

# ХИМИЧЕСКИЙ ДИЗАЙН

---

---

(ОТДЕЛЬНЫЙ ОТТИСК 4)

МЕТАХИМИЯ ДИЗАЙНА СЕМИОТИКИ  
ОСОЗНАНИЯ СМЫСЛА РЕФЛЕКСИИ



Chem.Lab.NCD

Новосибирск, 2014

**Метахимия парадигмы «золотого сечения» и квазиатомная модель  
КРЭП упрощенной зонной структуры вещества**

*Кутолин С.А.*

*профессор, доктор химических наук,*

*академик МАН ЦНЗ и РАТ.*

*Новосибирск, Россия*

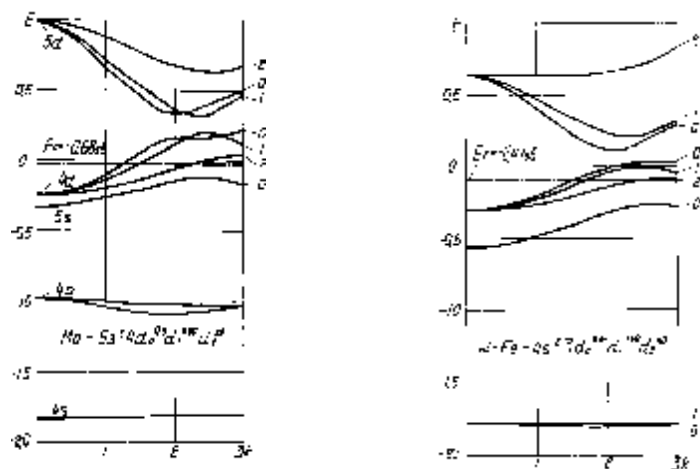
РЕФЕРАТ: Проведенный анализ показывает, что коэффициенты Чебышева в полиномах Чебышева, описывающие квазиатомное строение элементов Периодической таблицы Д.И.Менделеева, могут быть интерпретированы числовыми последовательностями Фибоначчи и Люка в форме функциональных квадратичных зависимостей с коэффициентом корреляции в модели ChemLehr 97-99% отн. ошибки.

Феноменологические расчеты приводят к утверждению генотипического характера описания свойств элементов периодической таблицы как парадигмы метахимии «золотого сечения». Именно этот «феномен», скорее всего, лежит в «принципе очевидности и феноменологических редукций», приводящих к априорным понятиям в сознании, создавая в духе Гуссерля основные понятия науки.

*Введение*

В одной из предыдущих работ данного сборника была проиллюстрирована метахимия синергизма, т.е. иерархия аналогии или прямое подобие, расчета атомных масс (атомных весов) элементов периодической системы элементов Д.И.Менделеева как «парадигмы золотого сечения». «Истина» периодического Закона фундаментальна и в том смысле, что в основе этого закона лежит натуральный ряд чисел. Это значит, что периодический Закон как открытие не имеет алгоритма по теореме Гёделя – Тарского. Частные формулировки периодизации самого Закона алгоритмируемы, т.е. позволяют исчислять число элементов в периоде, максимальное число электронов у уровне и подуровне s,p,d,f – состояний. Зонная структура вещества, т.е. современная теория твердого тела, позволяет детально описать состояния частиц твердого тела, согласующиеся, например, с оптическими свойствами вещества, вычисляемыми в широкой области гамма -, вакуумного ультрафиолета,

видимой области спектра, всего ИК- диапазона спектра. Но как предсказать конкретные свойства материала в его, так сказать, «физическом исполнении», т.е свойства металлов, их сплавов, стекла керамики, бетона, дать физико-химическое предсказание свойств отдельных веществ и реакций, в которых эти вещества взаимодействуют между собой. Эта задача, в какой – то мере, решается и нашими работами с сотрудниками<sup>13</sup>. В качестве базы данных(аргументов) для расчета физико-химических свойств материалов и процессов, протекающих между ними, используется квазиатомная модель карт распределения электронных полос (КРЭП)- рис.1, т.е. упрощенная зонная структура индивидуальных веществ и композиционных материалов.



<sup>13</sup> .Кутолин С.А.,Чернобровкин Д.И. Плёночное материаловедение редкоземельных соединений. М.:Металлургия,1981; Кутолин С.А.,Нейч А.И. Физическая химия стекла. М.:Стройиздат,1988;Кутолин С.А.,Котюков В.И., Писиченко Г.М.Кибернетические модели в материаловедении. Новосибирск:Chem.Lab.NCD,1996; Кутолин С.А.,Писиченко Г.М.,Капран А.С. Компьютерные модели конструкционных свойств сталей. Новосибирск: Chem.Lab.NCD,1997; Кутолин С.А., Писиченко Г.М.,Котюков В.И. Неорганическое материаловедение.Новосибирск: Chem.Lab.NCD, 1997. Кутолин С.А.Физико –органическая химия(компьютерный синэргизм).Новосибирск:Chem.Lab.NCD,2007.

