

ВЕСТНИК

ИВАНОВСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА

Серия «Естественные, общественные науки»

Вып. 2, 2010

Биология. Химия. Физика. Математика

Научный журнал

Издается с 2000 года

Журнал зарегистрирован в Министерстве Российской Федерации
по делам печати, телерадиовещания и средств массовых коммуникаций
Свидетельство о регистрации ПИ № 77-16954 от 5 декабря 2003 г.

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ:

В. Н. Егоров, д-р экон. наук
(председатель)

Д. И. Польшинский, д-р ист. наук
(зам. председателя)

В. И. Назаров, д-р психол. наук
(зам. председателя)

Л. В. Михеева (ответственный секретарь)

К. Я. Авербух, д-р филол. наук (Москва)

Ю. М. Воронов, д-р полит. наук

Н. В. Усольцева, д-р хим. наук

К. Префке, профессор (Германия)

Ю. М. Резник, д-р филос. наук (Москва)

О. А. Хасбулатова, д-р ист. наук

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ:

В. А. Исаев, д-р биол. наук

М. В. Клюев, д-р хим. наук

Д. И. Молдавский, д-р физ.-мат. наук

Над выпуском работали:

директор издательства *Л. В. Михеева*

редакторы: *О. В. Боронина*, *О. А. Кручинина*

технический редактор *И. С. Сибирева*

компьютерная верстка *Т. Б. Земсковой*

обложка *Р. Е. Круглов*

© ГОУ ВПО «Ивановский
государственный университет», 2010

СОДЕРЖАНИЕ

Биология

Исаев В. А. Кровососущие комары комплекса *Culex ripiens* (diptera, culicidae) в Верхне-волжье 5

Зарипов В. Н., Барнинова М. О. Особенности электроэнцефалограммы студентов с разными типами темперамента в ходе учебного процесса 10

Львов С. Е., Зарипов В. Н., Шапин В. И., Богомолов А. Ф. Комплексные исследования влияния локальной резонансной вибрации на биологические системы в межвузовской научно-исследовательской лаборатории «Биомеханика» 19

Воронин Д. Н., Звонарева Ю. А., Кравченко М. Г., Момонт И. С. Формирование «Аптекарского огорода» ботанического сада ИвГУ 21

Егорова Е. Ю., Чемоданов В. В., Краснова Е. Е., Демидов В. И., Беляков А. П. Морфологические показатели хронического гастродуоденита у детей школьного возраста 25

Баженов Ю. И. Стресс и барьерные функции организма 29

Химия

Гиричева Н. И., Медведева Ю. С., Бардина А. В. Изменение характера водородной связи в *ortho*-нитробензолсульфонамиде при переходе «кристалл — газ» 36

Гиричева Н. И., Бардина А. В., Медведева Ю. С. Влияние взаимного положения функциональных групп на число конформеров молекул нитрозамещенных бензолсульфо-кислоты 38

Лапыкина Е. А., Гиричева Н. И. Выбор базиса для расчета геометрических параметров молекул трийодидов лантаноидов 41

Казак А. В., Усольцева Н. В., Быкова В. В., Семейкин А. С., Юдин С. Г. Структура плавающих слоев мезозамещенных производных порфина 44

Петров В. М., Петрова В. Н., Иванов С. Н. Исследование строения молекулы 2-нафталинсульфонилхлорида 48

Крылов Е. Н. Соотношение между зарядами на атомах замещенных бензола и кон-

стантами заместителей по Гаммету и Гаммету — Брауну 51

Клюев М. В., Абдуллаев М. Г., Абдуллаева З. Ш. Металлополимеры в синтезе ди-каина 57

Курицын Л. В. К расчету статистического фактора в кинетике реакций полифункциональных соединений 59

Физика

Зайцев А. А., Афанасьев В. Н., Безумова М. А. Применение методов решеточных систем к теории вязкости жидкости 63

Давидзон М. И. О законе охлаждения Ньютона — Рихмана 70

Математика

Азаров Д. Н. О почти аппроксимируемости конечными p -группами абелевых групп 76

Белов А. С. Неулучшаемость некоторых коэффициентов условий равномерной сходимости тригонометрического ряда 79

Гайворонская М. Ю., Соколов Е. В. О финитной отделимости циклических подгрупп HNN-расширений групп 90

Груздева Ю. В., Пухов С. В. Парето-оптимальные решения выпуклых задач векторной оптимизации 98

Логинова Е. Д., Молдаванский Д. И. О пересечении подгрупп конечного индекса в свободных произведениях групп с коммутирующими подгруппами 104

Молдаванский Д. И. О пересечении подгрупп конечного p -индекса в группах Баумслага — Солитэра 106

Хашин С. И. Оценка качества сегментации изображения 112

Яцкин Н. И. К топологической трактовке аппроксимационных свойств групп, связанных с вербальными подгруппами 118

Аннотации 128

Summaries 134

Сведения об авторах 140

Информация для авторов «Вестника Ивановского государственного университета» 145

IVANOV STATE UNIVERSITY BULLETIN

Series "Natural, Social Sciences"

Issue 2, 2010

Biology. Chemistry. Physics. Mathematics

Scientific journal

Issued since 2000

The journal is registered in the Russian Federation Ministry
of Press, Television and Radio Broadcasting and Mass Communications
Registration certificate PI № 77-16954 of December 5, 2003

EDITORIAL COUNCIL:

V. N. Egorov, Doctor of Economics (Chairman)

D. I. Polyviannyi, Doctor of History
(Vice-Chairman)

V. I. Nazarov, Doctor of Psychology
(Vice-Chairman)

L. V. Micheeva (Secretary-in-Chief)

K. Ya. Averbuch, Doctor of Philology
(Moscow)

Yu. M. Voronov, Doctor of Politics

N. V. Usoltseva, Doctor of Chemistry

K. Prefcke, Professor (Germany)

Yu. M. Reznik, Doctor of Philosophy (Moscow)

O. A. Khasbulatova, Doctor of History

EDITORIAL BOARD:

V. A. Isaev, Doctor of Biology

M. V. Klyuev, Doctor of Chemistry

D. I. Moldavanskii, Doctor of Mathematics

Editorial Staff:

Publishing House Director *L. V. Mikheeva*

Editors *O. V. Boronina*,
O. A. Kruchinina

Technical Editor *I. S. Sibireva*
Computer layout *T. B. Zemskova*
Cover *R. E. Kruglov*

ISBN 978-5-7807-0749-3

© SEI of HPE "Ivanovo State University",
2010

CONTENTS

Biology

Isaev V. A. Mosquitoes (diptera, culicidae) of *Culex pipiens* complex (diptera, culicidae) in Upper Volga region 5

Zaripov V. N., Barinova M. O. Features electroencephalogram of students with different types of temperament in the course of educational process 10

Lvov S. Ye., Zaripov V. N., Shapin V. I., Bogomolov A. F. Complex researches of influence of the local resonant vibration on biological systems in the interuniversity research laboratories «Biomechanics» 19

Voronin D. N., Zvonaryova Yu. A., Kravchenko M. G., Momont I. S. Creation of «Pharmaceutical kitchen-garden» on the basis of botanical garden of Ivanovo State University 21

Egorova Ye. Yu., Chemodanov V. V., Krasnova Ye. Ye., Demidov V. I., Belyakov A. P. Morphological indicators of chronic gastroduodenitis among the children of the school age 25

Bazhenov Yu. I. Stress and barrier function of organism 29

Chemistry

Giricheva N. I., Medvedeva Yu. S., Bardina A. V. Change of hydrogen bond character in «crystal—gas» transition in 2-nitrobenzenesulfonamide 36

Giricheva N. I., Bardina A. V., Medvedeva Yu. S. Effect of functional groups relative position on the number of conformers of nitrosubstitute for benzenesulphonic acid molecules 38

Lapykina Ye. A., Giricheva N. I. The choice of basis set for geometry parameters of lanthanides triiodides molecules calculations 41

Kazak A. V., Usoltseva N. V., Bykova V. V., Semeikin A. S., Yudin S. G. The structure of floating layers of mesosubstituted porphyrine derivatives 44

Petrov V. M., Petrova V. N., Ivanov S. N. Study of 2-naphthalene sulfonyl chloride molecule structure **48**

Krylov Ye. N. Correlation between charge on atoms in substituted benzenes and deputy constants on Gammet and Gammet — Brown-equations **51**

Klyuev M. V., Abdullayev M. G., Abdullayeva Z. Sh. Metalpolymer catalysts in dicain syntheses **57**

Kuritsyn L. V. To the calculations of statistical factor in the kinetics of reactions in polyfunctional compounds **59**

Physics

Zaitsev A. A., Afanasyev V. N., Bezumova M. A. Using lattise methods in solution theory viscosity of liquids **63**

Davidzon M. I. About the law of cooling by Newton — Rikhman **70**

Mathematics

Azarov D. N. On the virtual residuality a finite p -groups of abelian groups **76**

Belov A. S. Unimprovability certain coefficient conditions for uniform convergence of trigonometrical series **79**

Gaivoronskaya M. Yu., Sokolov Ye. V. On the separability of cyclic subgroups in HNN-extensions of groups **190**

Gruzdeva Yu. V., Puhov S. V. Pareto optimal solutions in convex vector optimization problems **98**

Loginova Ye. D., Moldavanskii D. I. On the intersection of finite index subgroups in free products of groups with commuting subgroups **104**

Moldavanskii D. I. On the intersection of subgroups of finite p -index in Baumslag — Solitar groups **106**

Hashin S. I. The estimation of quality of segmentation of the map **112**

Yatskin N. I. On the topological interpretation of some residual group properties, associated with verbal subgroups **118**

Summaries **134**

Information about the authors **140**

Information for the authors of "Ivanovo State University Bulletin" **145**

1. Абдуллаев М. Г.
2. Абдуллаева З. Ш.
3. Азаров Д. Н.
4. Афанасьев В. Н.
5. Баженов Ю. И.
6. Бардина А. В.
7. Баринова М. О.
8. Безумова М. А.
9. Белов А. С.
10. Беляков А. П.
11. Богомолов А. Ф.
12. Быкова В. В.
13. Воронин Д. Н.,
14. Гайворонская М. Ю.
15. Гиричева Н. И.
16. Груздева Ю. В.
17. Давидзон М. И.
18. Демидов В. И.
19. Егорова Е. Ю.
20. Зайцев А. А.
21. Зарипов В. Н.
22. Зарипов В. Н.
23. Звонарева Ю. А.
24. Иванов С. Н.
25. Исаев В. А.
26. Казак А. В.
27. Ключев М. В.
28. Кравченко М. Г.
29. Краснова Е. Е.
30. Крылов Е. Н.
31. Курицын Л. В.
32. Лапыкина Е. А.
33. Логинова Е. Д.
34. Львов С. Е.
35. Медведева Ю. С.
36. Молдаванский Д. И.
37. Момонт И. С.
38. Петров В. М.
39. Петрова В. Н.
40. Пухов С. В.
41. Семейкин А. С.
42. Соколов Е. В.
43. Усольцева Н. В.
44. Хашин С. И.
45. Чемоданов В. В.
46. Шапин В. И.
47. Юдин С. Г.
48. Яцкин Н. И.

УДК 576.895.771

В. А. Исаев

КРОВСОСУЩИЕ КОМАРЫ КОМПЛЕКСА *CULEX PIPIENS* (DIPTERA, CULICIDAE) В ВЕРХНЕВОЛЖЬЕ

Памяти профессора Н. В. Хелевина

В последние годы в публикациях по идентификации видов пересматриваются данные по видовой диагностике, систематике и филогенетике, основанные на морфологических и иных критериях видов, при этом одни авторы доходят до отрицания морфологических методов, другие, наоборот, защищают их и рассматривают как опрометчивое решение о взятии на вооружение в первую очередь молекулярно-генетических методов, третьи, не вступая в полемику, считают, что истина обычно находится посередине [26, 17, 16].

Очевидно, что одной из важнейших задач при переходе к управляемой, контролируемой эволюции разных групп организмов становится комплексный системный анализ больших массивов разнородных данных, преодолевающий недостатки как прежних морфоэкологических, так и редукционистских молекулярно-генетических исследований прошлого века [5].

Одним из модельных объектов в этой области может послужить комплекс комаров рода *Culex*. Представители этого рода известны как активные кровососы и переносчики вобудителей обширного круга заболеваний. Такие группы, как комплекс *Culex pipiens*, имеют сложную таксономическую структуру, экологически чрезвычайно пластичны. Взаимоотношения между членами комплекса привлекают постоянное внимание исследователей. Широкое распространение и высокая численность синантропных популяций этих комаров делают глобальной разработку и совершенствование методов их контроля [1, с. 3).

Первые упоминания о комарах *Culex pipiens* в Ивановской области встречаются в работах Н. В. Хелевина 40-х гг. XX в., выполнявшихся в связи с исследованиями по биологии малярийных комаров и эпидемиологии малярии [18, 19]. В 40—60-е гг. прошлого века достоверно был известен только один *Culex pipiens* L., идентификация которого проводилась по отечественным и зарубежным определителям 30—40-х гг. XX в. Отмечалось, что личинки этого вида встречаются в загрязненных водоемах населенных пунктов, а удельный вес этих комаров незначителен [20].

После ликвидации в области малярии и обстоятельных исследований по комарам *Anopheles* и *Aedes* в обзоре о кровососущих комарах в нашем регионе указывалось, что из 4 родов, представленных на территории Ивановской области (*Anopheles*, *Aedes*, *Culex* и *Culiseta*), «два последних рода включают небольшое число видов и не имеют существенного значения в пределах области» [21, с. 119].

© Исаев В. А., 2010

В последующие полвека существенно изменилось соотношение нападающих на человека кровососущих комаров разных родов и их потенциальное эпидемиологическое значение в связи с отсутствием местных случаев заболевания малярией и распространением на территории области новых, ранее не регистрировавшихся заболеваний, передаваемых комарами [11, 12].

Кроме открытых водоемов, где ранее обнаруживали личинок комаров рода *Culex*, с середины 70-х гг. XX в. в г. Иванове службой санэпиднадзора в закрытых водоемах (подвалах, затопленных водой) стали находить городских подвальных комаров, идентифицированных позднее как экологическая форма вида *Culex pipiens* L. — *C. pipiens* f. *molestus*. В последующие 20 лет эта форма распространилась практически повсеместно — как в среднем по размеру городе (Иваново), так и расположенном неподалеку малом городе (Кохма) [8, 11, 12]. Отличия двух форм комаров комплекса *Culex pipiens* L., собранных на территории области в тот период, представлены в табл. 1.

Таблица 1

Различия экологических форм комаров комплекса *Culex pipiens* L. ([13, 14] с изм.)

<i>C. pipiens</i> f. <i>molestus</i>	<i>C. pipiens</i> f. <i>pipiens</i>
Окраска самок светлая	Окраска самок темная
Первые 4 членика пальп самцов короче хоботка	Первые 4 членика пальп самцов длиннее хоботка
Сифональный индекс личинок < 4,5	Сифональный индекс личинок > 4,5
Стеногамность	Эвригамность
Автогенность	Отсутствие автогенности
Антропофильность	Неантропофильность и умеренная антропофильность*
Гомодинамность	Гетеродинамность

Примечание. * Встречаются и антропофильные популяции.

В ходе дальнейших исследований разных популяций комаров было установлено, что на территории г. Иванова и Ивановской области обитает подвид комаров *Culex p. pipiens*, представленный тремя формами: 1) автогенной, гемерофильной формой *molestus*; 2) неавтогенной гемеродиафорной формой; 3) неавтогенной гемерофобной формой [10]. Для дифференциации личинок этих форм использовалась совокупность нескольких морфологических признаков, среди которых наиболее значимыми оказались длина и ширина сифона (сифональный индекс), длина последнего сегмента, длина седла, ширина груди, расстояние между глазами (табл. 2).

Таблица 2

Диагностические морфологические признаки личинок комаров комплекса *Culex pipiens pipiens*, мм ([10] с изм.)

Признак	Экологические формы комаров <i>C. p. pipiens</i>		
	<i>C. p. pipiens</i> f. <i>molestus</i>	<i>C. p. pipiens</i> f. <i>pipiens</i> (гемеродиафорная)	<i>C. p. pipiens</i> f. <i>pipiens</i> (гемерофобная)
Длина сифона	< 1,3	1,3 — 1,6	> 1,6
Ширина сифона	< 0,3	0,3	> 0,3
Длина последнего сегмента	< 0,4	0,4 — 0,6	> 0,6
Длина седла	< 0,4	0,4 — 0,5	> 0,5
Ширина груди	< 1,0	1,0 — 1,5	> 1,5
Расстояние между глазами	< 0,9	0,9	> 0,9

Гемеродиафорная форма *Culex p. pipiens* была собрана в окр. г. Кохмы и в дальнейшем была передана для исследований Е. Б. Виноградовой, а затем идентифицирована специалистами из ЗИН РАН и Института общей генетики РАН как новый для области вид *Culex torrentium* Mart. [27]. Тот же вид был отмечен в ходе молекулярно-генетических исследований личинок с территорий соседних с нами Ярославской и Нижегородской областей, а из других регионов, ближайшей к нам Московской области, по личинкам и имаго были представлены два вида рода *Culex*: *C. torrentium* и *Culex pipiens* (табл. 3).

В последней обстоятельной сводке по комарам Москвы и Московской области указывалось три вида рода *Culex* [6], различия которых представлены в табл. 4. Из этих материалов следует, что расположение щетинок на сифоне личинок *Culex pipiens* L. и *C. torrentium* Mart. различно и используется как качественный диагностический признак [6]. При изучении комаров Ивановской области (*C. p. pipiens f. pipiens* — гемеродиафорная форма и *Culex torrentium*, рассматривавшегося ранее как *C. p. pipiens f. Pipiens*, — гемерофобная форма) выяснено, что у личинок этих двух видов имеются и количественные различия, определяемые методом дискриминантного анализа [10]. Самки *Culex pipiens* L. и *C. torrentium* Mart. сходны по морфологии, но имеют некоторые экологические различия, а различия по гениталиям между этими двумя видами и *C. territans* Walk. отмечаются отечественными и зарубежными авторами [7, 23, 6]. Кроме того, в ряде работ, посвященных дифференциации *C. p. pipiens* и *C. torrentium*, указывается также, что единственным надежным морфологическим различием самцов *C. p. pipiens* и *C. torrentium* является лишь строение гипопигия самцов, в том числе форма дорзальных склеритов эдеагуса [25, 24, 1 и др.].

Таблица 3

Идентификация личинок комплекса *Culex pipiens* разных популяций из открытых водоемов ([27] с изм.)

Местность	Число, экз.	Вольбахия, %	Размер ITS2*, (п. н.)	3' COI митотип**, (P, M), вид
Окр. Ярославля	24	0	410	P, <i>C. torrentium</i>
Ивановская обл., окр. Кохмы***	20	0	410	P, <i>C. torrentium</i>
Нижегородская обл., Дивеево	18	0	410	P, <i>C. torrentium</i>
Нижегородская обл., Выкса	24	0	410	P, <i>C. torrentium</i>
Москва, Битца	16	0	410	P, <i>C. torrentium</i>
Москва, Останкино	15	0	410	P, <i>C. torrentium</i>
Москва, Останкино	3	100	460	M, <i>C. pipiens</i>
Московская обл., Лужки	20	90	460	M, <i>C. pipiens</i>
Московская обл., Чашниково	18	100	460	M, <i>C. pipiens</i>
Московская обл., Чашниково	32	0	410	P, <i>C. torrentium</i>
Московская обл., Икша	22	0	410	P, <i>C. torrentium</i>
Московская обл., Икша	20	100	460	M, <i>C. pipiens</i>
Московская обл., Стариково	20	100	460	M, <i>C. pipiens</i>
Московская обл., Стариково	24	0	410	P, <i>C. torrentium</i>

Примечания. * ITS2 — второй внутренний транскрибируемый спейсер рибосомной ДНК на хромосоме I; ** COI — митохондриальный ген субъединицы I цитохромоксидазы с; *** по нашим материалам.

Значительное сходство личинок и самок *C. p. ripiens* и *C. torrentium* и практическая необходимость в их дифференциации послужили основанием для проведения широких молекулярно-генетических исследований комплекса *Culex ripiens* на территории нашей страны. В результате молекулярно-генетических исследований были устранены ошибки в определении *C. torrentium*, который ранее принимался за *C. p. ripiens*, а также найдены маркеры для разделения автогенной и неавтогенной форм комплекса *Culex ripiens* [3, 4, 22 и др.]. Подробному изучению подверглись в последнее время также количественные морфологические признаки, различающие личинок *C. torrentium* и *C. p. ripiens f. molestus*, что подтвердило целесообразность использования всего набора известных методов диагностики видов для поиска потенциальных механизмов и сценариев дивергенции разных групп личиночных признаков в комплексе комаров *Culex ripiens* [2].

Таблица 4

Различия личинок и имаго *Culex ripiens* L. и близких к ним видов комаров рода *Culex* [7, 23, 6]

<i>Culex ripiens</i> L.	<i>C. torrentium</i> Mart.	<i>C. territans</i> Walk.
Щетинка 6-С у личинок из 4—5 ветвей	Щетинка 6-С у личинок из 4—5 ветвей	Щетинка 6-С у личинок простая или из 2 ветвей
Наиболее боковое положение на сифоне занимает вторая от вершины щетинка сифона	Наиболее боковое положение на сифоне занимает ближайшая от вершины щетинка	Щетинки сифона помещаются по одной линии вдоль границ боковых и задних частей сифона
Светлые поперечные перевязи или светлые боковые пятна расположены в основаниях тергитов брюшка самок	Светлые поперечные перевязи расположены на вершинах тергитов брюшка самок	Светлые поперечные перевязи расположены на вершинах тергитов брюшка самок
Предвершинный выступ гонококситы самцов с одной или с несколькими прозрачными пластинками овальной, ланцетовидной или, реже, ножевидной формы. Х стернит на вершине с шипиками, расположенными в несколько рядов	Предвершинный выступ гонококситы самцов с одной или с несколькими прозрачными пластинками овальной, ланцетовидной или, реже, ножевидной формы. Х стернит на вершине с шипиками, расположенными в несколько рядов	Предвершинный выступ гонококситы самцов без пластинчатых выростов. Х стернит на вершине с одним рядом относительно крупных зубцов или с несколькими рядами коротких шипиков

Комплексный анализ различных признаков комаров рода *Culex* в Верхневолжье позволяет заключить, что в составе комплекса *Culex ripiens* есть автогенная и неавтогенная формы *Culex ripiens* L. Кроме того, отмечено нахождение *C. torrentium* в одной из точек Ивановской области, в окр. г. Кохмы, подтвержденное с помощью молекулярно-генетических методов.

Вопрос об эволюции этих форм и их взаимосвязях на протяжении последнего столетия остается открытым, т. к. неизвестно, как широко последний вид был ранее распространен на изучаемой территории и принимался ли он ошибочно за *Culex ripiens f. ripiens*.

Если рассматривать экологические связи *C. torrentium* с экзотермными видами как первичные, то это более древний вид, который является гемеро-

фобной формой [15], не идущей в города или проникающей лишь в их окрестности вслед за прокормителями при мозаичности ландшафтов. Комплекс *Culex pipiens* с экологическими формами *pipiens* и *molestus*, способными осваивать открытые и закрытые водоемы, проникать в средние и малые города, расширять круг эндотермных прокормителей или использовать автогенный путь развития при их отсутствии, выступает в этом случае в нашей области как более молодая, прогрессивная таксономическая структура, сформировавшаяся в ходе синантропизации [8—14]. История появления или вытеснения ее форм в каждом регионе может быть различной и требует дополнительного анализа и тщательного мониторинга для прогноза эпидемиологических ситуаций и предупреждения заноса новых заболеваний.

Библиографический список

1. *Виноградова Е. Б.* Комары комплекса *Culex pipiens* в России. СПб., 1997. 307 с.
2. *Виноградова Е. Б., Ивницкий С. Б.* Изменчивость морфологических количественных признаков в локальных популяциях личинок некоторых представителей кровососущих комаров комплекса *Culex pipiens* (Diptera, Culicidae) // Зоол. журн. 2009. Т. 88. № 6. С. 685—693.
3. *Виноградова Е. Б., Шайкевич Е. В.* Молекулярно-генетические методы идентификации городского комара *Culex pipiens pipiens f. molestus* (Diptera, Culicidae) // Паразитология. 2004. Т. 38, № 5. С. 406—412.
4. *Виноградова Е. Б., Шайкевич Е. В.* Дифференциация городского комара *Culex pipiens pipiens f. molestus* и *Culex torrentium* (Diptera, Culicidae) молекулярными методами // Паразитология. 2005. Т. 39. С. 574—576.
5. *Гельфанд М. С.* Геномы и эволюция // Вестн. РАН. 2009. Т. 79, № 5. С. 411—418.
6. *Горностаева Р. М., Данилов А. В.* Комары Москвы и Московской области. М., 1999. 342 с.
7. *Гуцевич А. В., Мончадский А. С., Штакельберг А. А.* Фауна СССР. Л., 1970. Т. 3 : Насекомые двукрылые. Вып. 4: Комары сем. Culicidae. 384 с.
8. *Исаев В. А.* Кровососущие членистоногие в натурценозах, агроценозах и урбаноценозах // Материалы I Всероссийского совещания по кровососущим насекомым. СПб., 2006. С. 76—79.
9. *Исаев В. А., Егоров С. В.* Биотопическое распределение личинок комаров *Culex pipiens pipiens* L. в антропогенных биоценозах. Роль кровососущих насекомых и клещей в лесных экосистемах России. Великий Новгород, 2000. С. 17—21.
10. *Исаев В. А., Егоров С. В.* Комплексный метод диагностики популяций экологических форм комаров *Culex pipiens pipiens* L., обитающих в антропогенных биоценозах // Экология человека и природа : III науч.-техн. конф. Иваново, 2000. С. 32—35.
11. *Исаев В. А., Егоров С. В.* Комары (Diptera: Culicidae) и их потенциальное значение в трансмиссии дирофиляриозов в средних и малых населенных пунктах Ивановской области // Вестн. Иван. гос. ун-та. Сер. : Биология. Химия. Физика. 2004. № 3. С. 3—8.
12. *Исаев В. А., Егоров С. В., Кокурин В. Н.* Кровососущие комары (Diptera, Culicidae) малого и среднего городов восточного Верхневолжья Российской Федерации и их роль в распространении дирофиляриозов собак // Вестн. Иван. гос. ун-та. Сер. : Биология. Химия. Физика. Математика. 2006. № 3. С. 8—12.
13. *Исаев В. А., Цапленков А. Н., Егоров С. В.* Экология комаров комплекса *Culex pipiens* L. г. Иваново // Актуальные проблемы химии и химической технологии : материалы I Междунар. науч.-техн. конф. Иваново, 1997. С. 47.
14. *Исаев В. А., Цапленков А. Н., Егоров С. В.* К экологии комаров *Culex pipiens* L. (Diptera, Culicidae) в Иваново // Проблемы энтомологии в России : тр. РЭО РАН. СПб., 1998. Т. 1. С. 173.
15. *Клауснитцер Б.* Экология городской фауны. М., 1990. 246 с.

16. Лухтанов В. А., Кузнецова В. Г. Молекулярно-генетические и цитогенетические подходы к проблемам видовой диагностики, систематики и филогенетики // Журн. общ. биологии. 2009. Т. 70, № 5. С. 415—437.
17. Расницын А. П. Классическая и неклассическая систематика: другой взгляд // Там же. 2006. Т. 67, № 5. С. 385—388.
18. Хелевин Н. В. Характеристика зимовок малярийных комаров в Ивановской области // Мед. паразитология. 1941. Т. 10, № 3/4. С. 440—443.
19. Хелевин Н. В. Материалы по экологии малярийных комаров г. Иваново // Малярия в Ивановской области. Иваново, 1947. С. 52—60.
20. Хелевин Н. В. Некоторые итоги изучения биологии переносчиков заразных заболеваний в Ивановской области // К познанию фауны и флоры Ивановской области. Иваново, 1961. № 1. С. 9—35.
21. Хелевин Н. В. Кровососущие комары Ивановской области // Природа Ивановской области. Иваново, 1968. С. 119—121.
22. Храброва Н. В. Молекулярно-генетическое исследование комаров комплекса *Culex pipiens* (Diptera: Culicidae): автореф. дис. ... канд. биол. наук. Томск, 2006. 22 с.
23. Carpenter S. J., LaCasse W. J. Mosquitoes of North America (north of Mexico). Berkeley; Los Angeles: Univ. Calif. Press, 1955. 360 p.
24. Dahl C. Taxonomic studies on *Culex pipiens* and *C. torrentium* // Biosystematics of haematophagous insects. 1988. Oxford systematics assoc. special vol. № 37. P. 149—175.
25. Service M. W. The taxonomy and biology of two sympatric sibling species of *Culex*, *C. pipiens* and *C. torrentium* // Proc. Zool. Soc. 1968. Vol. 156. P. 313—323.
26. Scotland R. W., Olmstead R. G., Bennet J. R. Phylogeny reconstruction: the role of morphology // Syst. Biol. 2003. Vol. 52. P. 539—548.
27. Vinogradova E. B., Shaikevich T. V., Ivanitsky A. V. A study of the distribution of the *Culex pipiens* complex (Diptera, Culicidae) mosquitoes in the European part of Russia by molecular methods of identification // Comparative Cytogenetics. 2007. Vol. 1, № 2. P. 129—138.

ББК 88.361

В. Н. Зарипов, М. О. Барина

ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОЭНЦЕФАЛОГРАММЫ СТУДЕНТОВ С РАЗНЫМИ ТИПАМИ ТЕМПЕРАМЕНТА В ХОДЕ УЧЕБНОГО ПРОЦЕССА

Воздействие инновационных образовательных нагрузок, увеличение уровня психоэмоционального и интеллектуального напряжения, интенсификация учебного процесса, повышение требований к объему и качеству знаний и, самое главное, нарушение двигательного режима отрицательно влияют на функциональные возможности организма студентов и в первую очередь на состояние нервной системы [5]. Для раскрытия природы психологических функций и личностных особенностей, таких как способности и темперамент, наиболее адекватным для оценки является использование электроэнцефалографических показателей.

© Зарипов В. Н., Барина М. О., 2010

• Серия «Естественные, общественные науки»

Актуальность исследования обусловлена тем, что в литературных источниках отсутствуют данные об особенностях изменения электроэнцефалографических показателей у студентов с разными типами темперамента.

В связи с этим целью настоящего исследования явилось изучение изменений электроэнцефалограммы у студенток под влиянием различных этапов учебного процесса в зависимости от их типов темперамента.

Материал и методы исследования

В исследовании принимали участие 30 студенток биолого-химического факультета Ивановского государственного университета в возрасте 18—20 лет.

Исследование выполнялось в три этапа. На первом этапе исследования проводилось психологическое тестирование, которое включало определение типа темперамента на основании теста Г. Айзенка. При этом использовался программно-аппаратный комплекс «НС-Психотест» фирмы «Нейрософт» (Россия). По результатам психологического тестирования испытуемые были разделены на 3 группы в зависимости от типа темперамента: 1-я группа — меланхолики, 2-я группа — сангвиники, 3-я группа — холерики. По причине малой выборки данные ЭЭГ студенток с флегматичным типом темперамента исключили из дальнейшего анализа.

На втором этапе исследования проводилась регистрация ЭЭГ с помощью программно-аппаратного комплекса «Нейрон-Спектр» фирмы «Нейрософт» (Россия). Было проведено 3 серии обследования. В первой серии обследовались студентки в дни обычных учебных занятий за месяц до зачетной недели. Во второй серии были проведены аналогичные обследования у этих же студенток во время зачетной недели. В третьей серии обследовались студентки непосредственно перед сдачей экзаменов.

На заключительном этапе исследования с помощью метода электроэнцефалографии был выполнен компьютерный анализ электрической активности коры головного мозга, а именно амплитуды альфа-, бета-, дельта- и тета-ритмов в лобно-теменных, центральных, височных и затылочных областях коры больших полушарий.

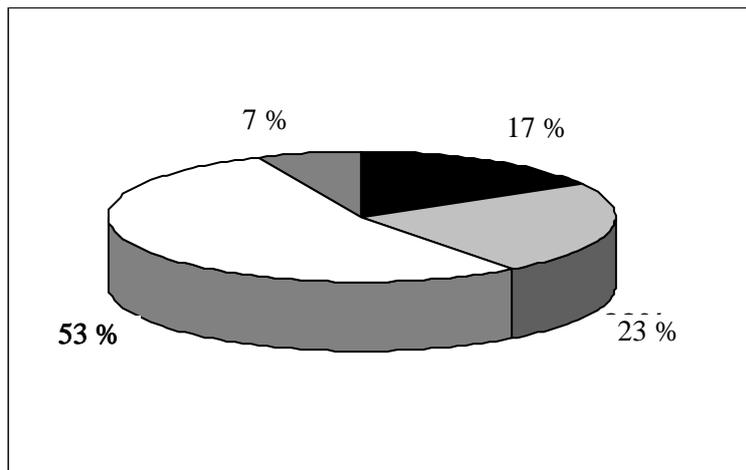
Достоверность изменений оценивали с использованием t-критерия Стьюдента.

Результаты исследования и их обсуждение

Психологическое тестирование по определению типов темперамента показало (см. рис.), что из общей группы исследуемых большинство студенток являются холериками (53 %), остальные — сангвиниками (23 %), меланхоликами (17 %) и флегматиками (7 %).

Анализ ЭЭГ студенток с разными типами темперамента показал, что достоверного изменения всех четырех основных ритмов во время зачетной недели по сравнению с семестром не происходит. Возможно, это связано с особенностями обучения на биолого-химическом факультете, а именно с использованием рейтинговой системы для промежуточного контроля успеваемости. Учитывая это, можно полагать, что зачетная неделя не является существенным стрессогенным фактором для исследуемых студенток.

Достоверные изменения ритмов ЭЭГ наблюдались при снятии показаний непосредственно перед экзаменом. При этом изменялись практически все ритмы обоих полушарий, в основном в затылочной и височной областях головного мозга, где располагаются центры зрительного и слухового анализаторов.



Процентное соотношение количества студенток в группах с разными типами темперамента:

■ — меланхолики; ■ — сангвиники; □ — холерики; ■ — флегматики

Обобщение ранее полученных экспериментальных данных [4, 6] позволяет утверждать, что возникающие при переживании стресса отрицательные эмоции связываются преимущественно с деятельностью правого полушария мозга человека. В то же время при интенсивной когнитивной деятельности отмечается большая активность лобных отделов коры левого полушария.

Таким образом, выявленная нами в ходе исследования достоверная активация преимущественно правого полушария позволяет заключить, что у исследуемых студенток предстоящий экзамен связан с негативным эмоциональным напряжением. При этом отсутствие изменений амплитуды ритмов ЭЭГ лобно-теменных областей обоих полушарий свидетельствует о слабой познавательной деятельности испытуемых. Действительно, в период экзаменов основная умственная деятельность связана с запоминанием и воспроизведением информации, а не с закреплением нового материала.

Существует немало предположений, касающихся функциональной роли альфа-ритма. Ряд исследователей считают, что этот ритм выполняет функцию временного сканирования информации и тесно связан с механизмами восприятия и памяти. Причем альфа-ритм особенно выражен в теменно-затылочных областях [3]. В проведенном исследовании изменений амплитуды альфа-ритма в левом полушарии не выявлено. В правом полушарии амплитуда альфа-ритма достоверно увеличивается у сангвиников в центральной, затылочной и височной областях головного мозга (см. табл. 1).

Таким образом, полученные данные позволяют заключить, что увеличение амплитуды альфа-ритма на ЭЭГ отражает активацию у студенток механизмов памяти. Так как эти изменения касаются правого полушария, то можно предположить, что у сангвиников при стрессе основную роль играет «творческое» полушарие.

Литературные данные в отношении β -ритма в общем сходятся на том, что увеличение амплитуды этого ритма является одним из признаков повышенной эмоциональности, возбудимости и активности. Установлено, что умственная деятельность у взрослых сопровождается повышением амплитуды бета-ритма, причем значимое усиление наблюдается при умственной деятельности, включающей элементы новизны, в то время как стереотипные, повторяющиеся умственные операции, сопровождаются снижением амплитуды [2].

В данном исследовании выявлено увеличение амплитуды бета-ритма в левом полушарии как у сангвиников, так и холериков. В правом полушарии увеличение амплитуды данного ритма наблюдалось только у сангвиников (см. табл. 2).

