

• увеличение техносферы за счет биосферы.

Конечно, существует такой вариант развития, при котором гибель биосферы планеты не будет означать гибель человека. Это станет возможным, если люди смогут переселиться на другие планеты (что всерьез рассматривали представители русского космизма, такие как К.Э. Циолковский и Н.Ф. Федоров). Для реализации данного проекта необходимо:

- наличие в космическом пространстве планеты, схожей по всем жизненно необходимым характеристикам с Землей;

достижение человечеством такого уровня развития техники, при котором станут возможны межзвездные полеты.

При кризисном состоянии биосферы еще возможно продолжение существования цивилизации, но при условии высочайшего развития техники, которая может позволить создать искусственную среду обитания на Земле или других, даже безжизненных планетах. Переселение на безжизненные космические объекты необходимо только при угрозе перенаселения или полного уничтожения Земли, т.к. искусственную биосферу легче и выгоднее создавать здесь на планете, чем где-то на другом конце Солнечной системы или Галактики.

Однако реализация вышеперечисленных вариантов на данный момент развития представляются фантастичными. Возможность дальнейшего существования человеческой цивилизации связывается нами все-таки с преодолением экологического кризиса.

Сама по себе данная проблема имеет в своей основе две взаимосвязанные составляющие — духовную и материальную. Первая из

указанных составляющих является доминирующей и связывается с особенностями духовного мира человека:

– его мировоззрения, ориентированного на антропоцентризм и представлением себя полноправным хозяином планеты с соответствующими правами по преобразованию окружающей среды по своему желанию и разумению;

– творческой активности, выражающейся в постоянном изобретательстве в сфере материального производства;

– неисчерпаемости потребностей, стремлением к их удовлетворению, комфорту.

Материальная составляющая является воплощением духовной и проявляется в разрушительном воздействии на биосферу различных техногенных объектов, созданных человеком.

Для решения экологического кризиса, на наш взгляд, необходимо:

– объединение всего человечества в борьбе за свое существование;

– формирование нового типа духовности, предполагающего высокую моральную ответственность каждого человека за судьбу цивилизации;

– наличие новой системы ценностей, основанной на экологическом императиве, как основной системы моральных ограничений в развитии цивилизации;

– создание новой парадигмы образования, роль которой будет заключаться во внедрение в сознание человека экологических норм;

– реализация духовного воспитания, которое через воплощение в материальном производстве, позволит избежать углубления экологического кризиса.

## Химические науки

### ТЕОРИЯ ГРАФОВ В ХИМИИ

**Виноградова М.Г.**

*Тверской государственный университет  
Тверь, Россия*

За последние десятилетия в теоретической химии широкое распространение получили представления топологии и теории графов. Они полезны при поиске количественных соотношений «структура — свойство» и «структура-активность», а также в решении теоретико-графовых и комбинаторно-алгебраических задач, возникающих в ходе сбора, хранения и об-

работки информации по структуре и свойствам веществ.

Графы служат, прежде всего, средством изображения молекул. При топологическом описании молекулы её изображают в виде молекулярного графа (МГ), где вершины соответствуют атомам, а рёбра — химическим связям (*теоретико-графовая модель молекулы*). Обычно в таком представлении рассматривают только скелетные атомы, например, углеводороды со «стёртыми» атомами водорода.

Валентность химических элементов накладывает на степени вершин определённые ограничения. У деревьев-алканов (связных графов, не имеющих циклов) степени вершин ( $r$ ) не

могут превышать четырёх ( $r = 1, 2, 3, 4$ ).

Графы можно задавать в *матричном виде*, что удобно при работе с ними на ЭВМ.

*Матрица смежности* вершин простого графа — это квадратная матрица  $A = [a_{\sigma\chi}]$  с элементами  $a_{\sigma\chi} = 1$ , если вершины  $\sigma$  и  $\chi$  соединены ребром,  $a_{\sigma\chi} = 0$  — в противном случае. *Матрица расстояний* — это квадратная матрица  $D = [d_{\sigma\chi}]$  с элементами  $d_{\sigma\chi}$ , определяемыми как минимальное число рёбер (наикратчайшее расстояние) между вершинами  $\sigma$  и  $\chi$ . Иногда применяются также матрицы смежности и расстояний по рёбрам ( $A^e$  и  $D^e$ ).

