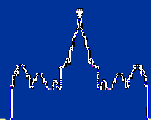


ГУМИНОВЫЕ ВЕЩЕСТВА И ХИМИЯ СЛОЖНЫХ СИСТЕМ: ВВОДНЫЙ КУРС

Лекция 2 Системные свойства гуминовых веществ

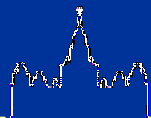
И.В. Перминова

Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова

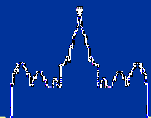
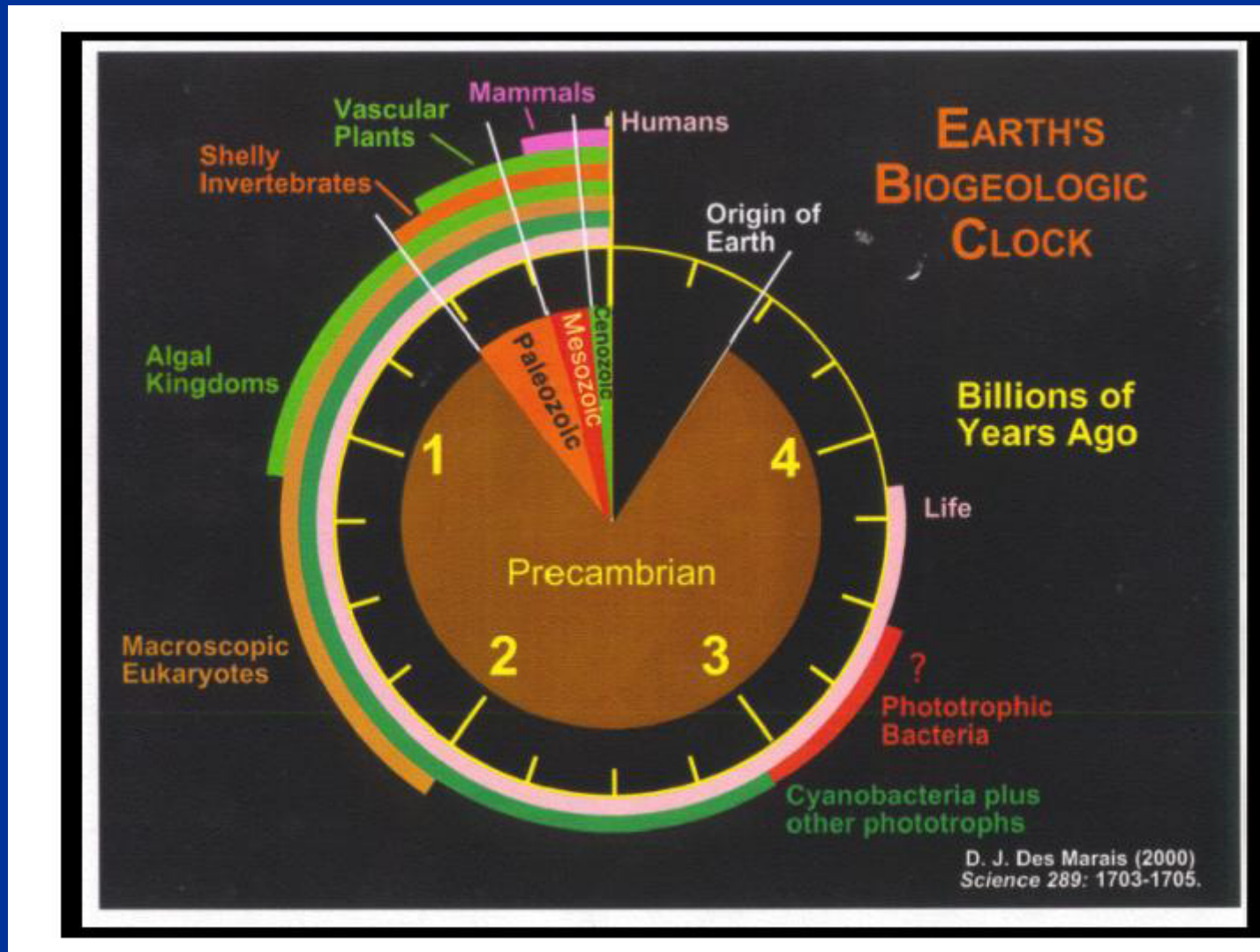


Содержание

- Определение системы
- Свойства систем
- Определение гуминовых веществ
- Свойства диссипативных систем
- Системные свойства гуминовых веществ
- Определение (рабочее) системы гуминовых веществ



Начало...



