

ХИМИЯ

УДК 514.13:515.127.1:518.518.114:530.117:531.111.54–18:544.01:544.015.2:544.427

ФРАКТАЛЬНЫЕ ОБРАЗЫ ХИМИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ

© 2003 г. В. В. Ключарев

Представлено академиком Ю.Д. Третьяковым 15.02.2003 г.

Поступило 17.02.2003 г.

Недавно средствами скоростной видеосъемки впервые удалось разделить во времени стадии становления и развития химического процесса в материале [1, 2]. Например, синтез никелида алюминия методом СВС при скорости съемки ~10 кадров/с выглядит как непрерывный процесс, при съемке со скоростью ~1000 кадров/с наблюдается скачкообразное перемещение фронта, а при съемке со скоростью более 10000 кадров/с по ходу формирования ступенек становится заметной мерцающая стадия превращения с возникновением и исчезновением отдельных очагов разогрева [2]. Сходную картину наблюдали и при взаимодействии металлического магния с водным раствором хлорида меди [3]. Оказалось, что она выглядит как иерархическая структура лавин химического превращения, причем лавины сопровождает пульсация магнитного поля с попеременными отклонениями его вертикальной компоненты то в одну, то в другую сторону. Анализируя картину взаимодействия магния с водным раствором хлорида меди, авторы работы [3] сформулировали два вопроса: 1) имеет ли всеобщее распространение мерцающее лавинообразное протекание химических реакций; 2) какие классы их способны демонстрировать явления, похожие на самоорганизованную критичность. Цель настоящего сообщения – дать ответ на эти вопросы, опираясь на представленную ниже универсальную модель превращений, в основе которой лежат идеи хаусдорфовой [4] и фрактальной геометрии [5].

Хорошо известно, что каждое вещество или материал проявляет свою химическую индивидуальность тогда и только тогда, когда достигает некоторой критической массы. Так, необходимый для взрыва критический диаметр трубки, наполненной тротилом, при 25°C составляет около 60 мм [6]. Не менее интересными свойствами обладает металлическая медь. Оказывается, она способна поглощать или испускать квант света,

энергия которого совпадает с теплотой испарения всех частиц, составляющих ее элементарную ячейку [7]. Известно, что медь имеет гранецентрированную кубическую решетку. Ее элементарная ячейка состоит из четырех атомов. Выяснилось, что спектр меди содержит в ультрафиолетовой части полосу поглощения и испускания, энергия которой очень близка к энталпии перехода  $4 \text{ Cu} (\text{тв.}) \rightarrow 4 \text{ Cu} (\text{газ.})$ , поделенной на число Авогадро. Пример тротила, как и пример меди, свидетельствует о том, что сущность химического акта необходимо отображать средствами дискретной математики. Причем это справедливо и тогда, когда вопросы химизма выходят за рамки квантовой физики взаимодействующих атомов и молекул.

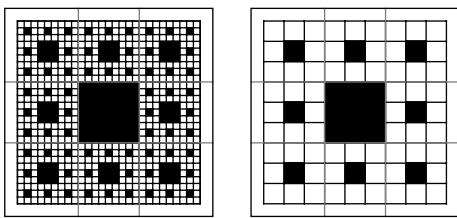
Сегодня фрактальные образы дискретной математики глубоко проникли в химию и химическую технологию [8]. Однако вопрос об их сущности остается спорным. Согласно одной из версий, фрактал – это статичный объект дробной размерности [5, 9]. Согласно другой версии, это изрезанные, изломанные тела, для которых дробная размерность есть продукт человеческой фантазии [10]. В первом случае термин “фрактал” относится к английскими словами “fraction” или “fractional” и отражает представления о телах бесконечно тонкой структуры. Во втором случае термин “фрактал” генетически связан с латинским словом “fractus” и отражает представления об изрезанных или изломанных телах вещественной природы. Столкновение двух принципиально разных мировоззренческих позиций, лежащих в основе этого разделения, порождает современную дискуссию о генезисе фракталов [11–13].

Сущность противоречий в системе представлений о фракталах удобно показать на примере ковра Серпинского. Построить его можно делением исходных квадратов на девять равных частей с изъятием центрального фрагмента (рис. 1). Формально этот процесс отражает уравнение

$$f(\lambda x) = \lambda^D \cdot f(x),$$

где  $\lambda = 3^N$  – масштабный множитель,  $f(\lambda x)$  и  $f(x)$  – число новых и число исходных элементов,  $N$  – любое целое число,  $D$  – размерность по Хаусдорфу.

Институт проблем химической физики  
Российской Академии наук,  
Черноголовка Московской обл.