Вид матриц  $A$  и  $D$  ( $A^e$  и  $D^e$ ) зависит от способа нумерации вершин (или рёбер), что вызывает неудобство при обращении с ними. Для характеристики графа применяются инварианты графа — топологические индексы (ТИ).

В настоящее время предложено много ТИ [1-4], например:

- число путей длины один

$$p_1 = x_{cc_0} = m = n-1;$$

- число путей длины два

$$p_2 = x_{cc_1} = (1/2)\sum_{i=1}^4 i(i-1)k_i = k_2 + 3k_3 + 6k_4;$$

- число троек смежных ребер (с общей вершиной)

$$4$$

$$R = x_{ccc_1} = (1/6)\sum_{i=1}^4 i(i-1)(i-2)k_i = k_3 + 4k_4;$$

- Число Винера ( $W$ ), определяемое как полусумма элементов матрицы расстояний рассматриваемого графа:

$$n$$

$$W = (1/2)\sum d_{\sigma\rho} = p_1 + 2p_2 + 3p_3 + \dots$$

$$\sigma, \rho = 1$$

и т.д.

Методология изучения связи «структура-свойство» через топологические индексы в теоретико-графовом подходе включает в себя следующие этапы [1].

Выбор объектов исследования (обучающая выборка) и анализ состояния численных данных по свойству  $P$  для данного круга соединений.

Отбор ТИ с учетом их дискриминирующей способности, корреляционной способности со свойствами и т.д.

Изучение графических зависимостей «Свойство  $P$  — ТИ графа молекуль», например,  $P$  от  $n$  — числа скелетных атомов,  $P$  от  $W$  — числа Винера и т.п.

Установление функциональной (аналитической) зависимости  $P = f(\text{ТИ})$ , например,

$$P = a(\text{ТИ}) + b,$$

$$P = a \ln(\text{ТИ}) + b,$$

$$P = a(\text{ТИ})_1 + b(\text{ТИ})_2 + \dots + n(\text{ТИ})_n + c$$

и т.п. Здесь  $a, b, c$  — некоторые параметры (не следует путать их с параметрами аддитивных схем.), подлежащих определению.

Численные расчеты  $P$ , сопоставление рассчитанных значений с экспериментальными.

Предсказание свойств еще не изученных и даже не полученных соединений (вне данной выборки).

Топологические индексы также используются в построении аддитивных схем расчёта и прогнозирования. Они могут применяться при разработке новых лекарственных средств, при оценке канцерогенной активности некоторых химических веществ, для предсказания относительной устойчивости новых (ещё не синтезированных) соединений и т.д.

Следует однако помнить, что выбор ТИ нередко носит случайный характер; они могут не отражать важные структурные особенности молекул или дублировать информацию (получаемую с помощью других индексов), а расчетные схемы не имеют прочного теоретического фундамента и плохо поддаваться физико-химической интерпретации.

Коллектив кафедры физической химии ТвГУ уже в течение многих лет ведет расчетно-теоретическое исследование по проблеме «Связь свойств веществ со строением молекул: математическое (компьютерное) моделирование». В центре внимания целенаправленный поиск новых структур, алгоритмы решения ряда теоретико-графовых и комбинаторных задач, возникающих в ходе сбора и обработки информации о структуре и свойствах веществ, создание экспертных информационно-поисковых систем и баз данных, разработка количественных методов расчета и прогнозирования.

Нами были построены аддитивные схемы и найдены аналитические зависимости вида  $P = f(\text{ТИ})$  для ряда органических и других молекул. По полученным формулам выполнены численные расчеты физико-химических свойств рассматриваемых соединений, с [1, 5-7].

#### Список литературы

1. Виноградова М.Г., Папулов Ю.Г., Смоляков В.М. Количественные корреляции «структура свойство» алканов. Аддитивные схемы расчета. Тверь, 1999. 96 с.
2. Химические приложения топологии и теории графов / Под ред. Р. Кинга. М.: Мир, 1987. 560 с.
3. Применение теории графов в химии / Под ред. Н.С. Зефирова и С.И. Кучанова. Новосибирск: Наука, 1988. 306 с.
4. Станкевич М.И., Станкевич И.В., Зефиров Н.С. Топологические индексы в органической химии // Успехи химии. 1988. Т.57, №3, С.337-366.

