

ДОКЛАДЫ НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК БЕЛАРУСИ

Выходит шесть номеров в год

Журнал основан в июле 1957 года

МИНСК, БЕЛОРУССКАЯ НАУКА, 2015, ТОМ 59, № 3

Учредитель – Национальная академия наук Беларуси

Редакционная коллегия:

В. Г. Гусаков (главный редактор),
А. В. Кильчевский (заместитель главного редактора),
С. Я. Килин (заместитель главного редактора),
С. А. Чижик (заместитель главного редактора),
И. М. Богдевич, Н. А. Борисевич, П. А. Витязь,
И. Д. Волоотовский, И. В. Гайшун, С. В. Гапоненко, А. Е. Дайнеко, И. В. Залуцкий,
О. А. Ивашкевич, Н. А. Изобов, Н. С. Казак, А. А. Коваленя,
Ф. Ф. Комаров, И. В. Котляров, В. А. Лабунов, А. П. Ласковнев, О. Н. Левко,
А. И. Лесникович, В. Ф. Логинов, А. А. Махнач, А. А. Михалевич,
М. Е. Никифоров, В. А. Орлович, О. Г. Пенязьков, Ю. М. Плескачевский,
Н. С. Сердюченко, А. Ф. Сменянович, Л. М. Томильчик, С. А. Усанов,
Л. В. Хотылева, В. А. Хрипач, И. П. Шейко,
ведущий редактор **Т. П. Петрович**

Адрес редакции:

220072, Минск, ул. Академическая, 1, к. 119,
тел. 284-19-19

csl.bas-net.by/Web/Pages/magNAS.asp

E-mail: doklady_nanb@mail.ru

СОДЕРЖАНИЕ

МАТЕМАТИКА

Астафьева А. В., Старовойтов А. П. Асимптотические свойства многочленов Эрмита	5
Красовский С. Г. Изменение знака центрального и особого показателей линейных сингулярных систем	12
Бударина Н. В., Диккинсон Д., Берник В. И. Распределение дискриминантов целочисленных многочленов с заданными законами их факторизации	17

ФИЗИКА

Кисель В. В., Овсюк Е. М., Веко О. В., Редьков В. М. Нерелятивистское приближение в теории частицы со спином 2	21
Гончаренко А. М. О распространении солитонов в отрицательных средах	28
Апанасевич П. А. Условия применимости уравнений переноса интенсивности для описания вынужденного комбинационного рассеяния	30
Кузьмицкий В. А. Вращения Якоби в обратной задаче нахождения параметров вибронной связи в условиях резонанса	34

ХИМИЯ

Клецков А. В., Бумагин Н. А., Курман П. В., Золотарь Р. М., Чепик О. П., Поткин В. И. Синтез замещенных <i>n</i> -бифенил(1-нафтил)изотиазол-3-илкетонів.....	39
Свиридова Т. В., Логвинович А. С., Свиридов Д. В. Электрохимический синтез металл-матричных композитов на основе дисперсных частиц MoO_3/WO_3 со структурой «ядро-оболочка»	43
Матулис Вадим Э., Матулис Виталий Э., Нагорный Ю. Е., Репченков В. И., Ивашкевич О. А. Особенности деформирования различных моделей графена при растяжении.....	47
Плиско Т. В., Бильдюкевич А. В., Зеленковский В. М. Структура и свойства дисперсий диоксида кремния в полиэтиленгликоле-400	51
Кашин И. А., Тузиков А. В., Андрианов А. М. Компьютерный скрининг низкомолекулярных ингибиторов проникновения ВИЧ-1 на основе нейтрализующего антитела 10E8.....	56

БИОЛОГИЯ

Долматович Т. В., Булойчик А. А. Молекулярная идентификация генов устойчивости к бурой ржавчине в сортах яровой мягкой пшеницы (<i>Triticum aestivum</i> L.)	66
Бусева Ж. Ф., Плюта М. В. Питание молоди рыб в литорали мелководного озера.....	71
Виноградов В. В., Степура И. И., Лабор С. А., Виноградов С. В., Туманов А. В. Механизмы некоферментного действия компонентов нейровазотропина при оксидативном стрессе и разработка антистрессорных тиаминсодержащих препаратов.....	77
Мартинovich Г. Г., Мартинovich И. В., Меньшикова Е. Б., Зенков Н. К., Черенкевич С. Н. Редокс-свойства опухолевых клеток и их пролиферативная активность при действии фенольных антиоксидантов...	82

МЕДИЦИНА

Миронова Г. П., Ханило Л. С., Пашкевич С. Г. Влияние снижения напряжения кислорода на когнитивные функции крыс	88
Гайшун Е. И., Гайшун И. В., Пристром А. М. Изменение растяжимости артерий в зависимости от суточной частоты сердечных сокращений	93

НАУКИ О ЗЕМЛЕ

Листван И. И., Дударчик В. М., Крайко В. М. Твердые горючие ископаемые Беларуси и особенности их глубокой переработки	97
---	----

ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ

Кравченко В. Ф., Кривенко Е. В., Левченко С. А., Луценко В. И., Плюта С. В. Смарт-грид технологии – основа модернизации системы водоснабжения.....	102
Боровиков С. М., Шнейдеров Е. Н., Бурак И. А. Модели на основе распределения Вейбулла–Гнеденко для описания деградации функциональных параметров изделий электронной техники	109

АГРАРНЫЕ НАУКИ

Шейко И. П., Шейко Р. И. Оценка общей, специфической и ассоциативной комбинационной способности материнских и отцовских форм различных пород свиней.....	116
--	-----

ДОКЛАДЫ НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК БЕЛАРУСИ. 2015. Т. 59, № 3
Журнал зарегистрирован в Министерстве информации Республики Беларусь,
свидетельство о регистрации № 387 от 18.05.2009.

Редактор Т. П. Петрович

Компьютерная верстка Л. И. Кудерко

Сдано в набор 02.06.2015. Выпуск в свет 28.06.2015. Формат 60×84¹/₈. Бумага офсетная. Печать цифровая.
Усл. печ. л. 14,88. Уч.-изд. л. 16,4. Тираж 134 экз. Заказ 104.

Цена номера: индивидуальная подписка – 70 150 руб.; ведомственная подписка – 169 991 руб.

Издатель и полиграфическое исполнение:

Республиканское унитарное предприятие «Издательский дом «Беларуская навука».

Свидетельство о государственной регистрации издателя, изготовителя, распространителя печатных изданий № 1/18 от 02.08.2013. ЛП № 02330/455 от 30.12.2013. Ул. Ф. Скорины, 40, 220141, г. Минск.

© «Издательский дом «Беларуская навука».
Доклады НАН Беларуси, 2015

DOKLADY OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF BELARUS

Published bimonthly

The journal has been published since July, 1957

MINSK, BELORUSSKAYA NAUKA, 2015, Vol. 59, N 3

Founder – National Academy of Sciences of Belarus

Editorial Board:

V. G. Gusakov (Editor-in-Chief),
S. Ya. Kilin (Associate Editor-in-Chief),
A. V. Kilchevsky (Associate Editor-in-Chief),
S. A. Chizhik (Associate Editor-in-Chief),
I. M. Bogdevich, N. A. Borisevich, A. Ye. Daineko, I. V. Gaishun, S. V. Gaponenko,
O. A. Ivashkevich, N. A. Izobov, N. S. Kazak, L. V. Khotyleva, V. A. Khripach,
A. A. Kovalenya, F. F. Komarov, I. V. Kotlyarov, V. A. Labunov, A. P. Laskovnev,
O. N. Levko, A. I. Lesnikovich, V. F. Loginov, A. A. Makhnach, A. A. Mikhalevich,
M. Ye. Nikiforov, V. A. Orlovich, O. G. Penyazkov, Yu. M. Pleskachevsky,
N. S. Serduchenko, I. P. Sheiko, A. F. Smeyanovich, L. M. Tomilchik,
S. A. Usanov, P. A. Vitiaz, I. D. Volotovskii, I. V. Zalutsky,
lead editor **T. P. Petrovich**

Address of the Editorial Office:

220072, Minsk, 1 Akademicheskaya Str., room 119

telephone: 284-19-19

csl.bas-net.by/Web/Pages/magNAS.asp

E-mail: doklady_nanb@mail.ru

CONTENTS

MATHEMATICS

Astafyeva A. V., Starovoitov A. P. Asymptotic properties of Hermite's polynomials.....	5
Krasovskii S. G. Sign changing of the central exponent and the general exponent of linear singular systems	12
Budarina N. V., Dickinson D., Bernik V. I. Distribution of discriminants of integral polynomials with prescribed laws of factorization.....	17

PHYSICS

Kisel V. V., Ovsiyuk E. M., Veko O. V., Red'kov V. M. Non-relativistic approximation in the theory of a spin 2 particle.....	21
Goncharenko A. M. Propagation of solitons in negative media	28
Apanasevich P. A. Conditions of application of the intensity transfer equation to the SRS description	30
Kuzmitsky V. A. Jacobi rotations in the inverse task of determination of vibronic coupling parameters at resonance conditions.....	34

CHEMISTRY

Kletskov A. V., Bumagin N. A., Kurman P. V., Zolotar R. M., Chepik O. P., Potkin V. I. Synthesis of substituted <i>p</i> -biphenyl(1-naphthyl)isothiazol-3-yl ketones.....	39
Sviridova T. V., Logvinovich A. S., Sviridov D. V. Electrochemical synthesis of metal-matrix composites based on dispersed particles of MoO ₃ (core)–WO ₃ (shell) structure	43
Matulis Vadim E., Matulis Vitaly E., Nagorny Yu. E., Repchenkov V. I., Ivashkevich O. A. Behavior of different models of graphene under tension.....	47
Plisko T. V., Bilyukevich A. V., Zelenkovsky V. M. Structure and properties of the dispersions of silica in polyethylene glycol-400.....	51
Kashyn I. A., Tuzikov A. V., Andrianov A. M. Computer-aided screening of small-molecule HIV-1 entry inhibitors based on neutralizing antibody 10E8	56

BIOLOGY

Dolmatovich T. V., Buloichik A. A. Molecular identification of leaf rust resistance genes in common wheat varieties (<i>Triticum aestivum</i> L.).....	66
Buseva Zh. F., Pljuta M. V. Feeding of YOY fish in the littoral zone of a shallow lake	71
Vinogradov V. V., Stepuro I. I., Labor S. A., Vinogradov S. V., Tumanov A. V. Mechanisms of noncoenzyme action of neurovasotropin components during oxidative stress and the development of anti-stress thiamine-containing drugs	77
Martinovich G. G., Martinovich I. V., Menshchikova E. B., Zenkov N. K., Cherenkevich S. N. Redox properties of tumor cells and their proliferative activity under the action of phenolic antioxidants	82

MEDICINE

Mironova G. P., Khanilo L. S., Pashkevich S. G. Effect of an oxygen tension reduction on the cognitive function of rats.....	88
Gaishun E. I., Gaishun I. V., Prystrom A. M. Change of the arterial distensibility depending on a 24-hour ambulatory heart rate	93

EARTH SCIENCES

Lishtvan I. I., Dudarchyck U. M., Kraiko V. M. Fuels of Belarus and the peculiarities of their deep processing.....	97
--	----

TECHNICAL SCIENCES

Kravchenko V. F., Krivenko O. V., Levchenko S. A., Lutsenko V. I., Pluyta S. V. Smart grid technology is the basis of modernization of a water supply system	102
Borovikov S. M., Shneiderov E. N., Burak I. A. Models based on the Weibull–Gnedenko distribution for the description of the degradation of functional parameters of electronic devices.....	109

AGRARIAN SCIENCES

Sheyko I. P., Sheyko R. I. Estimation of the overall, specific and associative combining ability of maternal and paternal forms of different breeds of pigs	116
--	-----

МАТЕМАТИКА

УДК 517.538.52+517.538.53+517.518.84

А. В. АСТАФЬЕВА, А. П. СТАРОВОЙТОВ

АСИМПТОТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МНОГОЧЛЕНОВ ЭРМИТА

(Представлено членом-корреспондентом Я. В. Радыно)

Гомельский государственный университет им. Ф. Скорины

Поступило 23.02.2015

Введение. Различают два типа аппроксимаций Эрмита–Паде экспоненциальных функций [1]. Аппроксимациями Эрмита–Паде I типа (Latin type) и $(n-1)$ -го порядка для системы экспонент $\{e^{pz}\}_{p=0}^k$ называют $k+1$ многочлен $A_0(z), A_1(z), \dots, A_k(z)$ степени не выше $n-1$, для которых

$$\sum_{p=0}^k A_p(z) e^{pz} = O(z^{kn+n-1}), \quad z \rightarrow 0, \quad (1)$$

где предполагается, что хотя бы один многочлен $A_p(z)$ тождественно не равен нулю.

Такие многочлены введены Эрмитом [2] в 1883 г. Еще раньше, при доказательстве трансцендентности числа e , Эрмит определил $k+1$ многочлен $Q_{kn}(z), P_{kn}^1(z), \dots, P_{kn}^k(z)$ степени не выше kn , для которых

$$R_n^j(z) := Q_{kn}(z) e^{jz} - P_{kn}^j(z) = O(z^{kn+n+1}), \quad z \rightarrow 0. \quad (2)$$

Набор рациональных функций $\pi_{kn,kn}^j(z; e^{jz}) = P_{kn}^j(z) / Q_{kn}(z)$, $j = 1, 2, \dots, k$, принято называть диагональными аппроксимациями Эрмита–Паде II типа (German type) n -го порядка. Отметим, что с помощью аппроксимаций Эрмита–Паде I типа также можно доказать трансцендентность числа e [3].

В одномерном случае, когда $k = 1$, общая постановка задачи о нахождении многочленов, удовлетворяющих равенствам (1), (2), принадлежит Паде, а построенные в обоих случаях многочлены совпадают. В многомерном случае ($k \geq 2$) систематическое изучение аппроксимаций Эрмита–Паде I и II типов начато в работе К. Малера [3] (об участии других авторов в создании формальной теории см. [4]). Оба типа аппроксимаций, явно различные в многомерном случае, имеют множество приложений, в частности, для измерения иррациональности, в доказательствах трансцендентности, в исследованиях алгебраической природы математических констант [4; 5].

Если $k = 1$, то приходим к классическим аппроксимациям Паде-экспоненты. В этом случае теорема Паде утверждает, что для многочленов $A_0(z) = -P_{n-1}^1(z)$, $A_1(z) = Q_{n-1}(z)$, нормированных так, что $A_1(0) = 1$, при $n \rightarrow \infty$ локально равномерно по $z \in \mathbb{C}$, т. е. на любом компакте в $\mathbb{C}$ справедливы асимптотические равенства

$$A_0(z) = -e^{z/2} \{1 + O(1/n)\}, \quad A_1(z) = e^{z/2} \{1 + O(1/n)\}.$$

С помощью явных формул П. Борвейн [6] нашел асимптотику многочленов Эрмита для системы $\{e^{pz}\}_{p=0}^k$ при $k = 2$. Этот результат обобщен Ф. Вилонским [7] на случай произвольного k . В [8] результат П. Борвейна обобщен на системы экспонент $\{e^{\lambda_p z}\}_{p=0}^2$ с произвольными различными действительными показателями $\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2$.

В данном сообщении исследуется асимптотика многочленов Эрмита $\{A_n^p(z)\}_{p=0}^k$, $\deg A_n^p \leq n-1$, удовлетворяющих условиям

$$\sum_{p=0}^k A_n^p(z) e^{\lambda_p z} = O(z^{kn+n-1}), \quad z \rightarrow 0, \quad (3)$$

где λ_p – произвольные различные действительные числа.

Асимптотические свойства аппроксимаций Эрмита–Паде II типа $\pi_{kn, kn}^j(z; e^{\lambda_j z})$ с различными действительными или чисто мнимыми показателями λ_p с помощью метода Лапласа описаны в [9; 10]. В данном случае метод Лапласа применяется в сочетании с методом перевала. Технология их применения является результатом дальнейшего совершенствования методов работ [7; 9].

Без ограничения общности далее считаем, что $0 = \lambda_0 < \lambda_1 < \dots < \lambda_k$. Общий случай сводится к рассматриваемому случаю. Для этого достаточно равенство (3) умножить на $e^{-\lambda^* z}$, где $\lambda^* = \min\{\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_k\}$.

Предварительные результаты. Многочлены $A_n^0(z), A_n^1(z), \dots, A_n^k(z)$, удовлетворяющие равенствам (3), могут быть получены решением линейной системы $kn + n - 1$ однородных уравнений с $kn + n$ неизвестными коэффициентами. Поэтому нетривиальное решение всегда существует. Легко показать, что такие нетривиальные решения могут быть выписаны в явном виде. Действительно, пусть C_p – граница круга с центром в точке λ_p столь малого радиуса, что все остальные λ_j лежат во внешности этого круга. Используя теорему Коши о вычетах, без труда проверяется, что функции

$$A_n^p(z) = \frac{e^{-\lambda_p z}}{2\pi i} \int_{C_p} \frac{e^{\xi z} d\xi}{[\varphi(\xi)]^n}, \quad 0 \leq p \leq k,$$

где $\varphi(\xi) = \xi(\xi - \lambda_1) \cdot \dots \cdot (\xi - \lambda_k)$, удовлетворяют (3) и всем другим условиям.

Приведем без доказательств в удобном для нас виде необходимые в дальнейшем утверждения [11, с. 398, 415].

