

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Иркутский государственный университет

Ф. К. Шмидт

Фракталы  
в физической химии гетерогенных систем и  
процессов

В фот. библиотеку  
Иркутского государственного  
университета  
автора.



3.06.2000 г.

Иркутск 2000

Шмидт Ф.К. Фракталы в физической химии гетерогенных систем и процессов. - Иркутск: Иркутский. ун-т, 2000. - 147 с.

Рецензент – доктор химических наук, профессор Сараев В.В.

В учебном пособии изложены основные понятия и концепции фрактальной геометрии и её приложения при анализе физико-химических процессов в гетерогенных системах. Подробно изложено использование концепции фракталов для определения периметров и площадей фрактальных фигур, пористых материалов и кластеров. Специальные разделы посвящены фрактальному анализу каталитических процессов и влиянию фрактальности на кинетику процессов. Рассмотрены основные понятия мультифрактального формализма и его приложение к гетерогенным каталитическим процессам.

Учебное пособие предназначено для студентов химических факультетов, а также для аспирантов и научных сотрудников, занимающихся изучением гетерогенных процессов.

Табл. 3 Ил. 55 Библ. 110.

© Ф.К. Шмидт, 2000

© Иркутский государственный университет, 2000



«Лишь теория решает, что мы  
ухитряемся наблюдать»

А. Эйнштейн

## Введение

Развитие современной техники и технологии определяется в первую очередь уровнем использования природных и получаемых искусственно материалов. Среди материалов особое место занимают твердофазные материалы, роль которых постоянно возрастает. В связи с этим наука о материалах – материаловедение, являющаяся симбиозом физики, химии и технологий и решающая задачу получения материалов с необходимым комплексом свойств, должна развиваться опережающими темпами.

В последние годы становится все более осознанным, что методологической основой изучения и создания новых материалов с заданными свойствами являются принципы синергетики, в соответствии с которыми эффективные способы получения и управления свойствами материалов возможны только в условиях самоорганизации структур [1]. Термином «синергетика» немецкий физик Г.Хакен назвал новое научное направление, связанное с изучением закономерностей процессов, протекающих в открытых неравновесных системах. Слово «синергетика» происходит от греческого «синергос», что означает «совместно действующий». Синергетика занимается изучением процессов самоорганизации, устойчивости и трансформации структур различной природы, являющимися общими для живой и неживой природы. Общность заключается в том, что всем естественным (а по мнению некоторых ученых также социальным и историческим) процессам свойственны неравновесные переходы, отвечающие особым точкам – точкам бифуркаций, в которых свойства системы, обусловленные самоорганизацией структур, изменяются самопроизвольно и скачкообразно. Движущей силой самоорганизации диссипативных структур, в понятиях термодинамики необратимых процессов, является стремление открытых систем при нестационарных процессах к снижению производства энтропии.

Термин «диссипативные структуры» введен для описания поведения сильно неравновесных состояний И.Р. Пригожиным. Дело в том, что по мере увеличения отклонения системы от равновесия, при определенных критических значениях внешних параметров система переходит в качественно новое состояние, которое характеризуется высшим уровнем самоорганизации, а именно, возникновением динамических устойчивых про-



странственно неоднородных структур, которые и называют диссипативными структурами. На языке термодинамики необратимых процессов в области существования диссипативных структур производство (правильнее возникновение) энтропии обеспечивается не только хаотическим поведением элементов системы, но и макроскопическими процессами. Это область нелинейной термодинамики необратимых процессов.

Оказалось, что самоорганизующиеся структуры, формирующиеся в неравновесных условиях, обладают свойствами фрактальности, т.е. они могут количественно описываться, наряду с другими величинами, с помощью фрактальной (дробной) размерности. С определенной натяжкой можно сказать, что фракталы являются геометрическим образом, самоорганизующейся в сильно неравновесных условиях, системы.