ОПРЕДЕЛЕНИЕ СИСТЕМЫ

Система – это множество элементов, находящихся в отношениях и связях друг с другом, которые образуют определенную целостность, единство (Садовский)

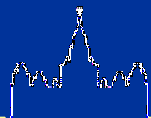
Система – это совокупность объектов, обладающая интегративным свойством (Жилин)

A system is a set of interacting elements that form an integrated whole (Hall and Fagen)

A system is a set of elements in dynamic interaction, organized for a goal (De Rosnay)



Система – это совокупность объектов, находящихся в динамическом взаимодействии друг с другом, организованных для выполнения цели (поддержания и воспроизведения интегративного свойства системы)



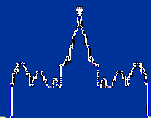
СВОЙСТВА СИСТЕМ ПО ОПРЕДЕЛЕНИЮ

**Наличие интегративного свойства,
не сводимого к сумме объектов**

**Наличие цели – поддержание
и воспроизведение
интегративного свойства,
благодаря чему система
функционирует и развивается**

**Наличие множества
взаимодействующих между
собой объектов**

**Наличие системы взаимосвязей,
внутренней организации системы,
направленной на выполнение
цели**



СВОЙСТВА СИСТЕМ (из Wikipedia – в сети)

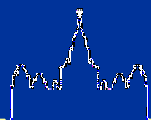
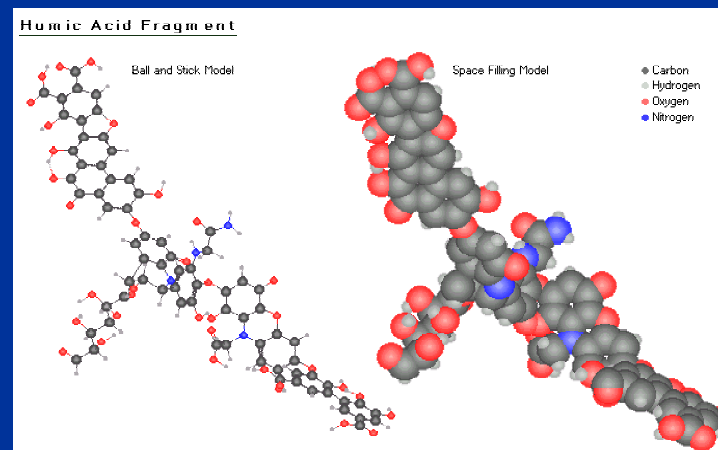
1. **целостность** — первичность целого по отношению к частям;
2. **неаддитивность** — принципиальная несводимость свойств системы к сумме свойств составляющих её компонентов;
3. **синергичность** — однонаправленность (или целенаправленность) действий компонентов усиливает эффективность функционирования системы;
4. **эмерджентность** — цели (функции) компонентов системы не всегда совпадают с целями (функциями) системы;
5. **мультипликативность** — как позитивные, так и негативные эффекты функционирования компонентов в системе обладают свойством умножения, а не сложения;
6. **взаимодействие и взаимозависимость** системы и внешней среды;
7. **структурность** — возможно разложение системы на компоненты;
8. **иерархичность** — каждый компонент системы может рассматриваться как система (подсистема) более широкой глобальной системы;
9. **непрерывность** функционирования и эволюции;
10. **целенаправленность**;
11. **адаптивность** — стремление к состоянию устойчивого равновесия, которое предполагает адаптацию параметров системы к изменяющимся параметрам внешней среды (однако «неустойчивость» может выступать и в качестве условия динамического развития);
12. **альтернативность** путей функционирования и развития;
13. **приоритет интересов системы более широкого (глобального) уровня** перед интересами её компонентов;
14. **надёжность** — функционирования системы при выходе из строя одной из компонент, сохраняемость проектных значений параметров системы в течение запланированного периода времени

