

**Материалы общероссийской научной конференции
«Перспективы развития ВУЗовской науки»**

Физико-математические науки

**ТЕРМОХИМИЧЕСКАЯ КИНЕТИКА И
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
КАК СПОСОБ ПОВЫШЕНИЯ КАЧЕСТВА
ОБРАЗОВАНИЯ В ВУЗЕ**

Виноградова М.Г., Артемьев А.А.
Тверской институт экологии и права
Тверь, Россия

Обеспечение качества образования – одна из главных задач современности. Сейчас в эпоху научно-технического прогресса, глобальных интеграционных процессов в науке и культуре вузовское образование должно обладать способностью к опережающему развитию, быть научным и опираться на последние достижения науки и техники.

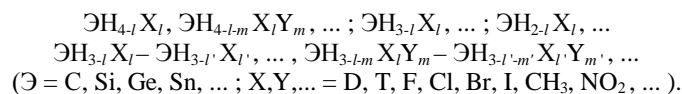
Этому способствует проведение фундаментальных исследований в вузах с привлечением студентов и аспирантов.

В настоящее время кафедрой естественных дисциплин Тверского института экологии и права и кафедрой физической химии

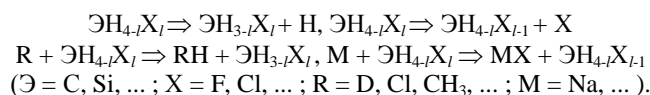
Тверского государственного университета ведутся работы по проекту РФФИ №07-03-96403-Центр-а «Термохимическая кинетика радикальных реакций: математическое моделирование».

Проект направлен на выявление закономерностей, связывающих тепловые эффекты, энергии активаций, логарифмы констант скоростей радикальных реакций распада и замещения со строением исходных частиц, а также на разработку количественных методов расчета и предсказания указанных величин.

Нами проведен анализ состояния числовых данных по термохимическим характеристикам радикальных реакций распада и замещения в органических соединениях, выведен ряд рабочих формул, пригодных для массового расчета и прогнозирования энергий связей, тепловых эффектов, энергий активаций, логарифмов констант скоростей радикальных реакций распада и замещения в рядах мало изученных и не изученных соединениях, таких как:



Тепловые эффекты реакций вида



есть не что иное, как энергии разрыва связей в исходной молекуле

$$\begin{aligned} q_D^{(1)l} &= a_D^{(1)} + b_D^{(1)}l + c_D^{(1)}l^2 \quad (l = 0, 1, 2, 3), \quad q_D^{(2)l} = a_D^{(2)} + b_D^{(2)}l + c_D^{(2)}l^2 \quad (l = 1, 2, 3, 4), \\ q_s^{(1)l} &= a_s^{(1)} + b_s^{(1)}l + c_s^{(1)}l^2 \quad (l = 0, 1, 2, 3), \quad q_s^{(2)l} = a_s^{(2)} + b_s^{(2)}l + c_s^{(2)}l^2 \quad (l = 1, 2, 3, 4). \end{aligned} \quad (1)$$

где $a_D^{(1)}, b_D^{(1)}, c_D^{(1)}, a_D^{(2)}, b_D^{(2)}, c_D^{(2)}$ – некоторые параметры.

В таком же виде можно представить энергии активаций.

На основе полученных формул, проведены численные расчёты по ряду термохимических характеристик: средним энергиям связей, энергиям разрыва связей, тепловым эффектам и энергиям активаций, логарифмам констант скоростей радикальных реакций.

В табл. 1 и табл. 2 показаны экспериментальные данные [1,2] и предсказанные значения соответственно энергии разрыва связей метилзамещенного силана и энергии активаций и логарифмы констант скоростей реакций радикального замещения. Звездочкой здесь помечены значения,

вычисленные нами с использованием квадратичной (частично линейной) зависимости.

Анализ экспериментальных данных позволил выявить некоторые закономерности в рядах однотипных реакций [3,4], построить графические зависимости «Свойство – степень замещения» и др. В дальнейшем планируется проведение квантовомеханических расчетов реперных соединений при помощи методов квантовой химии.

Полученные результаты можно использовать при проведении термохимических и др. расчетов исследуемых веществ и при подготовке справочных изданий. Нами они также применяются при подготовке учебных пособий и монографий, а также при чтении ряда общих и специальных дисциплин.