У т в е р ж д е н и е 1 (Метод Лапласа). Пусть $f(x), S(x)$ – непрерывные на отрезке $[a, b]$ функции, при этом $S(x)$ принимает только действительные значения, а $f(x)$ может быть комплекснозначной. Полагаем

$$I_n = \int_a^b f(x) e^{nS(x)} dx.$$

Предполагаем, что $S(x)$ в точке $x_0 \in (a, b)$ имеет абсолютный максимум на отрезке $[a, b]$, т. е. $S(x) < S(x_0)$, $x \neq x_0$, $S''(x_0) \neq 0$ и функции $f(x), S(x)$ бесконечно дифференцируемы в некоторой окрестности точки x_0 . Тогда при $n \rightarrow +\infty$ справедливо асимптотическое равенство

$$I_n = \sqrt{\frac{-2\pi}{nS''(x_0)}} e^{nS(x_0)} \{f(x_0) + O(1/n)\}.$$

У т в е р ж д е н и е 2 (Метод перевала). Пусть функции $f(z)$ и $S(z)$ регулярны в некоторой области G , содержащей кусочно-гладкую кривую γ и

$$F_n = \int_{\gamma} f(\xi) e^{nS(\xi)} d\xi.$$

Предположим, что $\max\{\operatorname{Re} S(\xi) : \xi \in \gamma\}$ достигается только в точке z_0 , которая является внутренней точкой контура и простой точкой перевала, т. е. $S'(z_0) = 0, S''(z_0) \neq 0$. Считаем также, что в окрестности z_0 контур γ проходит через оба сектора [11, с. 414], в которых $\operatorname{Re} S(\xi) < \operatorname{Re} S(z_0)$. Тогда при $n \rightarrow \infty$

$$F_n = \sqrt{\frac{-2\pi}{nS''(z_0)}} e^{nS(z_0)} \{f(z_0) + O(1/n)\}. \quad (4)$$

Выбор ветви корня в (4) определяется из условий

$$\arg \sqrt{\frac{-1}{S''(z_0)}} = \varphi_0,$$

где φ_0 – угол между касательной к кривой l в точке z_0 и положительным направлением действительной оси; а l – линия наискорейшего спуска, проходящая через точку z_0 , т. е. для l в окрестности z_0 выполняются условия: $\operatorname{Im} S(z) = \operatorname{Im} S(z_0)$ при $z \in l$; $\operatorname{Re} S(z) < \operatorname{Re} S(z_0)$ при $z \in l, z \neq z_0$.

Асимптотика многочленов Эрмита. Введем необходимые обозначения. Пусть $\{x_i\}_{i=1}^k$ – нули многочленов $\varphi'(\xi)$, т. е. $\varphi'(x_i) = 0$, $i = 1, 2, \dots, k$. Ясно, что x_i – действительные числа и $x_i \in (\lambda_{i-1}, \lambda_i)$, $i = 1, 2, \dots, k$. Считаем, что G такая односвязная область, что $\{x_i\}_{i=1}^k \subset G \subset \mathbb{C} \setminus \{\lambda_j\}_{j=0}^k$. Тогда [11, с. 172, пример 6] функция

$$S(\xi) = -\ln \varphi(\xi),$$

где $S(x_1) = -\ln |\varphi(x_1)|$, если $\varphi(x_1) > 0$, и $S(x_1) = -\ln |\varphi(x_1)| - i\pi$, если $\varphi(x_1) < 0$, является однозначной аналитической функцией в G . Значения функции $S(\xi)$ вычисляются по формуле

$$S(\xi) = -\ln |\varphi(\xi)| - i[\operatorname{Im} S(x_1) + \Delta_\gamma \arg \varphi(\xi)],$$

где кривая γ лежит в G и соединяет точки x_1 и ξ , а $\Delta_\gamma \arg \varphi(\xi)$ – приращение аргумента $\varphi(\xi)$ вдоль кривой γ .

Если $\xi \in G$, то справедливы равенства

$$S'(\xi) = -\frac{\varphi'(\xi)}{\varphi(\xi)} = -\frac{1}{\xi} - \frac{1}{\xi - \lambda_1} - \dots - \frac{1}{\xi - \lambda_k},$$

$$S''(\xi) = -\frac{\varphi''(\xi)\varphi(\xi) - [\varphi'(\xi)]^2}{\varphi^2(\xi)} = \frac{1}{\xi^2} + \frac{1}{(\xi - \lambda_1)^2} + \dots + \frac{1}{(\xi - \lambda_k)^2},$$

из которых следует, что $S'(x_i) = 0$, $S''(x_i) = -\varphi''(x_i) / \varphi(x_i) > 0$, $i = 1, 2, \dots, k$.

Выбирая положительное значение корня, полагаем

$$B_n(x_i) = \sqrt{\frac{1}{2\pi n S''(x_i)}} e^{nS(x_i)}, \quad i = 1, 2, \dots, k.$$

Т е о р е м а 1. Для каждого фиксированного $z \in \mathbb{C}$ и $n \rightarrow \infty$

$$A_n^0(z) = B_n(x_1) e^{x_1 z} \{1 + O(1/n)\}, \quad (5)$$

$$A_n^p(z) = B_n(x_{p+1}) e^{(x_{p+1} - \lambda_p)z} \{1 + O(1/n)\} - B_n(x_p) e^{(x_p - \lambda_p)z} \{1 + O(1/n)\}, \quad (6)$$

при $1 \leq p \leq k-1$,

$$A_n^k(z) = -B_n(x_k) e^{(x_k - \lambda_k)z} \{1 + O(1/n)\}. \quad (7)$$

Д о к а з а т е л ь с т в о. Исходя из интегрального представления

$$A_n^0(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{C_0} \frac{e^{\xi z} d\xi}{[\varphi(\xi)]^n}, \quad (8)$$

докажем равенство (5). Для этого в интеграле (8) деформируем контур интегрирования C_0 в прямоугольник R , принадлежащий области $\{z: -\infty < \operatorname{Re} z < \lambda_1\}$, с вершинами в точках $A(-a', -r)$, $B(-a', r)$, $C(a, r)$, $D(a, -r)$, где r – достаточно большое положительное число, $a \in (0, \lambda_1)$, $a' > 0$. Так как

$$|\varphi(a + it)| = \prod_{j=0}^k \sqrt{(a - \lambda_j)^2 + t^2} > |\varphi(a)|, \quad t \in [-r, r] \setminus \{0\},$$

то на вертикальном отрезке, соединяющем точки C и D , минимум функции $|\varphi(\xi)|$ достигается в единственной точке a . Аналогично, на вертикальном отрезке, соединяющем точки A и B , минимум функции $|\varphi(\xi)|$ достигается в единственной точке $-a'$. На оставшихся двух горизонтальных отрезках при достаточно большом r значение $|\varphi(\xi)|$ больше каждого из значений $|\varphi(\xi)|$ в точках $-a'$ и a . Действительно, если $r > 2 \max\{a', \lambda_k\}$, то при $t \in [-a, a]$

$$|\varphi(t \pm ir)| = \prod_{j=0}^k \sqrt{(t - \lambda_j)^2 + r^2} > \max\{|\varphi(a)|, |\varphi(-a')|\}.$$

Определимся теперь с выбором a' и a . Положим $a = x_1$, а a' возьмем таким, чтобы $|\varphi(-a')| > |\varphi(a)|$. Такой выбор возможен, так как $|\varphi(t)| \rightarrow +\infty$ при $t \in \mathbb{R}$ и $t \rightarrow -\infty$.

Считаем положительным направлением обхода произвольного отрезка $[L, N]$ направление от L к N и полагаем

$$F_n^{[L, N]}(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{[L, N]} \frac{e^{\xi z} d\xi}{[\varphi(\xi)]^n}.$$

Область G можно выбрать так, чтобы $[D, C] \subset G$. Поэтому

$$F_n^{[D, C]}(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{[D, C]} e^{\xi z} e^{nS(\xi)} d\xi.$$

В силу выбора точки a максимум функции $\operatorname{Re} S(\xi)$ на отрезке $[D, C]$ достигается в единственной точке x_1 , которая является простой точкой перевала. Поэтому для нахождения асимптотики интеграла $F_n^{[D, C]}$ можно применить метод перевала (утверждение 2). В результате получим

$$F_n^{[D, C]} = \frac{1}{2\pi i} \sqrt{\frac{-2\pi}{nS''(x_1)}} e^{nS(x_1)} e^{x_1 z} (1 + O(1/n)). \quad (9)$$

Ветвь корня в (9) выбираем с учетом того, что в рассматриваемом случае угол $\varphi_0 = \pi/2$. Тогда окончательно получим, что при $n \rightarrow \infty$

$$F_n^{[D, C]}(z) = B_n(x_1) e^{x_1 z} \{1 + O(1/n)\}. \quad (10)$$

К интегралу $F_n^{[B, A]}(z)$ применимы аналогичные рассуждения. Учитывая при этом выбор точки $-a'$, нетрудно показать, что имеет место оценка

$$|F_n^{[B, A]}(z)| \leq \theta |e^{n(S(x_1) - \delta)}|,$$

где θ и δ – положительные постоянные. Это значит, что при $n \rightarrow \infty$ интеграл $F_n^{[B, A]}(z)$ по модулю экспоненциально мал по сравнению с $|e^{nS(x_1)}|$. Это утверждение справедливо и по отношению к интегралам $F_n^{[C, D]}(z)$, $F_n^{[A, D]}(z)$. Поэтому основной вклад в асимптотику $A_n^0(z)$ вносит интеграл по отрезку $[D, C]$. Тогда из (10) следует справедливость равенства (5). Равенства (6) и (7) доказываются аналогично. Теорема 1 доказана.

С л е д с т в и е. При $n \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned} A_n^0(0) &= B_n(x_1) \{1 + O(1/n)\}, \\ A_n^p(0) &= B_n(x_{p+1}) \{1 + O(1/n)\} - B_n(x_p) \{1 + O(1/n)\}, \quad 1 \leq p \leq k-1, \\ A_n^k(0) &= -B_n(x_k) \{1 + O(1/n)\}. \end{aligned} \quad (11)$$

Из (11) следует, что при достаточно больших n $A_n^0(0) \neq 0$ и $A_n^k(0) \neq 0$. При таких n определим две последовательности нормированных многочленов

$$\tilde{A}_n^0(z) = A_n^0(z) / A_n^0(0), \quad \tilde{A}_n^k(z) = A_n^k(z) / A_n^k(0).$$

Чтобы определить последовательности нормированных многочленов при $1 \leq p \leq k-1$, рассмотрим три возможных случая, каждый из которых реализуется для конкретных систем экспонент.

А) $|\varphi(x_p)| \neq |\varphi(x_{p+1})|$. Обозначим через $\tilde{x}_p$ ту из точек x_p, x_{p+1} , для которой

$$\min\{|\varphi(x_p)|, |\varphi(x_{p+1})|\} = |\varphi(\tilde{x}_p)|.$$

Тогда при достаточно больших n $A_n^p(0) \neq 0$, и поэтому определена последовательность $\tilde{A}_n^p(z) = A_n^p(z) / A_n^p(0)$.

Б) $\varphi(x_{p+1}) = -\varphi(x_p)$, $S''(x_{p+1}) \neq S''(x_p)$. При достаточно больших n $A_n^p(0) \neq 0$, и поэтому определена последовательность $\tilde{A}_n^p(z) = A_n^p(z) / A_n^p(0)$.

В) $\varphi(x_{p+1}) = -\varphi(x_p)$, $S''(x_{p+1}) = S''(x_p)$. Поскольку $(-1)^{k+p+1}\varphi(x_p) > 0$, то

$$e^{nS(x_p)} = (-1)^{n(k+p+1)} e^{-n \ln|\varphi(x_p)|}, \quad e^{nS(x_{p+1})} = (-1)^{n(k+p+1)+n} e^{-n \ln|\varphi(x_p)|}.$$

Поэтому

$$A_n^p(z) = (-1)^{n(k+p+1)} \sqrt{\frac{1}{2\pi n S''(x_p)}} e^{-n \ln|\varphi(x_p)|} \{(-1)^n - 1\} \{1 + O(1/n)\}.$$

В этом случае при достаточно больших n $A_{2n+1}^p(0) \neq 0$ и, следовательно, определена последовательность многочленов $\tilde{A}_{2n+1}^p(z) = A_{2n+1}^p(z) / A_{2n+1}^p(0)$.

Производную многочлена $A_n^p(z)$ можно представить в виде

$$\frac{dA_n^p}{dz}(z) = \frac{e^{-\lambda_p z}}{2\pi i} \int_{C_p} (\xi - \lambda_p) \frac{e^{\xi z} d\xi}{[\varphi(\xi)]^n}. \quad (12)$$

Аналогично, как и при нахождении асимптотики $A_n^p(z)$, применив к интегралу в правой части равенства (12) при $z = 0$ метод перевала, получим

$$\frac{dA_n^p}{dz}(0) = B_n(x_{p+1})(x_{p+1} - \lambda_p) \{1 + O(1/n)\} - B_n(x_p)(x_p - \lambda_p) \{1 + O(1/n)\}.$$

При сделанных предположениях

$$\frac{dA_{2n}^p}{dz}(0) = (-1)^{n(k+p+1)} \sqrt{\frac{1}{2\pi n S''(x_p)}} e^{-n \ln|\varphi(x_p)|} (x_{p+1} - x_p) \{1 + O(1/n)\},$$

и, следовательно, при достаточно больших n определена последовательность многочленов $\tilde{A}_{2n}^p(z) = A_{2n}^p(z) / (A_{2n}^p)'(0)$.

Т е о р е м а 2. При $n \rightarrow \infty$ локально равномерно по z

$$\tilde{A}_n^0(z) \Rightarrow e^{x_1 z}, \quad \tilde{A}_n^k(z) \Rightarrow e^{(x_k - \lambda_k)z}. \quad (13)$$

Если $1 \leq p \leq k-1$, то локально равномерно по z при $n \rightarrow \infty$ в случае А)

$$\tilde{A}_n^p(z) \Rightarrow e^{(\bar{x}_p - \lambda_p)z}; \quad (14)$$

в случае Б)

$$\tilde{A}_{2n}^p(z) \Rightarrow \left(\frac{e^{(x_{p+1} - \lambda_p)z}}{\sqrt{S''(x_{p+1})}} - \frac{e^{(x_p - \lambda_p)z}}{\sqrt{S''(x_p)}} \right) \left(\frac{1}{\sqrt{S''(x_{p+1})}} - \frac{1}{\sqrt{S''(x_p)}} \right), \quad (15)$$

$$\tilde{A}_{2n+1}^p(z) \Rightarrow \left(\frac{e^{(x_{p+1} - \lambda_p)z}}{\sqrt{S''(x_{p+1})}} + \frac{e^{(x_p - \lambda_p)z}}{\sqrt{S''(x_p)}} \right) \left(\frac{1}{\sqrt{S''(x_{p+1})}} + \frac{1}{\sqrt{S''(x_p)}} \right); \quad (16)$$

в случае В)

$$\tilde{A}_{2n}^p(z) \Rightarrow \frac{1}{x_{p+1} - x_p} \left(e^{(x_{p+1} - \lambda_p)z} - e^{(x_p - \lambda_p)z} \right), \quad (17)$$

$$\tilde{A}_{2n+1}^p(z) \Rightarrow \frac{1}{2} \left(e^{(x_{p+1} - \lambda_p)z} + e^{(x_p - \lambda_p)z} \right). \quad (18)$$

Д о к а з а т е л ь с т в о. Поточечная сходимость в (13)–(18) доказана в теореме 1. Остается доказать, что нормированные многочлены $\tilde{A}_n^p(z)$ при $0 \leq p \leq k$ в каждом из случаев А), Б) и В)

равномерно сходятся на компактах в $\mathbb{C}$ к соответствующим функциям. Докажем это, например, для многочленов $\tilde{A}_n^0(z)$.

Если предположить, что $|z| \leq \rho$ и $\xi \in R$, то модуль $e^{\xi z}$ ограничен $M = e^{4\rho \max\{a', \lambda_k\}}$. Опираясь на равенство (8), в этом случае получим, что

$$|A_n^0(z)| \leq \frac{M}{\pi} \int_{\alpha}^{\beta} e^{-n \ln|\zeta(t)|} |\zeta'(t)| dt \quad (19)$$

при условии, что контур интегрирования R прежний и параметризуется вещественным параметром $t \in [\alpha, \beta]$. При достаточно больших n неравенство (19) сохраняется, если вместо R взять отрезок $[D, C]$. Для нахождения асимптотики интеграла в (19) применим метод Лапласа (утверждение 1). В результате получим, что при $n \rightarrow \infty$

$$\int_{\alpha}^{\beta} e^{n \operatorname{Re} S(\zeta(t))} |\zeta'(t)| dt = \sqrt{\frac{-2\pi}{n[\operatorname{Re} S(\zeta(t))]''_{t=t_0}}} e^{n \operatorname{Re} S(x_1)} |\zeta'(t_0)| (1 + O(1/n)), \quad (20)$$

где t_0 выбрано так, что $\zeta(t_0) = x_1$. Нетрудно показать, что

$$[\operatorname{Re} S(\zeta(t))]''_{t=t_0} = -S''(x_1) |\zeta'(t_0)|^2 < 0.$$

Отсюда, учитывая (11), (20), при $n \geq n_0$ получаем неравенство $|\tilde{A}_n^0(z)| \leq 2M$, из которого следует, что последовательность $\{\tilde{A}_n^0(z)\}_{n=1}^{\infty}$ равномерно ограничена по модулю в круге $\{z : |z| \leq \rho\}$. Тогда по теореме Витали [12, с. 371] эта последовательность равномерно сходится к функции $e^{x_1 z}$ на любом компакте из круга $\{z : |z| \leq \rho\}$. Аналогичные рассуждения применимы и к другим последовательностям из теоремы 2. Теорема 2 доказана.

Примеры. Примеры систем экспонент, для которых реализуются случаи А) и В) имеются в [7] и [8]. Полученные в этих работах результаты полностью согласуются с теоремами 1 и 2. Приведем пример, когда реализуется случай Б).