Необходимо также отметить, что во второй половине двадцатого столетия началось преобразование всего естествознания, которое можно сравнить с идеями, сформулированными в начале века и приведшими к созданию и развитию квантовой механики и теории относительности. Исходным пунктом этих новых взглядов были проблемы, которые связаны с описанием и изучением неупорядоченных структур и стохастических (нерегулярных, случайных) процессов. Особенно плодотворным было введение в естествознание концепции о фракталах, которая связывается с именем американского математика Бенуа Мандельброта.

Все возрастающий интерес к фракталам физико-химиков обусловлен тем, что одним из основных объектов исследования методами физической химии являются системы в которых ключевую роль играет состояние границы раздела между фазами. В системах, где поверхности раздела между фазами сильно развиты, свойства поверхностных слоев приобретают основное значение и определяют многие своеобразные свойства системы в целом. Например, такие важные в науке и практике явления как адсорбция и гетерогенный катализ в первую очередь определяются состоянием и свойствами поверхности и образующими её атомами и ионами. В самом деле при одинаковой измеренной удельной поверхности может быть реализована различная структура частиц, что отражается на распределении и энергетике активных центров. Все дело в том, что конденсированное состояние вещества может существовать в форме плотной сплошной среды и в виде сильно разрыхленных пористых структур. В равновесных условиях твердая фаза образует тела правильной геометрической конфигурации, которые в зависимости от природы вещества имеют кристаллическую или аморфную структуру. Наоборот, в сложных, сильно неравновесных условиях конденсированные фазы образуют, как правило, тела неправильной, пористой структуры.

Интуитивно геометрические модели различных естественных и искусственных объектов традиционно строились на сравнительно простых



геометрических фигурах: прямых, окружностях, сферах, многогранниках. Этот набор фигур вполне достаточен для описания структуры плотных кристаллических и аморфных тел. Однако при описании рыхлых пористых структур такой подход явно недостаточен. Для описания таких объектов необходимо использование новых геометрических представлений, которые были введены в естествознание Б. Мандельбротом, опубликовавшим в 1982 г. первую монографию «The Fractal Geometry of Nature», San-Francisco [2]. Именно Мандельброт ввел термин «фрактал», хотя подобные объекты были известны довольно давно и изучались математиками еще с конца 19 века [3]. Слово фрактал происходит от латинского «fractus» - ломанный, разбитый или от английского «fraction» - доля. Сегодня невозможно дать корректное определение фрактала. Причина заключается в том, что понятие «фрактал» основано больше на интуиции и должно вводиться аксиоматически – как, например, понятия о математической точке или прямой. По мнению Д.Д. Вертегела [3] «определение фрактала, даваемое в литературе, представляют собой попытки описать словами некий смутный образ, хранящийся в сознании авторов, и вполне естественно, что каждый человек описывает этот образ с помощью наиболее близких ему представлений»

И все-таки приведем некоторые определения фракталов. По Мандельброту, фракталом называется сложная структура, состоящая из частей, которые подобны структуре в целом, т.е. фрактал есть масштабно инвариантная структура. Фракталы чрезвычайно широко распространены в нашем мире: это очертания гор, извилины берегов озер и морей, контуры снежинок и хлопьев сажи, контуры деревьев и кустарников, очертания облаков, пламя костра, сосудистая система человека и есть даже мнение, что железнодорожная сеть и схема линий парижского метро имеют фрактальную структуру. В монографии Е.Федера первой и пока единственной книге на русском языке, освещающей наиболее подробно основные разделы науки о фракталах, указывается, что фракталами объявлены все от молекулярной поверхности белков до взлетных полос аэродромов [4].

В книге Мандельброта [2] содержится огромное количество изображений различных фрактальных множеств и приведены доказательства существования фрактальных объектов в природе. Напомним, что под множеством понимают объединение в единое целое определенных вполне различаемых предметов (объектов), которые при этом называются элементами образуемого им множества.

Фракталы – множества с крайне нерегулярной разветвленной или изрезанной структурой. Фрактальное множество есть объединение в единое целое ряда масштабно-инвариантных подмножеств. Мандельброт предложил еще одно пробное определение фрактала: фракталом называется самоподобное множество (при изменении масштаба), размерность Хаусдорфа-Безиковича (дробная размерность) которого строго больше его топологи-