**Рис. 1.** Превращение ковра Серпинского при переходе с третьей его итерации на вторую.

Поскольку при каждом трехкратном изменении масштаба число равных подобъектов изменяется не в 9, а только в 8 раз, хаусдорфова размерность ковра Серпинского есть величина

$$D = \frac{\log[f(\lambda x)/f(x)]}{\log \lambda} = \frac{\log[f(3x)/f(x)]^N}{\log 3} = \\ = \frac{N \cdot \log 8}{N \cdot \log 3} \approx 1.8928.$$

Нетрудно заметить, что появление дробной размерности связано с тем, что на каждом шаге масштабирования наблюдатель мысленно объединяет в однородные целостности те части, которые несут в себе содержание (на ковре выделены белым), и те части, которые этого содержания не имеют. Так, с увеличением масштаба при переходе от третьей итерации ковра Серпинского к его второй итерации часть черных квадратов меняет окраску (рис. 1). Эта процедура имеет физический смысл, если по ходу измерений происходит реальное, например, химическое превращение: белые области становятся черными или, наоборот, черные части становятся белыми. Если в рассматриваемой системе превращения отсутствуют, то ее геометрическую сущность отражают целочисленные размерности.

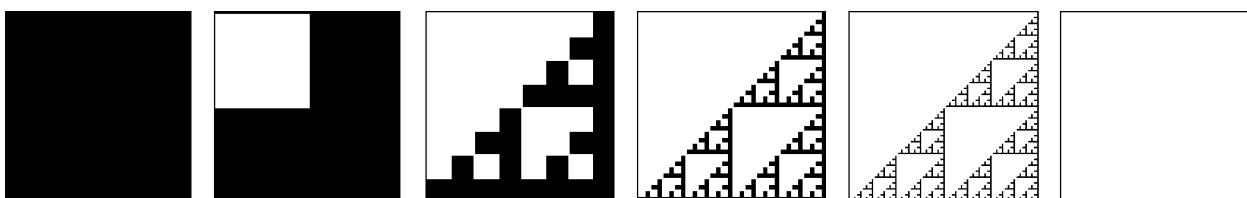
Считая возможным рассматривать тела неизменной природы как объекты с дробной размерностью, многие исследователи оказались в пленах образов статичного мышления. Отсюда ведут свою родословную известные противоречия фрактальной геометрии. Впервые на это обратил пристальное внимание О.Р. Шенкер [10]. Он заметил, что объекты с дробной размерностью от-

ражают бесконечный геометрический процесс. Вывод, правда, оказался ошибочным: “фрактальная геометрия не является геометрией природы”. Все становится на свои места, если уточнить: не просто какой-то геометрический процесс, а превращение тел, происходящее всегда с возникновением или исчезновением дискретных элементов системы. Именно в таком случае не могут служить адекватным средством измерения ни флюксия Ньютона, ни дифференциал Лейбница, ни мера Лебега. Приходится использовать меры с дробной размерностью, способные адекватно отражать и дискретность, и изменчивость превращений телесной природы. У истоков такого подхода первым стоял Ф. Хаусдорф [4].

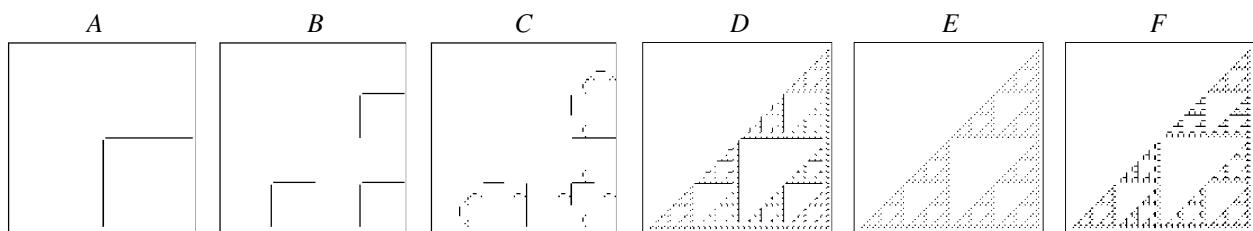
Статичные тела, для которых с помощью мысленных построений можно обнаружить дробную размерность, широко известны. Это и триадная кривая Коха, и упомянутый выше ковер Серпинского, и водяные снежинки, и кроны деревьев, и многое другое [5]. Однако тела с имманентной им дробной размерностью до сих пор относились к образам ускользающего бытия [14]. Ниже мы попробуем впервые рассмотреть их на треугольнике Паскаля по модулю два.

