

Экологическая культура применительно к процессам взаимодействия общества и природы предполагает реализацию новых принципов жизнедеятельности людей. Она несовместима со старой традицией покорения природы и предполагает гармонизацию трех видов взаимодействия природы и общества: использование природных богатств, охрану природы как естественной среды обитания человека, разумное регулирование природных процессов, их восстановление, сохранение, улучшение.

Это потребует переориентации всех видов жизнедеятельности человека, его менталитета, целей, идеалов, то есть мировоззрения. Природа в этом мировоззрении должна рассматриваться как самоценность, и ее преобразование должно санкционироваться высшими духовными смыслами, а не технократическими показателями, как это зачастую делается в современной культуре. Такая оценка природы должна быть имманент-

на самосознанию человека, а не только культуре. Природа должна оцениваться человеком как источник эстетических, нравственных и других идеалов. Гуманизм, при таком подходе, с необходимостью должен включать в себя ценности и идеалы экологического характера, то есть необходимо выйти за границы антропоцентрических ценностей и идеалов. Возможно, это будет биосфероцентрический менталитет и мировоззрение, где основная задача культуротворческой деятельности человека должна сводиться к развитию и установлению экологической системы самодостаточности человечества. Очевидно, что это – задача новой по духу культуры и нового по мировоззрению человека.

Список литературы

1. Актуальные проблемы культуры XX века. – М., 1993.
2. Печчи А. Человеческие качества. – М., 1985.
3. Хайдеггер М. Разговор на проселочной дороге. – М., 1991.

Химические науки

**ТЕОРЕТИКО-ГРАФОВЫЙ ПОДХОД
В ИЗУЧЕНИИ КОРРЕЛЯЦИЙ
СТРУКТУРА-СВОЙСТВО
ЗАМЕЩЕННЫХ АЛКИЛСИЛАНОВ**

Виноградова М.Г.

Тверской государственный университет,
Тверь, e-mail: mgvinog@mail.ru

Экспериментальные данные по физико-химическим, в частности термодинамическим свойствам органических веществ несмотря на кажущееся порой изобилие скудны и иногда весьма противоречивы, что делает актуальной задачу их расчётно-теоретического определения.

Изучение корреляций «структура – свойство» в теоретико-графовом подходе ведется обычно [1-4], через топологические индексы (ТИ). В настоящее время предложено много ТИ. Не все они имеют ясный физический смысл и равноценны по своей корреляционной способности со свойствами. В работе были рассмотрены следующие индексы:

- Число Винера

$$W = \sum_{i=1}^n d_{ii} + \left(\frac{1}{2}\right) \sum_{i,j=1}^n d_{ij}. \quad (1)$$

Здесь и далее d_{ii} , $d_{i\Box}$ – элементы матрицы расстояний вершинно-взвешенных графов, которые часто задаются как [5],

$$\begin{cases} 1 - \frac{6}{Z_i}, & \text{если } i=j \\ \sum_{k,l} K_{lm} = \sum_{k,l} \left(\frac{1}{B_{lm}} \cdot \frac{36}{Z_l Z_m} \right) + \left(\frac{1}{2} \right), & \text{если } i \neq j \end{cases}$$

где Z_i – заряд ядра i -го атома, B_{lm} – кратность связи $l-m$ ($B_{lm} = 1, 2, 3, 3/2$ соответственно для

простой, двойной, тройной и полуторной связи). Суммирование проводится по всем связям-ребрам образующим кратчайшую цепь между i -й и j -й вершинами (табл. 1).

Таблица 1

Значения d_{ii} и K_{lm} для атомов и связей

Атом	d_{ii}	Связь	K_{lm}
C	0	C-Si	0,429
Si	0,571	C-Cl	0,353
Cl	0,647	Si-Cl	0,151

- Число

$$W' = \sum_{i=1}^n (d_{ii})^2 + \left(\frac{1}{2}\right) \sum_{i,j=1}^n (d_{ij})^2; \quad (2)$$

- Индекс Харари

$$H = \sum_{i=1}^n (d_{ii})^{-2} + \left(\frac{1}{2}\right) \sum_{i,j=1}^n (d_{ij})^{-2}; \quad (3)$$

- Число троек смежных рёбер $R = xcsc_1$ и $R''' = xcclcl_1$.

Топологические индексы используют в построении аддитивных схем расчёта и прогнозирования [2, 6-9] или в корреляционных зависимостях вида $P = f(\text{ТИ})$, например,

$$P = a(\text{ТИ}) + b, \quad (4)$$

$$P = a(\text{ТИ})^2 + b(\text{ТИ}) + c, \quad (5)$$

$$P = b(\text{ТИ})^a, \quad (6)$$

$$P = a(\text{ТИ})_1 + b(\text{ТИ})_2 + \dots + n(\text{ТИ})_n + c \quad (7)$$

и т.п. Здесь a, b, c – некоторые параметры подлежащие определению.

