вопрос, можно предположить, что таковым является профессионал как результат подготовки по выбранному студентом профилю – «математик», «искусствовед», «специалист по связям с общественностью» и т.д. Но эта фигура, этот образ не может быть назван полноценным эталоном образовательных ситуаций, поскольку не присутствует в них, устранен и отнесен в будущее. Идеал же не только присутствует, выступая манящей целью, путеводной звездой, но и содержит в себе схему действия по преображению – приближению к идеалу. В контексте освобождения высшего образования от плена профессии, идеалом становится Человек Образованный.

При этом важно понимать, что идеал не может в полной мере быть отождествлен с какой бы то ни было «фигурой», закреплен за конкретным или абстрактным лицом. Идеал, образец, на который ориентирован весь образовательный процесс, всегда шире человеческого воплощения. Та область, в которой образец реально может присутствовать в практике каждого – это сфера операционного разворачивания идеала. Идеал – это, прежде всего, схема действия.

Процессуальное качество образа реализуется через те схемы действия, которыми партнеры взаимоотношения полагают себя друг в друга. Образ есть снятое бытие объектной и субъектной составляющих (операционное содержание этого бытия). Операционное взаимоснятие свойств субъектов в процессе их взаимоотношения является самодостаточным и творящим основанием образа, его конкретной субстанцией, творцом и носителем.

Операционное качество – суть образа. Синтезируя этот тезис с выводами относительно стержневой функции образа в образовании, можно заключить, что освоение операций по формированию образа отношения человека и мира – это основа образовательной программы. Согласно своей внутренней сущности, образование – это кристаллизация тех операций жизненной практики человека, которые выявляют сущность его взаимодействия с миром.

Образование Человека раскрывает его самого, что одновременно означает открытие *в* нем способности к совершению эталонных схем действия. Эталонные схемы действия организуют мироотношение. Человек может в большей или в меньшей степени приближаться к эталону в своей жизненной активности, но познание эталонных операций является одной из главных целей и ценностей образования. Операции эталонного соотнесения своего субъектного качества с субъектным качеством мира – основной объект любой образовательной ситуации.

Сближение эталонной цели образования как культурного феномена, призванного к созиданию Человека, и ориентиров деятельности образовательных институтов, наиболее перспективно проводить в условиях реализации концепции образования как идеалообразования. Результаты исследования как содержания самой сути образования, так и внутренних потребностей возраста субъекта высшего образования, демонстрируют, что идеальное проектирование – приоритетная область всестороннего развития личности.

Химические науки

РАСЧЕТНЫЕ МЕТОДЫ В ТЕРМОХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКЕ РАДИКАЛЬНЫХ РЕАКЦИЙ

Виноградова М.Г., Папулов Ю.Г.
Тверской государственный университет
Тверь, Россия

Установление связи физических свойств и реакционной способности реагирующих частиц с их строением составляет фундаментальную научную проблему химии [1, 2], в решении которой важное место имеет разработка теории и методов расчета и прогнозирования.

Экспериментальное определение физико-химических свойств нередко сопряжено со значительными техническими трудностями, связанными как с самой техникой измерения, так и с получением вещества, его очисткой и т.п. Оно требует больших затрат материальных средств, квалифицированного труда и времени, да и не всегда возможно. В результате число изученных веществ резко отстает от числа известных.

Наличие надежных расчетных методов позволяет предсказывать характеристики вещества (прежде, чем оно синтезировано, а свойство измерено) и тем самым выбрать из многих (еще не изученных и даже не полученных) соединений те, которые (согласно прогнозу) удовлетворяют поставленным требованиям. Это закладывает научные основы создания новых веществ и материалов с заранее заданными свойствами.

В арсенале современной теоретической химии есть разные группы методов: методы квантовой химии (строгие и полуэмпирические), статистической термодинамики, молекулярной механики, а также феноменологические

методы теории химического строения (аддитивные схемы), методы теории графов и теории групп в химии, а также методы Монте-Карло, молекулярной и стохастической динамики и др., которые не исключают, а, скорее всего, дополняют друг друга.