Увеличение амплитуды бета-ритма у сангвиников и холериков в левом полушарии свидетельствует о быстром темпе психической деятельности «логического» полушария студенток и способности лучше справляться со стрессовыми ситуациями, в отличие от меланхоликов. Можно также предположить, что у исследуемых студенток наблюдается умственная деятельность с элементами новизны. Таким образом, студентки меланхолического типа темперамента характеризуются медленным темпом психической деятельности, слабой способностью справляться с поставленными задачами и стрессом, касающимся в данном случае предстоящего экзамена.

Анализ изменений амплитуды дельта-ритма показал, что в левом полушарии амплитуда данного ритма увеличивается у холериков, а в правом полушарии у сангвиников в затылочной и височной областях. У меланхоликов изменений амплитуды дельта-ритма ни в правом, ни в левом полушариях не наблюдается (см. табл. 3).

При выполнении мыслительных заданий снижение функциональной активности мозга и темпа психической деятельности связано с пропорциональным увеличением выраженности дельта-ритма в спектре электроэнцефалограммы [1].

Таким образом, повышение амплитуды дельта-ритма у сангвиников и холериков свидетельствует о том, что учебная нагрузка в период экзаменационной сессии является достаточно сильным стрессогенным фактором.

Тета-ритм тесно связан с эмоциональным и умственным напряжением. Его иногда так и называют *стресс-ритм*, или *ритм напряжения* [2]. Установлено, что усиление тета-ритма происходит в ситуациях, требующих эмоциональной и интеллектуальной реакций, опосредованных процессами памяти, а также при выполнении мыслительных заданий. Также это может являться признаком готовности испытуемого к выполнению деятельности, отражать рабочее напряжение и даже оптимизировать функции внимания [6].

При выполнении данного исследования было выявлено увеличение амплитуды тета-ритма только у сангвиников, причем в левом полушарии коры головного мозга в височной области, а в правом полушарии в височной и затылочной областях (см. табл. 4).

Таким образом, увеличение амплитуды тета-ритма в левом и правом полушариях головного мозга у студенток с сангвиническим типом темперамента свидетельствует, с одной стороны, об эмоциональном и умственном напряжении организма студенток, а с другой стороны, об их готовности к выполнению мыслительных заданий.

Таблица 1

Изменение амплитуды альфа-ритма у студенток с разными типами темперамента на различных этапах учебного процесса

Области	Группы	Левое полушарие			Правое полушарие		
		семестр	зачет	экзамен	семестр	зачет	экзамен
Лобно-теменная	Меланхолики	14,43 ± 2,20	12,57 ± 2,22	9,0 ± 2,32	13,86 ± 2,32	12,57 ± 1,20	6,4 ± 2,64
	Сангвиники	6,5 ± 0,87	4,0 ± 1,22	9,43 ± 2,48	7 ± 1,68	5,25 ± 0,85	9,14 ± 2,52
	Холерики	10,38 ± 1,24 ▼	10,13 ± 1,17 ▼	10,69 ± 1,79	10,38 ± 1,27	11,25 ± 2,41 ▼	10,5 ± 1,66
Центральная	Меланхолики	16,14 ± 2,04	15,0 ± 1,95	16,0 ± 2,35	16,57 ± 2,15	21,29 ± 7,82	7,60 ± 3,12
	Сангвиники	5,50 ± 2,40	17,5 ± 7,37	12,14 ± 2,33	6,5 ± 2,25	12,75 ± 4,09	13,57 ± 1,11*
	Холерики	11,63 ± 1,32 ▼	11,63 ± 1,32	12,94 ± 1,87	13,88 ± 2,20 ▼	11,75 ± 1,18	11,56 ± 2,10
Затылочная	Меланхолики	28,29 ± 4,33	24,86 ± 4,56	15,4 ± 3,59	29,14 ± 4,48	25,29 ± 5,33	10,40 ± 4,91
	Сангвиники	8,5 ± 2,90	6,75 ± 2,69	12,57 ± 2,66	8,25 ± 2,78	6,75 ± 2,29	15,57 ± 1,82*•
	Холерики	14,38 ± 3,61	17,25 ± 2,55 ▼	21,5 ± 2,90 ▼	17,38 ± 3,09 ▼	16,0 ± 2,63 ▼	19,31 ± 3,23
Височная	Меланхолики	14,43 ± 1,89	12,57 ± 1,53	9,4 ± 2,44	12,57 ± 1,25	13,57 ± 3,17	6,40 ± 2,73
	Сангвиники	4,25 ± 2,46	10,5 ± 6,96	8,71 ± 2,29	4 ± 2,35	3,5 ± 1,26	9,57 ± 1,76•
	Холерики	9,5 ± 1,54	9,63 ± 1,21	12,19 ± 1,32	8,88 ± 1,14	9,75 ± 1,32 ▼	9,19 ± 1,58

Примечание. Достоверность отличий: * — $p < 0,05$ (семестр — экзамен; семестр — зачетная неделя); • — $p < 0,05$ (зачетная неделя — экзамен); ▼ — $p < 0,05$ (сангвиники — холерики).

Таблица 2

Изменение амплитуды бета-ритма у студенток с разными типами темперамента на различных этапах учебного процесса

Области	Группы	Левое полушарие			Правое полушарие		
		семестр	зачет	экзамен	семестр	зачет	экзамен
Лобно-теменная	Меланхолики	6,14 ± 0,86	5,71 ± 0,84	6,0 ± 1,38	6,0 ± 0,87	5,43 ± 0,69	7,0 ± 1,82
	Сангвиники	4,5 ± 0,65	4,75 ± 0,25	5,43 ± 0,48	4,75 ± 1,18	4,0 ± 0,58	4,43 ± 0,43
	Холерики	5,88 ± 1,19	4,88 ± 0,35	5,31 ± 0,44	5,13 ± 0,85	6,5 ± 1,68	5,25 ± 0,50
Центральная	Меланхолики	7,0 ± 1,02	7,86 ± 1,28	11,0 ± 1,87	7,57 ± 1,151	12,43 ± 5,68	7,80 ± 1,93
	Сангвиники	4,25 ± 0,95	12,25 ± 5,09	7,29 ± 0,97*	4,25 ± 0,75	8,25 ± 3,64	6,14 ± 0,86
	Холерики	5,38 ± 0,32	5,88 ± 0,64	7,5 ± 1,01*	7,88 ± 2,08	5,5 ± 0,57	7,06 ± 1,03
Затылочная	Меланхолики	8,71 ± 1,21	7,14 ± 0,83	7,40 ± 1,72	8,14 ± 0,83	7,57 ± 0,95	7,0 ± 2,02
	Сангвиники	4,75 ± 0,75	4,25 ± 0,48	7,00 ± 0,69*•	4,5 ± 0,65	4,5 ± 0,65	6,14 ± 0,67
	Холерики	5,88 ± 0,58	5,88 ± 0,35▼	7,31 ± 0,47•	5,75 ± 0,56	5,75 ± 0,37	6,31 ± 0,59
Височная	Меланхолики	5,86 ± 0,63	6,14 ± 0,74	6,20 ± 1,11	5,57 ± 0,53	7,43 ± 1,77	6,00 ± 1,30
	Сангвиники	4,0 ± 0,71	8,5 ± 4,17	5,71 ± 0,29*	3,5 ± 0,50	4,0 ± 0,71	5,43 ± 0,61*
	Холерики	4,75 ± 0,31	4,63 ± 0,32	5,63 ± 0,48	4,5 ± 0,46	4,5 ± 0,38	5,19 ± 0,60

Примечание. Достоверность отличий: * — $p < 0,05$ (семестр — экзамен; семестр — зачетная неделя); • — $p < 0,05$ (зачетная неделя — экзамен); ▼ — $p < 0,05$ (сангвиники — холерики).

Таблица 3

Изменение амплитуды дельта-ритма у студенток с разными типами темперамента на различных этапах учебного процесса

Области	Группы	Левое полушарие			Правое полушарие		
		семестр	зачет	экзамен	семестр	зачет	экзамен
Лобно-теменная	Меланхолики	19,86 ± 1,20	23,43 ± 3,12	21,80 ± 4,24	20,71 ± 0,81	22,86 ± 3,92	17,2 ± 0,86
	Сангвиники	29,50 ± 3,50 [#]	19,25 ± 1,55	21,71 ± 3,69	19,75 ± 2,32	19,0 ± 1,41	22,71 ± 3,32
	Холерики	19,25 ± 1,25	21,63 ± 1,38	23,38 ± 2,12	20,25 ± 1,00	23,38 ± 1,86	26,38 ± 4,03 [^]
Центральная	Меланхолики	17,43 ± 0,92	17,71 ± 1,30	24,60 ± 4,93	17 ± 0,79	20,86 ± 3,48	18,60 ± 1,47
	Сангвиники	16,75 ± 1,93	16,0 ± 2,12	20,57 ± 3,59	14,75 ± 0,75	15,25 ± 0,25	20,71 ± 2,73
	Холерики	15,63 ± 0,38	15,75 ± 0,56	18,31 ± 2,08	18,13 ± 1,03 [▼]	16,63 ± 0,73	22,63 ± 3,76
Затылочная	Меланхолики	17,71 ± 0,94	18,29 ± 1,06	23,60 ± 5,71	16,71 ± 0,89	17,57 ± 1,00	14,80 ± 0,66
	Сангвиники	16,25 ± 3,20	12,25 ± 1,80	16,57 ± 1,21	12,75 ± 1,70	14,0 ± 0,58	19,29 ± 1,48 ^{*#}
	Холерики	14,63 ± 0,84	15,63 ± 0,60	18,44 ± 1,66 [*]	15,13 ± 1,43	15,38 ± 0,80	21,50 ± 4,09
Височная	Меланхолики	18,29 ± 2,80	17,71 ± 1,08	26,00 ± 6,72	14,71 ± 0,36	16,0 ± 1,76	19,20 ± 2,33
	Сангвиники	22,50 ± 2,96	21,75 ± 8,01	16,29 ± 1,48	10,25 ± 2,96	13,5 ± 0,29	28,00 ± 5,88 [*]
	Холерики	14,38 ± 0,42	14,50 ± 0,57	19,06 ± 2,01 [*]	13,88 ± 1,51	15,25 ± 1,08	20,38 ± 3,68

Примечание. Достоверность отличий: * — $p < 0,05$ (семестр — экзамен; семестр — зачетная неделя); • — $p < 0,05$ (зачетная неделя — экзамен); ▼ — $p < 0,05$ (сангвиники — холерики); # — $p < 0,05$ (меланхолики — сангвиники); ^ — $p < 0,05$ (меланхолики — холерики).

Таблица 4

Изменение амплитуды тета-ритма у студенток с разными типами темперамента на различных этапах учебного процесса

Области	Группы	Левое полушарие			Правое полушарие		
		семестр	зачет	экзамен	семестр	зачет	экзамен
Лобно-теменная	Меланхолики	13,14 ± 0,99	11,43 ± 2,59	13,8 ± 5,36	12,57 ± 0,90	11,86 ± 2,30	2,0 ± 0,00
	Сангвиники	8 ± 1,08	7,5 ± 1,26	9,14 ± 3,41	8,25 ± 1,25	7,25 ± 0,85	9,57 ± 2,66 [#]
	Холерики	9,38 ± 1,15	9,13 ± 1,01	11,19 ± 2,90	9,5 ± 0,85	10,88 ± 2,02	9,81 ± 1,82 [^]
Центральная	Меланхолики	14,0 ± 1,02	13,86 ± 1,62	18,8 ± 7,69	14,71 ± 1,21	20,71 ± 7,82	4,6 ± 4,60
	Сангвиники	8,5 ± 1,26	16,5 ± 5,48	14,71 ± 2,83	10,0 ± 0,71	13,5 ± 3,57	13,0 ± 2,25
	Холерики	10,75 ± 0,25	11,63 ± 0,68	13,63 ± 1,62	14,5 ± 2,01 [▼]	11,13 ± 0,90	12,25 ± 1,73
Затылочная	Меланхолики	13,57 ± 1,43	13,71 ± 1,52	10,80 ± 5,50	13,0 ± 1,41	13,86 ± 1,34	2,0 ± 0,00
	Сангвиники	4,75 ± 2,43	4,5 ± 2,36	9,57 ± 2,52	2,0 ± 1,41	5,25 ± 1,25	10,29 ± 3,01 ^{*#}
	Холерики	7,13 ± 1,74	10,13 ± 0,64 [▼]	10,31 ± 2,19	7,0 ± 1,73 [▼]	8,5 ± 1,40	9,63 ± 1,73 [^]
Височная	Меланхолики	11,86 ± 1,35	11,57 ± 1,15	17,20 ± 3,97	10,14 ± 1,18	12,29 ± 3,34	0,0 ± 0,00
	Сангвиники	4 ± 2,27	10,75 ± 5,59	10,71 ± 1,97 [*]	2,75 ± 1,70	5,75 ± 1,75	11,71 ± 3,07 ^{*#}
	Холерики	5,75 ± 1,16	6,63 ± 1,27	8,50 ± 2,01	6,0 ± 1,16	6,375 ± 1,34	8,19 ± 1,67 [^]

Примечание. Достоверность отличий: * — $p < 0,05$ (семестр — экзамен; семестр — зачетная неделя); • — $p < 0,05$ (зачетная неделя — экзамен); ▼ — $p < 0,05$ (сангвиники — холерики); # — $p < 0,05$ (меланхолики — сангвиники); ^ — $p < 0,05$ (меланхолики — холерики).

Выводы

1. В период зачетной недели не выявлено изменений ритмов электроэнцефалограммы у студенток, поэтому можно считать, что зачетная неделя не является значимым стрессогенным фактором для студентов.

2. Перед сдачей экзамена у студенток происходит изменение ритмов электроэнцефалограммы преимущественно в правой полушарии, т. е. предстоящий экзамен связан с эмоциональным напряжением.

3. Ритмы электроэнцефалограммы левого и правого полушарий в основном изменяются в затылочной и височной областях коры головного мозга, что указывает на использование в период экзаменационной сессии зрительной и слуховой памяти. В то же время отсутствие изменений ритмов электроэнцефалограммы в лобно-теменных областях обоих полушарий свидетельствует о слабой познавательной деятельности студентов перед сдачей экзамена.

4. У сангвиников перед сдачей экзамена наблюдается достоверное увеличение амплитуды практически всех ритмов электроэнцефалограммы полушарий коры головного мозга, что отражает активацию механизмов памяти, ускорение темпов психической деятельности и их готовность к выполнению мыслительных заданий.

5. По показателям электроэнцефалограммы студентки меланхолического типа темперамента характеризуются наименьшей способностью справляться с поставленными задачами в период экзаменационной сессии.

Библиографический список

1. *Беребин М. А., Нечаева М. А.* Нейропсихологическая и электрофизиологическая диагностика при исследованиях нарушений психической адаптации студенческой молодежи // Место нейропсихологии в XXI веке : материалы Междунар. конф. М., 2005. С. 27—29.
2. *Гнездицкий В. В.* Обратная задача ЭЭГ и клиническая электроэнцефалография (картирование и локализация источников электрической активности мозга). М. : МЕДпресс-информ, 2004. 624 с.
3. *Зарипов В. Н., Баринов М. О.* Изменения показателей кардиоинтервалографии и вариабельности ритма сердца у студенток с разным уровнем психоэмоционального напряжения и типом темперамента на зачетной неделе // Физиология человека. 2008. Т. 34, № 3. С. 1—7.
4. *Зенков Л. Р.* Электроэнцефалография. М. : Медицина, 1991. 238 с.
5. *Коробейникова И. И.* Электрофизиологическая диагностика психической адаптации студентов // Человек и здоровье : сб. науч. тр. М., 2000. С. 56—61.
6. Особенности адаптации студентов к процессу обучения в вузе / М. А. Линник, Э. Г. Заркешев, Л. М. Андрива, К. М. Кангужина, Ж. А. Рахимжанова // Актуальные проблемы адаптации организма в норме и патологии : материалы Междунар. конф. Ярославль, 2005. С. 103—105.
7. *Умрюхин Е. А.* Значение ЭЭГ и ее составляющих. М. : Наука, 2003. 159 с.

УДК 591.1

*С. Е. Львов, В. Н. Зарипов,
В. И. Шапин, А. Ф. Богомоллов*

**КОМПЛЕКСНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ВЛИЯНИЯ
ЛОКАЛЬНОЙ РЕЗОНАНСНОЙ ВИБРАЦИИ
НА БИОЛОГИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ
В МЕЖВУЗОВСКОЙ НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ
ЛАБОРАТОРИИ «БИОМЕХАНИКА»**

В 1996 г. была создана межвузовская научно-исследовательская лаборатория (МНИЛ) «Биомеханика», объединившая усилия ученых по разработке способов диагностики и кибернетических средств медицинской техники для изучения опорно-двигательной системы человека в процессе лечения при травмах и заболеваниях. В 1997 г. работам, проводимым сотрудниками межвузовской лаборатории, присвоен статус фундаментальных исследований в рамках Министерства общего и специального образования РФ.

В результате проведения совместных НИР кафедр ТиПМ ИГЭУ и ТО и ВПХ ИвГМА созданы и функционируют комплексы для вибрационной диагностики и биомеханических исследований при повреждениях и заболеваниях конечностей. Продолжают разрабатываться и внедряться новые способы диагностики и кибернетических средств медицинской техники для контроля за функциональными возможностями мышц, суставов.

В настоящее время МНИЛ «Биомеханика» объединяет специалистов ИвГМА, ИГЭУ, ИвГУ, Ивановского областного госпиталя для ветеранов войн и других научных и практических учреждений г. Иванова.

На базе межвузовской лаборатории выполняются фрагменты диссертационных работ очных и заочных аспирантов данных вузов, соискателей, курсовые и дипломные работы студентов.

Сотрудники кафедры теоретической и прикладной механики ИГЭУ (зав. кафедрой проф. В. И. Шапин является инициатором проведения совместных НИР) на основе конверсии научных исследований, проведенных в оборонной промышленности еще до образования МНИЛ, включились в изучение резонансных характеристик тканей отдельных локализаций конечностей у здоровых лиц, больных с повреждениями в процессе лечения, обоснование параметров резонансного вибрационного воздействия, обладающего положительным влиянием на течение регенераторного процесса, а также в разработку аппаратуры.

Физической основой метода диагностики с помощью разработанных устройств является понятие биомеханического резонанса, который достигается путем подачи на обследуемый биомеханический объект посредством вибровозбудителя гармонически изменяющейся силы с частотой, совпадающей с собственной частотой колебаний биообъекта.

Повреждение ткани вызывает изменение жесткости исследуемой структуры и характеристик демпфирования (трения), что, в свою очередь,

© Львов С. Е., Зарипов В. Н., Шапин В. И., Богомоллов А. Ф., 2010

неизбежно приводит к изменению частоты собственной колебательной структуры и частоты резонансных колебаний.

Сотрудники кафедры физиологии человека и животных ИВГУ (зав. кафедрой кандидат биологических наук, доцент В. Н. Зарипов) в эксперименте и клинике проводят исследования по оценке физиологических реакций сосудистой, нервно-мышечной систем и костно-суставного аппарата в ответ на действие локальной резонансной вибрации.

Проведенные исследования доказали положительное влияние определенных частот и схем воздействия резонансной вибрации аппарата «Витафон» на кровообращение в конечностях. Установлены контакты с производственным объединением «Витафон» для продолжения исследования механизмов влияния на физиологические системы новых модификаций аппарата.

Результаты проведенных на кафедре исследований показали, что кратковременное влияние резонансной вибрации приводит к изменению амплитудно-частотных характеристик мышц человека. В частности, вибрация с частотой 40 Гц влияет на частоту мышечных сокращений и в то же время не оказывает существенного влияния на их амплитуду. При этом выявленные изменения имеют явно выраженный фазный характер: начинают проявляться уже через несколько минут после начала вибровоздействия и достаточно быстро возвращаются к исходным значениям.

Реовазографические исследования верхних конечностей человека показали, что вибрационное резонансное воздействие, апплицируемое на правую ключицу человека, приводит к улучшению как артериального кровоснабжения, так венозного оттока. При этом отмечают изменения контрлатерального кровотока в противоположном предплечье, что указывает на то, что локальное резонансное вибровоздействие отражается не только на локальных изменениях кровотока, но приводит к изменениям кровотока и на системном уровне. Это, в свою очередь, свидетельствует о наличии достаточно сложного рефлекторного механизма реагирования на действие данного раздражающего фактора.

Сотрудники МНИЛ «Биомеханика» по результатам биомеханических исследований опубликовали более 50 научных работ, получили 8 патентов на изобретение, 5 свидетельств и патентов на полезную модель. На базе лаборатории «Биомеханика» сотрудниками ИВГМА защищены 7 кандидатских и 2 докторских диссертации, новизна которых связана в том числе и с изучением биомеханики опорно-двигательной системы.

Проведенные исследования показали, что вибрация, имеющая явно выраженный резонансный характер, занимает особое место в анализе влияния вибровоздействий на живые структуры. Все это указывает на необходимость продолжения дальнейших исследований в данном направлении.

Решение сложных современных наукоемких инновационных задач возможно только совместными усилиями ученых разных специальностей. Опыт работы межвузовской лаборатории «Биомеханика» свидетельствует о целесообразности такого подхода.

УДК 58. 006

Д. Н. Воронин, Ю. А. Звонарева,
М. Г. Кравченко, И. С. Момонт

ФОРМИРОВАНИЕ «АПТЕКАРСКОГО ОГОРОДА» БОТАНИЧЕСКОГО САДА ИВГУ

В самых ранних письменных памятниках человеческой культуры присутствуют разнообразные указания на применение растений как лекарственных средств. Одним из самых древних письменных свидетельств такого рода являются глиняные таблички, найденные в Ассирии. На них давалось описание того или иного растения и рекомендации по их применению [3].

В конце XVI века был издан первый российский «Травник», возникли на огородах гряды «зеленых трав», а впоследствии специальные «аптекарские огороды». В Средневековье «аптекарскими огородами» назывались ботанические сады, где изучали целебные свойства растений [3].

В настоящее время многие ботанические сады мира активно занимаются разведением, изучением и сохранением лекарственных растений [5].

«Аптекарский огород» ботанического сада ИВГУ создан в целях изучения лекарственных растений, их размножения, разведения и обеспечения посевным и посадочным материалом учебных заведений. Проект экспозиции был разработан и частично выполнен в 2007 г. студентами биолого-химического факультета Д. Ворониным и А. Удаловой под руководством кандидата биологических наук И. Б. Хитерман. «Аптекарский огород» расположен в западной части зоны цветочного хозяйства. Он имеет форму староанглийской клумбы «колесо» и занимает площадь около 0,1 га [1].

По итогам изучения видового разнообразия экспозиции «Аптекарский огород» составлена обобщающая таблица. Номенклатура и объем понимания таксонов приведены в соответствии со сводкой П. Ф. Маевского [4]. Анализ жизненных форм проводился по системе Г. И. Серебрякова [6] с некоторыми изменениями. Принадлежность видов к адвентивной флоре определялась по Е. А. Борисовой [2], С. Е. Землинскому [3].

Перечень лекарственных растений экспозиции «Аптекарский огород»

Семейство	Вид	Год			Жизненная форма
		2007	2008	2009	
1	2	3			4
<i>Gramineae</i> (<i>Poaceae</i>)	<i>Hierochloe odorata</i> (L.) Whlbg. — Зубровка душистая			+	многолетник
<i>Liliaceae</i>	<i>Asparagus officinalis</i> L. — Спаржа лекарственная	+	+	+	многолетник
	<i>Allium fistulosus</i> L. — Лук-батун			+	многолетник
	<i>Allium nutans</i> L. — Лук слизун			+	многолетник
<i>Polygonaceae</i>	<i>Rheum</i> × <i>rhabarbarum</i> L. — Ревень обыкновенный			+	многолетник

© Воронин Д. Н., Звонарева Ю. А., Кравченко М. Г., Момонт И. С., 2010

Продолжение табл.

1	2	3			4
<i>Ranunculaceae</i>	<i>Hellebores caucasicus</i> A.Br. — Морозник кавказский			+	многолетник
<i>Crassulaceae</i>	<i>Rhodiola rosea</i> L. — Родиола розовая			+	многолетник
<i>Berberidaceae</i>	<i>Podophyllum peltatum</i> L. — Подофилл щитовидный			+	однолетник
<i>Resedaceae</i>	<i>Reseda aborata</i> L. — Резеда лекарственная			+	многолетник
<i>Phytolaccaceae</i>	<i>Phytolacca americana</i> L. — Лаконос американский			+	многолетник
<i>Anacardiaceae</i>	<i>Rhus coriaria</i> L. — Сумах			+	дерево
<i>Rosaceae</i>	<i>Potentilla erecta</i> (L.) Raeusch. — Лапчатка прямостоячая			+	многолетник
	<i>Rubus caesius</i> L. — Ежевика сизая	+	+	+	полукустарник
	<i>Sanguisorba minor</i> Scop. — Кровохлебка малая			+	многолетник
<i>Vitaceae</i>	<i>Vitis amurensis</i> Rup. — Виноград амурский			+	многолетняя лиана
<i>Malvaceae</i>	<i>Alphaeae officinalis</i> L. — Алтей лекарственный	+	+	+	многолетник
<i>Hypericaceae</i>	<i>Hypericum perforatum</i> L. — Зверобой продырявленный			+	многолетник
<i>Rutaceae</i>	<i>Ruta graveolens</i> L. — Рута пахучая			+	полукустар- ник
<i>Umbelliferae</i> (<i>Apiaceae</i>)	<i>Anisum vulgare</i> Gearth. — Анис обыкновенный	+	+		двулетник
	<i>Apium graveolens</i> L. — Сельдерей пахучий	+	+		двулетник
	<i>Carum carvi</i> L. — Тмин обыкновенный	+			двулетник
	<i>Coriandrum sativum</i> L. — Кориандр посевной	+			однолетник
	<i>Foeniculum vulgare</i> Mill. — Фенхель обыкновенный	+	+		многолетник
	<i>Levisticum officinalis</i> Koch. — Любисток лекарственный	+	+	+	многолетник
	<i>Petroselinum crispum</i> (Mill.) A. W. Hill — Петрушка кудрявая			+	двулетник
<i>Primulaceae</i>	<i>Lysimachia nummularia</i> L. — Вербейник монетчатый			+	многолетник
<i>Boraginaceae</i>	<i>Borago officinalis</i> L. — Бурач- ник лекарственный	+	+	+	однолетник
	<i>Cynoglossum officinalis</i> L. — Чернокорень лекарственный	+	+		двулетник
<i>Labiatae</i> (<i>Lamiaceae</i>)	<i>Dracosephalum moldavica</i> L. — Змеголовник молдавский	+	+		однолетник

Продолжение табл.

1	2	3			4
	<i>Hyssopus officinalis</i> L. — Иссоп лекарственный	+	+	+	полукустар- ничек
	<i>Lavandula officinalis</i> L. — Лаванда лекарственная		+		кустарник
	<i>Leonurus cardiaca</i> L. — Пустырник сердечный	+	+	+	многолетник
	<i>Lophanthus anisatum</i> L. — Лофант анисовый	+			многолетник
	<i>Melissa officinalis</i> L. — Мелисса лимонная			+	многолетник
	<i>Mentha × piperita</i> L. — Мята перечная			+	многолетник
	Мята крупнолистная			+	многолетник
	<i>Ocimum basilicum</i> L. — Базилик обыкновенный			+	полукустар- ник
	<i>Origanum vulgare</i> L. — Душица обыкновенная			+	многолетник
	<i>Prunella grandiflora</i> L. Jacq. — Черноголовка крупноцветковая			+	многолетник
	<i>Prunella vulgaris</i> L. — Черноголовка лекарственная			+	многолетник
	<i>Rosmarinus officinalis</i> L. — Розмарин лекарственный	+			полукустар- ник
	<i>Salvia glutinosa</i> L. — Шалфей клейкий	+	+	+	полукустар- ник
	<i>Salvia sclarea</i> L. — Шалфей мускатный	+			многолетник
	<i>Betonica officinalis</i> L. — Буквица лекарственная			+	многолетник
	<i>Thymus vulgaris</i> L. — Тимьян обыкновенный	+	+		однолетник
	<i>Thymus serpyllum</i> L. — Тимьян (Чабрец) ползучий			+	полукустар- ничек
<i>Solanaceae</i>	<i>Solanum nigrum</i> L. — Паслён чёрный	+	+	+	однолетник
<i>Scrophulariaceae</i>	<i>Digitalis grandiflora</i> L. — Наперстянка крупноцветковая			+	многолетник
	<i>Vervascum thapsus</i> L. — Коровяк медвежье ухо			+	многолетник
<i>Rubiaceae</i>	<i>Rubia tinctorum</i> L. — Марена красильная			+	многолетник
<i>Saxifragaceae</i>	<i>Bergenia crassifolia</i> (L.) Fritsch. — Бадан толстолистный	+	+	+	многолетник
<i>Valerianaceae</i>	<i>Valeriana officinalis</i> L. — Валериана лекарственная			+	многолетник
<i>Compositae</i> (<i>Asteraceae</i>)	<i>Anthemis tinctoria</i> L. — Пупавка красильная			+	многолетник
	<i>Artemisia dracunculys</i> L. — Эстрагон (тархун)	+	+	+	многолетник

Окончание табл.

1	2	3			4
	<i>Echinacea purpurea</i> L. — Эхинацея пурпурная			+	многолетник
	<i>Inula helenium</i> L. — Девясил высокий		+	+	многолетник
	<i>Monarda didyma</i> L. — Монарда двойчатая	+	+	+	многолетник
	<i>Silybum marianum</i> (L.) Gaertn — Расторопша пестрая	+	+	+	однолетник
	<i>Tanacetum vulgare</i> L. — Пижма обыкновенная			+	многолетник

В 2007 г. на территории экспозиции «Аптекарский огород» ботанического сада ИвГУ произрастало 22 вида высших сосудистых растений, относящихся к 9 семействам. Как видно из представленной таблицы, большинство видов относится к травянистым многолетникам (10 видов; 45,5 % от общего числа видов). Ведущими семействами по числу видов являются *Labiatae* (8 видов; 36,4 %) и *Umbelliferae* (6 видов; 27,3 %). Большая часть видов экспозиции принадлежит к местной флоре (15; 68,2 %).

В 2008 г. численность экспозиции составила 24 вида высших сосудистых растений, относящихся к 11 семействам. Доминирующим среди них по числу видов является семейство *Labiatae* (*Lamiaceae*), представленное 6 видами, т. е. 25 % от общего числа видов. В биоморфологической структуре флоры «Аптекарского огорода» преобладают многолетние травянистые растения (12 видов; 50 % от общего числа). Большинство видов растений (13 видов; 54,2 %), представленных на экспозиции, относится к местной флоре.

К осени 2009 г. коллекция «Аптекарского огорода» составила 46 видов, относящихся к 24 семействам.

Из дикорастущих растений флоры области в «Аптекарский огород» помещены такие, как валериана лекарственная, зверобой продырявленный, лапчатка прямостоячая и ряд других.

Из культурных растений в коллекцию входят лекарственные и лекарственно-ароматические [7]:

Лекарственные растения: алтей лекарственный, девясил высокий, базилик обыкновенный, спаржа лекарственная, наперстянка крупноцветковая и др.

Лекарственно-ароматические растения: иссоп лекарственный, мелисса лимонная, мята перечная, шалфей мускатный и др.

Самыми многочисленными по числу видов являются семейства *Labiatae* (12 видов; 26,1 % от общего числа видов) и *Asteraceae* (7 видов; 15,2 %). В биоморфологической структуре преобладают многолетние травянистые растения (33 вида; 71,7 %). Основу коллекции составили местные виды (25 видов; 54,4 %).

Таким образом, к 2009 г. численность экспозиции составила 46 видов, относящихся к 24 семействам. Наиболее многочисленное семейство по числу видов — *Labiatae* (12 видов; 26,1 %).

В дальнейшем планируется пополнение коллекции экспозиции новыми видами не только местной флоры, но и интродуцированными растениями. В настоящее время ведется работа по составлению проекта оформления «Аптекарского огорода» и прилегающей территории.

Библиографический список

1. *Воронин Д. Н.* Проектирование и создание экспозиции «Аптекарский огород» в ботаническом саду Ивановского государственного университета // Молодая наука в классическом университете : тез. докл. науч. конф. фестиваля студентов, аспирантов и молодых ученых, Иваново, 16—27 апреля 2007 г. : в 8 ч. Иваново : Иван. гос. ун-т, 2007. Ч. 5 : Актуальные проблемы современного естествознания. С. 24.
2. *Борисова Е. А.* Адвентивная флора Ивановской области. Иваново : Иван. гос. ун-т, 2007. 188 с.
3. *Землинский С. Е.* Лекарственные растения СССР. М. : Изд-во Моск. о-ва испытателей природы, 1949. 356 с.
4. *Маевский П. Ф.* Флора Средней полосы Европейской части России. 10-е изд. М. : Т-во науч. изд. КМК, 2006. 600 с.
5. Международная программа ботанических садов по охране растений. М., 2000. 57 с.
6. *Серебряков И. Г.* Жизненные формы высших растений и их изучение // Полевая геоботаника. М. ; Л. : Наука, 1964. Т. 3. С. 146—205.
7. *Шуйский Л. П.* Показательный питомник лекарственных растений. Иваново : ОГИЗ ИВГИЗ, 1947. 95 с.

УДК [616.33+616.342]-002.2-091-053.5

*Е. Ю. Егорова, В. В. Чемоданов,
Е. Е. Краснова, В. И. Демидов, А. П. Беляков*

**МОРФОЛОГИЧЕСКИЕ ПОКАЗАТЕЛИ ХРОНИЧЕСКОГО
ГАСТРОДУОДЕНИТА У ДЕТЕЙ ШКОЛЬНОГО ВОЗРАСТА**

Хронический гастродуоденит (ХГД) относится к наиболее часто встречающимся заболеваниям пищеварительной системы у детей. Постановка диагноза заболевания требует морфологического исследования слизистой оболочки, являющегося в соответствии с положениями Сиднейской системы «золотым стандартом» диагностики хронического гастрита/гастродуоденита.

Пациенты и методы. Обследовано 255 детей 7—15 лет с хроническим гастродуоденитом. Эндоскопическое исследование проводили аппаратами GIF-N30 и GIF-P20 фирмы «Olympus» (Япония) в период обострения заболевания до начала лечения. Эндоскопические формы поражения слизистой оболочки желудка и двенадцатиперстной кишки выделяли согласно рекомендациям А. И. Волкова [1].

Объектом гистологического исследования являлись биоптаты слизистой оболочки желудка, которые фиксировали в 10 %-м растворе нейтрального формалина и заливали в парафин. Серийные срезы толщиной 4—5 мкм окрашивали гематоксилином и эозином, проводили PAS-реакцию. Гистологический раздел диагноза ставили в соответствии с критериями модифицированной Сиднейской системы. Морфологические изменения, а именно лимфоплазмощитарную инфильтрацию, инфильтрацию полиморфно-ядерными лейкоцитами, атрофию желез, кишечную метаплазию оценивали полуквантитивно (слабые, умеренные, выраженные).

© Егорова Е. Ю., Чемоданов В. В., Краснова Е. Е., Демидов В. И., Беляков А. П., 2010

При анализе гистологических препаратов проводили морфометрическое исследование слизистой оболочки с помощью микроскопа «MICROS», анализатора изображения «BIOVISION» (Австрия). Основные структурные параметры (толщину слизистой оболочки, высоту покровного эпителия, глубину ямок, диаметр желез) измеряли в мкм. Состояние слизееобразующей функции желудка оценивали по выраженности PAS-реакции, при которой окрашивается содержащий нейтральные гликопротеины мукоид. Инфицированность *H. pylori* выявляли при бактериоскопии мазков-отпечатков с биопсийного фрагмента слизистой оболочки антрального отдела желудка. Мазки-отпечатки фиксировали, высушивали, окрашивали по Граму и исследовали под микроскопом.

Результаты и их обсуждение. По данным ЭГДС у большинства детей (85,9 %) встречалось одновременное поражение слизистой оболочки желудка и двенадцатиперстной кишки (ДПК). Изолированный гастрит, выявленный только у 14,1 % пациентов, в основном регистрировался при относительно небольшой длительности заболевания (1—2 года). Из данных, представленных в табл. 1, видно, что с возрастом детей увеличивается частота поражений различных отделов гастродуоденальной слизистой оболочки. Это позволяет сделать вывод, что у большинства детей двенадцатиперстная кишка вовлекается в патологический процесс вторично на фоне уже развившегося гастрита.

