

Раздел Химические науки

47 (Февраль) 2020

УДК 541

КВАНТОВАЯ ГИДРОДИНАМИКА В ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ХИМИИ

Худайбергенова Гозел Янываевна

Худайшукурова Юлдуз Рашитовна

студенты

Калмыцкого государственного университета имени Б.Б.Городовикова, г. Элиста

Аннотация: Эта статья исследует геометрические подходы к квантовой гидродинамике с целью разработки приложений в теоретической квантовой химии. На основе геометрической структуры карты импульса квантовой гидродинамики и связанных с ней уравнений Ли-Пуассона и Эйлера-Пуанкаре представлены альтернативные геометрические подходы к классическому пределу в квантовой гидродинамике.

Ключевые слова: Химия, химическая физика, квантовая физика, квантовая гидродинамика.

Во-первых, вводится новый регуляризованный лагранжиан, допускающий сингулярные решения, называемые "Бомионами", для которых связанные уравнения траектории конечномерны и зависят от сглаженного квантового потенциала. Во-вторых, рассматривается классический предел для квантовых смешанных состояний. Применяя холодное жидкостное замыкание к матрице плотности, квантовый потенциальный член полностью исключается из гамильтониана. Подход карты импульса к квантовой гидродинамике затем применяется к ядерной динамике в химической модели, известной как точная факторизация. Представлен вариационный вывод связанной электронно-ядерной динамики, включающий структуру Эйлера-Пуанкаре для движения ядра. Уравнения квантовой гидродинамики для ядер обладают теоремой циркуляции Кельвина-Гельмгольца, которая возвращает новое уравнение для эволюции электронной фазы Берри. Затем геометрическая обработка расширяется и включает унитарную электронную эволюцию в рамках ядерного потока, причем результирующая динамика несет как структуры Эйлера-Пуанкаре, так и структуры Ли-Пуассона. Затем получается новая смешанная квантово-классическая модель, применяющая как регуляризацию квантовой гидродинамики, так и замыкание холодной жидкости к обобщенному факторизационному анзацу на уровне матрицы молекулярной плотности. И тогда строится новая альтернативная геометрическая формулировка квантовой гидродинамики. Введение связи в качестве новой фундаментальной переменной обеспечивает новый метод включения голономии в квантовой гидродинамике, что

следует из его постоянной ненулевой кривизны. Связанный поток жидкости больше не ограничен тем, чтобы быть ирротационным, таким образом, обладая нетривиальной теоремой циркуляции и допускающей вихревые решения нити накала. Этот подход естественным образом расширяется и включает в себя связь динамики вихревых нитей с уравнением Шредингера. Эта формулировка квантовой гидродинамике затем применяется к молекулярной динамике Борна-Оппенгеймера, предлагая новое понимание роли фаз Берри в адиабатических явлениях. Наконец, неабелевы связи затем рассматриваются в квантовой механике. Динамика вектора спина в уравнении Паули позволяет ввести связь $SO(3)$, в то время как более общая связь $U(N)$ может быть введена из унитарной эволюции квантовой системы. Это используется для получения новой картины связи Берри и квантово-геометрического тензора, а также для получения более общих систем уравнений, которые имеют явную зависимость от кривизны связи. Затем рассматриваются соответствующие приложения к квантовой химии. Преимущества применения геометрических подходов к механическим системам разнообразны и многочисленны. Одна из самых мощных особенностей геометрической механики заключается в том, что она обеспечивает единую структуру, в рамках которой могут быть описаны все виды физических систем. Кроме того, благодаря своему абстрактному математическому формализму, часто кажущаяся несвязанной физика может быть показана как обладающая фундаментально эквивалентными геометрическими структурами, часто позволяющими предыдущим знаниям давать новые идеи в других областях. В этой диссертации мы применяем инструменты геометрической механики для изучения гидродинамической картины квантовой механики для разработки приложений в теоретической квантовой химии. Основной проблемой квантовой химии является вычислительная сложность решения уравнений, управляющих молекулярными процессами с участием большого числа составляющих частиц, когда они записываются в терминах их истинного квантово-механического описания. В результате большая часть усилий в области квантовой химии сосредоточена на создании приближенных моделей для описания таких систем. Стандартный подход состоит в том, чтобы разделить систему на две части, рассматривая одну часть в терминах классической механики, сохраняя решающее квантовое описание в другой. Удобным первым шагом для выполнения этого классического ограничения в одном секторе является использование гидродинамического описания квантовой механики. В этом тезисе геометрический подход используется для изучения широкого класса моделей в квантовой химии, основанных на так называемой факторизации Борна-Оппенгеймера и ее недавнем расширении-точной факторизации. В частности, исследуется геометрия этих систем и для последних показано, что они имеют ту же структуру, что и предыдущие геометрические подходы при исследовании жидкокристаллических течений. Кроме того, новые методы вызова классического описания используются для построения совершенно новой модели, которая

расширяет используемый в настоящее время подход точной факторизации. Наконец, вдохновленные аналогией с потоками жидких кристаллов, мы переносим некоторые из существующих геометрических инструментов в этой области в квантовую химию. Результатом является новая альтернативная геометрическая формулировка для квантовой гидродинамики, а также новый геометрический объект, измеряющий взаимодействие между электронами и ядрами в квантовой химии. В обоих случаях это приводит к интересным новым перспективам, которые, как надеются, приведут к физически релевантным приложениям.

Список литературы:

1. Ахметов Н.С. Общая и неорганическая химия. – М.: Высшая школа, 2004.
2. Демонстрационные опыты по общей и неорганической химии. / Под ред. Б.Д. Степина. – М.: Владос, 2003.
3. Кузьменко Н.Е., Еремин В.В., Попков В.А. Химия: Для школьников старших классов и поступающих в вузы. – М.: ОНИКС 21 век: Мир и образование, 2002.
4. Неорганическая химия: в 3 т. / Под ред. Ю.Д. Третьякова. Т. 2: Химия непереходных элементов. – М.: Академия, 2004.
5. Рабинович В.А., Хавин З.Я. Краткий химический справочник. – Л.: Химия, 1977.

ISSN 2541-9250
НАУКА ЧЕРЕЗ ПРИЗМУ ВРЕМЕНИ
Международный научный журнал
Ежемесячное научное издание
№2 (47) 2021

ISSN 2541-9250



9 772541 925005 >

Библиографическое описание статьи:

Худайбергенова Гозел Яныбаевна. Кватовая гидродинамика в теоретической химии // Наука через призму времени. – 2021. – №2 (47). – с. 10-12



<http://www.naupri.ru/journal/2836>

© Худайбергенова Гозел Яныбаевна, 2021

© Редакция научного журнала «Наука через призму времени», 2021