

УДК 167.7

DOI:

10.15372/PS20190106

С.С. Чунихин, В.А. Мукин**ЭФФЕКТИВНОСТЬ СИНЕРГЕТИЧЕСКОГО ПОДХОДА
В ХИМИЧЕСКОМ ИССЛЕДОВАНИИ***

В статье проанализирована эффективность применения синергетического подхода в химическом исследовании. Выбор для изучения именно этого подхода связан с тем, что в современных реалиях химическое исследование нельзя не рассматривать как многокомпонентную, нелинейно развивающуюся систему, состоящую из открытых элементов. В настоящей работе выявлены факторы открытости отдельных элементов системы, доказана эффективность применения синергетического подхода в химическом исследовании и показана перспективность использования данного подхода.

Ключевые слова: синергетика; синергетический подход; химическое исследование; методология химического исследования

S.S. Chunikhin, V.A. Mukin**THE EFFECTIVENESS OF THE SYNERGETIC
APPROACH
IN A CHEMICAL RESEARCH**

The article examines the effectiveness of applying the synergistic approach in a chemical research. We chose this approach to the study of a chemical research because in current realities one cannot fail to regard such a study as a multi-component, non-linearly developing system consisting of open elements. Therefore, we reveal factors of openness of individual elements of the system, prove the effectiveness of applying the synergetic approach in a chemical research and show potential of this approach.

Keywords: synergetics; synergetic approach; chemical research; methodology of chemical research

Примем явление науки как форму деятельности человечества в целом или отдельно взятого субъекта, направленную на постиже-

* Статья подготовлена при финансовой поддержке РФФИ и Кабинета Министров Чувашской Республики (проект № 18-410-210005 «р_а»)

ние истины об окружающем мире. Эта форма деятельности безусловно, как и любая другая форма деятельности, обладает своими отличительными чертами – в данном случае критериями научности. К ним относят истинность, проблемность, обоснованность, доказуемость, системность, прогрессивность. Единственный способ выявления научного знания – это научное исследование. Под научным исследованием понимается вид целенаправленной деятельности, представляющий собой процесс получения новых научных знаний. Отсюда химическое исследование – это вид целенаправленной деятельности, представляющий собой процесс получения новых знаний из области химии.

Процесс научного исследования основан на логических построениях и экспериментальных операциях, совокупность которых называется методом исследования. В свою очередь, выбор метода исследования, а также стратегию логических операций, направленных на получение нового научного знания, называют научным подходом. Существуют различные подходы к научному исследованию, например системный. Данный подход как направление методологии научного исследования основан на рассмотрении объектов как системы. При этом выявляются отдельные элементы системы, а также их функции. Важнейшим качеством системы является то, что массив свойств целостной системы меньше суммы свойств отдельных элементов данной системы. То есть при систематизации отдельных элементов система обретает новые качества, идентифицировать которые не представляется возможным без систематизации. Системный подход эффективно применяется для выявления взаимосвязей в замкнутых закрытых системах. Однако он не столь эффективен при анализе самоорганизующихся систем, базирующихся на открытых, т.е. постоянно обменивающихся с окружающей средой энергией и информацией, элементах системы. Такой областью знаний, которая бы позволяла находить взаимосвязи и предсказывать тенденции развития систем с открытыми элементами, является синергетика.

Для современного мира характерны высокая скорость развития технологий, а также открытый доступ к любой информации, включая научную. В связи с этим ускоряются темпы развития различных научных направлений, в том числе и химии. Кроме того, изменились принципы исследования, которые теперь имеют под собой более высокотехнологичную основу. И сами объекты исследования все чаще представляют собой область познания не одной

конкретной науки, обладают все большей сложностью и характеризуются междисциплинарностью. Указанные причины позволяют рассматривать химическое исследование как сложную, открытую, саморазвивающуюся и самоорганизующуюся систему, подверженную определенным флуктуациям под действием труднопредсказуемых факторов.