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ГУМИНОВЫХ ВЕЩЕСТВ

Гуминовые вещества – это более или менее темнокрашенные азотсодержащие высокомолекулярные соединения преимущественно кислотной природы
(Орлов Д.С. , 1990, с.48)

Humic substances – a series of relatively high molecular weight, yellow to black colored substances formed (in soil) by secondary synthesis reactions.
(Stevenson, 1994, p. 33)

Humic substances are a general category of naturally occurring, biogenic, heterogeneous organic substances generally characterized as yellow to black in colour, of high molecular weight, and refractory.
(Aiken et al. 1985)



ИНТЕГРАТИВНЫЕ СВОЙСТВА ГУМИНОВЫХ ВЕЩЕСТВ?????????? (перечислены в процессе дискуссии)

1) устойчивость к биоразложению в условиях высокой биологической активности (Шинкарев А.А.)

Поправки к первому признаку:

динамическая устойчивость к биоразложению

относительная устойчивость к биоразложению

кинетическая устойчивость к биоразложению

2) Различие в физиологической активности целого и фракций

3) Комплексность/сложность свойств ГВ

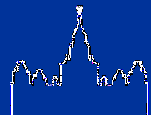
СИСТЕМНЫЕ СВОЙСТВА ГУМИНОВЫХ ВЕЩЕСТВ (ПО ОПРЕДЕЛЕНИЮ)

Системообразующий признак гуминовых веществ (интегративное свойство) – кинетическая устойчивость к биохимическому разложению в условиях высокой биологической активности

Цель системы гуминовых веществ – поддержание кинетической устойчивости к биохимическому разложению

Множественность индивидуальных компонентов (фракций)

Наличие множества разнотипных взаимодействий между компонентами (ковалентные, ионные, водородные, ван-дер-ваальсовы связи)



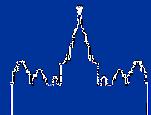
ФУНКЦИЯ ГУМИНОВЫХ ВЕЩЕСТВ В СИСТЕМЕ «ОРГАНИЧЕСКОЕ ВЕЩЕСТВО»

Функция системы гуминовых веществ –

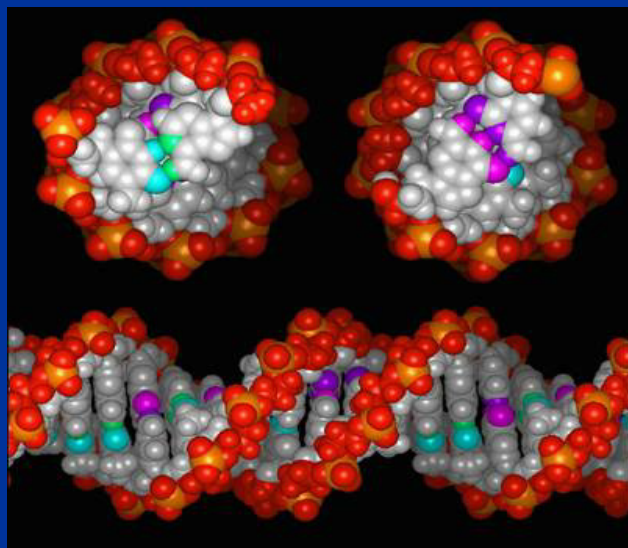
создание и поддержание резервуара органических соединений - продуктов «вторичного» синтеза, образуемых при разложении остатков живых организмов под воздействием микроорганизмов и абиотических факторов среды

