

Мудрецы советовали: «Оберегайте свой дух покоем, и тело само исправится» [2, 103].

Фактически то же самое говорилось и в греко-римской философии устами Сенеки: «...груз плоти, возрастая, угнетает дух и лишает его подвижности. Поэтому, в чем можешь, притесняй – Тело, и освобождай место для духа» [1, 172]. Итак, торжество разума, олицетворявшего собой телесность, в борьбе с верой, религией невольно породило пренебрежение духовностью. Поэтому для М.С. Орынбекова было ясно, что по мере разграничения человека и мира, исходная органическая связь человека с окружающим миром теряется, и он становится выброшенным на полосу отчуждения. Изначально принадлежащий человеку мир лишился его, своего центра и смысла, а к этому привел рост позитивного знания, мир науки и техники.

Это приходится специально подчеркивать, ибо оказалось, что даже ориентированные системы философии, делая акцент на проблеме духовности, тем не менее, часто теряли исходную направленность, уходя к сциентизму и панлогизму, которые так и остались внешними по отношению к внутреннему миру человека, его духовности. Н. Бердяев писал: «В германской идеалистической метафизике совсем не была поставлена проблема человека и личности, которые были подавлены универсальным безличным духом. Универсальное, общее опять по-иному, чем в греческой философии, победило индивидуальное, единичное, подлинно экзистенциальное. Философия духа стала философией объективного бытия» [3].

Одним из важнейших внутренних факторов формирования личностного самоопределения является рефлексия. Только осознавая свои мотивы, цели и идеалы, критически их осмысливая, человек ухватывает нить своей мотивации. Поэтому по-настоящему цельной, действующей на основе собственных убеждений, личность может стать только в результате рефлексивной индивидуализации. «Человеческая духовность вырастает из онтологических осно-

ваний бытия, однако, естественно, не является «бытийственным» феноменом, ибо она скорее относится к проблематике смыслов, идеалов и мировоззренческих ориентации человеческого существования. Это приводит к тому, что духовность оказывается родовым понятием по отношению к категориям духа и души, хотя грани между ними, безусловно, зачастую носят весьма относительный характер» [1, 175].

Ясно, что в понимании духовности мыслитель отталкивался не от разумных оснований познания, гносеологической деятельности разума, а от имманентных содержаний духовности, которые проявляются прежде всего в собственной духовной самобытности жизни людей, которая не может быть сведена к познавательной функции человека.

Это очень важно и ценно, ибо в чистом познавательном отношении аутентичная проблема духовности утопает в соотношении первичности и вторичности материи и сознания, объекта и субъекта и т.п. Справедливо писала В.Г. Федотова, что проблема духовности «утонула в доказательствах ее вторичности по отношению к материальному, в связи с чем возникла необходимость переосмысления этого понятия как характеристики деятельной способности человека, а не только как определенного качественного состояния сознания» [4].

Отрефлектированная индивидуализация не противостоит социализации, а является его наиболее полным и зрелым выражением. Нетрадиционность мыслей и действия, «кинакомыслие» и отклонение от сложившихся устаревших стереотипов – необходимые условия любой творческой деятельности.

Список литературы

1. Орынбеков М.С. Духовные основы консолидации казахов. – Алматы: ИД Аркаим, 2001. – 252 с.
2. Орынбеков М.С. История философской и общественной мысли Казахстана. – Алматы: Ана тілі, 1997. – 251 с. – С. 105.
3. Бердяев Н.А. Опыт эсхатологической метафизики // Царство Духа и царство Кесаря. – М.: Юнити, 1995. – С. 148.
4. Федотова Г.В. Мир культур против культуры мира // Свободная мысль. – 2003. – №9. – С. 48–55.

Химические науки

МЕТОД МНОГОУРОВНЕВОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В ОЦЕНКЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ РАСТВОРИТЕЛЕЙ. II*. ТЕПЛОЕМКОСТЬ

Танганов Б.Б.