Таблица 1

Локализация воспалительного процесса в слизистой оболочке желудка и ДПК в зависимости от возраста детей

Локализация процесса	Возраст детей					
	7—9 лет (n = 21)		10—12 лет (n = 96)		13—15 лет (n = 138)	
	абс.	%	абс.	%	абс.	%
Гастрит: антральный	4	19,1	6	6,3	6	4,4
	5	23,8	9	9,4	6	4,4
Гастродуоденит: антродуоденит	7	33,3	57	59,4	105	76,1
	5	23,8	24	25,0	21	15,2

Среди эндоскопических форм гастродуоденита (табл. 2) наиболее часто регистрировался эритематозный вариант (54,9 %), который преобладал во всех возрастных группах.

Таблица 2

Возрастной состав больных при различных эндоскопических формах хронического гастродуоденита

Возраст детей	Эндоскопические формы ХГД					
	эритематозная		гиперпластическая		эрозивная	
	абс.	%	абс.	%	абс.	%
7—9 лет	17	12,2	2	3,0	2	4,2
10—12 лет	58	41,4	23	34,3	15	31,3
13—15 лет	65	46,4	42	62,7	31	64,6
Всего	140	54,9	67	26,3	48	18,8

На втором месте по частоте встречаемости находится гиперпластическая форма ХГД (26,3 %), представленная в основном зернистостью антрального отдела желудка (нодулярный вариант). Если у младших школьников этот вариант встречался в единичных случаях, то в среднем и старшем школьных возрастах его удельный вес существенно увеличивался.

Отмечена достаточно высокая частота встречаемости эрозивного поражения слизистой оболочки желудка и ДПК (18,8 %), удельный вес которого в структуре эндоскопических форм ХГД также увеличивался с возрастом детей. У большинства больных выявлены острые эрозии — поверхностные дефекты поражения слизистой оболочки диаметром 1—4 мм, прикрытые фибринозным или геморрагическим налетом, окруженные венчиком гиперемии. Только у 2 больных старшей возрастной группы обнаружены хронические эрозии — полиповидные образования с вдавлением в центре и с дефектом под слоем фибрина диаметром 5—6 мм. Множественные эрозии в слизистой оболочке встречались чаще (62,5 %), чем единичные (37,5 %).

При гистологическом исследовании биоптатов слизистой оболочки, помимо оценки выраженности и активности воспаления, особое внимание уделяли состоянию микроциркуляторного русла и периваскулярного пространства. Установлено, что обострение ХГД протекает на фоне микроциркуляторных нарушений. Так, в биоптатах у больных помимо дистрофических явлений и воспалительной инфильтрации обнаружили дистонию (33,33 %) или парез микрососудов (20,83 %). Отмечено плазматическое пропитывание и расщепление базальной мембраны (20,83 %) сосудов, а также склероз мелких артерий (8,33 %). В полнокровных и расширенных подэпителиальных венах определялся стаз эритроцитов (62,55 %) и тромбы (25,0 %). У трети больных (29,17 %) имели место диапедезные кровоизлияния. Периваскулярный отек выявлен в 45,83 % случаях.

Воспалительные изменения у большинства пациентов были преимущественно выражены в антральном отделе желудка, откуда и брался биопсийный материал. При гистологическом исследовании биоптатов наличие хронического воспаления в виде лимфоплазмочитарной инфильтрации эпителия и собственной пластинки слизистой оболочки было подтверждено у всех больных. Более чем у 90 % детей хроническое воспаление не сопровождалось атрофией желез. Гастрит с атрофией наблюдался только в старшей возрастной группе, у детей с длительностью гастрита/гастродуоденита более 5 лет. Но даже при наибольшей длительности заболевания атрофия желез была слабовыраженной. В половине случаев (51,0 %) гастрит был неактивным, на что указывала инфильтрация лимфо- и плазмочитами слабой и умеренной степеней выраженности. У другой половины пациентов (49,0 %) выявили активный гастрит, характеризующийся сочетанием инфильтрации эпителия и собственной пластинки слизистой оболочки полиморфно-ядерными нейтрофилами, лимфоцитами и плазмочитами. Как правило, активное воспаление наблюдалось у детей, инфицированных *H. pylori*.

Морфометрический анализ основных структурных параметров слизистой оболочки антрального отдела желудка показал, что толщина слизистой оболочки желудка у больных ХГД колебалась в достаточно широких пределах — от 448 до 849 мкм и составила в среднем $632,86 \pm 10,46$ мкм. При сравнении индивидуальных показателей высоты покровного эпителия, глубины ямок, диаметра желез с условно нормальными значениями оказалось, что у более половины больных отмечалось снижение параметров основных

структур слизистой оболочки желудка, сопровождающееся снижением продукции защитной слизи. У 12 % больных отмечали гипертрофию и довольно высокое слизеобразование в ответ на повреждение слизистой оболочки, а у 16 % детей изменения морфометрических параметров можно было отнести к эутрофии. Таким образом, морфометрические данные большинства пациентов свидетельствуют о снижении резистентности гастродуоденальной слизистой оболочки, что подтверждалось ее контаминацией различными микроорганизмами: *H. pylori* (49,0 %), грамположительными кокками или палочками (42,5 %), обнаруженными при микроскопии мазков-отпечатков, окрашенных по Граму.

Наши данные об инфицированности детей *H. pylori* совпадают с такими, представленными в работах Т. Ю. Гроздовой [2], Г. Г. Ивановой [3]. В то же время П. Л. Щербаков с соавторами [4] указывает на более высокую распространенность инфекции. Различия данных о встречаемости хеликобактериоза у детей, по нашему мнению, обусловлены рядом причин, среди которых возрастной состав пациентов, особенности экономических и социально-гигиенических условий их проживания.

Важными гистологическими признаками ассоциированного с *H. pylori* гастродуоденита были полиморфно-ядерная инфильтрация слизистой оболочки и наличие в ней лимфоидных фолликулов. Мы отметили также, что выраженность лимфо- и плазмоцитарной инфильтрации слизистой оболочки при активном гастрите была сильнее, чем при неактивном. Кроме того, активное воспаление чаще было диффузным, а при неактивном воспалении в 70 % наблюдений выявлялась инфильтрация только поверхностного эпителия. В 17,7 % случаев в составе клеточного инфильтрата выявлены эозинофилы, указывающие на аллергический компонент воспаления. Отмечено, что при длительном течении гастродуоденита увеличивается количество фибробластов, указывающих на усиление процессов склерозирования.

Таким образом, патоморфоз хронического гастродуоденита у детей в настоящее время характеризуется преобладанием эритематозных форм, увеличением по мере роста возраста детей частоты встречаемости форм с нодулярной гиперплазией и эрозиями, что происходит параллельно с ростом встречаемости хеликобактериоза. Встречаемость хронического воспаления в слизистой оболочке с атрофией желез остается низкой.

Библиографический список

1. Волков А. И. Хронические гастродуодениты и язвенная болезнь // Рус. мед. журн. 1999. Т. 7, № 4. С. 179—186.
2. Гроздова Т. Ю. Хронические воспалительные заболевания желудка и двенадцатиперстной кишки у детей (клиника, патогенез, диагностика) : автореф. дис. ... д-ра мед. наук. Саратов, 1996. 31 с.
3. Иванова Г. Г. Факторы риска и комплексная терапия эрозивных поражений желудка и двенадцатиперстной кишки у детей : автореф. дис. ... канд. мед. наук. Владивосток, 2002. 22 с.
4. Щербаков П. Л. Вопросы педиатрической гастроэнтерологии // Рус. мед. журн. 2003. Т. 11, № 3. С. 107—112.

УДК 612.001+591.1.001

*Ю. И. Баженов***СТРЕСС И БАРЬЕРНЫЕ ФУНКЦИИ ОРГАНИЗМА**

Стресс как особое состояние организма возник в ходе эволюции живого мира. Это состояние приходит вместе с голодом, холодом, жарой, наблюдается при всякого рода стихийных бедствиях и явлениях природы, жизненных драмах, положительных и отрицательных эмоциях и др. Еще в XVIII в. Франсуа де Ларошфуко, отмечая, что внезапная немилость власть имущих поражает потерпевшего апоплексическим ударом, говорил о стрессе.

Старое английское слово «stress» (напряжение) благодаря трудам канадского ученого Ганса Селье приобрело новое звучание не только в области биологии и медицины, но и в обыденной жизни. Новый термин «стресс» стал очень популярным и довольно часто используется, когда необходимо одним словом определить общее физиологическое состояние организма человека при различных жизненных ситуациях, таких как психологическая травма, ежедневные неурядицы, конфликты с начальством или общение с неприятным для вас человеком, ощущение постоянного внутреннего давления, напряженная работа, финансовые трудности, ссоры с людьми, особенно с близкими, и др.

По определению самого Г. Селье, «стресс — состояние неспецифического напряжения живой материи, которое проявляется реальными морфофизиологическими изменениями в различных органах, и, особенно, в эндокринных железах, контролируемых передней долей гипофиза» [8]. В настоящее время проблема изучения стресса значительно расширилась. Его возникновение связывают с эмоциями, экстремальными воздействиями, непосильной физической и умственной нагрузками на организм, болевыми раздражениями и т. д. [4, 5]. Стрессовые реакции являются неспецифическими для организма. Они оказывают влияние в условиях воздействия внешней среды, специфических (стрессогенных) для данного индивидуума. В процессе эволюции не все организмы выработали у себя адекватную реактивность на возможные жизненные ситуации и влияние окружающей среды. Каждый стрессор, действуя на организм, вызывает комплексную реакцию, частью которой в том числе могут стать и специфические процессы. При этом возникает реакция, связанная в конечном счете с развитием процессов, которые способствуют адаптации (приспособлению) организма и регуляции физиологических процессов, направленных на сохранение гомеостаза.

Содержание стресс-реакции организма зависит от сложности организации живого существа. Одноклеточные организмы реализуют свою стресс-реакцию с помощью таких изменений в цитоплазме, которые позволяют избежать опасности и сохранить жизнь, например посредством хемо- и фотосинтеза, а также цистообразованием (как у амёбы). У млекопитающих, в том числе и у человека, реакция на стресс гораздо более сложная и многообразная, которая проявляется комплексом изменений основных функциональных систем организма. В частности, изменяется поведение, усиливается возбуждение, обостряются внимание и познавательные способности, параллельно происходит подавление пищевого и сексуального поведения и т. д., что в

© Баженов Ю. И., 2010

целом отражает «ориентировочную реакцию» и «готовность» к самозащите [9]. При этом мобилизуются функции систем кровообращения и кровообращения и дыхания, ответственных за доставку кислорода и питательных веществ в органы и ткани, изменяется активность иммунной системы и т. д. Упрощенная схема структуры стресс-реакции при воздействии физических факторов на организм представлена на рис. 1.

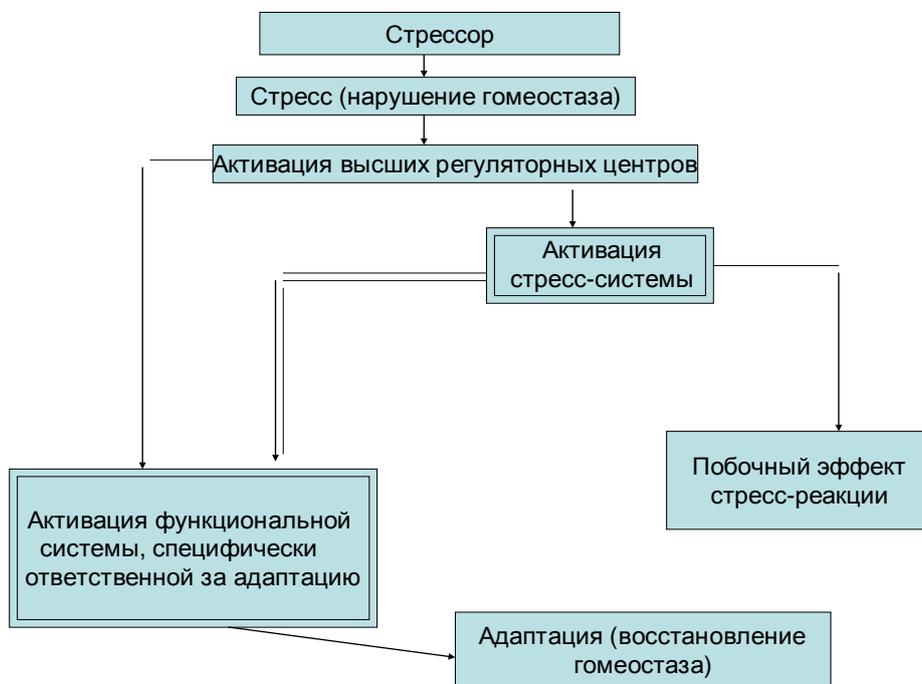


Рис. 1. Схема адаптивной стресс-реакции в ответ на действие физических стрессоров

Стресс посредством высших центров нервной системы активирует регуляторные взаимосвязи, которые объединяют определенные отделы нервной и эндокринной систем, и последние тем самым «неспецифически» активируются в ответ на стрессор, объединяясь в функциональную систему, ответственную за приспособление к конкретному стрессору. Например, при физической нагрузке функциональная система объединяет соответствующие моторные центры в головном и спинном мозге и управляемые ими скелетные мышцы, выполняющие необходимую мышечную работу. Активируются также органы дыхания и кровообращения, обеспечивающие увеличенный приток кислорода и питательных веществ к работающим мышцам и центрам управления. При этом стресс-система не только обеспечивает более полную мобилизацию функциональной системы, но и координирует адаптационные процессы [7].

Иначе говоря, стресс-система осуществляет «настройку» органов и тканей, вовлеченных в приспособительную реакцию (адаптацию) на деятельность в новых условиях. При этом влияние стресс-системы, в случае достаточно сильного стрессорного воздействия, может оказаться избыточным и привести к побочным неблагоприятным для организма стрессорным повреждениям (язвы желудочно-кишечного тракта, гипертонии, инсульта, инфаркта и других заболеваний).

Активация стресс-системы и системы, специфически ответственных за адаптацию, позволяет восстановить нарушенный гомеостаз (т. е. приспособиться к новым условиям) и завершить стресс-реакцию при условии, что сила и продолжительность стрессора относительно умеренны. Чрезмерное стрессовое воздействие приводит к нарушению физиологических функций повреждением органов и тканей. Повреждающие эффекты стресс-реакции возникают как «издержки» активации стресс-системы в ответ на сильный стресс и связаны с избыточным выбросом стресс-гормонов («побочные эффекты» стресс-реакции). Например, известно, что вазопрессин и катехоламины повышают артериальное давление, что необходимо при адаптивных (приспособительных) реакциях организма к новым условиям. Однако сосудосуживающее действие этих гормонов при их избытке в организме может оказаться чрезмерным и вызвать нарушения мозгового кровообращения и, как следствие, привести к инсульту. «Стрессорные» язвы органов желудочно-кишечного тракта также связаны с сосудосуживающим эффектом катехоламинов и возникающей вследствие этого ишемией слизистой оболочки этих органов. Избыточная секреция кортикотропин-релизинг-гормонов (КРГ) и глюкокортикоидов (ГК) подавляет секрецию половых гормонов и гормона роста, функцию щитовидной железы. Недавно также установлено, что с увеличенной секрецией цитокинов избыток КРГ вызывает угнетение системы иммунитета, что, возможно, является причиной возникновения раковых заболеваний у человека при тяжелых или затяжных стрессах. Тяжелые повреждения у людей возникают главным образом при эмоциональных стрессах. Известны случаи так называемой «внезапной сердечной смерти», наступившей после получения трагических или радостных известий. Виновником такой смерти, сопряженной с тяжелой аритмией — нарушением ритма сердечных сокращений, является избыток стресс-гормонов, главным образом катехоламинов. Конкретный механизм катехоламинового повреждения клеток связан с резким повышением концентрации Ca^{++} в них, а также с чрезмерной активацией свободно-радикального окисления, продукты распада которого оказывают повреждающее действие на организм. Сходное действие вызывает и избыток жирных кислот, образующихся в органах при активации распада липидов под влиянием катехоламинов. Подобным же образом нарушаются функции сердца, почек и других органов при хроническом действии даже умеренных по интенсивности психосоциальных стрессоров [7, 9].

В соответствии с данными исследований стресс-система состоит из центрального звена и двух периферических ветвей (симпатической и парасимпатической), которые осуществляют связь центрального звена со всеми органами и тканями организма. Центральное звено — это гипоталамус, который выполняет функции «дозорного» центральной нервной системы (ЦНС), он получает информацию о появлении стрессора и «запускает» работу стресс-системы. По концепции Г. Селье, стресс-система активируется в ответ на любой стрессор неспецифически, т. е. продуцирует одинаковый набор гормонов и медиаторов независимо от вида стрессора. Однако имеются данные, позволяющие полагать, что в ответ на физические стрессоры происходит преимущественная активация нейронов, вырабатывающих кортикотропин-релизинг-гормон (КРГ), а в ответ на психологические (эмоциональные) стрессоры — преимущественная активация норадренергических (НА)-нейронов и катехоламинового звена.

Активация симпатической нервной системы на периферии является фактором повышающим проницаемость гемато-энцефалического барьера (ГЭБ) для адреналина (Ад) и норадреналина (НА), которые, попадая в гипоталамус, активируют не симпатические центры (заднее ядро), а парасимпатические (переднее ядро гипоталамуса). В результате регуляторного механизма, в основе которого находится обратная химическая связь, реакция организма на действие стрессора ослабляется.

Учитывая, что Г. Селье в своей концепции придает особое значение передней доле гипофиза в развитии стресс-реакции организма, следует на пути активации гипоталамуса поместить и гипофиз, поскольку симпатические нервные волокна входят и в него. Гипофиз воспринимает импульсы, идущие от симпатикуса, и благодаря образованию соответствующих тропных гормонов передает их к соответствующим органам-мишеням (рис. 2.). В данном, конкретном случае аденокортикотропный гормон (АКТГ) влияет на корковую часть надпочечника и способствует образованию кортикостероидов (КС). Накопление КС в крови, вероятно, сопровождается и его накоплением в гипоталамусе при возможном повышении проницаемости ГЭБ для кортикостероидов. При этом также не исключается возможность, что накопление КС ведет к торможению образования релизинг-факторов (РЛФ)-вещества, стимулирующего образование тропных гормонов гипофиза [10].



Рис. 2. Процесс реакции организма на стресс

Механизмы внешней регуляции стресс-системы осуществляются модуляторными регуляторными системами, не входящими в стресс-систему, но тесно с ней связанными. Это так называемые стресс-лимитирующие, которые способны ограничивать активность стресс-системы и чрезмерную стресс-реакцию на центральном и периферическом уровнях регуляции. К центральным структурам стресс-лимитирующих систем относятся ГАМК — эргическая система (система нейронов, продуцирующих ГАМК — гамма-аминомасляную кислоту, обладающую тормозным действием на нейроны головного и спинного мозга) и опиоидэргическая система, объединяющая нейроны в гипоталамусе и секреторные клетки в гипофизе, которые вырабатывают опиоидные пептиды (ОП). Важно отметить, что существуют прямые связи нейронов стресс-системы с ГАМК-нейронами и опиоидными (ОП)-нейронами. Выделяемые нейронами стресс-системы гормоны активизируют ГАМК-нейроны и ОП-нейроны, которые секретируют ГАМК-опиоидные пептиды, ограничивающие, в свою очередь, активность стресс-системы. Это положение может быть продемонстрировано на примере ГАМК-системы, включающей 1) нейроны, вырабатывающие кортикотропин-релизинг-гормон (КРГ), т. е. гормон, который стимулирует секрецию адренокортикотропного гормона (АКТГ) в гипофизе и тем самым активизирует гипоталамо-гипофизарно-адреналовую систему (ГГАС); 2) нейроны, вырабатывающие гормоны аргинин, вазопрессин, усиливающие влияние КРГ на секрецию АКТГ в гипофизе; 3) группы нейронов в гипоталамусе и в других отделах ствола мозга, синтезирующих катехоламины, в основном норадреналин (рис. 3).



Рис. 3. Схема взаимодействия стресс-системы и ГАМК-эргической системы

Периферические ветви стресс-системы представлены: 1) гипоталамо-гипофизарно-адреноловой осью активируемой КРГ (кортикотропин-релизинг-гормон) и АКТГ (адренкортикотропный гормон гипофиза), ее конечным продуктом являются глюкокортикоиды, выделяемые корой надпочечников; 2) симпато-адреноловой системой, в которую входят симпатическая нервная система (иннервирующая все внутренние органы и ткани) и мозговой слой надпочечников. Конечным продуктом этой системы являются катехоламины — адреналин и норадреналин [4, 5, 7].

Ранее нами было показано, что в перестройке, связанной с температурной адаптацией к холоду, изменяется чувствительность нейромедиаторных и гормональных рецепторов [1, 3]. При этом важен и характер перехода от одних условий к другим. Если этот переход повышает стрессовый порог, события в организме определяются неспецифическими процессами. В частности, в экспериментах на животных было установлено, что при холодовом воздействии на организм повышенное теплообразование обусловлено не только увеличением теплопродукции бурой жировой ткани, но существенным, почти в 2 раза, повышением теплообразования в скелетной мускулатуре [2]. При этом отмечено, что адаптация к холоду в сочетании с мышечной деятельностью (бег на тредбане) элиминирует стрессорный эффект организма на действие холода. Введение норадреналина повышало терморегуляторную теплопродукцию не только в состоянии покоя, но и при мышечной деятельности, повышая ее энергетическую стоимость в среднем на 70—90 %, что указывает на его регулируемую роль в поддержании температурного гомеостаза при холодовом стрессе. Кроме того, нами было установлено, что нейропептиды — вазопрессин и окситоцин при действии холода на организм проявляют антагонистический эффект: гипертермическое действие окситоцина противоположно гипотермическому действию вазопрессина, а также и других пептидов — бомбезина, нейротензина, в-эндорфина и др. [3, 4]. Это указывает, что при холодовом воздействии включаются не только специфические гомеостатические механизмы, но и неспецифические компоненты различных функциональных систем организма [2, 3, 6].

Следовательно, основным результатом активации стресс-системы является увеличенный выброс в кровь глюкокортикоидов и катехоламинов — главных стресс-гормонов, которые способствуют мобилизации функции органов и тканей, ответственных за адаптацию. При этом существенную роль в регуляции температурного гомеостаза играют и нейропептиды.

Таким образом, активация стресс-системы и системы, специфически ответственных за адаптацию, позволяет восстановить гомеостаз (т. е. адаптироваться к данному стрессору) и завершить стресс-реакцию при условии, что сила и продолжительность стрессора умеренны. Чрезмерное стрессорное воздействие приводит к нарушению функции, выраженному повреждением органов и тканей. Повреждающие эффекты стресс-реакции возникают как «издержки» активации стресс-системы в ответ на сильный стресс и связаны с избыточным выбросом стресс-гормонов («побочные эффекты» стресс-реакции).

Библиографический список

1. *Баженов Ю. И.* Влияние холода на тепловое и функциональное состояние человека при мышечной работе // Холодовой стресс : критерии оценки, здоровье, профилактика. М., 2004.
2. *Баженов Ю. И.* Эколого-физиологические механизмы температурного гомеостаза // Экология и геосистемы. Шуя, 2007. Вып. 1.
3. *Баженов Ю. И., Баженова А. Ф., Горбачева Л. Р.* Физиологические механизмы адаптации к холоду // Приполярная медицина : XIII Междунар. конгресс. Новосибирск, 2006.
4. *Губарева Л. И.* Экологический стресс. СПб. ; Ставрополь, 2001.
5. *Меерсон Ф. З., Пшеникова М. Г.* Адаптация к стрессовым ситуациям и физическим нагрузкам. М., 1988.
6. *Мельникова Н. Н., Баженов Ю. И., Слепчук Н. А.* Воздействие Na H EDTA на дыхание, сердечную деятельность и мышечную активность у белых крыс при иммерсионной гипотермии // Вестн. Иван. гос. ун-та. Иваново, 2000. Вып. 3.
7. *Пшеникова М. Г.* Стресс и адаптация : энцикл. М., 1999. Т. 2 : Общая биология.
8. *Селье Г.* Стресс и дистресс : пер. с англ. М., 1986.
9. *Щербатых Ю. В.* Психология стресса и методы коррекции. СПб., 2008.
10. *Axelrod J., Resine T. D.* Stress Hormones : their Interaction and Regulation // Science. 1984. Vol. 224.

УДК 544.18

Н. И. Гиричева, Ю. С. Медведева, А. В. Бардина

ИЗМЕНЕНИЕ ХАРАКТЕРА ВОДОРОДНОЙ СВЯЗИ В *ОРТО*-НИТРОБЕНЗОЛСУЛЬФОНАМИДЕ ПРИ ПЕРЕХОДЕ «КРИСТАЛЛ—ГАЗ»

В последнее время мы занимаемся систематическим изучением строения молекул замещенных производных бензолсульфоновой кислоты. Одним из интересных представителей этого класса является *орто*-нитробензолсульфонамид (2-НБСА). Выполненные квантово-химические расчеты уровня ВЗLYP/сс-pVTZ показали, что свободная молекула 2-НБСА имеет четыре конформера, строение которых представлено на рис. 1. Два из них можно считать условно ортогональными. Связь S—N в этих конформерах располагается под углом 81(5)° и 72(5)° по отношению к плоскости бензольного кольца в конформерах I и II соответственно. Конформеры III и IV можно считать условно плоскими (связь S—N выходит из плоскости бензольного кольца всего на 21(5)° и 24(5)° для III и IV соответственно).

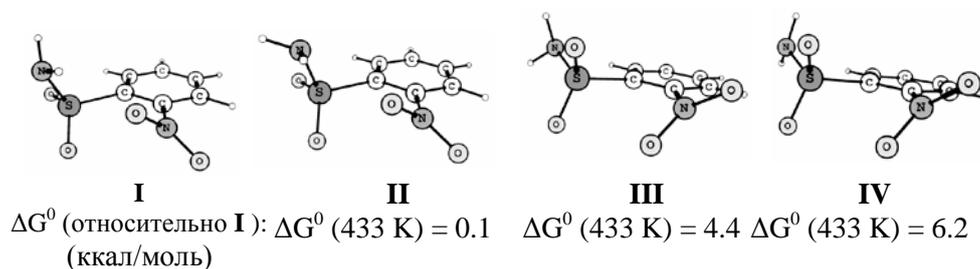


Рис. 1. Геометрическое строение и относительная энергия Гиббса конформеров молекулы 2-НБСА

Основное отличие конформеров I и II заключается во взаимной ориентации связей S = O и N—H в группе SO₂NH₂. Конформер I имеет ориентацию связей S = O и N—H, близкую к шахматной, а конформер II — близкую к заслоненной. То же можно сказать о «плоских» конформерах III и IV. Конформер III имеет ориентацию связей S = O и N—H, близкую к заслоненной, а конформер IV — близкую к шахматной. Группа NO₂ во всех конформерах развернута относительно плоскости бензольного кольца более чем на 40°. Однако если в первых двух конформерах торсионный угол O-N-C-C отрицателен, то в двух последних он положителен.

© Гиричева Н. И., Медведева Ю. С., Бардина А. В., 2010

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 09-03-00796а).

Более устойчивыми являются конформеры I и II. Об этом можно судить по относительным энергиям Гиббса конформеров (см. рис. 1). В газовой фазе при температуре 100 °С будут преобладать конформеры I и II.

Отметим, что в конформерах I и II расстояние между атомом Н группы NH₂ и атомом О группы NO₂ составляет 2.12 Å и 2.25 Å, угол ∠NH...O=133.3 ° и 118.2 ° соответственно.

Данные геометрические характеристики свидетельствуют об образовании внутримолекулярной водородной связи, которая стабилизирует конформеры I и II по сравнению с конформерами III и IV, где эта связь отсутствует.

Структура кристаллического 2-НБСА установлена в работе [1] и содержится в Кембриджской базе данных [2]. На рис. 2 показаны элементарная кристаллическая ячейка и способ упаковки молекул в ней. Как видно, в кристалле возникает межмолекулярная водородная связь с участием атома Н группы NH₂ одной молекулы и атома О группы SO₂ другой молекулы. При этом происходит разрушение внутримолекулярных водородных связей, которые свойственны для конформеров I и II свободной молекулы. Расстояние Н(NH₂)...O(NO₂) в каждой молекуле кристалла увеличивается до 2,58 Å и становится больше суммы Ван-дер-ваальсовых радиусов атомов Н и О.

В результате в кристалле за счет межмолекулярных водородных связей стабилизируется конформация, которую можно считать условно «ортогональной» относительно положения плоскости бензольного кольца и группы SO₂NH₂ и шахматной относительно расположения связей S = O и N—H в группе SO₂NH₂. Межмолекулярные водородные связи в кристалле оказываются сильнее, чем внутримолекулярные водородные связи в свободных молекулах. Оценка энергии водородной связи выполнена по формуле

$$E^{HB} = D_{HB} \cdot [5(r_{hb}/r_{DA})^{12} - 6(r_{hb}/r_{DA})^{10}] \cdot \cos^4(\theta_{DHA}),$$

где D_{HB} =9.5 ккал/моль — глубина равновесного парного потенциала при образовании водородной связи в димере H₂O; r_{hb} = 2,75 Å; r_{DA} , θ_{DHA} — расстояние и угол между атомом донора и акцептора соответственно. В нашем случае донором водородной связи является атом Н группы NH₂, а акцептором — атом О NO₂-группы в газообразных конформерах I и II и атом О группы SO₂ соседней молекулы в кристалле. В элементарной кристаллической ячейке содержится четыре молекулы 2-нитробензолсульфонамида, причем характеристики водородной связи между каждой парой молекул не равноценны. Поэтому в таблице они обозначены как «Кристалл I» и «Кристалл II».

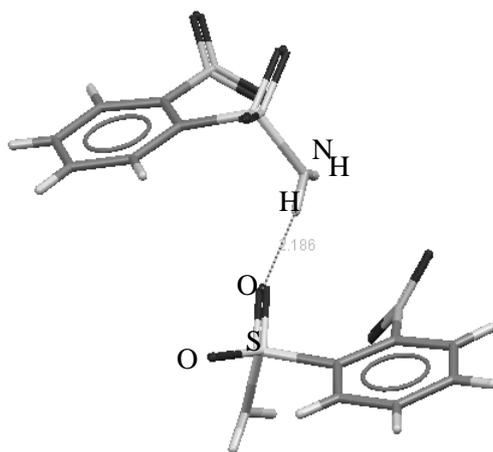


Рис. 2. Межмолекулярная водородная связь в кристалле 2-НБСА

**Характеристики водородной связи молекулы 2-НБСА
в кристалле и газовой фазе**

	$r_{DA}, \text{Å}$	$\theta_{DNA}, ^\circ$	E, ккал/моль
Конформер I	2.867	118.2	0.44
Конформер II	2.913	133.3	1.82
Кристалл I	3.057	168.8	5.97
Кристалл II	3.037	152.7	4.17

Сравнение энергии внутримолекулярных и межмолекулярных водородных связей показывает, что эффекты упаковки молекул в кристалл стабилизируют конформацию, способствующую образованию водородной связи между соседними молекулами, а не конформеры с более слабыми внутримолекулярными водородными связями.

Библиографический список

1. Hua-Long Cheng, Shu-Qin Zhang, Chun-Fang Huang // Acta Crystallogr. Sect. E: Struct. Rep. Online. 2007. Vol. 63. P. 1979.
2. The Cambridge Crystallographic Data Centre. Company registered in England № 2155347.

УДК 544.12; 547.541

Н. И. Гиричева, А. В. Бардина, Ю. С. Медведева

**ВЛИЯНИЕ ВЗАИМНОГО ПОЛОЖЕНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ
ГРУПП НА ЧИСЛО КОНФОРМЕРОВ МОЛЕКУЛ
НИТРОЗАМЕЩЕННЫХ БЕНЗОЛСУЛЬФОКИСЛОТЫ**

Молекулы бензолсульфокислоты и ее замещенных играют важную роль в промышленной химии. Ароматические сульфокислоты служат основой для синтеза многих фармацевтических препаратов, средств защиты растений, высокотемпературных полимеров (полисульфонов), пищевых добавок, красителей, моющих средств, антиоксидантов, экстрагентов. Сведения об их геометрическом и электронном строении важны для понимания химических процессов, протекающих с участием данных соединений.

В данной работе выполнен квантово-химический поиск возможных конформеров молекул БСК, 2-НБСК, 3-НБСК, 4-НБСК. Все расчеты уровня B3LYP/cc-pvtz проводились в программе Gaussian-03.

Молекула бензолсульфокислоты не имеет конформеров и характеризуется практически перпендикулярным расположением связи S—O(H) относительно плоскости бензольного кольца ($C-C-S-O = -95.3^\circ$), и такой ориентацией связи O—H, при которой она практически заслоняет одну из связей $S = O$ (рис. 1).

© Гиричева Н. И., Бардина А. В., Медведева Ю. С., 2010

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 09-03-00796а).

• Серия «Естественные, общественные науки»

При введении заместителей в бензольное кольцо молекула БСК приобретает способность к образованию конформеров, причем их число и строение зависят от положения заместителей.

Заместитель NO_2 играет важную роль, т. к. входит в большинство соединений ряда биологически активных веществ.

Если ввести заместитель NO_2 в *пара*положение, то его влияние на ориентацию и геометрию группы SO_2OH оказывается пренебрежимо малым и группа SO_2OH сохраняет свое положение относительно бензольного кольца, при этом группа NO_2 занимает наиболее энергетически выгодное копланарное с бензольным кольцом расположение (рис. 2). Других конформеров не возникает.

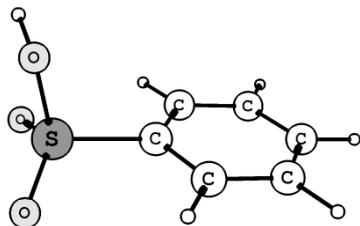


Рис. 1. Модель молекулы бензолсульфокислоты

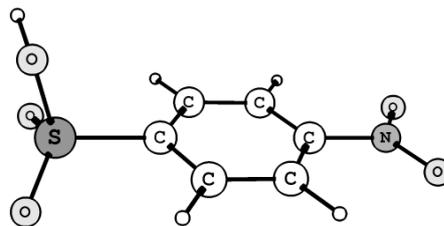


Рис. 2. Модель молекулы 4-нитробензолсульфокислоты

Введение заместителя в *мета*положение приводит к образованию двух конформеров (рис. 3), которые условно можно назвать *цис*- (конформер I) и *транс*- (конформер II).

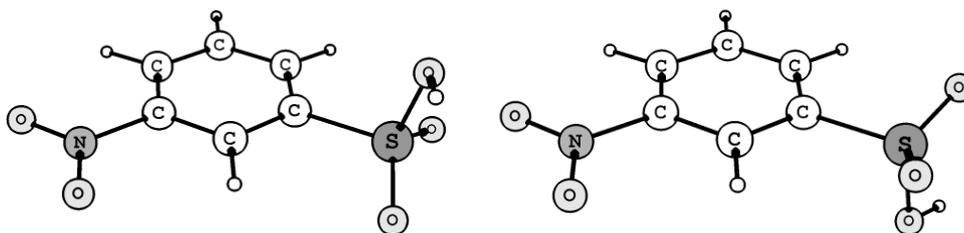


Рис. 3. Конформеры молекулы 3-нитробензолсульфокислоты (конформер I (*цис*-) — слева, конформер II (*транс*-) — справа)

Эти конформеры определяются разным взаимным положением связи O—H относительно группы NO_2 . Оба конформера имеют практически ортогональное расположение связи S—O(H) относительно бензольного кольца (углы C—C—S—O равны -92.5° и 85.4° для первого и второго конформеров соответственно). В обоих конформерах связь O—H выходит $\sim 10^\circ$ из плоскости фрагмента $(\text{H})\text{O—S}=\text{O}$, как и в молекулах БСК и 4-НБСК, в которых данный угол составляет -14.1° и -11.8° соответственно. Группа NO_2 сохраняет копланарное к бензольному кольцу расположение. Оба конформера молекулы 3-НБСК имеют близкую энергию. Однако энергия *транс*конформера на 0.28 ккал/моль выше.

При введении заместителя NO_2 в *орто*положение число конформеров возрастает до пяти (рис. 4). Они образуют в результате вращения группы SO_3H вокруг связи C—S , группы O—H вокруг связи S—O и группы NO_2 вокруг связи C—N . Один из них является энергетически намного более выгодным, чем остальные.