Рассмотрим систему экспонент $\{e^{\lambda_p z}\}_{p=0}^3$, где $\lambda_0 = 0$, $\lambda_1 = 1 - \varepsilon$, $\lambda_2 = 2 + \varepsilon$, $\lambda_3 = 3$, а $0 \leq \varepsilon < 1$. При выбранных значениях параметров

$$x_1 = \frac{3}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{9 - 2(1 - \varepsilon)(2 + \varepsilon)}, \quad x_2 = \frac{3}{2}, \quad x_3 = \frac{3}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{9 - 2(1 - \varepsilon)(2 + \varepsilon)},$$

$$\varphi(x_1) = \varphi(x_3) = -\frac{1}{4}(1 - \varepsilon)^2(2 + \varepsilon)^2, \quad \varphi(x_2) = \frac{9}{4}(0,5 + \varepsilon)^2.$$

Тогда при $\varepsilon = \frac{3}{2}\sqrt{2} - 2 \in (0, 1)$

$$x_1 = \frac{3}{2} - \frac{3}{2} \sqrt{2 - \sqrt{2}}, \quad x_2 = \frac{3}{2}, \quad x_3 = \frac{3}{2} + \frac{3}{2} \sqrt{2 - \sqrt{2}},$$

$$\varphi(x_2) = -\varphi(x_1) = -\varphi(x_3) = \frac{81}{8} \left(\frac{3}{2} - \sqrt{2} \right),$$

в то время как

$$\varphi''(x_2) = -18 + 9\sqrt{2}, \quad \varphi''(x_1) = \varphi''(x_3) = 36 - 18\sqrt{2}.$$

Поэтому

$$S''(x_1) = S''(x_3) = \frac{16}{9}(2 - \sqrt{2}), \quad S''(x_2) = \frac{32}{9}.$$

Следовательно, случай Б) реализуется при $p=1$ и $p=2$. Согласно теореме 2, например, при $p=1$ получаем

$$\tilde{A}_{2n}^1(z) \Rightarrow \frac{3}{4} e^{3(\sqrt{2}-1)z/2} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{e^{-3\sqrt{2}-\sqrt{2}} z/2}}{\sqrt{2-\sqrt{2}}} \right), \quad \tilde{A}_{2n+1}^1(z) \Rightarrow (\sqrt{2}-1) e^{3(\sqrt{2}-1)z/2} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{e^{-3\sqrt{2}-\sqrt{2}} z/2}}{\sqrt{2-\sqrt{2}}} \right).$$

Литература

1. *Mahler K.* // *Comp. Math.* 1968. Vol. 19. P. 95–166.
2. *Hermite C.* // *Ann. Math. Pura. Appl. Ser. 2A.* 1883. Vol. 21. P. 289–308.
3. *Mahler K.* // *J. Reine Angew. Math.* 1931. Vol. 166. P. 118–150.
4. *Aptekarev A. I., Stahl H.* // *Progress in Approximation Theory.* New York; Berlin: Springer-Verlag, 1992. P. 127–167.
5. *Chudnovsky G. V.* // *Lecture Notes in Math.* New York; Berlin: Springer-Verlag, 1982. Vol. 925. P. 299–322.
6. *Borwein P. B.* // *Const. Approx.* 1986. Vol. 62. P. 291–302.
7. *Wielonsky F.* // *J. Approx. Theory.* 1997. Vol. 90, N 2. P. 283–298.
8. *Старовойтов А. П.* // Проблемы физики, математики и техники. 2014. № 1(18). С. 74–80.
9. *Старовойтов А. П.* // Проблемы физики, математики и техники. 2013. № 1(14). С. 81–87.
10. *Старовойтов А. П.* // Изв. вузов. Математика. 2014. № 9. С. 59–68.
11. *Сидоров Ю. В., Федорюк М. В., Шабунин М. И.* Лекции по теории функций комплексного переменного. М., 1989.
12. *Маркушевич А. И.* Теория аналитических функций. М., 1967. Т. 1.

A. V. ASTAFYEVA, A. P. STAROVOITOV

avastafeva@mail.ru; svoitov@gsu.by

ASYMPTOTIC PROPERTIES OF HERMITE'S POLYNOMIALS

Summary

The article deals with asymptotic properties of diagonal Hermite–Pade’s approximants of type I for the exponential system $\{e^{\lambda_j z}\}_{j=0}^k$ with arbitrary real $\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_k$. The proved theorems complement the known results of P. Borwein, F. Wielonsky, and A. P. Starovoitov.

УДК 517.926.4

С. Г. КРАСОВСКИЙ

ИЗМЕНЕНИЕ ЗНАКА ЦЕНТРАЛЬНОГО И ОСОБОГО ПОКАЗАТЕЛЕЙ
ЛИНЕЙНЫХ СИНГУЛЯРНЫХ СИСТЕМ

(Представлено академиком Н. А. Изобовым)

Институт математики НАН Беларуси, Минск

Поступило 15.12.2014

Рассматриваем сингулярные линейные дифференциальные системы:
исходную

$$\varepsilon \dot{x} = A(t)x, \quad x \in \mathbb{R}^n, \quad \varepsilon \in (0, 1], \quad t \geq 0, \quad n \geq 2, \quad (1_{A/\varepsilon})$$

с кусочно-непрерывной ограниченной матрицей коэффициентов $A(t)$, совокупностью характеристических показателей (характеристической совокупностью) $\lambda(A/\varepsilon) \equiv (\lambda_1(A/\varepsilon), \dots, \lambda_n(A/\varepsilon)) \in \mathbb{R}^n$ и возмущенную

$$\varepsilon \dot{y} = A(t)y + Q(t)y, \quad y \in \mathbb{R}^n, \quad \varepsilon \in (0, 1], \quad t \geq 0, \quad (1_{(A+Q)/\varepsilon})$$

с достаточно малыми возмущениями $Q(\cdot)$, имеющими норму $\sup_{t \geq t_\delta \geq 0} \|Q(t)\| \leq \delta$ – мало (или эквивалентную предельную норму $\overline{\lim}_{t \rightarrow +\infty} \|Q(t)\| \leq \delta$).

Чтобы оценить точные верхнюю $\Omega'(A) = \lim_{\delta \rightarrow +0} \sup_{\|Q(t)\| \leq \delta} \lambda_n(A+Q)$ и нижнюю $\omega'(A) = \lim_{\delta \rightarrow +0} \inf_{\|Q(t)\| \leq \delta} \lambda_1(A+Q)$ предельные границы изменения соответственно старшего $\lambda_n(A+Q)$ и младшего $\lambda_1(A+Q)$ характеристических показателей возмущенной системы (1_{A+Q}) (в случае $\varepsilon = 1$), Р. Э. Виноградом [1; 2] введены понятия младшего $\omega(A)$ и старшего $\Omega(A)$ центральных показателей системы (1_A) и построены формулы их вычисления по матрице Коши $X_A(t, \tau)$:

$$\begin{aligned} \omega(A) &= \lim_{T \rightarrow +\infty} \overline{\lim}_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{mT} \sum_{k=1}^m \ln \|X_A^{-1}(kT, kT-T)\|^{-1}, \\ \Omega(A) &= \lim_{T \rightarrow +\infty} \overline{\lim}_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{mT} \sum_{k=1}^m \ln \|X_A(kT, kT-T)\|. \end{aligned} \quad (2)$$

Позднее В. М. Миллионщиковым [3] была доказана их достижимость.

Для исследования равномерной экспоненциальной устойчивости и неустойчивости дифференциальных систем по линейному приближению используются младший $\omega_0(A)$ и старший $\Omega_0(A)$ особые (генеральные) показатели линейной системы (1_A) :

$$\begin{aligned} \omega_0(A) &= \lim_{T \rightarrow +\infty} \underline{\lim}_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \ln \|X_A(kT-T, kT)\|^{-1}, \\ \Omega_0(A) &= \lim_{T \rightarrow +\infty} \overline{\lim}_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \ln \|X_A(kT, kT-T)\|, \end{aligned} \quad (3)$$

введенные П. Болем [4] (и независимо от него К. П. Персидским [5]).

В случае отрицательности старшего центрального $\Omega(A)$ (или старшего особого $\Omega_0(A)$) показателя системы (1_A) нулевое решение возмущенной системы (1_{A+Q}) с достаточно малым по норме

на полуоси $[0, +\infty)$ возмущением Q будет экспоненциально устойчиво (см., напр., [6, с. 50, 108; 7, с. 45, 108]), и тем самым справедливо свойство $y(t) \rightarrow 0$ при $t \rightarrow +\infty$ для всех решений системы (1_{A+Q}) .

Заметим, что свойства центральных и особых показателей линейных дискретных систем изучались в работах А. Чорника [8; 9].

Возникают, в частности, два вопроса:

1) существуют ли такие системы (1_A) с кусочно-непрерывными ограниченными коэффициентами и отрицательными старшими центральными показателями $\Omega(A)$ (или отрицательными старшими особыми показателями $\Omega_0(A)$), что старшие центральные $\Omega(A/\varepsilon)$ (или особые $\Omega_0(A/\varepsilon)$) показатели систем $(1_{A/\varepsilon})$ при некоторых значениях $\varepsilon \in (0, 1]$ оказываются положительными;

2) в случае отрицательного ответа на первый вопрос, существуют ли такие системы (1_A) с кусочно-непрерывными ограниченными коэффициентами и старшими центральными и особыми показателями $\Omega(A) = \Omega_0(A) = \varepsilon\Omega(A/\varepsilon) = \varepsilon\Omega_0(A/\varepsilon) < 0$, а также как угодно малое на полуоси $[0, +\infty)$ возмущение Q , что старшие центральные $\Omega((A+Q)/\varepsilon)$ (или особые $\Omega_0((A+Q)/\varepsilon)$) показатели оказываются положительными при некоторых значениях $\varepsilon \in (0, 1]$ (или даже их счетном числе).

Ответ на первый поставленный вопрос дает теорема 1.

Т е о р е м а 1. Для произвольных чисел $M > 0$, $\Omega \in (-M/3, 0)$ существуют:

1) двумерная система (1_A) с кусочно-непрерывной ограниченной матрицей коэффициентов $A(t)$, $\|A(t)\| \leq M$, $\forall t \geq 0$;

2) две последовательности $\{\varepsilon_m\} \downarrow +0$ и $\{\varepsilon'_m\} \downarrow +0$, $m \in \mathbb{N}$, значений параметра $\varepsilon > 0$, такие, что исходная система (1_A) имеет совпадающие старший центральный $\Omega(A)$ и старший особый $\Omega_0(A)$ показатели $\Omega(A) = \Omega_0(A) = \Omega$, а старшие центральный $\Omega(A/\varepsilon)$ и особый $\Omega_0(A/\varepsilon)$ показатели сингулярной системы $(1_{A/\varepsilon})$ одновременно оказываются положительными и отделенными от нуля на счетном множестве значений параметра $\varepsilon = \varepsilon_m$ и отрицательными на другом счетном множестве значений параметра $\varepsilon = \varepsilon'_m$ для каждого фиксированного натурального m .

С х е м а д о к а з а т е л ь с т в а. Для построения линейной системы по заданным в условии теоремы числам $M > 0$ и $\Omega \in (-M/3, 0)$ определяем величины

$$a = M + 3\Omega, \quad b = M, \quad \Delta = \frac{2\pi}{M}, \quad \omega = \frac{6\pi}{M}. \quad (4)$$

При таком определении справедливы неравенства

$$0 < a < b \leq M, \quad 0 < \Delta < \omega, \quad (5)$$

а выражение $(a-b)\frac{\omega-\Delta}{2\omega}$ оказывается равным заданному значению Ω . С помощью величин a, b, Δ, ω , определенных равенствами (4), теперь можно определить элементы 2×2 -матрицы коэффициентов $A(t)$ линейной системы (1_A) :

$$a_{11}(t) = \begin{cases} 0, & t \in [(2k+1)\omega - \Delta, (2k+1)\omega) \cup [(2k+2)\omega - \Delta, (2k+2)\omega), \\ a, & t \in [2k\omega, (2k+1)\omega - \Delta), \\ -b, & t \in [(2k+1)\omega, (2k+2)\omega - \Delta), \end{cases}$$

$$a_{22}(t) = a_{11}(t) \frac{a^2(a_{11}(t) - a) - b^2(a_{11}(t) + b)}{ab(a+b)},$$

$$a_{21}(t) = -a_{12}(t) = \begin{cases} M, & t \in [(2k+1)\omega - \Delta, (2k+1)\omega) \cup [(2k+2)\omega - \Delta, (2k+2)\omega), \\ 0, & t \in [2k\omega, (2k+1)\omega - \Delta) \cup [(2k+1)\omega, (2k+2)\omega - \Delta), \end{cases}$$

где $k \in \mathbb{N} \cup \{0\}$. Из неравенств (5) следует, что при таком определении коэффициентов построенной системы выполнено необходимое условие $\|A(t)\| \leq M$, $\forall t \geq 0$.

Вычисляя непосредственно по формулам (2), (3), получаем, что старший центральный и старший особый показатели построенной системы оказываются равными заданному числу

$$\Omega(A) = \Omega_0(A) = (a-b)\frac{\omega-\Delta}{2\omega} = \Omega < 0.$$

Если же теперь рассматривать соответствующую сингулярную возмущенную систему $(1_{A/\varepsilon})$, то непосредственными вычислениями получаем, что для значений параметра $\varepsilon = \varepsilon_m = 2\Delta M / (\pi + 4\pi m) \xrightarrow{m \rightarrow +\infty} +0$, $m \in \mathbb{N}$, старшие центральный и особый показатели построенной системы $(1_{A/\varepsilon_m})$ оказываются положительными и отделенными от нуля:

$$\Omega(A/\varepsilon_m) = \Omega_0(A/\varepsilon_m) = \frac{2}{3} \frac{a}{\varepsilon_m} > 0,$$

а для значений параметра ε при производной, взятых из последовательности $\varepsilon'_m = (2m+1)^{-1} \pi^{-1} \Delta M \xrightarrow{m \rightarrow +\infty} +0$, $m \in \mathbb{N}$, старшие центральный и особый показатели построенной системы $(1_{A/\varepsilon'_m})$ отрицательны:

$$\Omega(A/\varepsilon'_m) = \Omega_0(A/\varepsilon'_m) = \varepsilon'^{-1}_m \Omega < 0.$$

Теорема 1 доказана.

З а м е ч а н и е 1. Можно показать, что младшие центральный $\omega(A/\varepsilon)$ и особый $\omega_0(A/\varepsilon)$ показатели линейной системы, построенной при доказательстве теоремы 1, отрицательны на указанных множествах значений параметра ε :

$$\omega(A/\varepsilon) = \omega_0(A/\varepsilon) = -(2/3)\varepsilon^{-1}M < 0, \quad \varepsilon \in \{\varepsilon_m\} \cup \{\varepsilon'_m\} \cup \{1\}.$$

Положительный ответ на второй вопрос содержит

Т е о р е м а 2. Для произвольных чисел $M > 0$ и $\Omega \in (-M/3, 0)$ существуют:

1) двумерная система (1_A) с кусочно-непрерывной ограниченной матрицей коэффициентов $A(t)$, $\|A(t)\| \leq M$, и отрицательными старшим центральным $\Omega(A)$ и старшим особым $\Omega_0(A)$ показателями $\Omega(A) = \Omega_0(A) = \Omega < 0$, а также отрицательными показателями $\Omega(A) = \Omega_0(A) = \varepsilon\Omega(A/\varepsilon) = \varepsilon\Omega_0(A/\varepsilon) = \varepsilon\Omega < 0$ соответствующей сингулярной системы $(1_{A/\varepsilon})$ при всех значениях $\varepsilon > 0$;

2) кусочно-непрерывное возмущение $Q(\cdot)$ с нормой $\|Q(t)\| \leq \delta$, $\forall t \geq 0$, при любом как угодно малом $\delta > 0$ и последовательность $\{\varepsilon_m\} \downarrow 0$ такие, что сингулярная возмущенная система $(1_{(A+Q)/\varepsilon})$ имеет старшие центральный $\Omega((A+Q)/\varepsilon)$ и особый $\Omega_0((A+Q)/\varepsilon)$ показатели, которые одновременно оказываются положительными и отделенными от нуля на счетном множестве значений параметра $\varepsilon = \varepsilon_m$ для каждого фиксированного натурального m .

С х е м а д о к а з а т е л ь с т в а. Выбираем произвольные числа $\Delta > 0$ и $\delta > 0$, а числа a, b, ω определяем следующим образом:

$$a = M + 3\Omega > 0, \quad b = M > 0, \quad \omega = 3\Delta.$$

В силу такого определения значение выражения $\frac{1}{2}(a-b)\left(1 - \frac{\Delta}{\omega}\right)$ находится в пределах от $-M/3$ до нуля и обеспечивается выполнение равенства $\frac{1}{2}(a-b)\left(1 - \frac{\Delta}{\omega}\right) = \Omega \in (-M/3, 0)$.

Определим элементы матрицы коэффициентов $A(t) = \text{diag}[a_1(t), a_2(t)]$ исходной системы (1_A) :

$$a_1(t) = \begin{cases} 0, & t \in [(2k+1)\omega - \Delta, (2k+1)\omega) \cup [(2k+2)\omega - \Delta, (2k+2)\omega), \\ a, & t \in [2k\omega, (2k+1)\omega - \Delta), \\ -b, & t \in [(2k+1)\omega, (2k+2)\omega - \Delta), \end{cases}$$

$$a_2(t) = \begin{cases} 0, & t \in [(2k+1)\omega - \Delta, (2k+1)\omega) \cup [(2k+2)\omega - \Delta, (2k+2)\omega), \\ b, & t \in [2k\omega, (2k+1)\omega - \Delta), \\ -a, & t \in [(2k+1)\omega, (2k+2)\omega - \Delta), \end{cases}$$

где $k \in \mathbb{N} \cup \{0\}$. Непосредственными вычислениями по формулам (2), (3) получаем, что старший центральный и старший особый показатели построенной системы оказываются равными заданному числу

$$\Omega(A) = \Omega_0(A) = \frac{1}{2}(a-b)\left(1 - \frac{\Delta}{\omega}\right) = \Omega < 0,$$

а поэтому характеристические показатели $\lambda_1(A)$ и $\lambda_2(A)$ этой системы также будут отрицательными [6, с. 108]. Поскольку построенная система (1_A) диагональна, то соответствующая сингулярная система $(1_{A/\varepsilon})$ имеет характеристические показатели $\lambda_i(A/\varepsilon) = \varepsilon^{-1}\lambda_i(A) < 0, i = 1, 2$, и является асимптотически устойчивой. Для этой же диагональной системы отрицательными оказываются и старшие центральный и особый показатели, вычисленные по формулам (2), (3):

$$\begin{aligned}\Omega(A/\varepsilon) &= \lim_{T \rightarrow +0} \overline{\lim}_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{mT} \sum_{k=1}^m \ln \|X_{A/\varepsilon}(kT, kT-T)\| = \\ \lim_{T \rightarrow +0} \overline{\lim}_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{mT} \sum_{k=1}^m \varepsilon^{-1} \ln \|X_A(kT, kT-T)\| &= \Omega(A)/\varepsilon = \Omega/\varepsilon < 0 \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow +0} -\infty, \\ \Omega_0(A/\varepsilon) &= \lim_{T \rightarrow +\infty} \overline{\lim}_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \ln \|X_{A/\varepsilon}(kT, kT-T)\| = \\ \lim_{T \rightarrow +\infty} \overline{\lim}_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{\varepsilon T} \ln \|X_A(kT, kT-T)\| &= \Omega_0(A)/\varepsilon = \Omega_0/\varepsilon < 0 \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow +0} -\infty.\end{aligned}$$

Матрицу возмущений $Q(t)$ полагаем равной $\begin{pmatrix} 0 & -\delta \\ \delta & 0 \end{pmatrix}$ при $t \in [k\omega - \Delta, k\omega)$, $k \in \mathbb{N}$, и нулевой на остальных промежутках времени. При этом обеспечивается выполнение неравенства $\|Q(t)\| \leq \delta, \forall t \geq 0$.

