

полоса, в области 3460-3430 см^{-1} , отвечает валентным колебаниям ассоциированных гидроксил-оксигидроксида алюминия. Полоса при 1595 см^{-1} принадлежит деформационным колебаниям воды, полосы при 1020, 860 и 735 см^{-1} вызваны деформационными колебаниями групп OH^- гидроксидов, связь $\text{Me} - \text{O}$ дает слабые полосы поглощения в области 510 – 450 см^{-1} . Кроме того, на ИК-спектрах отмечены полосы поглощения при 1375-1525, 1050 см^{-1} , свидетельствующие о понижении симметрии CO_3^{2-} групп, что говорит об образовании связей $\text{Me}-\text{OCO}_3$.

Таким образом, ИК-спектроскопическое исследование СОГ показало наличие деформационных колебаний гидроксильных групп, что позволяет отнести их к истинным гидроксидам. Полученные результаты показывают возможность применения полученного магний-алюминиевого сорбента со структурой гидроталькита в качестве сорбента.

ТЕРМОХИМИЧЕСКАЯ КИНЕТИКА РАДИКАЛЬНЫХ РЕАКЦИЙ: КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

М.Г. Виноградова, Д.Р. Папулова

*Тверской государственный
университет
Тверь, Россия*

Экспериментальная кинетика не в состоянии удовлетворить все возрастающие запросы в новых данных. Систематические сведения о термодинамических и термокинетических характеристиках по отдельным классам органических (и иных) соединений весьма скудны и в ряде случаев противоречивы [1-5]. Так, для молекул галогензамещенных метана согласно [4] известны 19 значений энтальпий образова-

ния $\Delta_f H_{298}^0$ (из 70) в газовой фазе, для монорадикалов этих замещенных согласно [5] – 17 значений $\Delta_f H_{298}^0$ (из 35), из которых 10 могут быть рекомендованы. Согласно [3] по энергиям разрыва связей (D) в галогензамещенных метана имеются 14 значений D_{298} для связей C-H (из 35), 13 значений D_{298} для связей C-F (из 35), 12 значений D_{298} для связей C-Cl (из 35), 13 значений D_{298} для связей C-Br (из 35) и 9 значений D_{298} для связей C-I (из 35). Еще более неполны сведения в рядах замещенных силана, моногермана, стананна и др. Поэтому нужны эффективные расчетные методы определения и предсказания рассматриваемых величин [6-10].

Скудность и разноречивость экспериментальных данных по свойствам отдельных классов соединений делает актуальной задачу их расчетно-теоретического определения.

В арсенале современной теоретической химии есть разные группы методов: методы квантовой химии, статистической термодинамики, а также феноменологические методы теории химического строения, методы теории графов и теории групп в химии, методы Монте-Карло и др., которые не исключают, а, скорее всего, дополняют друг друга.

В настоящей работе рассматриваются феноменологические методы, основывающиеся на идее разложения данного свойства по свойствам, приходящимся непосредственно на взаимодействия атомов: одноцентровые, двухцентровые (парные), трехцентровые (тройные) и т.д. (концепция попарных и более сложных взаимодействий атомов) [10].

Ранее нами была разработана общая методология расчета термодинамических и термокинетических характеристик радикальных реакций, включающая в себя следующие этапы [11]: 1) выбор объектов исследования с выде-

лением базовых соединений (например, метана, силана и т.д.), генерирование и систематизация структур (на базе теории перечисления графов); 2) анализ состояния числовых данных по рассматриваемым свойствам для данного круга соединений, их сбор, экспертная оценка, упорядочение по рядам сходных молекул и т.д.; 3) выбор методов расчета; 4) проведение численных расчетов; 5) установление закономерностей; 6) организация баз данных.

Целью работы является изучение количественных соотношений, связывающих ($\Delta_r H^\theta$) энтальпии образования молекул и свободных радикалов, (ϵ_{3-x}) энергии связей, а также (q) тепловые эффекты, (ϵ^\ddagger) энергии активации и ($\lg k$) логарифмы констант скоростей радикальных реакций (прежде всего, распада и замещения) со строением реагирующих частиц для соединений вида $\text{ЭН}_{4-1}\text{X}_1$, $\text{ЭН}_{4-1-m}\text{X}_1\text{Y}_m$, ... ; $\text{ЭН}_{3-1}\text{X}_1$, ... ; $\text{ЭН}_{2-1}\text{X}_1$, ... ($\text{Э} = \text{C}, \text{Si}, \text{Ge}, \text{Sn}; \text{X}, \text{Y}, \dots = \text{D}, \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}, \text{CH}_3, \text{NO}_2, \dots$) и др.

Важную роль в исследовании закономерностей, связывающих свойства вещества со строением молекул играют также графические зависимости. Обычно это зависимости свойства вещества (P) от числа скелетных атомов или степени замещения.