Таблица 1. Энергии разрыва связей во метилзамещённых силана (в кДж/моль)[1]

Уравнение реакции	D_{298} (к Дж/моль)	Уравнение реакции	D_{298} (к Дж/моль)
$\text{SiH}_4 = \text{SiH}_3 + \text{H}$	395±12,5	$\text{CH}_3\text{SiH}_3 = \text{CH}_3 + \text{SiH}_3$	400±42
$\text{CH}_3\text{SiH}_3 = \text{CH}_3\text{SiH}_2 + \text{H}$	495*	$(\text{CH}_3)_2\text{SiH}_2 = \text{CH}_3\text{SiH}_2 + \text{CH}_3$	510*
$(\text{CH}_3)_2\text{SiH}_2 = (\text{CH}_3)_2\text{SiH} + \text{H}$	477	$(\text{CH}_3)_3\text{SiH} = (\text{CH}_3)_2\text{SiH} + \text{CH}_3$	477
$(\text{CH}_3)_3\text{SiH} = (\text{CH}_3)_3\text{Si} + \text{H}$	339	$(\text{CH}_3)_4\text{Si} = (\text{CH}_3)_3\text{Si} + \text{CH}_3$	300,4

Таблица 2. Энергии активаций и логарифмы констант скоростей реакций $\text{Na} + (\text{CH}_3)_m\text{Cl}_m\text{H}_{3-m}\text{C} - \text{Cl} \rightarrow (\text{CH}_3)_m\text{Cl}_m\text{H}_{3-m}\text{C} + \text{NaCl}$ ($T = 548 \text{ K}$)

Реакция	ε_i (кДж/моль)		$\lg k_i$ ($k, \text{c}^{-1}\text{cm}^3/\text{моль}$)	
	Опыт [2]	Расчёт	Опыт [2]	Расчёт
$\text{Na} + \text{CH}_3\text{Cl} \rightarrow$	41,8	41,8	10,7	10,7
$\text{Na} + \text{CH}_2\text{Cl}_2 \rightarrow$	31,0	31,0	11,75	11,75
$\text{Na} + \text{CHCl}_3 \rightarrow$	20,9	20,2	12,7	12,8
$\text{Na} + \text{CCl}_4 \rightarrow$	14,4	9,4	13,3	13,8
$\text{Na} + \text{CH}_3\text{CH}_2\text{Cl} \rightarrow$	39,3	39,3	10,85	10,85
$\text{Na} + (\text{CH}_3)_2\text{CHCl} \rightarrow$	36,0	36,8	11,18	11,0
$\text{Na} + (\text{CH}_3)_3\text{CCl} \rightarrow$	32,6	34,3	11,52	11,15
$\text{Na} + \text{CH}_3\text{CHCl}_2 \rightarrow$	---	28,5	11,89	11,90
$\text{Na} + \text{CH}_3\text{CCl}_3 \rightarrow$	---	17,7	---	12,95
$\text{Na} + (\text{CH}_3)_2\text{CCl}_2 \rightarrow$	---	26,0	12,45	12,05

Таким образом, проводимые исследования являются актуальными. Они позволяют решить ряд задач стоящих перед термодинамической кинетикой и химической термодинамикой, способствуют развитию вузовской науки, приобщению студентов и аспирантов к научной работе.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 07-03-96403-рЦентр-а)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Гурвич Л.В., Карачевцев Г.В., Кондратьев В.Н. и др. Энергии разрыва химических

связей. Потенциалы ионизации и сродство к электрону.- М.: Наука, 1974. 351с.

2. Кондратьев В.Н. Константы скорости газофазных реакций. М.: Наука, 1971. 352 с.

3. Папулов Ю.Г., Виноградова М.Г. Энергия химических связей: основные закономерности и методы расчета: Обзор //Вестн. ТвГУ. Сер. Химия. 2006. № 3. С.5-39.

4. Папулов Ю.Г., Виноградова М.Г., Соколов С.А. Энергетика реакций радикального распада// Успехи современного естествознания. 2007, № 8. С. 49

Биологические науки**СВЕДЕНИЯ О НАХОДКАХ ANTHYLLIS
MACROSPHALA L. В УСЛОВИЯХ
НОВГОРОДСКОЙ ОБЛАСТИ**

Абдушаева Я.М.

*Институт сельского хозяйства и природных
ресурсов Новгородского государственного
университета им. Ярослава Мудрого*

Флористические исследования способствуют сохранению генофонда редких и исчезающих растений на конкретной территории. Проведенные исследования в течение пяти лет позволили выявить места произрастания Anthyllis macrocephala L. - по реке Мста Боровичского и Новгородского единичное в Шимском и вдоль реки Псижа Старорусского района Новгородской области. Местообитания – суходольный луг (особенно – по прирусловым гривам), сосновый бор и антропогенные участки. Произрастает на глинах, песках и известняках.

По гербарным данным, впервые на территории области вид обнаружен В.Л. Комаровым в 1893 г. в Боровичском районе. На сегодняшний день экотип сохранился проективное покрытие более 25 %. Это пойменный экотип – левый берег р. Мста напротив д. Егла Боровичский р-он.

Многолетнее растение с прямостоячими тонкими стеблями высотой 56,3 см. Прикорневая розетка мощная с крупными листьями, длина листочка 4,2 см, ширина 1,9 см. На стебле через каждые 9 см расположены стеблевые листья в количестве от 3-4 шт. На листе обычно 5-6 пар листочков. Стебель обычно заканчивается 3 сближенными крупными соцветиями. Цветков в соцветии 15,3 шт, семян с головки - 13 шт. Цветет с конца июня по июль, плодоносит - с июля.

Адвентивный вид. Численность в естественных условиях произрастания невысокая. По опросным данным местное население всегда готовило сено для овец из язвенника, которое отли-