Восточно-Сибирский государственный университет
технологий и управления, Улан-Удэ,
e-mail: tanganov@rambler.ru

В связи с дальнейшим развитием химических технологий все большее применение находят ор-

ганические растворители, например, дипольные апротонные растворители, характеризующиеся высокой растворяющей способностью по отношению ко многим классам химических соединений, средой для органического синтеза.

В данной работе продолжены исследования характеристик растворителей – оценены теплоемкости конденсированных сред методами:

а) основанными на использовании принципа соответственных состояний (ПСС)

– Роулинсона-Бонди [1,2]:

$$\frac{C_{pL} - C_p^0}{R} = 2,56 + 0,436(1 - T_r)^{-1} + \omega \left[2,91 + 4,28(1 - T_r)^{1/3} \cdot T_r^{-1} + 0,296(1 - T_r)^{-1} \right]; \quad (1)$$

– Штернлинга-Брауна (уравнение 2):

$$\frac{C_{pL} - C_p^0}{R} = (0,5 + 2,2\omega) \left[3,67 + 11,64(1 - T_r)^4 + 0,634(1 - T_r)^{-1} \right], \quad (2)$$

где C_{pL} – теплоемкость жидкости при постоянном давлении; C_p^0 – идеально-газовая теплоемкость; R – универсальная газовая постоянная; T_r – приведенная температура, $T_r = T/T_c$ (T_c – критическая температура); ω – фактор ацентричности Питцера.

б) групповых составляющих (ГС) Чью-Свенсона [3] и Миссенара [4]. Считается, что различные группы в молекулах химических соединений вносят определенный вклад в общую мольную теплоемкость независимо от присутствия других [5].

Кроме того, применен метод многоуровневого моделирования (ММУМ), разработанный нами ранее [6–9], позволяющий математически прогно-

зировать и моделировать те или иные химические процессы, а также оценивать отсутствующие (дефицитные) характеристики физико-химических, медицинских и биологических систем [10–13].

В табл. 1 представлены базисные характеристики исследуемых растворителей для теоретических оценок теплоемкостей методом многоуровневого моделирования:

- X_1 – молярная масса растворителя, г/моль;
- X_2 – температура кипения, К;
- X_3 – плотность, г/см³;
- X_4 – дипольный момент, D;
- X_5 – коэффициент преломления;
- X_6 – вязкость, сПз;
- X_7 – диэлектрическая постоянная.

Таблица 1

Базисные параметры дипольных апротонных растворителей для ММУМ

№ п/п	Растворитель	$M = X_1$	$T_{\text{кип}} = X_2$	$\rho = X_3$	$p = X_4$	$n_D = X_5$	$\eta = X_6$	ДП = X_7
1	H ₂ O	18,0	373,2	0,9971	1,84	1,3330	1,005	78,30
2	MeOH	32,0	338,1	0,7914	1,70	1,3288	0,541	32,60
3	EtOH	46,0	351,3	0,7895	1,69	1,3611	1,052	24,30
4	PrOH	60,1	370,2	0,7995	1,68	1,3854	1,968	20,33
5	BuOH	74,1	390,2	0,8058	1,66	1,3993	2,616	17,49
6	AmOH	88,1	411,0	0,809	1,65	1,4070	3,718	14,40
7	HeOH	102,2	430,5	0,8155	1,64	1,4158	4,314	12,50
8	ДМК	58,0	329,2	0,7920	2,88	1,3588	0,316	20,70
9	МЭК	72,1	352,6	0,8054	2,79	1,3789	0,428	18,40
10	МПК	86,2	375,5	0,8089	2,48	1,3902	0,500	15,45
11	МБК	100,1	400,5	0,8304	2,16	1,4360	0,542	14,60
12	ФА	45,0	466,0	1,1290	3,25	1,4453	3,310	109,5
13	N-МФА	59,0	456,0	1,0110	3,82	1,4319	1,650	182,4
14	ДМФА	73,1	425,5	0,9445	3,82	1,4269	0,796	36,70
15	АА	59,1	494,2	1,1590	3,60	1,4278 ^{78C}	1,320 ^{105C}	59,00 ^{83C}
16	N-МАО	73,1	479,0	0,9420	3,71	1,4277	3,385	179,0
17	ДМАО	87,1	438,5	0,9366	3,79	1,4351	0,919	37,80
18	ГМФТА	179,2	508,0	1,0253	5,37	1,4582	3,340	29,60
19	ДМСО	78,0	462,0	1,1014	4,30	1,4783	2,000	48,90
20	ТМС	120,0	558,0	1,2618	4,69	1,4742	10,13	42,00
21	N-МП	99,1	475,0	1,0327	4,09	1,4706	1,830	31,50
22	АН	41,0	353,1	0,7856	3,80	1,3441	0,345	37,50
23	ПК	102,0	514,7	1,0257	4,94	1,4212	2,510	64,90