Непосредственными вычислениями можно убедиться, что для системы $(1_{(A+Q)/\varepsilon})$, построенной таким образом, характеристический показатель $\lambda[y]$ решения $y(t, y_0, \varepsilon)$, $y(0, y_0, \varepsilon) = [1, 0]^T$, где $\varepsilon = \varepsilon_m = \frac{2\Delta\delta}{\pi + 4\pi m} \xrightarrow{m \rightarrow +\infty} +0$, $m \in \mathbb{N}$, имеет представление $\lambda[y] = (2/3)\varepsilon^{-1}a > 0$. Поэтому старший характеристический показатель $\lambda_2((A+Q)/\varepsilon_m)$ этой системы положителен и отделен от нуля.

По указанной при доказательстве теоремы 2 последовательности $\{\varepsilon_m\} \downarrow 0$ можно сделать вывод о положительности верхней предельной границы изменения старшего характеристического показателя сингулярной возмущенной системы $(1_{(A+Q)/\varepsilon_m})$, а следовательно, и о положительности старшего центрального $\Omega((A+Q)/\varepsilon_m)$ и старшего особого $\Omega_0((A+Q)/\varepsilon_m)$ показателей. Непосредственными вычислениями по формулам (2) и (3), примененными к линейной системе с матрицей коэффициентов $\varepsilon_m^{-1}(A+Q)$, также получаем $\Omega((A+Q)/\varepsilon_m) = \Omega_0((A+Q)/\varepsilon_m) = (2/3)\varepsilon^{-1}a > 0$. Теорема 2 доказана.

З а м е ч а н и е 2. Коэффициенты систем, построенных при доказательстве теорем 1 и 2, можно сделать бесконечно дифференцируемыми.

З а м е ч а н и е 3. Эффект одновременной смены знака старшего центрального и старшего особого показателей под действием малых возмущений на бесконечном (счетном) числе значений малого положительного параметра при производной, выявленный в настоящей работе для двумерных линейных сингулярных дифференциальных систем, можно обобщить и на случай систем произвольной размерности.

Литература

1. Виноград Р. Э. // Мат. сб. 1957. Т. 42, № 2. С. 207–222.
2. Виноград Р. Э. // Докл. АН СССР. 1958. Т. 119, № 4. С. 633–635.
3. Миллиончиков В. М. // Сиб. мат. журн. 1969. Т. 10, № 1. С. 99–104.
4. Bohl P. Über Differentialgleichungen // J. reine und angew. Math. 1913. Bd. 144. S. 284–318.
5. Персидский К. П. // Мат. сб. 1933. Т. 40, № 3. С. 284–292.
6. Изобов Н. А. Введение в теорию показателей Ляпунова. Минск, 2006. – 319 с.
7. Izobov N. A. Lyapunov exponents and stability. Cambridge Scientific Publishers, 2012. – 353 p.
8. Czornik A., Niezabitowski M. // Nonlinear Analysis: Hybrid Systems. 2013. Vol. 9. P. 27–41.
9. Czornik A., Nawrat A., Niezabitowski M. // Studies in Computational Intelligence, vol. 440. Advanced Technologies for Intelligent Systems of National Border Security. 2013. P. 29–44.

S. G. KRASOVSKII

kras@im.bas-net.by

**SIGN CHANGING OF THE CENTRAL EXPONENT AND THE GENERAL EXPONENT
OF LINEAR SINGULAR SYSTEMS**

Summary

The existence of 2D linear differential systems with bounded piecewise continuous coefficients and a negative senior general exponent, such that the higher central exponent of the corresponding singular system is positive on a countable set of values of the positive parameter under derivative, is proved. Also, the existence of 2D linear singular differential systems with the effect of sign changing of the higher central exponent and the higher general exponent under small linear perturbations at an infinite number of small positive values for a parameter under derivative is proved. The result can be generalized to the case of systems of arbitrary dimension, and can be stated in the class of linear systems with infinitely differentiable coefficients.

УДК 511.42

Н. В. БУДАРИНА¹, Д. ДИККИНСОН², В. И. БЕРНИК³РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ДИСКРИМИНАНТОВ ЦЕЛОЧИСЛЕННЫХ МНОГОЧЛЕНОВ
С ЗАДАНЫМИ ЗАКОНАМИ ИХ ФАКТОРИЗАЦИИ

(Представлено академиком Н. А. Изобовым)

¹Хабаровское отделение Института прикладной математики ДВО РАН²Ирландский национальный университет в Мейноте³Институт математики НАН Беларуси, Минск

Поступило 30.03.2015

Пусть $P(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \dots + a_1 x + a_0 \in \mathbb{Z}[x]$ – многочлен степени $\deg P = n$ и высоты $H = H(P) = \max_{0 \leq j \leq n} |a_j|$. Если $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ – корни P и P – минимальный многочлен для этих корней, то $H(\alpha_i) = H(P)$, $1 \leq i \leq n$. Число

$$D(P) = a_n^{2n-2} \prod_{1 \leq i < j \leq n} (\alpha_i - \alpha_j)^2 \quad (1)$$

называется дискриминантом P . Дискриминант $D(P)$ можно записать в виде определителя порядка $2n - 1$ от своих коэффициентов, откуда, в частности, следует, что $D(P) \in \mathbb{Z}$ и если $D(P) \neq 0$, то

$$1 \leq |D(P)| < c_1(n) H^{2n-2}. \quad (2)$$

Рассмотрим класс полиномов

$$\mathcal{P}_n(Q) = \{P : \deg P = n, H(P) \leq Q\},$$

определенный для достаточно большого натурального числа Q . В (2) и далее через $c_1, c_2, \dots$ будем обозначать величины, зависящие от n и не зависящие от H и Q . Понятие дискриминанта – важная характеристика P и часто встречается в алгебре и теории чисел [1–4].

Обозначим через $\#A$ количество элементов конечного множества A , а через $\mu_1 B_1, \mu_2 B_2$ – меры Лебега и Хаара измеримых множеств $B_1 \subset \mathbb{R}$, $B_2 \subset \mathbb{Q}_p$, где $\mathbb{Q}_p$ – поле p -адических чисел.

Для простого числа p и $l \in \mathbb{N}$ обозначим через v корень уравнения $p^l = Q^v$. В работах [5–7] получены оценки для количества многочленов из класса $\mathcal{P}_n(Q)$, у которых дискриминанты по модулю не превосходят некоторой величины и при этом делятся на p^l . Задача ставится так. Выделим в натуральном числе b максимальную степень простого числа, $b = p^l b_1$, $\gcd(p, b_1) = 1$, и будем обозначать $|b|_p = p^{-l} = Q^{-v}$ – p -адическую норму b . Везде далее $|w|_p$ – p -адическая норма $w \in \mathbb{Q}_p$.

Рассмотрим класс полиномов

$$\mathcal{P}_n(Q, u, v) = \{P \in \mathcal{P}_n(Q) : 1 \leq |D(P)| < c_2 Q^{2n-2-2u}, |D(P)|_p < c_3 Q^{-2v}\}.$$

В работах [5–7] получены оценки для $\#\mathcal{P}_n(Q, u, v) > c_4 Q^{n+1-2u-2v}$, однако только при $\max(u, v) \leq 1/2$. В данной работе для класса $\mathcal{P}_n(Q, 0, v)$ получены оценки при любых $0 \leq v \leq n-1$. При доказательстве используются методы работ [7–9].

Т е о р е м а 1. Справедлива оценка

$$\#\mathcal{P}_n(Q, 0, v) > c_5 Q^{n+1-\frac{n+2}{n}v}.$$

Заметим, что при $n = 3$ эта оценка точная [10].

Вначале введем некоторые дополнительные понятия и приведем необходимые леммы.

Пусть $\delta_0, c_0 > \delta_0 > 0$ – действительные числа, $m \in \mathbb{N}$, $1 \leq m < n$. Обозначим через $B_3 \subset K$ множество p -адических чисел из некоторого цилиндра $K \subset \mathbb{Q}_p$, для которых при действительных числах $s_0, s_1, \dots, s_m, s_i \geq 0, 0 \leq i \leq m, s_0 + \dots + s_m = n + 1$ система неравенств

$$\begin{aligned} \delta_0 Q^{-s_0} &< |P(w)|_p < c_0 Q^{-s_0}, \\ \delta_0 Q^{-s_j} &< |P^j(w)|_p < c_0 Q^{-s_j}, \quad 1 \leq j \leq m, \\ \delta_0 &< |P^j(w)|_p < c_0, \quad m+1 \leq j \leq n, \end{aligned} \quad (3)$$

имеет решение в неприводимых полиномах $P \in \mathcal{P}_n(Q)$. Наложим на числа s_j дополнительное условие: последовательность из $m+1$ числа

$$d_j = s_{j-1} - s_j, \quad 1 \leq j \leq m, \quad d_{m+1} = s_m, \quad (4)$$

является невозрастающей.

Л е м м а 1. Пусть

$$S(\gamma_1) = \{w \in K : \min_{1 \leq j \leq n} |w - \gamma_j|_p = |w - \gamma_1|_p\}.$$

Тогда, если $|P'(w)|_p \neq 0, |P'(\gamma_1)|_p \neq 0$, то

$$|w - \gamma_1|_p \leq |P(w)|_p |P'(w)|_p^{-1}, \quad (5)$$

$$|w - \gamma_1|_p \leq |P(w)|_p |P'(\gamma_1)|_p^{-1}. \quad (6)$$

Неравенство (6) доказано в [4]. Неравенство (5) следует из тождества

$$P'(w)P^{-1}(w) = \sum_{i=1}^n (w - \gamma_i)^{-1}$$

и оценок

$$|P'(w)|_p |P(w)|_p^{-1} = \left| \sum_{i=1}^n (w - \gamma_i)^{-1} \right|_p \leq \max_{1 \leq i \leq n} |(w - \gamma_i)^{-1}|_p \leq |w - \gamma_1|_p^{-1}.$$

Л е м м а 2. Существуют действительные числа δ_0, c_0 такие, что при любом $d, 0 < d < 1$, система неравенств (3), (4) разрешима для всех $w \in B_4 \subset K$ и

$$\mu_2 B_4 > d \mu_2 K.$$

Утверждение аналогичное лемме 2 доказано в [11].

Л е м м а 3. При выполнении системы неравенств (3), (4) корни $\gamma_1, \dots, \gamma_{m+1}$ удовлетворяют неравенствам

$$|w - \gamma_j|_p < c_6 Q^{-s_{j-1} + s_j}, \quad 1 \leq j \leq m, \quad |w - \gamma_{m+1}|_p < c_6 Q^{-s_m}. \quad (7)$$

С х е м а д о к а з а т е л ь с т в а леммы 3. Упорядочим корни $\gamma_1, \dots, \gamma_n$ относительно w следующим образом:

$$|w - \gamma_1|_p \leq |w - \gamma_2|_p \leq \dots \leq |w - \gamma_n|_p. \quad (8)$$

При $m = 0$ второе неравенство (7) следует из (3) и (5). При $m = 1$ из (3) и (5) следует

$$|w - \gamma_1|_p \leq |P(w)|_p |P'(w)|_p^{-1} < c_0 \delta_0^{-1} Q^{-s_0 + s_1}. \quad (9)$$

Докажем второе неравенство (7). Если

$$|w - \gamma_2|_p \leq 2 |w - \gamma_1|_p, \quad (10)$$

то из (4), (9) и (10) имеем

$$|w - \gamma_2|_p \leq 2 |w - \gamma_1|_p \leq 2 c_0 \delta_0^{-1} Q^{-s_0 + s_1} \leq 2 c_0 \delta_0^{-1} Q^{-s_1},$$

и второе неравенство (7) доказано с $c_6 = 2c_0\delta_0^{-1}$. Если

$$|w - \gamma_2|_p > 2|w - \gamma_1|_p, \quad (11)$$

то из

$$P(w) = a_n(w - \gamma_1) \cdots (w - \gamma_n)$$

получим

$$P'(w) = a_n((w - \gamma_1) \cdots (w - \gamma_{n-1}) + \dots + (w - \gamma_2) \cdots (w - \gamma_n)). \quad (12)$$

Положим

$$M = a_n(w - \gamma_2) \cdots (w - \gamma_n).$$

Из (8), (11) и (12) по свойству неархимедовой нормы имеем

$$|P'(w)|_p = |M|_p. \quad (13)$$

Найдем

$$P''(w) = 2a_n((w - \gamma_3) \cdots (w - \gamma_n) + \dots + (w - \gamma_1)(w - \gamma_2) \cdots (w - \gamma_{n-2})),$$

а затем $(w - \gamma_2)P''(w)$,

$$(w - \gamma_2)P''(w) = 2a_n((w - \gamma_2)(w - \gamma_3) \cdots (w - \gamma_n) + \dots + (w - \gamma_1)(w - \gamma_2)^2 \cdots (w - \gamma_{n-2})),$$

откуда с учетом (13)

$$|w - \gamma_2|_p |P''(w)|_p \leq 2|P'(w)|_p \leq |P'(w)|_p. \quad (14)$$

Из (3), (4) и (14) следует, что

$$|w - \gamma_2|_p \leq |P'(w)|_p |P''(w)|_p^{-1} \leq c_0\delta_0^{-1}Q^{-s_1} < c_6Q^{-s_1}.$$

Далее применим индукцию по m . $\square$

Д о к а з а т е л ь с т в о т е о р е м ы 1. Возьмем $m = n - 1$ и $s_{j-1} - s_j = \theta$, $2 \leq j \leq n$. Тогда поскольку $s_n = 0$, то

$$\begin{aligned} s_{n-1} &= \theta, s_{n-2} = 2\theta, \dots, s_1 = (n-1)\theta, \\ s_0 &= n+1 - (s_1 + \dots + s_{n-1}) = n+1 - n(n-1)\theta/2. \end{aligned} \quad (15)$$

Воспользуемся леммой 3 и (15). Получим

$$|\gamma_k - \gamma_l|_p < c_7Q^{-\theta}, 1 \leq k < l \leq n,$$

и произведение

$$T_n = \prod_{1 \leq k < l \leq n} |\gamma_k - \gamma_l|_p^2$$

можно оценить так:

$$T_n < c_7Q^{-20C_{n-1}^2} = c_7Q^{-n(n-1)\theta}.$$

Если положить $\theta = \frac{2v}{n(n-1)}$, то из (1) получаем

$$|D(P)|_p < c_8Q^{-2v}. \quad (16)$$

Мы построили многочлен P_1 , который в окрестности точки $w_1 \in B_4$

$$|w_1 - w|_p < c_9Q^{-s_0+s_1}$$

удовлетворяет (16). Найдем $s_0 - s_1$:

$$s_0 - s_1 = n+1 - \theta(n(n-1)/2 + n-1) = n+1 - \frac{n+2}{n}v.$$

Каждый многочлен P , построенный в точках $w \in B_4$ может удовлетворять условиям (3), (4) на множестве $\sigma(P)$ с мерой не большей $nc_9 Q^{-n-1+\frac{n+2}{n}v}$. Если на множестве $B_4 \subset K$ с мерой $\mu_2 B_4 > d\mu_2 K$ построено t таких многочленов, то выполняется неравенство

$$tnc_9 Q^{-n-1+\frac{n+2}{n}v} > d\mu_2 K,$$

откуда

$$t > n^{-1} c_9^{-1} dQ^{n+1-\frac{n+2}{n}v} \mu_2 K,$$

и теорема доказана. $\square$

Работа первого автора выполнена при поддержке фонда РФФИ (грант 14-01-90002 Бел_а). Работа третьего автора выполнена при поддержке фонда БРФФИ (грант Ф14Р-034).

Литература

1. Beresnevich V. // Acta Arith. 1999. Vol. 90. P. 97–112.
2. Bernik V. // Acta Arith. 1989. Vol. 53. P. 17–28.
3. Ван дер Варден Б. Л. Алгебра. М.: Наука, 1976.
4. Спринджук В. Г. Проблема Малера в метрической теории чисел. Минск: Наука и техника, 1967.
5. Бересневич В. В., Берник В. И., Гетце Ф. // Докл. НАН Беларуси. 2010. Т. 54, № 2. С. 26–27.
6. Bernik V., Goetze F., Kukso O. // Acta Arith. 2008. Vol. 133, N 4. P. 375–390.
7. Bernik V., Goetze F., Kukso O. // Lith. Math. J. 2008. Vol. 48, N 4. P. 380–396.
8. Budarina N., Bernik V., Dickinson D. // Math. Proc. Cambridge Philos. Soc. 2010. Vol. 149, N 2. P. 193–216.
9. Bugeaud Y., Mignotte M. // Int. J. Number Theory. 2010. Vol. 6, N 3. P. 587–602.
10. Колёда Д. В. // Весці НАН Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. 2010. № 3. С. 10–16.
11. Beresnevich V. // Ann. of Math. 2012. Vol. 175, N 2. P. 187–235.

N. V. BUDARINA, D. DICKINSON, V. I. BERNIK

bernik@im.bas-net.by

DISTRIBUTION OF DISCRIMINANTS OF INTEGRAL POLYNOMIALS WITH PRESCRIBED LAWS OF FACTORIZATION

Summary

We obtained a sharp lower bound for the number of polynomials with the discriminants divisible by a large power of prime number.

