

КОНТИНУАЛЬНАЯ ПАРАДИГМА ХИМИЧЕСКОЙ ЭПИСТЕМОЛОГИИ

Термином «химический континуум» будем обозначать атомно-молекулярную среду, составляющие элементы которой находятся в состоянии химического взаимодействия, ведущего их к взаимопревращению. Антиподом химического континуума выступает модель зернистой, дискретной атомно-молекулярной среды, восходящая к классической атомистике, одним из ярких представителей которой считается Дж. Дальтон. Развитию идеи фундаментального значения непрерывности в хемосфере посвящены работы К. Л. Бертолле. Борьба линии Дальтона – Пруста с линией Бертолле, имевшая в химической эпистемологии довольно напряженный характер, к середине XX века сменилась примирением сторон, пришедших к соглашению о некотором сосуществовании их идеологий, допускающему существование химической организации вещества в двух формах: бертоллидной (непрерывной) и дальтонидной (дискретной) [1].

Дальнейшее развитие химии и ее методологии показало (Н. С. Курнаков), что именно бертоллидные формы, а не дальтонидные, как это предполагалось ранее, являются более общими и всеобъемлющими. Было осознано, что для химии существенны именно те состояния атомно-молекулярной агрегации, которые наиболее адекватно отражаются в образе «континуума реагирующих веществ» [1. С. 28].

Идеям динамизации химии посвящены работы Г. Башляра и И. Р. Пригожина. Сопоставляя их подходы, В. П. Визгин отмечает, что «...основная «переключка» Пригожина и Башляра состоит в их близком, почти совпадающем понимании основной тенденции в развитии современного естествознания – от статики к динамике» [2. С. 97].

Переход химической эпистемологии от статики к динамике, переориентацию химии с линии Пруста – Дальтона на линию Бертолле – Башляра – Пригожина В. П. Визгин обозначает как «...переориентацию химии от «точки» к «волне»...» [2. С. 95]. Это важный момент для нашего рассмотрения, ибо он раскрывает суть явления «динамизации химии», которое Г. Башляр определил как становление «химии прогрессирующей динамизации вещества» [2. С. 96].

По мнению В. П. Визгина, «динамизация мышления, а затем и его историзация действительно выступают как одна из ведущих тенденций развития не только химии, но во многом и всего комплекса естественных наук» [2. С. 96-97]. Методологическую исчерпанность статики для химической эпистемологии Г. Башляр характеризует следующим образом: «...статические интуиции отныне являются недостаточными, чтобы вполне схватить и понять в мышлении химические реакции» [3. С. 65]. Исключительно важное значение для понимания последних, как и для всего процесса «динамизации химии», имеет понятие переходного состояния как особой формы химической организации вещества. Остановимся на нем подробнее.

Как отмечает В. И. Кузнецов, «классическая химия с ее креном в сторону идей дискретности химических отношений не имела понятия о переходном состоянии. Единственным типом химического агрегирования атомов она признавала молекулы, а процессы их качественного превращения объясняла... перераспределением химических связей путем полной диссоциации исходных связей» [1. С. 79]. Переходное состояние характеризуется как состояние неустойчивого равновесия, которое реализуется в результате подведения тем или иным способом к исходной атомно-молекулярной системе энергии активации, расходуемой на ослабление (но не разрыв!) исходных химических связей, достаточное для возникновения «...хотя бы очень слабой (новой. – А. С.) химической связи... для образования активированного комплекса...» [1. С. 80]. Таким образом, в переходном состоянии сосуществуют в ослабленном виде исходные (дореакционные) и едва намечившиеся конечные (постреакционные) связи. Переходное состояние тем самым может считаться некой суперпозицией начального и конечного состояний атомно-молекулярной системы. В этом состоянии реализуется перемешивание несколько деформированных свойств дореакционных и постреакционных соединений. Не случайно это состояние называют «континуумом реагирующих веществ». Методы оценки активации молекул описаны нами в монографии [4].

Учитывая, что в основе химизма лежат явления реакционных превращений атомно-молекулярных систем, а также то обстоятельство, что химические реакции включают стадию переходного состояния, приходим к выводу, что наиболее существенным событием любых химических превращений служит образование переходного состояния, или континуализация реагирующих веществ. И в этом смысле предметом химии реакционных процессов считается химический континуум. Именно в нем происходит «акт единения» химической среды, характеризующийся «коллективизацией» дореакционных и постреакционных дальтонидных и бертоллидных форм химической организации вещества.

Рассмотрим другие свидетельства становления континуальной парадигмы химии и химической эпистемологии. Недавно нами была сформулирована гипотеза, оценивающая вероятность оформления в рамках континуальной парадигмы химической эпистемологии нового ее этапа, который мы наименовали «инфор-

мационным проектом химии», следуя терминологии концепции различения двух методологических проектов становления научного познания [5].

