобщенное уравнение, частным случаем которого при заданных условиях параметров является, например, известное уравнение Шредингера и Уиттекера, а уравнение Пуассона-Смолуховского инвариантно относительно расчетов по уравнению Шредингера.
Такой результат не является случайным. Он свидетельствует о квантово-флюктуационной природе обобщенного уравнения ГГ-ДФУ.
Любопытно отметить, что с иных позиций [Кобозев Н.И., 1961] отмечалась аналогия между радиальной функцией Шредингера и функцией распре-деления Пуассона-Смолуховского, а уже [Menzel D.H., 1964,формулы 19,28] показал, что обобщенный радиальный интеграл водородо-подобной функции в пределах от нуля до бесконечности инвариантен функции Пуассона-Смолуховского.
В работе [Тарасов В.Ф., Чанышев СМ., 1970] было показано, что уравнение Шредингера для водородоподобного атома может быть выражено конфлюэнтными гипергеометрическими функциями, дифференциальное уравнение описания которых есть уравнение гипергеометрическое, в точности совпадающее с полученным уравнением ГГ-ДФУ, которое как следует из предлагаемого материала, получено из совершенно других соображений и касается квантово-флюктуационной природы «мезострук-турной химии» вообще..

Ниже приводятся выкладки и расчеты иллюстрирующие высказанные

$$\text{Параметры}: \mathrm{a, b, c, l, z, где}: l = 1, z = 2$$

предположения: $h = 0.05$шаг в изменениях

$$c = 0\,,\quad a = -(2 - l + 1),\ b = 1/z$$

N=6 -число шагов.

$F(x,y,z)=\frac{1}{x(1-x)}\cdot(a\cdot b\cdot y+z(x(a+b+1)-c))$

Уравнение $\frac{d^2Y}{dx^2}=F(x,y,z)$, где: $z=\frac{dY}{dx}, z=Y'; y=Y$

$K1(x,y,z)=h\cdot F(x,y,z)$

$k2(x,y,z)=h\cdot F[x+\frac{h}{2}, y+h\cdot\frac{K1(x,y,h)}{8}, z+\frac{K1(x,y,z)}{2}]$

$K3(x,y,z)=h\cdot F[x+\frac{h}{2}, y+h\cdot\frac{z}{2}+h\cdot\frac{K1(x,y,z)}{8}, z+\frac{K2(x,y,z)}{2}]$

$K4(x,y,z)=h\cdot F[x+h, y+h\cdot z+h\cdot\frac{K3(x,y,z)}{2}, z+K3(x,y,z)]$

$K(x,y,z)=\frac{K1(x,y,z)+K2(x,y,z)+k3(x,y,z)}{6}$

$S(x,y,z)=\frac{K1(x,y,z)+2K2(x,y,z)+2K3(x,y,z)+k4(x,y,z)}{6}$

$i=0...N-1$ - задание цикла

начальные условия.

$$\begin{bmatrix} x_0 \\ y_0 \\ z_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.5 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} x_{i+1} \\ y_{i+1} \\ z_{i+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_i + h \\ y_i + h(z_i + K(x_i, y_i, z_i)) \\ z_i + S(x_i, y_i, z_i) \end{bmatrix}$$ - итерационные уравнения

Результаты расчёта:

$$x = \begin{bmatrix} 0.5 \\ 0.55 \\ 0.6 \\ 0.65 \\ 0.7 \\ 0.75 \\ 0.8 \end{bmatrix} \qquad z = \begin{bmatrix} 1 \\ 0.57 \\ 0.182 \\ -0.158 \\ -0.446 \\ -0.678 \\ -0.849 \end{bmatrix} \qquad y = \begin{bmatrix} 1 \\ 1.039 \\ 1.058 \\ 1.058 \\ 1.043 \\ 1.014 \\ 0.976 \end{bmatrix}$$

$$ZG = z \qquad YG = Y$$

Решение уравнения Шредингера методом Рунге-Кутта четвертого порядка при условиях, например: Z=2, n=2, l=-1, при шаге h=0.05;числе шагов: N=6. Энергия боровской орбиты принимается равной:

