

УДК

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ КРИТЕРИЙ ХИМИЧЕСКОЙ ЭВОЛЮЦИИ

© 2005 г. В.А.Шапошник

Воронежский государственный университет

Статья посвящена проблеме химической эволюции. В ней предложены критерии матричного и эмерджентного развития в виде первой и второй производных термодинамической энтропии. В качестве примера рассмотрена эволюция от водорода до сверхтяжелых атомов. Статья представляет основную часть доклада, сделанного автором на XIX Всемирном философском конгрессе в 1993 г. [1].

СИСТЕМНЫЙ КРИТЕРИЙ В ЭВОЛЮЦИИ

Большинство философских систем являются монистическими, поэтому их важнейшей потребностью является развитие эволюционных представлений. В учении Декарта, Спинозы и Лейбница основное место занимала концепция мировой эволюции, согласно которой мировой порядок образует последовательный ряд ступеней, восходящий и непрерывно развивающийся от низших форм до высших форм. За столетие до Дарвина Кант высказал мысль о том, что мы имеем описание не истории природы и сам внес свой вклад в ее развитие, создав первую гипотезу происхождения Земли. В философии Фихте эволюция предстает как развитие духа, первоначальным актом которого была воля. В философии Шеллинга исходным пунктом является тождество, из которого дифференцирование конструирует как реальное, так и идеальное. Однако настоящим вожаком современного эволюционизма является не философ, а биолог Чарльз Дарвин, с именем которого связаны важнейшие идеи современной эволюции. В современном дарвинизме за многие годы накопились не только достижения, но и трудности и противоречия, которые неизбежны при развитии любой научной дисциплины [2-4].

Эволюционные теории сложились при исследовании высших форм организации материи, поэтому развиты преимущественно на основе социальных наук и биологии. Пришла очередь химии и физики, в которых до сих пор идеи эволюции являются дискуссионными. В монографиях [5-7] речь идет о химической эволюции преимущественно на основе критерия сложности, согласно которому каждый объект представляет ансамбль взаимодействующих частиц, причем более высокое место в эволюционном ряду занимает комплекс по отношению к составляющим его частям. Сложность системы является не только результатом увеличения числа элементов,

но, что особенно важно, при увеличении числа взаимодействий между ними. Например, при описании системы средствами неравновесной термодинамики большей сложности соответствует большее число ненулевых элементов матрицы феноменологических коэффициентов проводимости. Ансамбль взаимодействующих частей состоит из последовательности вложенных одна в другую взаимодействующих субъединиц, образующих иерархическую систему [8]. С точки зрения критерия сложности в химии в линейном приближении имеется эволюционная последовательность: атомы – молекулы – макромолекулы или супрамолекулы.

ИНФОРМАЦИОННЫЙ КРИТЕРИЙ ЭВОЛЮЦИИ

Критерий сложности, или системный критерий, дает возможность качественного определения ступеней эволюционного ряда при линейном развитии. В случаях нелинейных процессов и разветвленных реакций такой критерий не дает отчета. Поиски количественного критерия привели к применению информационной энтропии для оценки уровня эволюции.

Клод Шеннон, развивая теорию связи, предложил понятие информационной энтропии H [9]

$$H = - \sum_i p_i \lg p_i \quad (1)$$

где p_i – вероятность события, $\lg$ – двоичный логарифм. В качестве единицы для информационной энтропии он взял, предложенную Д. Тьюки, величину БИТ (Binary digiT) примененную для обозначения одного двоичного разряда сообщения принимающего значения 0 и 1. Ю.А. Жданов предложил упрощенный метод применения уравнения Шеннона для расчета информационной энтропии [10]. Для примера в глицине, имеющем эмпирическую формулу $C_2H_5O_2N$, общее число атомов 10, вероятность

содержания водорода 1/2, углерода и кислорода по 1/5, азота 1/10. Отсюда информационная энтропия имеет величину

$$H = - \frac{1}{2} \lg \frac{1}{2} (H) - \frac{1}{5} \lg \frac{1}{5} (C) - \\ - \frac{1}{5} \lg \frac{1}{5} (O) - \frac{1}{10} \lg \frac{1}{10} (N) = 1.75 \text{ бит}.$$

Расчет величин информационной энтропии для гомологического ряда алканов показал возрастание этой величины от 0.72 у метана до 0.81 у декана. Непосредственный анализ этих величин не даёт ответ на вопрос о наличии эволюции, так как информационная энтропия выражает только неопределенность состояния.

