Математическая модель кинетики сорбции в средах с фрактальной структурой

Бейбалаев В.Д.

Дагестанский государственный университет

Математическое описание сорбции осуществляется системой уравнений, состоящей из уравнения баланса (закон сохранения вещества), кинетических уравнений для компонентов, участвующих в процессе сорбции, уравнения изотермы адсорбции, дающей связь между концентрациями вещества в растворе и на поверхности сорбента, уравнений электродинамики (если речь идет об электросорбции) [1-3]. В общей постановке уравнения имеют сложный интегро-дифференциальный вид. Поэтому применяются различные приближенные модели с четким определением границы их применимости. Принципиальная особенность рассматриваемого процесса заключается в том, что при сорбции вещества из жидкой фазы на поверхность твердой фазы, с дальнейшей диффузией в твердой фазе, сами кинетические коэффициенты зависят от искомых решений, и задача становится нелинейной. Более того, на разных этапах адсорбции, вообще говоря, необходимо использовать разные уравнения.

Можно отметить два фактора фундаментального характера, затрудняющих создание адекватной количественной теории гетерогенных систем: пространственная неоднородность и многофазность системы. Особенности пространственной структуры проявляются в том, что их описание в рамках представлений евклидовой геометрии оказывается ограниченным и необходимо привлечение представлений геометрии дробной размерности. Многофазность системы также приводит к необходимости развития принципиально иного подхода при исследовании кинетики сорбции. Граница между двумя фазами представляет собой особое состояние вещества, занимающее промежуточное положение между взаимодействующими фазами. Для такого промежуточного состояния вещества характерны наличие флуктуаций, сложная природа корреляций, обусловленных пространственной неоднородностью, отсутствие традиционной структуры иерархии времён релаксации. Сложный характер пространственных и временных корреляций приводит к появлению эффектов памяти и самоорганизации. Описание таких свойств требует выхода за рамки традиционных методов статистической физики.

В статье показано, что в рамках предложенного формализма дробного интегро-дифференцирования удается моделировать ранее известные процессы и осуществить их нетривиальное обобщение. Переход к дробным производным фактически означает принципиально новый способ количественного описания нелокальных по времени и пространству процессов. Множество решений дифференциальных уравнений дробного порядка используется как базисная система функций для параметрического представления экспериментально установленных временных зависимостей. Такое разложение устанавливает зависимость показателя дробности производной от времени и параметров теории. Предлагаемый подход позволяет из интегральных данных восстановить информацию микроскопического уровня. В нашем случае удается восстановить коэффициент диффузии. Фундаментальность фрактальной размерности в том, что она определяет порядок дробной производной и дробного интеграла и является «управляющим» параметром теории, подобный аналогичному параметру в физике открытых систем [7]. Установление закономерностей изменения фрактальной размерности, зависящих от природы процесса сорбции, становится важной задачей, развиваемой концепции фрактала и требует отдельного рассмотрения.

Литература

1. Золотарев П.П.// Изв.АН СССР. Сер. Химич. 1968.№ 10. С.2408.
2. Золотарев П.П.// Изв.АН СССР. Сер. Химич. 1970.№ 8. С.1703.
3. Кокотов Ю.А., Золотарев П.П.. Елькин Г.Е. Теоретические основы ионного обмена. Л.: Химия,1986.280 с.
4. Мейланов Р.П. Свешникова Д. А., Шахбанов О.М.//ЖФХ. 2003, Т.77,№3,С.260-264.
5. Мейланов Р.П. Свешникова Д.А., Шахбанов О.М. Метод дифференциальных уравнений дробного порядка в описании кинетики сорбции.// Журнал физической химии. 2003 г. Т77. №2. С.260-264.

6. С.Г. Самко, А.А. Килбас. О.И. Маричев. Интегралы и производные дробного порядка и некоторые их приложения. Минск. «Наука и Техника». 1987. 688 с.
7. Ю.Л. Климонтович. Введение в физику открытых систем. М.:Янус-К. 2002. 284 с.