

ХАОТИЧЕСКИЕ КОЛЕБАНИЯ В ПРОСТЕЙШЕЙ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ**Н.И. Кольцов**

Николай Иванович Кольцов

Кафедра физической химии и высокомолекулярных соединений, Чувашский государственный университет им. И.Н. Ульянова, Московский пр., 15, Чебоксары, Российская Федерация, 428015
E-mail: koltsovni@mail.ru

Известно, что хаотические колебания для химических реакций могут быть описаны нестационарными кинетическими моделями, состоящими из трёх обыкновенных дифференциальных уравнений. Росслером были установлены первые примеры химических реакций, в том числе двухмаршрутная пятистадийная реакция Вилламовски-Росслера, с тремя промежуточными веществами, содержащая три автокаталитические по промежуточным веществам стадии, динамическая модель которой описывает хаотические колебания. В данной статье приведена простейшая одномаршрутная четырехстадийная реакция $A+E=D$, включающая две автокаталитические и одну линейную по промежуточным веществам стадию, нестационарная кинетическая модель которой описывает хаотические колебания. Нестационарная кинетическая модель в предположении квазистационарности по основным веществам в рамках закона действующих масс представляет собой систему трех обыкновенных дифференциальных уравнений. Наличие хаоса подтверждено численными расчетами кинетической модели и экспонент Ляпунова. Экспоненты Ляпунова удовлетворяют условию $L1+L2+L3<0$, что доказывает существование хаотических колебаний.

Ключевые слова: простая химическая реакция, хаотические колебания

CHAOTIC OSCILLATIONS IN SIMPLEST CHEMICAL REACTION**N.I. Kol'tsov**

Nikolay I. Kol'tsov

Department of Physical Chemistry and Macromolecular Compounds, Chuvash State University named after I.N. Ulyanov, Moskovskiy ave., 15, Cheboksary, 428015, Russia
E-mail: koltsovni@mail.ru

It is known that chaotic oscillations for chemical reactions can be described by non-stationary kinetic models consisting of three ordinary differential equations. Rossler established the first examples of chemical reactions, including the two-route five-stage reaction of the Villamovski-Rossler, with three intermediate substances, containing three autocatalytic on intermediates stages, the dynamic model of which describes chaotic oscillations. In given article presents a simple one-

route four-stages reaction $A+E=D$ involving two autocatalytic and one linear on intermediate stage, the non-stationary kinetic model of which describes chaotic oscillations. The non-stationary kinetic model under the assumption of quasistationarity with respect to the main substances within the framework of the law of acting masses is a system of three ordinary differential equations. The presence of chaos is confirmed by numerical calculations of the kinetic model and Lyapunov exponents. The Lyapunov exponents satisfy the condition $L_1+L_2+L_3<0$, which proves the existence of chaotic oscillations.

Key words: simple chemical reaction, chaotic oscillations

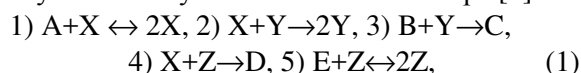
Для цитирования:

Кольцов Н.И. Хаотические колебания в простейшей химической реакции. *Изв. вузов. Химия и хим. технология.* 2018. Т. 61. Вып. 4-5. С. 133–135

For citation:

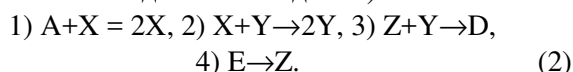
Koltsov N.I. Chaotic oscillations in simplest chemical reaction. *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.* 2018. V. 61. N 4-5. P. 133–135

Известно, что первые примеры химических реакций, динамические модели которых в рамках закона действующих масс (ЗДМ) описывают хаос, были установлены Росслером [1]. Простейшей из них является реакция, протекающая по пятистадийному механизму Вилламовски-Росслера [2]:



где A, B, C, D, E – основные вещества; X, Y, Z – промежуточные вещества. Механизм (1) включает 2 маршрута $A+B = C$ (стадии 1-3), $A+E = D$ (стадии 1,4,5) и содержит три автокаталитических стадии по промежуточным веществам (стадии 1, 2 и 5).