Примечания: H₂O – вода, MeOH – метанол, EtOH – этанол, PrOH – пропанол, BuOH – бутанол, AmOH – пентанол, HeOH – гексанол, ДМК – ацетон, МЭК – метилэтилкетон, МПК – метилпропилкетон, МБК – метилбутилкетон, ФА – формамид, N-МФА – N – метилформамид, ДМФА – N, N – диметилформамид, ДМАО – N, N – диметилацетамид, ГМФТА – гексаметилацетамид, ДМСО – диметилсульфоксид, ТМС – тетраметилсульфон (сульфолан), МП – N – метилпирролидон, АН – ацетонитрил, ПК – пропиленкарбонат.

В табл. 2 приведены значения теплоемкостей воды, спиртов, кетонов и других дипольных растворителей, оцененные методами ПСС и ГС (колонки 3–6), а также неэмпирическим уравнением МУМ (6) (колонка 7) на широком базисе:

$$C_{pL} = 1,79605 \cdot M + 0,07549 \cdot T_{\text{кип}} + 44,02771 \cdot \rho - 8,10254 \cdot p - 23,88629 \cdot n_D + 2,6820 \cdot \eta - 0,11827 \cdot \text{ДП} + 21,05423 (R_{\text{МУМ}} = 0,9949) \quad (3)$$

Таблица 2

Значения теплоемкостей растворителей C_{pl} (Дж/моль·К), оцененные методами Роулинсона-Бонди, Штернлинга-Брауна, Сью-Свенсона и Миссенара, а также методом МУМ

№ п/п	Растворитель	Расчеты теплоемкостей жидкостей по методам:				C_{pl} уп. 3 (ММУМ)	C_{pl} (лит)
		Роулинсона-Бонди	Штернлинга-Брауна	Чью-Свенсона	Миссенара		
1	Вода	92,97	94,35	59,41 ²⁰	58,99 ²⁰	72,13	75,31
2	MeOH	115,90	123,22	81,59	85,56	90,96	81,59
3	EtOH	143,34	151,58	111,96	113,80	118,69	119,24
4	PrOH	164,39	172,30	142,34	142,04	148,31	148,57
5	BuOH	186,06	192,38	172,72	170,29	177,15	186,26
6	AmOH	209,37	215,01	203,09	198,53	207,22	209,20
7	HeOH	231,92	236,81	233,46	226,77	236,00	232,50
8	ДМК	126,44	127,48	126,61	126,77	127,55	124,97
9	МЭК	156,19	157,36	156,98	155,02	156,05	161,08
10	МПК	178,15	179,53	187,36	183,26	186,04	-
11	МБК	-	-	217,73	211,50	215,56	211,50
12	ФА	120,75	130,04	126,19	120,92	121,83	120,92
13	N-МФА	134,01	140,45	148,36	150,83	123,66	-
14	ДМФА	156,35	162,63	172,63	149,79	158,81	156,69
15	АА	134,56	141,29	148,36	147,90	148,82	-
16	N-МАО	159,16	169,20	170,54	202,92	153,72	-
17	ДМАО	185,98	198,28	194,81	176,77	184,83	-
18	ГМФТА	233,22	256,19	-	-	353,51	-
19	ДМСО	141,92	143,84	142,25	151,46	173,94	-
20	ТМС	156,27	164,18	207,53	210,87	283,24	-
21	N-МП	188,11	192,59	199,00	178,24	213,28	-
22	АН	106,90	108,82	94,97	98,53	90,33	92,80
23	ПК	-	-	211,37	197,69	213,35	-

Примечание. * Предыдущая работа «Метод многоуровневого моделирования в оценке физико-химических параметров растворителей. I. Энергия ионизации» опубликована в Международном журнале прикладных и фундаментальных исследований. – 2012. – №4. – С. 49–51.