Количество передаваемой информации определяется уменьшением неопределенности

$$\Delta J = - \Delta H, \quad (2)$$

При этом предполагается, что если состояние системы изменяется в направлении увеличения молекулярного беспорядка, то энтропия увеличивается, и, соответственно, информация состоянии уменьшается. Напротив, если система эволюционирует в направлении упорядоченности, то её энтропия уменьшается, но увеличивается информация о микроскопическом состоянии.

Величина информационной энтропии возрастает за счёт увеличения числа структурных элементов при усложнении системы, и поэтому количество информации, не может непосредственно указать путь эволюции. Тахтаджан и Седов [11] предложили определять развитие как процесс, при котором увеличение количества информации опережает рост числа структурных элементов. Для матричного развития первая производная информации по числу структурных элементов положительна

$$\frac{\partial J}{\partial N} > 0. \quad (3)$$

К матричному развитию можно отнести книгопечатание, кристаллизацию в периодическом кристалле и процессы копирования. Для эмерджентного (лат. e-mergo – восходить, появляться) развития, характеризующего появлением новых качественных изменений, вторая производная информации по числу структурных элементов положительна:

$$\frac{\partial^2 J}{\partial N^2} > 0. \quad (4)$$

При матричном развитии количество информации увеличивается линейно, а при эмерджентном информация растёт прогрессивно, причем прогрессивное накопление информации не может осуществляться по детерминированной программе, а должно включать вероятностный, стохастический механизм [11].

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЙ КРИТЕРИЙ ЭВОЛЮЦИИ

При анализе физической и химической эволюции применение информационного критерия носит чисто формальный характер, так как не учитываются индивидуальные свойства атомов, входящих в соединение. Если при расчете количества информации атом водорода оценивается аналогично атому меди или урана, то формализм подхода становится очевидным.

Мы предположили, что более реальным является использование термодинамической энтропии, величина которой конкретно отражает организацию атомов. Так как понятия термодинамическая энтропия и информация связаны между собой выражением [12, с.258]

$$\Delta S = k \Delta H, \quad (5)$$

где k – постоянная Больцмана, то из уравнений (2) и (5) следует соотношение между информацией и термодинамической энтропией

$$\Delta I = - \frac{\Delta S}{k}. \quad (6)$$

Это дает возможность сформулировать условие матричного развития (3) в виде

$$\frac{\partial S}{\partial N} < 0, \quad (7)$$

а условие эмерджентного развития как неравенство

$$\frac{\partial^2 S}{\partial N^2} < 0. \quad (8)$$

Обратим внимание на смену знаков при переходе от информации к энтропии.

АНАЛИЗ ЭВОЛЮЦИИ ЭЛЕМЕНТОВ

Переход от информации к термодинамической энтропии открывает возможность использования экспериментальных величин энтропии для элементов и их соединений. Рис. 1 показывает зависимость величин энтропии элементов периодической системы, приводимых в справочнике [13], от порядкового номера элемента, который равен числу протонов или электронов атома элемента. В философской литературе существует две точки зрения на проблему эволюции элементов периодической системы. Одна из них полагает, что эволюция завершается синтезом углерода и других элементов, на основе которых построены живые организмы [6]. С этой точки зрения углерод обладает наивысшей сложностью, так как число его соединений на порядок превышает число неорганических веществ. С.А. Шукарев исходил из принципа “биогенности”, согласно которому близость к биологическому миру определяет ступень эволюционного ряда в химии [14]. Н. Пири полагал, что химическая эволюция направлена от химического раз-

