



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Дальневосточный федеральный университет»
(ДВФУ)

ШКОЛА ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК

«СОГЛАСОВАНО»
Руководитель ОП


(подпись) (А.А. Капустина)
« 11 » июля 2019 г.

«УТВЕРЖДАЮ»



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
История и методология химии
Направление подготовки 04.03.01 Химия
профиль «Фундаментальная химия»
Форма подготовки очная

курс 2 семестр 3
лекции 36 час.
практические занятия 18 час.
лабораторные работы час.
в том числе с использованием МАО лек. /пр. /лаб. час.
всего часов аудиторной нагрузки 54 час.
в том числе с использованием МАО час.
в том числе в электронной форме час.
самостоятельная работа 54 час.
в том числе на подготовку к экзамену 36 час.
курсовая работа / курсовой проект не предусмотрен
зачет не предусмотрен
экзамен 3 семестр

Рабочая программа составлена в соответствии с требованиями Федерального государственного образовательного стандарта, утвержденного приказом Министерства науки и высшего образования РФ от 17 июля 2017г. №671.

Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры Физической и аналитической химии ШЕН протокол протокол № 9 от « 26 » июня 2019 г.

ВРИО Заведующая кафедрой Физической и аналитической химии ШЕН профессор Соколова Л.И.
Составитель: д.х.н., профессор, Кондриков Н.Б.

Владивосток
2019

Оборотная сторона титульного листа РПУД

I. Рабочая программа пересмотрена на заседании кафедры:

Протокол от «_____» _____ 20__ г. № _____

Заведующий кафедрой _____
(подпись) (И.О. Фамилия)

II. Рабочая программа пересмотрена на заседании кафедры:

Протокол от «_____» _____ 20__ г. № _____

Заведующий кафедрой _____
(подпись) (И.О. Фамилия)

1.Цели и задачи освоения дисциплины:

Цели:

Цели освоения дисциплины (модуля) "История и методология химии" состоят в следующем: ознакомить с основными этапами развития химии с древнейшего времени до современного периода, показать, что история химии является частью химии и истории культуры, раскрыть роль исторического подхода в установлении взаимосвязи между естественнонаучными и гуманитарными предметами на примере химических исследований, показать неразрывность истории и методологии химии, рассмотреть эту дисциплину с мировоззренческих позиций и связать ее с естествознанием, философией и экономикой.

Задачи:

Достижение обозначенной цели представляется путем решения следующих задач:

- 1) сформировать у студентов представление о развитии химии с древнейших времен до современного периода.
- 2) рассмотреть периодизацию химических знаний
- 3) рассмотреть современное состояние химии

Для успешного изучения дисциплины « История и методология химии» у обучающихся должны быть сформированы знания, умения в области методологии химической науки и навыки использования исторических и философских подходов.

Планируемые результаты обучения по данной дисциплине (знания, умения, владения), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы, характеризуют этапы формирования следующих компетенций

Универсальные компетенции выпускников и индикаторы их достижения

Наименование категории (группы) универсальных компетенций	Код и наименование универсальной компетенции выпускника	Код и наименование индикатора достижения универсальной компетенции
--	--	---

<p>Системное и критическое мышление</p>	<p>УК-1 Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач</p>	<p>УК-1.1. Анализирует задачу, выделяя ее базовые составляющие, опираясь на методологию химии; УК-1.2. Определяет, интерпретирует и ранжирует информацию, требуемую для решения поставленной задачи с учетом исторического опыта; УК-1.3. Осуществляет поиск информации для решения поставленной задачи по различным типам запросов в течение необходимого исторического отрезка времени; УК-1.4. При обработке информации отличает факты от мнений, интерпретаций, оценок, формирует собственные мнения и суждения, аргументирует свои выводы и точку зрения, в том числе с применением философского понятийного аппарата. УК-1.5. Рассматривает и предлагает возможные варианты решения поставленной задачи, оценивая их достоинства и недостатки с учетом накопленного в науке исторического опыта.</p>
---	---	---

Для формирования вышеуказанных компетенций в рамках дисциплины «История и методология химии» применяются методы активного и интерактивного обучения: проблемные семинары, групповой разбор методологических и исторических проблем, написание рефератов по истории и современным областям химической науки и практики.

I. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ЧАСТИ КУРСА

(36 час)

Раздел 1. История развития химии (12 час)

Тема 1. Введение. Происхождение термина "химия". Определение химии как науки (4 часа)

Введение. Происхождение термина "химия". Определение химии как науки. Границы химии, физики и смежных разделов естествознания. История преподавания дисциплины "История химии". Два подхода в изучении истории химии - концептуальный и методологический. Происхождение термина "химия". Многозначность этого понятия. Греко-египетское происхождение. Китайский след. Границы химии и физики, химия и смежные разделы естествознания. Книги по истории химии. История преподавания дисциплины история химии.

Тема 2. Химия в Древнем мире. Химические знания и ремесла в первобытном обществе и в Древнем мире (4 часа)

Химия в Древнем мире, в средние века и в эпоху Возрождения. Химические знания и ремесла в первобытном обществе и в Древнем мире. Натурфилософы античного периода. Алхимический период в истории химии. Арабский период. Иатрохимия и техническая химия в XVI в. Парацельс и Агрикола. Алхимия в средневековье в Европе. Иатрохимия и техническая химия в XVI в. Развитие металлургии и химических производств в Европе. Появление химических знаний в Русском государстве. Отличие пути развития от европейского.

Тема 3. Химия XVII - XVIII вв (4 часа)

Период объединения. Химия XVII - XVIII вв. Возрождение атомистики. Работы Бойля (Химик-скептик). Теория флогистона. Развитие методов аналитической химии. Паяльная трубка. Пневматическая химия. Пневматическая ванна. Открытие кислорода, азота, хлора и других элементов (Шееле, Пристли, Каведиш). Работы Ломоносова, его роль в развитии российской науки. Химическая революция. Работы Лавуазье по горению, новая номенклатура.

Раздел 2 Становление научной химии(12 часов)

Тема 4. Химия начала XIX вв. Основные достижения химии XIX в.(4 часа)

Химия начала XIX вв. Становление научной химии. Основные достижения химии XIX в (общая характеристика). Закон постоянства состава. Полемика Бертолле и Пруста. Химическая атомистика Дальтона. Работы Берцелиуса, Авогадро. Открытие новых элементов. Вольтов столб. Развитие электрохимии. Работы Деви и Фарадея. Гей-Люссак и методы титриметрии.

Тема 5. Органическая химия в первой половине XIX в. (4 часа)

Органическая химия в первой половине XIX в. Опровержение витализма. Работы Либиха, Велера, Кольбе, Бертло. Теоретические представления в органической химии в начале XIX в. (теория радикалов, теория типов).

Классическая теория химического строения и ее развитие. Работы Кекуле, Купера, Бутлерова. Понятие валентности. Структурные формулы.

Тема 6. Химия во второй половине XIX в. (4 часа)

Химия во второй половине XIX в. Возникновение стереохимии (Вант-Гофф, Ле Бель). Координационная теория Вернера. Успехи экспериментальной органической химии в середине (Дюма, Зинин, Вюрц) и во второй половине XIX века (Гофман, Байер, Фишер. Возникновение и развитие промышленной органической химии. Органические красители. Сиреневое десятилетие. Возникновение термохимии, химической термодинамики, химической кинетики. Работы Гесса и Гиббса. Возникновение термохимии, химической термодинамики, химической кинетики. Основы теории растворов. Электрохимические исследования Нернста. Основы теории растворов (Вант-Гофф, Аррениус). Работы по термодинамике и электрохимические исследования Нернста. Гальванический элемент Ле-Кланше. Становление химии природных соединений, химии лекарственных веществ.

Раздел 3 Методологические проблемы химии(12 часов)

Тема 7. Концептуальные и методологические проблемы химической науки (3 часа)

Тема: Концептуальные и методологические проблемы химической науки. Характер химических законов - одних из основных законов природы, связанных с сохранением материи, массы и энергии, с законами движения и развития. Химические законы и теории как отражение состава, строения и химических свойств объектов химии, условий осуществления и природы химического акта и химической эволюции. Химические формы существования элементов в природе.

условие развития количественной теории. Компьютерные технологии синтеза.

Тема 8. Понятийный аппарат и его эволюция, формулы и другие знаковые средства в химии (3 часа)

Понятийный аппарат, формулы и другие знаковые средства в химии. Их роль в формировании химического знания. Основные понятия химии и их развитие (химический элемент, атом, ион, молекула, химическое соединение, вещество, валентность, химическое сродство, химическая связь, металл и металлоид, кислота и основание, мономер и полимер, реагент и катализатор, химическая и каталитическая система и т.д.). Формулы как знаковые модели в структурной химии. История появления химических символов.

Тема 10. Место химических объектов в иерархии форм существования материи (2 часа)

Типология объектов химии. Место химических объектов в иерархии форм существования материи. Атомно-молекулярный уровень структурной организации материи в химических объектах, дискретность химических объектов. Место химизма в иерархии форм движения материи. Химизм в биологической форме движения как фактор, обуславливающий явление жизни. Проявление химического движения в различных объектах природы (биохимия, геохимия, биохимия, экологическая химия, космохимия и др

Приоритет биохимии экологических проблем в концепции устойчивого развития общества..

Тема 11. Химия среди других наук естественного цикла (2 часа)

Тема: Химия среди других наук естественного цикла. Химия среди других наук, изучающих вещество. Химия в системе классификации научного знания. Индуктивные и дедуктивные системы познания. Связь химии с физикой (с молекулярно-кинетической теорией и термодинамикой, с электродинамикой, квантовой механикой и физикой твердого тела). "Зеленая химия" и химическая технология.

Тема 12 Эволюционно-синергетическая парадигма (2 часа)

Эволюционный катализ. Синергетика и ее язык. Синергетика и миропонимание. Хаос и порядок, роль флуктуаций. Диссипативные структуры по И. Пригожину. Нелинейность и бифуркации. Аттракторы, фракталы и другие понятия синергетики.

II. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ПРАКТИЧЕСКОЙ ЧАСТИ КУРСА И САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ

Практические занятия (18 час), 3 семестр

Раздел 1.

Занятие 1. Введение. Происхождение термина "химия". Определение химии как науки (2 часа).

Занятия 2-3. Химия в Древнем мире. Химические знания и ремесла в первобытном обществе и в Древнем мире. Химия XVII - XVIII вв (4 часа).

Занятия 4-5. Химия начала XIX вв. Основные достижения химии XIX в. Органическая химия в первой половине XIX в (4 часа).

Занятия 6-7. Химия во второй половине XIX в Концептуальные и методологические проблемы химической науки (4 часа)

Занятие 8. Химия среди других наук естественного цикла. Химия среди других наук, изучающих вещество. Химия в системе классификации научного знания. Индуктивные и дедуктивные системы познания Математизация и физикализация химических теорий и их роль в формировании химического знания.(2 часа)

Занятие 9. Эволюционный катализ. Синергетика и ее язык. Синергетика и миропонимание. Хаос и порядок, роль флуктуаций. Диссипативные структуры

по И. Пригожину. Нелинейность и бифуркации. Аттракторы, фракталы и другие понятия синергетики. (2 часа)

III. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ

Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся по дисциплине «История и методология химии включает в себя:

- план-график выполнения самостоятельной работы по дисциплине, в том числе примерные нормы времени на выполнение по каждому заданию;
- характеристика заданий для самостоятельной работы обучающихся и методические рекомендации по их выполнению;
- краткое содержание теоретического материала для самостоятельного изучения;
- критерии оценки выполнения самостоятельной работы.

План-график выполнения самостоятельной работы по дисциплине «История химии и ее современное состояние»

№ п/п	Дата/сроки выполнения	Вид самостоятельной работы	Примерные нормы времени на выполнение	Форма контроля
1	09.02-08.03	Подготовка к практическим занятиям 1-2	1 час	Собеседование УО 1
2.	09.03-05.04	Подготовка к практическим занятиям 3-4	1 час	Собеседование УО 1
3.	06.04- 03.05	Подготовка к практическим занятиям 5-6	1 час	Собеседование УО 1
4.	04.05-31.05	Подготовка к практическим занятиям 7-8	1 час	Собеседование УО 1
5.	01.06-14.06	Подготовка к практическому занятию 9.	1 час	Собеседование УО 1
6.	01.09-14.09	Подготовка к практическим занятиям 1-2	1 час	Собеседование УО 1
7.	15.09-28.09	Подготовка к практическим занятиям 1-2	1 час	Собеседование УО 1
8.	29.09-12.10	Подготовка к практическим занятиям 3-4	2 час	Собеседование УО 1
9.	13.10-26.10	Подготовка к практическим занятиям 3-4	1 час	Собеседование УО 1
10.	27.10-09.11	Подготовка к практическим занятиям 5-6	1 час	Собеседование УО 1
11.	10.11-23.11	Подготовка к прак-	2 час	Собеседование

		тическим занятиям 5-6		УО 1
12.	24.11-07.12	Подготовка к прак- тическим занятиям 7-8	1 час	Собеседование УО 1
13.	08.12-21.12	Подготовка к прак- тическим занятиям 7-8	2 час	Собеседование УО 1
14.	22.12-31.12	Подготовка к прак- тическим занятиям 9	2 час	Собеседование УО 1
15.	07.01-14.01	Подготовка к экза- мену	36 час	Экзамен

Задание на дом к практическим заданиям

Задание на дом к занятию №1

Просмотреть материал учебных пособий, учебников и подготовиться к обсуждению следующих вопросов:

Введение. Происхождение термина "химия". Определение химии как науки.

Задание на дом к занятиям №2-3

Просмотреть материал учебных пособий, учебников и подготовиться к обсуждению следующих вопросов:

Химия в Древнем мире. Химические знания и ремесла в первобытном обществе и в Древнем мире. Химия XVII - XVIII вв.

Задания на дом к занятиям 4-5.

Просмотреть материал учебных пособий, учебников и подготовиться к обсуждению следующих вопросов:

Химия начала XIX вв. Основные достижения химии XIX в. Органическая химия в первой половине XIX в

Задания на дом к занятиям 6-7.

Просмотреть материал учебных пособий, учебников и подготовиться к обсуждению следующих вопросов:

Химия во второй половине XIX в Концептуальные и методологические проблемы химической науки

Задание на дом к занятию 8.

Просмотреть материал учебных пособий, учебников и подготовиться к обсуждению следующих вопросов:

Математизация и физикализация химических теорий и их роль в формировании химического знания.

Задание на дом к занятию 9.

Просмотреть материал учебных пособий, учебников и подготовиться к обсуждению следующих вопросов:

Понятийный аппарат, формулы и другие знаковые средства в химии. Место химических объектов в иерархии форм существования материи.

..Теоретический материал для самостоятельного изучения и подготовки к практическим занятиям

Тема 1. Введение. Происхождение термина "химия". Определение химии как науки

Введение. Происхождение термина "химия". Определение химии как науки. Границы химии, физики и смежных разделов естествознания. История преподавания дисциплины "История химии". Два подхода в изучении истории химии - концептуальный и методологический. Происхождение термина "химия". Многозначность этого понятия. Греко-египетское происхождение. Китайский след. Границы химии и физики, химия и смежные разделы естествознания. Книги по истории химии. История преподавания дисциплины история химии.

Тема 2. Химия в Древнем мире. Химические знания и ремесла в первобытном обществе и в Древнем мире.

Химия в Древнем мире, в средние века и в эпоху Возрождения. Химические знания и ремесла в первобытном обществе и в Древнем мире. Натурфилософы античного периода. Алхимический период в истории химии. Арабский период. Иатрохимия и техническая химия в XVI в. Парацельс и Агрикола. Алхимия в средневековье в Европе. Иатрохимия и техническая химия в XVI в. Развитие металлургии и химических производств в Европе. Появление химических знаний в Русском государстве. Отличие пути развития от европейского.

Тема 3. Химия XVII - XVIII вв

Период объединения. Химия XVII - XVIII вв. Возрождение атомистики. Работы Бойля (Химик-скептик). Теория флогистона. Развитие методов аналитической химии. Паяльная трубка. Пневматическая химия. Пневматическая ванна. Открытие кислорода, азота, хлора и других элементов (Шееле, Пристли, Каведиш). Работы Ломоносова, его роль в развитии российской науки. Химическая революция. Работы Лавуазье по горению, новая номенклатура.

Тема 4. Химия начала XIX вв. Основные достижения химии XIX в. Интерактивный опрос по теме 1-3. лекционное занятие (2 часа(ов)):

Химия начала XIX вв. Становление научной химии. Основные достижения химии XIX в (общая характеристика). Закон постоянства состава.

Полемика Бертолле и Пруста. Химическая атомистика Дальтона. Работы Берцелиуса, Авогадро. Открытие новых элементов. Вольтов столб. Развитие электрохимии. Работы Деви и Фарадея. Гей-Люссак и методы титриметрии.