Способ реализации функции –

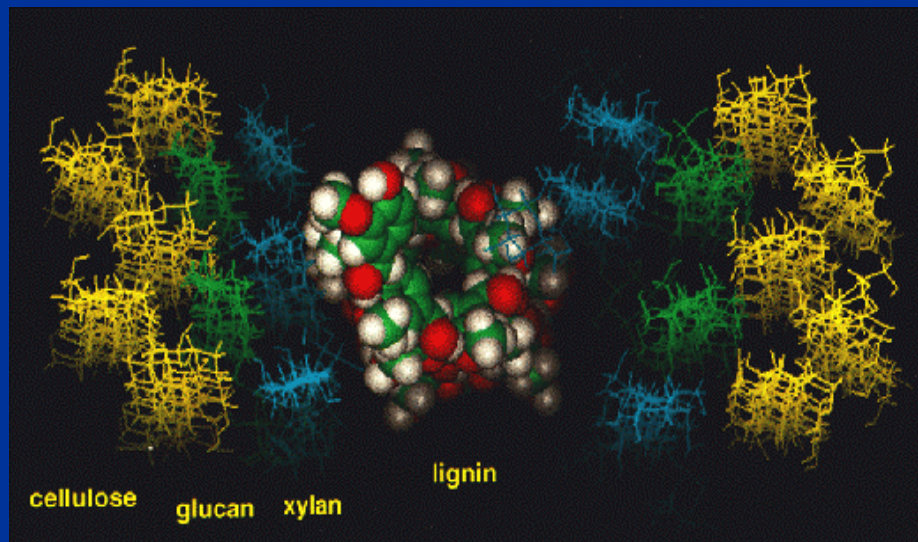
создание высокого уровня неупорядоченности структуры (поливариантность), препятствующего появлению ферментов, специализированных на разложении ГВ



ГЕНЕРАЦИЯ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СТРУКТУР

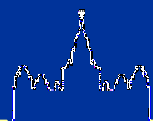
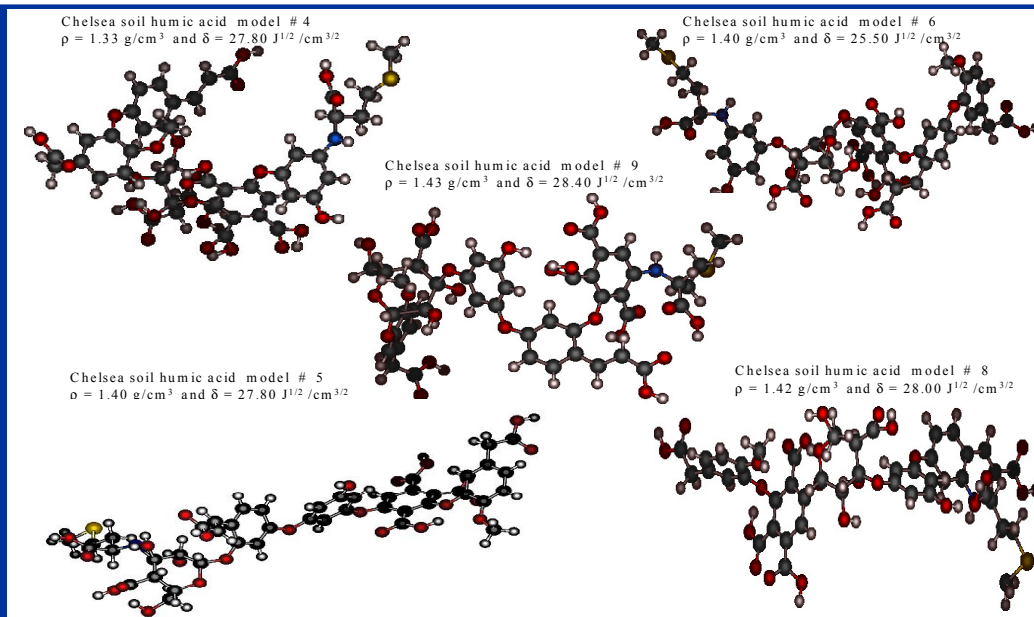


+



$\text{CO}_2, \text{H}_2\text{O}, \text{NH}_3$

+



СВОЙСТВА ОТКРЫТЫХ СИСТЕМ

Открытые системы, в которых наблюдается прирост энтропии, называют **диссипативными**. В таких системах энергия упорядоченного движения переходит в энергию неупорядоченного хаотического движения, в тепло.

Если отток энтропии превысит ее внутренний рост, начинают происходить **самоорганизационные процессы**, создание диссипативных структур.