ФИЗИКА

УДК 539.12

В. В. КИСЕЛЬ¹, Е. М. ОВСИЮК², О. В. ВЕКО², В. М. РЕДЬКОВ¹

НЕРЕЛЯТИВИСТСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ В ТЕОРИИ ЧАСТИЦЫ СО СПИНОМ 2

(Представлено членом-корреспондентом Л. М. Томильчиком)

¹Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси, Минск²Мозырский государственный педагогический университет им. И. П. Шамякина

Поступило 27.04.2015

Теория массивного и безмассового поля со спином 2, начиная с работ Паули и Фирца [1; 2], всегда присутствовала в литературе [3]. Большая часть работ выполнена в рамках формализма волновых уравнений второго порядка. По-видимому, первое систематическое исследование теории частицы со спином 2 в рамках теории релятивистских волновых уравнений первого порядка выполнено в работах Ф. И. Федорова и его учеников [4]. Оказалось, что частица со спином 2 требует в этом формализме для своего описания 30-компонентной волновой функции. Федоровым было инициировано развитие еще одной, 50-компонентной теории частицы со спином 2. В литературе специально исследовался вопрос о связях между двумя вариантами теории частицы со спином 2. Было показано, что 50-компонентное волновое уравнение для заряженной частицы со спином 2 во внешнем электромагнитном поле может быть сведено к виду 30-компонентного уравнения, но с дополнительным членом взаимодействия, интерпретируемым как аномальный магнитный момент.

Известно [5–8], что в релятивистской теории любой массивной частицы должен существовать нерелятивистский предел. Наиболее известными и разработанными [8] являются случаи полей спинов 1/2 и 1. До настоящего времени вопрос о паулиевском уравнении для частицы со спином 2 не исследовался. В настоящей работе соответствующее нерелятивистское волновое уравнение Паули для частицы со спином 2 найдено (реальными физическими частицами с таким спином являются короткоживущие мезоны). При этом использован формализм релятивистских волновых уравнений первого порядка, учтено присутствие внешнего электромагнитного поля.

Исходим из релятивистского волнового уравнения [5–7]

$$(\Gamma_\mu D_\mu + M)\Psi = 0 \quad (1)$$

($\hbar = c = 1$) для частицы массой M и спином $s = 2$, заданного относительно 30-компонентной функции Ψ , функция Ψ может быть представлена набором тензорных полей Ψ_0 , Ψ_μ , $\Psi_{(\mu\nu)}$, $\Psi_{\rho[\sigma\eta]}$, где Ψ_0 – 4-скаляр; Ψ_μ – 4-вектор; $\Psi_{(\mu\nu)}$ – симметричный тензор второго ранга с нулевым следом, т. е. $\Psi_{(\mu\nu)} = \Psi_{(\nu\mu)}$, $\Psi_{(\mu\mu)} = 0$, $\Psi_{\rho[\sigma\eta]}$ – тензор третьего ранга, удовлетворяющий условиям

$$\Psi_{\mu[v\lambda]} = -\Psi_{\mu[\lambda v]}, \quad \Psi_{\mu[\mu\nu]} = 0, \quad \Psi_{\mu[v\lambda]} + \Psi_{\lambda[\mu\nu]} + \Psi_{\nu[\lambda\mu]} = 0. \quad (2)$$

В уравнении (1) Γ_μ – четверка постоянных 30×30 -матриц, явный вид которых следующий (в пространстве Минковского используем метрику с мнимой единицей):

$$\Gamma_\mu = \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{0,\mu} + e^{\mu,0}) - \sqrt{\frac{2}{3}}(e^{v,(\mu\nu)} - e^{(\mu\nu),v}) - \sqrt{2}(e^{(v\lambda),v[\mu\lambda]} + e^{v[\mu\lambda],(v\lambda)}). \quad (3)$$

В (3) $e^{A,B}$ – элементы полной матричной алгебры [5–7], определяемые соотношениями

$$(e^{A,B})_{CD} = \delta_{A,C} \delta_{BD}, \quad e^{A,B} e^{C,D} = \delta_{B,C} e^{A,D},$$

где $\delta_{A,B}$ – обобщенные символы Кронекера. Минимальные полиномы [5–7] приведенных матриц Γ_μ задаются в виде $(\Gamma_\mu)^3((\Gamma_\mu)^2 - 1) = 0$ (по μ нет суммирования). Уравнение (1) представим в форме системы тензорных уравнений. При этом удобно разбить составляющие волновой функции на три группы: Ψ_+ , Ψ_- и Ψ_0 :

$$\Psi_0 = P_0 \Psi, \quad \Psi_+ = P_+ \Psi, \quad \Psi_- = P_- \Psi,$$

где проективные операторы P_0 , P_+ и P_- равны

$$P_0 = 1 - \Gamma_4^2, \quad P_+ = \frac{1}{2} \Gamma_4^3 (\Gamma_4 + 1), \quad P_- = \frac{1}{2} \Gamma_4^3 (\Gamma_4 - 1). \quad (4)$$

Функции Ψ_0 , Ψ_+ и Ψ_- в явной тензорной форме определяются так:

$$\Psi_0 = \begin{bmatrix} \Psi_0 \\ \Psi_k \\ \Psi_4 \\ -\frac{1}{3} \delta_{kn} \Psi_{(44)} \\ \Psi_{(4k)} \\ \Psi_{(44)} \\ \Psi_{r[kn]} \\ \Psi_{4[kn]} \\ \frac{1}{2} (\Psi_{r[k4]} - \Psi_{k[r4]}) \\ \Psi_{4[k4]} \end{bmatrix}, \quad (5)$$

$$\Psi_{+(-)} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ (\Psi_{(kn)} + \frac{1}{3} \delta_{kn} \Psi_{(44)}) + (-) \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_{k[n4]} + \Psi_{n[k4]}) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} [\frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_{k[n4]} + \Psi_{n[k4]}) + (-) (\Psi_{(kn)} + \frac{1}{3} \delta_{kn} \Psi_{(44)})] \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (6)$$

При получении нерелятивистского уравнения для частицы со спином 2 будем исходить из предположения, что составляющие функции Ψ_+ являются большими, тогда как составляющие функции Ψ_- являются малыми [9]. В этом случае большими являются следующие комбинации функций:

$$(\Psi_{(kn)} + \frac{1}{3} \delta_{kn} \Psi_{(44)}) \text{ и } (\Psi_{k[n4]} + \Psi_{n[k4]}).$$

Малыми будем также полагать и составляющие функции Ψ_0 . Обратимся к исходной системе тензорных уравнений, эквивалентной матричному уравнению (1):

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\sqrt{2}} D_{\mu} \Psi_{\mu} + M \Psi_0 = 0, \frac{1}{\sqrt{2}} D_{\mu} \Psi_0 - \sqrt{\frac{2}{3}} D_{\nu} \Psi_{(\nu\mu)} + M \Psi_{\mu} = 0, \\
& \frac{1}{\sqrt{6}} (D_{\rho} \Psi_{\sigma} + D_{\sigma} \Psi_{\rho} - \frac{1}{2} \delta_{\rho\sigma} D_{\nu} \Psi_{\nu}) - \frac{1}{\sqrt{2}} (D_{\nu} \Psi_{\rho[\nu\sigma]} + D_{\nu} \Psi_{\sigma[\nu\rho]}) + M \Psi_{(\rho\sigma)} = 0, \\
& \frac{1}{\sqrt{2}} (D_{\beta} \Psi_{(\eta\lambda)} - D_{\lambda} \Psi_{(\beta\eta)} + \frac{1}{3} \delta_{\eta\lambda} D_{\rho} \Psi_{(\rho\beta)} - \frac{1}{3} \delta_{\eta\beta} D_{\rho} \Psi_{(\rho\lambda)}) + M \Psi_{\eta[\lambda\beta]} = 0.
\end{aligned} \tag{7}$$

Произведем расщепление уравнений (7) по составляющим вида (4)–(6):

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\sqrt{2}} D_4 \Psi_4 + \frac{1}{\sqrt{2}} D_c \Psi_c + M \Psi_0 = 0, \\
& \frac{1}{\sqrt{2}} D_k \Psi_0 - \sqrt{\frac{2}{3}} D_b \Psi_{(bk)} - \sqrt{\frac{2}{3}} D_4 \Psi_{(4k)} + M \Psi_k = 0, \\
& \frac{1}{\sqrt{2}} D_4 \Psi_0 - \sqrt{\frac{2}{3}} D_b \Psi_{(b4)} - \sqrt{\frac{2}{3}} D_4 \Psi_{(44)} + M \Psi_4 = 0, \\
& \frac{1}{\sqrt{6}} \{D_a \Psi_b + D_b \Psi_a - \frac{1}{2} \delta_{ab} (D_4 \Psi_4 + D_c \Psi_c)\} - \\
& \frac{1}{\sqrt{2}} D_c (\Psi_{a[cb]} + \Psi_{b[ca]}) + \frac{1}{\sqrt{2}} D_4 (\Psi_{a[b4]} + \Psi_{b[a4]}) + M \Psi_{(ab)} = 0, \\
& \frac{1}{\sqrt{6}} (D_4 \Psi_a + D_a \Psi_4) - \frac{1}{\sqrt{2}} D_c (\Psi_{a[c4]} + \Psi_{4[ca]}) - \frac{1}{\sqrt{2}} D_4 \Psi_{4[a4]} + M \Psi_{(a4)} = 0, \\
& \frac{1}{2\sqrt{6}} (3D_4 \Psi_4 - D_b \Psi_b) - \sqrt{2} D_c \Psi_{4[c4]} + M \Psi_{(44)} = 0, \\
& \frac{1}{\sqrt{2}} \{D_r \Psi_{(kn)} - D_n \Psi_{(kr)} + \frac{1}{3} \delta_{kn} (D_c \Psi_{(cr)} + D_4 \Psi_{(r4)}) - \\
& \frac{1}{3} \delta_{kr} (D_c \Psi_{(cn)} + D_4 \Psi_{(n4)})\} + M \Psi_{k[nr]} = 0, \\
& \frac{1}{\sqrt{2}} \{D_4 \Psi_{(kn)} - D_n \Psi_{(k4)} + \frac{1}{3} \delta_{kn} (D_c \Psi_{(c4)} + D_4 \Psi_{(44)})\} + M \Psi_{k[n4]} = 0, \\
& \frac{1}{\sqrt{2}} (\frac{2}{3} D_4 \Psi_{(n4)} - D_n \Psi_{(44)} - \frac{1}{3} D_c \Psi_{(cn)}) + M \Psi_{4[n4]} = 0.
\end{aligned} \tag{8}$$

Отсюда комбинированием уравнений получаем

$$\begin{aligned}
& (M + D_4) \{(\Psi_{(kn)} + \frac{1}{3} \delta_{kn} \Psi_{(44)}) + \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_{k[n4]} + \Psi_{n[k4]})\} - \\
& \frac{1}{\sqrt{2}} (D_b \Psi_{k[bn]} + D_b \Psi_{n[bk]} + \frac{2}{3} \delta_{kn} D_b \Psi_{4[b4]}) +
\end{aligned} \tag{9}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\sqrt{6}} (D_k \Psi_n + D_n \Psi_k - \frac{2}{3} \delta_{kn} D_b \Psi_b) - \frac{1}{2} (D_k \Psi_{(n4)} + D_n \Psi_{(k4)} - \frac{2}{3} \delta_{kn} D_b \Psi_{(b4)}) = 0, \\
& (M - D_4) \{(\Psi_{(kn)} + \frac{1}{3} \delta_{kn} \Psi_{(44)}) - \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_{k[n4]} + \Psi_{n[k4]})\} - \\
& \frac{1}{\sqrt{2}} (D_b \Psi_{k[bn]} + D_b \Psi_{n[bk]} + \frac{2}{3} \delta_{kn} D_b \Psi_{4[b4]}) +
\end{aligned} \tag{10}$$

$$\frac{1}{\sqrt{6}} (D_k \Psi_n + D_n \Psi_k - \frac{2}{3} \delta_{kn} D_b \Psi_b) + \frac{1}{2} (D_k \Psi_{(n4)} + D_n \Psi_{(k4)} - \frac{2}{3} \delta_{kn} D_b \Psi_{(b4)}) = 0.$$

Кроме того, имеем

$$M\left(\frac{1}{2}\Psi_0 - \frac{1}{\sqrt{3}}\Psi_{(44)}\right) + \sqrt{\frac{2}{3}}D_k\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\Psi_k + \Psi_{4[k4]}\right) = 0, \quad (11)$$

$$M\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\Psi_k + \Psi_{4[k4]}\right) + \sqrt{\frac{2}{3}}D_k\left(\frac{1}{2}\Psi_0 - \frac{1}{\sqrt{3}}\Psi_{(44)}\right) - \frac{1}{\sqrt{3}}D_b(\Psi_{(bk)} + \frac{1}{3}\delta_{bk}\Psi_{(44)}) = 0. \quad (12)$$

Выделим энергию покоя с помощью следующей подстановки: $\Psi_A = \exp(-Mx_4)\Phi_A$. При этом уравнения трансформируются в

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\sqrt{2}}D_4\Phi_4 + \frac{1}{\sqrt{2}}D_c\Phi_c + M(\Phi_0 - \frac{1}{\sqrt{2}}\Phi_4) = 0, \\ & \frac{1}{\sqrt{2}}D_k\Phi_0 - \sqrt{\frac{2}{3}}D_b\Phi_{(bk)} - \sqrt{\frac{2}{3}}D_4\Phi_{(4k)} + M(\Phi_k + \sqrt{\frac{2}{3}}\Phi_{(4k)}) = 0, \\ & \frac{1}{\sqrt{2}}D_4\Phi_0 - \sqrt{\frac{2}{3}}D_b\Phi_{(b4)} - \sqrt{\frac{2}{3}}D_4\Phi_{(44)} + M(\Phi_4 - \frac{1}{\sqrt{2}}\Phi_0 + \sqrt{\frac{2}{3}}\Phi_{(44)}) = 0, \\ & \frac{1}{\sqrt{2}}D_c(\Phi_{a[cb]} + \Phi_{b[ca]}) + \frac{1}{\sqrt{2}}D_4(\Phi_{a[b4]} + \Phi_{b[a4]}) + M\{\Phi_{(ab)} + \frac{1}{2\sqrt{6}}\delta_{ab}\Phi_4 - \\ & \quad \frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi_{a[b4]} + \Phi_{b[a4]})\} = 0, \\ & \frac{1}{\sqrt{6}}(D_4\Phi_a + D_a\Phi_4) - \frac{1}{\sqrt{2}}D_c(\Phi_{a[c4]} + \Phi_{4[ca]}) - \\ & \quad \frac{1}{\sqrt{2}}D_4\Phi_{4[a4]} + M\{\Phi_{(a4)} - \frac{1}{\sqrt{6}}\Phi_a + \frac{1}{\sqrt{2}}\Phi_{4[a4]}\} = 0, \\ & \frac{1}{2\sqrt{6}}(3D_4\Phi_4 - D_b\Phi_b) - \sqrt{2}D_c\Phi_{4[c4]} + M\{\Psi_{(44)} - \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2}}\Phi_4\} = 0, \\ & \frac{1}{\sqrt{2}}\{D_r\Phi_{(kn)} - D_n\Phi_{(kr)} + \frac{1}{3}\delta_{kn}(D_c\Phi_{(cr)} + D_4\Phi_{(r4)}) - \\ & \quad \frac{1}{3}\delta_{kr}(D_c\Phi_{(cn)} + D_4\Phi_{(n4)})\} + M\{\Phi_{k[nr]} - \frac{1}{3\sqrt{2}}\delta_{kn}\Phi_{(r4)} + \frac{1}{3\sqrt{2}}\delta_{kr}\Phi_{(n4)}\} = 0, \\ & \frac{1}{\sqrt{2}}(D_r\Phi_{(n4)} - D_n\Phi_{(r4)}) + M\Phi_{4[nr]} = 0, \\ & \frac{1}{\sqrt{2}}\{D_4\Phi_{(kn)} - D_n\Phi_{(k4)} + \frac{1}{3}\delta_{kn}(D_c\Phi_{(c4)} + D_4\Psi_{(44)})\} + \\ & \quad M\{\Phi_{k[n4]} - \frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi_{(kn)} + \frac{1}{3}\delta_{kn}\Psi_{(44)})\} = 0, \\ & \frac{1}{\sqrt{2}}(\frac{2}{3}D_4\Phi_{(n4)} - D_n\Phi_{(44)} - \frac{1}{3}D_c\Phi_{(cn)}) + M\{\Phi_{4[n4]} - \frac{\sqrt{2}}{3}\Phi_{(n4)}\} = 0. \end{aligned} \quad (13)$$

Сохраняются соотношения типа (11), (12):

$$\begin{aligned} & M\left(\frac{1}{2}\Phi_0 - \frac{1}{\sqrt{3}}\Phi_{(44)}\right) + \sqrt{\frac{2}{3}}D_k\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\Phi_k + \Phi_{4[k4]}\right) = 0, \\ & M\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\Phi_k + \Phi_{4[k4]}\right) + \sqrt{\frac{2}{3}}D_k\left(\frac{1}{2}\Phi_0 - \frac{1}{\sqrt{3}}\Phi_{(44)}\right) - \frac{1}{\sqrt{2}}D_b(\Phi_{(bk)} + \frac{1}{3}\delta_{bk}\Phi_{(44)}) = 0. \end{aligned}$$