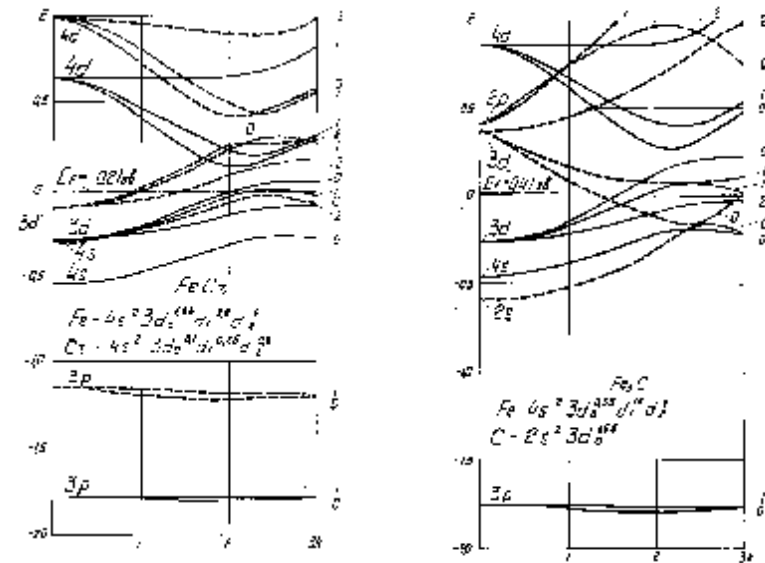


Рис. 1 а-в. Карты(КЭП) распределения энергии ( $E$ ) валентных электронов в а.е.м. (1 аем = 27,2 эВ) в зависимости от квазиимпульса  $K$  для металла ( $Mo, Fe$ ) (а), сплава состава  $FeCr$  (б) и карбида железа состава  $Fe_3C$  (в).  
Сплошные линии металлов  $Mo, Fe$ ; пунктирные — хрома, углерода; магнитные числа подуровней 0, 1, 2 проставлены с правой стороны.

Исследование природы химического взаимодействия рентгено-эмиссионными методами в сплавах и сопоставление этих результатов с расчетами, производимыми по картам распределения энергии валентных электронов в приближении КваМв, позволило в натурном эксперименте убедиться в необходимости и достаточности моделируемых представлений конденсированной среды в приближении квазиатомного строения.

Представление химической среды, в которой взаимодействие между электронами валентной полосы рассматривается как взаимодействие коллективизированных, локализованных и поляронных состояний электронов, позволило представить элементы в виде упрощенных зонных структур (карт распределения), а карты распределения электронных полос (рис.1) представляют собой зависимости энергии  $E$  валентных электронов от величины квазиимпульса  $E(k)$  при значениях

главного ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ), орбитального ( $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$ ) и магнитного  $m = 0, 1, 2, 3$ ) квантовых чисел (рис. 1). Благодаря  $m$ -расщеплению  $p$ -полоса разделяется на  $p_0, p_1, p_2$ ;  $d$ -полоса на  $d_0, d_1, d_2, d_3$ -подполосы. В силу симметрии рассматриваются только положительные значения  $l$ .

Кривые  $E(k)$  (рис. 1) рассчитаны вплоть до значения

$$k_{\max} = 4 \left( \frac{3}{4} \right)^{2/3} = 2,418 \quad (3)$$

в интервале значений энергий от  $E_{\min} = 1,0$  а.е.  $E_{\max} = 20$  а.е. (1 а.е. = 27,23 эВ)

Полученные зависимости энергии валентных электронов от величины квазиимпульса  $E(k)$  раскладывали в ряд по полиномам Чебышева и ограничивались квадратичным членом. Для этого энергия основного состояния электронов для дальнейших расчетов на ЭВМ задавалась рядом

$$E(k) = b_1 P_0(k) + b_2 P_1(k) + b_3 P_2(k) \quad (4)$$

где  $P_0(k), P_1(k), P_2(k)$  — полином Чебышева, отражающие инвариантное, линейное и квадратичное изменение  $s, p_0, p_1, d_0, d_1, d_2$  — валентных полос элемента;

$$\begin{aligned} P_0(k) &= 1 \\ P_1(k) &= (k - 7) \\ P_2(k) &= (k^2 - 14k + 35) \end{aligned} \quad (5)$$

$b_1, b_2, b_3$  — коэффициенты Чебышева при соответствующих полиномах Чебышева.

Таким образом, каждая кривая изменения энергии валентной полосы от величины квазиимпульса представлялась тремя коэффициентами  $X_1, X_2, X_3$ , отображающими инвариантное, линейное и квадратичное ее изменение. Распределение валентных электронов переходных металлов, имеющих  $s, d_0, d_1, d_2$ -валентные полосы, представлялось двенадцатью коэффициентами Чебышева  $X_1-X_{12}$  соответствующими четырем триадам коэффициентов  $b_1, b_2, b_3$ . Для описания полосной структуры  $p$ -элементов, имеющих  $s, p_0, p_1$ -валентные полосы, требовалось девять коэффициентов ( $X_{10}, X_{11}$  и  $X_{12}$  — коэффициенты принимались равными нулю).

Коэффициенты рассчитывались исходя из значений функций  $E(k)$ , взятых в 13 различных точках в интервале изменения квазиимпульса  $0 < k < k_{\max}$ . Все расчеты производились на ЭВМ.

Использование коэффициентов Чебышева позволяет вычислить энергию валентной полосы электронов для соответствующих элементов, применение метода компьютерного моделирования, с использованием коэффициентов Чебышева и значения энергии Ферми (табл. 1), дает возможность установить свойствами материала и его электронным строением (см. перечень монографий по использованию этого метода).