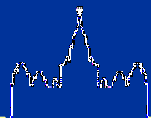
"Пригожин назвал эти системы "диссипативными структурами", чтобы отразить тот факт, что они поддерживают и развивают свою структуру посредством разрушения других структур в процессе метаболизма, и таким образом создают энтропию – беспорядок, которая затем рассеивается в форме отходов.

В диссипативных химических структурах динамика самоорганизации представлена в своей простейшей форме, проявляя, однако, большинство характерных признаков жизни - самовосстановление, адаптацию, эволюцию и даже примитивные формы "ментальных" процессов. Единственная причина, почему они не считаются живыми - это то, что они не воспроизводят себя или не формируют клетки. Таким образом, эти удивительные системы представляют собой промежуточное звено между живой и неживой материей". (Фритьоф Капра «Системный взгляд на жизнь»)

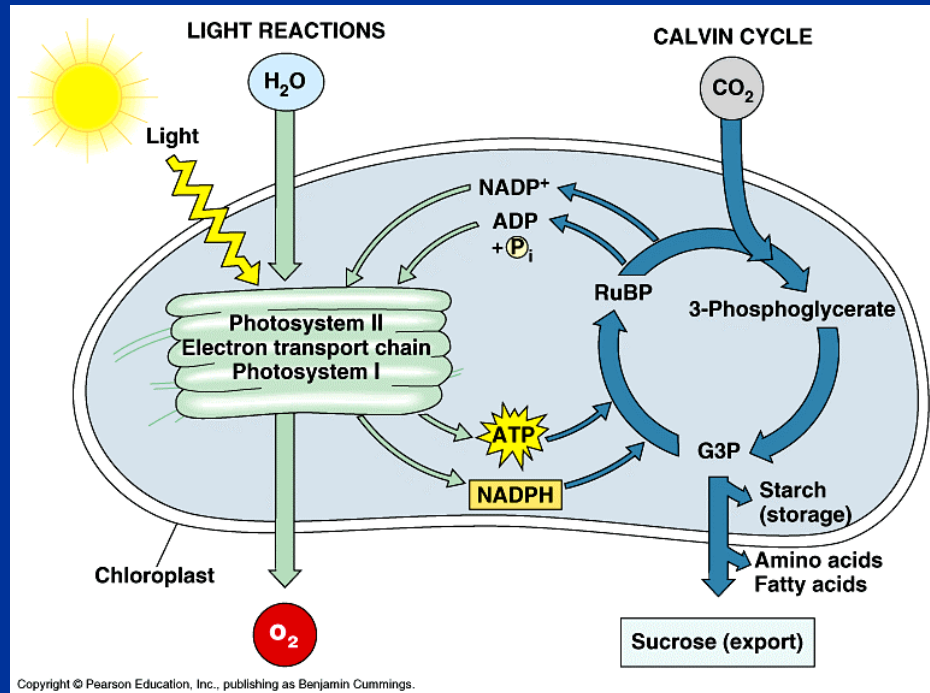
УСЛОВИЯ ВОЗНИКНОВЕНИЯ ДС

(Климонтович, 1994)

- **Диссипативные структуры** могут образовываться только в открытых системах. Только в них возможен приток энергии, компенсирующий потери за счет диссипации и обеспечивающий существование более упорядоченных состояний.
- **Диссипативные структуры** возникают в макроскопических системах, то есть в системах, состоящих из большого числа элементов (атомов, молекул, макромолекул, клеток и т.д.). Благодаря этому возможны коллективные - синергетические взаимодействия, необходимые для перестройки системы.
- **Диссипативные структуры** возникают лишь в системах, описываемых нелинейными уравнениями для макроскопических функций (например, кинетические уравнения Больцмана, уравнения газовой динамики и гидродинамики, уравнения Максвелла в электродинамике и т.д).
- Для возникновения **диссипативных структур** нелинейные уравнения должны при определенных значениях управляющих параметров допускать изменение симметрии решения (например, переход от молекулярного теплопереноса к конвективному теплопереносу по ячейкам Бенара).