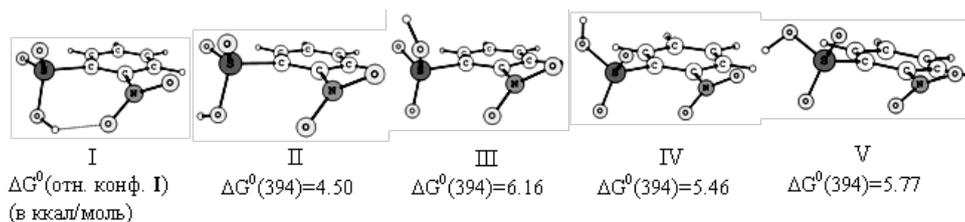


Рис. 4. Конформеры молекулы 2-нитробензолсульфокислоты

На рис. 4 во всех конформерах молекулы 2-НБСК вниз направлена одна из связей S—O, положение которой близко к ортогональному относительно плоскости бензольного кольца. Группа NO₂ во всех конформерах существенно развернута вокруг связи C—N относительно плоскости бензольного кольца. Конформер I заметно отличается от остальных конформеров наличием в нем внутримолекулярной водородной связи (1.863 Å), проявляющейся в направленности связи O—H к группе NO₂. Характерной чертой конформеров II—V является такое положение связи O—H, при котором она практически заслоняет одну из связей S = O фрагмента SO₂. При этом конформеры IV и V отличаются тем, что связь O—H в них направлена к разным атомам кислорода фрагмента SO₂. В принципе такую же пару образуют конформеры I и II, только в конформере I «ожидаемое» направление связи O—H к атому O группы SO₂ изменилось за счет возникшей водородной связи с атомом O группы NO₂.

Конформеру III также мог бы сопутствовать конформер, отличающийся от него направлением связи O—H. Однако попытка оптимизировать данную структуру привела к структуре изомера, являющегося зеркальным отражением конформера I. Отметим, что каждый из конформеров II—V также имеет свой зеркальный изомер.

В заключение следует отметить, что положение заместителя NO₂ относительно сульфокислотной группы оказывает определяющее влияние на число конформеров молекулы, которое увеличивается с одного — в *пара*-, двух — в *мета*- и пяти — в *орто*-положении. Основная черта *орто*-замещения проявляется в способности молекулы образовывать внутримолекулярную водородную связь между атомом кислорода заместителя и атомом H сульфокислотной группы.

УДК 544.18

Е. А. Лапыкина, Н. И. Гиричева

ВЫБОР БАЗИСА ДЛЯ РАСЧЕТА ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ МОЛЕКУЛ ТРИЙОДИДОВ ЛАНТАНОИДОВ

В настоящее время существуют серьезные проблемы воспроизведения экспериментальных значений геометрических параметров трийодидов лантаноидов. Электронографическим методом изучено строение десяти представителей серии LaI_3 — LuI_3 . В том числе шесть представителей PrI_3 , GdI_3 , TbI_3 , DyI_3 , HoI_3 , ErI_3 изучены нами. В литературе имеется наиболее полный обзор с результатами экспериментальных и теоретических исследований структуры молекул LnI_3 , выполненный А. Kovács и R. J. M. Konings [8]. В табл. 1 приведены температурно-усредненные значения расстояния $r_g(\text{Ln-I})$, полученные в электронографическом (ЭГ) эксперименте, и величины равновесных межъядерных расстояний $r_e(\text{Ln-I})$, рассчитанные разными квантово-химическими методами.

В работе [9] нами показано, что отличие между величинами $r_g(\text{Ln-I})$ и $r_e(\text{Ln-I})$ лежит в пределах от 0.002 до 0.0018 Å. Видно, что рассчитанные указанными в табл. 1 методами $r_e(\text{Ln-I})$ значительно (до 0.07 Å) превышают экспериментальные значения $r_g(\text{Ln-I})$. Данный факт свидетельствует о существенных недостатках использованных уровней расчетов.

Таблица 1

Температурно-усредненные значения расстояния $r_g(\text{Ln-I})$ и величины равновесных межъядерных расстояний $r_e(\text{Ln-I})$

LnI_3	Квантово-химический расчет			ЭГ
	метод	$r_e(\text{Ln-I})$	Наш расчет ^a $r_e(\text{Ln-I})$	$r_g(\text{Ln-I})$
Pr	MCSCF/ECPS, ECP _{Sd} [4]	2.980	2.912	2.916(6)
Gd	CISD+Q/ECPDF, ECP _{Dd} [5]	2.903	2.840	2.840(6)
	B3LYP/ECPS, ECP _{Sd} [2]	2.884		
	MCSCF/ECPS, ECP _{Sd} [4]	2.910		
	QC(BP-DS/TZ, TZd) [3]	2.868		
	QC(B3P/ECPS, ECP _{Sd}) [3]	2.887		
	QC(BP/ECPS, ECP _{Sd}) [4]	2.893		
	QC(PBE/ECPS, ECP _{Sd}) [10]	2.873		
	QC(PBE0/ECPD, ECP _{Dd}) [1]	2.870		
	QC(PBE0/ECPS, ECP _{Sd}) [1]	2.861		
Tb	MCSCF/ECPS, ECP _{Sd} [4]	2.890	2.826	2.823(6)
Dy	MCSCF/ECPS, ECP _{Sd} [4]	2.880	2.814	2.812(6)
	MP2/ECPD, ECP _{HWd3} [6]	2.878		
	QC(B3P/ECPD2fg, ECP _{Dd} 2df) [7]	2.835		
	B3P/ECPD, ECP _{Dd} [7]	2.849		
Ho	MCSCF/ECPS, ECP _{Sd} [4]	2.870	2.802	2.800(6)
Er	MCSCF/ECPS, ECP _{Sd} [4]	2.860	2.790	2.789(6)

© Лапыкина Е. А., Гиричева Н. И., 2010

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ № П2066.

2010. Вып. 2. Биология. Химия. Физика. Математика •

Примечание. ^a — ВЗLYP/ЕСP_D3f2g, Midix f ($f=0.22$).

Для определения приемлемого уровня расчетов нами было вычислено равновесное расстояние $r_e(\text{Ln-I})$ и частоты колебаний для молекулы PrI₃ в рамках D_{3h} симметрии (табл. 2). Были использованы три метода: HF, ВЗLYP и MP2, учитывающие электронную корреляцию. Для атома Pr были использованы эффективные остоновые потенциалы: ЕСР, включающие 4f-электроны в остов (предложенные Штутгартской группой), и CEP-121G, в котором 4f-электроны помещались в валентную область атома лантаноида. Для атома I использованы различные базисы, как включающие, так и не включающие поляризационные функции, как полноэлектронные, так и содержащие остоновый потенциал.

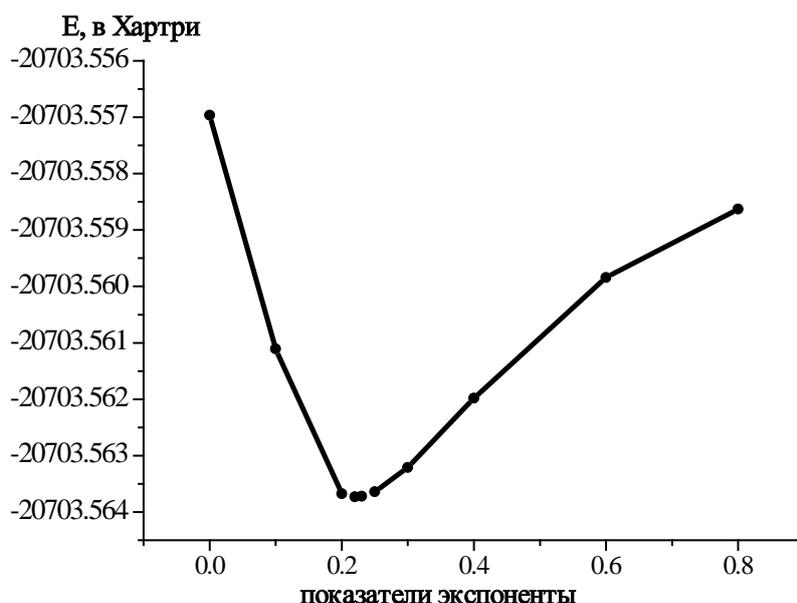
Таблица 2

Равновесное расстояние и частоты колебаний молекулы PrI₃

Pr	I		$r_e(\text{Pr-I}),$ Å	ν_1	ν_2	ν_3	ν_4
HF							
ЕСР	MIDIX	6s5p3d	3.028	132	27	194	31
CEP121	MIDIX	6s5p3d	2.986	132	26	193	33
MP2							
ЕСР	MIDIX	6s5p3d	2.989	134	19	201	28
CEP121	MIDIX	6s5p3d	2.948	134	28	194	28
ВЗLYP							
ЕСР	CEP-121G	2sp	2.993	130	12i	192	31
	aug-cc-pVTZ	6s5p4d2f	2.969	134	-7i	194	33
	LanL2DZ	2s2p	3.002	129	-10i	191	32
	SDDall	2s3p	2.999	129	-10i	191	31
	MIDIX	6s5p3d	2.981	134	-2i	198	30
	def2-TZVP	6s5p3d2f	2.968	133	-7i	193	33
	SDB-aug-cc-pVTZ	4s4p3d2f	2.967	134	-5i	194	33
	SDB-cc-pVTZ	3s3p2d1f	2.968	133	-7i	194	34
ЕСР3f2g	MIDIX	6s5p3d	2.925	143	5	209	33
	SDB-aug-cc-pVTZ	4s4p3d2f	2.958	135	8	194	33
	aug-cc-pVTZ	6s5p4d2f	2.959	135	7	195	34
CEP121	MIDIX	6s5p3d	2.948	134	28	195	29

Из табл. 2 видно, что разные уровни расчетов приводят к разбросу величин расстояния $r_e(\text{Pr-I})$ от 2.925 до 3.028 Å. Если частоты колебаний ν_1 , ν_3 и ν_4 в зависимости от метода и базиса меняются в пределах примерно 10 %, то значение частоты ν_2 , ответственной за структурную нежесткость, изменяется радикально, меняя вывод о симметрии равновесной конфигурации молекулы. Лучшее согласие с экспериментальным значением $r_e(\text{Pr-I})$ дает расчет ВЗLYP/ЕСР_D, MIDIX. Для атома Pr использованы последние разработки Штутгартской группы (базис ЕСР дополнен поляризационными функциями 3f2g), а для атома I — базис MIDIX.

Это сочетание «метод-базис» было использовано нами как старт для дальнейшего совершенствования базиса MIDIX атома I. Мы добавили еще одну поляризационную функцию f , значение экспоненты которой было оп-



ределено в результате численного эксперимента (см. рис.). На рисунке, минимуму энергии соответствует показатель экспоненты, равный 0,22.

Определение значения экспоненты
поляризационной f функции базиса MIDIX на атоме I

Найденный базис MIDIX f атома йода I в сочетании с большим основным потенциалом $[Kr4d104f^4]$ с базисным набором $[5s4p3d]$, расширенным поляризационными функциями $3f2g$, был использован для расчета равновесного расстояния $r_e(Ln-I)$ молекул PtI_3 , GdI_3 , TbI_3 , DyI_3 , HoI_3 , ErI_3 (табл. 1). Из табл. 1 видно, что подобранное сочетание «метод-базис» позволяет хорошо воспроизвести экспериментальное межъядерное расстояние Ln-I.

Библиографический список

1. Adamo C., Barone V. // J. Comput. Chem. 2000. 21. 1153.
2. Adamo C., Maldivi P. // Chem. Phys. Lett. 1997. 268. 61.
3. Adamo C., Maldivi P. // J. Phys. Chem. 1998. A 102. 6812.
4. Cundari T. R., Sommerer S. O., Strohecker L. A., Tippett L. // J. Chem. Phys. 1995. 103. 7058.
5. Dolg M., Stoll H., Preuss H. // J. Mol. Struct. (Theochem). 1991. 235. 67.
6. Kovács A. // J. Mol. Struct. 1999. 482/483. 403.
7. Kovács A. // Chem. Phys. Lett. 2000. 319. 238. Показатели экспоненты
8. Kovács A., Konings R. J. M. // J. Phys. Chem. 2004. Vol. 33. 404.
9. Shlykov S. A., Giricheva N. I., Lapykina E. A., Girichev G. V., Oberhammer H. // J. Mol. Struct. (in press).
10. Vetere V., Adamo C., Maldivi P. // Chem. Phys. Lett. 2000. 325. 99.

УДК 538.975

А. В. Казак, Н. В. Усольцева, В. В. Быкова,
А. С. Семейкин, С. Г. Юдин

СТРУКТУРА ПЛАВАЮЩИХ СЛОЕВ МЕЗОЗАМЕЩЕННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ПОРФИНА

Тонкие пленки, в том числе полученные по методу Ленгмюра—Блоджетт, представляют огромный интерес для науки и промышленности [1, 3]. На основе тонких пленок строят эффективные сенсорные системы, они также используются с большим успехом в радиоэлектронике. В настоящее время одним из классов органических соединений, перспективных для создания сенсорных систем, являются производные порфина. Поэтому в настоящей работе исследовалось влияние молекулярной структуры мезо-замещенных производных порфирина на их мезоморфизм и надмолекулярную организацию в плавающих слоях.

С этой целью было исследовано 2 новых соединения с мезо-замещением в молекуле (рис. 1). Их синтез осуществлялся по методу, описанному ранее [2].

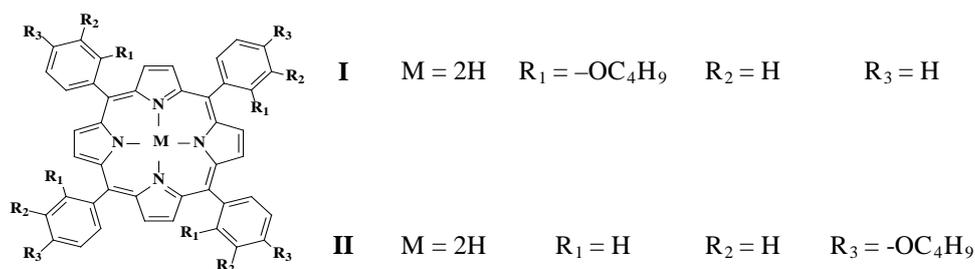


Рис. 1. Химическая структура соединений I — II

Фазовое состояние соединений исследовали методом поляризационной микроскопии, используя оптический термополяризационный микроскоп типа «Leitz Laborlux 12 Pol», снабженный термостолком «Mettler FP 82».

Построение модели молекул соединений I ($R_1 = -OC_4H_9$), II ($R_3 = -OC_4H_9$) и расчет их геометрических характеристик (табл. 1) выполнены в программе HyperChem версия 7.5 (метод расчетов MM+).

Таблица 1

Геометрические характеристики молекул исследуемых соединений

Соединение	Расположение молекул в слое	Площадь тени, nm^2	Площадь в плотнейшей упаковке, nm^2
I	face-on	1,52	1,88
	edge-on	1,09	1,06
II	face-on	2,00	3,38
	edge-on	1,00	0,96

© Казак А. В., Усольцева Н. В., Быкова В. В., Семейкин А. С., Юдин С. Г., 2010

• Серия «Естественные, общественные науки»

Ленгмюровские слои формировали из растворов соединения **I** ($C = 0,0245 \%$) и **II** ($C = 0,0445 \%$) в хлороформе на установке фирмы ФГУП «ГНЦ «НИОПИК» (Москва) при исходных степенях покрытия поверхности $c = 19, 24, 30, 37, 45, 50, 63 \%$ и $c = 45, 49, 59, 66, 74, 83 \%$ соответственно. Скорость сжатия слоя составляла $55 \text{ см}^2/\text{мин}$.

Количественный анализ изотерм сжатия выполнен на основе подхода с использованием πA - π графиков. Каждый линейный участок соответствует стабильному состоянию слоя с площадью, приходящейся на молекулу (A_{mol}), равной тангенсу угла наклона этого линейного участка. Структуру слоя характеризовали углом наклона молекул в стеке относительно границы раздела воздух — вода (ψ).

Исследование объемных образцов позволило установить, что алкокси-замещенный лиганд тетрафенилпорфирина **I** (с замещением в *орто*позиции фенильных колец, рис. 1) проявляет мезоморфные свойства (табл. 2). Такое поведение нетипично для родственных аналогов фталоцианина. Возможно, короткий периферический заместитель оптимально упаковывается в свободном пространстве между фенильными фрагментами, одновременно создавая предпосылки для хорошей микросегрегации надмолекулярного ансамбля.

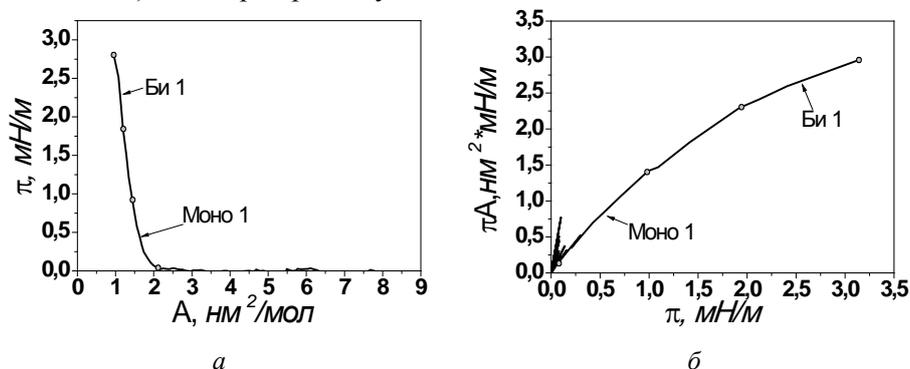
Перенос заместителя в *пара*положение (соединение **II**) приводит к исчезновению мезофазы (табл. 2) [4].

Таблица 2

Температура фазовых переходов лигандов порфирина **I** и **II**

№ соединения	Термотропный мезоморфизм	Лиотропный мезоморфизм
I	Cr • 237,7 °C Iso (Iso • 176,8 °C Mes • 60,2 °C G) стеклется с сохранением текстуры мезофазы	—
II	Cr • 283,8 °C Iso	—

Надмолекулярная организация в тонких пленках соединений **I** и **II** была изучена методом Ленгмюра—Блоджетт. Анализ изотерм сжатия ленгмюровских слоев исследуемых производных порфиринов позволяет выделить на соответствующих πA - π графиках несколько линейных участков, соответствующих стабильному состоянию слоя (рис. 2, *a*, *б*): значение площади, приходящейся на молекулу (A_{mol}), и область давлений (границы указаны на графике точками), в которой реализуется данное состояние.

Рис. 2. π - A изотерма (*a*) и πA - π график (*б*) соединения **I** ($c = 19 \%$)

Характеристики слоев исследуемых соединений для всех анализируемых степеней покрытия поверхности представлены в табл. 3.

Таблица 3

Характеристики плавающих слоев исследуемых соединений

Соединение	c_{face} , %	$\pi_i - \pi_f$, мН/м	A_{mol} , нм ²	Состояние слоя	ψ , град
I	19	0,06 — 0,99	1,39	Моно 1	50
		1,92 — 3,16	0,54	Би 1	79
	24	0,02 — 0,44	0,96	Би 1	34
	30	0,04 — 0,70	0,82	Би 1	40
	37	0,1 — 1,16	0,77	Би 1	44
		2,18 — 3,5	0,40	Поли	—
	45	0 — 1,03	0,68	Би 1	51
		1,79 — 3,04	0,36	Поли	—
	50	0 — 1,15	0,66	Би 1	53
		2,14 — 3,24	0,33	Поли	—
	63	0 — 1,23	0,66	Би 1	53
		3,04 — 4,75	0,19	Поли	—
II	45	0,14 — 0,48	0,65	Би 1	48
	49	0,02 — 0,54	0,62	Би 1	51
	59	0,06 — 0,66	0,61	Би 1	52
	66	0 — 0,81	0,61	Би 1	52
	74	0,04 — 1,6	0,52	Би 1	67
	83	0,08 — 3,03	0,48	Би 1	90

Примечание. ψ — угол наклона молекул в слое; c_{face} — степень покрытия поверхности при face-on расположении молекул; $\pi_i - \pi_f$ — область давлений, в которой существует стабильное состояние, мН/м; A_{mol} — площадь, приходящаяся на одну молекулу, нм².

У мезо-алкилоксизамещенного тетрафенилпорфина I с заместителем в ортопозиции во всех стабильных состояниях A_{mol} не превышает (даже в области малых давлений при $c = 19\%$) площадь, приходящуюся на молекулу в плотнейшей упаковке, соответствующей face-on расположению молекул (табл. 3). Следовательно, структура с face-on расположением молекул в исследованном диапазоне исходных поверхностных концентраций не реализуется.

Сравнение A_{mol} с A_{edge} в плотнейшей упаковке данного соединения (табл. 1) показывает, что при исследуемых исходных степенях покрытия поверхности в области приведенных давлений (табл. 3) только при $c = 19\%$ формируется стабильный монослой. Увеличение поверхностного давления (начальной степени покрытия 19%) сопровождается переходом монослоя, молекулы в котором, согласно нашим расчетам, располагаются под углом к поверхности $\psi = 50^\circ$, в бислои ($\psi = 79^\circ$), а в области более высоких c — переходом бислоев в полислои.

Мезо-алкилоксизамещенный тетрафенилпорфин II в плавающих слоях склонен к 3D агрегации. Однородные слои начинают формироваться только при начальной степени покрытия поверхности 45%.

Во всех стабильных состояниях A_{mol} не превышает (даже в области малых давлений при $c = 45\%$) площадь, приходящуюся на молекулу в плотнейшей упаковке, соответствующей *edge-on* расположению молекул (табл. 3). Следовательно, монослоевые структуры не образуют исследуемое соединение.

Сравнение A_{mol} с A_{edge} в плотнейшей упаковке соединения **I** (табл. 1) показывает, что в области приведенных давлений (табл. 3) при исследуемых c формируются только бислои. Повышение начальной степени покрытия поверхности сопровождается увеличением угла наклона молекул относительно раздела фаз вода — воздух от $\psi = 48^\circ$ ($c = 45\%$) до $\psi = 90^\circ$ ($c = 83\%$).

Итак, *мезо*-алкилоксизамещенный тетрафенилпорфин с заместителем в *орто*позиции (соединение **I**) формирует однородные стабильные слои уже при начальной степени покрытия поверхности 19% и менее склонен к 3D агрегации, чем *мезо*-алкилоксизамещенный тетрафенилпорфин с заместителем в *пара*позиции (соединение **II**). Последний образует стабильные слои только начиная с $c = 45\%$. Более того, при начальной поверхностной концентрации 19% соединение **I** образует монослой с наклоном молекул относительно раздела фаз вода — воздух $\psi = 50^\circ$.

В области более высоких начальных степеней покрытия поверхности оба соединения формируют стеки, молекулы в которых располагаются под близкими углами к поверхности: при $c = 45\%$ $\psi = 51^\circ$ и $\psi = 48^\circ$ для соединений **I** и **II** соответственно.

Заключение

Изучено 2 новых *мезо*замещенных лигандов тетрафенилпорфиринов с замещением в алкоксигруппах ($-\text{OC}_4\text{H}_9$) в *пара*- и *орто*позициях фенильных колец. Установлено, что *мезо*-алкилоксизамещенный тетрафенилпорфин с заместителем ($-\text{OC}_4\text{H}_9$) в *орто*позиции (соединение **I**) проявляет термотропный мезоморфизм, тогда как перенос заместителя в *пара*положение приводит к исчезновению мезофазы (соединение **II**).

Показано также, что *орто*-алкилоксизамещенный тетрафенилпорфин (соединение **I**) формирует однородные стабильные слои уже при начальной степени покрытия поверхности 19% и менее склонен к 3D агрегации, чем *мезо*-алкилоксизамещенный тетрафенилпорфин с заместителем ($-\text{OC}_4\text{H}_9$) в *пара*позиции (соединение **II**).

Библиографический список

1. Блинов Л. М. Ленгмюровские пленки // УФН. 1988. Т. 155, вып. 3. С. 443—480.
2. Быкова В. В., Усольцева Н. В., Семейкин А. С. и др. Синтез и мезоморфные свойства *мезо*-алкилоксизамещенных тетрафенилпорфина // Жидкие кристаллы и их практическое использование. 2007. Вып. 4. С. 67—74.
3. Ковальчук М. В. Органические наноматериалы, наноструктуры и нанодиагностика // Вестн. рос. акад. наук. 2003. Т. 73, № 5. С. 405.
4. Усольцева Н. В., Быкова В. В., Ананьева Г. А., Александров А. И., Пашкова Т. В., Казак А. В., Семейкин А. С., Глазунов А. В., Любимова Т. В., Юдин С. Г., Палто С. П. Мезоморфизм *мезо*-тетразамещенных тетрафенилпорфиринов и их металлокомплексов // Жидкие кристаллы и их практическое использование. 2009. Вып. 4 (30). С. 37—46.

УДК 539.27:547.541.513

В. М. Петров, В. Н. Петрова, С. Н. Иванов

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛЫ 2-НАФТАЛИНСУЛЬФОНИЛХЛОРИДА

Монозамещенные α - и β -нафталинсульфонилхлориды используются в качестве полупродуктов в синтезе биологически активных веществ, средств защиты растений, для получения промежуточных продуктов и красителей, ряда других ценных производных нафталинсульфокислот (амидов, анилидов, эфиров, сульфонов и пр.) [1—3].

Структура нафталинсульфонилгалогенидов до настоящего времени не исследовалась ни в твердой, ни в жидкой фазе. Для молекулы β -нафталинсульфонил-хлорида ($2\text{-C}_{10}\text{H}_7\text{-SO}_2\text{Cl}$) при температуре 395(5) К выполнен синхронный электронографический и масс-спектрометрический эксперимент.

Зарегистрированный масс-спектр свидетельствует, что все ионы (табл. 1) образуются из одной молекулярной формы ($\text{C}_{10}\text{H}_7\text{-SO}_2\text{Cl}$), а также об отсутствии как процесса термического разложения, так и летучих примесей в газовой фазе.

Поскольку наиболее вероятным процессом при диссоциативной ионизации методом электронного удара является разрыв связи S—Cl, самым интенсивным в масс-спектре $2\text{-C}_{10}\text{H}_7\text{-SO}_2\text{Cl}$ оказался ион с массовым числом $m/e=191$ а.е.м. ($\text{C}_{10}\text{H}_7\text{SO}_2^+$). Относительная интенсивность молекулярных ионов ($\text{C}_{10}\text{H}_7\text{SO}_2^{35}\text{Cl}^+$) также достаточно высока (I отн. (%) = 84.5 %).

Методом газовой электронографии с использованием квантово-химических расчетов высокого уровня B3LYP/6-311+G**, B3LYP/cc-pVTZ, medix(Cl) и MP2/cc-pVTZ изучено строение (табл. 2) молекулы 2-нафталинсульфонилхлорида. Установлено, что молекула $2\text{-C}_{10}\text{H}_7\text{SO}_2\text{Cl}$ имеет два конформера. Торсионный угол $\text{C}_1\text{-C}_5\text{-S-Cl}$, характеризующий положение связи S—Cl относительно плоскости нафталинового кольца в конформере I, равен $111.1(55)^\circ$. Связь S—Cl заметно отклонена от плоскости, перпендикулярной плоскости нафталиновых колец (рис. 1) по направлению к β -атому углерода, находящемуся в положении 3. При этом атом серы несколько выходит из плоскости нафталиновых колец (угол SCCC равен 1.1°). Связь C—S отклоняется от биссекторного расположения по отношению к углу C—C—C на 4.3° . Электроноакцепторный заместитель (группа SO_2Cl) увеличивает угол при атоме углерода от 120 до $123.5(3)^\circ$.

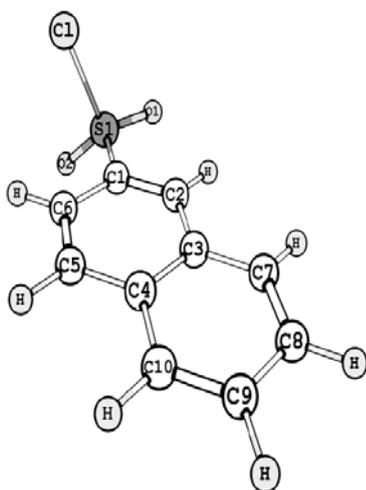


Рис. 1. Модель молекулы $2\text{-C}_{10}\text{H}_7\text{-SO}_2\text{Cl}$ с указанием нумерации атомов

© Петров В. М., Петрова В. Н., Иванов С. Н., 2010

Работа выполнена при поддержке РФФИ-DFG (грант 09-03-91341-ННИО_а).

• Серия «Естественные, общественные науки»

конформере II торсионный угол C₁-C_S-S-Cl равен 0.0°, при этом связь S—Cl лежит в плоскости бензольного кольца и направлена в сторону α-атома углерода.

Таблица 1

Масс-спектр насыщенных паров 2-C₁₀H₇SO₂Cl (T = 395(5) К, E_{ион.} = 50 эВ)

2-C ₁₀ H ₇ SO ₂ Cl			2-C ₁₀ H ₇ SO ₂ Cl		
m/e	формула иона	I отн.(%)	m/e	формула иона	I отн.(%)
228	C ₁₀ H ₇ SO ₂ ³⁷ Cl ⁺	22.4	127	C ₁₀ H ₇ ⁺	65
226	C ₁₀ H ₇ SO ₂ ³⁵ Cl ⁺	84.5	126	C ₁₀ H ₆ ⁺	8.6
191	C ₁₀ H ₇ SO ₂ ⁺	100	114	C ₉ H ₆ ⁺	7
159	C ₆ H ₃ SO ₂ ³⁷ Cl ⁺	24	100	C ₈ H ₄ ⁺	5
157	C ₆ H ₃ SO ₂ ³⁵ Cl ⁺	93	78	CSO ₂ ⁺	6.3
155	C ₆ H ₃ SO ₂ ³³ Cl ⁺	31	64	SO ₂ ⁺	8
128	¹³ C ¹² C ₉ H ₇ ⁺	36.2	48	SO ⁺	5.7

Таблица 2

Экспериментальные и рассчитанные структурные параметры молекулы 2-C₁₀H₇-SO₂Cl (расстояния в Å, углы в град., R_f = 4.41 %)

Параметры	ЭГ r _{h1} -структура конф. I	B3LYP/ 6-311+G** r _e -структура	B3LYP/ cc-pVTZ, me- dix(Cl) r _e -структура	MP2/ cc-pVTZ r _e -структура
C-H	1.085(6) ^a	1.084	1.082	1.082
C1-C2	1.379(3)	1.373	1.367	1.376
C2-C3	1.426(3)	1.417	1.415	1.412
C3-C4	1.439(3)	1.432	1.428	1.431
C4-C5	1.431(3)	1.421	1.419	1.416
C5-C6	1.378(3)	1.371	1.366	1.375
C1-C6	1.423(3)	1.414	1.411	1.409
C3-C7	1.427(3)	1.419	1.415	1.414
C7-C8	1.382(3)	1.374	1.370	1.377
C8-C9	1.422(3)	1.415	1.411	1.411
C9-C10	1.383(3)	1.375	1.371	1.377
C4-C10	1.426(3)	1.418	1.414	1.413
(C-C) _{cp.}	1.411(3)	1.403	1.399	1.400
C-S	1.753(5)	1.786	1.775	1.762
S-Cl	2.053(5)	2.147	2.070	2.076
S=O	1.418(4)	1.452	1.443	1.441
C2-C1-C6	123.5(3)	122.9	122.6	123.2
C1-S-Cl	102.9(12)	100.9	100.4	99.6
C1-S-O1	110.5(6)	110.0	110.4	110.1
C1-S-O2	109.8(6)	109.7	109.6	109.7
O1-S-Cl	107.8(3)	106.0	107.1	106.4
O2-S-Cl	106.2(3)	105.8	105.6	106.1
C2-C1-S-Cl	111.1(55)	96.1	117.5	98.0
R _f	4.41			

Примечание. ^a — погрешности в межъядерных расстояниях рассчитаны по формуле $[(2.5\sigma_{LS})^2 + (0.002 \cdot r)^2]^{0.5}$, погрешности в углах приняты равными $3\sigma_{\text{мнк}}$.

Рассчитанные методом B3LYP/cc-pvtz, medix(Cl) барьеры внутреннего вращения (рис. 2) сульфонилхлоридной группы составили $V_{01} = 1.88$ ккал/моль и $V_{02} = 1.44$ ккал/моль. Несколько большая величина барьера внутреннего вращения соответствует прохождению связи S—Cl через плоскость бензольного кольца вблизи β -атома углерода. Ожидаемое содержание конформеров I и II в газовой фазе, полученное с учетом расчетных величин энергии Гиббса, составляет 83 и 17 % соответственно.

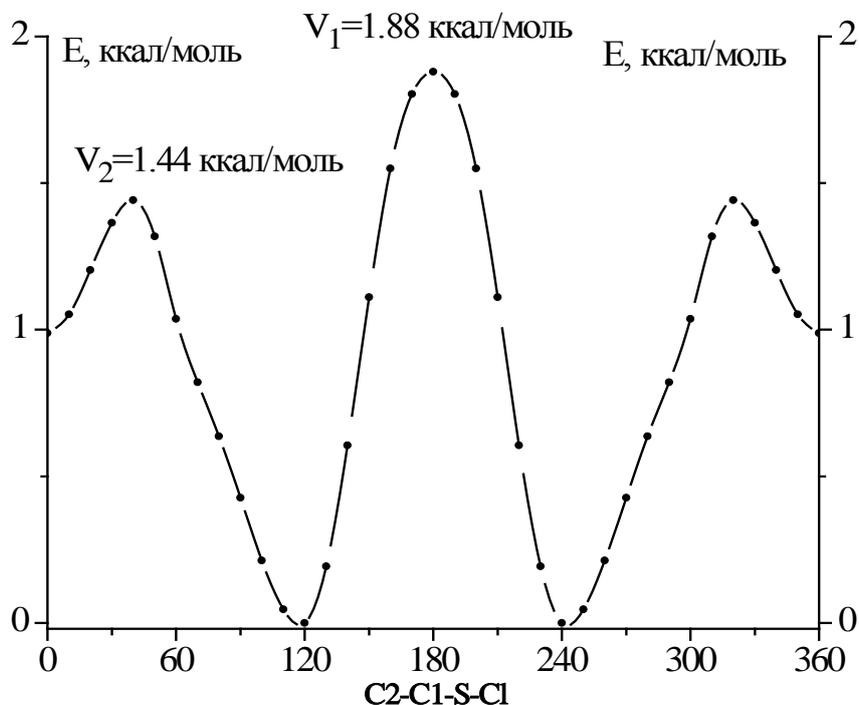


Рис. 2. Потенциальная функция внутреннего вращения группы SO_2Cl для молекулы $2\text{-C}_{10}\text{H}_7\text{-SO}_2\text{Cl}$

Сопоставление расчетных структурных параметров с экспериментальными (табл. 2) показывает, что при использовании метода B3LYP/cc-pvtz, medix(Cl) удается получить хорошее согласие для всех длин связей, за исключением содержащих атом серы. При этом расчетные величины S—X оказываются завышенными на 0.02—0.03 Å.

Библиографический список

1. Донольдсон Н. Химия и технология соединений нафталинового ряда. М.: Госхимиздат, 1963. 656 с.
2. Сьютер Ч. Химия органических соединений серы. М.: ИНЛИТ, 1951. Ч. 2. 440 с.
3. Общая органическая химия / под ред. Д. Бартона, У. Оллиса. М.: Химия, 1983. Т. 5. 548 с.

УДК 547.53:547.525.5:544.183.25

Е. Н. Крылов

**СООТНОШЕНИЕ МЕЖДУ ЗАРЯДАМИ НА АТОМАХ
ЗАМЕЩЕННЫХ БЕНЗОЛА И КОНСТАНТАМИ
ЗАМЕСТИТЕЛЕЙ ПО ГАММЕТУ И ГАММЕТУ — БРАУНУ**

Проблема взаимосвязи констант заместителей в квантовохимических параметрах исследовалась неоднократно. Известна, например, линейная корреляция между индукционными константами Тафта σ^* и граничной электронной плотностью [7]. Для *para*-дизамещенных бензола этот вопрос рассмотрен в работе [5] и ряде других работ этих авторов. Показано, что константы заместителей линейно связаны с условными зарядами (по Слейтеру) и зарядами, определенными по векторной схеме и дипольным моментам связей [3]. Обнаружено, однако, что при прямом электрохимическом определении σ -констант Гаммета регистрируется их изменение при изменении температуры, причем для *meta*- σ -константы метила оно достигает величин от -0.016 при $25\text{ }^\circ\text{C}$ до 0.06 при $50\text{ }^\circ\text{C}$ [19].

Данные по величинам *ortho*- σ -констант заместителей в достаточной степени противоречивы и несогласованны. Так, по данным Ола [18], $\sigma(\textit{ortho})^+$ константа для F равна 0.31 , а по данным Коптюга и Бураева [1] — всего 0.06 . Для MeO- и Me-группы эти величины равны соответственно -0.59 и -0.10 , а для F, Cl, Br и CF_3 — соответственно 0.19 , 0.26 , 0.29 и 0.69 [15].