Таблица 1

Численные значения коэффициентов Чебышева  
и энергии Ферми углерода

Элемент	Уровень Ферми; $E_F$ , эВ	Значения коэффициентов Чебышева			Уровень валентности полос
		$b_1$	$b_2$	$b_3$	
C	4,35	-0,343	0,065	-0,016	$s$
		0,140	-0,029	0,008	$p_0$
		0,254	-0,047	0,011	$p_1$

Постановка задачи заключается в следующем. Если каждый элемент периодической таблицы Д.И Менделееви может быть идентифицирован коэффициентами полиномов Чебышева в упрощенной модели конденсированной среды (КваМВ), то должна существовать иерархия аналогии, т.е. синергизм метакимии парадигмы «золотого сечения» и коэффициентов полиномов Чебышева, поскольку такая парадигма отмечается и в предсказании атомных масс элементов в периодическом законе Д.И.Менделеева.

*Использование метода "ChemLehr" в описании феноменологии метакимии парадигмы «золотого сечения» коэффициентов Чебышева в КваМВ КРЭП упрощенной зонной структуры вещества*

Таблица 2

1	Si	Ge	As	Bi	Se	Te	Fibi 4	Luka 5
1	-0.293	-0.533	-0.593	-0.489	-0.293	-0.418	3	1
2	0.054	0.096	0.106	0.088	0.054	0.075	5	3
3	-0.013	-0.022	-0.024	-0.020	-0.013	-0.017	8	4
4	0.000	-0.185	-0.218	-0.226	0.000	-0.154	13	7
5	-0.002	0.030	0.035	0.038	-0.002	0.025	21	11
6	0.001	-0.005	-0.006	-0.007	0.001	-0.004	34	18
7	0.086	-0.095	-0.130	-0.161	0.086	-0.085	55	29
8	-0.015	0.015	0.021	0.027	-0.015	0.139	89	47
9	0.003	-0.002	-0.003	-0.005	0.003	-0.002	144	76
10	1.63	-4.35	-4.90	-5.44	1.63	-6.53	233	123

Воспользуемся базой данных (regres.dat) для 10 элементов (C, Si, Ge, Pb, As, Sb, Bi, S, Se, Te), сведения о некоторых приведены в табл.2 в форме значений коэффициентов Чебышева и чисел Фибоначчи (аргумент4), и Люка (аргумент5).

Числовые ряды Fibi, Luka есть последовательности чисел Фибоначчи, Люка, каждый из которых может играть в модели роль аргумента.. А отношение последующего числа к предыдущему в рядах Фибоначчи, Люка есть «золотое сечение». Расчётные значения коэффициентов Чебышева есть функция вида:  $Y_{расч.} = Y(Fibi, Luka)$ , величины, которых предсказываются по модели "ChemLehr", а вид общей модельной функции представлен соотношением, где В- постоянный член зависимости:

$$Y_{расч.} = \sum_1^n a_i \cdot x_i + B,$$

Величины no, np, ny, lo, vread, vprint, znach, psigma означают - число исследуемых объектов, аргументов, искомый признак ( $Y_{расч.}$ ), ищется в форме линейной или квадратичной зависимости, укороченный (расширенный) вариант печати, коэффициент значимости, коэффициент удаления реализации.

x(no,np) - ИСХОДНАЯ МАТРИЦА с базой данных (regres.dat) для 10 элементов.

*1.РАСЧЕТ ПО ПРОГРАММЕ <"ChemLehr" для элемента С>*

```

ЧИСЛО РЕАЛИЗАЦИЙ           10
ЧИСЛО ПАРАМЕТРОВ           5
РЕЗУЛЬТИРУЮЩИЙ ПАРАМЕТР 2( коэффициенты Чебышева дляС)
ВАРИАНТ ПЕЧАТИ             2
КОЭФФИЦИЕНТ ЗНАЧИМОСТИ     1.00
КОЭФФИЦИЕНТ УДАЛЕНИЯ РЕАЛИЗАЦИЙ  3.0
СТРОИТСЯ КВАДРАТИЧНАЯ МОДЕЛЬ
LX(J)
  0 0 0 1 1
NOV(I)
  1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
LP(J)
  1 0 0 0 0
КОЛИЧЕСТВО ПАРАМЕТРОВ, ВКЛЮЧЕННЫХ В МОДЕЛЬ  3
ПАРАМЕТР 4(Fibi) СТЕПЕНЬ 1 КОЭФФИЦИЕНТ  -.33355
ПАРАМЕТР 5(Luka) СТЕПЕНЬ 1 КОЭФФИЦИЕНТ   .59604
ПАРАМЕТР 5(Luka) СТЕПЕНЬ 2 КОЭФФИЦИЕНТ   .00055
СВОБОДНЫЙ ЧЛЕН УРАВНЕНИЯ      .2640656
СРЕДНЯЯ ОСТАТОЧНАЯ ДИСПЕРСИЯ  .1064877

```

НЕСМЕЩЕННАЯ ОЦЕНКА ОСТАТОЧНОЙ ДИСПЕРСИИ  
 .1774790  
 СРЕДНЯЯ ОСТАТОЧНАЯ ДИСПЕРСИЯ НА КОНТРОЛЬНОЙ  
 ВЫБОРКЕ .0000000  
 КОЭФФИЦИЕНТ КОРРЕЛЯЦИИ МОДЕЛИ (ккм=96.9%) .9685617  
 ВКЛАД ВКЛЮЧЕННЫХ ПАРАМЕТРОВ, РАССЧИТАННЫЙ  
 МЕТОДОМ ИСКЛЮЧЕНИЯ  
 4(Fibi) 52.6 5 (Luka) 47.4  
 ВКЛАД ВКЛЮЧЕННЫХ ПАРАМЕТРОВ, РАССЧИТАННЫЙ  
 МЕТОДОМ ВКЛЮЧЕНИЯ  
 4(Fibi) 21.3 5 (Luka) 78.7

Фактически найдена функциональная квадратичная зависимость вида:  
 $Y_{расч.} = Y(Fibi, Luka)$  с ккм=96.9% для коэффициентов Чебышева  
 квазиатомов углерода.