Эти зависимости позволяют наглядно оценить влияние вида и числа разных заместителей, а с практической стороны графическим путем получать недостающие значения свойств.

В работе продолжена экспертная оценка экспериментальных и расчетных данных, отбор наиболее надежных значений, их сопоставление и упорядочение по рядам сходных реакций, выявлены определенные закономерности, уточнены ранее проведенные вычисления величин q , ϵ^\ddagger и $\lg k$ и выполнены новые расчеты.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 10-03-97500-рЦентр-а)

Список литературы

1. Веденеев В.И., Кибкало А.А. Константы скорости газофазных мономолекулярных реакций. М.: Наука, 1972. -164 с.
2. Кондратьев В.Н. Константы скорости газофазных реакций. Справочник. М.: Наука, 1971. -352 с.
3. Гурвич Л.В., Карачевцев Г.В., Кондратьев В.Н., Лебедев Ю.А., Медведев В.А., Потапов В.К., Ходеев Ю.С. Энергии разрыва химических связей. Потенциалы ионизации и сродство к электрону. М.: Наука, 1974.- 351 с.
4. Pedley J.B., Naylor R.D., Kirby S.P. Thermochemical data of organic compounds. 2nd ed. London; New York: Chapman and Hall, 1986. - P. 87-232.
5. Орлов Ю.Д., Лебедев Ю.А., Сайфуллин И.Ш. Термохимия органических свободных радикалов. М.: Наука, 2001. - 304 с.
6. Глестон С., Лейдлер К., Эйринг Г. Теория абсолютных скоростей реакций. М.: ИЛ, 1948. -584 с.
7. Бенсон С. Термохимическая кинетика. М.: Мир, 1971. -308 с.
8. Кондратьев В.Н., Никитин Е.Е., Резников А.И., Уманский С.Я. Термические бимолекулярные реакции в газах. М.: Наука, 1976. - 192 с.
9. Храпковский Г.М. Марченко А.Г. Шамонов. Влияние молекулярной структуры на кинетические параметры мономолекулярного распада С- и О-нитросоединений. Казань: ФЭН, 1997. - 222 с.
10. Папулов Ю.Г., Виноградова М.Г. Расчетные методы в атом-атомном представлении. Тверь: ТвГУ. 2002. - 232 с.

11. Виноградова М.Г., Папулова Д.Р.. Методология расчета термодинамических характеристик радикальных реакций // Фундаментальные исследования. 2009. № 5. - С. 25-26.

**ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ
ХИМИЧЕСКАЯ ПОДГОТОВКА
СТУДЕНТОВ МЕДИЦИНСКОГО
ВУЗА – ВАЖНОЕ ЗВЕНО
ПРОЦЕССА ФОРМИРОВАНИЯ
СОВРЕМЕННОГО ВРАЧА**

Т.Н. Литвинова

*Кубанский государственный
медицинский университет кафедра
общей химии
Краснодар, Россия*

Важной современной тенденцией развития высшего образования является его фундаментализация. Под фундаментализацией образования мы понимаем приоритетность: теоретических дисциплин; структурно-организованных, функционально-значимых знаний; методологической компоненты, выработка обобщенных междисциплинарных умений; овладения универсальными методами исследования. Именно такой подход к образованию позволяет формировать у студентов системное мышление, мотивацию учения, ценностное отношение к фундаментальным теоретическим знаниям, потребности к их постоянному пополнению и применению на практике.

Основой фундаментализации химического образования в медицинском вузе мы считаем такую систему и структуру образования, которая ориентирована не на узкоспециализированные, а на общетеоретические и методологически важные, долго живущие и инвариантные знания, способствующие целостному восприятию научной картины мира, развитию интел-

лекта, творческой самореализации и адаптации к быстро меняющимся условиям жизни и профессиональной деятельности.

В медицинском вузе студенты изучают общую, биоорганическую, биологическую химию, а также клиническую биохимию. Знания студентами комплекса химических наук в их преемственности и взаимосвязи дают большую возможность, широкий простор в исследовании и практическом использовании различных явлений, свойств и закономерностей, способствуют развитию личности. Специфическими особенностями изучения химических дисциплин в медицинском вузе, по нашему мнению, являются:

- взаимозависимость между целями медицинского образования и химической подготовки в его структуре;
- универсальность и фундаментальность данных курсов, особенность построения их содержания в зависимости от характера и общих целей подготовки врача и его специализации;
- единство изучения химических объектов на микро- и макроуровнях с раскрытием разных форм их химической организации как единой системы и проявляемых ею разных функций (химических, биологических, биохимических, физиологических и др.) в зависимости от их природы, среды и условий;
- зависимость методологического, эвристического, прогностического, мировоззренческого потенциала фундаментальных химических знаний и от уровня их системности и структурной организации;
- зависимость дидактических и профессиональных ценностей от связи химических знаний и умений с реальной действительностью и практикой, в том числе медицин-