Основные положения гипотезы, опубликованные в работах [6-10], сводятся к тому, что в современной теоретической химии может быть выделен ряд концепций, использующих модели, существенным признаком которых является их «тяготение» к восполнению целостности объектов познания. Среди таких концепций нами рассмотрены следующие: правила орбитальной симметрии Р. Вудворда и Р. Хоффманна, концепция вибронных взаимодействий в химии И. Б. Берсукера, теория групповой симметрии химических элементов Ю. Б. Румера и А. И. Фета, теория диссипативных структур И.Р. Пригожина и метод мультиплетных покрытий А.Н. Горбаня, Е.М. Миркеса и А.П. Свитина. Охарактеризуем основное содержание этих подходов и их значение для нового этапа становления концептуальной парадигмы химической эпистемологии.

Согласно правилу Вудворда – Хоффманна химические реакции так называемого синхронного типа протекают с большей вероятностью и при меньших энергиях активации тогда, «...когда существует соответствие между характеристиками орбитальной симметрии реагентов и продуктов реакции» [11. С. 7]. Важно отметить, что для выведения этого правила применяется специальная молекулярно-корреляционная диаграммная техника, не требующая проведения сложных расчетов, использующих довольно жесткие идеализации. Р. Вудворд и Р. Хоффманн отмечают, что «...каждая элементарная стадия в любой химической реакции представляет собой синхронный процесс... (и поэтому. – А. С.) корреляционные идеи можно применять ко всем реакциям» [11. С. 191]. Открытие Вудворда – Хоффманна имеет важное значение для становления континуальной парадигмы химической эпистемологии, ибо позволяет изучать реакционную среду с позиции единства между реагентами и продуктами химической реакции по критерию их симметричного родства, симметричной целостности.

Концепция вибронных взаимодействий в химии, выдвинутая И. Б. Берсукером, связана с «...отказом от полного разделения движения электронов и ядер в молекулах и кристаллах... и с более детальным учетом их взаимодействия посредством вибронного смешивания электронных состояний ядерными смещениями» [12. С. 3]. Концепция И. Б. Берсукера «... в той или иной степени охватывает *все типы молекулярных систем и все методы исследования. Всеобщность объектов и методов* (курсив мой. – А. С.) является характерной чертой вибронного подхода...» [12. С. 4]. Концепция вибронных взаимодействий, таким образом, выступает в качестве важного методологического принципа, преодолевающего ограничения традиционной точки зрения теорий строения и свойств молекул, основанных на идеализации адиабатического приближения, допускающего раздельное (расчленяющее) рассмотрение электронной и ядерной подсистем молекулярных образований. Следовательно, учет вибронных взаимодействий континуализирует моделирование атомно-молекулярной среды, внося определенный вклад в становление континуальной парадигмы химической эпистемологии.

Еще одним подходом, континуализирующим моделирование химических явлений, по нашему мнению, может служить концепция групповой симметрии химических элементов, выдвинутая А.И. Фетом и Ю.Б. Румером [13]. Если принцип сохранения орбитальной симметрии Р. Вудворда и Р. Хоффманна учитывает симметрию молекулярных орбиталей, а концепция вибронных взаимодействий И. Б. Берсукера – взаимодействие электронной и ядерной подсистем, то концепция групповой симметрии химических элементов Ю.Б. Румера и А.И. Фета позволяет описывать химические явления как состояния единой квантовой системы. Было показано, что «... конформная симметрия относится не только к электронным оболочкам, но и к атомам в целом» [13. С. 120]. В модели Бора атом каждого химического элемента считается отдельной квантовой системой. Модель Румера – Фета, рассматривающая атомы всевозможных элементов как состояния единой квантовой системы, соединяемые друг с другом действиями группы симметрии, преодолевает идеализацию оболочечной модели атом Бора и позволяет принимать химическую среду как единый атомно-молекулярный континуум.

В качестве еще одной предпосылки, «цементирующей» фундамент континуальной парадигмы химической эпистемологии, может выступать теория диссипативных структур И. Р. Пригожина [14]. Установление «нового молекулярного порядка» в диссипативных системах обусловлено способностью молекул при определенных условиях «кооперироваться». Это состояние когерентности молекул возникает вследствие нарастания флуктуаций в системе после ее перехода в одну из возможных постбифуркационных фаз. Диссипативное ассоциирование молекул выступает в форме деавтономизации молекул, которым в равновесном состоянии свойственна относительная автономность. Эти когерентные состояния молекул И. Р. Пригожин и И. Стенгерс метафорически описали как «пробуждение молекул», их «прозрение», позволяющее им в условиях сильно неравновесного оттока энергии «почувствовать» дальних соседей. Таким образом, в системе, приближающейся к сильно неравновесному диссипативному состоянию, все более явно проявляются, «пробуждаются» ее родовые континуальные характеристики. Равновесные фазы не отменяют, а всего лишь приглушают родовую континуальность атомно-молекулярных систем. В переходных же реакционных и

диссипативных состояниях атомно-молекулярные системы континуализируются. Поэтому для описания как равновесных, так и неравновесных систем необходимы континуальные модели химической реальности.