## 2.РАСЧЕТ ПО ПРОГРАММЕ <"ChemLehr" для элемента Si>

ЧИСЛО РЕАЛИЗАЦИЙ 10  
 ЧИСЛО ПАРАМЕТРОВ 5  
 РЕЗУЛЬТИРУЮЩИЙ ПАРАМЕТР 2( коэффициенты Чебышева для Si)  
 ВАРИАНТ ПЕЧАТИ 2  
 КОЭФФИЦИЕНТ ЗНАЧИМОСТИ 1.00  
 КОЭФФИЦИЕНТ УДАЛЕНИЯ РЕАЛИЗАЦИЙ 3.0  
 СТРОИТСЯ КВАДРАТИЧНАЯ МОДЕЛЬ  
 LX(J)  
 0 0 0 1 1  
 NOV(I)  
 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1  
 LP(J)  
 1 0 0 0 0  
 КОЛИЧЕСТВО ПАРАМЕТРОВ,ВКЛЮЧЕННЫХ В МОДЕЛЬ 3  
 ПАРАМЕТР4(Fibi) СТЕПЕНЬ 1 КОЭФФИЦИЕНТ -.21113  
 ПАРАМЕТР5 (Luka) СТЕПЕНЬ 1 КОЭФФИЦИЕНТ .38756  
 ПАРАМЕТР5 (Luka) СТЕПЕНЬ 2 КОЭФФИЦИЕНТ .00020  
 СВОБОДНЫЙ ЧЛЕН УРАВНЕНИЯ .0692206  
 СРЕДНЯЯ ОСТАТОЧНАЯ ДИСПЕРСИЯ .0173564  
 НЕСМЕЩЕННАЯ ОЦЕНКА ОСТАТОЧНОЙ ДИСПЕРСИИ  
 .2892730E-01



СРЕДНЯЯ ОСТАТОЧНАЯ ДИСПЕРСИЯ НА КОНТРОЛЬНОЙ  
ВЫБОРКЕ .0000000

КОЭФФИЦИЕНТ КОРРЕЛЯЦИИ МОДЕЛИ(ккм=96,5%) .9652702

ВКЛАД ВКЛЮЧЕННЫХ ПАРАМЕТРОВ,РАССЧИТАННЫЙ  
МЕТОДОМ ИСКЛЮЧЕНИЯ

4(Fibi) 51.4 5 (Luka) 48.6

ВКЛАД ВКЛЮЧЕННЫХ ПАРАМЕТРОВ,РАССЧИТАННЫЙ  
МЕТОДОМ ВКЛЮЧЕНИЯ

4(Fibi) 22.9 5 (Luka) 77.1

Найдена функциональная квадратичная зависимость вида:

$Y_{\text{расч.}} = Y(\text{Fibi}, \text{Luka})$  с ккм=96,5% для коэффициентов Чебышева  
квазиатомов кремния.

3.РАСЧЕТ ПО ПРОГРАММЕ <"ChemLehr" для элемента Ge>

ЧИСЛО РЕАЛИЗАЦИЙ 10

ЧИСЛО ПАРАМЕТРОВ 5

РЕЗУЛЬТИРУЮЩИЙ ПАРАМЕТР 2( коэффициенты Чебышева дляGe)

ВАРИАНТ ПЕЧАТИ 2

КОЭФФИЦИЕНТ ЗНАЧИМОСТИ 1.00

КОЭФФИЦИЕНТ УДАЛЕНИЯ РЕАЛИЗАЦИЙ 3.0

СТРОИТСЯ КВАДРАТИЧНАЯ МОДЕЛЬ

LX(J)

0 0 0 1 1

NOB(I)

1 1 1 1 1 1 1 1 1 1

LP(J)

1 0 0 0 0

КОЛИЧЕСТВО ПАРАМЕТРОВ,ВКЛЮЧЕННЫХ В МОДЕЛЬ 4

ПАРАМЕТР 4(Fibi) СТЕПЕНЬ 1 КОЭФФИЦИЕНТ -.35069

ПАРАМЕТР 5 (Luka) СТЕПЕНЬ 1 КОЭФФИЦИЕНТ .70270

ПАРАМЕТР 5 (Luka) СТЕПЕНЬ 2 КОЭФФИЦИЕНТ -.06495

ПАРАМЕТР 4(Fibi) СТЕПЕНЬ 2 КОЭФФИЦИЕНТ .01794

СВОБОДНЫЙ ЧЛЕН УРАВНЕНИЯ -.3316265

СРЕДНЯЯ ОСТАТОЧНАЯ ДИСПЕРСИЯ .0676442

НЕСМЕЩЕННАЯ ОЦЕНКА ОСТАТОЧНОЙ ДИСПЕРСИИ  
.1352854

СРЕДНЯЯ ОСТАТОЧНАЯ ДИСПЕРСИЯ НА КОНТРОЛЬНОЙ  
ВЫБОРКЕ .0000000

КОЭФФИЦИЕНТ КОРРЕЛЯЦИИ МОДЕЛИ (ккм=98%) .9795542

ВКЛАД ВКЛЮЧЕННЫХ ПАРАМЕТРОВ,РАССЧИТАННЫЙ  
МЕТОДОМ ИСКЛЮЧЕНИЯ

4(Fibi) 49.5 5 (Luka) 50.5

ВКЛАД ВКЛЮЧЕННЫХ ПАРАМЕТРОВ,РАССЧИТАННЫЙ  
МЕТОДОМ ВКЛЮЧЕНИЯ

4(Fibi) 50.0 5 (Luka) 50.0

Найдена функциональная квадратичная зависимость вида:  $Y_{\text{расч.}} = Y(\text{Fibi}, \text{Luka})$  с  $\text{ккм}=98\%$  для коэффициентов Чебышева квазиатомов германия.