При исследовании зависимостей (4)–(7) было выявлено уравнение, отвечающее наиболее тесной корреляционной связи между энтальпией образования, кДж/моль, хлорпроизводных алкилсиланов и ТИ :

$$\Delta_f H^\circ_{(г, 298 К)} = 13,358W - 5,718W' - 3,0698H - 77,791R + 472,078R'' - 169,749. \quad (8)$$

Средняя абсолютная ошибка расчета ($|\bar{\epsilon}|$) и максимальное отклонение (ϵ_{\max}) соответственно равны 5,75 кДж/моль и -12 кДж/моль.

Рассчитанные величины согласуются с экспериментальными и позволяют предсказать (в пределах ошибок опыта) недостающие значения свойств членов исследуемого ряда.

По уравнению (8) был выполнен расчет энтальпии образования ряда хлорпроизводных силана вида $ASiH_{2-l}Cl_l$ ($A = CH_3, C_2H_5, \dots$). Результаты расчета для первых 36 членов исследуемого ряда представлены в табл. 2.

Таблица 2

Результаты расчета по уравнению (8) энтальпий образования хлорпроизводных силана вида $ASiH_{2-l}Cl_l$ (кДж/моль)

Молекула	$\Delta_f H^\circ(г, 298 К),$ (кДж/моль)		Молекула	$\Delta_f H^\circ(г, 298 К),$ (кДж/моль)	
	Опыт [10]	Расчет		Опыт [10]	Расчет
CH_3SiH_2Cl	---	-322	$CH_3CH_2CH_2SiH_2Cl$	---	-305
CH_3SiHCl_2	---	-490	$CH_3CH_2CH_2SiHCl_2$	---	-470
CH_3SiCl_3	-215 ± 8	-215	$CH_3CH_2CH_2SiCl_3$	---	-194
$CH_3CH_2SiH_2Cl$	---	-306	$CH_3CH_2(CH_3)SiHCl$	-303 ± 13	-314
$CH_3CH_2SiHCl_2$	---	-468	$CH_3CH_2SiCl_2(CH_3)$	-481 ± 13	-479
$CH_3CH_2SiCl_3$	---	-660	$(CH_3)_2CHSiH_2Cl$	---	-287
$(CH_3)_2SiHCl$	---	-335	$(CH_3)_2CHSiHCl_2$	---	-431
$(CH_3)_2SiCl_2$	-506 ± 8	-505	$(CH_3)_2CHSiCl_3$	---	-157
$(CH_3)_3SiCl$	---	-637	$CH_3CH_2(CH_3)CHSiCl_3$	---	-175
$CH_3CH_2CH_2CH_2SiH_2Cl$	---	-356	$CH_3CH_2(CH_3)_2SiH_2Cl$	-362 ± 13	-352
$CH_3CH_2CH_2CH_2SiHCl_2$	---	-550	$(CH_3)_2CHCH_2SiH_2Cl$	---	-300
$CH_3CH_2CH_2CH_2SiCl_3$	---	-297	$(CH_3)_2CHCH_2SiHCl_2$	---	-484
$CH_3CH_2CH_2(CH_3)SiHCl$	---	-329	$(CH_3)_2CHCH_2SiCl_3$	---	-197
$CH_3CH_2CH_2(CH_3)SiCl_2$	---	-498	$(CH_3)_2CH(CH_3)SiHCl$	---	-282
$(CH_3CH_2)_2SiHCl$	-312 ± 13	-303	$(CH_3)_2CH(CH_3)SiCl_2$	---	-578
$(CH_3CH_2)_2SiCl_2$	---	-435	$(CH_3)_3CHSiH_2Cl$	---	-354
$CH_3CH_2(CH_3)CHSiH_2Cl$	---	-245	$(CH_3)_3CHSiHCl_2$	---	-611
$CH_3CH_2(CH_3)CHSiHCl_2$	---	-457	$(CH_3)_3CHSiCl_3$	---	-147

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 12-03-97518-р_центр_а).

Список литературы

1. Platt J.R. Prediction of isomeric differences in paraffins properties // J. Chem. Phys. – 1952. – № 3, V. 56 – P. 328–336.
2. Greenshields J.B. Molecular structure and properties of hydrocarbons / J.B. Greenshields, F.D. Rossini // J. Phys. Chem. – 1958. – V. 62. – P. 271–280.
3. Руврэ Д.Г. Химию прогнозирует топология // В мире науки (Scientific American). – 1986. №11 – С. 14–22.
4. Химические приложения топологии и теории графов / под ред. т.Р. Кинга. – М.: Мир, 1987. – 560 с.
5. Папулов, Ю.Г. Молекулярные графы / Ю.Г. Папулов, В.Р. Розенфельд, Т.К. Кеменева – Тверь: ТГУ, 1990. – 86 с.

6. Виноградова М.Г. Количественные корреляции «структура–свойство» алканов. Аддитивные схемы расчёта: Учебное пособие / М.Г. Виноградова, Ю.Г. Папулов, В.М. Смоляков. – Тверь: ТвГУ, 1999. – 96 с.

7. Смоленский Е.А. Применение теории графов к расчётам структурно-аддитивных свойств углеводородов // Журн. физ. химии. – 1964. – Т.38, №5. – С. 1288–1290.

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

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

10. Термические свойства кремнийорганических соединений / под ред. В.Н. Кострюкова и В.Г. Генцель. – М.: Научно-исслед. ин-т технико-экон. исследований. – 1973. – 168 с.