

2. Еремин В. В. Теоретическая и математическая химия для школьников. Подготовка к химическим олимпиадам. М.: МЦНМО, 2007. 392 с.

УДК 514.87

Студ. В. С. Березовская,
Науч. рук. доц. Л. Д. Яроцкая
(кафедра высшей математики, БГТУ)

ФРАКТАЛЬНОСТЬ КРИСТАЛЛОВ, ДЕНДРИТОВ И ДЕНДРИМЕРОВ

Фрактал означает структуру, возникающую, когда части целого соединяются друг с другом так, что возникает инвариантность по отношению к масштабу. Про такие фигуры говорят, что они самоподобны, моделируют сами себя. Принято различать регулярные и нерегулярные фракталы, из которых первые являются плодом воображения, а вторые – продуктом природы или деятельности человека. Нерегулярные фракталы сохраняют способность к самоподобию в ограниченных пределах, определяемых реальными размерами системы.

Отметим, что фракталы обладают непривычными свойствами. В 1904 году швед Хельге фон Кох придумал непрерывную кривую, которая нигде не имеет касательной. Один из вариантов этой кривой носит название «снежинка Коха». Она обладает периметром бесконечной длины, хотя ограничивает конечную площадь. Эта фигура – один из первых исследованных учеными фракталов. Термин «фрактал» введен Б. Мандельбротом в 1975 году.

Фракталы являются могущественным средством описания сложных структур и процессов. Яркими примерами фракталов в химии являются кристаллы, дендриды и дендримеры. Целью данной работы является обсуждение особенностей фрактальных структур некоторых химических процессов и веществ.

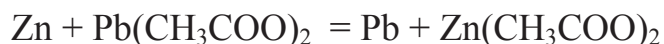
Кристалл – твердое тело, атомная структура которого обладает трансляционной периодичностью. Помимо периодичности кристаллы часто обладают и другими элементами симметрии (осевыми, плоскостными, инверсионными). Сами продукты кристаллизации обладают исключительным многообразием форм. Кристаллы могут расти из растворов, из расплавов и из пара. Катаплеит, очень редкий циркониевый минерал, образуется в щелочных магматических породах. Кристаллы дигидрата $\text{NaCl} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ образуются в соленых озерах в зимнее время, когда температура достаточно низкая для скопления минерала, получившего название гидрогалит. Кристаллы

искусственного дендрита магния получены осаждением паров магния на холодной поверхности. Первые кристаллики льда на стекле – это всегда шестилучевые звездочки или шестигранные стержельки, которые, разрастаясь и взаимодействуя друг с другом, образуют скелетные или ветвистые кристаллы, называемые дендритами.

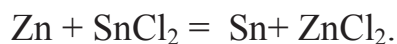
Дендрит представляет собой ветвящееся и расходящееся в стороны образование, возникающее при ускоренной или стеснённой кристаллизации в неравновесных условиях, при этом кристалл расщепляется по определённым законам. Когда начинается процесс кристаллизации в переохлажденном веществе, то энергия системы изменяется в двух противоположных направлениях. Образование новой поверхности раздела приводит к увеличению поверхностного натяжения и уменьшению выделения теплоты кристаллизации. Оба эти процесса нелинейны, и если при определенных условиях их характеристические времена оказываются близкими друг к другу, то возникают благоприятные условия для взаимосогласованного поведения частей системы в процессе кристаллизации и образования в ней дендритных структур с фрактальными свойствами.

Процесс образования дендрита принято называть дендритным ростом, при этом рост дендритов идет в строго определенных направлениях, а ветвление происходит приблизительно через одинаковые промежутки, которые становятся все короче с повышением порядка ветвей. В процессе дендритного развития объекта кристаллографическая закономерность изначального кристалла утрачивается по мере его роста. Дендриты могут быть трёхмерными объёмными (в открытых пустотах) или плоскими двумерными (например, если растут в тонких трещинах горных пород).

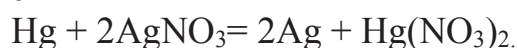
Приведем описание опытов получения некоторых дендритов металлов. Чтобы вырастить «Сатурново дерево», наливают в высокий стакан водный раствор 25 – 30 г ацетата свинца в 100 мл воды и погружают в него очищенную тонкой наждачной бумагой пластину или стержень из цинка. С течением времени на цинковой поверхности вырастают ветвистые и блестящие сросшиеся между собой кристаллы свинца. Их появление вызвано реакцией восстановления свинца из соли более активным в химическом отношении металлом.