Тема 5. Органическая химия в первой половине XIX в.

Органическая химия в первой половине XIX в. Опровержение витализма. Работы Либиха, Велера, Кольбе, Бертло. Теоретические представления в органической химии в начале XIX в. (теория радикалов, теория типов). Классическая теория химического строения и ее развитие. Работы Кекуле, Купера, Бутлерова. Понятие валентности. Структурные формулы.

Тема 6. Химия во второй половине XIX в.

Химия во второй половине XIX в. Возникновение стереохимии (Вант-Гофф, Ле Бель). Координационная теория Вернера. Успехи экспериментальной органической химии в середине (Дюма, Зинин, Вюрц) и во второй половине XIX века (Гофман, Байер, Фишер). Возникновение и развитие промышленной органической химии. Органические красители. Сиреневое десятилетие. Возникновение термохимии, химической термодинамики, химической кинетики. Работы Гесса и Гиббса. Возникновение термохимии, химической термодинамики, химической кинетики. Основы теории растворов. Электрохимические исследования Нернста. Основы теории растворов (Вант-Гофф, Аррениус). Работы по термодинамике и электрохимические исследования Нернста. Гальванический элемент Ле-Кланше. Становление химии природных соединений, химии лекарственных веществ.

Тема 7. Концептуальные и методологические проблемы химической науки.

Тема: Концептуальные и методологические проблемы химической науки. Характер химических законов - одних из основных законов природы, связанных с сохранением материи, массы и энергии, с законами движения и развития. Химические законы и теории как отражение состава, строения и химических свойств объектов химии, условий осуществления и природы химического акта и химической эволюции. Химические формы существования элементов в природе.

Тема 8. Математизация и физикализация химических теорий и их роль в формировании химического знания.

10. Математизация и физикализация химических теорий и их роль в формировании химического знания. Создание математических моделей явления

(процессов) как средство познания и необходимое условие развития количественной теории. Компьютерные технологии синтеза.

Тема 9. Тема: Понятийный аппарат, формулы и другие знаковые средства в химии.

Понятийный аппарат, формулы и другие знаковые средства в химии. Их роль в формировании химического знания. Основные понятия химии и их развитие (химический элемент, атом, ион, молекула, химическое соединение, вещество, валентность, химическое сродство, химическая связь, металл и металлоид, кислота и основание, мономер и полимер, реагент и катализатор, химическая и каталитическая система и т.д.). Формулы как знаковые модели в структурной химии. История появления химических символов.

Тема 10. Тема: Место химических объектов в иерархии форм существования материи.

Типология объектов химии. Место химических объектов в иерархии форм существования материи. Атомно-молекулярный уровень структурной организации материи в химических объектах, дискретность химических объектов. Место химизма в иерархии форм движения материи. Химизм в биологической форме движения как фактор, обуславливающий явление жизни. Проявление химического движения в различных объектах природы (биохимия, геохимия, биохимия, экологическая химия, космохимия и др.). Приоритет биохимии экологических проблем в концепции устойчивого развития общества. Роль аналитической химии, современный уровень ее развития. Аналитическая химия как основной компонент в мировоззренческом базисе современного химика. Методология аналитической химии и доказательная база в науках о жизни.

Тема 11. Тема: Химия среди других наук естественного цикла.

Тема: Химия среди других наук естественного цикла. Химия среди других наук, изучающих вещество. Химия в системе классификации научного знания. Связь химии с физикой (с молекулярно-кинетической теорией и термодинамикой, с электродинамикой, квантовой механикой и физикой твердого тела). "Зеленая химия" и химическая технология.

Тема 12. Тема: Особенности современной химии.

Особенности современной химии. Значение современной химии для понимания происхождения жизни и ее эволюции. Роль современной химии в истолковании процессов жизнедеятельности. Химия в системе наук о жизни.

Проникновение химических знаний в смежные науки. Интеграционные процессы в науках и междисциплинарность базовых курсов по химическим наукам. Дифференциация химического знания, новые дисциплины и новые научные журналы как отражение этого процесса. Структура современного химического знания. Фундаментальные и прикладные исследования в химии. Условность приоритета, глобализация фундаментальной науки. Логистическая кривая и информационные потоки. Индекс цитирования, импакт-фактор журнала.

Примерное содержание теоретического материала, особенно методологических тем и вопросов.

Тема № 1. Введение. Задачи истории химии. Периодизация химических знаний. Методология химии. Особенности современной химии.

Historia est magistra vitae! – История – учитель жизни!

Не зная историю науки и ничего о возникновении химии, нельзя понять современную науку. Понимание противоречий следует из изучения исторических аспектов химии (да и вообще любой науки). Бесконечные явления, которые представляются нам новыми (в настоящее время) были предметом исследований и опытов предшественников; с другой стороны в старой литературе заключены бесконечные наблюдения, и мысли древних могут воскреснуть вновь в этой жизни. Если проще, то все новое – это хорошо забытое старое. Идея имеет более длительное существование, нежели нам кажется. Многие идеи, высказанные в древности, имеют жизнь и сегодня. Чтобы понять проблемы химии сегодня, нужно “заглянуть” в лабораторию древних предшественников.

История и методология химии – это завершающая стадия получения образования. Есть мнения о том, что химия не наука, а физика – наука... Но история и методология химии – жизненно необходимая дисциплина (имеется в виду для химика как ученого или педагога). Она нужна для понимания (в полном объеме) современных знаний по химии. Изучая этот предмет, начинающий исследователь может обозначить свою роль в науке, соотнести место этой науки с другими. “Молодые химики будут черпать знания из исторической химии”, – сказал Бутлеров.

История химии позволяет заново воссоздать химию в ее логическом единстве согласно новейшим интеграционным тенденциям в ее развитии. Эволюция химии как науки – это целостностный процесс, характеризующийся нарастающей мощностью потока знаний. Протекание этого процесса определяется множеством факторов и причин, и учет их и диалектически правильная оценка требует тщательного историко-научного и методологического анализа.

О подходах в изучении истории химии.

Историко-научный метод (анализ) осуществляется двумя различными подходами. Первый (традиционный) сводится к тому, что конечная цель (итог) исследования уже известна и формулируется на основе современных представлений и теорий современности (естественно, что используется современный язык и терминология). Этот подход преобладает в большинстве учебников по истории химии. Второй подход является гораздо менее традиционным и более сложным. Заключается в том, что историк пытается воспроизвести ход исследований, ставя себя на место того ученого, исследования которого подвергаются анализу. Конечный итог при этом остается неизвестным. Также стараются не использовать современный язык и терминологию. Этот подход требует огромной эрудиции и воображения. Т.е. весь ход развития проходит как бы глазами предшественника. Несмотря на сложность подхода, он имеет фундаментальную ценность. Он позволяет так же увидеть высоту барьеров, которые пришлось преодолеть ученому, трудившемуся в прошлом.

Кроме этих подходов следует поговорить о методологии науки. Она изучает общие принципы и средства научного познания. Ее нельзя путать с методикой, т.е. описанием конкретных экспериментальных и теоретических методов. Методика определяет тактику развития науки (научного исследования). Методология определяет стратегию науки. Ее основная задача (как части общей методологии науки) в инвентаризации важнейших химических понятий, в уточнении их содержания, анализа и в их применении при изложении современных основ химии. Почему это необходимо? Химия не стоит на месте, и вместе с ее развитием меняются основные понятия. Говоря об истории химии, мы должны достичь современного состояния ее, пройдя через все ступени.

Основные тенденции развития современно химии.

1) Современное состояние химии характеризуется возрастающим вкладом теорий и компьютеризации химических знаний.

2) Широкое использование физических методов (это позволило вести исследования на атомном уровне – видеть отдельные атомы).

3) Широкое взаимопроникновение химии и биологии (science of life). Наибольший вклад в статейном мире испытывает засилье (в хорошем смысле) биохимической направленности. Появилась отдельно медицинская химия, занимающаяся лекарственными препаратами.

4) Интерес к экологическим проблемам. Если бы химики этим не интересовались, то Земля превратилась бы в свалку, и люди увязли бы в грязи и погибли.

Возникновение химии и периодизация ее истории.

Химия – это древняя и одновременно молодая наука. Зачатки опытов можно отыскать еще в древности. Самостоятельной химия как наука стала в

конце XIX в. Многие считали, что химия – это искусство. Например, Берглю говорил: “Химия – это искусство превращения обыкновенных металлов в золото и их сплавы”.

“Химия” как слово заимствовано из египетского “chemi” (в латинском написании), что значит “Египет” или “черный”. Раньше выделялась каста жрецов. Так вот они впервые занялись химией как ремеслом. Они опекали те ремесла, которые могли принести коммерческую выгоду, потому ремеслом-химией и занимались. Секреты ремесла передавались из уст в уста по кастовому делению. Химия считалась привилегией жрецов.

Греция характеризовалась высоким духовным развитием. И Платон, и Аристотель занимались отдельными аспектами химии. В их работах встречались упоминания об исследованиях, которые можно отнести к химическим. В отличие от других ученых греческие натурфилософы смотрели в корень вещей. В Греции зародились истоки химических теорий. Ученые применяли созерцательный метод (анализ). Выдвинули основные понятия. Грекам принадлежит основное понятие “элемента” как первоначала всякого вещества. Они считали разные вещества вариантами одного и того же вещества – элемента. Элементы по-гречески были просты. У Фалеса элементом была вода, у Анаксимента – воздух, т.е. он думал, что при сжигании воздуха образуется вода и земля (современный эквивалент представлениям – агрегатные состояния), у Гераклита – огонь (современный аналог – энергия). По Пифагору и Эмпедоклу элементов было уж четыре – вода, земля, воздух и огонь. Аристотель выделял уже четыре элемента стихии по качественному признаку: холод, тепло, сухость и влажность. По его мнению огонь – сухой и теплый, земля – сухая и холодная и т.д. Еще Аристотель обозначил эфир – пятый элемент (в переводе “сверкающий”). Сейчас то, что древний ученый назвал эфиром, современные физики называют физическим вакуумом. Эфир – это концентрированная форма чего-либо или “quin ta essentia” (квинтэссенция).

Еще греки дали представление о делимости материи. Эти вещи принадлежат Евклиду и Демокриту. Они считали, что вещества состоят из неделимых “атомос” – атомов. Демокрит считал, что атомы каждого элемента имеют разные формы и размеры, что обеспечивает различия в свойствах. Изменяя природу веществ, можно превратить одно вещество в другое, так как реальные вещества – это совокупность атомов. И это было высказано до нашей эры!

Нельзя забывать о Китае, который по практической химии выдвинулся на первое место в мире. Достаточно вспомнить, что изобретатели пороха были сынами этой страны.

Поэтому условно можно разделить историю развития химии на два больших периода: доалхимический и, собственно, алхимический.

Алхимия – это рационализация накопленных совокупностей знаний для превращения неблагородных металлов в благородные. Идея трансмутации, владевшая умами алхимиков, двигала развитие других областей химии. Некоторые ученые связывали алхимию с Гермесом и называли ее герметическим искусством. В развитии самой алхимии известны различные подпериоды развития. Например, арабский период (кстати, “алхимия” – арабское слово “al chimia”). Можно выделить ярких алхимиков: Джабир, например, получил нашатырный спирт, свинцовые белила, слабую азотную кислоту. Ибн Сина (по-европейски Авиценна) очень известный медицинский алхимик. Из европейской алхимии известен Бэкон (его еще называли псевдо-Джабир). Этот ученый ввел экспериментальные и математические методы. Он получил концентрированные минеральные кислоты: серную и азотную, что позволило проводить многие, доселе невозможные реакции. Даже Бойль и Ньютон занимались алхимией. Шло перекрытие периодов в развитии химии. Умы алхимиков занимало супер вещество “al-i-ksir” – эликсир бессмертия или катализатор трансмутации.

Период алхимии длился до XVI в. и сменился периодом объединения химии (XVI–XVII вв.), который включил в себя период ятрохимии, период химии измерений, период флогистонной химии, период антифлогистонной системы, период количественных законов химии.

Начинался этот период прикладной химии с трудов Агриколы и Глаубера. Представления алхимии не исчезли, но значительно сдали позиции.

По медицинской химии появились труды Парацельса (ятрохимия). Он рассматривал химию как вспомогательную медицине науку.

С середины XVII в. до последней трети XVIII в. выработался единый взгляд на процессы, и концептуально это выразилось в эксперименте. Т.е. появилась экспериментальная (измерительная) химия. Развивали ее Ньютон, Бойль (пневмохимия, впервые ввел количественные измерения). Только к концу XVIII в., начиная с Лавуазье, наука приняла экспериментальный характер, заключающийся в экспериментальном анализе состава тел.

Шталь и др. развивали флогистонную химию. Для объяснения горения была придумана некая субстанция – флогистон. Согласно этому вещества, богатые флогистоном, горят лучше, чем бедные. При горении флогистон уходит из веществ. Лавуазье же показал отсутствие флогистона, объяснил роль кислорода в горении и вывел (доказал экспериментально) закон сохранения массы, чем обозначил период антифлогистонной системы.

В период количественных законов химии появились атомистические представления Дальтона, молекулярные представления Авогадро, реформы Кавендиша дали представление об атомах, молекулах и эквивалентах с их точными формулировками.

Лишь с 60-х годов XIX в. химия выступает как самостоятельная наука, используя достижения математики, физики. Совершается переход от чистого эмпиризма к рационализму. Этот период называют периодом современной химии или золотым. Именно в это время обозначили понятие валентности, периодической системы, стереохимии, структурных теорий, строения вещества (углубление), синтетической химии, условности границы между живой и неживой природой. А также шло бурное развитие физической химии, термодинамики, радиоактивности, электронной структуры, теории материи. Также шла резкая дифференциация химии.

Стоит отметить, что географически развитие химии перемещалось из страны в страну вследствие причин общественно-политического и социального характера. Можно вспомнить период химического развития в Швеции, ученые которой открыли кобальт, марганец и др. Там впервые применили паяльную трубку для анализа элементарного состава веществ по различию в цвете пламени. Там же разработал Бергман теорию химического сродства. Шееле открыл винную, лимонную и прочие кислоты. Он пробовал все на вкус (!), даже работая с мышьяковыми и цианистыми соединениями. Про Францию можно вспомнить, что Лавуазье – богатый собственник, ученый – попал под нож (в прямом смысле) Великой Французской революции. Его казнили на гильотине.

Тема №2. Основные понятия в химии, их эволюция. Место химии в системе научных знаний. Структура химии. Дифференциация и интеграция в химии.

Рассмотрим методологию как инвентаризацию. Речь пойдет об известных вещах, на которые обычно не обращают внимание. На самом деле эти понятия есть фундамент, и нужно знать историю их формирования. До сих пор нет однозначности в таких понятиях, как элемент, вещество, химическое соединение, атом, молекула.

“Элемент” – впервые это понятие и сам термин, как уже говорилось выше, появляются в работах древнегреческих натурфилософов. Некоторые понимали элемент как составную часть, начало, простое неразложимое тело, также под это понятие подводили элементы стихии, а в некоторых переводах само слово звучит как “стоять в ряду”, “порядок”, “ряд”. По Аристотелю элемент вещи – то основное, что входит в состав вещи. Далее по истории происходит путаница в понятиях. Так, вплоть до конца XVIII в. под элементом понимали первичные частицы – атомы, т.е. неделимые части тела. Также сюда относили аристотелевские начала (тепло, холод, влажность, сухость). И сюда же относили алхимические понятия (ртуть, сера, соль).

Основа разделения понятий принадлежит Ван Гель-Монту и Бойлю, которые впервые поставили вопрос об истинном составе тел. Бойль под “простыми телами” понимал те, которые могут быть выделены при разложении более сложных тел. Он полагал, что элемент – это составная часть, из которой состоят сложные тела и на которые они могут быть разложены. Т.е. если есть предел, после которого вещество не разлагается, то это неразложимое вещество и есть простое тело – элемент.

Период флогистона внес еще большую неразбериху. Так, например металлы и сера стали считаться сложными веществами, поскольку они были богаты флогистоном (хорошо горели), а калий – простым. Ломоносов со своими корпускулами добавил еще больше путаницы в понятия и терминологию. Он под элементом понимал атом, а под корпускулой – молекулу. По его мнению начало – есть тело, состоящее из однородных корпускул.