СИНТЕЗ БИОМАССЫ – ИСТОЧНИКА ГУМИНОВЫХ ВЕЩЕСТВ



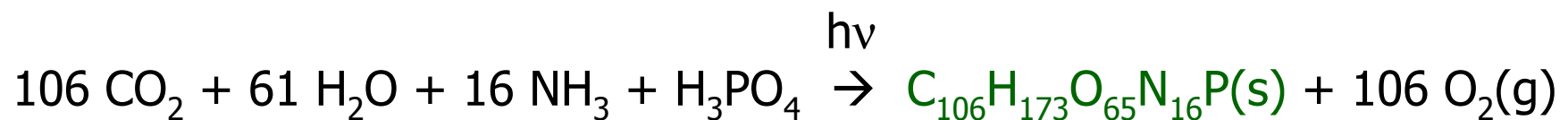
Брутто-формула биомассы

морского фитопланктона:



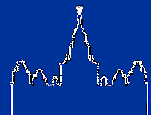
(corrected Redfield formula)

Credit to: E.M.Perdue



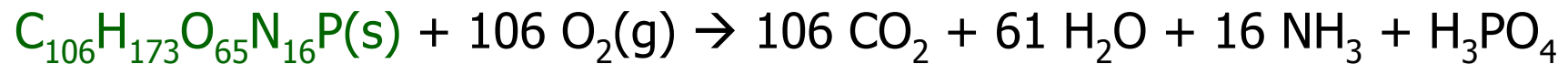
Biomass Heating Value

~20 GJ/dry tonn HHV, or 18.5 GJ/t LHV at 10% moisture (ash free)



РАЗЛОЖЕНИЕ БИОМАССЫ

Окисление до низкомолекулярных соединений
(максимальный рост энтропии)



$$S = k \cdot \ln W \Rightarrow \Delta S = k \cdot \ln(W_t/W_0),$$

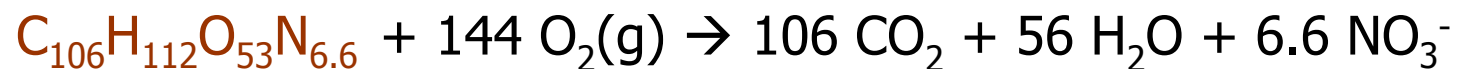
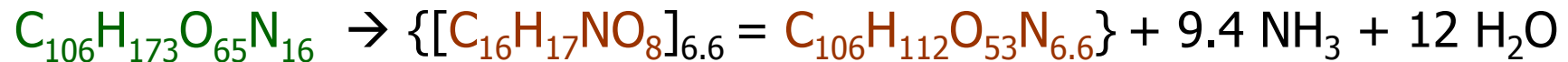
где k – постоянная Больцмана, W – число микросостояний в данном макросостоянии

G_{\max}

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

G_{\min}

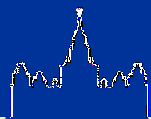
Разложение с образованием гуминовых веществ -
- самоорганизация – минимизация производства энтропии



