



## ОПЫТ ИЗЛОЖЕНИЯ СИНЕРГЕТИКИ В УЧЕБНИКЕ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ

А.Г. Стромберг

Автор делится опытом изложения в учебнике физической химии основных представлений синергетики и иллюстрирования их на примере автокаталитической колебательной реакции.

Феномен самоорганизации материи в химических системах проявляется главным образом в виде автоколебательных химических реакций, наиболее изученным случаем которых является реакция Белоусова – Жаботинского (БЖ) [1]. В литературе их открытие рассматривается как возникновение *новой химии* [2]. Однако традиционными учебниками физической химии эти вопросы до сих пор не освещаются. Как отмечает ученица лауреата Нобелевской премии И. Пригожина Агнесса Баблоянц, «... новая химия – это последнее достижение науки, но в настоящее время она не входит ни в один курс обучения ни в одном учебном заведении» [2]\*. При подготовке третьего издания учебника физической химии для химических специальностей вузов [4] нами предпринята попытка изложить принципы нелинейной динамики на количественном уровне и рассказать об использовании методов синергетики в химии.

Во введении к этому разделу учебника раскрываются основные идеи о способности материи к **самоорганизации** в определенных условиях, и формулируются эти **условия**: *нелинейность системы; неравновесность системы; наличие обратной связи* (для химической реакции это – наличие среди других – автокаталитической стадии); *неустойчивое стационарное состояние, далекое от состояния равновесия* (для химической реакции это – проведение ее в проточном реакторе); *стохастичность* (наличие в системе случайных процессов). Из разных областей знания приводятся примеры самоорганизации материи и более подробно дается предварительное качественное описание явлений, которые наблюдаются при протекании реакции БЖ [1].

Далее рассматриваются основные положения **двух подходов** для количественного описания явлений самоорганизации: *нелинейная термодинамика неравновесных процессов; нелинейная динамика*. Отмечается, что для выявления конкретных условий возникновения автоколебательного режима химической реакции более простым является нелинейно-динамический подход с использованием критерия устойчивости Ляпунова.

\* В изданном в 1995 году учебнике дается краткое (на двух страницах) качественное описание реакции БЖ, которая рассматривается как частный случай автокаталитической реакции в «экзотических» условиях [3].

Дается представление о **фазовом портрете**, в частности, для системы с двумя степенями свободы, к которой относится реакция БЖ. Объясняется, почему вид фазового портрета позволяет сделать заключение о типе устойчивости стационарного состояния. На примере математической модели маятника с двумя степенями свободы как механического аналога реакции БЖ показывается, что фазовый портрет идеального маятника – предельный цикл. Объясняется, почему для реального маятника с трением фазовый портрет имеет вид скручивающейся спирали, которая заканчивается особой точкой.

На простом примере математической модели двухстадийной химической реакции поясняется понятие **бифуркации** [5].

**Анализ реакции БЖ** дается в учебнике на примере «брюсселятора» – одной из её наиболее простых математических моделей, состоящей из четырех односторонних стадий (причем вторая стадия является автокаталитической) и включающей два промежуточных соединения. Название модели дана столица Бельгии – Брюссель, где находится научная школа И. Пригожина, предложившая эту модель. Предполагается, что реакция протекает при постоянных концентрациях исходных веществ и продуктов реакции, то есть в проточном реакторе (в открытой системе), благодаря чему стационарное состояние системы поддерживается далеким от равновесия.

Составляющая «брюсселятора» система из двух нелинейных дифференциальных уравнений для двух промежуточных соединений комментируется в физико-химическом плане. Поскольку численное решение уравнений достаточно сложная задача, излагаются принципы приближенного рассмотрения динамики концентраций соединений для небольшого возмущения относительно стационарного состояния. Демонстрируется, как использование критерия устойчивости Ляпунова позволяет получить фазовый портрет этого возмущения (вблизи устойчивого состояния). Обсуждаются шесть возможных типов фазовых портретов, получаемых при математическом исследовании «брюсселятора».

Излагается классический прием исследования влияния соотношения исходных концентраций  $A$  и  $B$  на динамику реакции: в координатах  $A$ ,  $B$  строится диаграмма и разбивается на четыре участка, которые соответствуют различным видам фазовых портретов, в том числе – предельному циклу.

В конце раздела рассматриваются элементы **теории фракталов** [6]. Вводится понятие дробной размерности. На примере модельной кривой Коха поясняется отличие сложных объектов с фрактальной размерностью от простых с целочисленными размерностями. Применение теории фракталов иллюстрируется качественным описанием явления «вязких пальцев», наблюдаемого при закачивании раствора (например, с токсичными отходами) в толщу Земли.

Автор выражает признательность Б.Н. Пойзнеру, «заразившему» его своим увлечением синергетикой.

## Литература

1. Колебания и бегущие волны в химических системах / Под ред. Р. Филда и М. Бургер. М.: Мир, 1988. С. 20–193.
2. *Баблюнц А.* Молекулы, динамика и жизнь. М.: Мир, 1990. С. 161, 235.
3. Физическая химия. В 2-х кн. / К.С.Краснов, Н.К. Воробьев, И.Н. Годнев и др. М.: Высшая школа, 1995. Кн. 2.. С. 269–271.
4. *Стромберг А.Г., Семченко Д.П.* Физическая химия. 2-е изд. М.: Высшая школа, 1988.
5. *Эбелинг В.* Образование структур при необратимых процессах. М.: Мир, 1979.
6. *Федер Е.* Фракталы. М.: Мир, 1991.

Томский политехнический  
университет

Поступила в редакцию 19.07.97



*Стромберг Армин Генрихович* – родился в Бреславле (1910), окончил Уральский политехнический институт (УПИ, 1930), защитил кандидатскую диссертацию (УПИ, 1939), был интернирован в Тагиллаге НКВД (1942–1943). Защитил докторскую диссертацию по электроаналитической химии (УПИ, 1951). Заведовал кафедрой физической и коллоидной химии (1956–1985) и руководил проблемной лабораторией (1962–1985) в Томском политехническом институте. Профессор–консультант той же кафедры (1985). Область научных интересов: электрохимия, электроаналитическая химия, наукометрия, методика преподавания физической химии. Автор 430 научных публикаций, соавтор вузовского учебника «Физическая химия» (1974, 1988) и двух задачников: по электрохимии (1968), по химической термодинамике (1974, 1977, 1985, 1988). Член Научного Совета по аналитической химии АН СССР – РФ (с 1950). Заслуженный химик РФ (1996), Заслуженный Соросовский профессор (1995).