4.РАСЧЕТ ПО ПРОГРАММЕ <"ChemLehr" для элемента Pb>

ЧИСЛО РЕАЛИЗАЦИЙ 10  
ЧИСЛО ПАРАМЕТРОВ 5

РЕЗУЛЬТИРУЮЩИЙ ПАРАМЕТР 2( коэффициенты Чебышева для Pb)

ВАРИАНТ ПЕЧАТИ 2

КОЭФФИЦИЕНТ ЗНАЧИМОСТИ 1.00

КОЭФФИЦИЕНТ УДАЛЕНИЯ РЕАЛИЗАЦИЙ 3.0

СТРОИТСЯ КВАДРАТИЧНАЯ МОДЕЛЬ

LX(J)

0 0 0 1 1

NOV(I)

1 1 1 1 1 1 1 1 1 1

LP(J)

1 0 0 0 0

КОЛИЧЕСТВО ПАРАМЕТРОВ,ВКЛЮЧЕННЫХ В МОДЕЛЬ 4

ПАРАМЕТР 4(Fibi) СТЕПЕНЬ 1 КОЭФФИЦИЕНТ -.30211

ПАРАМЕТР 5 (Luka) СТЕПЕНЬ 1 КОЭФФИЦИЕНТ .61410

ПАРАМЕТР 5 (Luka) СТЕПЕНЬ 2 КОЭФФИЦИЕНТ -.06622

ПАРАМЕТР 4(Fibi) СТЕПЕНЬ 2 КОЭФФИЦИЕНТ .01828

СВОБОДНЫЙ ЧЛЕН УРАВНЕНИЯ -.3484647

СРЕДНЯЯ ОСТАТОЧНАЯ ДИСПЕРСИЯ НА КОНТРОЛЬНОЙ  
ВЫБОРКЕ .0000000

КОЭФФИЦИЕНТ КОРРЕЛЯЦИИ МОДЕЛИ( $\text{ккм}=97,9\%$ ) .9792352

ВКЛАД ВКЛЮЧЕННЫХ ПАРАМЕТРОВ,РАССЧИТАННЫЙ  
МЕТОДОМ ИСКЛЮЧЕНИЯ

4(Fibi) 49.5 5 (Luka) 50.5

ВКЛАД ВКЛЮЧЕННЫХ ПАРАМЕТРОВ,РАССЧИТАННЫЙ  
МЕТОДОМ ВКЛЮЧЕНИЯ

4(Fibi) 50.0 5 (Luka) 50.0

Найдена функциональная квадратичная зависимость вида:  $Y_{\text{расч.}} = Y(\text{Fibi}, \text{Luka})$  с  $\text{ккм}=97,9\%$  для коэффициентов Чебышева квазиатомов свинца.

5. РАСЧЕТ ПО ПРОГРАММЕ <"ChemLehr" для элемента As>

ЧИСЛО РЕАЛИЗАЦИЙ 10  
ЧИСЛО ПАРАМЕТРОВ 5  
РЕЗУЛЬТИРУЮЩИЙ ПАРАМЕТР 2 (коэффициенты Чебышева для As)  
ВАРИАНТ ПЕЧАТИ 2  
КОЭФФИЦИЕНТ ЗНАЧИМОСТИ 1.00  
КОЭФФИЦИЕНТ УДАЛЕНИЯ РЕАЛИЗАЦИЙ 3.0  
СТРОИТСЯ КВАДРАТИЧНАЯ МОДЕЛЬ  
LX(J)  
0 0 0 1 1  
NOB(I)  
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1  
LP(J)  
1 0 0 0 0  
КОЛИЧЕСТВО ПАРАМЕТРОВ, ВКЛЮЧЕННЫХ В МОДЕЛЬ 4  
ПАРАМЕТР 4(Fibi) СТЕПЕНЬ 1 КОЭФФИЦИЕНТ -.38507  
ПАРАМЕТР 5 (Luka) СТЕПЕНЬ 1 КОЭФФИЦИЕНТ .77261  
ПАРАМЕТР 5 (Luka) СТЕПЕНЬ 2 КОЭФФИЦИЕНТ -.07182  
ПАРАМЕТР 4(Fibi) СТЕПЕНЬ 2 КОЭФФИЦИЕНТ .01984  
СВОБОДНЫЙ ЧЛЕН УРАВНЕНИЯ -.3761412  
СРЕДНЯЯ ОСТАТОЧНАЯ ДИСПЕРСИЯ НА КОНТРОЛЬНОЙ  
ВЫБОРКЕ .0000000  
КОЭФФИЦИЕНТ КОРРЕЛЯЦИИ МОДЕЛИ (ккм=97.9%) .9788440  
ВКЛАД ВКЛЮЧЕННЫХ ПАРАМЕТРОВ, РАССЧИТАННЫЙ  
МЕТОДОМ ИСКЛЮЧЕНИЯ  
4(Fibi) 49.5 5 (Luka) 50.5  
ВКЛАД ВКЛЮЧЕННЫХ ПАРАМЕТРОВ, РАССЧИТАННЫЙ  
МЕТОДОМ ВКЛЮЧЕНИЯ  
4(Fibi) 50.0 5 (Luka) 50.0  
Найдена функциональная квадратичная зависимость вида:  $Y_{\text{расч.}} = Y(\text{Fibi}, \text{Luka})$  с ккм=97,9% для коэффициентов Чебышева квазиатомов мышьяка.