$E=- Z^2 / 2n^2$, тогда

Уравнение Шредингера имеет вид:

$$F(x, y, z) = \frac{-2}{x} \cdot z - 2\left(E + \frac{Z}{x} - 1 \cdot \frac{l+1}{2x^2}\right) y$$

И при задании одинакового цикла, начальных условий и уравнений итерации получаем следующие результаты расчёта:

$$x = \begin{bmatrix} 0.5 \\ 0.55 \\ 0.6 \\ 0.7 \\ 0.75 \\ 0.8 \end{bmatrix} \quad SHZ = \begin{bmatrix} 1 \\ 0.518 \\ 0.149 \\ -0.136 \\ -0.357 \\ -0.529 \\ -0.661 \end{bmatrix} \qquad SH = \begin{bmatrix} 1 \\ 1.037 \\ 1.054 \\ 1.054 \\ 1.041 \\ 1.019 \\ 0.989 \end{bmatrix} \quad SH,SHZ-$$

Значение функции Шредингера и ее первой производной при значениях параметров: l=-1,Z=2,n=2. Значения функции линейной корреляции между результатми расчета по основному

уравне-нию(1) и решением уравнения Шредингера соответственно равно: corr (YG, SH) =0.994; corr(ZG,SHZ) =0.997 . Уравнение Пуассона-Смолуховского есть функция F:

$$F = \frac{x_i^{(n-1)}}{n!} \cdot \exp(\quad - x_i)$$

Будем полагать, что решение основного уравнения ГГ-ДФУ в форме Y и величины F для численных решений числом i есть величины C от i:

$C_i = Y_i / Fi$

Тогда для среднего значения величины □ получаем решения для i случаев в форме величин AY:

□=□ i/6

$Ay_i =$ □ Fi ; SH=Y

$$A_y = \begin{bmatrix} 0.947 \\ 0.991 \\ 1.029 \\ 1.06 \\ 1.086 \\ 1.107 \end{bmatrix} \quad SH = \begin{bmatrix} 1 \\ 1.037 \\ 1.054 \\ 1.054 \\ 1.041 \\ 1.019 \\ 0.989 \end{bmatrix} \quad (A_y \pm 0.045) = \begin{bmatrix} 0.992 \\ 1.036 \\ 1.074 \\ 1.105 \\ 1.131 \\ 1.152 \end{bmatrix}$$

Результаты расчета с очевидностью показывают,что расчеты функции по уравнению Шредингера инвариантны значениям ве-личин, получаемых при расчете по уравнению Пуассона – Смолу-ховского. Расходимость между вели-чинами Ay, SH лежит в пределах 4.5% относительной ошибки!

ЛИТЕРАТУРА

Menzel D.H. *Rev.of Modern Physics*,1964.vol.36.№2.p.613-617.

Ерофеев Б.В., Кутолин С.А., Лосев Ю.П. и др. *ДАН,*1992,т.325,№1-4,с.88-92;с.314-320;с.518-521;с.767-771.

Ким А.М., Кутолин С.А. *Теория КЛОП и компьютерное моделирование свойств органических соединений.* Новосибирск: НГПУ, 1992

Кобозев Н.И. *Вестник МГУ ,сер.хим*.,1961.№4.с.70-78.

Кобозев Н.И. *Избранные труды*. М.:МГУ,1978.с.237-249.

Кобозев Н.И. *Исследования в области термодинамики процессов информации и мышления*.М:МГУ,1971.195с.

Колмогоров А.Н. *Теория вероятности и математическая статис-тика. К теории броуновского движения*.М.:Наука,1986.с.168-170

Кутолин С.А. *Квантово-флюктуационная модель строения тугоплавких соединений// Сб. Теория и электронное строение тугоплавких соединений*. Киев: Наукова Думка,1985.с.36-49

Тарасов В.Ф., Чанышев С.М. *Известия АН КазССР*,1970.№6.с.50.

Философская энциклопедия.М.:ИСЭ,1970.Т5.с.430-431.

Хида Т. *Броуновское движение*.М.:Наука,1987.304с.