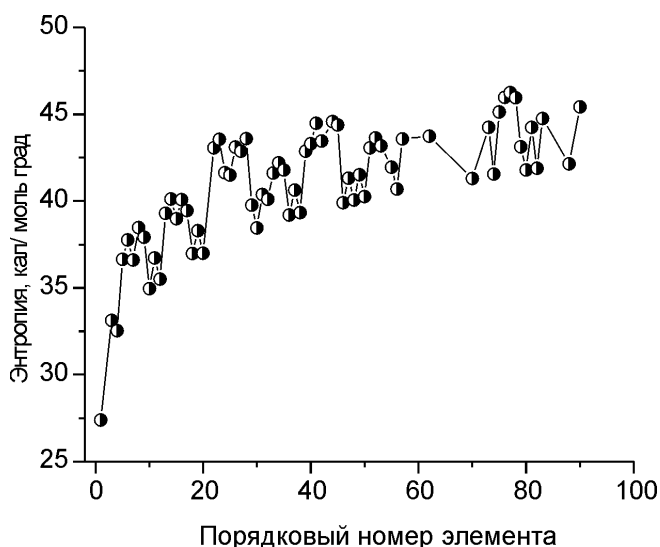


Рис. 1. Зависимость величины термодинамической энтропии от заряда ядра элемента (порядкового номера в периодической системе).

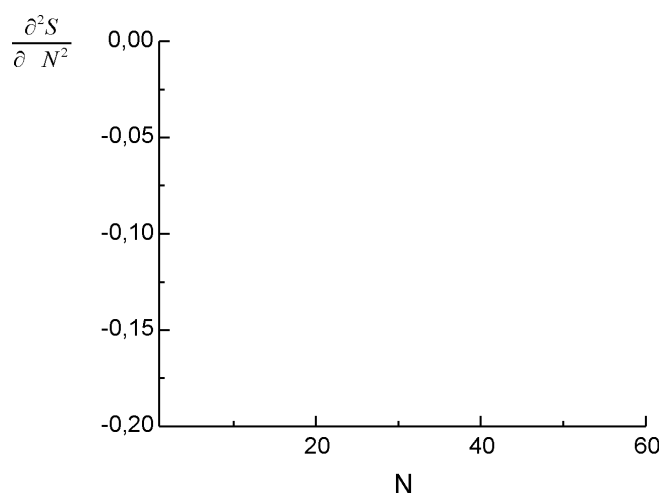


Рис. 2. Зависимость второй производной энтропии от заряда ядра элемента (номера элемента в периодической системе).

нообразия и простых структур к морфологической сложности и химической однородности [15].

Вторая точка зрения состоит в том, что сложность элемента и его место в эволюционном ряду увеличивается с увеличением числа элементарных частиц в атоме [16,17], поэтому уран можно считать более высокой ступенью в эволюционном ряду. Авторы монографии [6] нашли компромиссное решение в представлении первой точки зрения в виде химической эволюции, а второй как физической эволюции. С представлением эволюции элементов от водорода до сверхтяжелых как физической нельзя согласиться уже потому, что задача превращения элементов друг в друга всегда была сферой деятельности алхимиков, пытавшихся превратить неблагородные металлы в золото и серебро, а затем стала объектом исследований неохимиков. Первыми были проведены исследования превращения радиоактивных элементов, которые были отмечены Нобелевской премиями по химии 1908 г. Э. Резерфорда. Затем Нобелевскую премию по химии 1911 г. получила М. Кюри за открытие радия, полония и их превращений. В 1921 г. Нобелевской премии был удостоен Ф. Содди, исследовавший с Э. Резерфордом распад радиоактивных элементов и создавший современные представления об изотопах. Интересно обратить внимание на то, что Э. Резерфорд был удивлен тем, что Нобелевская премия ему была присуждена именно по химии. “Мне приходилось иметь дело с весьма различными трансмутациями, обладающими разной продолжительностью во времени, но быстрее из всех, какие я встречал, это моя собственная трансмутация из физика в химика – она произошла в одно мгновение”

