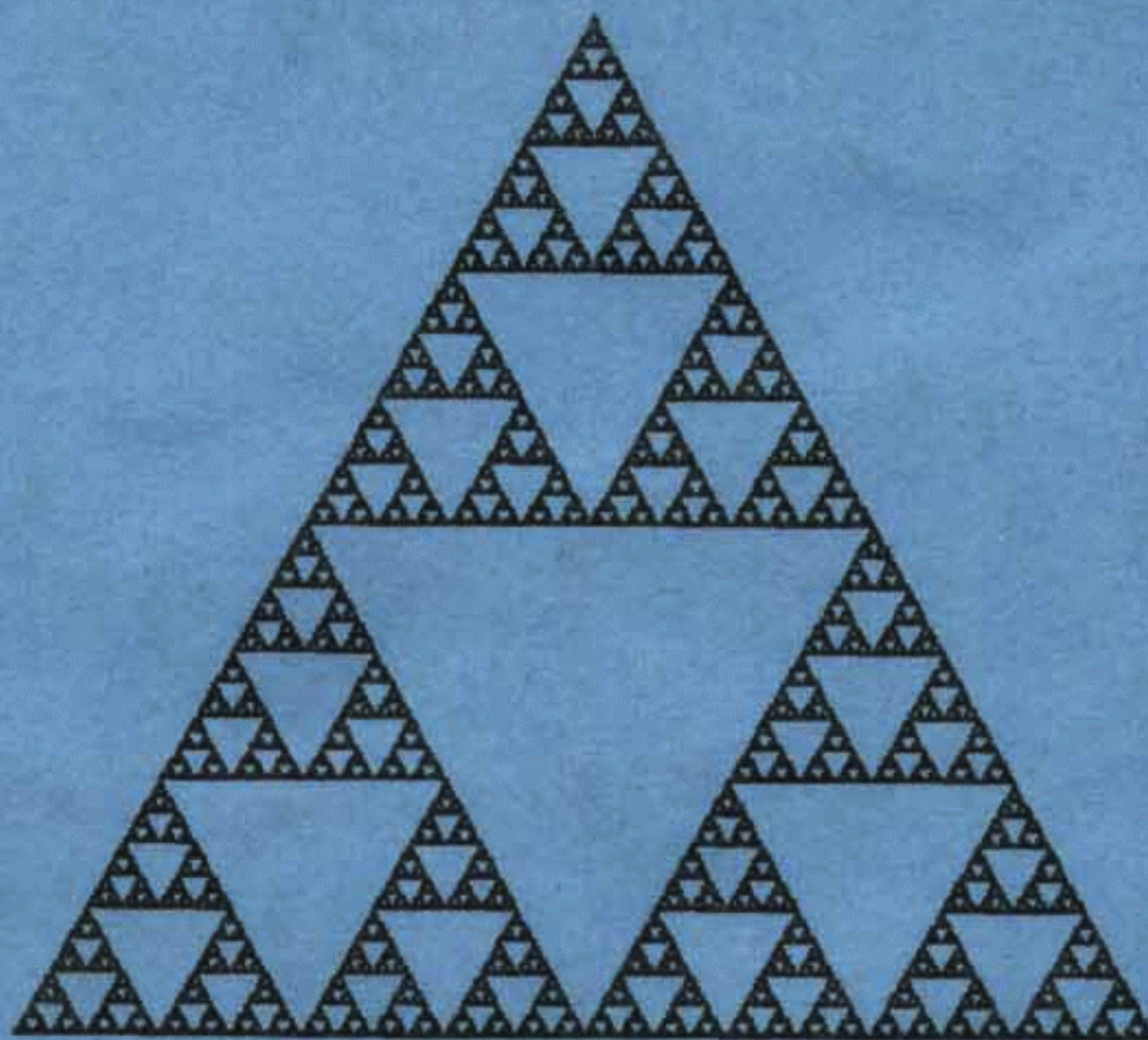


Ф. К. ШМИДТ

МЕТОДЫ СИНЕРГЕТИКИ В КАТАЛИТИЧЕСКОЙ
ХИМИИ
(САМООРГАНИЗАЦИЯ ХИМИЧЕСКИХ СИСТЕМ)



Иркутск
2001

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Иркутский государственный университет

В дар библиотеке
в канцелярии
с современной научной литературы
Иркутск
3.09.2001

Ф. К. ШМИДТ

**МЕТОДЫ СИНЕРГЕТИКИ В КАТАЛИТИЧЕСКОЙ
ХИМИИ
(САМООРГАНИЗАЦИЯ ХИМИЧЕСКИХ СИСТЕМ) .**

Иркутск
-2001-

УДК 66.02:536.75

Шмидт Ф.К. Методы синергетики в каталитической химии (самоорганизация химических систем).. - Иркутск: Иркутский. ун-т, 2001. - с.

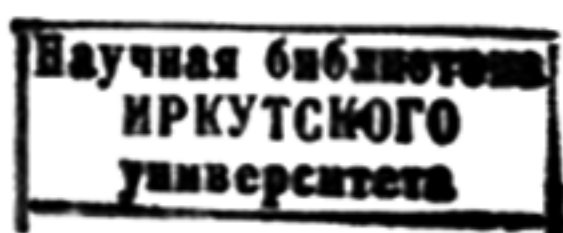
Рецензент – доктор химических наук, профессор Ткач В. С.