Из уравнений (9), (10) выводим

$$\begin{aligned}
& D_4 \left\{ (\Phi_{(kn)} + \frac{1}{3} \delta_{kn} \Phi_{(44)}) + \frac{1}{\sqrt{2}} (\Phi_{k[n4]} + \Phi_{n[k4]}) \right\} - \frac{1}{\sqrt{2}} (D_b \Phi_{k[bn]} + D_b \Phi_{n[bk]} + \\
& \frac{2}{3} \delta_{kn} D_b \Phi_{4[b4]}) + \frac{1}{\sqrt{6}} (D_k \Phi_n + D_n \Phi_k - \frac{2}{3} \delta_{kn} D_b \Phi_b) - \\
& \frac{1}{2} (D_k \Phi_{(n4)} + D_n \Phi_{(k4)} - \frac{2}{3} \delta_{kn} D_b \Phi_{(b4)}) = 0, \\
& (2M - D_4) \left\{ (\Phi_{(kn)} + \frac{1}{3} \delta_{kn} \Phi_{(44)}) - \frac{1}{\sqrt{2}} (\Phi_{k[n4]} + \Phi_{n[k4]}) \right\} - \\
& \frac{1}{\sqrt{2}} (D_b \Phi_{k[bn]} + D_b \Phi_{n[bk]} + \frac{2}{3} \delta_{kn} D_b \Phi_{4[b4]}) + \\
& \frac{1}{\sqrt{6}} (D_k \Phi_n + D_n \Phi_k - \frac{2}{3} \delta_{kn} D_b \Phi_b) + \frac{1}{2} (D_k \Phi_{(n4)} + D_n \Phi_{(k4)} - \frac{2}{3} \delta_{kn} D_b \Phi_{(b4)}) = 0.
\end{aligned} \tag{14}$$

Произведем нерелятивистское приближение в уравнении (14), записанном в форме

$$\begin{aligned}
& D_4 \left\{ (\Phi_{(kn)} + \frac{1}{3} \delta_{kn} \Phi_{(44)}) + \frac{1}{\sqrt{2}} (\Phi_{k[n4]} + \Phi_{n[k4]}) \right\} + \\
& \frac{1}{\sqrt{6}} \left\{ D_k (\Phi_n + \sqrt{\frac{2}{3}} \Phi_{(n4)}) + D_n (\Phi_k + \sqrt{\frac{2}{3}} \Phi_{(k4)}) - \frac{2}{3} \delta_{kn} D_b (\Phi_b + \sqrt{\frac{2}{3}} \Phi_{(b4)}) \right\} - \\
& (D_k \Phi_{(n4)} + D_n \Phi_{(k4)} - \frac{2}{3} \delta_{kn} D_b \Phi_{(b4)}) - \\
& \frac{1}{\sqrt{2}} D_b \left\{ (\Phi_{k[bn]} + \frac{1}{3\sqrt{2}} \delta_{kn} \Phi_{(b4)} - \frac{1}{3\sqrt{2}} \delta_{kb} \Phi_{(n4)}) + \right. \\
& \left. (\Phi_{n[bk]} + \frac{1}{3\sqrt{2}} \delta_{kn} \Phi_{(b4)} - \frac{1}{3\sqrt{2}} \delta_{nb} \Phi_{(k4)}) + \frac{2}{3} \delta_{kn} (-\Phi_{4[b4]} + \frac{\sqrt{2}}{3} \Phi_{(b4)}) \right\} = 0.
\end{aligned} \tag{15}$$

В силу принятых предположений о малости составляющих функций Ψ_0, Ψ_- , из уравнений (13) следует, что

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\sqrt{2}} (\Phi_{k[n4]} + \Phi_{n[k4]}) \approx (\Phi_{(kn)} + \frac{1}{3} \delta_{kn} \Phi_{(44)}), \\
& \Phi_{k[n4]} \approx \Phi_{n[k4]}, \\
& \frac{1}{\sqrt{3}} \Phi_k + \Phi_{4[k4]} \approx \frac{1}{M\sqrt{2}} D_b (\Phi_{(bk)} + \frac{1}{3} \delta_{bk} \Phi_{(44)}), \\
& \Phi_{k[nr]} - \frac{1}{3\sqrt{2}} \delta_{kn} \Phi_{(r4)} + \frac{1}{3\sqrt{2}} \delta_{kr} \Phi_{(n4)} \approx -\frac{1}{M\sqrt{2}} \left\{ D_r (\Phi_{(kn)} + \frac{1}{3} \delta_{kn} \Phi_{(44)}) - \right. \\
& \left. D_n (\Phi_{(kr)} + \frac{1}{3} \delta_{kr} \Phi_{(44)}) + \frac{1}{3} \delta_{kn} D_c (\Phi_{(cr)} + \frac{1}{3} \delta_{cr} \Phi_{(44)}) - \frac{1}{3} \delta_{kr} D_c (\Phi_{(cn)} + \frac{1}{3} \delta_{cn} \Phi_{(44)}) \right\},
\end{aligned} \tag{16}$$

а также

$$\begin{aligned}
& \Phi_k + \sqrt{\frac{2}{3}} \Phi_{(k4)} \approx \frac{1}{M} \sqrt{\frac{2}{3}} D_b (\Phi_{(bk)} + \frac{1}{3} \delta_{bk} \Phi_{(44)}), \\
& \Phi_{4[n4]} - \frac{\sqrt{2}}{3} \Phi_{(n4)} \approx \frac{1}{M3\sqrt{2}} D_c (\Phi_{(cn)} + \frac{1}{3} \delta_{cn} \Phi_{(44)}),
\end{aligned} \tag{17}$$

откуда в свою очередь имеем

$$\frac{1}{\sqrt{3}}\Phi_k - \Phi_{4[k4]} + \frac{2\sqrt{2}}{3}\Phi_{(k4)} \approx \frac{1}{M3\sqrt{2}}D_b(\Phi_{(bk)} + \frac{1}{3}\delta_{bk}\Phi_{(44)}). \quad (18)$$

Кроме того,

$$\begin{aligned} \Phi_{(n4)} - \frac{1}{\sqrt{6}}\Phi_n - \frac{1}{\sqrt{2}}\Phi_{4[n4]} &\approx \frac{1}{M\sqrt{2}}D_c\Phi_{n[c4]} \approx \frac{1}{M2\sqrt{2}}D_c(\Phi_{n[c4]} + \Phi_{c[n4]}) \approx \\ &\frac{1}{2M}D_c(\Phi_{(cn)} + \frac{1}{3}\delta_{cn}\Phi_{(44)}), \end{aligned} \quad (19)$$

значит,

$$\begin{aligned} \Phi_{(n4)} &\approx \frac{1}{M}D_c(\Phi_{(cn)} + \frac{1}{3}\delta_{cn}\Phi_{(44)}), \Phi_n \approx 0, \\ \Phi_{4(n4)} &\approx \frac{1}{M\sqrt{2}}D_c(\Phi_{(cn)} + \frac{1}{3}\delta_{cn}\Phi_{(44)}). \end{aligned} \quad (20)$$

С учетом соотношений (16)–(20) нерелятивистское уравнение для частицы со спином 2 в приближении Паули, получаемое из (15), принимает вид

$$\begin{aligned} D_4(\Phi_{(kn)} + \frac{1}{3}\delta_{kn}\Phi_{(44)}) &= \frac{1}{2M}D_bD_b(\Phi_{(kn)} + \frac{1}{3}\delta_{kn}\Phi_{(44)}) - \\ &\frac{ie}{4M}\varepsilon_{kbc}B_c(\Phi_{(bn)} + \frac{1}{3}\delta_{bn}\Phi_{(44)}) - \frac{ie}{4M}\varepsilon_{nbc}B_c(\Phi_{(bk)} + \frac{1}{3}\delta_{bk}\Phi_{(44)}); \end{aligned} \quad (21)$$

$-ieF_{[\mu\nu]} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$ – тензор электромагнитного поля; $F_{[ab]} = \varepsilon_{abc}B_c$. Учитывая, что $D_4 = \partial_4 - ieA_4$, $\partial_4 = \frac{1}{i}\partial_t$, $A_4 = i\varphi$ (φ – скалярный потенциал электромагнитного поля), уравнению (21) можно придать форму

$$\begin{aligned} (i\partial_t - e\varphi)\left(\Phi_{(kn)} + \frac{1}{3}\delta_{kn}\Phi_{(44)}\right) &= -\frac{1}{2M}D_bD_b\left(\Phi_{(kn)} + \frac{1}{3}\delta_{kn}\Phi_{(44)}\right) - \\ &\frac{ie}{4M}\varepsilon_{kcb}B_c\left(\Phi_{(bn)} + \frac{1}{3}\delta_{bn}\Phi_{(44)}\right) - \frac{ie}{4M}\varepsilon_{ncb}B_c\left(\Phi_{(bk)} + \frac{1}{3}\delta_{bk}\Phi_{(44)}\right). \end{aligned}$$

В свою очередь, функция $(\Phi_{(kn)} + \frac{1}{3}\delta_{kn}\Phi_{(44)})$ представима в виде (для краткости круглые скобки как напоминание симметричности по двум индексам опускаем)

$$\Psi_{kn} = (\Phi_{kn} + \frac{1}{3}\delta_{kn}\Phi_{44}) = (\Phi_{kn} - \frac{1}{3}\delta_{kn}\Phi_{cc}).$$

Составляющие этого симметричного тензора можно перечислить:

$$\begin{aligned} \Psi_{kn} &= (\Psi_j, \Psi'_j), \quad \Psi_1 = \Psi_{23}, \quad \Psi_2 = \Psi_{31}, \quad \Psi_3 = \Psi_{12}, \\ \Psi'_1 &= \Psi_{11}, \quad \Psi'_2 = \Psi_{22}, \quad \Psi'_3 = \Psi_{33}, \quad \Psi'_3 + \Psi'_2 + \Psi'_1 = 0. \end{aligned}$$

Уравнение Паули для этих шести (фактически пяти независимых) компонент выглядит так:

$$(i\partial_t - e\varphi)\Psi_{kn} = -\frac{1}{2M}D_bD_b\Psi_{kn} - \frac{ie}{4M}(\varepsilon_{kcb}B_c\Psi_{bn} + \varepsilon_{ncb}B_c\Psi_{bk}); \quad (22)$$

формально в (22) имеем 6 уравнений. Однако можно заметить, что суммируя эти шесть уравнений по k и n , получим ноль:

$$(i\partial_t - e\varphi)\Psi_{kk} = -\frac{1}{2M}D_bD_b\Psi_{kk} - \frac{ie}{4M}(\varepsilon_{kcb}B_c\Psi_{bk} + \varepsilon_{kcb}B_c\Psi_{bk}) \Rightarrow 0 = 0.$$

В более детальном виде систему уравнений можно переписать следующим образом:

$$(i\partial_t - e\varphi)\Psi'_1 = -\frac{1}{2M}D_bD_b\Psi'_1 - \frac{ie}{2M}(B_2\Psi_2 - B_3\Psi_3),$$

$$\begin{aligned}
(i\partial_t - e\varphi)\Psi'_2 &= -\frac{1}{2M}D_b D_b \Psi'_2 - \frac{ie}{2M}(B_3\Psi_3 - B_1\Psi_1), \\
(i\partial_t - e\varphi)\Psi'_3 &= -\frac{1}{2M}D_b D_b \Psi'_3 - \frac{ie}{2M}(B_1\Psi_1 - B_2\Psi_2), \\
(i\partial_t - e\varphi)\Psi_1 &= -\frac{1}{2M}D_b D_b \Psi_1 - \frac{ie}{4M}[B_1(\Psi'_2 - \Psi'_3) - (B_2\Psi_3 - B_3\Psi_2)], \\
(i\partial_t - e\varphi)\Psi_2 &= -\frac{1}{2M}D_b D_b \Psi_2 - \frac{ie}{4M}[B_2(\Psi'_3 - \Psi'_1) - (B_3\Psi_1 - B_1\Psi_3)], \\
(i\partial_t - e\varphi)\Psi_3 &= -\frac{1}{2M}D_b D_b \Psi_3 - \frac{ie}{4M}[B_3(\Psi'_1 - \Psi'_2) - (B_1\Psi_2 - B_2\Psi_1)].
\end{aligned}$$

Отмечаем, что существенное зацепление отдельных уравнений происходит только во внешнем магнитном поле. Можно показать, что если в явном виде оставить в уравнениях только пять независимых компонент, то дополнительный член взаимодействия для частицы с внешним магнитным полем представим в виде скалярного произведения вектора магнитного поля $\mathbf{B}$ и вектора спина $\mathbf{S}$ (последний реализуется при этом 5-мерными матрицами).

Работа выполнена при поддержке Белорусского фонда фундаментальных исследований (грант Ф13-146).

Литература

1. Pauli W., Fierz M. // Helv. Phys. Acta. 1939. Bd. 12. S. 297–300.
2. Feirz M., Pauli W. // Proc. Roy. Soc. London. A. 1939. Vol. 173. P. 211–232.
3. De Broglie L. // C. R. Acad. Sci. Paris. 1941. Vol. 212. P. 657–659; Pauli W. // Rev. Mod. Phys. 1941. Vol. 13. P. 203–232; Гельфанд И. М., Яглом А. М. // ЖЭТФ. 1948. Т. 18. С. 703–733; Фрадкин Э. Е. // ЖЭТФ. 1950. Т. 20, вып. 1. С. 27–38; Файнберг В. Я. // Тр. ФИАН СССР. 1955. Т. 6. С. 269–332; Regge T. // Nuovo Cim. 1957. Vol. 5, N 2. P. 325–326; Buchdahl H. A. // Nuovo Cim. 1958. Vol. 10. P. 96–103; Buchdahl H. A. // Nuovo Cim. 1962. Vol. 25. P. 486–496; Velo G., Zwanziger D. // Phys. Rev. 1969. Vol. 188, N 5. P. 2218–2222; Velo G. // Nucl. Phys. B. 1972. Vol. 43. P. 389–401; Hagen C. R. // Phys. Rev. D. 1972. Vol. 6, N 4. P. 984–987; Hagen C. R. // Phys. Rev. D. 1972. Vol. 5, N 2. P. 377–388; Cox W. // J. Phys. A. 1982. Vol. 15. P. 253–268; Barut A. O., Xu B. W. // J. Phys. A. 1982. Vol. 15, N 4. P. 207–210; Loide R. K. // J. Phys. A. 1986. Vol. 19, N 5. P. 827–829; Vasiliev M. A. // Phys. Lett. B. 1992. Vol. 285. P. 225–234; Buchbinder I. L., Krykhtin V. A., Pershin V. D. // Phys. Lett. B. 1999. Vol. 466. P. 216–226; Buchbinder I. L. et al. // Nucl. Phys. B. 2000. Vol. 584. P. 615–640.
4. Федоров Ф. И. // Уч. зап. БГУ. Сер. физ.-мат. 1951. Вып. 12. С. 156–173; Крылов Б. В., Федоров Ф. И. // ДАН БССР. 1967. Т. 11, № 8. С. 681–684; Богуш А. А., Крылов Б. В., Федоров Ф. И. // Весці АН БССР. Сер. фіз.-мат. навук. 1968. № 1. С. 74–81; Федоров Ф. И. // Докл. АН СССР. 1968. Т. 179, № 4. С. 802–805; Крылов Б. В. // Весці АН БССР. Сер. фіз.-мат. навук. 1972. № 6. С. 82–89; Кисель В. В. // Весці АН БССР. Сер. фіз.-мат. навук. 1986. № 5. С. 94–99; Федоров Ф. И., Кирилов А. А. // Acta Physica Polonica. B. 1976. Vol. 7, N 3. P. 161–167; Богуш А. А., Кисель В. В. // Докл. АН БССР. 1984. Т. 28, № 8. С. 702–705; Богуш А. А., Кисель В. В., Федоров Ф. И. // Докл. АН СССР. 1984. Т. 277, № 2. С. 343–346; Богуш А. А., Кисель В. В. // Изв. вузов МВ и ССО СССР. Физика. 1988. Т. 31, № 3. С. 11–16; Богуш А. А., Кисель В. В. // Изв. вузов. Физика. 1984. № 1. С. 23–27; Богуш А. А., Кисель В. В., Федоров Ф. И. // Докл. Академии наук СССР. 1984. Т. 277, № 2. С. 343–346; Кисель В. В., Овсюк Е. М., Редьков В. М. // Весці НАН Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. 2011. № 2. С. 18–26; Богуш А. А., Кисель В. В., Токаревская Н. Г., Редьков В. М. // Весці НАН Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. 2003. № 1. С. 62–67; Кисель В. В., Редьков В. М. // Весці БДПУ імя Максіма Танка. Сер. 3. 2010. № 1(63). С. 3–6; Весці БДПУ імя Максіма Танка. Сер. 3. 2010. № 2(64). С. 8–10; Red'kov V. M., Tokarevskaya N. G., Kisel V. V. // Nonlinear Phenomena in Complex Systems. 2003. Vol. 6, N 3. P. 772–778.
5. Федоров Ф. И. Группа Лоренца. М.: Наука, 1979. – 384 с.
6. Богуш А. А. Введение в полевую теорию элементарных частиц. Минск: Наука и техника, 1981. – 390 с.
7. Плетюхов В. А., Стражев В. И., Редьков В. М. Группа Лоренца и теория релятивистских волновых уравнений. Минск: Беларус. навука, 2015. – 300 с.
8. Редьков В. М. Поля частиц в римановом пространстве и группа Лоренца. Минск: Беларус. наука, 2009. – 495 с.

V. V. KISEL, E. M. OVSIYUK, O. V. VEKO, V. M. RED'KOV

v.redkov@dragon.bas-net.by

NON-RELATIVISTIC APPROXIMATION IN THE THEORY OF A SPIN 2 PARTICLE

Summary

In the 30-component first-order wave equation (Fedorov, 1951) for a massive spin 2 particle, a non-relativistic approximation is performed. The quantum-mechanical equation of Pauli type for a spin 2 particle in the presence of an external electromagnetic field is derived. The non-relativistic wave function is a symmetric irreducible 2-rank tensor with five independent components.

УДК 530.1.535.3

Академик А. М. ГОНЧАРЕНКО

О РАСПРОСТРАНЕНИИ СОЛИТОНОВ В ОТРИЦАТЕЛЬНЫХ СРЕДАХ

Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси, Минск

Поступило 20.04.2015

В работе [1] нами частично рассмотрено распространение постоянных солитонов в отрицательных средах [2; 3]. В данном сообщении исследованы основные особенности свойств переменных солитонов в таких средах.