6. РАСЧЕТ ПО ПРОГРАММЕ <"ChemLehr" для элемента Sb>

ЧИСЛО РЕАЛИЗАЦИЙ 10  
ЧИСЛО ПАРАМЕТРОВ 5  
РЕЗУЛЬТИРУЮЩИЙ ПАРАМЕТР 2 (коэффициенты Чебышева для Sb)  
ВАРИАНТ ПЕЧАТИ 2  
КОЭФФИЦИЕНТ ЗНАЧИМОСТИ 1.00  
КОЭФФИЦИЕНТ УДАЛЕНИЯ РЕАЛИЗАЦИЙ 3.0

СТРОИТСЯ КВАДРАТИЧНАЯ МОДЕЛЬ  
LX(J)  
0 0 0 1 1  
NOB(I)  
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1  
LP(J)  
1 0 0 0 0  
КОЛИЧЕСТВО ПАРАМЕТРОВ,ВКЛЮЧЕННЫХ В МОДЕЛЬ 4  
ПАРАМЕТР 4(Fibi) СТЕПЕНЬ 1 КОЭФФИЦИЕНТ -.25659  
ПАРАМЕТР 5 (Luka) СТЕПЕНЬ 1 КОЭФФИЦИЕНТ .50463  
ПАРАМЕТР 5 (Luka) СТЕПЕНЬ 2 КОЭФФИЦИЕНТ -.03660  
ПАРАМЕТР 4(Fibi) СТЕПЕНЬ 2 КОЭФФИЦИЕНТ .01012  
СВОБОДНЫЙ ЧЛЕН УРАВНЕНИЯ -.1719677  
СРЕДНИЙ МОДУЛЬ ОШИБКИ .0897297  
СРЕДНЯЯ ОСТАТОЧНАЯ ДИСПЕРСИЯ НА КОНТРОЛЬНОЙ  
ВЫБОРКЕ .0000000  
КОЭФФИЦИЕНТ КОРРЕЛЯЦИИ МОДЕЛИ (ккм=98,1%) .9805214  
ВКЛАД ВКЛЮЧЕННЫХ ПАРАМЕТРОВ,РАССЧИТАННЫЙ  
МЕТОДОМ ИСКЛЮЧЕНИЯ  
4(Fibi) 49.6 5 (Luka) 50.4  
ВКЛАД ВКЛЮЧЕННЫХ ПАРАМЕТРОВ,РАССЧИТАННЫЙ  
МЕТОДОМ ВКЛЮЧЕНИЯ  
4(Fibi) 50.0 5 (Luka) 50.0  
Найдена функциональная квадратичная зависимость вида:  $Y_{расч.} = Y(Fibi, Luka)$  с ккм=98,1% для коэффициентов Чебышева квазиатомов сурьмы  
7.РАСЧЕТ ПО ПРОГРАММЕ <"ChemLehr" для элемента Bi>

ЧИСЛО РЕАЛИЗАЦИЙ 10  
ЧИСЛО ПАРАМЕТРОВ 5  
РЕЗУЛЬТИРУЮЩИЙ ПАРАМЕТР 2(коэффициенты Чебышева для Bi)  
ВАРИАНТ ПЕЧАТИ 2  
КОЭФФИЦИЕНТ ЗНАЧИМОСТИ 1.00  
КОЭФФИЦИЕНТ УДАЛЕНИЯ РЕАЛИЗАЦИЙ 3.0  
СТРОИТСЯ КВАДРАТИЧНАЯ МОДЕЛЬ  
LX(J)  
0 0 0 1 1  
NOB(I)  
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1  
LP(J)  
1 0 0 0 0

КОЛИЧЕСТВО ПАРАМЕТРОВ,ВКЛЮЧЕННЫХ В МОДЕЛЬ 3  
 ПАРАМЕТР 4(Fibi) СТЕПЕНЬ 1 КОЭФФИЦИЕНТ -.11160  
 ПАРАМЕТР 5 (Luka) СТЕПЕНЬ 1 КОЭФФИЦИЕНТ .26172  
 ПАРАМЕТР 5 (Luka) СТЕПЕНЬ 2 КОЭФФИЦИЕНТ -.00072  
 СВОБОДНЫЙ ЧЛЕН УРАВНЕНИЯ -.4438125  
 СРЕДНЯЯ ОСТАТОЧНАЯ ДИСПЕРСИЯ НА КОНТРОЛЬНОЙ  
 ВЫБОРКЕ .0000000  
 КОЭФФИЦИЕНТ КОРРЕЛЯЦИИ МОДЕЛИ (ккм=97,4%) .9737507  
 ВКЛАД ВКЛЮЧЕННЫХ ПАРАМЕТРОВ,РАССЧИТАННЫЙ  
 МЕТОДОМ ИСКЛЮЧЕНИЯ  
 4(Fibi)36.9 5 (Luka) 63.1  
 ВКЛАД ВКЛЮЧЕННЫХ ПАРАМЕТРОВ,РАССЧИТАННЫЙ  
 МЕТОДОМ ВКЛЮЧЕНИЯ  
 4(Fibi) 36.8 5 (Luka) 63.2  
 Найдена функциональная квадратичная зависимость вида:  $Y_{расч.} = Y(Fibi, Luka)$  с ккм=97,4% для коэффициентов Чебышева квазиатомов висмута.