Для начала выберем черный квадрат, сторона которого состоит из точек, принадлежащих интервалу  $(0, 2^N)$  ( $N$  – целое число). Поместим его в белую рамку, сторона которой –  $L$  содержит в себе точки сегмента  $[0, 2^N]$ . Разделим квадрат на четыре части, как показано на рис. 2, и сделаем левую верхнюю часть белой. Примем, что узел деления имеет координаты  $X_1 = L/2$ ,  $Y_1 = L/2$  и сторона выбеленного квадрата состоит из  $L/2$  экранных пикселей. Тем самым выполняется условие, согласно которому дискретный объект заключает в себе свои границы. Указанную процедуру можно продолжить, задавая узлы деления как дроби с основанием  $2^M$  от нормированной стороны обрамляющей белой рамки и определяя сторону каждого нового белого квадрата величиной  $L/2^M$ , где  $M$  – целое число и  $M \in [1, N]$ . В итоге можно наблюдать за возникновением все более тонких деревьев Кэли с размерностью

$$D = \frac{\log 3}{\log 2}. \text{ При } M = N \text{ получается сплошной белый}$$



**Рис. 2.** Превращения треугольника Паскаля с длиной ребра в  $128 (2^7)$  точек на 0-м, 1-м, 3-м, 5-м, 6-м и 7-м шаге его итерации. (Кадры слева направо.)



**Рис. 3.** Превращения треугольника Паскаля с длиной ребра (кадры слева направо): А – 129 точек, В – 130 точек, С – 131 точка, Д – 159 точек, Е – 160 точек, Ф – 161 точка – на 7-м шаге его итерации.

лый квадрат. Нетрудно заметить, что возникающие деревья Кэли раскрывают тонкую структуру превращения черного квадрата в белый квадрат при целочисленном масштабировании этого процесса. Иными словами, удачно выбирая средства наблюдения, можно увидеть превращение как скачкообразное продвижение его фрактального фронта.

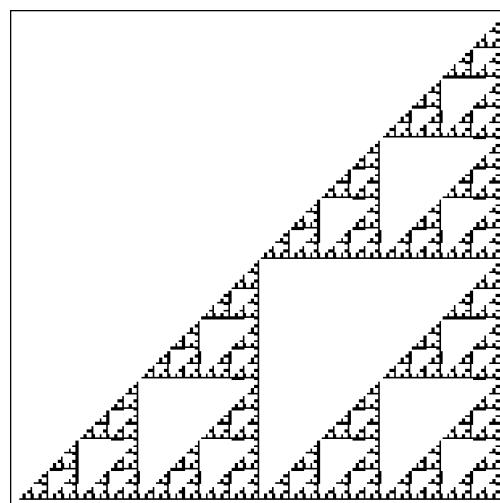
Принципиально иная ситуация возникает, если отслеживать превращение тел при масштабах меньших, чем предел их делимости. Допустим, что для исходного квадрата в рамке с  $L = 2^N$  удалось достичь границы полного превращения. Это значит, – выполнено условие  $M = N$ . Понятно, что можно увеличить сторону исходного квадрата до значения  $L = 2^{N+1}$ , тогда мы снова увидим дерево Кэли минимальной толщины. Отследим механизм возникновения этого дерева, увеличивая сторону исходного квадрата не скачком, от  $2^N$  до  $2^{N+1}$ , а малыми шагами – по одному экранному пикселью. Допустим,  $N = 7$ , тогда можно рассмотреть  $2^8 - 2^7 = 128$  промежуточных состояний системы, от сплошного белого тела до дерева Кэли на границе целочисленного деления. Координаты узлов деления и длина превращающихся элементов квадрата могут при этом оказаться дробными. Поэтому, отслеживая превращения как дискретные явления, зададим правила округления, допуская способность природы ограничивать несущественные величины. Для определенности примем условие: если дробная часть числа больше или равна 0.5, то округление происходит до следующего целого числа. Возникающая картина превращения представлена на рис. 3.

Первое, что бросается в глаза, – многообразие форм, из которых складывается треугольник Паскаля при масштабах, меньших, чем предел его делимости. Второе – лабильность этих форм: кадры А–С и кадры Д–Ф, представленные на рис. 3, получены при последовательном увеличении рамки  $L$  всего лишь на один пиксель. Третье и, может быть, самое главное – мерцание фрагментов треугольника Паскаля. Особенно хорошо это видно по кадрам А–С, когда появляются его первые островки. Они нестабильны. По мере того, как растет рамка  $L$ , эти островки то появляются,

то исчезают, хотя постепенно мощность их множества нарастает. Интересно отметить, что по ходу становления фрактала могут возникать деревья Кэли, похожие на то, которое возникает на пределе целочисленного масштабирования. Однако эти новообразования нестабильны и разрушаются уже при очередном изменении рамки  $L$ .