[18]. Из сказанного можно сделать вывод о том, что Нобелевский комитет всегда уверенно относил работы по превращению элементов к области химии. Так было, когда исследования концентрировались на дезинтеграции сложных элементов, так было и потом, когда появились работы по синтезу новых элементов. Г. Сиборг стал лауреатом Нобелевской премии по химии в 1951 г. за работы по получению плутония.

При дифференцировании функции, представленной на рис. 1, мы получили положительную первую производную энтропии по числу электронов атома, что свидетельствует об отсутствии матричного развития в ряду элементов периодической системы. При вторичном дифференцировании функции мы получили зависимость, представленную на рис. 2. Он показывает наличие отрицательной второй производной термодинамической энтропии по числу электронов (протонов, порядковому номеру элемента), свидетельствующее об эмерджентном развитии. Оно имеет наибольший темп для легких элементов, которые образуют биологически активные соединения и на основе которых формируется живой организм. Можно обратить внимание на тот результат, что величина второй производной асимптотически приближается к нулю для тяжелых элементов, а это свидетельствует не об отсутствии химической эволюции элементов, а только о замедлении ее темпа, поэтому термодинамическая интерпретация эволюции объединяет обе точки зрения на ее природу.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Shaposhnik V.A. Chemical evolution // XIX World Congress of Philosophy. V.I. Book of Abstracts.

Moscow, 1993. – P. 47.

2. Яблоков А.В., Юсуфов А.Г. Эволюционное учение. Дарвинизм. – М.: Высшая школа, 1998. – 336 с.

3. Алтухов Ю.П. Вид и видообразование // Соросовский образовательный журнал. – 1997. – № 2. – С. 2- 10.

4. Философия и методология науки. – М.: Аспект Пресс, 1996. – С. 78.

5. Кузнецов В.И. Диалектика развития химии. – М.: Наука, 1973. – 327 с.

6. Васильева Т.С., Орлов В.В. Химическая форма материи. – Пермское книжное издательство, 1983. – 167 с.

7. Федина Г.А. Проблема развития в химии. – Ленинград: Наука, 1989. – 120 с.

8. Николис Дж. Динамика иерархических систем. Эволюционное представление. – М.: Мир, 1989. – 486 с.

9. Shannon C.E. A Mathematical Theory of Communication // Bell System Techn. J. – 1948. – V.27. – P. 370-423, 623 – 656.

10. Жданов Ю.А. Энтропия информации в органи-

ческой химии. – Ростов – на – Дону : РГУ, 1979. – 56 с.

11. Седов Е.А. Эволюция и информация. – М.: Наука, 1976. – 230 с.

12. Эбелинг В., Энгель А., Файстель Р. Физика процессов эволюции. – М: УРПС, 2001. – 326 с.

13. Справочник химика. – Т. 1. – Ленинград-Москва, Госхимиздат, 1963. – С. 774.

14. Щукарев С.А. Неорганическая химия. – М.: 1974. Т. 2.

15. Пири Н. Химическое многообразие и проблема происхождения жизни. В кн.: Возникновение жизни на земле. – М.: Изд. АН СССР, 1959. – С. 79- 87.

16. Кедров Б.М. Предмет и взаимосвязь естественный наук. В кн.: Проблемы развития в современном естествознании. – М.: МГУ, 1968. – С. 108.

17. Штофф В.А. К вопросу о классификации форм движения в неорганической природе. В кн.: Проблемы развития в природе и обществе. М.-Л.: Изд. АН СССР, 1958. – С. 67.

18. Данин Д. С. Резерфорд. М.: Молодая гвардия, 1966. – С. 326.