Шестидесятые годы XVIII в. ознаменовались химико-аналитическим периодом. В это время было открыто много химических элементов – простых веществ (O_2 , H_2 , N_2 , галогены). Появилась необходимость систематизации накопленных знаний по этому вопросу. Первая попытка систематизации принадлежит Лавуазье, который ввел таблицу простых тел. В первую группу вошли свет, тепло, газы. Во вторую группу попали неметаллы, которые окисляются и дают кислоты. Далее шли солеобразующие и землистые вещества. Всего в таблице содержалось 23 пункта. При этом тогда уже знали сложные радикалы органических кислот, были известны борная и плавиковая кислоты. Другими словами Лавуазье придерживался представлений о простых телах, которые далее не разлагаются. Естественно, выход из сложившегося положения был делом анализа и времени, и при развитии методов ранее простые вещества становились уже сложными. Таким образом, представления о предельном разложении тел жили до XIX в. Только с появлением атомистических представлений Дальтона заговорили об атомных весах. Хотя даже сам Дальтон придерживался концепции Лавуазье.

Выдвигался еще ряд гипотез, например, Прютом. Тот полагал, что первичная материя – водород. Существовала концепция бесконечной делимости атома, где все же не отбрасывалась идея простого тела, но были понятия о бесконечном делении материи. Об элементе пока не говорили.

К тому времени, как открыли около 40 элементов, Менделеев писал о том, что надо различать простое тело и элемент, а также вес частицы и вес атома. Это было в 1871 году. Элемент – это те материальные составляющие части простых и сложных тел, которые придают ему совокупность химических и физических свойств. Если простому телу соответствует понятие о частице, то элементу – понятие об атоме.

С открытием явления радиоактивности (распада) классическое понятие элемента было подорвано (XX в.).

Единственным свойством простых тел, которое без сомнения принадлежит элементу, а не простому телу – атомный вес элемента.

Дальнейшее развитие химии от таблицы простых тел Лавуазье шло в сторону большей материализации понятия элемента. Т.е. от описания внешних свойств элемента химии переходят к описанию его внутренних субстанционных качеств (Дальтон). Вместо весьма условного критерия разложимости стали считать характеристикой элемента его атомный вес. С развитием атомистических представлений эмпирика химического элемента как простого тела, далее неразложимого, утратила свою почву.

В связи с этим всем понятие химического элемента неоднозначно. Инвариантно оно только в одном случае – при переходе от одного соединения к другому. Все понимают, что в металлводородных соединениях и галогенводородах водород разный, но элемент водород один. Поэтому эталоном химического элемента должны быть не связанные, а свободные атомы, из которых образуются все и всякие химические соединения. В этом отношении и любая молекула, и любая химическая частица – это результат соединения химических атомов. Поэтому химик должен исследовать процесс соединения свободных атомов, в то время как физик – еще более абстрактную частицу “изолированный атом”.

Стоит привести понятия учебных и энциклопедических изданий, так как даже в них не существует правильных однозначных определений.

Химическое вещество или вещество – определение отсутствует или вещество описано как вид материи, который обладает массой покоя, что более близко к физической точки зрения, нежели к химической.

Простые вещества образованы атомами одного химического элемента, а потому являются формой его существования в свободном состоянии. Спорно, т.к. если между молекулами есть химическая связь, то это уже соединение.

Сложные вещества образованы атомами разных элементов, могут иметь постоянный состав (дальтониды), подчиняющиеся стехиометрическим соотношениям, а также могут иметь в некоторых пределах непостоянный состав (бертоллиды, по имени итальянского ученого, который ввел понятия о веществах непостоянного состава).

Химическое соединение – это химически индивидуальное вещество, состоящее из атомов различных элементов, однако, к химическим соединениям можно отнести и соединения, состоящие из атомов одного элемента, связанные между собой теми или иными видами химической связи. С этой точки зрения и простые вещества можно считать химическими соединениями. Важным при-

знаком химического соединения является его однородность. Этим оно отличается от механической смеси. Однородность химического соединения сближает его с растворами.

Атом – наименьшая частица химического элемента и носитель его свойств.

Молекула – наименьшая частица данного вещества, обладающая его основными химическими свойствами, способная к самостоятельному существованию и состоящая из одинаковых или различных атомов, соединенных в одно целое химической связью. Но известно, что во многих веществах вообще нет молекул, и одна молекула, выдранная из этого вещества, не может определять свойства вещества в целом. Способность к самостоятельному существованию молекулы не является ни необходимым, ни достаточным ее признаком.

Таким образом, многие определения имеют изъяны и недостатки.

Замечания по существованию теории Дальтона и самих атомов были. Это связано с философскими представлениями. Скептицизм в XIX в. был вызван тем, что по теории философского позитивизма полагалось, что если мы чего-то не ощущаем, то этого нет (Кант, Маг).

Слова корпускула и молекула существовали давно, но доказательства их существования были сделаны Переном при исследовании броуновского движения в конце XIX в. Ученый показал движения отдельных молекул. Это было выявлено на основе эксперимента, а химия – наука экспериментальная.

В последнее время продолжается совершенствование основных понятий.

Химическое соединение – это атомно-молекулярная система, обладающая следующими признаками: система содержит большое количество атомов ограниченных “сортов”; наблюдается постоянная определяющая индивидуальность химического соединения, распределяющая элементы по сортам, причем каждому сорту атомов соответствует определенная координация; система может существовать в виде одной или нескольких равновесных фаз, воспроизводимых по составу и структуре, т.е. в виде одного или нескольких химических веществ. В качестве примера можно взять сульфид цинка ZnS . Известные модификации этого сульфида – сфалерит и вюрцит. В этих модификациях заключено одно и то же химическое соединение – сульфид цинка. Оба минерала имеют одинаковый химический состав и координацию (тетраэдр). Но представляют разные вещества, так как кристаллизуются в различных группах. Сфалерит обладает кубической сингонией, а вюрцит – гексагональной. Лед и жидкая вода различные вещества, но одно и то же химическое соединение. При этом они являются дальтонидами. По этой концепции химическое соединение вовсе не обязательно должно содержать атомы разных элементов. Наряду со сложными соединениями, которые образуют сложные вещества, должны быть простые соедине-

ния, которые образуют простые вещества. Алмаз и лонсдейлит (гексагональный алмаз) – это разные вещества, которые представляют одно и то же соединение. Алмаз и графит – не только разные вещества, но и разные соединения, поскольку взаимопревращение алмаза и графита происходит путем химической реакции.

Меняется понятие и об аллотропии. Это существование разных простых соединений (именно соединений, а не веществ), образованных одним и тем же химическим элементом. Но ромбическая и моноклинная сера – это не аллотропические, а полиморфные модификации, поскольку обе имеют общую формулу S_8 и превращение одной в другую идет не путем химической реакции, а путем фазового перехода.

Проанализировав основные понятия и рассмотрев их эволюцию, можно перейти к химии как науке.

Место химии в системе научных знаний.

Этот вопрос далеко не праздный, так как некоторые до сих пор не признают химию за науку. Химию можно рассматривать с двух сторон – с точки зрения философии и, как противоположность, историзма.

Предметом любой науки в философском аспекте рассмотрения являются специфические особенности и взаимосвязи материальных объектов. С точки зрения диалектики – в мире существует связь взаимообусловленности и взаимозависимости функций. Развитие материального движения происходит при наличии противоречий. Для любой из форм движения материи имеются свои противоречия со своим характером, что обеспечивает особенности данного конкретного движения. Объективные условия существования дисциплины возникают в тех случаях, когда имеется множество других явлений, для которых существуют одни и те же специфические закономерности, законы и противоречия. Если такие противоречия становятся объектом исследований, то происходит зарождение отдельной науки. Противоречия же не существуют сами по себе, а связаны с определенными материальными объектами. В качественно различных материальных объектах противоречия приобретают свои различия. На любой ступени развития науки специфицируются противоречия, присущие данным материальным объектам, круг общих исследований данной дисциплины становится шире, охватывая все больше и больше противоречий. Изучение конкретных противоречий становится глубже, поэтому предмет (понятие) науки не есть нечто заданное, застывшее, неизменное. Существуют причинные связи между явлениями. Правильному пониманию особенностей предмета науки может способствовать знание ее исторического развития.

Если говорить о противоречиях, изучаемых в химии, то это противоречия материального движения, присущего атомам, молекулам, ионам, т.е. химия –

наука о веществах и их превращении (еще школьное понятие). Это определение с современных позиций далеко не бесспорно, так как вещества изучает не только химия, а физика и биология; превращения элементарных частиц друг в друга изучает атомная физика; взаимопревращения магнетиков, явление сверхтекучести (фазовые превращения) изучает молекулярная физика; превращения веществ, связанных с жизнедеятельностью организмов, – область биологии. Материальными объектами в химии являются вещества, имеющие атомное, молекулярное или ионное строение.

Исторический аспект.

В донаучный период нельзя было говорить о предмете химии как таковом, поскольку она не представляла собой систему знаний. Химия тогда занималась изучением противоречий превращения в качествах тел с единственной целью удовлетворения запросов ремесла и нарождающейся промышленности. В конце XVII в. известна формулировка МакКи: “Химия имеет целью исследовать природу всех тел посредством анализа соединений”. Если вспомнить Лавуазье, так тот полагал, что в химии цель – разложить все вещества и выявить их состав. Тогда меньше занимались синтезом, все более тяготели к разложению веществ. Однако, с философской точки зрения, разложение и синтез (соединение) – суть две стороны одного и того же процесса – химического движения. Но в период химической революции (Лавуазье, Ломоносов) определяющей целью химии было разложение веществ.

Мейером и Менделеевым уже было дано определение химии, как науки о превращении веществ. Химия – наука о веществах и законах, объясняющих взаимное их действие. Идет переход к определениям, где главным мотивом звучит не разложение, а соединение (синтез).

Пока опытных данных было не много, речь о дифференциации химии не шла, химия воспринималась как единая наука. Химия периода формирования теоретических основ является единой наукой, главной целью которой есть синтез и анализ сложных веществ. По мере развития химических знаний начинается период разделения химии. На современном этапе в науке наблюдается значительная дифференциация. Необходимо рассматривать предмет химии и связывать его с другими областями знаний. К чертам, присущим современной химии, можно отнести то, что эта наука не является беспорядочным конгломератом (скоплением) наук, а обладает присущим ей строением. Существует “ядро” науки (общая, неорганическая, органическая химия). В данном случае общая химия – фундамент всех химических знаний. К этому “ядру” примыкают пограничные науки (физическая, биоорганическая, биохимия и др.). Особняком стоит аналитическая химия – это вспомогательная наука для химии, биологии,

физики и т.д. Любой структурный элемент науки взаимосвязан с другими науками.

Основной задачей научного “ядра” является исследование основного противоречия между разрушением и образованием молекул. Для дочерних наук задача та же, но со своей спецификой каждой из них. В пограничных науках исследуются еще и близлежащие формы движения материй, их взаимосвязи и взаимопереходы. Подводя некий итог вышесказанному, формулировка современной химии будет звучать так.

Современная химия – сложная система наук, главной задачей которой является изучение противоречий химической формы движения или же взаимосвязей и взаимозависимостей между химической и другими формами движения материи. Наиболее общие черты в содержании современной химии – исследование атомно-молекулярных систем, изучение противоречий химической формы движения и их взаимосвязь с другими формами движения материи. В связи с этим появляются попытки свести химию к математике, физике и т.д.

Говоря о взаимозависимости наук, следует сказать, что химию нельзя свести к другим. Нужно определить специфику науки. Например, никакая математическая система не в состоянии отобразить такого многообразия процессов и явлений, какие отображает химия. Поэтому того, чего достигла математика, не хватит (без химии) для решения этой задачи. В квантовой химии были представления, что ученый-химик скоро не пойдет в лабораторию ставить эксперименты, а на машинах все посчитает. Но это оказалось не так, поскольку для точных расчетов знаний квантовой химии не хватило. Физика имеет свой предмет исследований. Безусловно, неизбежны взаимосвязи между физическими и химическими явлениями (объективные, природные связи). Эти связи не означают, что нет качественных различий между ними. Процессы взаимопроникновения наук неизбежны, так как это один из объектов существующей в природе взаимосвязи всего сущего. Современный период дифференциации химии нельзя считать законченным из-за неглубоких знаний в отдельных областях химии.

Считается, что проблема точности (особенно для квантовиков с их волновыми функциями) имеется для системы из 10–15 молекул, так как квантовомеханические положения не могут точно, адекватно объяснить, а тем более предсказать, точное взаимодействие атомов в молекуле.

Для того чтобы определить место химии в естествознании, необходимо рассмотреть базисные индивиды. Существуют две–три важнейшие системы базисных индивидов и несколько второстепенных систем. Так, для физики базисным индивидом считается многообразие физических явлений, для биологии – многообразие биологических видов, а для химии – это уже многообразие химических соединений и химических веществ. Это специфично сугубо для химии.

Если сюда же добавить многообразие химических процессов, то вот полный перечень отличий химии от других наук. О степени важности тех или иных базисных индивидов говорить не приходится по вполне понятным причинам.

Тема №3. Предмет химии. Взаимоотношения химии и других областей знаний. Физика и химия, особенности развития с позиций методологии. Взаимоотношения химии и биологии. Химическая форма движения материи.

Почти всегда практические задачи химии опережают теоретические. Философия черпает из источника развития химии, а химия с другой стороны с помощью философии лучше видит частные исследуемые случаи.

Как уже было сказано, все определения химии в той или иной степени не бесспорны. Существуют более современные толкования предмета химии. Например, предметом химии является определенный тип организации вещества, элементы, соединения, различные атомы и агрегаты, образованные за счет валентных связей. Любой такой агрегат или частица представляют собой единую квантово-механическую систему, устойчивость которой определяется минимумом энергии как функцией межатомного состояния. В этом аспекте химия изучает молекулы, радикалы, ионы, поверхностные соединения, твердые и жидкие фазы постоянного и переменного состава, активные комплексы и переходные состояния. В этом смысле химия изучает определенный тип превращений одних квантово-механических систем в другие, которые осуществляются путем перераспределения валентных электронов связи, обобществленными в виде электронного газа, переходов электронов с одних орбит на другие и т.д.

В современной методологической литературе встречаются определения химии, которые подчеркивают связи и их взаимодействия. Жданов много сделал в этой области: “Химия – это наука об изменениях тел, происходящих под влиянием изменения их внутреннего строения, т.е. порядков взаимосвязи и взаимодействия атомов”. Другой видный историк и методолог химии говорил: “Химия изучает превращения веществ, протекающих путем перераспределения связей между атомами”. Оба определения отражают предмет химии, если имеется в виду химическая связь. Хотя известны вещества, в которых нет такой связи (вандерваальсово взаимодействие и т.п.). Поэтому эти определения не полны и до конца не верны.

О фундаментальности законов физики и химии, их соотношении и самостоятельности наук.

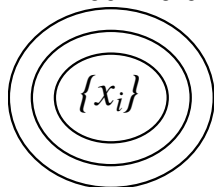
Вопрос этот является дискуссионным с разными точками зрения. Рассмотрим одну из них.

Считается, что в исходной аксиоме физики главенствующую роль играет естествознание, поскольку является сборником фундаментальных законов природы. Это законы классической механики (Ньютон), первое и второе начала термодинамики, законы статистической физики, кинетическое уравнение Больцмана, каноническое распределение Гиббса, уравнение Шредингера и соотношения неопределенности Гейзенберга. Таким образом, в физике важны фундаментальные законы природы.

В химии же такими законами будут иные вещи. Самостоятельность химии (имеется в виду, что химия – не часть физики, в частности) в том, что в химии есть автономные модели, согласующиеся с фундаментальными законами физики, но строго из них не вытекающие. Сложность этого вопроса в том, что в современной химии есть различные слабо связанные и противоречивые модели и представления (физико-химическая теория растворов, катализа и т.д.). В идеале хочется интерпретировать все химические факты исходя из законов природы. Но это происходит медленно и нерезультативно. В химии плодотворно обратное индуктивное построение системы знаний. А именно, на основе химической фактологии выявляются наиболее важные и общие закономерности (называемые законами и правилами), строятся обобщающие их модели, затем интерпретируются новые факты. Индукция в том, что из множества фактов выделяются общие и по ним идет предсказание новых фактов. Ценность этих моделей определяется чистой прагматикой. Обобщенные модели, полученные таким путем (имеющие эмпирический характер), составляют основу современной теоретической химии. Эти модели, как правило, не удается вывести из фундаментальных физических теорий. В лучшем случае эмпирические модели не противоречат фундаментальным законам. Должны признать, что фундаментальные законы – это прерогатива физики, а в химии иной (индуктивный) путь с эмпирическими моделями. Однако химию относят к фундаментальным естествознаниям, так как в ней обширное поле деятельности относительно фундаментальности. В химии есть круг проблем, которые являются неотъемлемой частью общей картины мира. Они не сводятся к каким-либо физическим фактам и не являются их следствием. В то же время обсуждение этих физических закономерностей невозможно без изложения неких химических понятий, что дает право химикам считать эти понятия фундаментальными. Другими словами молекулы, атомы, элементы и т.п. – есть фундамент химии, в то время как в физике совсем другое. К фундаментальным понятиям лучше не относить те химические законы, которые получены эмпирическим путем, так как они являются приближенными. В этом смысле к числу фундаментальных законов природы не относят периодический закон Менделеева, т.к. он эмпиричен, несмотря на всю его важность.