$$\Delta G = \sum \Delta G_i$$

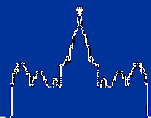
$$i = 1, \dots, n$$

G_{\max}



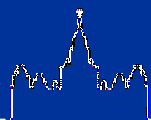
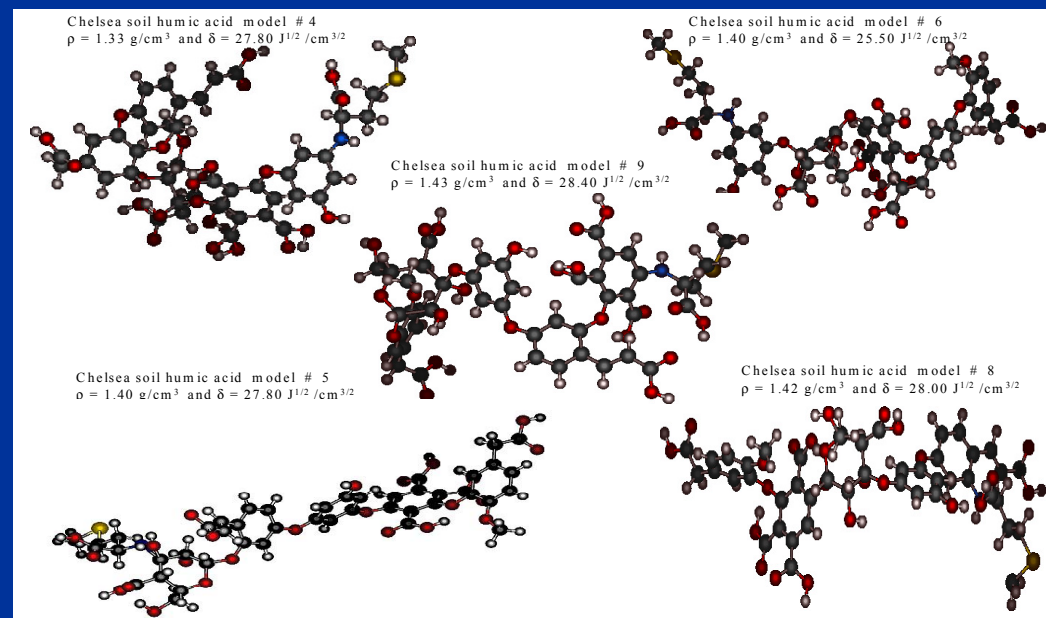
ПРИЗНАКИ САМООРГАНИЗАЦИИ

- **Отсутствие внешнего контроля** (автономность)
- **Динамичность процесса** (эволюция во времени)
- **Колебания** (поиск значений параметров/шум)
- **Возникновение симметрии** (потеря свободы/появление разнородности)
- **Глобальный порядок** (возникновение из локальных взаимодействий)
- **Рассеивание** (использование энергии/неравновесные процессы)
- **Нестабильность** (самоусиливающиеся эффекты/нелинейность)
- **Несколько положений равновесия** (много аттракторов)
- **Критичность** (краевые эффекты/фазовые переходы)
- **Избыточность** (нечувствительность к повреждениям)
- **Самостоятельность** (восстановление/механизмы воспроизведения)
- **Адаптивность** (функциональность/учёт внешних изменений)
- **Сложность** (много одновременных критериев или целей)
- **Иерархичность** (множественные уровни самоорганизации)



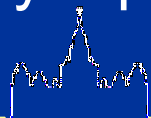
СИСТЕМНОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ГУМИНОВЫХ ВЕЩЕСТВ

Гуминовые вещества - это сложные системы природных органических или минерал-органических соединений, кинетически устойчивых к биоразложению, образующихся в результате вторичного синтеза путем самоорганизации в молекулярные ансамбли с высокой степенью неупорядоченности структуры и полидисперсности молекулярных масс .



ВЫВОДЫ

1. Гуминовые вещества – сложные диссипативные системы, образующиеся в процессе разрушения высокоупорядоченных живых систем.
2. Интегративный признак системы гуминовых веществ – кинетическая устойчивость к биохимическому разложению.
3. Функция гуминовых веществ в системе «планетарное органическое вещество» – создание и поддержание резервуара органических соединений в виде продуктов «вторичного синтеза».
4. Реализация функции достигается путем самоорганизации разлагающихся остатков живого органического вещества в молекулярные ансамбли с высокой степенью неупорядоченности структуры и полидисперсности молекулярных масс.



РЕКОМЕНДОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- Пригожин И. От существующего к возникающему. М.: Наука, 1985.
- Хакен Г. Синергетика. М: Мир, 1980.
- Климонтович Ю.Л. Статистическая теория открытых систем. М.: Янус, 1995.
- Климонтович Ю.Л. Физика открытых систем. *Успехи физических наук*. 1966. Т. 168.
- Самоорганизация и наука . Под ред. И.Г. Акчурина и В.И. Аршинова. М.: Арго, 1994.
- Руденко А.П. Самоорганизация и прогрессивная химическая эволюция открытых каталитических систем. 1999. В сб. «Синергетика». Том 2. М. Изд-во МГУ. С. 17-35.
- Шинкарев А.А. 2005. Теоретико-экспериментальные исследования фракционного состава органических компонентов почв лесостепи Среднего Приволжья. Автореферат докт. дисс. Ростовский государственный университет. Ростов-на-Дону