5. Виноградова М.Г., Салтыкова М.Н. Теоретико-графовый подход в изучении взаимосвязи между строением и свойствами алкилсиланов. // *Фундаментальные исследования*, 2009. №1. С. 17-19.

6. Виноградова М.Г., Салтыкова М.Н., Ефремова А.О., Мальчевская О.А. Взаимосвязь между строением и свойствами алкилсиланов // *Успехи современного естествознания*, №1, 2010. С.136-137.

7. Виноградова М.Г., Салтыкова М.Н., Ефремова А.О. Корреляции «Структура — свойство» алкилсиланов: теоретико-графовый подход // *Успехи современного естествознания*, №3, 2010. С.141-142.

### ИЗУЧЕНИЕ КАВИТАЦИИ В НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ СТУДЕНТОВ

**Жаворонков В.И., Резник Е.Н.**

*Вятский государственный гуманитарный  
университет  
Киров, Россия*

При проведении научно-исследовательской работы студентов наибольший интерес для развития научного кругозора и формирования творческих характеристик профессионального сознания представляют темы затрагивающие смежные области различных наук. В Вятском государственном гуманитарном университете на протяжении ряда лет студенты, обучающиеся по специальностям «физика» и «химия», проводят исследования связанные с кавитацией в жидких средах.

Кавитация сопровождается рядом физико-химических эффектов таких как: сонолюминесценция, различные химические реакции, механическое воздействие, дегазация жидкости, эффективное и контролируемое диспергирование фаз. Все эти эффекты интенсивно изучаются и широко используются в науке и технике. Однако до сих пор не решены многие, связанные с ними проблемы, имеющие важное теоретическое и практическое значение.

Сравнительно несложное оборудование, позволяющее проводить исследования на достаточно глубоком уровне, и ценность практической реализации результатов делает кавитацию доступным и интересным объектом студенческой науки.

Были проведены экспериментальные исследования по обнаружению и регистрации сонолюминесценции в глицерине, влиянию кавитации на адсорбционные свойства активирован-

ного угля, изучались деструкция полисахаридов и холодный крекинг нефти, происходящие под действием ультразвука. В настоящее время исследуется образование прямых и обратных эмульсий растительного масла и воды, такие эмульсии находят применение в пищевой промышленности. Применение ультразвука позволяет в перспективе получать достаточно устойчивые системы без применения эмульгаторов, что важно как с экономической, так и экологической точки зрения.

По результатам исследований защищены три выпускные квалификационные работы, сделано несколько докладов на международных и всероссийских конференциях, получен диплом научно технической выставки.

### ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ НЕФТЕПРОДУКТОВ В ПОЧВЕ С УЧЕТОМ ИХ КАЧЕСТВЕННОГО СОСТАВА

**Околелова А.А.**

*Волгоградский государственный  
технический университет*

Существуют методики, по которым долю нефтепродуктов в почве определяют по содержанию в ней органического углерода. Нефтепродукты содержат не только углерод. Значит, их концентрация будет больше. Предлагаем для учета количества нефтепродуктов (а не только углерода) ввести поправочный коэффициент  $K_n$  — коэффициент накопления нефтепродуктов в почве и формулу его определения:

$$K_n = 100/n,$$

где  $K_n$  — коэффициент накопления нефтепродуктов в почве;  $n$  — суммарная доля углерода всех индивидуальных углеводородов, входящих в состав нефти, %; 100 — поправочный коэффициент.

Расчет суммарной доли углерода представлен на примере нефти Коробковского месторождения Волгоградской области. Ее состав в массовых процентах: этана ( $C_2H_6$ ) — 2,30, пропана ( $C_3H_8$ ) — 19,60, изобутана ( $C_4H_{10}$ ) — 21,00, н-бутана ( $C_4H_{10}$ ) — 57,10. Долю углерода в молекуле этана рассчитывают по формуле:

$$\omega_{C(C_2H_6)} = \frac{28}{34} = 82,35\%,$$

где  $\omega_{C(C_2H_6)}$  — доля углерода в молекуле этана; 28 — атомный вес углерода, 34 — атомный вес этана.

Для определения процентного содержа-