Соотношение между реакционной способностью органических соединений и зарядами далеко не всегда удается обнаружить, поскольку заряды на атомах представляют собой статический индекс реакционной способности, а такие индексы не вполне пригодны для оценки активности органических соединений [8]. Известно, что схема Малликена для расчета эффективных зарядов подходит плохо, как это показано на примере расчета функций Фукуи [20], поскольку достаточно часто расчет зарядов по этой схеме приводит к появлению отрицательных значений этих функций, что противоречит физическому смыслу этого параметра, да и сами величины зарядов существенно зависят от уровня метода и размера базиса. В частности, суммарный заряд на нитрогруппе, а также заряд на атомах водорода в замещенных нитробензолах определяется электронным эффектом заместителей, что было показано с использованием метода AM1 [4], однако зависимость между зарядами на атомах углерода и σ -константами Гаммета не обнаруживается.

Анализ соотношений между зарядами, определенными в различных схемах расчета заселенности — Малликена, NBO, Хиршфельда, AIM и VDD (плотность деформационной энергии, основанная на теории атомных ячеек Вороного) [12] показывает, что заряды по Малликену слишком зависят от уровня теории и размера базисного набора, заряды по Бадеру (иногда NBO) не всегда реалистичны, приводя к завышению степени ионности связей. Наиболее химически приемлемыми величинами зарядов, по мнению авторов [12], — представляются заряды, определенные в схемах Хиршфельда [13] и VDD [12]. Именно эта схема использована [14] для расчета зарядов и через них функций Фукуи как дескрипторов реакционной способности при нуклео-

фильной атаке [10]. Кроме этих схем, однако, существуют способы определения зарядов, основанные на расчете электростатического потенциала — в частности ChelpG и метод Мерца — Коулмена (МК) [16], которые также имеют ряд достоинств [22]. Вполне вероятно, что изменение уровня теории и базиса позволит преодолеть некоторые указанные затруднения.

Для определения атомных зарядов, основных на схеме NBO и электростатическом потенциале в монозамещенных бензола XPh и 4-замещенных нитробензолов 4-XPhNO₂, использован программный комплекс PC FireFly v. 7.1.G [11] (как модификация GAMESS US QC [21]). Расчет структур молекул проведен при полной оптимизации геометрии без ограничений по типу симметрии и контроле стационарной точки минимума расчетом колебательного спектра на уровне теории B3LYP/6-311G**. Заряды на атомах определены в рамках теории NBO и методами ChelpG и МК, основанными на теории электростатического потенциала [9]. Анализ результатов показывает (табл. 1), что введение заместителя практически не сказывается на величине NBO-заряда на атомах азота и кислорода нитрогруппы, а суммарный NBO-заряд на нитрогруппе коррелирован на *пара*-σ-константу Гаммета ($R = 0.934$), что соответствует картине, обнаруженной методом AM1 [4] с коэффициентом корреляции 0.895. В то же время для корреляции суммарного заряда на нитрогруппе (DFT B3LYP/6-311G**/NBO) и *мета*-σ-константами (табл. 2) соответствие существенно хуже ($R = 0.701$). Необходимо отметить, что расчет зарядов для *мет*аположений имеет существенно меньшее изменение заряда по выборке — всего 8.5 %, что может быть одной из причин наблюдаемого явления.

Таблица 1

Заряды на атомах *пара*-дизамещенных X-Ph-NO₂, B3LYP/6-311G** (NBO).
Относительное изменение заряда по выборке 16.2 %

X	Q(N)	Q(O1)	Q(O2)	Q(C1)	Q(C2)	Q(C3)	Q(C4)	Q(C5)	Q(C6)	Σ(QNO ₂)
H	0.516	-0.383	-0.383	0.062	-0.184	-0.191	-0.170	-0.191	-0.184	-0.250
Me	0.515	-0.386	-0.386	0.054	-0.174	-0.200	0.018	-0.200	-0.174	-0.257
Et	0,515	-0,386	-0,386	0,055	-0,174	-0,201	0,018	-0,201	-0,174	-0.257
MeO	0.154	-0.394	-0.392	0.033	-0.158	-0.292	0.360	-0.236	-0.168	-0.272
EtO	0.511	-0.395	-0.393	0.028	-0.202	-0.323	0.354	-0.275	-0.193	-0.277
CF₃	0.516	-0.374	-0.374	0.075	-0.176	-0.170	-0.125	-0.170	-0.176	-0.232
F	0.516	-0.383	-0.383	0.045	-0.165	-0.264	0.456	-0.264	-0.165	-0.250
Cl	0.515	-0.380	-0.380	0.057	-0.167	-0.220	0.001	-0.220	-0.167	-0.245
Br	0.515	-0.380	-0.380	0.059	-0.167	-0.220	-0.066	-0.220	-0.167	-0.245
t-Bu	0.515	-0.387	-0.387	0.056	-0.171	-0.205	0.014	-0.198	-0.176	-0.259
OH	0,514	-0.393	-0.391	0.032	-0.060	-0.283	0.367	-0.249	-0.162	-0.271
Ph	0.514	-0.386	-0.386	0.059	-0.176	-0.186	-0.011	-0.186	-0.176	-0.258
CH₂Cl	0.515	-0.380	-0.380	0.068	-0.175	-0.179	-0.037	-0.179	-0.175	-0.245

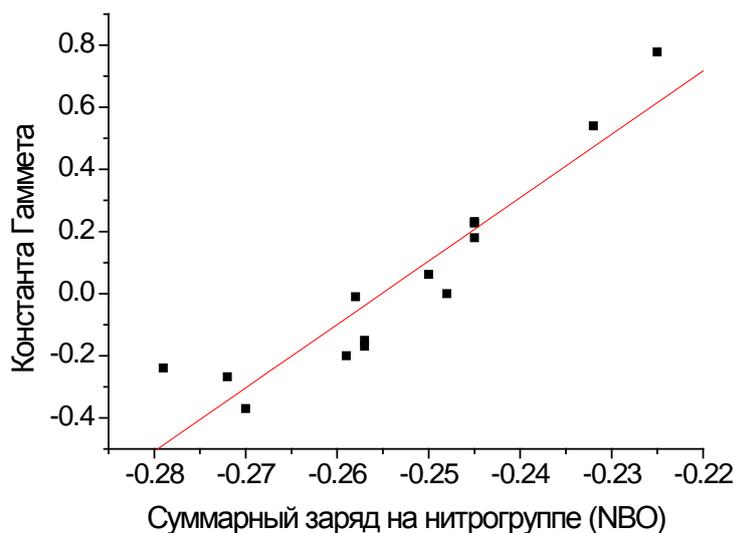


Рис. 1. Корреляция суммарного заряда на нитрогруппе (NBO) и *para*- σ -констант заместителей в *para*-X-Ph-NO₂ (R = 0.934)

По всей видимости, далеко не всегда между зарядами, определенными различными методами и на разных уровнях теории, наблюдается согласованность в изменении. В частности, корреляция между величинами зарядов на атомах 4-цианодифенилоксида, взятого в качестве модельного соединения, определенных методами PM3 [6] и B3LYP/6-311G** (NBO), имеет невысокое качество (рис. 2), поскольку коэффициент корреляции весьма мал и не выдерживает проверку на значимость. Коэффициенты в уравнении (1) имеют высокий вероятный разброс, для свободного коэффициента совпадающий с его величиной, что указывает на незначимость последнего, а угловой коэффициент имеет погрешность около 50 %. Следовательно, изменения зарядов при переходе от схемы Малликена к схеме NBO в данном случае несистематичны.

Таблица 2

Заряды на атомах *meta*-дизамещенных X-Ph-NO₂, B3LYP/6-311G** (NBO).
Относительное изменение заряда по выборке 8.5 %

X	Q(N)	Q(O1)	Q(O2)	Q(C1)	Q(C2)	Q(C3)	Q(C4)	Q(C5)	Q(C6)	$\Sigma(QNO_2)$
Me	0.516	-0.385	-0.383	0.072	-0.196	-0.005	-0.176	-0.183	-0.192	-0.252
Et	0.516	-0.385	-0.383	0.072	-0.195	-0.005	-0.178	-0.184	-0.192	-0.252
CF ₃	0.516	-0.374	-0.376	0.070	-0.167	-0.143	-0.150	-0.182	-0.169	-0.234
CH ₂ Cl	0.516	-0.384	-0.378	0.074	-0.190	-0.045	-0.176	-0.177	-0.187	-0.246
OH	0.516	-0.388	-0.378	0.083	-0.280	0.346	-0.226	-0.172	-0.216	-0.250
MeO	0.516	-0.389	-0.380	0.084	-0.291	0.339	-0.213	-0.177	-0.214	-0.253
EtO	0.516	-0.389	-0.381	0.084	-0.290	0.343	-0.213	-0.177	-0.214	-0.254
Ph	0.517	-0.386	-0.381	0.072	-0.176	-0.032	-0.158	-0.183	-0.188	-0.250
F	0.516	-0.377	-0.377	0.080	-0.260	0.437	-0.243	-0.173	-0.203	-0.238
Cl	0.516	-0.376	-0.376	0.079	-0.217	-0.015	-0.200	-0.147	-0.190	-0.236
NO ₂	0.515	-0.386	-0.373	0.058	-0.191	0.058	-0.186	-0.223	-0.186	-0.244

$$Q(\text{NBO}) = -(0.06 \pm 0.07) + (1.35 \pm 0.62) * Q(\text{PM3}) \quad (1)$$

Достаточно удачным можно считать результат расчета монозамещенных бензола XPh на уровне теории DFT методом B3LYP/6-311G** (NBO), поскольку он позволяет обнаружить корреляцию между расчетными зарядами на атомах углерода в *пара*-положениях этих соединений и *пара*- σ -константами Гаммета с коэффициентом корреляции 0.949, электрофильными σ^+ -константами (0.967) и резонансными $\sigma(R)$ -константами (0.975) (табл. 3). В то же самое время корреляции соответствующих констант и зарядов в *мета*-положениях имеют крайне низкое качество (коэффициенты корреляции около 0.21). Причины такого расхождения на данной стадии исследования пока не выяснены. Известно однако, что в ядернозамещенных ароматических бо-разинах корреляция по Гаммету наблюдается лишь для *пара*-положения [17] и для π -электронной плотности.

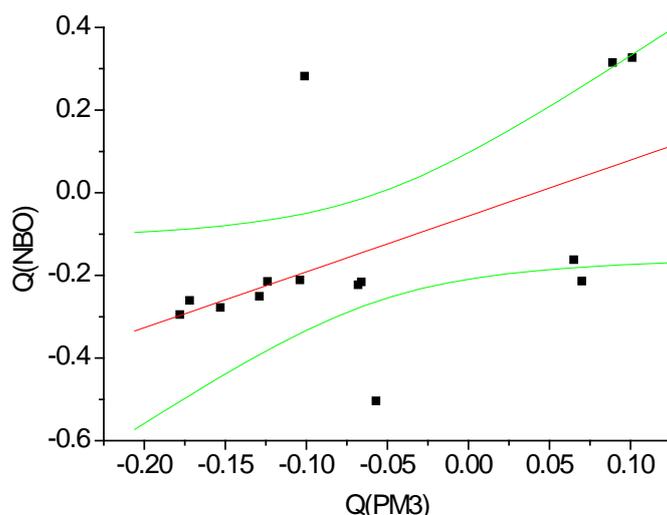


Рис. 2. Корреляция зарядов на атомах в молекуле 4-цианодифенилоксида, определенных методами PM3 и B3LYP/6-311G** (NBO) (показан 95%-й доверительный интервал)

Таблица 3

Расчетные величины зарядов на атомах углерода в монозамещенных бензола X-Ph (расчет B3LYP/6-311G** (NBO))

X	Qi	Qo	Qm	Qp	$\sigma(m-)$	$\sigma(p-)$	$\sigma(p-)^+$	$\sigma(R)$
NH ₂	0.190	-0.26	-0.178	-0.254	-0.16	-0.66	-1.30	-0.75
H	-0.200	-0.200	-0.200	-0.200	0.00	0.00	0.00	0.00
CN	-0.174	-0.149	-0.194	-0.176	0.56	0.66	0.674	0.15
Br	-0.079	-0.229	-0.182	-0.203	0.391	0.232	0.150	-0.239
NMe ₂	0.188	-0.267	-0.178	-0.274	-0.211	-0.84	-1.70	-0.944
Ph	-0.044	-0.191	-0.192	-0.201	0.06	-0.01	-0.179	-0.105
OMe	0.33	-0.272	-0.180	-0.233	0.115	-0.268	-0.778	-0.575
NO ₂	0.062	0.183	-0.191	-0.170	0.71	0.778	0.79	0.102
Me	-0.015	-0.207	-0.191	-0.209	-0.069	-0.17	-0.311	-0.152
F	0.430	-0.274	-0.181	-0.220	0.377	0.062	-0.073	-0.413
Cl	-0.014	-0.230	-0.182	-0.204	0.373	0.227	0.114	-0.219
R*					-0.208	0.949	0.967	0.974

* R — коэффициент корреляции зарядов на соответствующие σ -константы.

При переходе к схемам расчета зарядов, основанных на электростатическом потенциале (СHelpG, МК), можно показать, что для первой схемы заряды на атоме азота нитрогруппы в соединениях XPhNO₂ относительно малочувствительны к изменению заместителей в широком диапазоне изменения их электронных эффектов (табл. 4).

Исключение составляет этоксигруппа, имеющая сильный эффект сопряжения и вступающая в прямой полярный резонанс с нитрогруппой [2], которая по этой причине из указанных ниже корреляций выпадает. Кроме того, обращает на себя внимание заметная разница между зарядами, определенными по указанным двум схемам. Соотношение между этими зарядами плохо описывается линейной зависимостью ($R = 0.544$, $SD = 0.036$), что согласуется с выводом, сделанным выше.

Схема Мерца—Коулмена, напротив, обнаруживает такую чувствительность. Однако корреляции зарядов, определенные методами СHelpG и МК, на σ -константы заместителей по Гаммету неудовлетворительны, за исключением соотношения между $Q(\text{NO}_2)(\text{СHelpG})$ и величинами $\sigma(\text{п-})$, но и эта зависимость имеет корреляционные параметры невысокого качества ($R = 0.793$, $SD = 0.215$, $A = 6.85 \pm 1.65$, $B = 19.01 \pm 4.64$). Сходные параметры имеет зависимость между зарядами на атоме углерода в *пара*положении монозамещенных бензола и $\sigma(\text{R})$ -константами заместителей (по табл. 3): $R = 0.756$, $SD = 0.02$, $A = -0.09 \pm 0.08$, $B = 0.06 \pm 0.02$ (рис. 3). Корреляция между зарядами на атоме азота, определенными методом СHelpG и МК, неудовлетворительна ($R = 0.544$).

Таблица 4

Заряды на атомах азота Q(N) и суммарный заряд на нитрогруппе Q(NO₂) в XPhNO₂. Схемы СHelpG (I) и МК (II)

X	I		II	
	Q(N)	-Q(NO ₂)	Q(N)	-Q(NO ₂)
4-NO ₂	0.168	0.334	0.686	0.090
2-F	0.171	0.348	0.733	0.084
2-Cl	0.171	0.361	0.746	0.103
3-MeO	0.172	0.362	0.685	0.123
3-CH ₂ Cl	0.166	0.361	0.700	0.115
3-OH	0.179	0.362	0.818	0.080
H	0.180	0.352	0.695	0.119
3-CF ₃	0.168	0.344	0.654	0.113
3-Et	0.179	0.364	0.799	0.088
4-MeO	0.180	0.368	0.726	0.123
4-Cl	0.167	0.361	0.681	0.121
4-CH ₂ Cl	0.164	0.362	0.684	0.124
4-Ph	0.160	0.376	0.673	0.139
4-Me	0.177	0.361	0.716	0.120
4-OH	0.180	0.366	0.740	0.112
4-t-Bu	0.176	0.362	0.683	0.124
4-CF ₃	0.176	0.362	0.691	0.099
4-F	0.182	0.348	0.724	0.104
4-Et	0.164	0.374	0.584	0.128
4-EtO	0.382	0.421	0.652	0.145

Таким образом, в корреляциях по Гаммету заряды, определенные методами, основанными на теории электростатического потенциала, не являются адекватными σ -константам заместителей. Этот вывод согласуется с общим представлением о том, что результаты подобного рода исследований будут *существенным образом зависеть* от уровня теории, метода и базиса.

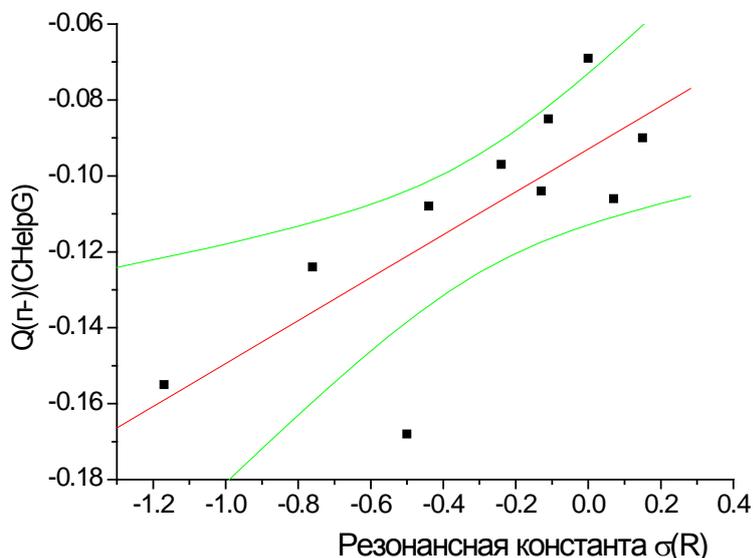


Рис. 3. Соотношение между зарядами в параположении XPh и резонансными константами заместителей

Библиографический список

1. Бураев В. И. Количественное описание изомерных превращений замещенных ароматических соединений, протекающих под влиянием кислотных катализаторов : дис. ... канд. хим. наук. Новосибирск, 1978. 129 с.
2. Джонсон К. Уравнение Гаммета. М. : Мир, 1977. 240 с.
3. Кодолов В. И., Семернева Г. А., Максимов А. А., Спасский С. С. // ЖФХ. 1977. Т. 51, № 8. С. 2133—2134.
4. Кочетова Л. Б., Клюев М. В. Влияние заместителя в бензольном кольце на реакционную способность ароматических нитросоединений : квантовохимический подход // Квантовохимические расчеты : структура и реакционная способность органических и неорганических молекул : III школа-семинар. Иваново : Иван. гос. ун-т, 2007. С. 105—108.
5. Притыкин А. Н., Селютин О. Б. // ЖОрХ. 1998. Т. 34, вып. 8. С. 1197—1202.
6. Смирнова М. В. Синтез и химические превращения производных дифенилоксида, содержащих нитрильную и иминогруппу : автореф. дис. ... канд. хим. наук. Волгоград, 2008. 24 с.
7. Фрейдлин Б. Г. // ЖОХ. 1974. Т. 44, вып. 8. С. 1846—1848.
8. Ясинский О. А., Русаков А. И., Плахтинский В. В., Миронов Г. С. // Изв. вузов. Сер. хим. и хим. технол. 1988. Т. 31, № 2. С. 23—25.
9. Cramer C. J. Essentials of computational chemistry : theories and models. 2-nd ed. Southern Gate : Wiley J. and Sons, 2004. 596 p.
10. De Proft F., Van Alsenoy C., Peeters A., Langenaeker W., Geerlings P. // J. Comput. Chem. 2002. Vol. 23, № 12. P. 1198—1209.
11. Granovsky A. A. FireFly ver. 7.1.G. <http://classic.chem.msu.su/gran/gamess/index.html>
12. Guerra C. F., Handgraaf J.-W., Baerends E. J., Bickelhaupt F. V. // J. Comput. Chem. 2004. Vol. 25, № 2. P. 189—210.

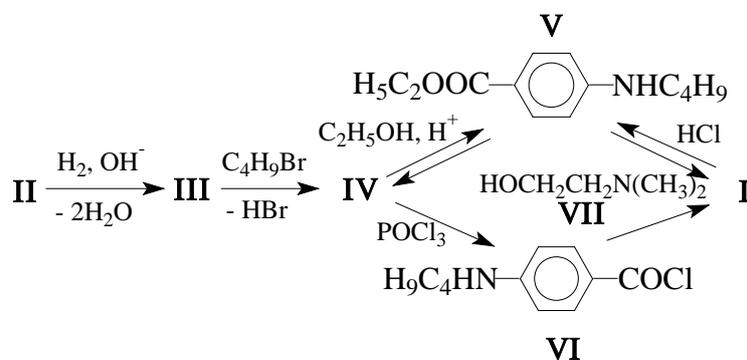
13. *Hirshfeld F. L.* // *Theor. Chim. Acta.* 1977. Vol. 44. P. 129.
14. <http://xtal.sourceforge.net/man/charge-cont.html>
15. *Kelly D. P., Spear R. J.* // *Austral. J. Chem.* 1977. Vol. 30, № 9. P. 1993—2004.
16. *Molecular electrostatic potential : concepts and applications* / ed. J. S. Murray, K. Sen. Amsterdam : Elsevier Science V. B., 1996. 680 p.
17. *Nelson T. J., Pietro W. J.* // *Inorg. Chem.* 1989. Vol. 28, № 1. P. 544—548.
18. *Olah G. A., Kobayashi S., Tashiro M.* // *J. Am. Chem. Soc.* 1972. Vol. 94. P. 7448.
19. *Riechel T.* // *J. Electrochem. Sci.* 1974. Vol. 121, № 11. P. 1462—1464.
20. *Roy R. K., Hirao K.* // *J. Chem. Phys.* 2000. Vol. 113, № 4. P. 1372—1379.
21. *Schmidt M. W. et al.* // *J. Comput. Chem.* 1993. Vol. 14. P. 1347—1363.
22. *Theoretical aspects of chemical reactivity* / ed. A. Toro-Labbe. Amsterdam : Elsevier, 2007. 330 p.

УДК 542.971:541.128

М. В. Ключев, М. Г. Абдуллаев, З. Ш. Абдуллаева

МЕТАЛЛОПОЛИМЕРЫ В СИНТЕЗЕ ДИКАИНА

Максимальной местноанестезирующей активностью в ряду своих аналогов — анестезина и новокаина обладает дикаин (I) (β -диметиламиноэтиловый эфир *n*-бутиламинобензойной кислоты). Промышленный синтез I проводится аналогично синтезу новокаина [5, 8], но с той лишь разницей, что в данном случае появляется еще одна стадия — алкилирование аминогруппы, которая образуется при восстановлении *n*-нитробензойной кислоты (II) до *n*-аминобензойной кислоты (III). Далее могут применяться различные пути использования полученной *n*-бутиламинобензойной кислоты (IV), которые схематично можно представить следующим образом:



Оба промышленных процесса обладают существенными недостатками:

1) целевой препарат I является продуктом многостадийного синтеза, каждая стадия которого сопровождается существенными потерями синтезируемого соединения;

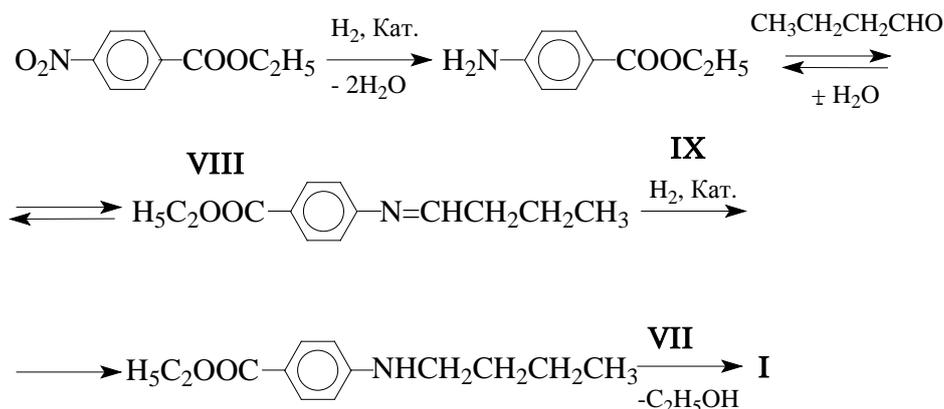
2) на стадии синтеза ключевого соединения IV происходит образование третичного амина, в результате чего IV получают с примесью *n*-бутиламинобензойной кислоты, которая загрязняет I;

© Ключев М. В., Абдуллаев М. Г., Абдуллаева З. Ш., 2010

3) из соединения IV в одном случае получают этиловый эфир *n*-бутил-аминобензойной кислоты (V), в другом — *n*-бутиламинобензоил хлорид (VI); недостатком первого процесса является его обратимость, которую устраняют благодаря использованию большого избытка этилового спирта, а недостатком второго являются технологические сложности, связанные с использованием POCl_3 ;

4) стадии получения соединения I из V или VI путем взаимодействия с диметиламиноэтанолом (VII) также не лишены недостатков; процесс взаимодействия V с VII является равновесным, что требует избытка VII; в другом случае недостаток связан с использованием легкогидролизуемого VI, что приводит к недопустимому [9] загрязнению препарата I веществом IV.

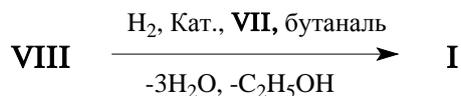
Предложенный в работе метод получения соединения I позволяет устранить, частично или полностью, многие указанные недостатки. В качестве катализаторов использовали палладийсодержащие аниониты АН-1 и АВ-17-8 (АН-1-Pd и АВ-17-8-Pd). АН-1 (политриметилломеламин) — сильноосновный анионит, практически не набухает в органических растворителях; АВ-17-8 (аминированный хлорметилированный сополимер стирола и дивинилбензола) — слабоосновный, сильноосновный анионит, хорошо набухает в органических растворителях. Исходным веществом служит этиловый эфир *n*-нитробензойной кислоты (VIII). Образующийся при его гидрировании этиловый эфир *n*-аминобензойной кислоты (анестезин) (IX) взаимодействует с находящимся в реакционной массе бутаналем, образуя азометин — этиловый эфир *n*-бутилиденаминобензойной кислоты (X), который восстанавливается до этилового эфира *n*-бутиламинобензойной кислоты (XI). Генерируемые *in situ* X и XI подвергаются реакции переэтерификации, взаимодействуя с VII, образуя I.



Следует отметить, что гидрогенизационное аминирование бутанала IX и переэтерификация XI протекают одновременно, но с различными скоростями, следствием чего является накопление в реакционной массе промежуточных продуктов IX—XI.

Ранее было показано, что при гидроаминировании алифатических альдегидов ароматическими аминами [4, 10], гетероциклических альдегидов циклогексиламиноом [7] и ароматическими аминами [3] на палладийсодержащих полимерах [2, 6], целевые продукты — вторичные амины образуются с выходом 84—100%. При выборе оптимальных условий оказалось возможным осуществление одновременного гидрирования нитрогруппы, гидроаминирования альдегидов и переэтерификации сложноэфирной группировки на

палладиевых катализаторах [1; 2; 3; 6; 7]. Исходя из литературных и полученных в работе данных общую схему получения I из VIII можно представить следующим образом:



Препарат I (основание) не требует дополнительной очистки, т. к. вода и этанол входят в состав спиртового раствора HCl для перевода I в солянокислую соль. При использовании HCl в качестве катализатора переэтерификации удается сразу получить соль I.

Таким образом, разработанный метод позволяет осуществить каталитический синтез препарата I из VIII в одну стадию с высоким выходом (68—94 %) и в мягких условиях. При этом совмещаются реакции гидрирования, гидроаминирования и переэтерификации, что позволяет существенно повысить эффективность технологического процесса получения I.

Библиографический список

1. Абдуллаев М. Г. //Хим.-фармацевт. журн. 2001. Т. 35, вып. 1. С. 42—45.
2. Абдуллаев М. Г., Насибулин А. А., Клюев М. В. // Изв. вузов. Химия и хим. технология. 1994. Т. 37, вып. 7/9. С. 55—58.
3. Абдуллаев М. Г., Насибулин А. А., Клюев М. В. // Там же. С. 58—62.
4. Воронин М. В., Насибулин А. А., Клюев М. В. // Нефтехимия. 1997. Т. 37, вып. 6. С. 516—522.
5. Государственная фармакопея СССР. М. : Медицина, 1989. Т. 9.
6. Клюев М. В., Насибулин А. А., Абдуллаев М. Г. // Нефтехимия. 1994. Т. 34, вып. 5. С. 413—420.
7. Клюев М. В., Насибулин А. А., Абдуллаев М. Г. // Журн. орган. химии. 1995. Т. 31, вып. 3. С. 416—418.
8. Мелентьева А. Г. Фармацевтическая химия. М. : Медицина, 1968.
9. Сенов П. Л. Фармацевтическая химия. М. : Медицина, 1971.
10. Способ получения катализатора гидрирования и гидрогенизационного аминирования : патент 2039599 Рос. Федерация ; заявл. 12.10.92 ; опубл. 20.07.95. Бюл. № 20.

УДК 541

Л. В. Курицын

К РАСЧЕТУ СТАТИСТИЧЕСКОГО ФАКТОРА В КИНЕТИКЕ РЕАКЦИЙ ПОЛИФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

Полифункциональные соединения, в молекулах которых имеется две или несколько функциональных групп с одинаковой по химической природе и реакционной способностью, широко используются в органическом синтезе при получении полупродуктов, красителей, лекарственных веществ, полимеров.

При изучении кинетики реакций с участием таких соединений необходимо учитывать статистический фактор — коэффициент пропорциональности между экспериментально определяемой константой скорости изменения концентрации групп реагента или продукта реакции (K_1) и константой скорости реакции (K).

© Курицын Л. В., 2010

$$K_i = P_i \cdot K, \quad (1)$$

где P_i — статистический фактор.

Необходимо отметить, что взаимодействие полифункциональных соединений (мономеров) — это сложный многостадийный процесс, включающий как параллельные, так и последовательные стадии. В некоторых случаях скорость первой стадии процесса значительно больше скорости последующих стадий и становится возможным изучить кинетику этой стадии.

В настоящей работе обсуждается только первая стадия взаимодействия полифункциональных соединений A_1 и A_2 .

$$A_1(n_1, z_1) + A_2(n_2, z_2) = A_3[(n_1 - 1)z_1; (n_2 - 1)z_2] + A_4(z_1 z_2) \quad (2)$$

где n_1 и n_2 — число функциональных групп, способных вступать в реакцию, z_1, z_2 — атомы или группы атомов отсоединившихся от A_1 и A_2 при их взаимодействии.

Скорость реакции (2) может быть определена по изменению концентраций реагентов или продуктов в ходе реакции и пропорциональна произведению концентраций функциональных групп C'_1 и C'_2 в реагентах A_1 и A_2 :

$$-\frac{dC_1}{d\tau} = K_1 \cdot C'_1 \cdot C'_2; \quad (3)$$

$$-\frac{dC_2}{d\tau} = K_1 \cdot C'_1 \cdot C'_2; \quad (4)$$

$$\frac{dC_3}{d\tau} = K_1 \cdot C'_1 \cdot C'_2; \quad (5)$$

$$\frac{dC_4}{d\tau} = K_1 \cdot C'_1 \cdot C'_2, \quad (6)$$

где C_1, C_2, C_3, C_4 — текущие концентрации A_1, A_2, A_3, A_4 в момент времени τ от начала реакции; K_1 — константа скорости реакции (2).

Концентрации функциональных групп реагентов A_1 и A_2 :

$$C'_1 = C_1^{0(1)} - y_1; \quad C'_2 = C_2^{0(1)} - y_2, \quad (7)$$

где $C_1^{0(1)}, C_2^{0(1)}$ — начальные концентрации функциональных групп A_1 и A_2 ; y_1, y_2 — изменение концентрации в ходе реакции.

Обозначив концентрации A_4 как $C_4 = x$, имеем

$$C_3 = y_1 + y_2 - x = y. \quad (8)$$

Уравнения (3)—(6) можно преобразовать к виду:

$$\frac{dy_1}{d\tau} = K_1(C_1^{0(1)} - y_1)(C_2^{0(1)} - y_2); \quad (9)$$

$$\frac{dy_2}{d\tau} = K_1(C_1^{0(1)} - y_1)(C_2^{0(1)} - y_2); \quad (10)$$

$$\frac{dy}{d\tau} = K_1(C_1^{0(1)} - y_1)(C_2^{0(1)} - y_2); \quad (11)$$

$$\frac{dx}{d\tau} = K_1(C_1^{0(1)} - y_1)(C_2^{0(1)} - y_2). \quad (12)$$

Уравнения (9)—(12) могут быть проинтегрированы при условии, если выразить их как функцию двух переменных, учитывая взаимосвязь y_1 , y_2 , y и x :

$$\frac{y_1}{n_1} = \frac{y_2}{n_2} = \frac{y}{n_1 + n_2 - 1} = x. \quad (13)$$

Интегральная форма уравнений (9)—(12) имеет вид:

$$\frac{n_2}{n_1} K_1 = \frac{1}{\tau} \int_0^{y_1} \frac{dy_1}{(n_1 C_1^0 - y_1)(n_1 C_2^0 - y_1)}; \quad (14)$$

$$\frac{n_1}{n_2} K_1 = \frac{1}{\tau} \int_0^{y_2} \frac{dy_2}{(n_2 C_1^0 - y_2)(n_2 C_2^0 - y_2)}; \quad (15)$$

$$\frac{n_1 \cdot n_2}{(n_1 + n_2 - 1)^2} K_1 = \frac{1}{\tau} \int_0^y \frac{dy}{[(n_1 + n_2 - 1) \cdot C_1^0 - y][(n_1 + n_2 - 1) \cdot C_2^0 - y]}; \quad (16)$$

$$n_1 n_2 K_1 = \frac{1}{\tau} \int_0^x \frac{dx}{(C_1^0 - x)(C_2^0 - x)}. \quad (17)$$

Из уравнений (14)—(17) следует, что константы скорости изменения концентраций функциональных групп A_1 , A_2 , A_3 , A_4 соответственно равны:

$$\begin{aligned} K(A_1) &= \frac{n_2}{n_1} K_1; & K(A_3) &= \frac{n_1 n_2}{(n_1 + n_2 - 1)^2} K_1 \\ & & & ; \\ K(A_2) &= \frac{n_1}{n_2} K_1; & K(A_4) &= n_1 n_2 K_1 \end{aligned} \quad (18)$$

и статические факторы:

$$\begin{aligned} P(A_1) &= \frac{n_2}{n_1}; & P(A_3) &= \frac{n_1 n_2}{(n_1 + n_2 - 1)^2} \\ & & & ; \\ P(A_2) &= \frac{n_1}{n_2}; & P(A_4) &= n_1 n_2. \end{aligned} \quad (19)$$

Из уравнений (19) следует также, что статистический фактор реакции (2) может быть больше единицы или меньше единицы, целым или дробным числом, в зависимости от того, по какому компоненту реакции изучается скорость реакции (см. табл.).

Значения $P(A_1)$, $P(A_2)$, $P(A_3)$ и $P(A_4)$ при разных n_1 и n_2

n_1, n_2	$P(A_1)$	$P(A_2)$	$P(A_3)$	$P(A_4)$
1,2	2	2^{-1}	2^{-1}	2
1,3	3	3^{-1}	3^{-1}	3
1,6	6	6^{-1}	6^{-1}	6

2,3	3/2	2/3	3/8	6
2,4	2	2 ⁻¹	8/25	8
3,4	4/3	3/4	1/3	12
3,5	5/3	3/5	15/49	15
3,6	2	2 ⁻¹	9/32	18

Если изучается скорость реакции монофункционального соединения $A_1(n_1=1)$ с полифункциональным соединением $A_2(n_2)$, то статистические факторы соответственно равны:

$$\begin{aligned} P(A_1) &= n_2; & P(A_3) &= n_2^{-1}; \\ P(A_2) &= n_2^{-1}; & P(A_4) &= n_2. \end{aligned} \quad (20)$$

Из уравнений (20) следует, что если скорость реакции изучается по изменению концентрации монофункционального соединения A_1 или A_4 , то статистический фактор равен числу функциональных групп A_2 ; если же скорость реакции изучается по изменению концентрации функциональных групп полифункционального соединения A_2 или A_3 , то статистический фактор равен n_2^{-1} .

Последний случай имеет место для реакций электрофильного ароматического замещения (например, сульфирования, нитрования, бромирования и др.), кинетику которых невозможно изучать по изменению концентрации электрофильной частицы.