Объектом нашего анализа является химическое исследование, предметом – синергетический подход. Целью настоящей работы определены выявление и оценка достоинств и недостатков применения синергетического подхода в научных исследованиях. Для ее достижения поставлены следующие задачи: 1) выявить возможность применения синергетического подхода в научных исследованиях; 2) оценить эффективность, определить достоинства и недостатки применения синергетического подхода в химическом исследовании.

Понятие «синергетика» впервые ввел в обиход немецкий физик-теоретик Г. Хакен. Его работа, посвященная этой области знаний [2], начинается с рассуждений о тривиальных термодинамических системах, закономерности изменения которых без особых усилий можно описать на языке математики. Другими словами, описываются процессы упорядочивания или разупорядочивания таких систем. Осуществить описание этих процессов не составляет особого труда, поскольку факторы, влияющие на систему, весьма немногочисленны. Например, процесс упорядочивания молекул воды из состояния водяного пара происходит при понижении температуры. Безусловно, агрегатное состояние воды зависит не только от температуры, есть еще несколько важных факторов, которые могут оказывать влияние на процесс межфазного перехода. Это, например, давление, наличие примесей в воде или газовый состав атмосферы, в которой происходит данный процесс. Таким образом, рассматривать такой простой с точки зрения термодинамики процесс, как кристаллизация воды, можно более или менее подробно. Соответственно, описание упорядоченности системы будет осуществляться с применением большего или меньшего количества уравнений разной сложности.

Однако вопрос о возможности объяснения процессов в многокомпонентных открытых сложноорганизованных системах долгое время оставался неизученным. К таким системам можно отнести, к примеру, биологические процессы. Некоторые исследования пока-

зали эффективность применения синергетического подхода и в социальных науках, в частности при выявлении корреляционных связей в университетском пространстве [1]. Но число факторов, обуславливающих процессы упорядочивания данных систем чрезвычайно велико, так же как и велико число факторов, негативно влияющих на упорядоченность. Кроме того, при рассмотрении равновесных термодинамических систем не учитываются такие факторы, как обмен энергией, материей и информацией компонентов рассматриваемой системы с окружающей средой.

В химии к таким явлениям можно отнести реакции Белоусова – Жаботинского. Это класс химических реакций, протекающих в колебательном режиме, когда некоторые параметры реакции (цвет, концентрация компонентов, температура и др.) изменяются периодически, образуя сложную пространственно-временную структуру реакционной среды. Одна из разновидностей реакций такого типа – взаимодействие между сульфатом церия, броматом калия, малоновой и серной кислотами в присутствии ферроина в качестве окислительно-восстановительного индикатора. Было показано, что реакционный механизм данной реакции представляет собой набор из 80 элементарных реакций [5]. Изучение этой реакции показало, что при определенных условиях система может демонстрировать очень сложные формы поведения – от регулярных периодических до хаотических колебаний.

Отсюда можно заключить, что для описания сложных многокомпонентных систем наподобие биологических организмов или многокомпонентных химических реакций, подверженных постоянному обмену энергией, материей и информацией с окружающей средой, пользоваться методами, применимыми для классической термодинамики, нельзя. Необходимо либо доработать эти методы, либо рассматривать многокомпонентные системы с какой-то иной позиции, которая учитывала бы многообразие факторов, влияющих на такие системы, и позволяла бы предсказывать пути их развития систем. Именно с этой целью была разработана область знаний, именуемая синергетикой, а подход, опирающийся на синергетические представления об устройстве объектов, стал называться синергетическим.

Рассмотрим совокупность принципов, которые кладутся в основу синергетического подхода.

1. Объекты в рамках данного подхода рассматриваются как саморазвивающиеся, сложные, открытые, нелинейные системы. Открытость объектов подразумевает их способность к контакту с внешней средой, в результате чего может происходить обмен энергией, материей и информацией. Сложность таких объектов заключается в том, что они формируются из отдельных элементов, которые сами по себе также обладают открытостью.