В работе проведено критическое рассмотрение и сопоставление применяемых в термохимической кинетике расчетных методов (чисто теоретических, полуэмпирических, эмпирических), очерчены их сильные и слабые стороны, ограничения и границы применимости.

В принципе все физико-химические свойства можно вывести из фундаментальных положений квантовой механики и физической статистики. Однако полные неэмпирические расчеты (*ab initio*) весьма трудоемки, что ограничивает их практические возможности. Обсуждаются возможности метода Хартри-Фока (HF) в различных базисах с учетом электронной корреляции в рамках теории возмущений Меллера-Плессета (MP) 2-го и более высоких порядков: HF/3-21G, HF/6-31G*, MP2/3-21G, MP2/6-31G*, MP3/6-31G* и др.

Методы статистической термодинамики исходят при расчете свойств из суммы по состояниям (для одной молекулы или макротела) и требуют знания уровней энергии молекул (электронных, колебательных, вращательных), экспериментальное или теоретическое определение которых практически возможно лишь для молекул с небольшим числом атомов.

Методы молекулярной механики основываются на механической модели (с заданием того или иного силового поля – потенциальных функций с варьируемыми параметрами) и опираются (при описании невалентных взаимодействий) на эмпирические атом-атомные потенциалы.

Феноменологические методы более просты в обращении и успешно справляются с решениями задач массового расчета, хотя и требуют для своего использования определенного количества исходных (реперных) данных. Эти методы выступают как эффективный инструмент исследования закономерностей, связывающих свойства веществ со строением молекул, и неиссякаемый источник новых данных. Без таких методов невозможно создание информационно-поисковых систем, полноценных баз и банков данных, целенаправленный поиск новых структур, решение задач молекулярного дизайна [3].

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

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Семенов Н.Н. О некоторых проблемах химической кинетики и реакционной способности. М.: Изд-во АН СССР. 1958. 686 с.

2. Бучаченко А.А. Химия на рубеже веков: свершения и прогноз //Успехи химии, 1999. Т. 68, № 2. С. 99-118.

3. Папулов Ю.Г., Виноградова М.Г. Расчетные методы в атом-атомном представлении: Монография. Тверь: ТвГУ, 2002. 232 с.

ДОЛГОВЕЧНОСТЬ ПОЛИМЕРНЫХ КОНСЕРВАНТОВ ПАМЯТНИКОВ

Емельянов Д.Н., Волкова Н.В., Молодова А.А.
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского.
Нижний Новгород, Россия

Многолетней практикой выработаны критерии выбора полимеров для реставрации памятников истории и культуры. Наиболее существенный при выборе полимеров для реставрации параметр – это долговечность реставрационного материала и в идеале она должна быть близкой к ожидаемому времени существования реставрируемого объекта [1].

Долговечность полимеров – это продолжительность времени от момента нагружения до разрушения полимерного тела. Долговечность полимеров зависит от приложенной нагрузки и от температуры опыта [2]. Что следует понимать под термином «долговечность реставрационных материалов», и в какой степени долговечность самого реставрационного материала, будь это осетровый клей или современный синтетический адгезив, играет существенную роль в сохранении отреставрированного объекта?

Применительно к реставрационным материалам долговечность понимается как время, в течение которого сохраняется целостность и декоративные свойства отреставрированного объекта, иными словами – время до повторной реставрации произведения искусства [1].

Для различных реставрационных ситуаций ответственными за разрушение могут быть различные свойства: например, при подклейке шелушащегося красочного слоя, при склейке фрагментов предметов прикладного искусства. При дублировании на новый реставрационный материал причиной повторного разрушения, скорей всего, будет снижение или утрата адгезионных свойств по отношению к авторским материалам – грунтам, штукатурному или какому-либо иному основанию живописи.

Рассматривая проблему долговечности, интересуются поведением реставрационного