Строгого разграничения между физикой и химией нет, но есть разница в круге проблем и методологии, приемами которой пользуются те и другие. Вещество для физики – арена, на которой разыгрываются физические явления. У химиков вещество на первом месте, проявляется интерес к рядам веществ (гомологи и т.п.), что не является интересным для физиков.

Точка зрения методологии: если существует некое индивидуальное вещество x_i , то отличие химии от физики в многообразии веществ, их обнаружении и исследовании. Множественность вещества – это, так называемый, первый концентр. Вторым концентром является противоречие между синтезом и анализом. Но главная задача химии в исследовании веществ, в связи зависимостей, свойств, реакционной способности. Другими словами, по такой схеме от вещества и его множественности через синтез и анализ переходим к исследованию функциональных зависимостей свойств вещества. Эти зависимости можно представить в виде $P=f(x)$, где $f(x)$ – химические, физические, физико-химические свойства, биологическая активность.



В исследовании зависимостей типа $P=f(x)$ используются и квантовые положения, но иногда встречаются сложности, например, при описании системы из 10–15 молекул. Таким образом, квантовая химия не может отобразить всего многообразия веществ и предсказать картину химического взаимодействия.

В чем взаимопроникновение физики и химии? И та, и другая наука занимается исследованием поведения неодушевленной материи или такими процессами в природе, при которых можно пренебречь существованием жизни (слова Гейзенберга, начало XX в.). Сейчас с этим можно поспорить, но все же... Химия занимается качеством материи, ее вещественным составом, свойствами, возможностью превращения одних веществ в другие. Физика занимается количественными взаимосвязями во внешних проявлениях материи и пытается в математической форме представить взаимоотношения между силой, массой и движением. В разное время соотношение между физикой и химией было различно. До второй половины XIX в. науки шли разными путями. Химики – чистым качеством, физики – количеством. Во многих философских системах особое внимание уделяется тем точкам, где количественное изменение переходит в качественное. Однако, плодотворные отношения между физикой и химией там, где наоборот, качество переходит в количество. В 1870 году физические методы резко вошли в химию (расцвет термодинамики). Крупные физико-химики

Оствальд, Планк, Нернст были убеждены в том, что принципы классической физики достаточны не только для описания химического поведения материи, но способны понять все устройство Вселенной. Тогда выдвигались концепции энергетизма, монизма (замена религии наукой и баланс в обществе), агностицизма (непознаваемости материи), которые являлись кризисом естествознания. Физика тогда была дающей стороной для химии. Однако позже химики дали больше предметов исследований для физики. В этом суть взаимопроникновения этих наук.

Одним из наиболее удачных примеров – модели молекул из органической химии. Ни одно обобщение в науке (даже точное в математическом отношении) не достигло большего успеха по объединению в простой форме множеств, чем группа идей по структурной теории. Графические формулы органиков имеют большее значение, чем теория расположения атомов. Этот практический метод просто и наглядно отображает множество соединений. В этом отношении химия XIX в. сделала очень много.

Взаимопроникновение химии и биологии.

Химия существует едино в естествознании. Связи с биологией не столь просты, как может показаться. Если рассматривать вещества с точки зрения организации, но не с позиций сложности как в биологии, то мы имеем следующее. Если взять ионы Na^+ , Cl^- и кристаллы поваренной соли, то, естественно, кристаллы более организованы, чем разрозненные частицы. Точно также макромолекула полимера выше по организации молекулы мономера. А справедливо ли всякую организованную частицу считать выше другой? Сложно. Наиболее высокоорганизованной материей считается та, что носит жизнь, а потом и сознание. Белковые тела, обеспечивающие обмен веществ (ассимиляции и диссимиляции) являются тем ориентиром, к которому стремятся химические органические вещества. Белковые тела имеют много сходств с другими телами, но есть общий признак отличия с точки зрения химизма – это совместимость основных химических функций, принадлежащих в условиях *in vitro* (внутри) разным веществам. Белковые тела в процессе жизнедеятельности (*in vivo*) совмещают в себе функции реагентов, катализаторов, растворителей и химических сосудов-аппаратов. Полифункциональность обеспечивается элементарным строением отдельных звеньев, составом, бертоллидной формой химической организации, наличием функциональных групп (COOH , OH , NH_2 , омыляемые эфирные связи, металлоорганические связи и т.д.). Бертоллидная форма представлена межатомными связями вплоть до свободного перемещения π -электронов вдоль полипептидной цепи.

Все это создает условия для реакций в живых организмах с малой энергией активации, исключительной селективностью, легкостью вовлечения любых веществ из окружающей среды (прежде всего CO_2 и H_2O).

Если рассматривать идеальные кристаллы относительно ионов, то с точки зрения катализа кристаллы мертвы. Но в реальных кристаллах за счет примесей и дефектов совмещаются функции реагентов и катализаторов, но они разделены по реакциям. А совмещение этих функций в одном процессе является важным признаком развития вещества. Например, если рассматривать каталитическую активность иона железа и иона железа, входящего в состав ядра порфирина, то активность железа в ядре в 1000 раз выше в той же реакции.

Многие ферменты удалось моделировать, например, из металлоорганических соединений. Гомогенные катализаторы наиболее близки по действию, чем гетерогенные, к биологическим функциям. Они способны к более глубоким изменениям в составе при образовании переходных комплексов. Таким образом, образуются более лабильные высокоэнтропийные структуры (наночастицы), более чем в 1000 раз мелькие, чем кристаллы, но более высокоорганизованны. Эти частицы могут выступать в нескольких ролях: как катализаторы, как реагенты, как растворители, как промежуточные активированные комплексы. Когда комплекс выступает в качестве реагента, то энергия активации процесса снижается на теплоту образования этого комплекса. Когда же он выступает в качестве катализатора, то энергия активации снижается за счет электронного переноса в пределах одной частицы. Если же комплекс выступает в качестве растворителя, то обеспечивается среда, что способствует химической реакции. К таким комплексам относятся ферменты Густавсона ($\text{Ar}\cdot\text{H}\cdot\text{Al}_2\text{Br}_6\cdot 5\text{Ar}'\cdot\text{H}$), соединения Кондакова ($\text{R}_2\text{C}=\text{CHR}'\cdot 2\text{ZnCl}_2$), Кучерова ($3\text{HgCl}_2\cdot 3\text{HgO}\cdot 2\text{CH}\equiv\text{CH}-\text{CH}_3$), соединения трифторида бора ($\text{BF}_3\cdot\text{O}(\text{C}_2\text{H}_5)_2$, $\text{HF}\cdot\text{BF}_3\cdot\text{O}(\text{C}_2\text{H}_5)_2$). С помощью этой металлоорганики осуществлено связывание азота воздуха при нормальных условиях. Титан-органика Вольпена является катализатором стереоспецифического синтеза полимеров.

Это наиболее удачные модели тех высокоорганизованных соединений, которыми пользуется природа для осуществления тех же реакций. В любом каталитическом процессе есть явления саморегулирования обратных связей.

Несмотря на то, что химия не имеет фундаментальных основ (в отличие от физики), теоретическая химия существует. Например, в Санкт-Петербурге читается обобщенный курс лекций теоретической химии. Почему эта химия может быть самостоятельной наукой и имеет право на существование? Приведем некоторые тезисы. Объединением фундаментальности в химии и является теоретическая химия, включая все понятия, концепции и взаимосвязи между отделами химии. Ее нельзя отождествлять с квантовой химией и нельзя под

теорией понимать квантовую теорию. Сущность этой химии в том, что теория имеет не только эмпирический, но и полуэмпирический, а также чисто эмпирический характер. Существует принципиальная невыводимость основных закономерностей химии из уравнений квантовой механики (это не математика). Нельзя получить чисто дедуктивным методом (от общего к частному) все свойства решений уравнений математической физики, уровень которых соответствовал бы химической форме движения материи. Теоретическая химия – это самостоятельная и главная дисциплина химической науки, т.е. совокупность общих теоретических концепций, составляющих учение о строении, устойчивости и реакционной способности химических соединений. Венцом творения теоретической химии является общая теория химической связи. Химическое явление более высоко порядка, чем физическое. И наиболее весомым свидетельством этого является достоверный факт химической эволюции в природе, т.е. протекание специфических, целесообразных процессов в химических структурах, вплоть до образования сложных предбиологических форм. Этот факт указывает на непреодолимую ступень не сводимости химии к физике.

В основе химической формы движения материи лежит небольшое число принципов, из которых могут быть выведены все химические закономерности, не сводимые к физическим законам.

1. Принцип электронного строения молекулярных систем;
2. Учение о взаимосвязи строения и свойств молекулярных систем;
3. Учение о реакционной способности химических соединений;
4. Концепция единства химических явлений.

В методологическом плане теоретическая химия призвана формировать те проблемы, а также устанавливать принципиальные пути их решения, которые с одной стороны соотносятся с важными природными явлениями и соответствуют задачам развития цивилизаций, а с другой – требуют силу многоплановости явлений, привлечения сразу нескольких концептуальных представлений различных химических дисциплин.

В качестве нескольких главных проблем (чаши Грааля), запредельной, актуальной цели, которая доступна только тем, кто чист в мыслях, словах и делах, можно представить искусственный фотосинтез, объединяющий специалистов разных химических дисциплин, пути рационального использования солнечной энергии (без экологически вредных выбросов), т.е. преобразования энергии солнца в энергию химических топлив, топливо на основе водорода и т.д.

Тема №4. Дискретность и непрерывность в химии. Методология и история понятия химического соединения. Химическая организация вещества как понятийная и философская категория.

Состав – структура – свойства – процесс. С этой философской проблемой связано и понятие реакционной системы.

Идеи дискретности возникли давно (натурфилософы). Возродились у Ломоносова, Бойля, Пристли, Шееле особенно при вхождении понятия элемента. Однако химия не обладала достаточным количеством критериев для суждения о способах химического соединения. Если взять соединение типа A_nB_m , то можно говорить о постоянстве состава, т.е. $n=m=const$. Химия пошла двумя независимыми путями, оба из которых были и теоретически, и экспериментально обоснованы. Эти пути – развитие идей дискретности и непрерывности. Если первые получили право на жизнь давно, то идеи непрерывности появились в трудах Бертолле гораздо позже, при изучении сплавов и растворов. По представлениям этого итальянца вещество A_nB_m по диаграмме имело состав в пределах от $A_n=100\%$ до $B_m=100\%$. Другими словами, состав такого вещества непостоянен. В любой точке диаграммы свойства вещества могут быть разными. Вывод о неопределенности (непостоянстве) состава Бертолле обосновал динамической атомистикой, т.е. непрерывным изменением сил сцепления частиц (элементов). Зародилось учение о непрерывности соединения. Почти одновременно Пруст установил закон постоянства состава для индивидуальных соединений. Если говорить об этом применительно к диаграмме состава, то вместо непрерывных линий (как в случае Бертолле) мы увидим дискретные точки. Свойства при переходе от точки к точке меняются не непрерывно, а скачком. В качестве примера можно привести все соединения общей формулы Pb_xO_y . В истории случился спор между авторами (и их сторонниками) этих идей и продолжался довольно долго. Закончился победой Пруста (закон постоянства состава, кратных отношений, эквивалентов). Победили идеи, в которых атомной дискретности соответствует и дискретность химических отношений.

Почему произошло именно так? Химическая атомистика Дальтона и представления Пруста больше отвечали в то время состоянию развития научного (химического) сознания. Энгельс сказал: “Прежде нужно было исследовать предметы, чем сразу исследовать процессы”. Бертолле же сразу поставил задачу исследования изменений тел, чем намного опередил сознание науки. Он определил равновесие и способы его смещения и т.д. Но для того времени идеи Пруста были проще идей Бертолле. К тому же выводы Бертолле были односторонними, он отвергал стехиометрические законы, скачкообразные переходы свойств, считал соединения постоянного состава (дальтониды) частным случаем более общих соединений непостоянного состава (бертоллидов). Эта односторонность не могла быть тогда принята (как, впрочем, и сейчас). Даже Ломоносов считал, что скачки, переломы, разрывы сплошности – есть признак химизма. Таким образом, идеи дискретности, односторонне обоснованные при-

знанием атомной прерывности стали на многие годы специфическим качеством химии. Атомно-молекулярное учение, опираясь на целочисленность валентности, стехиометрические законы, идеи дискретности составило основное содержание химии как науки. Проще – Пруст победил, и в этом нет ничего удивительного. В науке вполне могут быть две противоположности, обе имеющие право на жизнь. Пруст, преодолев противоречия Бертолле о непрерывности изменения состава, освободил химию не только от логического, но и от диалектического противоречия. Это привело к тому, что химические реакции стали пониматься как процессы дискретного характера, т.е. обмен группами атомов идет через полную диссоциацию связей и образование новых. Такие представления живы до сих пор, особенно в каталитических реакциях. Строго это далеко не так. Победа дискретности была обусловлена предметностью представлений в отличие от смутных по тому времени динамических идей.

Первые попытки попасть в механизм реакции относятся к 70^м годам XIX в. Идя по схеме состав – структура – свойства – процесс химия подошла к структурным теориям строения (Кеккуле и т.д.), которые сложили представления об устойчивости (неустойчивости) соединений, о промежуточных соединениях (в частности стехиометрического состава) в реакциях органического катализа. Хотя эти представления были ограничены теорией дискретности, которая могла объяснить регенерацию катализаторов, металлов, но не строение промежуточных соединений. Несмотря на то, что идеи Пруста превалировали, идеи Бертолле все равно продвигались другими учеными. Это были Берцелиус, Либих, Бутлеров, Менделеев, Зелинский и др., которые мыслили более диалектически, пытаясь объединить обе концепции. Однако только в трудах Курнакова эти идеи были возрождены к жизни на более высокой экспериментальной и теоретической основе. В то же время Бутлеров признавал непрерывность изменения свойств, хотя был сторонником дискретности атомизма. Идеи Бертолле были односторонни, но содержали рациональную часть, поэтому произошел синтез обоих представлений, с последующим овладением умов химиков идеями непрерывности.

Что такое дальтони́ды и бертоллиды? Отличительной чертой неопределенных соединений по составу является малая прочность связей атомных групп, непрерывное изменение химического сродства (сил взаимодействия между атомами и их группами). Они ближе к самому химическому процессу. Характерно для растворов, где идут процессы диссоциации и сольватации, т.е. вещество трудно отделить от процесса. Курнаков считал, что образованию дальтони́дов соответствуют сингулярные точки на диаграммах состав – свойства.

Какие силы в природе преобладают при образовании химической связи?

Силы бертоллидного характера, действие слабых химических связей, допускающих гораздо большую возможность химических преобразований, чем действие полновалентных связей. Отсюда большая распространенность бертоллидных систем, к которым относят и те соединения, которые считают хрестоматийными (сплавы, расплавы, растворы), но и хемосорбционные соединения, все объекты коллоидной химии, и, собственно, химический процесс (кинетический континуум).

Как это не парадоксально, но соединения с полновалентными связями в природе в подавляющем большинстве случаев преобразуются в менее прочные, неопределенные соединения с неполновалентными свойствами.

И дальтонидные, и бертоллидные формы – суть формы химической организации вещества, которые нельзя противопоставлять. Можно говорить о единстве дискретности и непрерывности. С этой точки зрения характеризовать любой тип соединения как тот или иной – неверно. Молекулы и непосредственно сами дальтониды представляют такую форму организации вещества, где на первом плане выступают признаки дискретности. Это атомно-молекулярная прерывность и более менее четко обозначенная целочисленность валентных отношений. В бертоллидной же системе более яркие признаки непрерывности: непостоянство состава, нецелочисленность валентных отношений, широкий диапазон изменения межатомных связей. Все это означает, что дальтониды не лишены непрерывности, а бертоллиды – дискретности. Последняя проявляется в виде дискретных переходов с одного уровня на другой через квантовые числа, через характерный ряд свойств электронов и т.п. В то же время непрерывность проявляется в непрерывности свойств электронов, ответственных за химическую связь, в обменном взаимодействии как особом виде (перекрывание облаков).

В настоящее время в понятие молекулы входит и отдельные молекулы, и ионы, и ковалентные полурадикалы, и кристаллы ионного типа с бесконечным множеством электронов и дырок, локализованных на поверхности.

Различие между дальтонидами и бертоллидами заключается в подчинении или не подчинении стехиометрическим законам, а общность – в том, что частицы любого химического соединения находятся в энергетических потенциальных ямах и обладают минимумом энергии, как функции межъядерных расстояний.