Уравнение (15) в этом случае принимает вид

$$\frac{1}{n_2} K_1 = \frac{1}{\tau} \int_0^{y_2} \frac{dy_2}{(n_2 C_1^0 - y_2)(n_2 C_2^0 - y_2)} = \bar{K}_2. \quad (21)$$

Из уравнения (21) следует, что статистический фактор в реакциях электрофильного ароматического замещения равен

$$P = n_2^{-1}. \quad (22)$$

Экспериментальное значение константы скорости реакции одного реакционного центра ароматического соединения с электрофильной частицей \bar{K}_2 названо Ингольдом [3] парциальной константой скорости реакции. Уравнение (21) может быть представлено в виде:

$$K_1 = n_2 \bar{K}_2. \quad (23)$$

Ингольдом были введены понятия «парциальная (регио) селективность», «фактор парциальных скоростей реакции», которые используются исследователями при изучении кинетики реакций электрофильного ароматического замещения. Следует отметить работы [1, 2] в которых дана необоснованная критика автора настоящей работы по поводу $P = n_2^{-1}$. По их мнению $P = n_2$. Возникшее противоречие связано с тем, что авторы работ [1, 2] отождествляют два разных понятия P и n_2 .

Библиографический список

1. Гнедин Б. Г., Крылов Е. Н. // Вестн. Иван. гос. ун-та. 2007. Вып. 3. С. 23—27.
2. Крылов Е. Н. // Там же. 2006. Вып. 3. С. 38—41.
3. Ingold C. K. et. al. // J. Chem. Soc. 1927. P. 2918.

УДК 541.8

А. А. Зайцев, В. Н. Афанасьев, М. А. Безумова

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ РЕШЕТОЧНЫХ СИСТЕМ К ТЕОРИИ ВЯЗКОСТИ ЖИДКОСТИ

Теоретическое описание свойств жидких систем — одна из самых сложных задач статистической физики, так как до настоящего времени нет универсальных методов, которые бы в применении к жидкости давали всегда надежные результаты, позволяющие на основе учета молекулярного строения жидкости правильно отражать экспериментальные данные.

Одной из проблем жидкого состояния, не получивших однозначного решения, является проблема правильного теоретического описания свойств вязкости жидкости, ее зависимости от температуры и от параметров взаимодействия молекул жидкости. Различные аспекты этой проблемы отражены, например, в [2, 4, 7]. В литературе приводятся, в частности, чисто эмпирические выражения, достаточно хорошо отражающие зависимости вязкости различных жидкостей в ограниченных интервалах температур.

Наиболее разработанная теория вязкости, содержащая несколько различных вариантов, восходит к теории Эйринга, согласно которой в процессе вязкого течения молекулы при движении относительно друг друга должны преодолевать энергетический барьер между двумя соседними положениями. Скорость этого процесса определяется факторами, аналогичными тем, которые действуют в химических реакциях. Этот подход приводит к формулам вида

$$\eta = B \exp(\Delta H / RT), \quad (1)$$

где ΔH — энтальпия активации (иногда в формуле (1) вместо ΔH фигурирует ΔG — свободная энергия Гиббса активации). Для предэкспоненциального фактора B и его зависимости от температуры разными авторами предложено несколько отличающихся друг от друга выражений. Сложной задачей при этом остается задача определения зависимости величины ΔH от параметров межмолекулярного взаимодействия и от температуры.

Другой, совершенно отличный от этого, подход основан на предположении об определяющей роли вакансий в жидкости для характеристики ее вязкости. Согласно ему текучесть (величина, обратная вязкости) должна быть пропорциональна объему вакансий в жидкости, что приводит к так называемой формуле Бачинского

$$\eta = \frac{K}{V_{\mu} - V_S}, \quad (2)$$

© Зайцев А. А., Афанасьев В. Н., Безумова М. А., 2010

где V_s — объем жидкости, в которой отсутствовали бы вакансии, приходящийся на один моль, V_m — молярный объем, K — константа, зависящая от сил взаимодействия между молекулами.

Как оказалось, при соответствующих методах установления предельного объема V_s и постоянной K (напр., [1, 8]) использование формулы (2) приводит к хорошему совпадению с опытом для многих жидкостей в широком интервале температур.

Оказывается, что согласование обоих подходов возможно на основе методов так называемых решеточных теорий, широко используемых в статистической физике [6].

Применению этих методов к проблеме теоретического описания вязкости жидкости и посвящена данная работа.

Использование в теории жидкости решеточных методов основано на следующей модели. Весь объем жидкости V разбивается на маленькие ячейки, число ячеек N_0 , объем каждой ячейки $V_0 = V/N_0$ выбирается так, чтобы в каждой ячейке помещалось не больше одной молекулы. Вводя для каждой ячейки, центр которой характеризуется радиус-вектором \mathbf{r}_i , величины n_i , могущие принимать значения 0 или 1 в зависимости от того, занята ячейка молекулой или пуста, энергию взаимодействия i -й и k -й ячейки записывают в виде $u_{ik}n_i n_k$, где u_{ik} — энергия частиц, находящихся на расстоянии $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k|$.

Учитывая наряду с потенциальной энергией взаимодействия частиц

$$U = \frac{1}{2} \sum_{ik} u_{ik} n_i n_k \quad (3)$$

кинетическую энергию, большую статистическую сумму такой системы можно представить в виде

$$\Xi = \sum_{n_1=0}^1 \sum_{n_2=0}^1 \dots \exp(-\beta E), \quad (4)$$

где $\beta = 1/kT$ (k — постоянная Больцмана, T — температура),

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i,k=1}^{N_0} u_{ik} n_i n_k + t \sum_{i=1}^{N_0} n_i, \quad (5)$$

$-\beta t = \beta\mu + \ln(\lambda V_0)$, $\lambda = (2\pi m / \beta h^2)$, μ — химический потенциал [3].

Данная модель может быть применена для описания как жидкого, так и газообразного состояния. В применении к газу, когда большинство ячеек являются пустыми, число молекул $N = \sum_{i=1}^{N_0} n_i$ много меньше числа ячеек N_0 .

Для жидкости же наоборот. Для идеального решеточного газа, где не учитывается энергия взаимодействия частиц (см. [3]),

$$\Xi_0 = (1 + \lambda V_0 \exp(\beta\mu))^{N_0}. \quad (6)$$

Согласно идее, приводящей к формуле Бачинского (2), подвижность должна быть пропорциональна числу незаполненных ячеек $N_0 - N$. Если была бы известна большая статистическая сумма жидкости Ξ , то эту величину можно было бы рассчитать, используя известное в статистической физике выражение для числа частиц

$$N = \frac{\partial \ln \Xi}{\partial (\beta \mu)}, \quad (7)$$

и исследовать зависимость вязкости, пропорциональной $1/(N_0 - N)$, от температуры, давления и молекулярных параметров. Как отмечалось, прямой расчет статистической суммы жидкости связан со значительными сложностями, однако имеется возможность использовать для ее определения метод, предложенный в [3]. В этой работе получено соотношение между статистическими суммами для состояний, лежащих по разные стороны от точки фазового перехода следующего вида:

$$\Xi(\beta, z_1) = \Xi(\beta, z_2) z_1^{N_0} \exp(-\beta a N_0 / 2). \quad (8)$$

В формуле (8)

$$z_1 = \exp(-\beta t_1), \quad z_2 = \exp(-\beta t_2) = \exp(\beta(a + t_1)), \quad a = \sum_k u_{ik}. \quad (9)$$

Соотношение (8) дает возможность, зная большую статистическую сумму для одной фазы (например, газообразной), характеризующейся одним значением химического потенциала, через который выражается параметр t , находить статистическую сумму для другой фазы (жидкой), характеризующейся другим значением μ , а также путем приравнивания $z_1 = z_2$ и, следовательно, $\mu_1 = \mu_2$ находить μ в точке фазового перехода. Как показано в [3], числа частиц N_1 и N_2 в состояниях, связанных формулами (8), (9), удовлетворяют соотношению

$$N_1 + N_2 = N_0. \quad (10)$$

Таким образом, найдя значения термодинамических величин в каком-либо газообразном состоянии, используя (8) и (9), можно находить их в соответствующем ему жидком состоянии. Величины, относящиеся к жидкому состоянию, будем обозначать цифрой 1, к газообразному — цифрой 2. Статистическую сумму газообразного состояния возьмем в виде (6).

Применяя соотношение (7), получим для газа

$$\exp(-\beta t_2) = \frac{N_2 / N_0}{1 - N_2 / N_0}, \quad \ln \Xi_2 = N_0 \ln \frac{1}{1 - N_2 / N_0}. \quad (11)$$

Логарифмирование выражения (8) и подстановка туда (11) дают

$$N_0 \ln \frac{1}{1 - N_2 / N_0} + N_0 \beta t_2 = \ln \Xi_1(\beta, t_1) - N_0 \beta a / 2. \quad (12)$$

Используя формулу статистической физики

$$pV = kT \ln \Xi, \quad (13)$$

перепишем (12) в виде

$$-N_0 \ln(1 - N_2/N_0) + N_0 \ln \frac{1 - N_2/N_0}{N_2/N_0} = \frac{(pV)_1}{kT} - \beta N_0 a/2. \quad (14)$$

Выражая N_2 через N_1 по соотношению (10), из формулы (14) получаем

$$\frac{N_0}{N_0 - N_1} = \exp(\beta(\frac{pV}{N_0} - a/2)), \quad (15)$$

где p и V — давление и объем жидкости.

Так как согласно идее, приводящей к формуле Бачинского, левая сторона равенства (15) пропорциональна вязкости, из (15) следует

$$\eta = c \exp(\beta(\frac{pV}{N_0} - a/2)). \quad (16)$$

Согласно (9), потенциальная энергия взаимодействия всех частиц в жидкости $E_{ном} = aN/2$. Так как энтальпия $H = pV + U$ (U — внутренняя энергия) и энергию активации ΔU можно отождествить с $-E_{ном}$, учитывая, что в жидкости N_0 мало отличается от N , формулу (16) можно записать в виде

$$\eta = B \exp((pV_\mu - N_A a/2)/RT) = B \exp(\Delta H/RT), \quad (17)$$

(N_A — число Авогадро), в полном соответствии с формулой (1).

Таким образом, показано, что два, казалось бы, совершенно разных подхода, применяемых для теоретического описания вязкости жидкости, находятся в полном согласии друг с другом.

Чтобы применять (17) для расчета вязкости, нужно решить вопросы о зависимости потенциала межмолекулярного взаимодействия, через который выражается величина a , от температуры и о значении предэкспоненциального фактора B .

Известно, что в случае не очень сложного строения молекул жидкостей и газов межмолекулярное взаимодействие в них достаточно хорошо описывается потенциалом Леннарда — Джонса вида

$$u(r) = -4\varepsilon((\frac{\sigma}{r})^6 - (\frac{\sigma}{r})^{12}). \quad (18)$$

В литературе [2, 4] имеется много данных о значениях параметров ε и σ для различного сорта молекул. Нашей задачей является получение на основании формулы (17) универсального выражения, правильно описывающего вязкость для случая, когда в качестве потенциала межмолекулярного взаимодействия можно использовать потенциал Леннарда — Джонса.

При учете взаимодействия лишь ближайших молекул жидкости величина a , входящая в (17), может быть выражена как $a = \gamma u(r)$, где γ — координационное число и r — среднее расстояние между молекулами в жидкости (мы при этом пренебрегаем небольшим различием в значениях средней потенциальной энергии и потенциала от среднего значения расстояния между молекулами).

Наши оценки показывают, что для жидкости при давлениях порядка одной атмосферы величина pV_μ много меньше члена $aN_A/2$, поэтому формулу для вязкости жидкости можно с достаточной точностью записать в виде

$$\eta = B \exp(-\gamma u(r)/2kT). \quad (19)$$

Так как среднее расстояние между молекулами в жидкости увеличивается с ростом температуры, а, следовательно, величина $u(r)$ уменьшается, можно разложить $u(r)$ в ряд по степеням температуры и, ограничиваясь первыми степенями разложения, записать

$$-u(r) = c_1 + c_2 T + c_3 T^2, \quad (20)$$

откуда

$$-\gamma u(r) / 2kT = \gamma c_1 / kT + A - A_1 T, \quad (21)$$

где c_1, A, A_1 — постоянные.

Используя справочный материал из [5] по зависимости плотности жидкостей от температуры, для восьми жидкостей нами были рассчитаны средние расстояния r между молекулами, рассчитаны по ним потенциалы $u(r)$ и построены графики зависимости $u(r)/kT$ от температуры. Оказалось, что во всех исследованных случаях зависимости величин $-\gamma u(r)/kT$ от T очень хорошо укладываются на прямые линии, небольшие отклонения имелись лишь в области низких температур, что говорит о том, что первым членом в правой части формулы (21) можно пренебречь.

Из выражения для среднего значения потенциальной энергии (см. [6])

$$E_{nom} = \frac{\int (1/2(\sum u(r_{ik})) \exp(-(\beta/2)(\sum u(r_{ik}))) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots}{\int \exp(-(\beta/2)(\sum u(r_{ik}))) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots} \quad (22)$$

следует, что E_{nom}/kT , в случае потенциала вида (18), должна быть функцией от T/ε , в соответствии с чем формула (21) может быть переписана в виде

$$-\gamma u(r) / kT = A - \frac{b}{\varepsilon} T, \quad (23)$$

где A и b не зависят от параметров потенциала Леннард — Джонса.

Включая неявно в предэкспоненциальный фактор формулы (19) множитель $\exp(A)$, перепишем ее в виде

$$\eta = V \exp(-\frac{b}{\varepsilon} T). \quad (24)$$

Для нахождения зависимости предэкспоненциального фактора V от температуры и индивидуальных параметров, характеризующих жидкость, воспользуемся идеей «рациональных параметров», предложенной в [1, 8]. Согласно этой идее, для того чтобы теория вязкости была применима ко всем жидкостям, нужно ввести новые единицы измерения, в определение которых нужно включить те факторы, от которых может зависеть вязкость. Несколько модифицируя по сравнению с [1, 8] определение этих новых единиц, введем их следующим образом. Новая единица массы μ — масса моля, единица длины σ — параметр потенциала Леннард — Джонса, единица энергии — κT . Согласно идее рациональных параметров вязкость, представленная в этих единицах, обозначим ее η' , должна иметь одинаковое выражение для всех жидкостей с потенциалом взаимодействия частиц вида (18). Следовательно,

$$\eta' = c \exp(-\frac{b}{\varepsilon} T), \quad (25)$$

где c — постоянная. В обычных единицах в системе СИ вязкость измеряется в кг/мс. Нетрудно от новых единиц перейти к обычным, что дает соотношение $\eta = \eta' \frac{\sqrt{\mu\kappa T}}{\sigma^2}$, в соответствии с чем для вязкости η окончательно получаем формулу вида

$$\eta = c \frac{\sqrt{\mu\kappa T}}{\sigma^2} \exp\left(-\frac{b}{\varepsilon} T\right). \quad (26)$$

Разумность выбора новых единиц данного вида (рациональных параметров) подтверждается тем, что в результате получилась формула, в которой при $b = 0$ зависимость от массы, температуры и параметра, характеризующего размер молекул, такая же, как для вязкости идеального газа, особенности же вязкости, связанные с взаимодействием частиц в жидкости, передаются множителем, содержащим экспоненту.

Нами был сделан расчет по формуле (26) вязкости нескольких жидкостей и проведено сравнение с опытом. Результаты расчета для жидкого азота представлены в табл. 1. При этом данные о параметрах ε и σ взяты из [2]. Постоянные c и b , найденные по методу наименьших квадратов, оказались равными: $c = 8,8510^7$ (8,85(7)), $b = 5,7010^{-23}$ (5,70(-23)) Дж/мольК. Видно, что результаты расчета хорошо соответствуют опыту. Относительная ошибка $\rho = 8,572(-3)$ — меньше одного процента.

Эти значения постоянных c и b затем были использованы для расчета вязкостей жидкого кислорода и жидкого фтора. Результаты расчета существенно зависят от использованных при этом величин параметров ε и σ . В различных источниках приводятся несколько отличных друг от друга их значений. Так, для кислорода данные из [2]: $\varepsilon/\kappa = 117,5$, $\sigma = 3,58(-10)$ м, данные из [4]: $\varepsilon/\kappa = 106,7$, $\sigma = 3,467(-10)$ м. В табл. 2 приведены наряду с экспериментальными значениями вязкости кислорода, взятыми из [5], результаты расчета по формуле (26) в двух вариантах, когда ε и σ взяты из [2] (вариант 1) и из [4] (вариант 2).

В табл. 3 отражены результаты расчета вязкости жидкого фтора, где вариант 1 — расчет при $\varepsilon/\kappa = 112,6$, $\sigma = 3,357(-10)$ м, вариант 2 — при $\varepsilon/\kappa = 106,4$, $\sigma = 3,360(-10)$ м.

Таблица 1

Сравнение расчетных значений вязкости жидкого азота с данными эксперимента

№ п/п	Т К	$\eta/\Pi_3 \cdot c$	
		Эксперимент	Расчет
1	66,2	2,47(-4)	2,441(-4)
2	69,0	2,17(-4)	2,189(-4)
3	71,1	2,02(-4)	2,016(-4)
4	73,1	1,84(-4)	1,863(-4)
5	75,4	1,71(-4)	1,701(-4)
6	77,4	1,58(-4)	1,570(-4)

Таблица 2

**Сравнение расчетных значений вязкости жидкого кислорода
с данными эксперимента**

№ п/п	Т К	$\eta \Pi z \cdot c$		
		Эксперимент	Расчет (вариант 1)	Расчет (вариант 2)
1	61,7	5,21(-4)	5,12(-4)	4,82(-4)
2	63,5	4,67(-4)	5,42(-4)	4,54(-4)
3	65,4	4,35(-4)	5,13(-4)	4,26(-4)
4	68,9	3,77(-4)	4,66(-4)	3,79(-4)
5	72,3	3,23(-4)	4,16(-4)	3,37(-4)
6	79,2	2,79(-4)	3,36(-4)	2,65(-4)

Таблица 3

**Сравнение расчетных значений вязкости жидкого фтора
с данными эксперимента**

№ п/п	Т К	$\eta \Pi z \cdot c$		
		Эксперимент	Расчет (вариант 1)	Расчет (вариант 2)
1	65,4	4,756(-4)	5,712(-4)	4,680(-4)
2	69,2	4,140(-4)	5,063(-4)	4,112(-4)
3	73,2	3,490(-4)	4,453(-4)	3,583(-4)
4	75,3	3,280(-4)	4,160(-4)	3,330(-4)
5	78,2	2,990(-4)	3,460(-4)	3,011(-4)
6	80,9	2,750(-4)	3,460(-4)	2,798(-4)

Видно, что при соответствующих значениях величин ε и σ , находящихся в интервале разброса литературных данных об этих параметрах, формула (26) хорошо передает зависимость вязкости различных жидкостей от температуры.

Библиографический список

1. Афанасьев В. Н., Паненко Е. С., Рябова В. В. Моделирование внутреннего трения молекулярных жидкостей на основе метода рациональных параметров. М., 1996. 324 с. Деп. в ВИНТИ 19.08.96, № 2699-В96.
2. Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. М. : Изд-во иностр. лит., 1961. 929 с.
3. Зайцев А. А. Соотношение термодинамических свойств различных фаз решеточных систем // Журн. физ. химии. 1994. Т. 68, № 6. С. 991—992.
4. Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей. Л. : Химия, 1982. 592 с.
5. Справочник химика. М. ; Л. : Химия, 1971. Т. 1. 549 с.
6. Хилл Т. Статистическая механика. М. : Изд-во иностр. лит., 1960. 485 с.
7. Эрдеи-Груз Т. Явления переноса в водных растворах. М. : Мир, 1976. 595 с.
8. Afanasyev V. N., Panenko E. S. Internal friction of supercritical fluids over a wide range of temperatures and pressures // Models in Chemistry. 1999. Vol. 136 (5/6). P. 635—645.

УДК 536.24

*М. И. Давидзон***О ЗАКОНЕ ОХЛАЖДЕНИЯ НЬЮТОНА — РИХМАНА**

Для описания теплового взаимодействия выделенной физической системы с окружающей средой или другой физической системой, как правило, применяют два метода: Фурье и Ньютона — Рихмана. По методу Фурье поверхностная плотность теплового потока q пропорциональна градиенту температуры ΔT :

$$q = -\lambda \nabla T, \quad (1)$$

где λ — коэффициент теплопроводности.

Выражение (1) справедливо при малых градиентах температуры, т. е. в условиях, когда перенос энергии осуществляется молекулами в отсутствие конвекции (макроскопического переноса). Уравнение (1) принято называть законом Фурье.

При использовании метода Ньютона — Рихмана предполагается, что интенсивность переноса энергии в форме тепла зависит от разности температур взаимодействующих физических систем. Принимается линейный характер этой зависимости. В современном виде ее записывают в форме

$$q = \alpha(T_w - T_\infty), \quad (2)$$

где T_w — температура теплоотдающей поверхности; T_∞ — температура окружающей среды; α — эмпирическая величина, получившая название коэффициента теплообмена.

Выражение (2) является результатом обобщения опытов И. Ньютона [5] и более подробных и разнообразных экспериментов В. Рихмана [7]. В отечественной литературе его принято называть законом охлаждения Ньютона — Рихмана.

Методика проведения опытов по В. Рихману такова: «Я подвесил на тонком шнурке стеклянный сосуд сферической формы с узким горлышком таким образом, что он соприкасался только с воздухом, температура которого была 68° , и налил в этот сосуд кипящую воду <...> Опустив термометр в воду, я увидел, что теплота уменьшилась...» [7, с. 73]. Добавим к этому, что температура измерялась в градусах Фаренгейта и фиксировалась каждые пять минут. Опыты проведены с различными массами воды.

Из выводов работы: «Итак, мы заключаем из опытов, что убывание теплоты <...> происходит в сложной зависимости, прямо пропорционально поверхностям и разностям между температурой охлаждаемых или нагреваемых масс и температурой воздуха и обратно пропорционально объемам нагреваемых или охлаждаемых масс, при условии, что промежутки времени равны друг другу и невелики. Утвердив это положение, мы способны будем обосновать закон, согласно которому можно будет предсказать убывание или возрастание теплоты за любой промежуток времени, *при постоянной температуре воздуха*» [7, с. 80] (курсив мой. — М. Д.).

К сожалению, трагическая смерть помешала В. Рихману записать закон в форме (2). Но следует обратить внимание, что в опытах В. Рихмана темпе-

ратура в помещении, где проводились опыты, т. е. температура окружающей среды T_∞ , оставалась неизменной.

Отсюда следует первое и очень важное ограничение закона охлаждения Ньютона — Рихмана — неизменность в процессе теплообмена температуры окружающей среды. Это возможно только при определенных условиях. В самом деле, согласно первому закону термодинамики (3) для открытых систем в расчете на один моль подводимая к системе энергия в форме тепла δQ расходуется на изменение внутренней энергии dU , совершение работы pdV и массообмен γdN :

$$\delta Q = dU + pdV + \gamma dN, \quad (3)$$

где p — давление, V — объем, γ — энергия одной частицы, N — число частиц системы.

Помещение, в котором проводятся опыты, в общем случае является открытой системой. Если подводится достаточное количество тепла δQ , то система приходит в стационарное состояние с неизменной внутренней энергией. Подводимая энергия тратится на совершение работы и массообмен. Для обычных лабораторных помещений, когда не предусматривается их герметизация, возможности системы для совершения работы и массообмена ограничены размерами стен, дверей, окон и степенью их герметичности. Если после достижения стационарного состояния системы увеличить подвод достаточного количества тепла, то система придет в новое стационарное состояние, но с уже более высоким значением внутренней энергии. При этом температура воздуха в помещении — температура окружающей среды T_∞ — вырастет до какого-то нового значения.

И в законе охлаждения Ньютона — Рихмана, и в нашем обыденном представлении температура T_∞ — это температура среды на достаточно большом (с формальной точки зрения бесконечном) удалении от границ рассматриваемой физической системы. На некоторых границах, где имеются источники или стоки тепла, температура может быть больше или меньше T_∞ . Но, по мере удаления от источников (стоков), она приобретает значение T_∞ , соответствующее не равновесному в термодинамическом отношении значению, а стационарному (может быть, его можно назвать динамически равновесным значением T_∞). Численное значение T_∞ зависит от многих причин. Например, от способности системы воспринимать тепло (теплоемкость), вида процесса теплообмена ($p = const$, $V = const$ и т. п.), способа передачи тепла (конвекция, теплопроводность, лучеиспускание) и, что очень существенно, от числа частиц, составляющих систему (количество молей).

Если находящаяся в стационарном состоянии система с температурой T_∞ вступает в тепловое взаимодействие с другой системой типа стеклянного шара (как у В. Рихмана), то передаваемой от сферы энергии может оказаться недостаточно, чтобы изменить температуру помещения T_∞ . Температура, как это принято сейчас считать, является мерой средней кинетической энергии хаотического движения частицы системы. Надо поступающую от сферы энергию поделить на колоссальное число частиц, составляющих систему (воздух помещения). Ввиду того что сферы в опытах были малых размеров и относительно низких температур, их энергии было недостаточно, чтобы изменить температуру T_∞ . У поверхности сферы температура T была больше T_∞ ($T > T_\infty$), но она быстро убывала с расстоянием x от поверхности и вдали

(теоретически $x \rightarrow \infty$) становилась равной $T = T_\infty$. Ситуация напоминает процесс охлаждения стакана чая в помещении или океан, в котором плавают одиночные корабли, например авианосцы. Они выделяют тепло, но этой энергии недостаточно, чтобы изменить температуру океана в целом.

Важно отметить, что соотношение (2) связывает три независимые величины: поверхностную плотность теплового потока q , температуру стенки T_w и неизменную в процессе теплообмена температуру окружающей среды T_∞ . В таком виде соотношение (2) как бы претендует на название закона. Правда, из этого закона не следует, на каком расстоянии x от стенки устанавливается значение температуры T_∞ . Можно предположить, что это расстояние невелико. Это означает, что изменение температуры с расстоянием x от стенки подчиняется, например, экспоненциальному закону. Примем закон изменения температуры $T(x)$ в виде

$$T = T_w - (T_w - T_\infty)(1 - e^{-\beta x}), \quad (3)$$

где β — некоторая постоянная.

Нетрудно проверить, что функция (3) удовлетворяет требуемым граничным условиям:

если $x = 0$, то $T = T_w$;

если $x \rightarrow \infty$, то $T = T_\infty$.

Согласно закону Фурье (1) поверхностная плотность потока тепла q пропорциональна градиенту температуры ∇T . В одномерном случае равенство (1) можно записать в виде

$$q = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x}, \quad (4)$$

где λ — коэффициент теплопроводности.

С учетом (3) выражение (4) (после разложения экспоненты в ряд Маклорена в линейном приближении) принимает вид (5), совпадающий с законом охлаждения Ньютона — Рихмана:

$$q = \lambda \cdot \beta (T_w - T_\infty) = \alpha (T_w - T_\infty). \quad (5)$$

Постоянная β имеет размерность $1/\text{м}$, а произведение $\lambda \cdot \beta$ имеет размерность коэффициента теплообмена a .

Выходит, что закон охлаждения Ньютона — Рихмана (1) является следствием закона Фурье, когда температура окружающей среды после теплового взаимодействия остается неизменной.

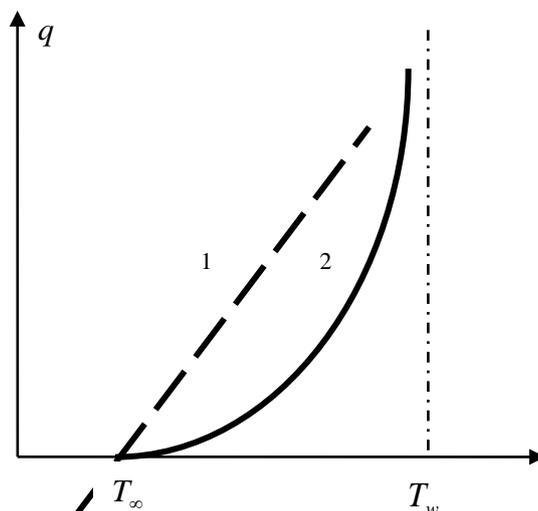
Закон Фурье (4) справедлив при малых градиентах температуры, когда имеет место перенос тепла теплопроводностью. Соответственно, закон Ньютона — Рихмана, скорее всего, справедлив при малых разностях температур $T_w - T_\infty$ и молекулярном переносе тепла.

Обратим внимание на то, что в равенстве (2) при неизменной температуре помещения T_∞ плотность теплового потока будет тем выше, чем выше температура охлаждаемой стенки T_w . Однако зависимость эта не должна быть линейной. В самом деле, если принять зависимость линейной (линия 1 на рисунке), то это означает, что поверхностная плотность потока тепла q

может быть отрицательной, т. е. температура стенки T_w при охлаждении стенки может оказаться ниже температуры окружающей среды T_∞ , что в реальности не наблюдается. Она может асимптотически приближаться к температуре окружающей среды. Линия 1 на рисунке должна быть заменена на плавную кривую 2. Эта кривая должна удовлетворять граничным условиям:

если $T_w = T_\infty$, то $q = 0$;

если $T_w \rightarrow \infty$, то $q \rightarrow \infty$.



Зависимость поверхностной плотности теплового потока от температуры стенки

Соответственно, функцией, описывающей теплообмен и удовлетворяющей этим условиям, может быть выражение

$$q = \alpha(T_w - T_\infty) \exp\{L(T_w - T_\infty)\}, \quad (6)$$

где α и L — некоторые постоянные, позволяющие обеспечить одну и ту же размерность в правой и левой части уравнения (6).

Получается, что вместо линейной модели Ньютона — Рихмана (2) описывать теплообмен следует более сложной моделью (6). В случае малого показателя экспоненту можно разложить в ряд и, если ограничиться линейным приближением при разложении, вместо выражения (6) можно записать

$$q = \alpha(T_w - T_\infty)(1 + L(T_w - T_\infty)). \quad (7)$$

При малых разностях температур и малом значении постоянной L вторым слагаемым справа в выражении (7) можно пренебречь. Придем к традиционному уравнению Ньютона — Рихмана (2).

Чтобы как-то сравнить модели Ньютона — Рихмана с экспоненциальной (6) и квадратичной (7), необходимо знать значение постоянной L . Поскольку ни экспериментальных, ни теоретических работ в этом направлении не проводилось, попытаемся определить L хотя бы по порядку величины.

Выражение (7) переходит в выражение (2) при

$$L(T_w - T_\infty) \ll 1.$$

Но так как разность температур всегда больше единицы, то, выходит, постоянная L должна быть много меньше единицы.

Перепишем равенство (7):

$$q = \alpha(T_w - T_\infty) + \alpha L(T_w - T_\infty)^2. \quad (8)$$

Из выражения (8) видно, что поверхностная плотность теплового потока как функция разности температур $T_w - T_\infty$ представляет собой параболу. Исследование на экстремум показывает, что минимум функции находится в области отрицательной разности температур. Нас же интересует область положительных значений $T_w - T_\infty$. Зададимся вопросом, какой допустим разброс экспериментальных данных при теплотехнических измерениях и обобщениях. Если принять данную величину в 20 %, то это означает, что при вычислениях по формулам (2) и (8), т. е. по линейной и квадратичной зависимости, разница будет лежать в пределах погрешности экспериментов. Формально из уравнения (8) следует вычесть (2) и поделить все на равенство (2). Частное от деления не должно превышать 0,2. В результате выполнения этих несложных расчетов можно прийти к заключению, что величина L имеет порядок 10^{-2} при порядке разности температур 10^1 .

Из изложенного выше можно заключить, что модель Ньютона — Рихмана (закон охлаждения Ньютона — Рихмана) справедлива только при малых разностях температур $T_w - T_\infty$, т. е. в области значений $T_w - T_\infty$, когда зависимость (6) вырождается в (2). При малых разностях температур возникновение конвективных течений маловероятно. Передача тепла осуществляется путем теплопроводности. Говорить о конвективных течениях не приходится. Кроме того, возмущения, вносимые в рассматриваемую систему, должны быть слабыми (слабощными), такими, чтобы система не развивалась в направлении возмущения.

Эксперименты, проведенные еще в начале XIX века, подтверждают изложенное выше. Так, Д. Дальтон, проводивший опыты по охлаждению тел, имевших температуру более высокую, чем в опытах Рихмана, обнаружил, что соотношение (2) — закон охлаждения Ньютона — Рихмана — становится неверным при высоких температурах и приближенным при низких [7]. По исследованиям П. Л. Дюлонга и А. Т. Пти, падение температуры тел, заключенных в баллоне при температуре 240°C , в шесть раз больше, чем потеря тепла при температуре тела 80°C при тех же условиях, тогда как по формуле Ньютона — Рихмана получается результат лишь в три раза больший. Заметим, если пользоваться для расчета экспоненциальной зависимостью (6), то результаты имеют тот же порядок, что и в опытах П. Л. Дюлонга и А. Т. Пти. Модель (6) более точно описывает охлаждение тел.

Для расчета передачи тепла конвекцией современные исследователи пользуются выражением

$$q = \alpha(T_w - T). \quad (9)$$

По форме оно не отличается от модели Ньютона — Рихмана (2). Различия заключены в толковании смысла температуры T . В учебниках по теплопередаче [1, 3, 4] указывается, что T — это «температура окружающей тело жидкой или газообразной среды». В научной литературе приводится уточнение, что это температура жидкости вдали от стенки [6] или средняя температура жидкости по сечению [2]. Существует и такая точка зрения, что следует договориться в каж-

дой задаче, что понимать под T : среднюю по сечению канала, среднemasсовую температуру жидкости или постоянную по сечению температуру жидкости на входе в обогреваемый участок трубы. Выбор зависит от характера задачи и производится лишь из соображений удобства расчетов [6]. При этом выражение (9) именуют законом охлаждения Ньютона — Рихмана.

Однако, выражение, претендующее на название закона, должно удовлетворять многим требованиям. Одно из них состоит в том, что оно должно выражать связь между независимыми величинами. Представляется, что при нагревании (охлаждении) жидкости в трубах (каналах) температура жидкости вдали от стенки, средняя по сечению и среднemasсовая температура зависят от температуры стенки T_w и температуры в предшествующем сечении. Температура T не является независимой величиной. Да и что это за физический закон, когда T выбирается лишь из соображений удобства расчетов?! Повторимся, в модели Ньютона — Рихмана (2) температура окружающей среды T_∞ — это динамически равновесная, не меняющаяся в процессе теплообмена температура всей системы. Тепло, подводимое к системе, не меняет ее внутренней энергии.

При нагревании среды в каналах все подводимое тепло идет на изменение внутренней энергии и, соответственно, температуры. Температура T меняется от одного сечения канала к другому. У системы в канале нет единой температуры T_∞ , которая бы в процессе теплообмена не меняла своего значения. В некоторых ситуациях выражение (2) становится принципиально неверным. Так, например, при $q = const$ плотность теплового потока не является функцией разности температур, а наоборот, и T_w , и T_∞ являются функцией поверхностной плотности теплового потока q .

Равенство (9) только внешне напоминает закон охлаждения Ньютона — Рихмана (2). Оно не является законом и скорее напоминает некоторое выражение, которое экспериментами в одних ситуациях может подтверждаться, а в других нет. Его использование для расчета конвективного теплообмена на основе эмпирического определения коэффициента теплообмена a вместе с выражением, подобным закону Ома для участка электрической цепи, позволило единообразно вести расчет теплообменных устройств. Но для этого понадобились тысячи экспериментальных исследований и разработка теории подобия применительно к явлениям передачи тепла. В итоге сложилась ситуация, когда конструкторы вынуждены пользоваться исключительно экспериментальными данными, которые представляются в виде громоздких степенных безразмерных комплексов. Однако понимание физической сущности явлений оставляет желать лучшего.

Библиографический список

1. *Балайка Б., Сикора К.* Процессы теплообмена в аппаратах химической промышленности. М.: Машгиз, 1962. 352 с.
2. *Гребер Г., Эрк С.* Основы учения о теплообмене. М.; Л., 1936. 327 с.
3. *Исаченко В. П., Осипова В. А., Сукомел А. С.* Теплопередача. М.: Энергоиздат, 1981. 424 с.
4. *Михеев М. А., Михеева И. М.* Основы теплопередачи. М.: Энергия, 1973. 320 с.
5. *Ньютон И.* Математические начала натуральной философии. Оптика. Оптические лекции: (избранные места). Л.: Изд-во П. П. Сойкина, 1929. 71 с.
6. *Петухов Б. С.* Теплообмен и сопротивление при ламинарном течении жидкости в трубах. М.: Энергия, 1967. 411 с.
7. *Рихман В.* Труды по физике. М.: Изд-во АН СССР, 1956. 711 с.