2. Саморазвитие системы начинается с хаоса. В период хаоса внутри системы возможны флуктуации, т.е. некоторое движение, изменение векторов развития как отдельных элементов системы, так и всего рассматриваемого объекта в целом. Когда объект находясь во флуктуационном состоянии, в микро- или макромасштабе, возникают точки бифуркации – точки выбора траектории дальнейшего развития объекта или его элементов. Посредством механизмов взаимодействия между элементами системы, а также под влиянием труднопредсказуемых факторов внешней среды осуществляется самоорганизация системы, что с различной степенью вероятности приводит систему к тому или иному аттрактору.

3. Аттрактор – это определенный этап, иначе, результат развития системы. Это состояние системы, к которому она пришла в результате самоорганизации.

Рассмотрим химическое исследование как объект с точки зрения синергетического подхода. Химическое исследование, как было сказано ранее, это комплекс логически построенных операций, направленных на выработку новых научных знаний в области химии. Синергетический подход позволяет изучать самоорганизующиеся системы, которые в результате своего развития приходят к определенному аттрактору. То есть системы, изначально существующие в некотором состоянии «А», которое впоследствии в результате многочисленных изменений элементов системы, плавно перетекает в состояние «Б». В рамках синергетического подхода состоянием «А» химического исследования будет состояние непознания. А состоянием «Б» – новое знание, аттрактор, к которому пришла система в результате самоорганизации. Поскольку в определенные моменты своего существования система пребывает в точках бифуркации и по этой причине развивается нелинейно, возможен исход, когда сгенерированное научное знание шире ожидаемого научного результата. Безусловно, процесс научного исследования

состоит из определенных этапов. В рамках синергетического подхода этапы химического исследования могут быть рассмотрены как сложные открытые саморазвивающиеся объекты.

Любое научное исследование начинается с выбора темы. Выбор темы исследования может основываться на нескольких факторах. В первую очередь, тема исследования должна быть актуальной: т.е. в решении проблемы, на которой базируется тематика, должно быть заинтересовано научное сообщество или какая-либо производственная отрасль. То есть решение поставленной задачи принесет пользу научному сообществу или технологической отрасли. Немаловажной составляющей выбора или корректировки темы исследования является анализ литературных данных. Он позволяет выявлять тенденции развития различных областей знаний и показывает границы познанного и непознанного. Таким образом, исследователь, находящийся на этапе выбора темы научного исследования, пребывает в точке бифуркации, поскольку осуществляет этот выбор темы, опираясь на текущее состояние изученности объектов в данной области знаний.

Важнейший этап научного исследования после выбора темы исследования – разработка гипотезы, лежащей в основе исследования. Как правило, если тема работы не является абсолютно непознанной областью знаний, то в литературе уже могут быть представлены подходящие гипотезы, с помощью которых можно описывать наблюдаемые в ходе исследования явления. Таким образом, при проведении исследования можно выбрать уже разработанную кем-то гипотезу или развить свою при наличии достаточного на то основания. Этап выбора гипотезы научного исследования – еще одна точка бифуркации, в которой находится научный работник на данном этапе научного исследования. Открытость этого элемента системы химического исследования заключается не только в том, что на выбор гипотезы могут влиять литературные данные. На сегодняшней ступени развития технологий компьютерного моделирования ключевым фактором, влияющим на формирование гипотезы, может стать предварительный анализ интересующих химика объектов, осуществленный при помощи подходящего программного обеспечения. Например, одна из программ, способных рассчитывать различные параметры молекул, а также супрамолекулярных структур, –Gaussian [4]. Эта программа может, к примеру, предсказывать энергию молекулярных орбиталей любых молекул, что часто ис-

пользуется химиками-синтетиками, занимающимися разработкой красителей для DSSC-ячеек, для предварительной оценки работоспособности создаваемого сенсбилизатора [3; 6; 7].