Что такое переходное состояние в химии (активированный комплекс) как одна из форм организации вещества? Переходное состояние характеризуется тем, что такая система (такая функция межъядерных расстояний) стремится к максимуму энергии, даже находится на вершине энергетического барьера. Не-

смотря на то, что время жизни активированного комплекса невелико (10^{-13} с.), значение его для химии огромно, т.к. это сущность химического превращения и большинства химических процессов. Назвать переходное состояние химическим соединением мы не можем (лучше не надо). Если бы прибегнули к этому, то случилась бы путаница в понятийном аппарате химии. Действительно, в активированном комплексе сохраняется ряд признаков химического соединения, но главное его свойство состоит в том, что он отрицает химическое соединение, отрицает устойчивость данного качества (покоя) и переходит к неустойчивому состоянию, т.е. качественному изменению. Активированный комплекс характеризуется, например, односторонним изменением состояния и уменьшением межатомных расстояний. Обладает непрерывным уменьшением величин исходных связей и непрерывным увеличением величин энергии образующихся связей. Если мы имеем рост энергии до максимума на подъеме к вершине и уменьшение до почти минимума на спуске потенциального барьера. Активированный комплекс не химическое соединение, а особая форма химической организации вещества, присущая химической частице, находящейся в процессе качественного превращения.

Химическая организация вещества как философская и понятийная категория.

Идя по схеме состав – структура – свойства – процесс Бутлеров под химическим строением понимал распределение действия, т.е. химическую силу сродства, вследствие которой атомы посредственно или непосредственно влияют друг на друга и соединяются в химическую частицу, т.е. молекулу.

В то время это было прогрессивным определением. С точки зрения методологии это употреблялось относительно молекулы, находящейся в дореакционном состоянии. Таким образом, Бутлеров переходит к прогнозированию химических процессов.

Понятия, введенные Берцелиусом, Либихом, о термохимизме применялись для обсуждения взаимодействий между атомами сложной частицы и частиц в процессе их реагирования. В XIX в. был введен более узкий термин, который описывал качественные изменения химических веществ – химическое явление. Появление этих терминов – важная часть понятийного аппарата.

Химическая форма движения материи обладает статусом философской категории. С этой точки зрения такая форма движения переходит к дореакционному состоянию химической системы (частицы) как частному случаю химического движения.

Понятие химической организации вещества возникло не случайно. Связано было с описанием бертоллидов. Т.е. другие определения были для дальтони-дов (дореакционного состояния) и не могли описать все случаи. Если по Бутле-

рову характеристикой молекулы является ее строение, то характеристика бертоллидов – химическая организация вещества, имеющая свою специфику: открытый состав, широкий спектр химических связей и т.д., т.е. это неустойчивая упорядоченность. Важно то, что факторы такой упорядоченности характерны для химических процессов и переходного состояния, т.е. для любых форм организации вещества.

Таким образом, в области стационарных состояний (дальтонидах) и в области непрерывности (бертоллиды) уже не достаточно понятия химической структуры. Т.е. химическое строение есть часть понятия химической организации вещества.

Химическая организация вещества. Рассматривая все-все-все химик должен перейти от объекта структурной химии с ее стереохимическими особенностями к более широкому объекту – химической организации вещества, охватившей все многообразие частиц, включая молекулы. Эти системы необходимо рассматривать в непрерывном взаимодействии и преобразовании. Есть формы организации вещества, к которым относятся: а) дальтонидах; б) бертоллиды; в) переходные состояния; г) кинетические системы (практические вещества, находящиеся в ходе химической реакции – кинетический континуум). В этом континууме рассматривается взаимодействие всех компонентов системы, т.е. не только реагентов, но и растворителей, стенок сосудов, катализаторов и ингибиторов. В нем целая сеть взаимосвязей переходных состояний, которая уподобляется потоку (одна из форм материи). В чистом виде такие системы не реализуются, есть смешанные. Химическая организация вещества (философская, понятийная категория) охватывает все системы агрегированных частиц (молекулы, ионы, сложные радикалы, коллоидные частицы, первичные кристаллы, активированные комплексы и кинетические системы). Одна из этих систем относится к дореакционным состояниям, другие – к процессам химических превращений. Первые вообще-то не существуют – это предельный случай вторых. Понятие структуры также входит в понятие химической организации вещества в преобразованном виде, так же как и понятие состава входит в понятие структуры.

Т.е. история развития понятий укладывается в схему состав – структура – кинетический континуум – химическая организация вещества.

Химическая организация вещества – это основанная на обменном взаимодействии упорядоченность отношений между атомами и/или атомными агрегатами, вследствие которой образуется единая система. В случае устойчивой упорядоченности – химическое соединение, в случае неустойчивой – кинетический континуум, в том числе и переходное состояние. Здесь нет акцента на дальто-

ниды или бертоллиды, т.к. в кинетический континуум входят все эти представители.

Отражением идей дискретности и непрерывности является эволюция теоретических представлений, группы теорий, связанных с дискретностью (теория состава, структурная теория), с кинетическими теориями (идеи Бертолле).

Тема №5. Эволюция основных теоретических представлений химии

Путь развития концепций и теорий в химии можно уложить в схему: состав – структура – свойства – процесс. К процессу относятся кинетические теории. Интересно рассмотреть переход от структуры к процессу.

Лучше всего нам известны теории структуры и состава. Это традиционно. В то время другие теории лежат в тени, хоть и призваны решать основные задачи химии.

Опустим донаучный период химии до конца XVII в. и кислородную теорию Лавуазье, где были общие представления, и перейдем к следующему этапу.

В 1792 году Рихтер ввел в химию термин стехиометрия. Есть смысл говорить о составе. Сюда отнесем теорию сложного атома с его массой Дальтона, газовые законы Гей-Люссака (газы соединяются в простых объемных соотношениях), молекулярную теорию Авогадро (1811), которая не была принята в течение нескольких десятилетий вплоть до обобщенных представлений Канницаро. Сюда же можно отнести идеи изоморфизма Митчерлих – строение кристаллов определяется не столько природой атомов, сколько их расположением в пространстве. Берцелиус дал таблицу атомных весов (где кислород принят за 100), предложил дуалистическую электрохимическую теорию (в одном и том же веществе есть и “+”, и “-” заряд, что обеспечивает соединение). Это для нас кажется обыденным, а тогда это было прогрессивными взглядами. Закончить можно законом атомов Канницаро (1858): различное количество одного и того же элемента, содержащееся в одинаковых объемах, как свободного тела, так и его соединений, является целыми кратными одного и того же количества. Съезд в Цюрихе закрепил все понятия и определения.

Перейдем от состава к структуре. Представлений о составе было недостаточно для объяснения всех вопросов, и они сменились теориями структуры (строения). Параллельно со структурными теориями стали зарождаться кинетические теории, но их ростки завяли и возродились только через 50 лет. Существуют диалектические противоречия, например, дискретность и непрерывность вещества. В таких противоположностях раньше не было видно единого целого до тех пор, пока не прошел их синтез. Структурные теории сменили теории состава на более высоком уровне и изменили представления о реакции.

Основным достижением структурных теорий является теория строения Бутлерова, которая вобрала в себя стехиометрические учения, химическую атомистику, теорию валентности и объяснила непонятные большинству явления изомерии. Период же развития органической химии до появления этой теории так и называют – доструктурный.

Кинетические теории пришли с трудами Аррениуса, Оствальда, Семенова и т.д. 50 лет спустя.

Теории находятся в тесной связи и взаимозависимости. Они отражают разные стороны химической организации вещества, ее статику и динамику и дополняют друг друга. Структурные теории более известны (точнее их эволюция). Коснемся гносеологических корней появления кинетических теорий. Родоначальником этих теорий можно считать Вильгельми, который в 1850 году дал закон скорости химической реакции. Однако его работа (как и у Бертолле) оказалась непонятой большинством химиков, преждевременной. Исследование “законченных предметов” еще не подготовило почвы для систематического изучения процессов. Структурные теории, несмотря на их прогрессивность, рассматривали вещество в нереакционном состоянии. Вильгельми же впервые рассмотрел вещество в реакционной среде.

Следующим этапом в кинетических теориях стало представление о химическом равновесии. Возникла химическая статика, которая связала химию с термодинамикой. Статика, несмотря на ограниченность, вступила в противоречие с законом постоянства состава, кратных отношений, эквивалентов. Закон равновесия, закон действия масс в лучшем случае замалчивались, в худшем встречались в штыки. Только в 1861 году Менделеев ввел понятие об обратимости и равновесии в своей книге “Органическая химия” на примере синтеза и омыляемости сложных эфиров. Только с работами Гульберта и Вааге пришло признание закона действия масс и т.д. Химическая статика основывалась на господствовавших идеях механицизма (перенос из физики), поэтому она легче пробилась себе путь, чем другие области кинетики, в частности, химическая динамика. В химии, как и в механике, наиболее естественным методом является рассмотрение равновесия сил притяжения и отталкивания.

Лишь во второй половине 1860^x годов статика стала сменяться кинетической динамикой, как непрерывное изменение сил взаимодействия. Если вещества А и В соединяются с образованием продуктов реакции, то сила взаимодействия пропорциональна реагирующим массам веществ А и В:

$$F = k \cdot [A] \cdot [B]$$

Отсюда один шаг до вывода о том, что нет принципиальной разницы между силами сродства в химических соединениях постоянного и переменного состава. 1870^с–80^с годы характеризуются тем, что идеи химического динамизма

начинают овладевать умами химиков и становятся более заметными. Однако развитие идей химического динамизма пошло в двух направлениях. Одни сводили это к всеобщей подвижности, механическому перемешиванию тел, т.е. к отсутствию покоя атомов и молекул, что привело к известным осцилляционным и планетарным моделям, отказу от структурных представлений. Это развивали Бертло, Кеккуле, частично Менделеев. Мишуткин по этому поводу говорил, что едва ли теории строения, не обнимающие динамические стороны химических явлений, могут считаться выражением состояния химии.

Были и другие взгляды на динамизм: есть определенная взаимозависимость между атомами соответствующих частей, т.е. химическое соединение не есть что-то мертвое, застывшее, одаренное постоянным движением. Но свойства динамизма не рассматривались как функции химического строения. Фактически это было рассмотрение химического взаимодействия в нереагирующей молекуле.

Эти противоречия в динамизме не антагонистические, а дуалистические. Разрешаются при переходе от внереакционных систем к исследованию химического процесса (качества химического вещества). По Гульберту и Вааге реакции совершаются е вполне, но отчасти, они всегда подвижны и обратимы в зависимости от условий. Динамизм объясняется только лабильностью сродства, т.е. через непрерывное изменение энергии химического взаимодействия. Попытки свести динамизм к осцилляции и планетарным моделям является вульгарным динамизмом, который есть подновленный механицизм. Естественно, химическая динамика наиболее полное развитие получила в трудах Ван-Гоффа “Очерки по химической динамике” (1894). Академик Семенов оценил эту книгу как веху для развития человеческого знания. В ней дано понятие молекулярности реакции. Это не феноменологическая (понятийная) теория, но позволяющая исследовать механические процессы на начальном уровне. Примеров нормального участия целочисленного количества молекул в элементарном акте превращения, вопреки ожиданиям, немного. Идет описание аномальных процессов (“возмущающих действие”). Тогда это не все поняли. Было дано понятие стеночного катализа, автокатализа (продукты реакции – катализаторы), рекуперации энергии реакции (возвращения энергии от стадии к стадии). Это был первый труд, где сформулирована необходимость рассмотрения перехода от неакционных к реакционным системам, т.е. учет участия в реакции всего-всего-всего.

Бутлеров в своей теории видел зачатки динамизма. Критически оценивая свою теорию, он не ограничивался представлениями о структуре, как о чем-то неподвижном. Ввел динамический фактор, таутомерию. Считал, что структур-

ные теории отойдут на второй план после динамических, более прогрессивных теорий.

Одних теорий строения недостаточно для описания химического явления. Типичный пример – реакция Фаворского (1935), где есть переход протона, который играет в реакции определяющее значение. Эта реакция имеет каталитическую природу и проходит при неполновалентном взаимодействии реагирующих веществ с каталитической системой. Ведущую роль играет здесь не дискретность, а непрерывность связей при действии спиртового раствора щелочи. В данном случае химии молекул оказалось недостаточно для объяснения механизма процесса. В реакции Дэвиса-Измайлова происходит примерно то же самое. Оказалось, что таких примеров множество и все эти реакции идут в растворе, где происходит постоянное расслабление и перераспределение химических связей, и в концентрированных системах, а также в некоторых фазовых реакциях при взаимодействии со стенками сосудов. Во всех этих реакциях наряду с молекулами реагента принимают участие на правах сореагентов всякие молекулярные комплексы растворителей, примеси, катализаторы, ингибиторы и т.п., хотя их химизм заключается во взаимодействии протона и атома водорода реагентов, что является перекрыванием волновых функций. Часто для описания простых реакций недостаточно традиционных представлений химии молекул, а требуется привлечение реакционных систем.

Аргументы основных положений Ван-Гоффа переросли в цепную теорию Боденштейна-Семенова сначала для газовых и гомогенных процессов, потом и для гетерогенного катализа. Это синтез и дискретности с непрерывностью и структурных теорий. Дискретность наблюдается в дискретной валентной передаче от одной частицы к другой (свободный радикал). Непрерывность в том, что сам неспаренный электрон взаимодействует с радикалом, и это зависит от структуры радикала.

В чем же различие структурных и кинетических теорий? В отражении объективно существующего единства вещества. Кинетические теории отрешились от старых взглядов на незыблемость стехиометрических законов и теорию валентности как фундамент химии. Это было в работах по кинетике как наличие дробных порядков реакции. Цепная теория Боденштейна-Семенова продолжила это.

Дальнейшее развитие цепных теорий пошло по пути рассмотрения участия стенки сосуда в захвате и генерации свободных радикалов. Далее предметом теорий стал гетерогенный катализ. Его теория стала наглядным примером диалектического совмещения дискретного характера свободной валентности и непрерывной формы химического взаимодействия между атомами частицы и кристалла с образованием слабой, а затем и прочной хемосорбции.

Определяющую роль в химических процессах играет не столько электронное строение молекулярных реагентов, сколько электронное строение образующихся из них свободных радикалов, т.е. взаимодействие свободных электронов с остальными связями в сложном радикале. Именно в этом Семенов видит путь глубокого понимания синтеза Бутлеровской и кинетической теорий. Этот вывод принципиален, т.к. реакционная способность связана с электронной структурной особенностью индивидуальной молекулы. (даже сейчас).

Фактически в кинетических теориях произошел синтез структурных и динамических теорий. Они снимают противоречия дискретности непрерывности. По схеме состав – структура – свойства – процесс переходим к теориям химического процесса.

Тема №6. Химическая эволюция. Развитие форм химической организации вещества.

Проблема ХЭ раньше находилась на задворках. Генезис не был задачей для химика. Если рассматривать различные аспекты ХЭ, то окажется, что они важны как с познавательной, так и с методологической точки зрения. Этой проблемой интересуются биохимики, космохимики, геохимики, биологи и др. ХЭ определяют как происхождение и прогрессивное развитие химической формы движения материи как некой целостности или химической организации вещества во всех ее проявлениях. Значение ХЭ еще в том, что через нее можно пройти по иерархии теорий и подойти к эволюционным теориям катализа, а это связано, прежде всего, с самоорганизацией в неживых и живых системах.

Каковы аспекты ХЭ интересны? Геохимический аспект отображает историю химизма Земли. Хотя и не совпадает с теорией химической организации вещества, имеет право на существование. Он связан с появлением химической формы организации веществ из дохимической (перекликается с космохимией). По геохимическим представлениям существовал горячий материал – протопланеты, которые остывали, появлялись твердые вещества, далее шло отделение твердых фаз от жидких, образовывались химические формы. Т.е. от ионизированной плазмы дело доходило до высших форм.

По некоторым другим представлениям была, напротив, холодная масса, на которой под действием радиации шло развитие от простых к сложным радикалам, разделение твердых и жидких фаз, а дальше как в предыдущем описании.

По Вернадскому геохимия – история атомов на Земле, т.е. наука об истории планеты.

Космохимический аспект зародился на стыке астрономии, химии. По его представлениям на первой стадии образования жизни дохимические формы

существования вещества переходят в химические, на второй – образуются высокоорганизованные (в том числе органические) соединения, а на третьей – появляются биологические формы.

Развитие форм химической организации вещества.

В условиях ионизирующей плазмы (10000К) возможно существование водорода, азота. При 5000К могут образовываться оксиды титана, циркония и т.д. Ниже 5000К появляются твердые частицы. При 3000К около 12 соединений могут быть в твердой фазе в виде карбидов гафния, тантала и т.д. При 1000К около 100 веществ могут становиться твердыми. Есть предположения, что жизнь зародилась во внеземных условиях, т.к. аминокислоты находят в метеорных телах.