МАТЕМАТИКА

76 • *Вестник Ивановского государственного университета*

80 • *Вестник Ивановского государственного университета*

82 • *Вестник Ивановского государственного университета*

84 • *Вестник Ивановского государственного университета*

86 • *Вестник Ивановского государственного университета*

Математика • 117

Математика • 119

Математика • 121

Математика • 123

Математика • 125

Математика • 127

2010. Вып. 2. Биология. Химия. Физика. Математика •

120 • *Вестник Ивановского государственного университета*

122 • *Вестник Ивановского государственного университета*

124 • *Вестник Ивановского государственного университета*

126 • *Вестник Ивановского государственного университета*

• *Серия «Естественные, общественные науки»*

И в законе охлаждения Ньютона — Рихмана, и в нашем обыденном представлении температура T_∞ — это температура среды на достаточно большом (с формальной точки зрения бесконечном) удалении от границ рассматриваемой физической системы. На некоторых границах, где имеются источники или стоки тепла, температура может быть больше или меньше T_∞ . Но, по мере удаления от источников (стоков), она приобретает значение T_∞ , соответствующее не равновесному в термодинамическом отношении значению, а стационарному (может быть, его можно назвать динамически равновесным значением T_∞). Численное значение T_∞ зависит от многих причин. Например, от способности системы воспринимать тепло (теплоемкость), вида процесса теплообмена ($p = const$, $V = const$ и т. п.), способа передачи тепла (конвекция, теплопроводность, лучеиспускание) и, что очень существенно, от числа частиц, составляющих систему (количество молей).

Если находящаяся в стационарном состоянии система с температурой T_∞ вступает в тепловое взаимодействие с другой системой типа стеклянного шара (как у В. Рихмана), то передаваемой от сферы энергии может оказаться недостаточно, чтобы изменить температуру помещения T_∞ . Температура, как это принято сейчас считать, является мерой средней кинетической энергии хаотического движения частицы системы. Надо поступающую от сферы энергию поделить на колоссальное число частиц, составляющих систему (воздух помещения). Ввиду того что сферы в опытах были малых размеров и относительно низких температур, их энергии было недостаточно, чтобы изменить температуру T_∞ . У поверхности сферы температура T была больше T_∞ ($T > T_\infty$), но она быстро убывала с расстоянием x от поверхности и вдали (теоретически $x \rightarrow \infty$) становилась равной $T = T_\infty$. Ситуация напоминает процесс охлаждения стакана чая в помещении или океан, в котором плавают одиночные корабли, например авианосцы. Они выделяют тепло, но этой энергии недостаточно, чтобы изменить температуру океана в целом.

Важно отметить, что соотношение (2) связывает три независимые величины: поверхностную плотность теплового потока q , температуру стенки T_w и неизменную в процессе теплообмена температуру окружающей среды T_∞ . В таком виде соотношение (2) как бы претендует на название закона. Правда, из этого закона не следует, на каком расстоянии x от стенки устанавливается значение температуры T_∞ . Можно предположить, что это расстояние невелико. Это означает, что изменение температуры с расстоянием x от стенки подчиняется, например, экспоненциальному закону. Примем закон изменения температуры $T(x)$ в виде

$$T = T_w - (T_w - T_\infty)(1 - e^{-\beta x}), \quad (3)$$

где β — некоторая постоянная.

Нетрудно проверить, что функция (3) удовлетворяет требуемым граничным условиям:

если $x = 0$, то $T = T_w$;

если $x \rightarrow \infty$, то $T = T_\infty$.

Согласно закону Фурье (1) поверхностная плотность потока тепла q пропорциональна градиенту температуры ∇T . В одномерном случае равенство (1) можно записать в виде

$$q = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x}, \quad (4)$$

где λ — коэффициент теплопроводности.

С учетом (3) выражение (4) (после разложения экспоненты в ряд Маклорена в линейном приближении) принимает вид (5), совпадающий с законом охлаждения Ньютона — Рихмана:

$$q = \lambda \cdot \beta (T_w - T_\infty) = \alpha (T_w - T_\infty). \quad (5)$$

Постоянная β имеет размерность $1/\text{м}$, а произведение $\lambda \cdot \beta$ имеет размерность коэффициента теплообмена a .

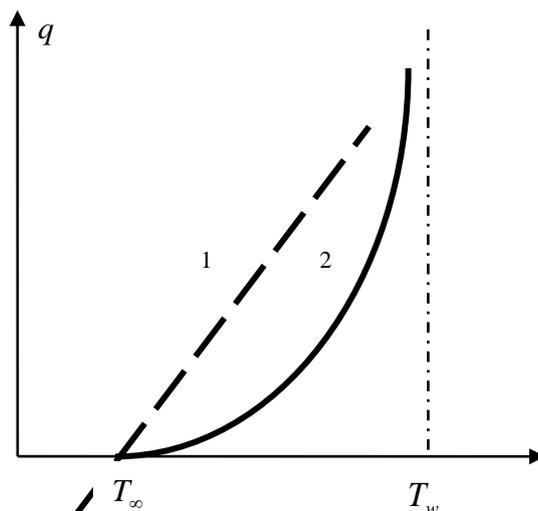
Выходит, что закон охлаждения Ньютона — Рихмана (1) является следствием закона Фурье, когда температура окружающей среды после теплового взаимодействия остается неизменной.

Закон Фурье (4) справедлив при малых градиентах температуры, когда имеет место перенос тепла теплопроводностью. Соответственно, закон Ньютона — Рихмана, скорее всего, справедлив при малых разностях температур $T_w - T_\infty$ и молекулярном переносе тепла.

Обратим внимание на то, что в равенстве (2) при неизменной температуре помещения T_∞ плотность теплового потока будет тем выше, чем выше температура охлаждаемой стенки T_w . Однако зависимость эта не должна быть линейной. В самом деле, если принять зависимость линейной (линия 1 на рисунке), то это означает, что поверхностная плотность потока тепла q может быть отрицательной, т. е. температура стенки T_w при охлаждении стенки может оказаться ниже температуры окружающей среды T_∞ , что в реальности не наблюдается. Она может асимптотически приближаться к температуре окружающей среды. Линия 1 на рисунке должна быть заменена на плавную кривую 2. Эта кривая должна удовлетворять граничным условиям:

если $T_w = T_\infty$, то $q = 0$;

если $T_w \rightarrow \infty$, то $q \rightarrow \infty$.



Зависимость поверхностной плотности теплового потока от температуры стенки

Соответственно, функцией, описывающей теплообмен и удовлетворяющей этим условиям, может быть выражение

$$q = \alpha(T_w - T_\infty) \exp\langle L(T_w - T_\infty) \rangle, \quad (6)$$

где α и L — некоторые постоянные, позволяющие обеспечить одну и ту же размерность в правой и левой части уравнения (6).

Получается, что вместо линейной модели Ньютона — Рихмана (2) описывать теплообмен следует более сложной моделью (6). В случае малого показателя экспоненту можно разложить в ряд и, если ограничиться линейным приближением при разложении, вместо выражения (6) можно записать

$$q = \alpha(T_w - T_\infty) \langle 1 + L(T_w - T_\infty) \rangle. \quad (7)$$

При малых разностях температур и малом значении постоянной L вторым слагаемым справа в выражении (7) можно пренебречь. Придем к традиционному уравнению Ньютона — Рихмана (2).

Чтобы как-то сравнить модели Ньютона — Рихмана с экспоненциальной (6) и квадратичной (7), необходимо знать значение постоянной L . Поскольку ни экспериментальных, ни теоретических работ в этом направлении не проводилось, попытаемся определить L хотя бы по порядку величины.

Выражение (7) переходит в выражение (2) при

$$L(T_w - T_\infty) \ll 1.$$

Но так как разность температур всегда больше единицы, то, выходит, постоянная L должна быть много меньше единицы.

Перепишем равенство (7):

$$q = \alpha(T_w - T_\infty) + \alpha L(T_w - T_\infty)^2. \quad (8)$$

Из выражения (8) видно, что поверхностная плотность теплового потока как функция разности температур $T_w - T_\infty$ представляет собой параболу. Исследование на экстремум показывает, что минимум функции находится в области отрицательной разности температур. Нас же интересует область положительных значений $T_w - T_\infty$. Зададимся вопросом, какой допустим разброс экспериментальных данных при теплотехнических измерениях и обобщениях. Если принять данную величину в 20 %, то это означает, что при вычислениях по формулам (2) и (8), т. е. по линейной и квадратичной зависимости, разница будет лежать в пределах погрешности экспериментов. Формально из уравнения (8) следует вычесть (2) и поделить все на равенство (2). Частное от деления не должно превышать 0,2. В результате выполнения этих несложных расчетов можно прийти к заключению, что величина L имеет порядок 10^{-2} при порядке разности температур 10^1 .

Из изложенного выше можно заключить, что модель Ньютона — Рихмана (закон охлаждения Ньютона — Рихмана) справедлива только при малых разностях температур $T_w - T_\infty$, т. е. в области значений $T_w - T_\infty$, когда зависимость (6) вырождается в (2). При малых разностях температур возникновение конвективных течений маловероятно. Передача тепла осуществляется путем теплопроводности. Говорить о конвективных течениях не приходится. Кроме того, возмущения, вносимые в рассматриваемую систему, должны быть слабыми (слабомощными), такими, чтобы система не развивалась в направлении возмущения.

Эксперименты, проведенные еще в начале XIX века, подтверждают изложенное выше. Так, Д. Дальтон, проводивший опыты по охлаждению тел, имевших температуру более высокую, чем в опытах Рихмана, обнаружил, что соотношение (2) — закон охлаждения Ньютона — Рихмана — становится неверным при высоких температурах и приближенным при низких [7]. По исследованиям П. Л. Дюлонга и А. Т. Пти, падение температуры тел, заключенных в баллоне при температуре 240°C , в шесть раз больше, чем потеря тепла при температуре тела 80°C при тех же условиях, тогда как по формуле Ньютона — Рихмана получается результат лишь в три раза больший. Заметим, если пользоваться для расчета экспоненциальной зависимостью (6), то результаты имеют тот же порядок, что и в опытах П. Л. Дюлонга и А. Т. Пти. Модель (6) более точно описывает охлаждение тел.

Для расчета передачи тепла конвекцией современные исследователи пользуются выражением

$$q = \alpha(T_w - T). \quad (9)$$

По форме оно не отличается от модели Ньютона — Рихмана (2). Различия заключены в толковании смысла температуры T . В учебниках по теплопередаче [1, 3, 4] указывается, что T — это «температура окружающей тело жидкой или газообразной среды». В научной литературе приводится уточнение, что это температура жидкости вдали от стенки [6] или средняя температура жидкости по сечению [2]. Существует и такая точка зрения, что следует договориться в каждой задаче, что понимать под T : среднюю по сечению канала, среднemasсовую температуру жидкости или постоянную по сечению температуру жидкости на входе в обогреваемый участок трубы. Выбор зависит от характера задачи и производится лишь из соображений удобства расчетов [6]. При этом выражение (9) именуют законом охлаждения Ньютона — Рихмана.

2010. Вып. 2. Биология. Химия. Физика. Математика •

- *Вестник Ивановского государственного университета*

- *Серия «Естественные, общественные науки»*

АННОТАЦИИ

В. А. Исаев

КРОВСОСУЩИЕ КОМАРЫ КОМПЛЕКСА CULEX PIPIENS (DIPTERA, CULICIDAE) В ВЕРХНЕВОЛЖЬЕ

Проанализированы вопросы идентификации видов комплекса *Culex pipiens* в Верхневолжье посредством различных методов.

Ключевые слова: комары, идентификация, *Culex pipiens*, *Culex torrentium*.

В. Н. Зарипов, М. О. Барينو

ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОЭНЦЕФАЛОГРАММЫ СТУДЕНТОВ С РАЗНЫМИ ТИПАМИ ТЕМПЕРАМЕНТА В ХОДЕ УЧЕБНОГО ПРОЦЕССА

Приводятся данные об особенностях изменений электроэнцефалографических показателей под влиянием зачетной недели и сдачи экзаменов у студенток с разными типами темперамента.

Ключевые слова: электроэнцефалография (ЭЭГ), типы темперамента, зачетная неделя, сдача экзаменов.

С. Е. Львов, В. Н. Зарипов, В. И. Шапин, А. Ф. Богомолов

КОМПЛЕКСНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ВЛИЯНИЯ ЛОКАЛЬНОЙ РЕЗОНАНСНОЙ ВИБРАЦИИ НА БИОЛОГИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ В МЕЖВУЗОВСКОЙ НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ ЛАБОРАТОРИИ «БИОМЕХАНИКА»

Представлены результаты совместных научных работ сотрудников вузов г. Иванова по разработке новых методов и средств диагностики и лечения заболеваний и травм опорно-двигательной системы на основе комплексных исследований влияния локальной резонансной вибрации на биологические системы.

Ключевые слова: межвузовское сотрудничество, резонансная вибрация, физиология человека, биомеханика опорно-двигательной системы.

Д. Н. Воронин, Ю. А. Звонарева, М. Г. Кравченко, И. С. Момонт

ФОРМИРОВАНИЕ «АПТЕКАРСКОГО ОГОРОДА» БОТАНИЧЕСКОГО САДА ИВГУ

В экспозиции «Аптекарский огород» ботанического сада ИвГУ в 2009 г. отмечено 46 видов высших сосудистых растений, относящихся к 24 семействам, из которых самым многочисленным является *Lamiaceae*. Проведен систематический, биоморфологический и географический анализ видового разнообразия.

Ключевые слова: лекарственные растения, аптекарский огород, ботанический сад ИвГУ.

*Е. Ю. Егорова, В. В. Чемоданов, Е. Е. Краснова,
В. И. Демидов, А. П. Беляков*

МОРФОЛОГИЧЕСКИЕ ПОКАЗАТЕЛИ ХРОНИЧЕСКОГО ГАСТРОДУОДЕНИТА У ДЕТЕЙ ШКОЛЬНОГО ВОЗРАСТА

После обследования 225 детей с хроническим гастродуоденитом установлено, что с увеличением возраста у этих больных чаще встречается эритематозное и эрозивные формы воспаления слизистой оболочки желудка и 12-перстной кишки.

Ключевые слова: хронический гастродуоденит, воспаление слизистой оболочки желудка и 12-перстной кишки.

Ю. И. Баженов

СТРЕСС И БАРЬЕРНЫЕ ФУНКЦИИ ОРГАНИЗМА

Рассматривается современное состояние проблемы стресса и его влияния на здоровье человека. Анализируются некоторые защитные реакции и механизмы, снижающие патологическое действие стресса на организм.

Ключевые слова: стресс, организм, гипоталамус, гипофиз.

Н. И. Гиричева, Ю. С. Медведева, А. В. Бардина

ИЗМЕНЕНИЕ ХАРАКТЕРА ВОДОРОДНОЙ СВЯЗИ В ОРТО-НИТРОБЕНЗОЛСУЛЬФОНАМИДЕ ПРИ ПЕРЕХОДЕ «КРИСТАЛЛ—ГАЗ»

Квантово-химическим методом уровня V3LYP/сс-pVTZ найдены 4 конформера молекулы 2-нитробензолсульфонамида, в двух из которых образуется внутримолекулярная водородная связь. В кристаллическом 2-НБСА имеются межмолекулярные водородные связи, которые разрушаются при переходе «кристалл—газ». Межмолекулярные Н-связи в кристалле сильнее, чем внутримолекулярные водородные связи в свободных молекулах.

Ключевые слова: 2-нитробензолсульфонамид, квантовая химия, конформер, молекулярная структура.

Н. И. Гиричева, А. В. Бардина, Ю. С. Медведева

ВЛИЯНИЕ ВЗАИМНОГО ПОЛОЖЕНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ГРУПП НА ЧИСЛО КОНФОРМЕРОВ МОЛЕКУЛ НИТРОЗАМЕЩЕННЫХ БЕНЗОЛСУЛЬФОКИСЛОТЫ

Расчеты V3LYP/сс-pVTZ предсказывают существование одного конформера молекулы бензолсульфокислоты (БСК), одного конформера молекулы 4-нитробензолсульфокислоты (4-НБСК), двух конформеров молекулы 3-нитробензолсульфокислоты (3-НБСК), пяти конформеров молекулы 2-нитробензолсульфокислоты (2-НБСК). Один из пяти конформеров молекулы 2-НБСК стабилизирован внутримолекулярной водородной связью между атомом Н группы ОН и атомом О группы NO₂.

Ключевые слова: бензолсульфокислота, нитрозамещенные бензолсульфокислоты, конформер, квантовая химия, молекулярная структура, заместитель.

Е. А. Лапыкина, Н. И. Гиричева

ВЫБОР БАЗИСА ДЛЯ РАСЧЕТА ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ МОЛЕКУЛ ТРИЙОДИДОВ ЛАНТАНОИДОВ

Имеющиеся к настоящему времени результаты квантово-химических расчетов не воспроизводят экспериментальные величины межъядерных расстояний Ln-I в молекулах трийодидов лантаноидов. Нами выполнено исследование и найдено оптимальное сочетание «метод-базис», которое позволяет воспроизвести длины связей в молекулах LnI₃.

Ключевые слова: трийодиды лантаноидов, квантово-химические расчеты, частоты колебаний, геометрические параметры.

А. В. Казак, Н. В. Усольцева, В. В. Быкова, А. С. Семейкин, С. Г. Юдин

СТРУКТУРА ПЛАВАЮЩИХ СЛОЕВ МЕЗОЗАМЕЩЕННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ПОРФИНА

С целью исследования влияния особенностей молекулярной структуры на мезоморфизм и надмолекулярную упаковку в тонких пленках производных порфина, изучено 2 новых мезозамещенных тетрафенилпорфина с замещением ($-OC_4H_9$) в *пара*- или *орто*позициях. Изучены мезоморфизм объемных образцов, зависимость от структуры порфиринов и положения заместителей. Показано влияние положения заместителей на надмолекулярную организацию мезозамещенных порфиринов в тонких пленках.

Ключевые слова: производные порфина, жидкокристаллические свойства, структура, пленки Ленгмюра — Блоджетт.

В. М. Петров, В. Н. Петрова, С. Н. Иванов

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ МОЛЕКУЛЫ 2-НАФТАЛИНСУЛЬФОНИЛХЛОРИДА

Выполнено совместное электронографическое и квантово-химическое исследование строения молекулы 2-нафталинсульфонилхлорида (2-НСХ). В газовой фазе 2-НСХ присутствует в виде двух устойчивых конформеров с различным расположением связи S-Cl относительно плоскости нафталиновых колец.

Ключевые слова: 2-нафталинсульфонилхлорид, конформер, молекулярная структура, внутреннее вращение, потенциальные функции, газовая электронография, квантовая химия, масс-спектрометрия.

Е. Н. Крылов

СООТНОШЕНИЕ МЕЖДУ ЗАРЯДАМИ НА АТОМАХ ЗАМЕЩЕННЫХ БЕНЗОЛА И КОНСТАНТАМИ ЗАМЕСТИТЕЛЕЙ ПО ГАММЕТУ И ГАММЕТУ — БРАУНУ

Проведен расчет атомных зарядов в моно- и дизамещенных бензола в рамках схем Малликена и NBO, а также на основе методов CHelpG и МК, основанных на электростатическом потенциале. Показано, что корреляции по

Гаммету и Гаммету — Брауну могут иметь место только в отдельных случаях, а качество этих соотношений весьма зависит от уровня теоретического метода и размера базиса при квантовохимическом расчете.

Ключевые слова: моно- и дизамещенные бензола, квантовохимический расчет, схема Малликена, NBO, CNelpG, Merz-Kollman, корреляции по Гаммету и Гаммету — Брауну.

М. В. Ключев, М. Г. Абдуллаев, З. Ш. Абдуллаева

МЕТАЛЛОПОЛИМЕРЫ В СИНТЕЗЕ ДИКАИНА

Показано, что дикаин можно получить в одну стадию из этилового эфира п-нитробензойной кислоты, совмещая реакции гидрирования, гидроаминирования и переэтерификации. Выход дикаина составляет до 94 %.

Ключевые слова: катализ, дикаин, гидрирование, гидрогенизационное аминирование, переэтерификация, металлполимерные катализаторы.

Л. В. Курицын

К РАСЧЕТУ СТАТИСТИЧЕСКОГО ФАКТОРА В КИНЕТИКЕ РЕАКЦИЙ ПОЛИФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

Обсуждаются уравнения для расчета статистических факторов в кинетике полифункциональных соединений. Показано, что статистические факторы могут быть меньше или больше единицы и зависят от числа функциональных групп реагентов.

Ключевые слова: статистический фактор, кинетика.

А. А. Зайцев, В. Н. Афанасьев, М. А. Безумова

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ РЕШЕТОЧНЫХ СИСТЕМ К ТЕОРИИ ВЯЗКОСТИ ЖИДКОСТИ

Путем применения методов решеточных систем к теории вязкости показана согласованность подходов Эйринга и Бачинского. Получено выражение для вязкости жидкостей, в которых взаимодействие молекул описывается потенциалом Леннарда — Джонса. Проведена проверка выведенной формулы для вязкости, показавшая хорошее совпадение теории и опыта.

Ключевые слова: внутреннее трение, решеточная теория, жидкость, статистическая сумма.

М. И. Давидзон

О ЗАКОНЕ ОХЛАЖДЕНИЯ НЬЮТОНА — РИХМАНА

Показано, что закон охлаждения Ньютона — Рихмана является математической моделью для приближенного описания теплообмена тела с окружающей средой неизменной температуры. При этих условиях он становится следствием закона Фурье. Обращено внимание на границы справедливости

закона. Показана некорректность использования этой модели для расчета конвективного теплообмена в каналах.

Ключевые слова: Ньютон, Рихман, коэффициент теплообмена, конвективный теплообмен.

Д. Н. Азаров

О ПОЧТИ АППРОКСИМИРУЕМОСТИ КОНЕЧНЫМИ p -ГРУППАМИ АБЕЛЕВЫХ ГРУПП

Для абелевой группы получено необходимое и достаточное условие почти аппроксимируемости конечными p -группами.

Ключевые слова: абелева группа, почти аппроксимируемость конечными p -группами.

А. С. Белов

НЕУЛУЧШАЕМОСТЬ НЕКОТОРЫХ КОЭФФИЦИЕНТНЫХ УСЛОВИЙ РАВНОМЕРНОЙ СХОДИМОСТИ ТРИГОНОМЕТРИЧЕСКОГО РЯДА

Доказывается неулучшаемость полученных ранее достаточных условий на коэффициенты тригонометрического ряда для равномерной сходимости (ограниченности) его частных сумм.

Ключевые слова: тригонометрические ряды, равномерная сходимость.

М. Ю. Гайворонская, Е. В. Соколов

О ФИНИТНОЙ ОТДЕЛИМОСТИ ЦИКЛИЧЕСКИХ ПОДГРУПП HNN-РАСШИРЕНИЙ ГРУПП

В случае, когда HNN-расширение G удовлетворяет хорошо известному фильтрационному условию, получен критерий финитной отделимости циклической подгруппы группы G . Найдены также некоторые достаточные условия максимальности семейства финитно отделимых циклических подгрупп группы G , имеющие место при различных ограничениях, накладываемых на эту группу.

Ключевые слова: финитно аппроксимируемые группы, финитно отделимые подгруппы, циклические подгруппы HNN-расширения групп.

Ю. В. Груздева, С. В. Пухов

ПАРЕТО-ОПТИМАЛЬНЫЕ РЕШЕНИЯ ВЫПУКЛЫХ ЗАДАЧ ВЕКТОРНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ

Получены необходимые и достаточные условия для слабого Парето-оптимального решения в выпуклой задаче векторной оптимизации.

Ключевые слова: упорядоченное векторное пространство, положительный конус, векторная оптимизация, минимум по Парето.

Е. Д. Логинова, Д. И. Молдаванский

О ПЕРЕСЕЧЕНИИ ПОДГРУПП КОНЕЧНОГО ИНДЕКСА В СВОБОДНЫХ ПРОИЗВЕДЕНИЯХ ГРУПП С КОММУТИРУЮЩИМИ ПОДГРУППАМИ

Для произвольной группы, являющейся свободным произведением двух групп с коммутлирующими подгруппами, найдено описание пересечения всех нормальных подгрупп конечного индекса.

Ключевые слова: финитная аппроксимируемость, свободное произведение групп (с коммутлирующими подгруппами), проконечное замыкание, нормальное замыкание.

Д. И. Молдаванский

О ПЕРЕСЕЧЕНИИ ПОДГРУПП КОНЕЧНОГО p -ИНДЕКСА В ГРУППАХ БАУМСЛАГА — СОЛИТЭРА

Для групп с одним определяющим соотношением, составляющих семейство групп Баумслэга — Солитэра, дано описание пересечения подгрупп конечного p -индекса. В качестве следствия получено новое доказательство известного критерия аппроксимируемости групп этого семейства конечными p -группами.

Ключевые слова: группы Баумслэга — Солитэра, аппроксимируемость конечными p -группами, нормальное замыкание.

С. И. Хашиш

ОЦЕНКА КАЧЕСТВА СЕГМЕНТАЦИИ ИЗОБРАЖЕНИЯ

Предлагается метод нахождения численной оценки качества алгоритма сегментации изображения. Алгоритм оценивается двумя числами: средним размером сегмента и долей «неправильных» точек. Приводятся оценки качества сегментации для трех различных несложных алгоритмов сегментации: на квадраты, с помощью триангуляции Делоне и через «кристаллизацию».

Ключевые слова: сегментация изображений.

Н. И. Яцкин

К ТОПОЛОГИЧЕСКОЙ ТРАКТОВКЕ АППРОКСИМАЦИОННЫХ СВОЙСТВ ГРУПП, СВЯЗАННЫХ С ВЕРБАЛЬНЫМИ ПОДГРУППАМИ

Вводится и изучается понятие вербально финитно аппроксимируемой (относительно некоторого многообразия групп) группы.

Ключевые слова: многообразие групп, вербальная подгруппа, маргинальная подгруппа, аппроксимант, вербальная финитная аппроксимируемость, вербальная финитная отделимость.

SUMMARIES

V. A. Isaev

MOSQUITOES (DIPTERA, CULICIDAE) OF CULEX PIPIENS COMPLEX (DIPTERA, CULICIDAE) IN UPPER VOLGA REGION

The questions of the identification Culex pipiens complex (Diptera, Culicidae) in Upper Volga region by means of various methods were analysed.

Key words: Culex pipiens, Culex torrentium.

V. N. Zaripov, M. O. Barinova

FEATURES ELECTROENCEPHALOGRAMM OF STUDENTS WITH DIFFERENT TYPES OF TEMPERAMENT IN THE COURSE EDUCATIONAL PROCESS

The aim of the studying was to investigate of specific changes of the electroencephalographic parameters of students by influence of preexamination week and examinations. On the bases of our researching we have established that the features of electroencephalographic parameters depend on the tape of temperament of student's organism.

Key words: electroencephalography (EEG), temperament types, test week, passing examinations.

S. Ye. Lvov, V. N. Zaripov, V. I. Shapin, A. F. Bogomolov

COMPLEX RESEARCHES OF INFLUENCE OF THE LOCAL RESONANT VIBRATION ON BIOLOGICAL SYSTEMS IN THE INTERUNIVERSITY RESEARCH LABORATORIES «BIOMECHANICS»

Results of joint scientific works of employees of high schools of Ivanovo city on working out of new methods and diagnostic aids and treatments of diseases and traumas of oporno-impellent system on the basis of complex researches of influence of local resonant vibration on biological systems are presented.

Key words: interuniversity cooperation, resonant vibration, human physiology, biomechanics of oporno-impellent system.

D. N. Voronin, Yu. A. Zvonaryova, M. G. Kravchenko, I. S. Momont

**CREATION OF «PHARMACEUTICAL KITCHEN-GARDEN»
ON THE BASIS OF BOTANICAL GARDEN
OF IVANOVO STATE UNIVERSITY**

In the exposition «Pharmaceutical kitchen-garden» on the territory of botanical garden of Ivanovo University in 2009 there have been noted 46 species of higher vascular plants referring to 24 families of which the most numerous ones by the number of species is Lamiaceae. A systematic, biomorphological and geographical analysis of flora has been carried out.

Key words: herbs, Pharmaceutical kitchen-garden, botanical garden of Ivanovo University.

*Ye. Yu. Egorova, V. V. Chemodanov, Ye. Ye. Krasnova,
V. I. Demidov, A. P. Belyakov*

**MORPHOLOGICAL INDICATORS OF CHRONIC GASTRODUODENTIS
AMONG THE CHILDREN OF THE SCHOOL AGE**

After inspection of 225 children with chronic gastroduodenitis it is established that with increase of age of these patients erythematosis and erosive forms of an inflammation of a mucous membrane of a stomach and a duodenal gut is met more often.

Key words: chronic gastroduodenitis, an inflammation of a membrane of a stomach and a duodenal gut.

Yu. I. Bazhenov

STRESS AND BARRIER FUNCTIONS OF THE ORGANISM

The modern situation of stress problem and its influence on the health of a person is considered. Some defending reaction of organism and mechanisms which make less the pathological influence of stress on organism are analyzed.

Key words: stress, organism, hypothalamus, hypophysis.

N. I. Giricheva, Yu. S. Medvedeva, A. V. Bardina

**CHANGE OF HYDROGEN BOND CHARACTER
IN «CRYSTAL — GAS» TRANSITION
IN 2-NITROBENZENESULFONAMIDE**

Four conformers of 2-nitrobenzenesulphonamide molecule were found by B3LYP/cc-pVTZ method. Two conformers have intermolecular hydrogen bond. In crystal of this compound intramolecular hydrogen bonds are present, which are broken with «crystal — gas» transition. Intramolecular hydrogen bonds in crystal are stronger than intermolecular hydrogen bonds in free molecules.

Key words: 2-nitrobenzenesulphonamide, quantum chemical calculations, molecular structure.

N. I. Giricheva, A. V. Bardina, Yu. S. Medvedeva

EFFECT OF FUNCTIONAL GROUPS RELATIVE POSITION ON THE NUMBER OF CONFORMERS OF NITROSUBSTITUTE FOR BENZENESULPHONIC ACID MOLECULES

Theoretical computations B3LYP/cc-pVTZ predict the existence of one conformer of benzenesulphonic acid (BSA), one conformer of 4-nitrobenzenesulphonic acid (4-NBSA), two conformers of 3-nitrobenzenesulphonic acid (3-NBSA), and five conformers of 2-nitrobenzenesulphonic acid (2-NBSA). One of the five conformers of 2-NBSA is stabilized by intermolecular hydrogen bond between H atom in OH group and O atom in NO₂ group.

Key words: benzenesulphonic acid, nitrosubstitute for benzenesulphonic acid, conformer, quantum chemistry, molecular structure, substitute.

Ye. A. Lapykina, N. I. Giricheva

THE CHOICE OF BASIS SET FOR GEOMETRY PARAMETERS OF LANTHANIDES TRIODEDES MOLECULES CALCULATIONS

At present time experimental values of Ln-I internuclear distances of lanthanides triodedes molecules couldn't reproduce by quantum-chemical calculations. We found optimal combinations of method/basis set, which allowed calculate bond lengths Ln-I of LnI₃ with split-hair accuracy.

Key words: lanthanide triodides, quantum chemical calculations, vibration frequencies, geometrics parameters.

A. V. Kazak, N. V. Usoltseva, V. V. Bykova, A. S. Semeykin, S. G. Yudin

THE STRUCTURE OF FLOATING LAYERS OF MESOSUBSTITUTED PORPHYRINE DERIVATIVES

Two new *meso*substituted tetraphenylporphyrines with substitution in *para*- or *ortho*positions (–OC₄H₉) were studied with the aim of investigation of the influence of molecular structure peculiarities on mesomorphism and supramolecular packing in the thin films. Bulk samples' mesomorphism and its dependence of porphyrine structure and substituent position was studied. The influence of substituent position on supramolecular organization of *meso*substituted porphyrines in thin films was shown.

Key words: porphyrine derivatives, liquid crystal properties, structure, Langmuir — Blodgett films.

V. M. Petrov, V. N. Petrova, S. N. Ivanov

STUDY OF 2-NAPHTHALENE SULFONYL CHLORIDE MOLECULE STRUCTURE

A combined gas-phase electron diffraction and quantum chemical study of the structure of the 2-Naphthalene sulfonyl chloride (2-NSCl) molecule is performed. At a gas phase 2-NSCl is present as two stable conformers with a various arrangement of the bond S-Cl relative to a plane of naphthalenic rings.

Key words: 2-Naphthalene sulfonyl chloride, conformer, molecular structure, internal rotation, potential functions, gas-phase electron diffraction, quantum chemistry, mass-spectrometry.

Ye. N. Krylov

CORRELATION BETWEEN CHARGE ON ATOMS IN SUBSTITUTED BENZENES AND DEPUTY CONSTANTS ON GAMMET AND GAMMET — BROWN-EQUATIONS

The calculation of atomic charges in mono- and disubstituted benzenes within the framework of schemes Malliken and NBO, as well as on base of the methods CHelpG and MK founded on electrostatic potential are carry out. It is shown that correlations on Gammet and Gammet — Brown-equations can exist only in separate events, but quality of these correlations very depends on level of the theoretical method and size of the base at quantum chemistry calculations.

Key words: mono- and disubstituted benzenes, quantum chemistry calculation, scheme of Malliken, NBO, CHelpG, Merz-Kollman, correlations on Gammet and Gammet — Brown.

M. V. Klyuev, M. G. Abdullayev, Z. Sh. Abdullayeva

METALPOLYMER CATALYSTS IN DICAIN SYNTHESYS

It is shown that dicain can be synthesized in one stage from ethyl ester of p-nitrobenzoic acid by combining hydrogenation, hydroamination and transesterrification reactions. Dicain yield is up 94 %.

Key words: catalysis, dicain, hydrogenation, hydroamination, transesterrification, metalpolymer catalysts.

L. V. Kuritsyn

TO THE CALCULATIONS OF STATISTICAL FACTOR IN THE KINETICS OF REACTIONS IN POLYFUNCTIONAL COMPOUNDS

The equations for the calculations of statistical factors in the kinetics of polyfunctional reagents have been discussed. It is shown that statistical factors may be more or less the unity and depends of the number of functional groups in the reagents.

Key words: statistical factors, kinetic.

A. A. Zaitsev, V. N. Afanasyev, M. A. Bezumova

USING LATTISE METHODS IN SOLUTION THEORY VISCOSITY OF LIQUIDS

By use methods lattice system in the case theory of viscosity was indicate consistency approaches Eiring and Bachinskiy. The expression of viscosity of liquids, with molecular interaction to circumscribe by potential of Lennard — Johns.

The check of mathematic formula which was obtained for viscosity, give nice coincidence theory and experience.

Key words: internal friction, lattice theory, fluid, sum of state.

M. I. Davidzon

ABOUT THE LAW OF COOLING BY NEWTON — RIKHMAN

It is shown, that the law of cooling by Newton — Rikhman is a mathematical model for the approached description of heat exchange of the body with the environment of invariable temperature. Under these conditions it turns out to be the consequence the Furier law. The attention is paid to the borders of justice of Newton — Rikhman law. The incorrectness of the use of this model for calculating the convective heat exchange in channels is shown.

Key words: Newton, Rikhman, heat-transfer coefficient, heat transfer by convection.

D. N. Azarov

ON THE VIRTUAL RESIDUALITY A FINITE P -GROUPS OF ABELIAN GROUPS

For abelian groups the necessary and sufficient condition to be virtually residually a finite p -group is obtained.

Key words: abelian group, virtually residually a finite p -group.

A. S. Belov

UNIMPROVABILITY CERTAIN COEFFICIENT CONDITIONS FOR UNIFORM CONVERGENCE OF TRIGONOMETRICAL SERIES

Unimprovability obtained earlier sufficient conditions on coefficients of trigonometrical series for uniform convergence (boundedness) its partial sums is proved.

Key words: trigonometrical series, uniform convergence.

M. Yu. Gaivoronskaya, Ye. V. Sokolov

ON THE SEPARABILITY OF CYCLIC SUBGROUPS IN HNN-EXTENSIONS OF GROUPS

Let G be an HNN-extension and let S be the family of all finitely separable cyclic subgroups of G . The criteria for a cyclic subgroup of G to be in S is obtained in the case when group G satisfies the well-known filtrational condition. Certain sufficient conditions of the maximality of S are found also which take place under various restrictions on group G .

Key words: residually finite groups, separable subgroups, cyclic subgroups, HNN-extensions of groups.

Yu. V. Gruzdeva, S. V. Puhov

**PARETO OPTIMAL SOLUTIONS
IN CONVEX VECTOR OPTIMIZATION PROBLEMS**

The necessary and sufficient conditions for the weak Pareto-optimal solutions in the convex vector optimization problems are obtained.