Следующий этап работы – составление плана исследования. В качестве очередного этапа с точки зрения синергетического подхода план как никакой другой элемент системы научного исследования является открытым, нелинейным, саморазвивающимся и наиболее динамичным объектом. Открытость плана заключается в том, что зачастую, составленный на начальном этапе исследования, он претерпевает значительные корректировки в результате выполнения задач и подзадач исследования. Это происходит по причине того, что не всегда удается осуществить определенные подзадачи исследования или осуществить их по задуманной изначально методике. В таком случае подыскивается альтернативный вариант выполнения поставленной задачи. И первоначальный план претерпевает ветвление в соответствии с изменяющимися параметрами системы. Многократное ветвление плана, т.е. подбор методов для выполнения задач исследования, формирует тенденцию к постепенному осуществлению цели исследования, что является аттрактором системы.

Задача любого химика при получении определенного результата – это корректно его интерпретировать. То есть при получении ранее неизвестного соединения надо уметь доказательно определить его структуру и по возможности изучить, а также охарактеризовать его свойства. Есть множество способов выявить структуру неизвестной молекулы, такие как масс-спектрометрия, а также ИК- и ЯМР-спектроскопия. Эти способы широко используются и интерпретация с их помощью ранее неизвестной структуры является задачей довольно тривиальной. Иначе обстоит дело с изучением свойств нового соединения. С точки зрения синергетического подхода на данном этапе химического исследования стоит рассматривать такой элемент системы, как охарактеризование свойств нового соединения. Тогда под открытостью этого элемента системы подразумевается многообразие свойств, которые можно охарактеризовать, а также многообразие корреляционных связей между структурой вещества и его свойствами, которые можно выявить. Построение массива из данных по выявленным свойствам и найденным корреляционным связям создает вокруг изучаемой структуры охарактеризованное информационное поле, т.е. комплекс всей информации о соединении.

Каждый исследователь стремится создать информационное поле достаточного размера, для того чтобы в нем можно было найти ответы на интересующие специалиста вопросы и тем самым достигнуть поставленных в исследовании задач. Выполненные задачи исследования – это аттракторы системы химического исследования. Однако химическое исследование само по себе как открытый объект развивается нелинейно, поскольку при движении от одного этапа к другому проходит через точки бифуркации. Так формируются побочные ветви возможного развития исследования. То есть информационное поле вокруг объектов исследования распространяется не только в направлении главного аттрактора, но и несколько шире и в сторону от этого вектора развития. Данный процесс формирует последующие исследования, которые не были запланированы и не могли быть предугаданы заранее. В этом заключается нелинейность развития системы химического исследования.

Таким образом, нами доказана возможность применения синергетического подхода в химическом исследовании. Установлена высокая эффективность получения нового научного знания, обусловленная выявленными параметрами открытости отдельных этапов химического исследования. К недостаткам же синергетического подхода можно отнести то, что для получения научного знания с помощью данного подхода требуется весьма дорогостоящее оборудование, а также необходим доступ к интернет-ресурсам и программному обеспечению, стоимость которых довольно высока для организаций, не придерживающихся политики высокоразвитой экономики знаний. Однако учитывая современную мировую тенденцию к усилению экономики знаний в учебных заведениях и научных организациях, логично предположить, что в перспективе указанный недостаток будет преодолеваться.

Полагаем, что синергетический подход в научных исследованиях имеет высочайший потенциал, поскольку позволяет взглянуть на предмет исследования с разных сторон и способствует более глубокому пониманию процессов, связанных с данным предметом. Кроме того, нельзя не отметить прогрессивность синергетического подхода в научных исследованиях. То есть этот подход становится тем эффективнее, чем более развита технологическая база конкретного исследования.