Важна роль появления твердых тел в качестве подложек для образования растворов и расплавов. Это косвенный показатель роли бертоллидных систем в каталитических взаимодействиях бертоллидов и дальтонилов. Дальнейшее развитие шло, основываясь на водных системах.

Биогеохимический аспект развивался Вернадским. Биосфера – особая форма организации вещества, которая при взаимодействии с другими сферами участвует в биохимической эволюции Земли (состав, структура). Роль биогеохимии заключается в том, что дается общая направленность, но не затрагивается иерархия химической формы организации вещества (сделано на основе термодинамического аспекта).

Биохимический аспект. Биохимия со своей спецификой – единственный аспект, где проблема химической эволюции решается как таковая во всей ее полноте – от вопросов происхождения элементов, отбора структур до образования живого вещества. Хочется эволюцию свести к чистой биохимии. Общее между ней и химией – изучение химических процессов, общих закономерностей химизма. Различие состоит в том, что в химии рассматриваются все формы организации вещества как самостоятельные системы, а в биохимии – только высокоорганизованные формы, более сложные процессы, относящиеся к биологическим объектам. Биохимия не интересуется реакционной способностью объектов (что главное для химии), изучая только биоформу движения материи (но не с химических позиций). Тем не менее, биохимия и химия обогащают друг друга за счет разных подходов. Биохимический аспект химической эволюции интересен потому, что рассматривается переход от системы к системе, от простых атомов до сложных структур, а во времени охватывается период в сотни миллионов лет. Если у химика центральный интерес лежит в генезисе вещества, то у биохимии – в биогенезе. Биохимия берет у химии готовые методы определения состава, структуры и т.д. и ими пользуется. Химические понятия используются для интерпретации реакций изолированных ферментов. Поскольку хи-

мия не знает принципов актуализма, использующихся в биологии, принципов эволюционных учений, то за счет этого она обогащается. Биохимический аспект дает химикам направленность ХЭ, раскрывает движение силы ХЭ, поскольку используются методы историзма, эволюционной биологии, что является мощнейшим инструментарием. Биохимия указывает отдельные этапы и стадии ХЭ.

Говоря о направленности ХЭ, следует рассмотреть общую направленность развития химических форм движения. Наиболее простой формой движения считается механическое перемещение, далее по сложности идут всевозможные поля (физическая форма), далее химическая форма движения, а наверху стоит жизнь (своеобразная форма движения). Обычно ХЭ призвана рассматривать не только химическую форму движения материи как звено в ряду, но и как развитие этой формы движения во всей ее целостности. Главный фактор – прогрессивность в развитии, биогенез. Принцип восхождения от простого к сложному (от менее организованных систем к более организованным) позволяет расставить химические системы в соответствии с историзмом, прогрессивностью в развитии.

Такие попытки классификации были, но оказались малозаметны. В 1911 году Курилов предлагал рассматривать все системы от формы первичной материи до протоплазмы, т.е. в качестве перехода от менее высокого к более высокому. Пример – образование более высокоорганизованного ионного кристалла хлорида натрия из менее организованных ионов натрия и хлора: $\text{Na}^+ + \text{Cl}^- \rightarrow \text{NaCl}$.

Существуют критерии, которые могут разделить системы по высоте организации. К одному из таких критериев относится термодинамический аспект. Но для него благоприятной ситуацией считается, если есть простейшие неорганические системы. В этом случае термодинамика со своими первым и вторым началами все объясняла. Но эта классическая термодинамика запрещает процессы с переходом к биогенезу. Если в этой термодинамике направленность процесса относится к состоянию равновесия, то в химической эволюции – к устойчивому неравновесию. По второму началу термодинамики все процессы в изолированных системах протекают в направлении возрастания энтропии ($dS > 0$). Отсюда идет закон неубывания энтропии, что определяет направленность процесса в сторону беспорядка, хаоса, а уменьшение энтропии может идти только в случае флуктуации (отклонения), что само по себе маловероятно, т.е. закон имеет вероятностный характер.

В химической эволюции преобладает фактор устойчивого неравновесия, т.е. присутствует господство не вероятностных процессов. В данном случае нужна термодинамика открытых (неравновесных) систем, приводящая к поня-

тию синергетики и т.п. Для того чтобы судить об открытых системах (в частности, о биосистемах) нужна такая термодинамика. Пригожин, Хакен получили нобелевскую премию в этой области за теорию диссипативных систем (почти чистая математика). По этой теории энтропия делится на составляющие: $dS = dS_i + dSe_i$, где dS_i – прирост энтропии за счет внутренних энергетических процессов, а dSe_i – учитывает изменение энтропии при обмене с окружающей средой. Этот подход устраняет запрет движения системы в сторону упорядочивания. Основным отличием живого от неживого (крайний случай) является то, что в живом возникает и воспроизводится низкоэнтропийная организация систем.

Николаев дает классификацию систем по степени их организации.

1. Механические системы, условием равновесия которых является равенство нулю виртуальной работы внешних сил, приложенных к системе. Описываются классической механикой, где нет понятия температуры как таковой.

2. Термодинамические системы, условием равновесия которых является максимум энтропии при минимуме свободной энергии. Описываются классической термодинамикой, которая не пользуется понятием времени, хотя в целом предназначена для описания процессов.

3. Открытые системы, которые появляются при взаимодействии систем второго типа. Эти системы являются потоками (в том числе потоками энтропии, диссипативные системы) и описываются термодинамикой необратимых процессов. Изменение энтропии по времени стремится к минимуму ($\frac{dS}{dt} \rightarrow \min$). При $\frac{dS}{dt} = \min$ система достигает максимально устойчивого состояния или стационарного режима, поток становится равномерным. При выведении из этого состояния система стремится обратно. Это первый элемент самоорганизации вещества.

4. Живые биосистемы. Стабильность поддерживается саморегулированием.

Системы 3 и 4 являются высокими, возникающими из систем низшего порядка, когда те находятся в состоянии перехода к равновесию, но не в состоянии равновесия (флуктуации). Системы 3 и 4 более важны для химической эволюции и являются системами высшего уровня.

Примерами систем 3 ранга из химии могут служить автокаталитические системы, в которых регулирование скорости может идти в две стороны. Здесь есть потоки, связанные с переносом электронов, протонов, атомных групп. Будучи открытыми, эти системы с низкой энтропией как бы оберегают себя от хаоса, распада, развала посредством автокаталитических и ингибирующих механизмов с избытком производящих энтропию.

Появление систем 4 ранга с точки зрения химической эволюции происходит за счет усложнения составляющих частей системы и за счет усложнения механизмов связей таких систем. Основную роль играет не столько природа связей, сколько способность проявлять обратные связи, т.е. способность реагировать на внешние возбудители.

С таким термодинамическим подходом можно провести границу между живым и неживым. Неживое имеет тенденции к изменению неорганических систем 1 и 2 уровней, склонно к разупорядочиванию, рассеянию энергии, ликвидации флуктуаций, т.е. стремится к максимуму энтропии, к состоянию равновесия. У систем 3 и 4 ранга (живого) все наоборот – имеются тенденции к минимуму энтропии, к способности локального аккумуляирования энергии химической реакции, к флуктуации, к нарушению равновесия, к устойчивому неравновесию. Простой пример таких систем – человек. Живой в состоянии устойчивого неравновесия, а мертвый пришел в равновесие.

Устойчивость систем 1 и 2 уровней обеспечивается изолированным характером от внешнего воздействия, а устойчивость систем 3 и 4 ранга обуславливается их открытым характером, обменом веществ с окружающей средой и механизмами обратной связи. Поток – суть динамической устойчивости.

Существуют и другие подходы, связанные с философскими понятиями. Например, информационный подход, в соответствии с которым сложность вещества характеризуется информационным уровнем вещества (принесен Ждановым из кибернетики). Сущность подхода: чем выше химическая организация вещества, тем более чувствительным рецептором (датчиком) внешних воздействий оно становится. Воздействие механических, тепловых, электрических полей фиксируется в виде возбужденного состояния при сохранении своей индивидуальности. Все это связано с теорией отражения, где есть понятия отклика на воздействие с сохранением памяти (первоначального образа) этого материального объекта.

Если взять органическое вещество, то от неорганического вещества оно будет отличаться тем, что сохраняет свою индивидуальность. Может быть гидрофилом, гидрофобом, иметь полифункциональность, иметь способность аккумуляировать энергию, чтобы войти в сопряженную реакцию. Подход рассчитывает информационную емкость вещества на один атом. Критерием повышения организации вещества здесь является повышение динамичности, способность к комплиментарности (взаимное соответствие структур), к кодированию, к дистанционному возбуждению и обратной связи. Количественной мерой информационной емкости является способность к отражению.

Биологическая организация вещества.

У биологов есть понятия отбора, актуализации, принципа преобразования развития. Эти вещи помогают химику понять, как в химической эволюции шел отбор химических элементов, структур, подход к предбиологическим формам, которые имеют признаки биообъектов.

Биологические формы

Живое вещество (верхняя граница хим. формы движения материи, предбиологические системы)

Адсорбционные слои, к-е упорядочивают систему, увеличивают концентрацию в-в

Появление водных растворов (коллоидных растворов, в том числе органических в-в)

Появление твердых кристаллических тел и осадочных пород

Твердые оксидные и силикатные системы и расплавы – начало химической эволюции по земному типу

Более системный биоподход в ХЭ.

Высокоорганизованные химические системы – это динамически устойчивые системы, состояния устойчивого неравновесия. Они характеризуются лабильностью (здесь: подвижностью связей, перестройкой вещества).

По Бауэру первой особенностью живого является процесс самодвижения системы, ее активность, которая состоит в противодействии внешним силам, активность против равновесия, несовместимого с жизнью. Принцип устойчивого неравновесия – это универсальный закон биологической формы движения материи. Чтобы система функционировала, нужно пополнять свои запасы структурной энергии, повышать уровень неравновесия, динамичности и непрерывной структурной лабильности за счет обмена веществом и энергией с внешней средой.

Поскольку рассматривается биоподход, то факторы из биологии можно перенести в химию. Отбор химических элементов (в истории, в ХЭ). В основу живого вошли органогены (азот, кислород, фосфор, сера и др.). Живое на 97% построено из них. В качестве активных центров ферментов вошли еще 12 элементов (натрий, кальций, калий), ионная сила раствора обеспечивается хлором. Они составляют около 1.6% в живом. Остальные 20 элементов, входящие в состав живого “весят” около 1%. Причем эти цифры не соответствуют распространенности этих элементов в природе (азота в сумме с углеродом менее 0.024%). Из 2млн. химических соединений (известных науке) около половины приходится на органические вещества, состоящие всего из 6–18 элементов. Здесь играют роль биохимические факторы – лабильность строения, динамическая устойчивость органогенов. Почему углерод лежит в основе? Этот элемент уникален, поскольку он и донор, и акцептор в связи, имеет различные степени окисления, образует циклы, цепи и т.п. Для органогенов характерно образование внутримолекулярных и внутрикомплексных связей, что обеспечивает все

богатство химической связи. Способны имитировать связи, характеризующиеся полупроводниковыми свойствами (органические полупроводники), образовывать макроэргические связи, обладающие огромным запасом энергии (молекулы АТФ). Способны образовывать слабые водородные связи, определяющие лабильность, многоцентровые связи (пирольные кольца иминов). Если рассматривать ХЭ с точки зрения отбора, то элементов было отобрано немного, что обусловлено биохимическими факторами, лежащими в основе жизнедеятельности.

Отбор структур – вторая стадия, соответствующая в биологии естественному отбору. Из 2млн. в построении живого принимают участие только несколько сот, из ста аминокислот в белки входит около двадцати, лишь четыре нуклеотида участвуют в передаче наследственности. Из такого малого круга структур состоит весь живой и растительный мир!

После перехода к живому ХЭ застыла. Уже отобраны все структуры и элементы, способные поддерживать динамизм устойчивого неравновесия. В древних окаменелостях нашли те же соединения, что и в современных животных, т.е. ХЭ стала. И химику нужно понять, каким образом природа приспособливает для своих нужд низкоорганизованные материалы (углекислый газ, воду и т.п.) и при обычных температурах и давлении ведет синтез сложнейших соединений из простых.

В ходе ХЭ отобраны структуры, которые обеспечили виды связи, регулирующие саму структуру. Как шла эволюция? Первыми появились фазовые границы (основа физико-химической адсорбции), что вело к концентрации и упорядочиванию вещества. Это первое проявление возможности каталитических эффектов. Вторыми образовывались полупроводниковые цепи, шел перенос протонов, трансгидрирование, появлялись группы окислительно-восстановительного и кислотного катализа. Третий фрагмент эволюции включает образование групп, ответственных за энергетическое обеспечение структур – оксо-, оксигруппы, фосфорсодержащие ферменты с макроэргическими связями, которые также начинают выполнять роль катализаторов. Их главная роль состоит в снятии термодинамических запретов путем сопряжения реакции диспропорционирования макроэргических связей с ферментативными реакциями. На четвертом этапе развивались полимерные структуры РНК и ДНК, исполняющие роль шаблона или катализаторных матриц, которые могут воспроизвести себе подобные структуры – эффект подложки катализатора. Пятыми появились структуры со связями типа металл–азот, металл–углерод, как один из типов высокоорганизованных соединений.

Отношением к катализу объясняется отбор этих структур. Роль катализа высока – это ведущий фактор ХЭ, поскольку общее у всех пяти этапов – отношение структур к катализу, проявление каталитических функций.

На ранних стадиях ХЭ катализ был не нужен, т.к. энергии было в избытке (тепло, разряды, радиация и т.д.), перекрывающей энергетический барьер. При 5000К появлялись первые твердые частицы, космопыль. В этих условиях уже возможно проявление каталитической активности. При охлаждении эти частицы исполняли роль неспецифических катализаторов в газофазных реакциях, катализаторов роста кристаллообразующихся физических тел. Нужно отметить, что неорганические структуры дезактивируют каталитическую активность элементов, по сравнению с органическими. Например, каталитическая активность железа в минерале меньше активности свободного иона Fe^{+3} , но при включении железа в порфириновое кольцо активность повышается на 10 порядков. Органическая ветвь катализаторов ведет к активации (является более высокой ступенью).

Наибольшие шансы эволюционировать имели структуры, способные к катализу. Есть мнения, что на ранних стадиях при образовании оксидов, сульфидов и других минералов (апатиты), те являлись матрицами для синтеза белка, т.к. структурно соответствуют протобелковым молекулам (Бернал, Костецкий).

Гомогенный катализ совершеннее гетерогенного. А если взять катализ металлорганическими соединениями, то это ступень перехода к высокоспецифичному катализу ферментами.

Таким образом, отбор структур шел по степени отношения к катализу. Высока роль бертоллидного состояния, т.к. соединения такого типа обладали набором активных центров с различной энергией связи, которые могли обеспечить взаимодействие с другим веществом в качестве катализатора с образованием молекул дальтонилов. Но есть различия в принципе действия химических и биокатализаторов. Последние представляют собой особого рода системы, промежуточные между бертоллидами и дальтонидами. Их бертоллидное качество состоит в широком спектре энергоемкости, зарядов связи, а дальтонидное – в строгом составе частиц с определенными активными энергетически локализованными центрами и в высокой стереоспецифичности. Другими словами биокатализаторы являются ключом для одного единственного субстрата, который реализуется на данном активном центре.

Тема №7. Продолжение раскрытия темы химической эволюции. Идей эволюционного катализа. Саморазвитие и саморегуляция систем

Интенсивно развивается система ферментоподобных катализаторов. Одни считают, что, изучая изолированный фермент, можно решить проблему. Другие

полагают, что нужно изучать фермент *in vivo* – в среде обитания, а затем переносить *in vitro*. Другими словами, существует два подхода для изучения биокатализаторов.

В отличие от обычной химической биореакция протекает не путем увеличения энтропии, а посредством уменьшения энтропии переходных состояний, вследствие чего получаются более организованные системы по схеме фермент – субстрат. При увеличении же энтропии образуется менее организованная система (более хаотичная). В создании биокатализаторов нужно стремиться к воссозданию всей системы со всеми ее параметрами и ее поддержанию. Биокатализаторы работают в определенной системе и при образовании активных комплексов.

Пусть стоит задача создания стабильных каталитических систем. Нужно *in vitro* решить, затем удовлетворить *in vivo*. Это идет через познание процессов биогенеза эволюции, что решают химия и биология.

Взаимодействуя со средой, биокатализатор воспроизводит свой каталитический аппарат. Если в обычных системах 1 и 2 ранга преобладает направление от хаоса к равновесию, то в 3 и 4 – прогрессирующее развитие, что является не просто процессом (реакцией) обеспечивающим функционирование таких высокоорганизованных систем.

В 1847 году Берцелиус говорил, что с помощью катализаторов удастся подслушать тайну лаборатории живого организма, т.е. используя опыт живой природы, можно создать катализатор. Это же направление развивали Либих, Митчерлих, Густавсон и другие.