Разумеется, можно детально проследить трансформацию фракталов не только на последней стадии их “жизни”. Ту же самую мерцающую часть можно обнаружить на треугольнике Паскаля и при  $N > M + 1$ , т.е. тогда, когда мы находимся выше предела делимости. Если  $L$  не кратно  $2^M$ , то в этом случае по периметру устойчивых деревьев Кэли появляются отдельные шероховатости, которые возникают и исчезают с очередным шагом масштабирования (рис. 4).

Полученная картина позволяет впервые выделить разные моды превращения с участием целостностей телесной природы. Моды развития отвечают возникновению статичных форм при масштабировании с шагом  $\lambda^N$ , где  $\lambda$  – коэффициент подобия фрактала. Каждая из таких форм имеет минимальный масштаб  $a_0$ , начиная от которого



**Рис. 4.** Вид треугольника Паскаля с длиной ребра в 302 точки на 6-м шаге масштабирования.

рассматриваемый объект можно измерить, используя обычные евклидовы метрики [10]. Назовем их фраксетами (fracssets): от английских слов *fractional* (т.е. дробный) и *set* (т.е. неподвижный, застывший, незыблемый). Моды становления отвечают возникновению мерцающих объектов при масштабировании с шагом, не равным  $\lambda^N$ . Именно эти объекты, промежуточные между предшествующим устойчивым состоянием и последующим устойчивым состоянием, представляют собой тела с имманентной им дробной размерностью. Определим их как фраксимы (fracsims): от английских слов *fractional* и *simmer* (последнее слово означает “закипать, кипеть на медленном огне, кипеть от гнева, ярости”).

Идентификация фраксетов и фраксимов дает основание к выводу: мерцающие стадии и лавины химических превращений служат атрибутами любого химического акта с участием целостностей телесной природы. Связано это с возникновением хаусдорфовых (фраксимальных) состояний веществ и материалов. До сих пор эти состояния ускользали от внимания за отсутствием необходимых категорий. Вследствие этого само превращение человек воспринимал как мгновенный переход из предшествующего статичного состояния в последующее [15]. Осознание фрактального облика превращений позволит людям увидеть окружающий их мир с принципиально новой точки зрения. Способствовать этому могут технические средства наблюдения с разрешением, большим, чем предел делимости физических фракталов.

Автор выражает признательность Б.Б. Хине, Н.А. Бульёнкову, Р.А. Андриевскому, С.В. Калинину, А.А. Вертегелю и академику Ю.Д. Третьякову за вдохновляющую дискуссию.

Работа выполнена при поддержке ФЦП “Интеграция” (проект Б0–115).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Varma A., Rogachev A.S., Mukasyan A.S., Hwang S.* // Proc. Nat. Acad. Sci. USA. 1998. V. 95. № 19. P. 11053–11058.
2. *Mukasyan A.S., Rogachev A.S., Varma A.* // Chem. Eng. Sci. 1999. V. 54. № 15/16. P. 3357–3367.
3. *Claycomb J.R., Bassler K.E., Miller J.H. et al.* // Phys. Rev. Lett. 2001. V. 87. № 17. P. 178303-1–178303-4.
4. *Hausdorff F.* // Math. Ann. 1919. V. 79. P. 157–179.
5. *Mandelbrot B.B.* The Fractal Geometry of Nature. N.Y.: Freeman, 1983. 468 p.
6. *Беляев А.Ф., Курбангалина Р.Х.* // ЖФХ. 1960. Т. 34. № 3. С. 603–610.
7. *Бокий Г.Б., Лаптев В.И.* // ЖСХ. 1991. Т. 32. № 3. С. 8–12.
8. *Кольцова Э.М., Третьяков Ю.Д., Гордеев Л.С., Вертегел А.А.* Нелинейная динамика и термодинамика необратимых процессов в химии и химической технологии. М.: Химия, 2001. 407 с.
9. *Кроновер Р.М.* Фракталы и хаос в динамических системах. Основы теории. М.: Постмаркет, 2000. С. 10.
10. *Shenker O.R.* // Stud. Hist. and Phil. Sci. B. 1994. V. 25. № 6. P. 967–981.
11. *Avnir D., Biham O., Lidar D., Malcai O.* // Science. 1998. V. 279. № 5347. P. 39–40.
12. *Mandelbrot B.B.* // Science. 1998. V. 279. № 5352. P. 783–784.
13. *Pfeifer P.* // Science. 1998. V. 279. № 5352. P. 784.
14. *Гиренок Ф.И.* Ускользающее бытие. М.: ИФРАН, 1994. 220 с.
15. *Тимашев С.Ф.* // ЖФХ. 2000. Т. 74. № 1. С. 16–30.