Как видно, вычисленные методами ПСС и ГС значения теплоемкостей характеризуются разбросом между собой, в некоторых случаях – значительными отклонениями от литературных данных. В работе [5] было отмечено, что методы ПСС и ГС приемлемы в определенных диапазонах приведенных температур и оцениваются по разным уравнениям для полярных и неполярных жидкостей.

Исследуемые растворители отличаются друг от друга разной природой (вода, спирты, кетоны, азот-, фосфор-, серусодержащие конденсированные среды), полярностями – дипольными моментами, а также диэлектрическими постоянными. Несмотря на это, оцененные методом многоуровневого моделирования величины достаточно сопоставимы с литературными (колонки 7 и 8) с высокой вероятностью (0,9949).

Таким образом, установлено, что ММУМ, как и в предыдущей работе, вполне применим для оценки теплоемкостей жидкостей разной природы.

Список литературы

1. Rowlinson J.S. Liquids and Liquid Mixtures. – 2d ed. – Butterworth. – London, 1969.
2. Bondi A. Ind. Eng. Chem. Fundam. – 1966. – 5. – P. 443.
3. Chueh C.F., Swanson A.C. Can. J. Chem. Eng. – 1973. – 51. – P. 596.
4. Missenard F.A. Chem. Rev. – 1965. – 260. – P. 5521.
5. Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей: справочное пособие / пер. с англ. под ред.

Б.И. Соколова. – 3-е изд., перераб. и доп. – Л.: Химия, 1982. – 592 с., ил.

6. Танганов Б.Б. Оценка констант автопротолиза неводных растворителей посредством множественной регрессии // Журнал физической химии. – 1986. – Т.60. – С. 1435–1437; Russian J. Phys. Chem. – 1986. – V. 60(6). – P. 856–857.

7. Танганов Б.Б. Математические методы в химии. – Улан-Удэ: Изд. ВСГУ, 1999. – 104 с.

8. Танганов Б.Б. Взаимодействия в растворах электролитов: моделирование сольватационных процессов, равновесий в растворах полиэлектролитов и математическое прогнозирование: монография. – М.: Изд-во РАЕ, 2009. – 141 с.

9. Танганов Б.Б., Балданов М.М., Мохосоев М.В. Множественные регрессии физико-химических характеристик неводных растворителей на расширенном базисе параметров // Журнал физической химии. – 1992. – Т.66. – №6. – С. 1476–1480; Russian J. Phys. Chem. – 1992. – V. 66(6). – P. 786–789.

10. Танганов Б.Б. Взаимодействия в растворах электролитов: моделирование сольватационных процессов, равновесий в растворах полиэлектролитов и математическое прогнозирование // Международный журнал экспериментального образования. Химические науки. – 2009. – №4. – С. 10–11.

11. Танганов Б.Б., Балданов М.М., Гребенщикова М.А., Балданова Д.М. Метод множественной регрессии в оценке энергий кристаллических решеток солей // Доклады СО АН ВШ. – 2003. – Вып. 2. – С. 18–25.

12. Цыренжапов А.В., Николаев С.М., Танганов Б.Б. Моделирование нарушения поверхностно-активных свойств желчи // Вестник КазНУ им. Аль-Фараби / Вычислительные технологии. – Т. 9. – Серия математика, механика, информатика. – №3(42). – С. 238–243.

13. Жапова О.И., Анцупова Т.П., Танганов Б.Б. Математическое прогнозирование содержания флавоноидов и некоторых макро- и микроэлементов в красодневе малом, произрастающем на территории Восточного и Западного Забайкалья // Актуальные проблемы современной науки: труды II-го Междунар. Форума. – Часть 29. – Биологические науки. – Самара, 2006. – С. 67–71.