Для описания атомно-молекулярных систем, учитывающих динамику их континуальности, может быть использован метод мультиплетных покрытий, разработанный автором совместно с А.Н. Горбанем и Е.М. Миркесом [15]. Метод основан на группировке свойств атомов (молекул) в мультиплеты (пересекающиеся «классы»), определяемые эмпирическими характеристиками и заданным классом функций от теоретических параметров. Методологическое значение метода мультиплетного моделирования, как было отмечено в [10], состоит в его принципиальном отличии от традиционных, классических методов моделирования, вынужденных придерживаться той или иной определенной классификации используемых ими теоретических и эмпирических параметров (понятий, категорий, данных и т. п.). Практически любая из таких классификаций является в той или иной мере идеализацией, вычлняющей (изолирующей) исследуемый объект. Предложенный метод порывает с классификационно-расчлняющей идеологией разбиения исходной информации об объекте и рассматривает ее (информацию) в нерасчлененной взаимосвязности. Это достигается благодаря идее мультиплетных покрытий, словно многократно пронизывающих пространство информации, взаимосвязность элементов которой обеспечивается сшивающим эффектом пересекающихся мультиплетов.

Проведенный анализ иллюстрирует поступательное становление химической эпистемологии от этапа дискретного описания атомно-молекулярной среды через этап сосуществования дискретного и непрерывного подходов к этапу приоритета континуального моделирования химической реальности. Переход от мозаичной, пуантилистической техники изображения химической картины мира к целостной, волновой, природоогенной на примере некоторых концепций современной теоретической химии. Показано, что орбитально-симметричный, вибранный, симметрично-групповой, диссипативный и мультиплетный подходы направлены на восходящее восполнение целостности описания химического континуума. Раскрыто значение гипотезы информационного проекта химии для оценки современного этапа становления континуальной парадигмы химической эпистемологии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кузнецов, В. И. Диалектика развития химии / В. И. Кузнецов. - М. : Наука, 1973. - 328 с.
2. Визгин, В. П. Эпистемология Гастона Башляра и история науки / В. П. Визгин. - М. : Ин-т философии РАН, 1996. - 263 с.
3. Bachelard, G. Philosophie du non: Essai d'une philosophie du nouvel esprit scientifique / G. Bachelard. P., 1940, 2 ed. P., 1962.
4. Быков, В. И. Методы расчета параметров активации молекул / В. И. Быков, А. П. Свитин. - Новосибирск: Наука. Сиб. отд-ние, 1988. - 210 с.
5. Чуринов, Н. М. Совершенство и свобода: Философские очерки / Н. М. Чуринов; САА. - Красноярск, 2001. - 432 с.
6. Свитин, А. П. Предпосылки возникновения информационной химии / А. П. Свитин // Теория и история. - 2002. - № 1. - С. 137-143.
7. Свитин, А. П. Химическая реальность / А. П. Свитин // Вестн. СибГАУ. Вып. 4. - Красноярск, 2003. - С. 373-376.
8. Свитин, А. П. Химическая тектология / А. П. Свитин // Теория и история. - 2003. - № 2. - С. 130-137.
9. Свитин, А. П. Неразрушающее познание / А. П. Свитин // Теория и история. - 2003. - № 3. - С. 144-149.
10. Свитин, А. П. Становление информационной химии: философско-методологические аспекты: Монография / А. П. Свитин. - Красноярск: Изд-во СибГАУ, 2003. - 156 с.
11. Вудворд, Р. Сохранение орбитальной симметрии / Р. Вудворд, Р. Хоффманн. - М.: Мир, 1971. - 207 с.
12. Берсукер, И. Б. Эффект Яна – Теллера и вибранные взаимодействия в современной химии / И. Б. Берсукер. - М.: Наука, 1987. - 344 с.
13. Фет, А. И. Группа симметрии химических элементов / А. И. Фет // Математическое моделирование в биологии и химии. Новые подходы. - Новосибирск : Наука. Сиб. отд-ние, 1992. - С. 118-198.
14. Пригожин, И. Р. Порядок из хаоса. Новый диалог человека с природой / И. Р. Пригожин, И. Стенгерс. - М.: Эдиториал УРСС, 2000. - 310 с.
15. Горбань, А. Н. Метод мультиплетных покрытий и его использование для предсказания свойств атомов и молекул / А. Н. Горбань, Е. М. Миркес, А. П. Свитин // Журн. физ. химии. - 1992. - Т. 6. № 6. - С. 1504-1510.