Идеи эволюционного катализа

Эти идеи были высказаны для более простых систем, чем самоорганизующиеся. В каталитической химии появились представления о неизменяемости состава катализатора после каталитического акта, т.е. катализатор восстанавливается полностью. Но на самом деле катализатор меняет активность центров в ходе реакции. Такая мысль была высказана в 1940 году Гуотми и Канниганом: “Реакция формирует подходящую для себя поверхность катализатора”. В практике такое было известно давно, но этому не придавали должного значения. В профессиональном жаргоне даже есть термин “саморазработка”, означающий, что активность катализаторов со временем увеличивается. Далее это обсуждается в трудах Борескова, Полторака, Руденко (в наибольшей степени). Последний создал теорию саморазвития каталитических систем – теорию эволюционного катализа. В 1969 году Руденко дал строгую формулировку эволюционного катализа.

Основные положения:

1. Тезис о неизменности катализатора неверен (нужен пересмотр). Его активные центры претерпевают изменения.

2. Понятие кинетического континуума. Катализатор рассматривается не как “третье тело”, а как полноправный участник реакции, также как и примеси, и стенки сосуда, и сами реагенты. Это все неотделимо друг от друга в системе.

3. Система с изменяющимся катализатором самодвижущаяся. Идет самоприспособление такой системы под базисную реакцию.

Вводится некая вероятность изменения активности катализатора P . Если $P=0$, то это классически идеальный акт, т.е. сам катализатор неизменен. Если $P=1$, катализатор рассматривается в качестве реагента, т.е. может взаимодействовать в стехиометрических соотношениях. Реальный же катализатор соответствует неравенству $0 < P < 1$. При этом идет саморазвитие каталитической системы. Его основой является статистический фактор. Это возможно при постоянно протекающей базисной реакции, при наличии комплекса постоянных условий (давление, температура, объем, приток реагентов, отвод тепла и продуктов – проточные системы), при комплексном перемешивании условий, приводящем к нарушению стационарности открытой системы, но не к прекращению ее функционирования (катализатор не дезактивируется). Это условия каталитического континуума.

Центры катализатора могут изменяться. Если a – активность центра и то может быть и $a_1 > a_2$ (убыль активности), и $a_1 < a_2$. Эти процессы равновероятны (действие статистического фактора).

Необходимо учитывать действие кинетического фактора. Оно придает направленность процессу. Поскольку при условии $a_1 < a_2$ возрастает интенсивность базисных реакций, увеличивается частота каталитических актов, то при равной вероятности единичных событий вероятность цепи прогрессивных изменений центров катализатора становится больше, чем вероятность цепи регрессивных изменений центров катализатора – $P_{\text{прог}} > P_{\text{регр}}$, $P_{\text{прог}} > 1$. Это означает, что система движется не хаотичном направлении, а в определенном.

В процессе саморазвития происходит некий “естественный отбор” тех центров, которые обладают большей активностью. На них сосредотачивается базисная реакция. Центры же, активность которых падает ($a_1 > a_2$), выключаются из кинетического континуума, не выживают в ходе реакции. В этом эволюция сопровождается уменьшением бесполезного рассеивания энергии базисной реакции и повышением степени ее использования на работу (на увеличение количества активных центров катализаторов). Это сопровождается повышением уровня организации каталитической системы, т.е. системы с меньшей энтропией.

Особенность – саморегулирование изменений в природе под действием катализаторов. Фактором изменения является наличие противоречий между упрощенными и усложненными системами. Можно привести классификацию систем по степеням организации от низких до высоких. Идеальные кристаллы → реальные кристаллы (с примесями из сферы реакции) → твердые катализаторы с хемосорбционными комплексами (все еще гетерокатализ) → простые гомогенные катализаторы → системы комплексов металлоорганики → биокатализаторы → ферменты.

Для современного взгляда на катализаторы характерен динамический подход к проблеме (развитие, саморазвитие систем). При рассмотрении проблемы эволюционного катализа мы встречаемся с рядом методологических проблем, требующих нового уровня теоретического мышления, который характеризуется отношением между двумя типами процессов: стохастических (не имеющих направленность) количественных и качественных изменений и прогрессивной направленности реакций, приводящей к повышению уровня организации.

Эволюционный катализ является новым, концептуальным подходом, более высокоуровневым после квантовых представлений. Рассмотрение проблемы эволюционного катализа подводит к рассмотрению новых систем не только в химии, естествознании, социальных явлениях, мироздании и миропонимании. Такой новой концептуальной системой рационализации является эволюционно-синергетическая парадигма (ЭСП).

Тема 8. Эволюционно-синергетическая парадигма. Основные понятия и категории синергетики. Диссипативные структуры по Пригожину.

На других факультетах читается: “Концепция в современном естествознании”. Вопросу ЭСП отводится серьезное внимание.

Под парадигмой понимается определенная совокупность общепринятых идей и методов научного исследования, а поэтому синергетику как парадигму можно характеризовать тремя признаками: нелинейность, самоорганизация и открытая система. Это выше, чем теория. Повышается тип научного мышления. Раньше был классический тип научного мышления, заложенный Ньютоном и ему подобными. Неклассический же тип появился с идеями квантовой механики, релятивистскими представлениями. Так, в основу ЭСП положено постнеклассическое научное мышление. Характеризуется новой методологической и эвристической стороной.

Основа – представления кибернетики, общей теории систем, использование закономерностей развития – эволюция и функционирование живого. Оказалось, что последние закономерности действуют не только в живом, но и в не-

живом. А специфика лишь в том, что в живом находятся особые сочетания, что является отражением эволюционной жизни на Земле. В рамках кибернетики (50^е годы) и физики (60^е годы) сформировано понятие самоорганизации, которое используется в ЭСП. Важно, что ЭС подход и теория самоорганизации была воспринята всеми образованными людьми и стала важным собственным мировоззрением.

ЭСП использует философские подходы глубокой древности. Сопоставляется и используется два типа мышления: восточный (Индия, Китай) и западного. Первый характеризуется тем, что мир рассматривается в некоем единстве – родственность всего всему (природы и человека, вселенства и микроскопичности). Классика (зародилась при Аристотеле) подразумевала разрыв природы и человека, исключала все случайное и единичное, все подчинено закономерностям. Таким образом, случайные отклонения (флуктуации) остаются за рамками эволюции. Но расчленение знаний о мире неправомерно, они едины. Об этом нужно говорить, т.к. наблюдаются совпадения событий, в, казалось бы, несопоставимых областях.

Последние 15–20 лет стал закладываться единый фундамент, модель миропонимания – синергетика. Она вводит принципиально новое видение мира. По классике (Ньютон, Лаплас) процессы в мире обратимые, ретропредсказуемые на неограниченном промежутке времени, эволюция линейна и без отклонений, без возврата, без побочных явлений. Синергетика основана на общности закономерностей всех уровней материальной и других организаций, нелинейности, т.е. многовариантности и необратимости, глубинности взаимосвязей хаоса и порядка, соответствующей случайности и необходимости. Синергетика дает новое понимание мира. Мир – это открытая система, мир не ставший, а становящийся, т.е. не сущий, а постоянно развивающийся. Это относится как к микро, так и к макроявлениям. Функционируя по нелинейным законам, мир полон неожиданных поворотов, связанных с выбором путей дальнейшего развития. Появление синергетики означает то, что в науке происходит революция, не меньшая по значимости квантовомеханических представлений на рубеже века. Синергетика синтезирует фрагменты обобщенного научного знания (восточного и западного). Восток символизирует единый путь Дао, которому следует мир и человек в нем. Запад – принцип рационального мышления, анализа, опирающегося на эксперимент, математический аппарат. Синергетика посредством фундаментальных идей и образов пытается описать взаимоподобные области и пытается овладеть способами управления этими процессами. Синергетикой описываются открытые системы, обмен энергией и веществом со средой, нелинейные системы.

Предмет синергетики – механизмы саморегуляции, механизмы устойчивого существования и саморазрушения. Механизмы разрушения и образования структур, переходы от хаоса к порядку и обратно не зависят от природы элементов или подсистем. Они присущи природе, человеку и социуму. Поэтому синергетика – междисциплинарное направление в исследовании. Синергетика имеет свой специфический язык и понятия. Например “аттрактор” – направленность нелинейной системы. Т.е. если система может быть направлена, то она ее найдет в конусе аттрактора (мяч всегда найдет ямку, в которой остановится). “Бифуркация” – выбор пути развития (раздвоение, разделение, разветвление чего-либо). В биологии эволюционное дерево является аналогом бифуркации в синергетике, т.е. это ветвление путей эволюции систем. Если система линейна (классика), то развивается по определенным законам, а нелинейная – по законам бифуркации. Примером ее может служить положение витязя перед развилкой у трех дорог. “Фрактал” – самоподобие, масштабная инвариантность. Малый фрагмент структуры подобен другому крупному и даже структуре в целом. Пример – контур облака повторяет очертание береговой линии. Это также отражение старых представлений о монадах в мире – повторяющихся структурах. По Лейбницу монада отражает свойства мира в целом.

Итак, синергетика раскрывается несколькими особенностями.

При структурном подобии имеется общность в живой и неживой природе. Например, схожи рукава галактик, вихри циклона, панцирь улитки, форма морской раковины. Все структуры по синергетике эволюционны, т.е. любая представлена лишь определенной стадией развития процесса.

Есть функциональная общность процессов самоорганизации. Динамика установившихся сложных систем поддерживается путем чередования ритмов, сменой состояний: подъем – спад, ночь – день и т.д. Все живое и неживое поддерживается этими ритмами.

Третья особенность синергетики – открывается случайность, как элемент мира. Случайность играет особую роль процессов саморегуляции и саморазвития.

Синергетика характерна для достаточно сложных, открытых систем, далеких от состояния равновесия. Примерами сложных систем в химии служат цепные реакции – простые цепи Боденштейна: $\text{Cl}_2 \rightarrow 2\text{Cl}\cdot$, $\text{Cl}\cdot + \text{H}_2 \rightarrow \text{HCl} + \text{H}\cdot$. За P_2O_5^* $\rightarrow \text{O}_2 \rightarrow \text{O}\cdot + \text{O}\cdot$ Семенову дали Нобелевскую премию – единственному ученому из СССР.

Эти сложные системы считаются колебательными. Реакция $\text{A}_{\text{красное}} \rightarrow \text{B}_{\text{синее}}$ характеризуется короткодействующими силами (соизмеримыми с атомными диаметрами). Молекулы устанавливаются между собой на гораздо больших расстояниях и реагируют все разом, по сигналу, а система становится то крас-

ная, то синяя. Эти реакции идут в сильно неравновесных системах. Такие системы характеризуются рядом признаков, которым соответствуют понятия синергетики.

Отличие равновесных от неравновесных систем в том, что последние реагируют на внешние условия; поведение систем случайно и не зависит от начальных условий, но зависит от ее предыстории (эффект памяти); приток энергии к системе создает порядок, и энтропия ее уменьшается. Для таких систем характерна бифуркация, т.е. наличие переломных точек в развитии системы. Также характерна когерентность – система ведет себя как единое целое, как резервуар дальнедействующих сил. Несмотря на короткодействие химических сил, система структурируется так, как если бы любая молекула была информирована о состоянии системы в целом. Если в классике установившаяся система ассоциируется с понятием детерминичного симметричного времени, то неустановившаяся система – с понятием вероятного времени, которое характеризуется нарушением симметрии между прошлым и будущим.

От исхода конкуренции между устойчивостью и неустойчивостью из-за флуктуации зависит порог устойчивости системы. Преодолев порог, система попадает в критическое состояние, называемое точкой бифуркации. В ней система неустойчива относительно флуктуации и может перейти к состоянию устойчивости (по новому), т.е. система колеблется вокруг нескольких путей эволюции. Наибольшая флуктуация может послужить в точке бифуркации новым направлением. Т.е. идет сочетание случайности и детерминизма от одной такой точки к другой. Случайности и детерминизм взаимно дополняют друг друга.

Диссипативные структуры. (Диссипация – потеря, испускание энергии).

В точке бифуркации флуктуация достигает такой силы, что система разрушается, и нельзя предсказать – станет ли система хаосом или лучше упорядочится. Если произойдет последнее, то получится диссипативная система, т.к. для ее поддержания требуется больше энергии, чем для поддержания предыдущей простой. Система диссипирует энергию, т.е. производит энтропию, а т.к. система устойчиво существует, то энтропия становится прародительницей порядка.

ЭСП – общая для всех дисциплин системы миропонимания всего во всем. Много места отдано бифуркации, флуктуации, нелинейности и т.д. Это отличные понятия от тех, что нам ближе по сложившемуся типу мышления.

Критерии оценки самостоятельной работы

I. Оценка устных ответов:

Отметка "Отлично"

1. Дан полный и правильный ответ на основе изученных теорий.

2. Материал понят и изучен.
3. Материал изложен в определенной логической последовательности, литературным языком.
4. Ответ самостоятельный.

Отметка "Хорошо"

- 1, 2, 3, 4 – аналогично отметке "Отлично".
5. Допущены 2-3 незначительные ошибки, исправленные по требованию преподавателя, наблюдалась "шероховатость" в изложении материала.

Отметка "Удовлетворительно"

1. Учебный материал, в основном, изложен полно, но при этом допущены 1-2 существенные ошибки (например, неумение применять законы и теории к объяснению новых фактов).
2. Ответ неполный, хотя и соответствует требуемой глубине, построен несвязно.

Отметка "Неудовлетворительно"

1. Незнание или непонимание большей или наиболее существенной части учебного материала.
2. Допущены существенные ошибки, которые не исправляются после уточняющих вопросов, материал изложен несвязно.

IV. КОНТРОЛЬ ДОСТИЖЕНИЯ ЦЕЛЕЙ КУРСА

№ п/п	Контролируемые разделы / темы дисциплины	Коды и этапы формирования компетенций	Оценочные средства - наименование		
			текущий контроль	промежуточная аттестация	
1	Темы практических занятий Раздел 1. Занятия 1-9. Основные этапы развития и становления химических знаний. Периодизацию в Основные знания, полученные с древнейших времен до становления химии как науки. Методологические пробле-	УК-1	Знает:	Собеседование (УО-1)	Вопросы к экзамену 1-6
			Умеет:	Собеседование (УО-1) Реферат (ПР-4)	Вопросы к экзамену 7-12 Темы рефератов 1-12
			Владеет:	Собеседование (УО-1) Реферат (ПР-4)	Вопросы к экзамену. 13-17 Темы рефератов 12-24

	мы химии. Эволюционно-синергетическая парадигмаю				
2.	Раздел2. Современная химия. Занятия 1-18.		Знает:	Собеседование (УО-1)	Вопросы к экзамену № 1-4, 13,14
			Умеет:	Собеседование (УО-1)	Вопросы к экзамену № 5-8, 15
			Владеет:	Собеседование (УО-1)	Вопросы к экзамену № 9-12, 16,17.

Типовые контрольные задания, методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений и навыков и (или) опыта деятельности, а также критерии и показатели, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и характеризующие этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы, представлены в фонде оценочных средств.

V. СПИСОК УЧЕБНОЙ ЛИТЕРАТУРЫ И ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Основная литература

(электронные и печатные издания)

1. Миттова, И.Я. История химии с древнейших времен до конца XX века / И.Я. Миттова, А.М.Самойлов. - Долгопрудный: Интеллект, 2012.- Т.1.- 411 с.
<http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:690506&theme=FEFU>
2. Миттова, И.Я. История химии с древнейших времен до конца XX века / И.Я. Миттова, А.М.Самойлов. - Долгопрудный: Интеллект, 2009.- Т.1.- 415 с.
<http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:293698&theme=FEFU>
- 3.Владимиров А. А. Зеленов, Л. А. История и философия науки [Электронный ресурс] : Уч. пособ. для магистров, соискателей и аспирантов / Л. А. Зеленов, А. А. Владимиров, В. А. Щуров. - 2-е изд., стереотип. - М. : Флинта : Наука, 2011. - 472 с. - Режим доступа:
<http://znanium.com/bookread.php?book=406114>
4. Савинкина Е.В. История химии. Элективный курс [Электронный ресурс] : учебное пособие / Е. В. Савинкина, Г. П. Логинова, С. С. Плоткин. - 2-е изд. (эл.). -М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012.- 200 с.
<http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996309665.html>

5. Савинкина, Е.В. История химии. Элективный курс [Электронный ресурс]: методическое пособие / Г.П., Логинова, С.С., Плоткин, Е.В., Савинкина. - М.: Лань, 2012. - 72с. http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=8700.