Нами найдена более простая четырехстадийная реакция, содержащая две автокаталитические и одну линейную по промежуточным веществам стадию. Механизм этой реакции получен путем замены в схеме (1) стадий 3 и 4 на стадию 3) $Z+Y \leftrightarrow D$ и стадии 5 на стадию 4) $E \rightarrow Z$:

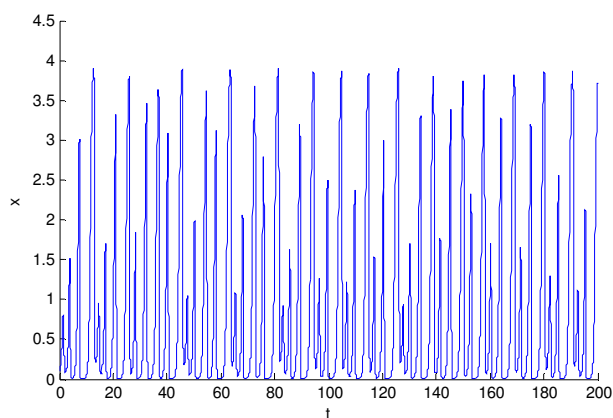


Механизм (2) образует один маршрут $A+E=D$, а его нестационарная кинетическая модель в предположении квазистационарности по основным веществам в рамках ЗДМ представляет систему трех обыкновенных дифференциальных уравнений

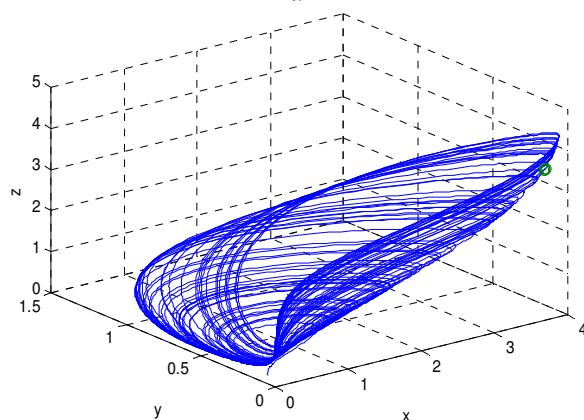
$$x' = w_1x - w_{-1}x^2 - w_2xy, \quad y' = w_2xy - w_3yz, \\ z' = -w_3yz + w_4, \quad (3)$$

где w_i, w_{-i} – частоты стадий в прямом и обратном направлениях $i = 1,2,3,4$, включающие константы скоростей стадий и концентрации основных веществ A, E и D; x, y и z – безразмерные концентрации промежуточных веществ X, Y и Z. Система (3) описывает хаотические колебания (рисунок).

При приведенных на рисунке величинах частот стадий и начальных условиях для модели (3)



а



б

Рис. Хаотические колебания в реакции, протекающей по схеме (2) и описываемой моделью (3) при $w_1=3, w_2=18, w_3=10, w_4=1, w_{-1}=0,75$ и начальных условиях $x_0=y_0=z_0=0,1$:

а – зависимость $x(t)$; б – фазовый 3D-портрет

Fig. Chaotic oscillations in the reaction proceeding according to the scheme (2) and described by the model (3) with $w_1=3, w_2=18, w_3=10, w_4=1, w_{-1}=0,75$ and initial conditions $x_0=y_0=z_0=0,1$:

а – dependence $x(t)$; б – 3D phase portrait

при $t = 500$ показатели Ляпунова принимают значения: $L_1 \approx 0,138; L_2 \approx -0,003 \rightarrow 0; L_3 \approx -2,096$. Для

трехмерных автономных систем сигнатура (+, 0, -) при $L_1+L_2+L_3<0$ соответствует странному аттрактору, что доказывает существование хаотических колебаний [3].

Таким образом, установлена простейшая одномолекулярная четырехстадийная химическая реакция, протекающая при определенных значениях частот стадий в режиме хаотических колебаний.

Автор выражает благодарность В.Х. Федотову за полезные обсуждения результатов работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Rossler O.E.** Chaotic behavior in simple reaction system. *Z. Naturforsch.* 1976. V. A(31). P. 250-264.
2. **Willamowski K.D., Rossler O.E.** Irregular oscillations in a realistic abstract quadratic mass action system. *Z. Naturforsch.* 1980. V. 35a. P. 317-318.
3. **Кузнецов С.П.** Динамический хаос. М.: Физматлит. 2006. 356 с.

REFERENCES

1. **Rossler O.E.** Chaotic behavior in simple reaction system. *Z. Naturforsch.* 1976. V. A(31). P. 250-264.
2. **Willamowski K.D., Rossler O.E.** Irregular oscillations in a realistic abstract quadratic mass action system. *Z. Naturforsch.* 1980. V. 35a. P. 317-318.
3. **Kuznetsov S.P.** Dynamic chaos. M.: Fizmatlit. 2006. 356 p. (in Russian).

Поступила в редакцию 12.07.2017

Принята к опубликованию 05.03.2018

Received 12.07.2017

Accepted 05.03.2018