Образование кристаллов олова на кусочках цинка называют «деревом Юпитера». Для этого в высокий стеклянный сосуд наливают водный раствор 30 – 40 г хлорида олова SnCl_2 в 100 мл воды и погружают цинковую пластинку.



Серебряное «деревце Дорфмана» получается, если в стеклянный стакан с каплей ртути на дне налить 10%-й водный раствор нитрата серебра AgNO_3 . Сначала ртуть покрывается серой пленкой амальгамы серебра, а через 5 – 10 секунд на ней быстро начинают расти блестящие игольчатые кристаллы серебра. Спустя несколько минут иглы начинают ветвиться, а через час в сосуде вырастает сверкающее серебряное деревце. Отметим, что здесь очень важно точно соблюсти рекомендованную концентрацию нитрата серебра: при более низком содержании AgNO_3 роста кристаллов металлического серебра не наблюдается, а при более высоком – кристаллизация серебра идет без образования ветвистых кристаллов. Но сохранить эти кристаллы не получится, т.к. они очень хрупкие и тонкие



Фрактальные крупные молекулы, синтезированные в органических и в неорганических системах, получили название дендримеров. Это макромолекулы с симметричной древообразной с регулярными ветвлениями структурой. Дендример становится похожим на дерево с шарообразной кроной, если в процессе роста полимерной молекулы не происходит соединения растущих ветвей.

Дендримеры активно исследуются с 1980-х годов, и с тех пор получены уже сотни различных типов подобных макромолекул. Дендримеры 3-го и более высоких поколений характеризуются высокой плотностью молекулярной структуры и имеют близкую к сферической форму. Растворы дендримеров обладают гораздо меньшей вязкостью, чем растворы других веществ с такой же молекулярной массой. Благодаря контролируемым и воспроизводимым с большой точностью размерам макромолекул, дендримеры уже используются для калибровки в масс-спектрометрии, электронной и атомной спектроскопии, ультрафильтрации. Дендримеры, содержащие тяжелые металлы, используются в медицинской диагностике в качестве рентгеноконтрастного вещества. А возможность прикрепления к дендримерам сразу нескольких различных молекул нашла свое применение при лечении злокачественных опухолей.

Таким образом, что фрактальные самоподобные структуры по существу описывают различные пути возникновения порядка в сложных системах. Во всем, что нас окружает, мы часто видим хаос, но на самом деле это не случайность, а идеальная форма, разглядеть которую нам помогают фракталы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Пайтген Х., Рихтер П.Х. Красота фракталов. М.: Мир, 1993.
2. Третьяков Ю.Д. Дендриты, фракталы и материалы // Соросовский образовательный журнал, № 11, 1998г., с. 96-102.

УДК 519.173.5:547.022

Студ. П. В. Пашковский,
Науч.рук. канд. физ-мат наук Яроцкая Л.Д.
(кафедра высшей математики, БГТУ)

ГРАФИЧЕСКОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ МОЛЕКУЛ ДЛЯ АНАЛИЗА СВОЙСТВ ВЕЩЕСТВ НА ПРИМЕРЕ БУТАНА, ПЕНТАНА И ИХ ИЗОМЕРОВ

Одной из основных задач органической химии является установление связи между строением вещества и его свойствами. Методы математического моделирования позволяют найти количественные соотношения между структурой и анализируемыми свойствами вещества. В частности, способы описания структуры молекул сводятся к обработке методами теории графов соответствующих им абстрактных математических структур – молекулярных графов.

Целью данной работы является построение молекулярных графов для некоторых алканов и анализ связи между структурой молекул и физико-химическими свойствами посредством топологических индексов.

Граф – сложная геометрическая схема, состоящая из совокупности точек (вершин), соединённых линиями (рёбрами). Связный неориентированный граф, вершинами которого служат атомы углерода, а ребра связями между ними, является молекулярным графом. Если его вершины непомечены, то граф отражает только структуру, а если помечены – структуру и состав. Если рёбра молекулярного графа непомечены, то различия между одинарными и кратными химическими связями нет.

Как математические объекты графы описываются числами, которые в химии называют топологическими индексами. Топологические индексы находят разнообразное применение в структурной химии. В частности, они могут быть использованы для кодирования химической информации, при планировании химического эксперимента в теории электронного строения и реакционной способности молекул, для количественного описания химических структур при анализе связи между структурой молекулы и её свойствами.