8.РАСЧЕТ ПО ПРОГРАММЕ <"ChemLehr" для элемента S>

ЧИСЛО РЕАЛИЗАЦИЙ 10  
 ЧИСЛО ПАРАМЕТРОВ 5  
 РЕЗУЛЬТИРУЮЩИЙ ПАРАМЕТР 2(коэффициенты Чебышева для S)  
 ВАРИАНТ ПЕЧАТИ 2  
 КОЭФФИЦИЕНТ ЗНАЧИМОСТИ 1.00  
 КОЭФФИЦИЕНТ УДАЛЕНИЯ РЕАЛИЗАЦИЙ 3.0  
 СТРОИТСЯ КВАДРАТИЧНАЯ МОДЕЛЬ  
 LX(J)  
 0 0 0 1 1  
 NOV(I)  
 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1  
 LP(J)  
 1 0 0 0 0  
 КОЛИЧЕСТВО ПАРАМЕТРОВ,ВКЛЮЧЕННЫХ В МОДЕЛЬ 4  
 ПАРАМЕТР 4(Fibi) СТЕПЕНЬ 1 КОЭФФИЦИЕНТ -.26569  
 ПАРАМЕТР 5 (Luka) СТЕПЕНЬ 1 КОЭФФИЦИЕНТ .51405  
 ПАРАМЕТР 5 (Luka) СТЕПЕНЬ 2 КОЭФФИЦИЕНТ -.02771  
 ПАРАМЕТР 4(Fibi) СТЕПЕНЬ 2 КОЭФФИЦИЕНТ .00768  
 СВОБОДНЫЙ ЧЛЕН УРАВНЕНИЯ -.1132167

СРЕДНЯЯ ОСТАТОЧНАЯ ДИСПЕРСИЯ НА КОНТРОЛЬНОЙ  
ВЫБОРКЕ .0000000

КОЭФФИЦИЕНТ КОРРЕЛЯЦИИ МОДЕЛИ(ккм=(98,1%) .9805153  
ВКЛАД ВКЛЮЧЕННЫХ ПАРАМЕТРОВ, РАССЧИТАННЫЙ  
МЕТОДОМ ИСКЛЮЧЕНИЯ

4(Fibi) 49.7 5 (Luka) 50.3

ВКЛАД ВКЛЮЧЕННЫХ ПАРАМЕТРОВ, РАССЧИТАННЫЙ  
МЕТОДОМ ВКЛЮЧЕНИЯ

4(Fibi) 50.0 5 (Luka) 50.0

Найдена функциональная квадратичная зависимость вида:  $Y_{\text{расч.}} = Y(\text{Fibi}, \text{Luka})$  с ккм=98,1% для коэффициентов Чебышева квазиатомов серы.

### 9.РАСЧЕТ ПО ПРОГРАММЕ <"ChemLehr" для элемента Se>

ЧИСЛО РЕАЛИЗАЦИЙ 10  
ЧИСЛО ПАРАМЕТРОВ 5  
РЕЗУЛЬТИРУЮЩИЙ ПАРАМЕТР 2(коэффициенты Чебышева для Se)  
ВАРИАНТ ПЕЧАТИ 2  
КОЭФФИЦИЕНТ ЗНАЧИМОСТИ 1.00  
КОЭФФИЦИЕНТ УДАЛЕНИЯ РЕАЛИЗАЦИЙ 3.0  
СТРОИТСЯ КВАДРАТИЧНАЯ МОДЕЛЬ  
LX(J)  
0 0 0 1 1  
NOV(I)  
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1  
LP(J)  
1 0 0 0 0  
КОЛИЧЕСТВО ПАРАМЕТРОВ,ВКЛЮЧЕННЫХ В МОДЕЛЬ 4  
ПАРАМЕТР 4(Fibi) СТЕПЕНЬ 1 КОЭФФИЦИЕНТ -.39526  
ПАРАМЕТР 5 (Luka) СТЕПЕНЬ 1 КОЭФФИЦИЕНТ .78063  
ПАРАМЕТР 5 (Luka) СТЕПЕНЬ 2 КОЭФФИЦИЕНТ -.05682  
ПАРАМЕТР 4(Fibi) СТЕПЕНЬ 2 КОЭФФИЦИЕНТ .01571  
СВОБОДНЫЙ ЧЛЕН УРАВНЕНИЯ -.3137969  
СРЕДНЯЯ ОСТАТОЧНАЯ ДИСПЕРСИЯ НА КОНТРОЛЬНОЙ  
ВЫБОРКЕ .0000000  
КОЭФФИЦИЕНТ КОРРЕЛЯЦИИ МОДЕЛИ(ккм=97,4%) .9744358

ВКЛАД ВКЛЮЧЕННЫХ ПАРАМЕТРОВ,РАССЧИТАННЫЙ  
МЕТОДОМ ИСКЛЮЧЕНИЯ

4(Fibi) 49.6 5 (Luka) 50.4  
ВКЛАД ВКЛЮЧЕННЫХ ПАРАМЕТРОВ,РАССЧИТАННЫЙ  
МЕТОДОМ ВКЛЮЧЕНИЯ

4(Fibi) 50.0 5 (Luka) 50.0

Найдена функциональная квадратичная зависимость вида:

$Y_{\text{расч.}} = Y(\text{Fibi}, \text{Luka})$  с ккм=97,4% для коэффициентов Чебышева квази-  
атомов селена.