Key words: partially ordered vector space, positive cone, vector optimization, Pareto minimum, Lagrange's function, saddle point, core of a set.

Ye. D. Loginova, D. I. Moldavanskii

**ON THE INTERSECTION OF FINITE INDEX SUBGROUPS
IN FREE PRODUCTS OF GROUPS WITH COMMUTING SUBGROUPS**

For any group that is a free product of two groups with commuting subgroups the description of the intersection of all finite index normal subgroups is found.

Key words: residual finiteness, free product of groups (with commuting subgroups), profinite closure, normal closure.

D. I. Moldavanskii

**ON THE INTERSECTION OF SUBGROUPS OF FINITE p -INDEX
IN BAUMSLAG — SOLITAR GROUPS**

For any one-relator group from the family of Baumslag — Solitar groups the description of the intersection of all subgroups of finite p -index is given. As a corollary a new proof of the known criterion of residuality a finite p -group of Baumslag — Solitar groups is obtained.

Key words: Baumslag — Solitar groups, residuality a finite p -group, normal closure.

S. I. Hashin

THE ESTIMATION OF QUALITY OF SEGMENTATION OF THE MAP

The method for finding a numerical estimation of quality of algorithm of segmentation of the map is offered. The algorithm is estimated by two numbers: the average size of a segment and the proportion of «incorrect» points. Assess the quality of segmentation for three various simple algorithms for the segmentation: on the squares, using Delaunay triangulation and through «crystallization».

Key words: image segmentations.

N. I. Yatskin

**ON THE TOPOLOGICAL INTERPRETATION OF SOME RESIDUAL
GROUP PROPERTIES, ASSOCIATED WITH VERBAL SUBGROUPS**

The concept of a group being verbally residually finite (with respect to some variety of groups) is introduced and investigated.

Key words: variety of groups, verbal subgroup, marginal subgroup, residual, verbally residually finite group, verbally separable subgroup.



К 100-ЛЕТИЮ СО ДНЯ РОЖДЕНИЯ АКАДЕМИКА А. И. МАЛЬЦЕВА

В ноябре 2009 года исполняется 100 лет со дня рождения выдающегося математика академика Анатолия Ивановича Мальцева. Его работы в области алгебры и математической логики оказали и продолжают оказывать огромное влияние на развитие этих и сопредельных математических наук. Современные ученые активно используют результаты А. И. Мальцева в своих исследованиях, ссылаются на его работы, учатся по его учебникам и монографиям.

Жизнь и деятельность А. И. Мальцева более 30 лет были тесно связаны с Ивановом, Ивановским государственным педагогическим институтом, математическими сообществами города, с его общественными организациями. Здесь он воспитал большую группу учеников, организовывал и осуществлял многообразную научную, преподавательскую, общественную и просветительскую деятельность. Он избирался от Ивановской области депутатом Верховных Советов РСФСР и СССР нескольких созывов, был председателем Ивановского областного Комитета защиты мира.

После переезда в 1960 году из Иванова в Новосибирск, где начало функционировать Сибирское отделение Академии наук СССР, главной задачей А. И. Мальцева стала организация исследований по алгебре и математической логике в Сибири, и в первую очередь в Новосибирске. Здесь сформировалась — теперь всемирно известная — научная школа академика А. И. Мальцева, интенсивно работающая и в настоящее время. Наряду с крупными учеными, которых А. И. Мальцев «переманил» в Новосибирск из других городов страны, а также его учениками, в том числе из Иванова, эта школа стала пополняться воспитанниками Новосибирского государственного университета. Сейчас практически все сибирские алгебраические и логические кафедры университетов, других высших учебных заведений Сибири и Дальнего Востока сформированы учеными, прошедшими школу Мальцева. Ряд ее воспитанников работают за рубежом в самых престижных научных коллективах. В настоящее время школу

А. И. Мальцева возглавляет его ученик, выпускник НГУ, выдающийся алгебраист и логик академик Ю. Л. Ершов.

Как математик сам А. И. Мальцев воспитывался под руководством крупнейшего ученого современности академика А. Н. Колмогорова. Он был его аспирантом в Московском государственном университете и докторантом в Математическом институте им. В. А. Стеклова АН СССР. Он всю жизнь поддерживал связь с Андреем Николаевичем. Однако, как говорил сам А. Н. Колмогоров, Мальцев приехал к нему с уже сложившимся замыслом работы по математической логике. В это время А. И. Мальцевым был доказан самый знаменитый его результат — *локальная теорема* (которую часто называют теоремой компактности). Эта теорема оказалась одним из самых сильных инструментов в исследованиях как по самой математической логике, так и по алгебре, топологии и другим математическим наукам.

Зарубежные математики довольно долгое время, применяя эту локальную теорему, не ссылались на А. И. Мальцева, потому что они не могли прочитать его работы, напечатанные на русском языке в недоступных для них журналах. Например, важная работа «Об одном общем методе получения локальных теорем теории групп» напечатана в «Ученых записках» Ивановского государственного педагогического института в 1941 году.

Широкое мировое признание локальной теоремы А. И. Мальцева и ее доказательства началось с книг и статей крупного логика А. Робинсона. (См., например, его доклад на Международном конгрессе по логике, методологии и философии науки в Стэнфорде (США) в 1960 году; текст этого доклада — «Последние достижения в теории моделей» — на русском языке можно прочитать в сборнике статей «Математическая логика и ее применения», изданном в 1965 году. Или другой пример — книга А. Робинсона «Introduction to model theory and to the metamathematics of algebra», опубликованная в 1963 году; русский перевод — «Введение в теорию моделей и метаматерику алгебры» — был издан в 1967 году.) Мне приходилось встречаться с А. Робинсоном и другими крупными учеными-логиками — А. Тарским, Л. Хенкиным, Дж. Робинсоном... Они всегда отмечали огромное значение для математики работ А. И. Мальцева, их насыщенность новыми идеями и методами. В 1971 году были изданы на английском языке избранные труды А. И. Мальцева под названием «The metamathematics of algebraic systems». Наши зарубежные коллеги смогли ознакомиться с многообразием работ и научных результатов А. И. Мальцева, его математическими интересами.

Ниже я попробую кратко объяснить содержание и значение результатов А. И. Мальцева, в том числе и этой замечательной локальной теоремы.

В свои ранние годы А. И. Мальцев провел многие важнейшие исследования в области алгебры. Им плодотворно изучались теории таких классических образований, как группы, кольца и поля. Эти математические объекты возникли в XIX веке. Их изучение бурно развивалось в течение всего XX века, да и сейчас они привлекают внимание многих ученых. Они нашли широкое применение в других естественных науках, в первую очередь в физике и кристаллографии. В связи с дифференциальными уравнениями и развитием топологии математики стали изучать так называемые группы Ли (непрерывные группы). В этом направлении было много нерешенных вопросов. Л. С. Понтрягину, А. И. Мальцеву и другим уче-

ным удалось разрешить часть этих проблем. В 1946 году А. И. Мальцеву была присуждена Государственная премия за исследования в области теории групп Ли.

Отметим лишь несколько результатов А. И. Мальцева в этих направлениях: решение проблемы Ван-дер-Вардена о существовании колец без делителей нуля, не вложимых в тело; доказательство финитной аппроксимируемости свободной группы; нахождение необходимых и достаточных условий для существования точных линейных представлений групп и алгебр Ли; решение проблемы Картана о сопряженности максимальных компактных подгрупп связной группы Ли. В 1948 году А. И. Мальцев написал книгу «Основы линейной алгебры», которая стала одним из базовых учебников по линейной алгебре. По этой книге учились многие математики нашей страны.

Отталкиваясь от однотипных результатов в теории групп, колец, полей, топологических систем, универсальных алгебр и других конкретных математических структур, А. И. Мальцев приходит к идее развития общей теории систем. Он по праву является родоначальником нового направления на стыке многих математических наук. Это — теория алгебраических систем или, как иногда ее называют, теория моделей.

Основными объектами изучения в теории алгебраических систем являются различные системы математических структур и их свойства, которые можно сформулировать и записать на каком-либо логическом языке. Прилагательное «алгебраическое» здесь присутствует главным образом по историческим причинам, потому что такой подход и апробация результатов первоначально применялись в алгебре. Теперь же основой рассматриваемых алгебраических систем могут быть множества объектов любой природы, наделенные некоторым списком предикатов (отношений) и функций. Эти предикаты и функции считаются основными. С помощью логических средств теперь можно получать и другие предикаты и функции на данном множестве объектов; их принято считать производными, или определяемыми, из основных.

Символы основных предикатов и функций зафиксированы в некотором списке, называемом сигнатурой. Это позволяет нам высказывать такие, например, фразы: «возьмем алгебраическую систему данной сигнатуры», или «пусть у нас есть две модели одной сигнатуры», или даже «рассмотрим класс всех алгебраических систем данной сигнатуры». Здесь имеется в виду, что на рассматриваемых множествах отношения и функции хотя и обозначены одинаково, но имеют каждый раз свой смысл, присущий именно данной алгебраической системе.

Идя дальше, мы можем на основе сигнатурных символов с помощью логических средств строить логические формулы. Если смотреть на такую формулу пока только синтаксически, т. е. на то, как она построена, то говорить о каком-то ее значении не приходится. Однако мы можем придавать ей определенное значение, если соотносить ее с конкретной алгебраической системой. Действительно, в таком случае сигнатурные символы имеют свой специфический смысл, а логическое строение формул будет способно выразить различные свойства объектов этой алгебраической системы. Весь вопрос теперь состоит в следующем: выполняется ли данное свойство на данной алгебраической системе или нет. В первом случае мы говорим, что данная формула *выполняется* на данной алгебраической системе, которая является *моделью* для этой формулы, а

во втором — *опровергается* (не выполняется) на данной системе. Конечно, формула, выполняющаяся на какой-либо системе, отличает ее от тех систем, на которых эта формула опровергается. Так с помощью формул или систем формул появляется возможность специализировать алгебраические системы: выбрав некую систему формул, мы можем исследовать тот класс алгебраических систем, на которых выполняются все эти формулы. Или, наоборот, зафиксировав класс алгебраических систем, можно спросить себя, какие логические формулы выполняются на всех выбранных системах.

Великий философ, математик и логик Г. Лейбниц мечтал о создании такого искусственного языка, на котором математики различных направлений могли бы общаться. И главная особенность такого языка должна проявляться в том, что верность или неверность каких-либо математических утверждений можно узнавать внутри этого языка, не обращаясь к нашим интуитивным (а значит, изначально неточным!) представлениям. Современная логика имеет некий вариант такого языка — узкое исчисление предикатов и функций (УИП). На этом языке возможно выразить утверждения довольно значительного и существенного фрагмента математики. Заметим, кстати, что легко найти и утверждения, невыразимые в УИП; это связано с ограниченностью правил, по которым строятся формулы УИП (об этом сигнализирует прилагательное «узкое»). Для выражения таких утверждений необходимы логики более высоких ступеней. Несмотря на это, в дальнейшем мы всегда будем иметь дело с УИП, не оговаривая это каждый раз.

Теперь рассмотрим следующую задачу: по данной формуле A постараться построить тот «мир объектов», т. е. алгебраическую систему M , на котором формула A выполняется. Сама формула может быть и довольно простой, чтобы такое построение было осуществлено, но и достаточно замысловатой. В последнем случае построение M будет сопряжено со значительными трудностями, а в ряде случаев и просто не осуществимо. Оказывается, что никакого эффективного способа (алгоритма) для определения выполнимости формул УИП для почти всех сигнатур не существует. Так что, приступая к сформулированной задаче, мы заранее почти никогда не будем знать, сумеем мы ее решить или нет.

Еще большую трудность доставит нам построение алгебраической системы, на которой выполняются две заданные формулы A и B . Может быть, мы сможем легко и быстро построить системы M и N , где выполняются отдельно A и B соответственно. Но системы M и N могут оказаться совсем разной природы и свойства одной из систем могут препятствовать выполнению свойств другой системы. Правда, в логике имеется довольно простой способ свести эту задачу для двух (и вообще конечного числа) формул к задаче для одной формулы: формула $A \& B$ выполнима в том и только том случае, когда выполняются обе формулы A и B (логический знак $\&$ соответствует союзу «и»).

Принципиальную трудность доставит нам случай бесконечного числа формул, например $\mathbf{A} = \{A_0, A_1, A_2, \dots\}$. Здесь нам не удастся свести дело к какой-нибудь одной формуле; у нас нет возможности строить формулы бесконечной длины. Как же быть?

Ответ дает *локальная теорема* А. И. Мальцева (точнее, один из ее вариантов): система формул \mathbf{A} выполнима тогда и только тогда, когда выполнима каждая ее конечная часть формул. Итак, мы сводим нашу

задачу для бесконечной системы формул $A = \{A_0, A_1, A_2, \dots\}$ ко многим задачам, но каждая для конечных систем формул, а значит — и к системам, состоящим из одной формулы.

Здесь справедлив вопрос: сделали ли мы задачу более простой, чем первоначальная задача? Конечных частей у системы A неизмеримо больше, чем ее формул. Нам же предлагается теперь решать все эти многочисленные задачи. Тем не менее во многих случаях такой переход от одной задачи к бесконечному множеству задач приводит к успеху. Поясним это на одном несложном, но поучительном примере.

В арифметике натуральных чисел обычно в качестве основных выбираются функции сложения и умножения. Другие предикаты и функции, даже очень сложные, чаще всего оказываются определяемыми через сложение и умножение. Если мы еще зафиксируем 1 как основную функцию-константу, то другие конкретные натуральные числа легко получаются как суперпозиции основных функций: $2=1+1$, $3=(1+1)+1$, $4=((1+1)+1)+1$, ...

Однако мы не сможем выразить на нашем логическом языке, что всякий объект алгебраической системы N сигнатуры $\{1, +, \times\}$ имеет указанный вид. Для этого нам надо было бы сказать следующее:

$$\forall x \exists n \{x = (\dots (1+1) + \dots) + 1\}$$

(для всякого объекта x существует объект n такой, что x получается сложением 1 n раз). Здесь все выразимо с помощью логических правил, кроме одного. Что значит «сложить n раз»? Мы можем сложить 2 раза, 10 раз, миллион раз. Но надо сложить n раз, где n — некоторый объект неизвестной нам пока природы. Конечно, в формуле мы подспудно считаем, что n — это обычное натуральное число. Но ведь мы как раз и хотим сказать, что все объекты системы N есть обычные натуральные числа. Порочный круг!

Эти рассуждения наталкивают на мысль: возможно, существуют такие системы N , на которых выполняются все формулы, которые выполняются на стандартных натуральных числах, но объекты системы N совсем не похожи на натуральные числа. Как говорят, у арифметики натуральных чисел имеются нестандартные модели. И это действительно так.

Покажем существование нестандартных моделей с помощью локальной теоремы Мальцева. Пусть Ap — формулы сигнатуры $\{1, +, \times\}$, выполнимые на стандартных натуральных числах. Рассмотрим еще систему формул:

$$A = \{A_0 \equiv 0 < a, A_1 \equiv 1 < a, A_2 \equiv 2 < a, \dots\}.$$

Каждая формула легко записывается в сигнатуре $\{1, a, +, \times\}$. Возьмем какое-нибудь конечное подмножество формул $Ap + \{A_s, \dots, A_t\}$. Ясно, что на стандартных натуральных числах все эти формулы выполнимы, если мы будем интерпретировать символ a числом, строго большим, чем $s + \dots + t$. По локальной теореме и вся система формул $Ap + A$ выполнима на некоторой модели N_1 сигнатуры $\{1, a, +, \times\}$. Итак, на модели N_1 выполняются все формулы, выполняющиеся на стандартных натуральных числах, но имеется такой элемент a , который больше всех стандартных натуральных чисел. Естественно назвать этот элемент a нестандартным числом.

Как мы видим, использование локальной теоремы не составило никакого труда, но результат получился крайне неожиданным: наши логиче-

ские формулы неспособны однозначно охарактеризовать такой фундаментальный математический объект, как натуральные числа.

Применяя локальную теорему в различных ситуациях, сам А. И. Мальцев и другие исследователи получили много интересных и важных результатов в различных математических науках, значительно упростили доказательства более ранних результатов, обрисовали общую ситуацию, связанную с различием таких понятий, как «конечность» и «бесконечность».

Логические результаты А. И. Мальцева не исчерпываются лишь локальной теоремой. Но локальная теорема стала краеугольным камнем при изучении общей теории алгебраических систем и моделей. Сюда входят вопросы аксиоматизируемости, конструктивности и разрешимости различных элементарных теорий (теорий, для изучения которых используется язык УИП). В 1970 году А. И. Мальцев пишет книгу «Алгебраические системы», где им собраны и структурированы собственные результаты в этом направлении, а также многих других ученых.

Здесь необходимо отметить еще один феномен, редко встречающийся в научном мире. Будучи уже вполне сложившимся ученым, получившим крупнейшие результаты в логике, алгебре, топологии и других математических науках, А. И. Мальцев приступает к исследованиям в совсем новом для себя направлении — теории алгоритмов. Прежде всего он сам как студент изучает эту науку. В 1965 году выходит в свет его книга «Алгоритмы и рекурсивные функции». Как нередко говорил Анатолий Иванович, для того чтобы хорошо освоить и прочувствовать какую-нибудь науку, надо самому написать по ней книгу. Он так и сделал!

Пристальное внимание А. И. Мальцева привлекает изучение алгоритмической разрешимости или неразрешимости элементарных теорий. Выше уже говорилось, что проблема определения выполнимости формул алгоритмически неразрешима, т. е. не существует алгоритма для узнавания по синтаксической записи формулы, будет она выполнима или нет. Если мы будем рассматривать всевозможные теории (чаще всего задаваемые своими аксиомами), то возникает подобный вопрос: существует ли алгоритм, который по записи формулы определяет, принадлежит эта формула данной теории или нет. Оказалось, что теории, у которых такой алгоритм есть (их называют *разрешимыми*), очень редки. И наоборот, многие хорошо известные теории, как стало известно, требуемого алгоритма не имеют (естественно их назвать *неразрешимыми*). Сам А. И. Мальцев решил одну из труднейших задач этого направления: им доказано, что теория конечных групп неразрешима. То, что теория групп неразрешима, было установлено А. Тарским (США). Но переход от групп к их конечным экземплярам был крайне сложным, и это долгие годы составляло интригующую проблему.

К изучению элементарных теорий и оценке степени их неразрешимости (если они таковыми являются) А. И. Мальцев привлек своих учеников и коллег. По его инициативе Ю. Л. Ершовым, И. А. Лавровым, А. Д. Таймановым, М. А. Тайцлиным в журнале «Успехи математических наук» (1965, т. 20, № 4), был опубликован обзор «Элементарные теории», где собраны и систематизированы имеющиеся к тому времени результаты о разрешимых и неразрешимых теориях.

Исследования в теории алгоритмов и ее приложениях привели А. И. Мальцева к созданию так называемой теории нумераций. В этой

теории он пытается найти наиболее общие понятия и формулировки, связанные с математическими совокупностями, объекты которых каким-либо образом занумерованы, например натуральными числами. Способ таких нумераций был впервые предложен выдающимся ученым К. Геделем, что позволило ему доказать одну из самых замечательных теорем математики — теорему о неполноте арифметики натуральных чисел.

В теории алгоритмов фундаментальными объектами изучения являются частично рекурсивные функции и рекурсивно перечислимые множества, которые наделяются соответствующими нумерациями — нумерацией Клини и нумерацией Поста. Сравнивая свойства этих двух классических нумераций, А. И. Мальцев сумел найти то общее, что их характеризует и позволяет доказывать для них многие важные результаты. Те нумерации, для которых выполняются общие свойства нумераций Клини и Поста, были названы *полными*. Для полных нумераций оказалось возможным доказать теоремы типа важнейших теорем Роджерса, Райса, Майхилла и ряд других. Дальнейшим обобщением стало понятие *предполной* нумерации. Создание теории полных и предполных нумераций является выдающимся вкладом А. И. Мальцева в теорию алгоритмов. В настоящее время в области теории нумераций работают многие отечественные и зарубежные ученые.

За цикл работ по приложениям математической логики к алгебре и теории моделей А. И. Мальцеву в 1964 году была присуждена Ленинская премия, высшая отечественная награда для ученых.

Заканчивая краткий обзор научного наследия А. И. Мальцева, хотелось бы обратить внимание на самые последние его работы, связанные с изучением замкнутых классов k -значных логик. Обычная логика имеет дело с двумя значениями формул — истина и ложь. Из-за этого обычную логику называют двузначной. В k -значной логике значением формулы может быть одно из k выбранных значений.

Для 2-значной логики Э. Постом были описаны все замкнутые классы и выявлены все (их оказалось 5) так называемые предполные классы. Для 3-значной логики С. В. Яблонский выявил все (их оказалось 18) предполные классы. Дальнейшее продвижение с ростом k связано с принципиальными трудностями. А. И. Мальцев решил подобную задачу для $k=4$. Он описал с точностью до изоморфизма все предполные классы 4-значной логики. В настоящее время имеется прогресс в этом направлении: для $k>4$ найдены серии замкнутых классов, среди которых находятся и все предполные.

Научное наследие А. И. Мальцева исключительно многообразно. Идеи его работ до сих пор помогают математикам двигаться вперед, развивая науку. А. И. Мальцев в 1937 году защитил кандидатскую диссертацию «Абелевы группы конечного ранга без кручения», а в 1941-м — докторскую диссертацию «Структура изоморфно-представимых бесконечных алгебр и групп». В 1953 году его избирают членом-корреспондентом Академии наук СССР, а в 1958-м — действительным членом (академиком) Академии наук СССР.

Во все периоды своей жизни А. И. Мальцев плодотворно занимался и научно-организационной деятельностью. Как уже говорилось, в Иванове он стал организатором Ивановского математического общества, собравшего всех активно действующих в городе математиков. И в Новосибирске он основал Сибирское математическое общество, которое было гораздо

больше Ивановского, т. к. объединяло математиков Сибири и Дальнего Востока. Много сил было отдано Анатолием Ивановичем созданию и функционированию математических журналов. Он был главным редактором «Сибирского математического журнала», специализированного журнала «Алгебра и логика». Эти издания стали ведущими отечественными математическими журналами, они пользуются огромным профессиональным авторитетом во всем мире.

Бесценна деятельность А. И. Мальцева по организации всесоюзных алгебраических и логических коллоквиумов. В течение многих десятков лет они проходили в различных математических центрах страны: Москве, Киеве, Минске, Свердловске, Кишиневе, Алма-Ате, Новосибирске и других городах.

Традиции, заложенные А. И. Мальцевым, развиваются и в настоящее время. Практически ежегодно его ученики проводят в Новосибирском академгородке «Мальцевские чтения», в которых участвуют логики и алгебраисты не только России, но и других стран ближнего и дальнего зарубежья. На август 2009 года запланировано проведение в Новосибирске конференции, посвященной 100-летию А. И. Мальцева. Желание принять участие в конференции выразили многие ведущие специалисты по алгебре, математической логике и другим смежным наукам из разных стран мира.

А. И. Мальцева всегда волновали вопросы преподавания математики на разных уровнях. Возглавляя соответствующие кафедры в Ивановском государственном педагогическом институте и Новосибирском государственном университете, он составлял программы и учебные планы преподавания алгебры и логики на математических факультетах вузов. Им была разработана концепция формирования логико-математического образования в высшей школе. Эта концепция эффективно реализуется учениками А. И. Мальцева в различных университетах нашей страны.

В 1967 году А. И. Мальцев опубликовал в центральной советской газете «Правда» статью «Математика нужна всем». В ней он высказал очень глубокие мысли об основных направлениях математических исследований и подготовке молодых ученых. В математической логике, дискретной математике и математической статистике Анатолий Иванович усматривал теоретический фундамент использования и усовершенствования вычислительной техники и всех наук, связанных с вычислениями. Время подтверждает его прозрения.

А. И. Мальцев ставил перед высшими органами власти в стране вопрос о создании Института высших исследований СССР. Задачами такого института должны стать теоретические исследования и анализ экспериментальных данных, полученных в различных институтах прикладного профиля, изучение структуры науки и научных теорий. В Институт будут приглашаться на ограниченный срок отечественные и зарубежные ученые для разработки проектов, требующих объединения усилий исследователей различных направлений науки. Институт на регулярной основе будет проводить всесоюзные и международные конференции, симпозиумы и школы по наиболее быстро развивающимся разделам науки.

Полностью замысел А. И. Мальцева не был реализован. Имеются лишь специализированные институты (в основном по математике и физике), задачами которых являются именно те, что ставил Анатолий Ивано-

вич. Первым подобным институтом в нашей стране стал киевский, специализирующийся в области физики. Сейчас успешно работает Международный математический институт им. Л. Эйлера в Санкт-Петербурге. За рубежом математические институты подобного профиля находятся в Германии (Обервольфах), в Польше (Международный институт им. С. Банаха, сперва в Варшаве, а теперь под Познанью), в Японии (Цукуба). С более общей концепцией работает Институт прикладных системных исследований в Австрии (Лаксенбург). Эффективность работы подобных институтов как нельзя лучше подтверждает плодотворность идей А. И. Мальцева.

Анатолий Иванович был человеком широкой и многогранной души. Бережное и внимательное отношение к коллегам и ученикам, его доступность и некрикливая демократичность и, наоборот, твердость в отстаивании принципиальных позиций снискали ему непререкаемый авторитет. С ним можно было свободно обсуждать не только математические проблемы, но и музыкальные и балетные события, вопросы живописи и многое другое. Он любил русскую природу, охоту и рыбалку.

А. И. Мальцев ушел из жизни внезапно, не дожив до 58 лет, в полном расцвете творческих сил. Не стало великого ученого. Остались его книги, статьи, организованные им журналы и общества. Активно работает алгебрологическая школа Мальцева. Его идеи вдохновляют все новые поколения ученых. Его имя вечно будет жить в математике.

И. А. Лавров,
ведущий научный сотрудник
Института системного программирования РАН
(Москва)

Сведения об авторах

- АБДУЛЛАЕВ** зав. кафедрой естественных наук, доктор
Махрам Гасанович химических наук, профессор,
зам. директора, Филиал Ивановского
государственного университета
в г. Дербенте
- АБДУЛЛАЕВА** старший преподаватель кафедры
Зульфия Шамильевна естественных наук, Филиал Ивановского
государственного университета
в г. Дербенте
- АЗАРОВ** кандидат физико-математических наук,
Дмитрий Николаевич доцент кафедры алгебры и математической
логики, Ивановский
государственный университет.
(4932) 30-02-42
- АФАНАСЬЕВ** кандидат химических наук, доцент,
Владимир Николаевич ведущий научный сотрудник,
Институт химии растворов РАН.
(4932) 30-85-28
- БАЖЕНОВ** заслуженный деятель науки РФ,
Юрий Иванович доктор биологических наук, профессор
кафедры биологии и экологии,
Шуйский государственный
педагогический университет.
(49351) 23-06-40 (деканат)
- БАРДИНА** кандидат химических наук,
Анна Владимировна инженер кафедры физической химии,
Ивановский государственный университет.
bardina_av@mail.ru
- БАРИНОВА** кандидат биологических наук, доцент
Марина Олеговна кафедры физиологии человека и животных,
Ивановский государственный университет.
nayka@list.ru
- БЕЗУМОВА** кандидат физико-математических наук,
Маргарита Александровна доцент кафедры математики, Ивановская
сельскохозяйственная академия.
(4932) 30-45-80
- БЕЛОВ** доктор физико-математических наук,
Александр Сергеевич профессор кафедры математического анализа,
Ивановский государственный университет.
asbelov@ivanovo.ac.ru

- БЕЛЯКОВ Александр Петрович** кандидат медицинских наук, доцент, зав. кафедрой безопасности жизнедеятельности, Ивановский государственный университет
- БОГОМОЛОВ Адольф Федорович** кандидат медицинских наук, доцент кафедры физиологии человека и животных, Ивановский государственный университет. bogomolov@ivanovo.ac.ru
- БЫКОВА Венера Васильевна** кандидат химических наук, зам. директора Научно-исследовательского института наноматериалов, Ивановский государственный университет
- ВОРОНИН Дмитрий Николаевич** аспирант, НИИ материнства и детства им. В. Н. Городкова
- ГАЙВОРОНСКАЯ Мария Юрьевна** студентка математического факультета, Ивановский государственный университет. ivgu_matfak@mail.ru
- ГИРИЧЕВА Нина Ивановна** доктор химических наук, профессор, зав. кафедрой физической химии, Ивановский государственный университет. n.i.giricheva@mail.ru
- ГРУЗДЕВА Юлия Владимировна** студентка магистратуры, Ивановский государственный университет. (4932) 30-02-42
- ДАВИДЗОН Михаил Иосифович** кандидат технических наук, профессор кафедры общей физики и методики преподавания, Ивановский государственный университет. davesse@mail.ru
- ДЕМИДОВ Вадим Игоревич** кандидат медицинских наук, доцент кафедры патологической анатомии, Ивановская государственная медицинская академия
- ЕГОРОВА Евгения Юрьевна** кандидат медицинских наук, доцент кафедры безопасности жизнедеятельности, Ивановский государственный университет
- ЗАЙЦЕВ Александр Александрович** доктор химических наук, профессор кафедры теоретической физики, математического и компьютерного моделирования, Ивановский государственный университет. (4932) 42-13-85

- ЗАРИПОВ Владимир Николаевич** кандидат биологических наук, зав. кафедрой физиологии человека и животных, Ивановский государственный университет. (4932) 42-36-91; zaripov@ivanovo.ac.ru
- ЗВОНАРЕВА Юлия Александровна** агроном ботанического сада, Ивановский государственный университет. (4932) 37-01-27
- ИВАНОВ Сергей Николаевич** доктор химических наук, профессор кафедры физической химии, Ивановский государственный университет. serg_ivan@inbox.ru
- ИСАЕВ Владимир Анатольевич** доктор биологических наук, зав. кафедрой зоологии, Ивановский государственный университет. (4932) 42-13-07; viam_e@mail.ru
- КАЗАК Александр Васильевич** аспирант Научно-исследовательского института наноматериалов, Ивановский государственный университет. s_kazak@list.ru
- КЛЮЕВ Михаил Васильевич** доктор химических наук, профессор, зав. кафедрой органической и биологической химии, декан биолого-химического факультета, Ивановский государственный университет. (4932) 37-01-57; klyuev@inbox.ru
- КРАВЧЕНКО Марина Геннадьевна** ведущий инженер ботанического сада, Ивановский государственный университет. (4932) 37-01-27
- КРАСНОВА Елена Евгеньевна** доктор медицинских наук, доцент кафедры детских болезней лечебного факультета, Ивановская государственная медицинская академия
- КРЫЛОВ Евгений Николаевич** доктор химических наук, профессор кафедры органической и биологической химии, Ивановский государственный университет. (4932) 37-37-03; enk2005@rambler.ru
- КУРИЦЫН Лев Викторович** доктор химических наук, профессор кафедры физической химии, Ивановский государственный университет. (4932) 37-37-03
- ЛАПЫКИНА Елена Андреевна** аспирант кафедры физической химии, Ивановский государственный университет. ealapochka@mail.ru

- ЛОГИНОВА** кандидат физико-математических наук,
Елена Давидовна доцент кафедры алгебры
и математической логики, Ивановский
государственный университет.
loginova@ivanovo.ac.ru
- ЛВОВ** профессор, доктор медицинских наук,
Сергей Евтихиевич зав. кафедрой травматологии, ортопедии
и военно-полевой хирургии, Ивановская
государственная медицинская академия.
drlvov@mail.ru
- МЕДВЕДЕВА** кандидат химических наук,
Юлия Сергеевна документовед кафедры физической химии,
Ивановский государственный университет.
julya_1@list.ru
- МОЛДАВАНСКИЙ** доктор физико-математических наук,
Давид Ионович профессор, зав. кафедрой алгебры
и математической логики,
Ивановский государственный университет.
(4932) 30-02-42
- МОМОНТ** биолог ботанического сада,
Ирина Сергеевна Ивановский государственный университет.
(4932) 37-01-27
- ПЕТРОВ** кандидат химических наук,
Вячеслав Михайлович доцент кафедры физической химии,
Ивановский государственный университет.
petrovVM@mail.ru
- ПЕТРОВА** кандидат химических наук,
Валентина Николаевна доцент кафедры физики,
Ивановский государственный
химико-технологический университет.
petrovVM@mail.ru
- ПУХОВ** кандидат физико-математических наук,
Сергей Владимирович декан математического факультета,
Ивановский государственный университет.
(4932) 30-02-42
- СЕМЕЙКИН** доктор химических наук, профессор
Александр Станиславович кафедры органической химии,
Ивановский государственный
химико-технологический университет.
- СОКОЛОВ** кандидат физико-математических наук,
Евгений Викторович доцент кафедры вычислительной
и прикладной математики,
Ивановский государственный университет.
ev-sokolov@yandex.ru

- УСОЛЬЦЕВА** Надежда Васильевна доктор химических наук, профессор,
директор Научно-исследовательского
института наноматериалов,
Ивановский государственный университет.
(4932) 93-43-49
- ХАШИН** Сергей Иванович кандидат физико-математических наук,
доцент кафедры алгебры
и математической логики,
Ивановский государственный университет.
khash2@mail.ru
- ЧЕМОДАНОВ** Вадим Владимирович доктор медицинских наук, профессор,
зав. кафедрой детских болезней
лечебного факультета, Ивановская
государственная медицинская академия
- ШАПИН** Вадим Иванович профессор, кандидат технических наук,
зав. кафедрой теоретической и прикладной
механики, Ивановский государственный
энергетический университет.
shapin@tipm.ispu.ru
- ЮДИН** Сергей Георгиевич доктор физико-математических наук,
профессор, старший научный сотрудник,
Институт кристаллографии
им. А. В. Шубникова РАН
- ЯЦКИН** Николай Иванович кандидат физико-математических наук,
профессор кафедры алгебры
и математической логики,
Ивановский государственный университет.
yatskin@ivanovo.ac.ru

ИНФОРМАЦИЯ ДЛЯ АВТОРОВ «ВЕСТНИКА ИВАНОВСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА»

1. В журнал принимаются материалы в электронном виде на дискете стандартного формата с приложением одного экземпляра распечатки на белой бумаге.

Максимальный размер статьи — 1,0 авт. л. (20 страниц текста через 1,5 интервала, 30 строк на странице формата А4, не более 65 знаков в строке, выполненного в редакторе Microsoft Word шрифтом Times New Roman или Times New Roman Cyr, кегль 14), сообщения — 0,5 авт. л. (10 страниц).

2. Материал для журнала должен быть оформлен в следующей последовательности: **УДК** (для естественных и технических специальностей), **ББК** (в библиографическом отделе библиотеки ИвГУ); на русском и английском языках: **инициалы и фамилия автора, название материала**, для научных статей — **аннотация** (объемом 10—15 строк), **ключевые слова; текст статьи** (сообщения).

3. Библиографические источники должны быть пронумерованы в алфавитном порядке, ссылки даются в тексте статьи в скобках в строгом соответствии с пристатейным списком литературы. Библиографическое описание литературных источников к статье оформляется в соответствии с ГОСТами 7.1—2003, 7.0.5—2008. В каждом пункте библиографического списка, составленного в алфавитном порядке (сначала произведения на русском языке, затем на иностранном), приводится одна работа. В выходных сведениях обязательно указание издательства и количества страниц, в ссылке на электронный ресурс — даты обращения.

4. Фотографии, прилагаемые к статье, должны быть черно-белыми, контрастными, рисунки — четкими.

5. В конце представленных материалов следует указать полный почтовый адрес автора, его телефон, фамилию, имя, отчество, ученую степень, звание, должность. Материал должен быть подписан всеми авторами.

6. Направление в редакцию ранее опубликованных и принятых к печати в других изданиях работ не допускается.

7. Материалы, представляемые к публикации в журнале, должны пройти научную экспертизу и сопровождаться положительной рецензией.

8. Редакция оставляет за собой право осуществлять литературную правку, корректирование и сокращение текстов статей.

9. Рукописи аспирантов публикуются бесплатно.

**ВЕСТНИК
ИВАНОВСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА**
Серия «Естественные, общественные науки»
Вып. 2
Биология. Химия. Физика. Математика

Подписано в печать 15.09.2010 г.
Формат 70×108¹/₁₆. Бумага писчая. Печать плоская.
Усл. печ. л. 12,8. Уч.-изд. л. 11,8. Тираж 300 экз.

Издательство «Ивановский государственный университет»
✉ 153025 Иваново, ул. Ермака, 39 ☎ (4932) 93-43-41
E-mail: publisher@ivanovo.ac.ru