Для краткости ограничимся случаем одномерных пространственных солитонов. При этом имеем следующее нелинейное уравнение Шредингера [4]:

$$\frac{\partial E}{\partial z} + \frac{i}{2k_0} \frac{\partial^2 E}{\partial x^2} + i\beta_0 |E|^2 E = 0.$$

Здесь k_0 – постоянная распространения среды; β_0 – параметр нелинейности. Полагая электрическое поле $E = A_0 \psi$, $\beta = \beta_0 |A_0|^2$ и для отрицательных сред $k_0 = -\sigma$, получаем следующее уравнение:

$$\frac{\partial \psi}{\partial z} - \frac{i}{2\sigma} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + i\beta |\psi|^2 \psi = 0. \quad (1)$$

Ищем решение этого уравнения в форме переменного гауссова пучка

$$\psi = \exp \left(i\gamma_1 - \gamma_2 - \frac{x^2}{x_0^2 f} + i \frac{x^2}{x_0^2 g} \right). \quad (2)$$

Здесь γ_1, γ_2, f, g – функции от z . Подставляя (2) в уравнение (1), получаем следующую систему уравнений:

$$\gamma_1' + \beta - 2\beta\gamma_2 + \frac{1}{\alpha f} = 0,$$

$$\gamma_2' - \frac{1}{\alpha g} = 0; \quad (3)$$

$$\frac{f'}{f} - \frac{4}{\alpha g} = 0, \quad (4)$$

$$\frac{1}{\alpha f^2} - \frac{1}{\alpha g^2} + \frac{g'}{2g^2} + \beta \frac{1}{f} = 0. \quad (5)$$

Здесь $\alpha = \sigma x_0^2$, а штрих означает производную по z .

Сравнивая уравнения (3), (4) с аналогичными уравнениями обычных сред [5], заключаем, что функция $g(z)$ имеет в данном случае противоположный знак. Это означает, что фазовый фронт солитона распространяется в отрицательных средах в направлении, противоположном направлению распространения самого солитона, что характерно для любых импульсов в отрицательных средах.

Из уравнений (4), (5) получаем следующее уравнение относительно функции f , определяющей поперечный размер солитона:

$$2f'' = \frac{f'^2}{f} + \frac{16}{\alpha} \left(\frac{1}{f} + \alpha\beta \right).$$

Решение этого уравнения сводится к функции [5]

$$f' = \frac{4}{\alpha\sqrt{f_0}} \left(f - f_0 + \alpha\beta f_0 f \ln \frac{f}{f_0} \right)^{1/2}, \quad (6)$$

где $f_0 = f(0)$. При этом из уравнения (4) получаем

$$g = \sqrt{f_0} f \left(f - f_0 + \alpha\beta f_0 f \ln \frac{f}{f_0} \right)^{-1/2},$$

К сожалению, уравнение (6) это дифференциальное уравнение, которое не имеет решения в известных функциях. Его решение может быть найдено только приближенно и представлено через $\cos \left(\frac{4}{\alpha\sqrt{f_0}} \sqrt{-\alpha\beta} z \right)$. Это означает, что в отрицательных нелинейных средах возможно распространение пространственных переменных солитонов при условии, что и нелинейность тоже должна быть отрицательной, а именно $\beta < 0$.

Литература

1. Гончаренко А. М. // Весці НАН Беларусі, сер. фіз.-мат. навук. 2015. № 1. С. 123–124.
2. Веселаго В. Г. // УФН. 1967. Т. 92, вып. 3. С. 517–526.
3. Шевченко В. В. // УФН. 2011. Т. 181, вып. 11. С. 1171–1182.
4. Silberberg J. // Jpt. Lett. 1990. Vol. 15, N 22. P. 1283–1284.
5. Гончаренко А. М. Оптические гауссовы пучки и солитоны. Минск, 2011.

A. M. GONCHARENKO

a.goncharenko@ifanbel.bas-net.by

PROPAGATION OF SOLITONS IN NEGATIVE MEDIA

Summary

Some properties of solitons in negative media are investigated. It is shown that a soliton is an oscillating momentum.

УДК 535.42

Академик П. А. АПАНАСЕВИЧ

УСЛОВИЯ ПРИМЕНИМОСТИ УРАВНЕНИЙ ПЕРЕНОСА ИНТЕНСИВНОСТИ
ДЛЯ ОПИСАНИЯ ВЫНУЖДЕННОГО КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ

Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси, Минск

Поступило 13.04.2015

В последнее время вынужденное комбинационное рассеяние (ВКР) широко используется для преобразования частоты лазерного излучения. При этом для оптимизации создаваемой системы применяются теоретические модели, неизбежно включающие упрощающие предположения. В частности, часто используются уравнения переноса интенсивностей пучков накачки и стоксова излучения, при этом действие процесса ВКР на заселенности уровней колебательного перехода, на котором происходит ВКР, не учитывается. Данное сообщение посвящено определению условий применимости такого подхода и построению простейшей модели учета действия ВКР процесса на заселенности уровней рассеивающих центров, если этим действием пренебречь нельзя.

Случай однонаправленных пучков. Если направления пучков накачки и стоксова излучения совпадают, то часто ВКР взаимодействие между ними может быть описано системой уравнений [1–4]

$$\frac{1}{u_s} \frac{\partial I_s}{\partial t} + \frac{\partial I_s}{\partial z} = g I_p I_s - k_s I_s, \quad (1)$$

$$\frac{1}{u_p} \frac{\partial I_p}{\partial t} + \frac{\partial I_p}{\partial z} = -g' I_p I_s - k_p I_p, \quad (2)$$

где I_i , u_i и k_i – интенсивности, групповые скорости и коэффициенты потерь накачки ($i = p$) и стоксова излучения ($i = s$); g – коэффициент ВКР усиления $g' = g \lambda_s / \lambda_p$, λ_i – длины волн.

Как следует из процедуры вывода уравнений (1), ими обоснованно можно пользоваться в тех случаях, когда поперечное сечение пучка накачки не очень мало и его изменением на длине рассеивающей среды можно пренебречь, когда спектральная ширина излучения накачки значительно меньше спектральной ширины колебательного перехода, на котором происходит комбинационное рассеяние (КР), и когда, как уже отмечалось, можно пренебречь действием процесса ВКР на распределение рассеивающих центров по уровням рабочего колебательного перехода. Последнее в некоторых случаях может быть недопустимым и играть важную роль.

В наиболее часто практически реализуемых случаях частоты накачки и стоксова излучения находятся в области прозрачности используемых сред. При этом условии действие ВКР процесса на заселенности уровней рассеивающих центров часто может быть описано системой уравнений [3]:

$$\frac{dq}{dt} = 4 \operatorname{Im} U \rho - \frac{1}{T_1} (q - q_0), \quad (3)$$

$$\frac{d\rho}{dt} = i U^{\otimes} q - \left(\frac{1}{T_2} - i \Delta \right) \rho, \quad (4)$$

где $q = q_1 - q_2$ – разность заселенностей уровней рассеивающего центра, между которыми происходит КР переход; ρ – недиагональный элемент квантовомеханической матрицы плотности, соответствующий рассматриваемому переходу (величина, пропорциональная ВКР индуцированному дипольному моменту); T_1 – время релаксации разности заселенностей до равновесной q_0 ,

обычно называемого временем продольной релаксации; T_2 – время релаксации возбуждения перехода, т. е. время поперечной релаксации; $\Delta = 2\pi(\nu_p - \nu_s - c\Omega)$ – отстройка разности несущих частот ν_i накачки и стоксова излучения от частоты Ω (в см^{-1}) колебания, на котором происходит ВКР, и $U = \vec{E}_p \hat{\beta} \vec{E}_s / h$. Здесь E_i – амплитуды полей накачки и стока; h – постоянная Планка; β – тензор КР. При выводе уравнений (3) и (4) использовано предположение, что изменениями амплитуд E_i на времени поперечной релаксации T_2 можно пренебречь.

Уравнение (4) использовано при выводе уравнений (1) и (2) из более общих уравнений для амплитуд E_i взаимодействующих полей [1–3]. При этом предположено, что можно, во-первых, пренебречь изменениями ρ на времени поперечной релаксации T_2 и, во-вторых, положить $q = q_0$, т. е. пренебречь первым слагаемым в правой части уравнения (3), учитывающим действие процесса ВКР на заселенности уровней рассеивающих центров. Так как T_2 обычно значительно меньше T_1 , то области применимости этих предположений могут значительно различаться, причем область применимости первого всегда шире, чем второго. В области первого предположения уравнение (3) принимает вид

$$\frac{dq}{dt} = -2Bq - \frac{1}{T_1}(q - q_0), \quad (5)$$

где

$$B = \frac{2T_2 |U|^2}{1 + (T_2 \Delta)^2} \quad (6)$$

– вероятность перехода рассеивающего центра между уровнями 1 и 2, вызванного ВКР процессом. В ситуациях, когда первое предположение выполняется, а второе нет, уравнения (1) и (2) следует дополнить уравнением (5), заменив при этом параметр g на gq / q_0 .

Из простых соображений ясно, что параметры g и B жестко связаны между собой. Действительно, из процедуры вывода уравнений (1) и (2) следует [1–3], что имеет место соотношение

$$gI_p I_s = 2Nq_0 h\nu \frac{T_2 |U|^2}{1 + (T_2 \Delta)^2}, \quad (7)$$

в котором N – плотность рассеивающих центров и n_s – показатель преломления. Из (7) и (6) получается формула

$$B = gI_p I_s / h\nu_s Nq_0, \quad (8)$$

связывающая вероятность ВКР перехода B с величинами, измеряемыми в экспериментах по исследованиям ВКР.

Из уравнения (5) следует, что действием ВКР процесса на заселенности уровней рассеивающих центров можно пренебречь тогда, когда максимальное значение вероятности B удовлетворяет условию $B_m T_1 \ll 1$, или, что то же самое, когда $(I_p I_s)_m \ll h\nu_s Nq_0 / gT_1$. Из уравнений (1) и (2) следует, что в стационарном режиме произведение $I_p I_s$ имеет максимальное значение в области, где $I_s = I_p \lambda_p / \lambda_s$ и, соответственно, $(I_p I_s)_m = I_L^2 \lambda_p / 4\lambda_s$. Здесь I_L – интенсивность накачки на входе в ВКР среду. Приведенные соотношения определяют область интенсивностей I_L , в которой при описании стационарного ВКР усиления можно полагать $q = q_0$. Они применимы и в случае импульсной накачки, если различием скоростей u_i можно пренебречь. В этом случае под I_L следует понимать интенсивность в максимуме импульса накачки

ВКР лазер. В ВКР лазерах рассеивающая среда находится в резонаторе и при продольной накачке ВКР преобразование описывается уравнениями [4–6]

$$\frac{1}{u_s} \frac{\partial I_s^\pm}{\partial t} \pm \frac{\partial I_s^\pm}{\partial z} = g(I_p^+ + I_p^-) I_s^\pm - k_s I_s^\pm, \quad (9)$$

$$\frac{1}{u_p} \frac{\partial I_p^\pm}{\partial t} \pm \frac{\partial I_p^\pm}{\partial z} = -g'(I_s^+ + I_s^-) I_p^\pm - k_p I_p^\pm, \quad (10)$$

где $I_i^\pm$ – интенсивности пучков встречных направлений, переходящие друг в друга на зеркалах резонатора. В уравнении (8) в этом случае под I_i следует понимать суммы интенсивностей пучков противоположных направлений, т. е. полагать $I_i = I_i^+ + I_i^-$.

Пользуясь уравнениями (9), (10) и соотношением (8) нетрудно оценить условия, когда в этом случае $B_m \ll 1 / T_1$, и следовательно, действием ВКР процесса на заселенности уровней колебательного перехода можно пренебречь. Проведем такую оценку для случая стационарной генерации простейшего ВКР лазера, т. е. при предположениях, что зеркала расположены на торцах рассеивающей среды, входное зеркало (зеркало 1) полностью прозрачно для излучения накачки и полностью отражает стоксову компоненту, а выходное (зеркало 2) полностью отражает накачку и имеет коэффициент отражения R_s на частоте стока. При этих предположениях граничные условия имеют вид

$$I_{p1}^+ = I_L, \quad I_{p2}^- = I_{p2}^+, \quad I_{s1}^+ = I_{s1}^-, \quad I_{s2}^- = R_s I_{s2}^+, \quad (11)$$

где I_L – интенсивность излучения накачки, подводимая к входному зеркалу ВКР лазера.

С учетом (11) из уравнения (9) при $\delta I_s^\pm / \delta t = 0$ следует, что $gI_p = \gamma_s$ и $I_{s1}^\pm = (\sqrt{R_s})^\pm I_{s2}^\pm$, где $I_p = \int (I_p^+ + I_p^-) dz / l$ – средняя интенсивность накачки; l – длина среды; $\gamma_s = k_s l - \ln \sqrt{R_s}$ – коэффициент полных потерь стоксова излучения. Используя приведенные равенства нетрудно показать, что при $R_s > 0,5$ интенсивности $I_s = I_s^+ + I_s^-$ стоксова излучения на торцах рассеивающей среды различаются меньше, чем на 6 %, а следовательно, зависимость I_s от z при $R_s > 0,5$, как правило, можно пренебречь. В таких случаях из уравнения (10) с учетом соответствующих граничных условий получается соотношение

$$I_L [1 - \exp 2l(-g'I_s - k_p)] = (g'I_s + k_p) \gamma_s / g, \quad (12)$$

определяющее интенсивность I_s стоксова излучения в резонаторе. Определив I_s из (12), по формулам

$$I_{p1} = (1 + b_s^2) I_L \quad \text{и} \quad I_{p2} = 2b_s I_L, \quad (13)$$

где $b_s = \exp l(-g'I_s - k_p)$, нетрудно найти и интенсивности накачки I_{p_i} на торцах рассеивающей среды, а следовательно, и значения величины gI_{p_i} , входящей в определение вероятности ВКР перехода B . В других точках рассеивающей среды произведение $I_p I_s$ имеет значения, промежуточные между $I_{p1} I_s$ и $I_{p2} I_s$, при этом всегда $I_{p1} I_s > I_{p2} I_s$.

Из (12) и (13) следует, что когда I_L в два и больше раз превышает пороговое значение $I_{th} = \gamma_s / g'l$, то с высокой точностью на входном торце рассеивающей среды $I_{p1} = I_L$, $I_s = (\lambda_p / \lambda_s) I_L / \gamma_s$ и $B_1 = 2\lambda_p g I_L^2 / hc \gamma_s N q_0$, где $\gamma_s \approx -\ln \sqrt{R_s}$. Соответственно, условие допустимости пренебрежения действием процесса ВКР на заселенности уровней в этом случае имеет вид неравенства $I_L^2 \ll hc \gamma_s N q_0 / 2\lambda_p g T_1$. При оценках предположено, что внутренними потерями k_i можно пренебречь.

Пользуясь полученными соотношениями, проведем численную оценку B_1 для ВКР лазера, рассеивающей средой в котором является нитрат бария $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$, $\lambda_p = 1,064$ мкм и рассеяние происходит на колебании с $\Omega = 1047$ см⁻¹ и временем поперечной релаксации $T_2 = 1,3 \cdot 10^{-11}$ с [7]. В этом случае $g = 11$ см/Гвт, $q_0 = 1$ и $N = 0,74 \cdot 10^{22}$ см⁻³. Плотность рассеивающих центров N определена с использованием удельного веса кристалла, равного 3,24 г/см³ [7], и атомного веса молекулы $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$, равного 261. С учетом приведенных значений параметров вероятность перехода $B_1 = 0,75 \cdot 10^{-11} I_L^2 / \gamma_s$ с⁻¹, где I_L следует брать в ваттах на см². Отсюда при накачках порядка 10⁸ Вт/см² (что вообще-то трудно реализуемо на практике в стационарном режиме) и $R_s = 0,9$ вероятность B_1 достигает значения 1,5 · 10⁶ с⁻¹. В твердотельных средах это, по-видимому, значительно меньше 1 / T_1 (к сожалению, точное значение T_1 нам не известно), а следовательно, первым слагаемым в правой части уравнения (5), как правило, можно пренебречь и положить $q = q_0$. При $R_s = 0,5$ и использованных выше других параметрах $B_1 = 2,3 \cdot 10^5$ с⁻¹, т. е. в 6,5 раз меньше, чем при $R_s = 0,9$.

Закключение. Показано, что в широкой области интенсивностей излучения накачки для описания ВКР в твердотельных средах можно пользоваться уравнениями переноса интенсивности и действие процесса ВКР на заселенности уровней колебательного перехода, на котором происходит ВКР, считать пренебрежимо малым. Построен простой метод учета этого действия в области, в которой условия его малости не выполнены.

Литература

1. *Shen Y. R., Blombergen N.* // Phys. Rev. 1965. Vol. 137. P. 1787–1794.
2. *Апанасевич П. А.* Основы теории взаимодействия света с веществом. Минск, 1977.
3. *Шен И. Р.* Принципы нелинейной оптики. М., 1989.
4. *Апанасевич П. А., Чулков Р. В., Тимофеева Г. И.* // ЖПС. 2004. Т. 71, № 6. С. 778–787.
5. *Ding S. et al.* // Appl. Phys. 2006. Vol. B85. P. 89–95.
6. *Басиев Т. Т.* и др. // Квант. электроника. 2010. Т. 40, № 8. С. 710–715.
7. *Lisinetskii V. A. et al.* // J. Nonlinear Optics, Physics and Materials. 2005. Vol. 14. P. 107–112.

P. A. APANASEVICH

p.apanasevich@ifanbel.bas-net.by

CONDITIONS OF APPLICATION OF THE INTENSITY TRANSFER EQUATION TO THE SRS DESCRIPTION

Summary

It is shown that the equations of intensity transfer can be used for describing the stimulated Raman scattering (SRS) in solids in a wide range of pump radiation intensities, and that the effect of the stimulated Raman scattering on the population of vibrational transition levels, on which SRS occurs, can be considered negligible. A simple method is developed for taking into account this effect in the region where it must not be neglected.