В учебном пособии изложены основные понятия синергетики, термодинамики необратимых процессов, нелинейной динамики. Описаны основы теории качественного анализа дифференциальных уравнений, теории бифуркаций, а также кинетические модели самоорганизации химических систем. Учебное пособие рекомендуется студентам химических факультетов, аспирантам, преподавателям и научным сотрудникам, работающим в области физической химии, химической кинетики и катализа.

Табл. 1, Ил. 61, Библ. 72.

© Ф.К. Шмидт, 2001

© Иркутский государственный университет, 2001



A568.786

“Порядок тот, что в хаосе таится...”

Генри Миллер.

Стареют не проблемы, стареют их решения.

Харольд Хефдинг.

Введение

Классическое естествознание XIX века обогатило науку двумя на первый взгляд противоположными концепциями эволюции. Одна использовалась долгое время при изучении живой, а другая только неживой материи. Эти фундаментальные научные достижения связаны с концепцией необратимости в термодинамике, точнее с ее вторым законом и сформулированная в это же время другая концепция лежит в основе эволюционной теории живой материи Ч. Дарвина. Между этими двумя подходами сразу же обнаружилось различие, а точнее резкое противоречие. В самом деле, сущность второго закона термодинамики заключается в том, что в изолированной системе, т.е. в системе не обменивающейся с окружающей средой ни энергией, ни веществом в самопроизвольных процессах энтропия может только возрастать. При достижении максимума энтропии системы все макроскопические процессы в ней останавливаются, и такое состояние системы будет равновесным. Хорошо известна формулировка первого и второго законов термодинамики Р. Клаузиуса, который ввел в научный обиход понятие энтропии: “Энергия мира постоянна, энтропия мира стремится к максимуму”. Л. Больцман интерпретировал понятие энтропии в терминах изменения порядка в системе – при возрастании энтропии в системе усиливается беспорядок, хаос и дезорганизация. Поскольку всякие изменения в изолированных системах в соответствии с термодинамикой сопровождаются увеличением энтропии, то последняя выступает в качестве своеобразной стрелы времени. В классической физике время выступает просто как параметр, знак которого можно изменить на обратный, и таким образом вернуться к исходному состоянию системы. В термодинамических процессах ничего подобного быть не может, так как теплота не может самопроизвольно передаваться от холодного тела к горячему, а равномерно распределенное в пространстве вещество собраться в определенной части пространства. Термодинамические процессы по своей природе являются необратимыми. Термодинамика ввела в физику понятие времени в весьма своеобразной форме, а именно в форме необратимого возрастания энтропии в системе.

Наиболее очевидная особенность биологических систем заключается в том, что они способны к самоорганизации, то есть самопроизвольному (спонтанному) образованию и развитию сложных структур. Как показал Э. Шредингер, это не противоречит законам термодинамики, поскольку все живые системы не являются закрытыми и обмениваются с окружающей средой энергией и веществом. В основе эволюционного учения Ч. Дарвина

лежит концепция естественного отбора, которая направлена на развитие живой материи от низших форм к высшим, усложнение их организации и выживание более совершенных организмов. Таким образом, концепция эволюции в XIX веке возникла в двух прямо противоположных формах – в виде теории создания структур Ч. Дарвина и теории деградации структур в соответствии с постулатами классической термодинамики. Обе теории согласовывались с многочисленными экспериментальными фактами. И только в середине XX века с развитием нелинейной термодинамики необратимых процессов удалось обобщить известные опытные факты из разных областей знаний и приблизиться к пониманию процессов формирования структур в открытых системах, которые принципиально отличаются от изолированных и закрытых систем тем, что эти системы обмениваются с окружающей средой и энергией и веществом. Оказалось, что в открытых системах далеких от состояния равновесия при определенных условиях появляется способность к самоорганизации. Молекулы и другие частицы, образующие открытую систему, начинают участвовать в кооперативных согласованных движениях, формируя временные, пространственные и пространственно-временные структуры, которые по предложению И. Пригожина, внесшего главный вклад в этот раздел естествознания, называют *диссипативными структурами* [1,2]. Пригожиным и его школой было установлено, что способность к самоорганизации является общим свойством открытых систем, а источником формирования структур являются неравновесность и флуктуации в открытых системах.

Термодинамика необратимых процессов сформировалась как раздел термодинамики в 50-х годах XX века. Особый вклад в линейную термодинамику необратимых процессов внес Л. Онзагер, который в 1968 году был удостоен Нобелевской премии по химии. Основополагающие идеи, обусловившие бурное развитие нелинейной термодинамики необратимых процессов, были сформулированы, проработаны и развиты И. Пригожиным и его школой. За разработку теории диссипативных структур И. Пригожин был удостоен Нобелевской премии в 1974 году. Первая книга, посвященная возникновению упорядоченности в открытых системах, написана Т. Николисом и И. Пригожиным и называется “Самоорганизация в неравновесных системах” с подзаголовком “от диссипативных структур к упорядоченности через флуктуации” [3]. Эта монография является естественным продолжением книги П. Гленсдорфа и И. Пригожина “Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флуктуаций”, в которой обсуждаются фундаментальные вопросы термодинамики далеких от равновесия открытых систем, где проявляются нелинейные свойства системы. Открытая система не может быть равновесной, потому что ее функционирование требует непрерывного