10.РАСЧЕТ ПО ПРОГРАММЕ <"ChemLehr" для элемента Te>

ЧИСЛО РЕАЛИЗАЦИЙ 10  
ЧИСЛО ПАРАМЕТРОВ 5  
РЕЗУЛЬТИРУЮЩИЙ ПАРАМЕТР 2(коэффициенты Чебышева для Te)  
ВАРИАНТ ПЕЧАТИ 2  
КОЭФФИЦИЕНТ ЗНАЧИМОСТИ 1.00  
КОЭФФИЦИЕНТ УДАЛЕНИЯ РЕАЛИЗАЦИЙ 3.0  
СТРОИТСЯ КВАДРАТИЧНАЯ МОДЕЛЬ  
LX(J)  
0 0 0 1 1  
NOV(I)  
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1  
LP(J)  
1 0 0 0 0  
КОЛИЧЕСТВО ПАРАМЕТРОВ,ВКЛЮЧЕННЫХ В МОДЕЛЬ 3  
ПАРАМЕТР 4(Fibi) СТЕПЕНЬ 1 КОЭФФИЦИЕНТ -.05550  
ПАРАМЕТР 5 (Luka)СТЕПЕНЬ 1 КОЭФФИЦИЕНТ .16666  
ПАРАМЕТР 5 (Luka) СТЕПЕНЬ 2 КОЭФФИЦИЕНТ -.00088  
СВОБОДНЫЙ ЧЛЕН УРАВНЕНИЯ -.4980787  
СРЕДНЯЯ ОСТАТОЧНАЯ ДИСПЕРСИЯ НА КОНТРОЛЬНОЙ  
ВЫБОРКЕ .0000000  
КОЭФФИЦИЕНТ КОРРЕЛЯЦИИ МОДЕЛИ(ккм=97,7%) .9771585  
ВКЛАД ВКЛЮЧЕННЫХ ПАРАМЕТРОВ,РАССЧИТАННЫЙ  
МЕТОДОМ ИСКЛЮЧЕНИЯ  
4(Fibi) 22.1 5 (Luka) 77.9  
ВКЛАД ВКЛЮЧЕННЫХ ПАРАМЕТРОВ,РАССЧИТАННЫЙ  
МЕТОДОМ ВКЛЮЧЕНИЯ  
4(Fibi) 45.1 5 (Luka) 54.9

Найдена функциональная квадратичная зависимость вида:

$Y_{\text{расч.}} = Y(\text{Fibi, Luka})$  с ккм=97,7% для коэффициентов Чебышева квази-атомов селена. Проведенный анализ показывает, что коэффициенты Чебышева в полиномах Чебышева, описывающие квазиатомное строение элементов Периодической таблицы Д.И.Менделеева в модели КваМВ, могут быть интерпретированы числовыми последовательностями Фибоначчи и Люка в форме квадратичных функциональных зависимостей с коэффициентом корреляции в модели ChemLehr 97-99% отн.ошибки.

Таблица 3

C	Si	Ge	Pb	As	Sb	Bi	S	Se	Te
4.36	1.63	-4.35	-4.80	-4.90	-2.04	-5.44	-1.10	-3.54	-6.53
4.15	1.55	-4.19	-4.62	-4.72	-1.97	-5.21	-1.07	-3.41	-6.27

В таблице 3 представлены табличные значения энергии Ферми (эВ), полученные в рамках модели КваМВ, а нижний ряд чисел состоит из расчетных данных по программе ChemLehr с использованием числовых рядов Фибоначчи и Люка. Относительная ошибка в расчетах между этими методами в пределах 5%отн. Отношение каждого последующего члена ряда, например, Фибоначчи к предыдущему называется “золотым сечением”. В данном случае полученные результаты с использованием методических приёмов метахимии методом операций с числами и символами в рамках рефлексии синергизма подтверждаются, по сути дела, феноменологическими расчетами, приводящими к утверждению генотипического характера описания свойств элементов периодической таблицы как парадигмы метахимии “золотого сечения”. Именно этот “феномен”, скорее всего, лежит в “принципе очевидности и феноменологических редукций, приводящих к априорным понятиям в сознании», создавая в духе Гуссерля основные понятия науки. На самом же деле «ключ и замок», «человек и машина природы» действуют по одному и тому же «генотипическому алгоритму». Вот почему числовые полиномы Чебышева могут быть описаны и чисто математическими последовательностями Фибоначчи и Люка, как это было показано Wengpeng Zhang в статье: “On Chebyshev Polynomials and Fibonacci Numbers” в одном из номеров “The Fibonacci Quarterly” за 2001год<sup>14</sup>, смотри также работу Т.Коши<sup>15</sup>.

<sup>14</sup> .Zhang Wengpeng. The Fibonacci Quarterly, 1997.v35, № 3, p.229.

<sup>15</sup> .Koshy T. Fibonacci and Lucas Numbers with Applications. NY.: Wiley-Interscience, 2001.