Литература

1. Мукин В.А. Образовательное пространство: региональный аспект. Чебоксары: Изд-во Чуваш. ун-та, 2009.
2. Хакен Г. Синергетика. – М.: Мир, 1980.
3. Dhar A., Kumar N.S., Vekariya R.L. et al. Influence of tagging thiophene bridge unit on optical and electrochemical properties of coumarin based dyes for DSSCs with theoretical insight // *Organic Electronics*. – 2018. – No. 53. – P. 280–286.
4. *Gaussian 09* (Revision A.2) / Frisch M.J., Trucks G.W., H.B. Schlegel et al. – Wallingford, CT: Gaussian, Inc., 2009.
5. Gyorgyi L., Turanyi T., Field R.J. Mechanistic details of the oscillatory Belousov-Zhabotinskii reaction // *J. Phys. Chem.* – 1990. – No 94 (18). – P. 7162–7170.
6. Reddy M.A., Vinayak B., Suresh Th. et al. Highly conjugated electron rich thiophene antennas on phenothiazine and phenoxazine-based sensitizers for dye sensitized solar cells // *Synthetic Metals*. – 2014. – Vol. 195. – P. 208–216.
7. Wang L., Liang M., Zhang Y. et al. Influence of donor and bridge structure in D–A–p–A indoline dyes on the photovoltaic properties of dye-sensitized solar cells employing iodine/cobalt electrolyte // *Dyes and Pigments*. – 2014. – Vol. 101. – P. 270–279.

References

1. Mukin, V.A. (2009). *Obrazovatelnoe prostranstvo: regionalnyy aspekt* [Educational Space: Regional Aspect]. Cheboksary, Chuvash State University Publ.
2. Haken, H. (1980). *Sinergetika* [Synergetics]. Moscow, Mir Publ. (In Russ.).
3. Dhar, A., N.S. Kumar, R.L. Vekariya et al. (2018). Influence of tagging thiophene bridge unit on optical and electrochemical properties of coumarin based dyes for DSSCs with theoretical insight. *Organic Electronics*, 53, 280–286.
4. Frisch, M.J., G.W. Trucks, H.B. Schlegel et al. (2009). *Gaussian 09* (Revision A.2). Wallingford, CT, Gaussian, Inc.
5. Gyorgyi, L., T. Turanyi & R.J. Field. (1990). Mechanistic details of the oscillatory Belousov-Zhabotinskii reaction. *J. Phys. Chem.*, 94 (18), 7162–7170.
6. Reddy, M.A., B. Vinayak, Th. Suresh et al. (2014). Highly conjugated electron rich thiophene antennas on phenothiazine and phenoxazine-based sensitizers for dye sensitized solar cells. *Synthetic Metals*, 195, 208–216.
7. Wang, L., M. Liang, Y. Zhang et al. (2014). Influence of donor and bridge structure in D–A–p–A indoline dyes on the photovoltaic properties of dye-sensitized solar cells employing iodine/cobalt electrolyte. *Dyes & Pigments*, 101, 270–279.

Информация об авторах

Чунихин Сергей Сергеевич – аспирант Чувашского государственного университета им. И.Н. Ульянова (428015, Чебоксары, Московский пр-т, 15, e-mail: chunikhins@mail.ru).

Мукин Владимир Антонович – кандидат физико-математических наук, заведующий кафедрой философии и методологии науки Чувашского государственного университета им. И.Н. Ульянова (428015, Чебоксары, Московский пр-т, 15, e-mail: mukin-va@yandex.ru).

Information about the authors

Chunikhin, Sergey Sergeevich – Postgraduate Student at I.N. Ulyanov Chuvash State University (15, Moskovskiy av., Cheboksary, 428015, Russia, e-mail: chunikhinss@mail.ru).

Mukin, Vladimir Antonovich – Candidate of Sciences (Physics and Mathematics), Head of the Chair of Philosophy and Methodology of Science, I.N. Ulyanov Chuvash State University (15, Moskovskiy av., Cheboksary, 428015, Russia, e-mail: mukin-va@yandex.ru).

Дата поступления 31.01.2019