Дополнительная литература:

(электронные и печатные издания)

1. С.И. Левченков. История химии. Краткий очерк истории химии. Учебное пособие С.И. Левченков (конспект лекций). М.: Из-во МГУ, 2000.-27 с. <http://znanium.com/bookread.php?book=406114>

2. Волков, В. А., Вонский, Е. В., Кузнецова, Г. И.. Выдающиеся химики мира /В.А.Волков, Е.В.Вонский, Г.И.Кузнецова. - М.: Высшая школа, 1991. -656 С.

<http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:30555&theme=FEFU>

3.Краткая история химии : развитие идей и представлений в химии / А. Азимов пер. с англ. З. Е. Гельмана. М.: Мир , 1983.

<http://lib.dvfu.ru:8080/lib/item?id=chamo:47846&theme=FEFU>

Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети

«Интернет»

1. <http://e.lanbook.com/>
2. <http://www.studentlibrary.ru/>
3. <http://znanium.com/>
4. <http://www.nelbook.ru/>
5. Общий очерк истории химии [Электронный ресурс] режим доступа. – <http://www.dic.academic.ru/>
6. История возникновения химии[Электронный ресурс] режим доступа. – <http://www.day-chemist.html/>
7. История химии, биографии ученых[Электронный ресурс] режим доступа. – <http://www.alhimikov.net/>
8. Хронология химических открытия[Электронный ресурс] режим доступа. – [http://www.chemistry.ru /](http://www.chemistry.ru/)
9. Сайт учителя биологии и химии[Электронный ресурс] режим доступа. – <https://sites.google.com/site/portfolioucitelabiologiihimii/metodiceskaa-kopilka>
10. Каталог образовательных Интернет – ресурсов[Электронный ресурс] режим доступа. – <http://catalog.vlgmuk.ru/>
11. Каталог образовательных ресурсов [Электронный ресурс] режим доступа. – <http://window.edu.ru/>
12. Российский общеобразовательный портал [Электронный ресурс] режим доступа. – <http://www.school.edu.ru/>
13. Бытие российской науки [Электронный ресурс] режим доступа. – <http://www.scientific.ru/dforum/scilife/1341917059>

14. Сайт Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова: <http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/phys.html>
15. Левченков С. И. Краткий очерк истории химии - www.physchem.chimfak.rsu.ru/Source/History/
16. Волков, В. А., Вонский, Е. В., Кузнецова, Г. И.. Выдающиеся химики мира [Текст] /В.А.Волков, Е.В.Вонский, Г.И.Кузнецова. - М.: Высшая школа, 2014. <http://rutracker.org/forum/viewtopic.php?t=2380705>
17. История науки [Текст]: учеб. пособ. для студ. вузов / Соломатин В.А. - Москва : ПЕР СЭ, 2003. <http://www.booka.ru/books/120068#about>
18. Волков, В. А., Вонский, Е. В., Кузнецова, Г. И.. Выдающиеся химики мира [Текст] /В.А.Волков, Е.В.Вонский, Г.И.Кузнецова. - М.: Высшая школа, 2014. <http://rutracker.org/forum/viewtopic.php?t=2380705>
19. История науки [Текст]: учеб. пособ. для студ. вузов / Соломатин В.А. - Москва : ПЕР СЭ, 2003. <http://www.booka.ru/books/120068#about>

VI. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

Подготовка к практическим занятиям (раздел 1)

Раздел1 История развития химии

3 семестр

Задание на дом к занятию № 1

Просмотреть материал учебных пособий, учебников и подготовиться к обсуждению следующих вопросов:

Введение. Происхождение термина "химия". Определение химии как науки.

Задание на дом к занятиям № 2-3

Просмотреть материал учебных пособий, учебников и подготовиться к обсуждению следующих вопросов:

Химия в Древнем мире. Химические знания и ремесла в первобытном обществе и в Древнем мире. Химия XVII - XVIII вв.

Раздел2 Становление научной химии

Задания на дом к занятиям 4-5.

Просмотреть материал учебных пособий, учебников и подготовиться к обсуждению следующих вопросов:

Химия начала XIX вв. Основные достижения химии XIX в. Органическая химия в первой половине XIX в

Раздел3 Методологические проблемы химии

Задания на дом к занятиям 6-7.

Просмотреть материал учебных пособий, учебников и подготовиться к обсуждению следующих вопросов:

Химия во второй половине XIX в Концептуальные и методологические проблемы химической науки

Задание на дом к занятию 8.

Просмотреть материал учебных пособий, учебников и подготовиться к обсуждению следующих вопросов:

Математизация и физикализация химических теорий и их роль в формировании химического знания.

Задание на дом к занятию 9.

Просмотреть материал учебных пособий, учебников и подготовиться к обсуждению следующих вопросов:

Понятийный аппарат, формулы и другие знаковые средства в химии и их эволюция. Место химических объектов в иерархии форм существования материи. Эволюционно-синергетическая парадигма, новое миропонимание.

деградации органических веществ

VII. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Лекционная аудитория (мультимедийный проектор, настенный экран, ноутбук).

Проведение занятий с использованием мультимедийной аппаратуры для демонстрации иллюстративного материала; тестирование студентов в системе Webrate

VIII. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

Паспорт оценочных средств по дисциплине «История и методология химии»

№ п/п	Контролируемые разделы / темы дисциплины	Коды и этапы формирования компетенций		Оценочные средства - наименование	
				текущий контроль	промежуточная аттестация
1	Темы практических занятий Раздел1. Занятия 1-9. Основные этапы развития и становления химических знаний. Периодизацию в Основные знания, полученные с древнейших времен до становления химии как науки. Методологические проблемы химии. Эволюционно-синергетическая парадигма	УК-1	Знает:	Собеседование (УО-1)	Вопросы к экзамену 1-6
			Умеет:	Собеседование (УО-1) Реферат (ПР-4)	Вопросы к экзамену 7-12 Темы рефератов 1-12
			Владеет:	Собеседование (УО-1) Реферат (ПР-4)	Вопросы к экзамену. 13-17 Темы рефератов 12-24
2.	Раздел2. Современная химия. Занятия 1-18.	УК-1	Знает:	Собеседование (УО-1)	Вопросы к экзамену № 1-4, 13,14
			Умеет:	Собеседование (УО-1)	Вопросы к экзамену № 5-8, 15
			Владеет:	Собеседование (УО-1)	Вопросы к экзамену № 9-12, 16,17.

Шкала оценивания уровня сформированности компетенций по дисциплине «История химии и её современное состояние»

Наименование категории (группы) универсальных компетенций	Код и наименование универсальной компетенции выпускника	Код и наименование индикатора достижения универсальной компетенции
---	---	--

<p>Системное и критическое мышление</p>	<p>УК-1 Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач</p>	<p>УК-1.1. Анализирует задачу, выделяя ее базовые составляющие, опираясь на методологию химии;</p> <p>УК-1.2. Определяет, интерпретирует и ранжирует информацию, требуемую для решения поставленной задачи с учетом исторического опыта;</p> <p>УК-1.3. Осуществляет поиск информации для решения поставленной задачи по различным типам запросов в течение необходимого исторического отрезка времени;</p> <p>УК-1.4. При обработке информации отличает факты от мнений, интерпретаций, оценок, формирует собственные мнения и суждения, аргументирует свои выводы и точку зрения, в том числе с применением философского понятийного аппарата.</p> <p>УК-1.5. Рассматривает и предлагает возможные варианты решения поставленной задачи, оценивая их достоинства и недостатки с учетом накопленного в науке исторического опыта.</p>
---	---	---

Критерии оценки знаний умений и навыков при текущей проверке

I. Оценка устных ответов:

Отметка "Отлично"

1. Дан полный и правильный ответ на основе изученных теорий.
2. Материал понят и изучен.
3. Материал изложен в определенной логической последовательности, литературным языком.
4. Ответ самостоятельный.

Отметка "Хорошо"

- 1, 2, 3, 4 – аналогично отметке "Отлично".

5. Допущены 2-3 несущественные ошибки, исправленные по требованию преподавателя, наблюдалась "шероховатость" в изложении материала.

Отметка "Удовлетворительно"

1. Учебный материал, в основном, изложен полно, но при этом допущены 1-2 существенные ошибки (например, неумение применять законы и теории к объяснению новых фактов).

2. Ответ неполный, хотя и соответствует требуемой глубине, построен несвязно.

Отметка "Неудовлетворительно"

1. Незнание или непонимание большей или наиболее существенной части учебного материала.

2. Допущены существенные ошибки, которые не исправляются после уточняющих вопросов, материал изложен несвязно.

Примерный перечень оценочных средств (ОС)

I. Устный опрос

1. Собеседование (УО-1) (Средство контроля, организованное как специальная беседа преподавателя с обучающимся на темы, связанные с изучаемой дисциплиной, и рассчитанное на выяснение объема знаний обучающегося по определенному разделу, теме, проблеме и т.п.) - Вопросы по темам/разделам дисциплины.

2. . Экзамен (Средство промежуточного контроля) – Вопросы к экзамену, образцы билетов.

II. Письменный опрос

1. Реферат (ПР-4)

(Продукт самостоятельной работы обучающегося, представляющий собой краткое изложение в письменном виде полученных результатов теоретического анализа определенной научной (учебно исследовательской) темы, где автор раскрывает суть исследуемой проблемы, приводит различные точки зрения, а также собственные взгляды на нее.) – Темы рефератов.

Вопросы для текущей проверки

1. Тема: Структура химического знания. Химическое знание как совокупность экспериментальных фактов, зависимостей, правил, понятий, теорий и законов.

2. Тема: Происхождение термина "химия". Многозначность этого понятия. Определение химии как науки.

3. Тема: Химия XVII - XVIII вв. Работы Ломоносова, его роль в развитии российской науки.

4. Тема: Химия XIX вв. Основные достижения неорганической химии XIX в. (общая характеристика).

5. Тема: Органическая химия в первой половине XIX в. Опровержение витализма. Работы Либиха, Велера, Кольбе, Бертло, Кекуле, Купера, Бутлерова.

6. Тема: Химия во второй половине XIX в. Возникновение стереохимии (Вант-Гофф, Ле Бель).

7. Тема: Периодический закон и таблица элементов Менделеева. Предшественники Менделеева. Последующее развитие периодической таблицы.

8. Тема: Химия в XX в. Возникновение радиохимии (Кюри-Склодовская). Создание планетарной модели атома (Резерфорд, Бор). Теория химической связи (Льюис, Коссель, Полинг, Малликен).

9. Тема: Химия и медицина. Развитие смежной области в XX веке.

10. Тема: Возникновение и развитие физической и коллоидной химии.

11. Тема: Химия поверхностных явлений. Возникновение и развитие.

12. Тема: Исторический обзор развития химии в России в XX веке (на примере работ выдающихся химиков).

13. Тема: Альфред Нобель, Нобелевские премии и лауреаты по химии.

14. Тема: Концептуальные и методологические проблемы химической науки. Характер химических законов. Химические законы - одни из основных законов природы, связанные с сохранением материи, массы и энергии, с законами движения и развития.

15. Тема: Химические законы и теории как отражение состава, строения и химических свойств объектов химии, условий осуществления и природы химического акта и химической эволюции. Факторы пространства и времени в химических законах, теориях и методах исследования и анализа.

16. Тема: Понятийный аппарат, формулы и другие знаковые средства в химии. Их роль в формировании химического знания. Основные понятия химии и их развитие (химический элемент, атом, ион, молекула, химическое соединение, вещество, валентность, химическое сродство, химическая связь, металл и металлоид, кислота и основание, мономер и полимер, реагент и катализатор, химическая и каталитическая система и т.д.). Формулы как знаковые модели в структурной химии. Использование символов.

17. Тема: Типология объектов химии. Место химических объектов в иерархии форм существования материи. Атомно-молекулярный уровень структурной организации материи в химических объектах, дискретность химических объектов. Место химизма в иерархии форм движения материи.

Примерные темы рефератов

1. История представлений об атомах и молекулах, атомистика Дальтона, теории Авогадро, Канницаро.

2. Количественные соотношения в химии. Пневмохимия (Бойль), атомные веса, стехиометрические законы.
3. История развития учения о валентности и химической связи.
4. Материалистические и идеалистические направления в теории строения молекул: теория Бутлерова и теории мезомерии и резонанса.
5. Идеалистические представления в квантовой химии, их преодоление.
1. 6. Методологические проблемы физической химии. Энергетизм Оствальда.
6. История возникновения и развитие аналитической химии.
7. Методологические проблемы катализа.
8. Периодический закон, развитие идей о привилегиях дискретности в химии.
9. Проблемы и специфика химической формы материи.
10. Термодинамический подход к эволюции в экологических системах.
11. Исторические и методологические аспекты учения о химическом процессе.
12. Попытки классификации и систематизации химических элементов до 1869 года.
13. Развитие электрохимии.
14. Теория химического строения и проблема ароматичности.
15. Проблемы физической химии в трудах Д. И. Менделеева.
16. Атомистика Дальтона об эмпиризме и о роли теоретического мышления.
17. Философские аспекты проблемы химической эволюции. Биохимический подход к проблеме химической эволюции.
18. Квантовая химия: смотрим на мир по-новому?
19. От теории радикалов к структурной химии.
20. Современная экология: наука или мировоззрение.
21. А. А. Баландин и его мультиплетная теория.
22. Эволюция основных понятий в химии.
23. Проблема “сведения” химии к физике: аргументы “за” и “против”.
24. Научная жизнь Я. Г. Вант-Гоффа

Промежуточная аттестация

Вопросы к экзамену

1. Тема: Химизм в биологической форме движения как фактор, обуславливающий явление жизни. Проявление химического движения в различных объектах природы (биохимия, геохимия, биохимия, экологическая химия, космохимия и др.).

2. Тема: Химия среди других наук естественного цикла. Химия среди других наук, изучающих вещество. Химия в системе классификации научного

знания. Связь химии с физикой (с молекулярно-кинетической теорией и термодинамикой, с электродинамикой, квантовой механикой и физикой твердого тела)

3. Тема: Методы исследования химических явлений. Роль эксперимента в химии. Недоступность химических микрообъектов (атомов, молекул и элементарных химических систем) непосредственному чувственному восприятию и их познание через макроскопические проявления.

4. Тема: Прямые и косвенные методы химического анализа. Анализ с использованием химических превращений анализируемого вещества и специальных реактивов - прямой метод. Анализ путем измерения каких-либо физических параметров с помощью физических методов косвенный физико-химический метод.

5. Тема: Особенности современной химии. Значение современной химии для понимания происхождения жизни и ее эволюции. Роль современной химии в истолковании процессов жизнедеятельности. Химия в системе наук о жизни. Проникновение химических знаний в смежные науки.

6. Тема: Дифференциация химического знания, новые дисциплины и новые научные журналы как отражение этого процесса. Структура современного химического знания. Фундаментальные и прикладные исследования в химии. Условность приоритета, глобализация фундаментальной науки.

7. Тема: Химия и современная культура.

8. Тема: Особенности современной химии. Значение современной химии для понимания происхождения жизни и ее эволюции. Роль современной химии в истолковании процессов жизнедеятельности. Химия в системе наук о жизни. Проникновение химических знаний в смежные науки.

9. Тема: Дифференциация химического знания, новые дисциплины и новые научные журналы как отражение этого процесса. Структура современного химического знания. Фундаментальные и прикладные исследования в химии. Условность приоритета, глобализация фундаментальной науки.

10. Тема: Химия и современная культура.

11. Тема: Особенности современной химии. Значение современной химии для понимания происхождения жизни и ее эволюции. Роль современной химии в истолковании процессов жизнедеятельности. Химия в системе наук о жизни. Проникновение химических знаний в смежные науки.

12. Тема: Дифференциация химического знания, новые дисциплины и новые научные журналы как отражение этого процесса. Структура современного химического знания. Фундаментальные и прикладные

исследования в химии. Условность приоритета, глобализация
фундаментальной науки.

Образцы экзаменационных билетов

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования

«Дальневосточный федеральный университет»

Школа естественных наук

ООП 04.03.01- Химия

шифр, название направления подготовки

Дисциплина «История и методология химии »

Форма обучения очная

Семестр 3 20- 21 учебного года

Реализующая кафедра: Физической и аналитической химии

Экзаменационный билет № 1

1. Химия среди других наук естественного цикла. Происхождение термина "Химия".
2. Общая картина развития физической химии в XIX и XX вв.

Зав. кафедрой _____ (Л.И. Соколова)
М.П. (школы)

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования

«Дальневосточный федеральный университет»

Школа естественных наук

ООП 04.03.01- Химия

шифр, название направления подготовки

Дисциплина История и методология химии Форма обучения очная

Семестр 3 20- 21 учебного года

Реализующая кафедра: Физической и аналитической химии

Экзаменационный билет № 2

1. Особенности развития химии в XX в. Дифференциация химического знания. Интеграционные процессы.
2. .
3. Стратегические направления в развитии химической науки на рубеже XX, XXI вв.

Зав. кафедрой _____ (Л.И. Соколова)
М.П. (школы)