УДК 535.34+539.19

В. А. КУЗЬМИЦКИЙ

**ВРАЩЕНИЯ ЯКОБИ В ОБРАТНОЙ ЗАДАЧЕ НАХОЖДЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ
ВИБРОННОЙ СВЯЗИ В УСЛОВИЯХ РЕЗОНАНСА**

(Представлено членом-корреспондентом К. Н. Соловьевым)

Командно-инженерный институт МЧС Республики Беларусь, Минск

Поступило 15.12.2014

Введение. Электронно-колебательное взаимодействие в условиях резонанса с участием возбужденных электронных состояний S_2 и S_1 (вибронный аналог сложного резонанса Ферми) экспериментально тщательно исследовано Весселем и Мак Клюром [1]. Ими обнаружено, что в низкотемпературных спектрах поглощения молекул нафталина и его дейтерированного производного, внедренных в качестве примесного центра в кристаллы дуrolа и ксилoла, вместо ожидаемой одной линии 0–0-перехода во второе синглетное состояние $S_0 \rightarrow S_2$ (или его 0–1-колебательного повторения) наблюдается конгломерат нерегулярно расположенных узких линий с числом компонент 30–50. Вибронная связь состояний S_2 и S_1 характерна и для других ароматических полициклических соединений [2; 3]. Аналогичные закономерности наблюдаются в низкотемпературных спектрах поглощения (возбуждения флуоресценции) молекул класса порфиринов, у ряда соединений которого 0–0-переход $S_0 \rightarrow S_2$ также распределен по большому (~30) числу линий [4; 5].

Расчет сложных спектров, возникающих в результате вибронного взаимодействия, в принципе, возможен на основе методов квантовой химии. Однако решение этой задачи сильно осложняется требованием высокой точности расчета электронных и колебательных состояний, необходимой для выполнения условия резонанса. Кроме того, экспериментальные данные свидетельствуют о существенном влиянии окружения примесной молекулы на наблюдаемое распределение интенсивности линий, и интервал энергии между электронными уровнями S_2 и S_1 является своеобразным параметром модуляции резонанса [4; 5]. Поэтому может быть сформулирована обратная задача, которая предусматривает определение из экспериментальных данных матричных элементов резонансных вибронных взаимодействий. Следует отметить, что аналогичная обратная задача актуальна для описания ряда других явлений, характеризующих близостью уровней различной физической природы, например, внутримолекулярного перераспределения колебательной энергии [6] (сложный резонанс Ферми).

Прямая и обратная задачи. С квантово-механической точки зрения для рассмотрения сложного резонанса Ферми или его вибронного аналога существенно наличие точного или приближенного вырождения состояний Φ_1 и Φ_k ($k = 2, 3, \dots, n$, $n \geq 3$) и «взаимодействия» между ними за счет возмущения $\hat{H}^{(1)}$. Состояние Φ_1 выделено в связи с тем, что предполагается, что только один переход из начального (основного) состояния $\Phi_0 \rightarrow \Phi_1$ является разрешенным, а остальные переходы $\Phi_0 \rightarrow \Phi_k$ запрещены. Состояние Φ_1 называют «светлым» (bright), а состояния Φ_k – «темными» (dark).

Для описания резонансных взаимодействий будем использовать линейный вариационный метод, в рамках которого волновые функции возмущенных состояний Ψ_k представляются как

$$\Psi_k = \sum_{m=1}^n C_{mk} \Phi_m \quad (1)$$

(базисные функции Φ_m полагаем действительными, тогда матрица C , составленная из коэффициентов C_{mk} , будет ортогональной, $C^{-1} = C^t$, индекс t означает транспонирование).

Прямая задача состоит в вычислении матричных элементов $\langle \Phi_k | \hat{H} | \Phi_m \rangle$ ($\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}^{(1)}$ – гамильтониан системы), решении секулярной проблемы

$$HC = CE, E = \text{diag}(e_1^{(\text{calc})}, e_2^{(\text{calc})}, \dots, e_n^{(\text{calc})})$$

и вычислении интенсивности переходов $\Phi_0 \rightarrow \Psi_k$, пропорциональной квадрату матричного элемента $\langle \Psi_k | M | \Phi_0 \rangle$ (M – дипольный момент молекулы). Так как разрешен только переход $\Phi_0 \rightarrow \Phi_1$, относительная интенсивность переходов в результирующие состояния $\Phi_0 \rightarrow \Psi_k$, $I_k^{(\text{calc})} = |\langle \Psi_k | M | \Phi_0 \rangle|^2 / |\langle \Phi_1 | M | \Phi_0 \rangle|^2$, выражается через элементы первой строки матрицы C , $I_k^{(\text{calc})} = (C_{1k})^2$ ($k = 1, 2, \dots, n$).

В дальнейшем будем считать, что действительная матрица гамильтониана H размерностью $n \times n$ может быть представлена в следующем (каноническом) виде:

$$H = \begin{pmatrix} 0 & B' \\ B & A \end{pmatrix}, \quad (2)$$

где $A = \text{diag}(a_1, a_2, \dots, a_{n-1})$ – диагональная матрица; B – вектор размерности $n - 1$; $B' = (b_1, b_2, \dots, b_{n-1})$; $b_i = \langle \Phi_1 | \hat{H}^{(1)} | \Phi_{i+1} \rangle$ – матричные элементы связи ($i = 1, 2, \dots, n - 1$). Канонический вид матрицы H предполагает, что элементами $\langle \Phi_i | \hat{H}^{(1)} | \Phi_{i'} \rangle$ при $i \neq i'$ можно пренебречь, а с учетом приближенного равенства $\langle \Phi_{i+1} | \hat{H} | \Phi_{i+1} \rangle - \langle \Phi_1 | \hat{H} | \Phi_1 \rangle \approx \langle \Phi_{i+1} | \hat{H}^{(0)} | \Phi_{i+1} \rangle - \langle \Phi_1 | \hat{H}^{(0)} | \Phi_1 \rangle$ можно трактовать a_i как энергии невозмущенных «темных» состояний.

Обратная задача может быть сформулирована следующим образом: основываясь на экспериментальных данных определить энергии невозмущенных уровней a_i и матричные элементы связи b_i . Число указанных величин $n - 1 + n - 1 = 2n - 2$. Что касается данных эксперимента, то из них известно положение σ_k и интенсивность I_k n линий конгломерата, всего $2n$ величин. Однако, во-первых, сумма теоретических интенсивностей нормирована на 1, $\sum_{k=1}^n I_k^{(\text{calc})} = \sum_{k=1}^n (C_{1k})^2 = 1$ (как следствие ортогональности матрицы C). Этому отвечает $\sum_{k=1}^n I_k^{(\text{obs})} = 1$, где $I_k^{(\text{obs})}$ – соответствующие нормированные экспериментальные величины, $I_k^{(\text{obs})} = I'_k / \sum_{m=1}^n I'_m$. Кроме того, энергия невозмущенного уровня Φ_1 принята за начало отсчета, поэтому $H_{11} = 0$, и с учетом $H = C E C'$ должно иметь место равенство $\sum_{k=1}^n e_k^{(\text{calc})} (C_{1k})^2 = \sum_{k=1}^n e_k^{(\text{calc})} I_k^{(\text{calc})} = 0$. Этому соответствует то, что «центр тяжести» наблюдаемого конгломерата $g = \sum_{m=1}^n \sigma_m I_m^{(\text{obs})}$ должен отождествляться с положением уровня энергии состояния Φ_1 относительно основного состояния Φ_0 , и для энергий $e_k^{(\text{obs})}$ относительно «центра тяжести» g , $e_k^{(\text{calc})} = \sigma_k - g$, выполняется соотношение $\sum_{k=1}^n e_k^{(\text{obs})} I_k^{(\text{obs})} = 0$. Таким образом, на экспериментальные величины σ_k и I_k наложены два дополнительных условия, т. е. из наблюдаемых величин независимы только $2n - 2$. Отсюда следует, что обратная задача должна иметь однозначное решение.

Необходимо отметить, что обратная задача выглядит достаточно необычно и первоначально для ее решения (с использованием данных для молекулы нафталина) применялся метод проб и ошибок [1], причем критерием подгонки параметров a_i и b_i служило совпадение интенсивностей рассчитанного и наблюдаемого спектра. В работе [7] использовался метод функции Грина (для определения спин-орбитальной связи между ровибронными состояниями молекулы пиразина), который в принципе может дать точное решение, однако его недостатком является зависимость от произвольно выбираемой «демпфирующей» полуширины линий [8; 9].

Рассматриваемую задачу называют еще обратной диагонализацией, так как величины a_i и b_i будут известны, если найдено решение уравнения $H = C E C'$. При этом предполагается, что диагональная матрица E состоит из наблюдаемых энергий уровней, $E = \text{diag}(e_1^{(\text{obs})}, e_2^{(\text{obs})}, \dots, e_n^{(\text{obs})})$, а элементы первой строки матрицы C удовлетворяют условию $(C_{1k})^2 = I_k^{(\text{obs})}$. В [10; 11] разработан точный алгебраический метод решения этой задачи. Алгоритм существенным образом базируется на использовании преобразований подобия X_a , и в качестве X_a берутся матрицы собственных векторов действительных матриц частного вида, элементы которых строятся из комбинаций $e_k^{(\text{obs})}$ и $I_k^{(\text{obs})}$. В настоящей работе будет показано, что такого рода преобразования подобия могут быть построены без использования процедуры диагонализации, а только с помощью элементарных вращений Якоби.

Преобразования подобия на основе вращений Якоби. Первый этап алгоритма. Кроме функций Ψ_k (1) мы можем рассматривать функции

$$\Theta_k = \sum_{m=1}^n X_{mk} \Phi_m, \quad (3)$$

так что матрица X , составленная из коэффициентов X_{mk} ортогональная; таких наборов функций Θ_k , конечно, бесконечное количество. Отличие функций Θ_k от функций Ψ_k состоит в том, что в общем случае матрица гамильтониана $\hat{H}$ на функциях Θ_k , $\langle \Theta_k | \hat{H} | \Theta_{k'} \rangle$, не имеет диагонального вида, и поэтому ее элементы не могут быть непосредственно соотнесены с наблюдаемыми энергиями. Это верно уже в силу того, что наблюдается n переходов с энергиями $e_k^{(\text{obs})}$, а для задания симметричной матрицы $\langle \Theta_k | \hat{H} | \Theta_{k'} \rangle$ необходимо $n(n+1)/2$ величин. Наложим теперь на функции (3) требование $X_{1k} = C_{1k}$ ($k = 1, 2, \dots, n$), т. е. пусть первая строка матриц X и C совпадает. Тогда функции Θ_k и Ψ_k различаются линейными комбинациями функций «темных» состояний. Так как «светлым» является только состояние Φ_1 , то переходы $\Phi_0 \rightarrow \Theta_k$ имеют такую же интенсивность, что и переходы $\Phi_0 \rightarrow \Psi_k$. Это обстоятельство и будет использоваться нами для нахождения алгоритма решения поставленной обратной задачи.

Обратимся к поиску преобразования X , которое обеспечивает выполнение условия $(X_{1k})^2 = I_k^{(\text{obs})}$. Рассмотрим матрицу X_1 в виде элементарного вращения Якоби

$$X_1 = \begin{pmatrix} c_1 & s_1 & 0 & \dots & 0 \\ -s_1 & c_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Этому преобразованию соответствуют преобразованные функции Θ_1 и Ω_2 :

$$\begin{aligned} \Theta_1 &= c_1 \Phi_1 - s_1 \Phi_2, \\ \Omega_2 &= s_1 \Phi_1 + c_1 \Phi_2. \end{aligned} \quad (5)$$

Определим параметры c_1 и s_1 как

$$c_1 = \sqrt{I_1^{(1)}}, \quad s_1 = \sqrt{1 - I_1^{(1)}}; \quad (6)$$

здесь для большей симметрии с нижеприведенными формулами обозначения для интенсивностей изменены: $I_k^{(1)} \equiv I_k^{(\text{obs})}$. Из (5), (6) следует, что, во-первых, переход $\Phi_0 \rightarrow \Theta_1$ имеет такую же интенсивность, что и переход $\Phi_0 \rightarrow \Psi_1$, и поэтому в дальнейшем достаточно искать преобразования, которые оставляли бы неизменной функцию Θ_1 , но затрагивали бы только функции $\Omega_2, \Phi_3, \dots, \Phi_n$. Во-вторых, из (5), (6) видно, что оставшаяся часть интенсивности, $1 - I_1^{(1)}$, сосредоточена в переходе $\Phi_0 \rightarrow \Omega_2$, и его следует считать источником заимствования в остальные переходы. Таким образом, теперь нужно искать перераспределение интенсивности от этого перехода в переходы в состояния $\Theta_2, \Theta_3, \dots, \Theta_n$, так что их относительная интенсивность совпадала бы с относительной интенсивностью переходов в состояния $\Psi_2, \Psi_3, \dots, \Psi_n$. Тем самым рассматриваемая обратная задача о заимствовании интенсивности от одного перехода $\Phi_0 \rightarrow \Phi_1$ в n переходов свелась к задаче о заимствовании интенсивности от одного перехода $\Phi_0 \rightarrow \Omega_2$ в $n-1$ переход.

Определим новые относительные интенсивности $I_k^{(2)} = I_k^{(1)} / (1 - I_1^{(1)})$ для $k = 2, 3, \dots, n$ с выполнением нормировки $\sum_{k=2}^n I_k^{(2)} = 1$.

По аналогии с (4) рассмотрим матрицу преобразования X_2

$$X_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & c_2 & s_2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -s_2 & c_2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} \quad (7)$$

и определим c_2 и s_2 следующим образом:

$$c_2 = \sqrt{I_2^{(2)}}, s_2 = \sqrt{1 - I_2^{(2)}}.$$

Преобразованию (7) соответствуют преобразованные функции

$$\begin{aligned}\Theta_2' &= c_2 \Omega_2 - s_2 \Phi_3, \\ \Omega_3' &= s_2 \Omega_2 + c_2 \Phi_3.\end{aligned}$$

В свою очередь произведению матриц $X_1 X_2$ отвечают функции

$$\begin{aligned}\Theta_2 &= c_2(s_1 \Phi_1 + c_1 \Phi_2) - s_2 \Phi_3, \\ \Omega_3 &= s_2(s_1 \Phi_1 + c_1 \Phi_2) + c_2 \Phi_3.\end{aligned}$$

Интенсивность перехода $\Phi_0 \rightarrow \Theta_2$ определяется величиной $c_2 s_1$, которая равна

$$c_2 s_1 = \sqrt{I_2^{(2)}} \sqrt{1 - I_1^{(1)}} = \left(\sqrt{I_2^{(1)}} / \sqrt{1 - I_1^{(1)}} \right) \sqrt{1 - I_1^{(1)}} = \sqrt{I_2^{(1)}} = \sqrt{I_2^{(\text{obs})}}.$$

Таким образом, преобразование $X_1 X_2$ дает две функции Θ_1 и Θ_2 , так что интенсивности $I_1^{(\text{obs})}$ и $I_2^{(\text{obs})}$ переходов $\Phi_0 \rightarrow \Theta_1$ и $\Phi_0 \rightarrow \Theta_2$ совпадают с интенсивностями переходов $\Phi_0 \rightarrow \Psi_1$ и $\Phi_0 \rightarrow \Psi_2$. Функция Ω_3 имеет компоненту, пропорциональную Φ_1 : $s_2 s_1 = \sqrt{1 - I_2^{(2)}} \sqrt{1 - I_1^{(1)}} = \sqrt{1 - I_2^{(1)}} / (1 - I_1^{(1)}) \sqrt{1 - I_1^{(1)}} = \sqrt{1 - I_1^{(1)} - I_2^{(1)}} = \sqrt{1 - I_1^{(\text{obs})} - I_2^{(\text{obs})}}$, и тем самым, переход $\Phi_0 \rightarrow \Omega_3$ можно считать источником дальнейшего перераспределения интенсивности теперь уже в переходы в $n - 2$ состояния $\Theta_3, \Theta_4, \dots, \Theta_n$.

Точно также могут быть построены матрицы $X_3, X_4, \dots, X_{n-1}$, аналогичные матрицам (4) и (7), а их произведение даст матрицу $X = X_1 X_2 \dots X_{n-1}$. Матрице преобразования X соответствуют функции Θ_k , $k = 1, 2, \dots, n$, интенсивность переходов $\Phi_0 \rightarrow \Theta_k$ для которых такая же, как и интенсивность переходов $\Phi_0 \rightarrow \Psi_k$.

Второй этап алгоритма. После того как матрица X , элементы первой строки которой удовлетворяют условиям $(X_{1k})^2 = I_k^{(\text{obs})}$ и $\sum_{k=1}^n (X_{1k})^2 = 1$, построена, умножив равенство $C^t H C = E$ слева на X и справа X^t . Результат будет иметь следующий блочный вид:

$$X C^t H C X^t = X E X^t = \begin{pmatrix} 0 & D^t \\ D & F \end{pmatrix}. \quad (8)$$

В формуле (8) F – матрица размерностью $(n - 1) \times (n - 1)$; D – вектор размерности $n - 1$; $D^t = (d_1, d_2 \dots d_{n-1})$; $(X E X^t)_{11} = 0$ в силу того, что $\sum_{k=1}^n e_k^{(\text{obs})} (X_{1k})^2 = \sum_{k=1}^n e_k^{(\text{obs})} I_k^{(\text{obs})} = 0$. По способу построения преобразования X матрица F – симметричная действительная.

Сформулируем для матрицы F задачу на собственные значения

$$FZ = ZA, \quad (9)$$

где $A = \text{diag}(a_1, a_2, \dots, a_{n-1})$ – диагональная матрица. Тогда $F = Z A Z^t$, $Z^t = Z^{-1}$.

Умножая выражения (8) слева на Y и справа на Y^t , где $Y = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & Z^t \end{pmatrix}$, получим

$$Y X C^t H C X^t Y^t = Y X E X^t Y^t = \begin{pmatrix} 0 & (Z^t D)^t \\ Z^t D & A \end{pmatrix},$$

т. е. искомое преобразование C найдено, $C = Y X$, как и матрица H гамильтониана, имеющая требуемую структуру (2): $H = Y X E (Y X)^t$. Первая строка матрицы C совпадает с первой строкой матрицы X , $C_{1k} = X_{1k}$, и следовательно, требование для интенсивностей выполнено, $(C_{1k})^2 = (X_{1k})^2 = I_k^{(\text{obs})}$. Собственные значения a_i задачи (9) дают энергии невозмущенных уровней, а матричные элементы связи b_i вычисляются из уравнения

$$b_i = \sum_{j=1}^{n-1} d_j Z_{ji}.$$

Заключение. Таким образом, нами показано, что обратная задача нахождения энергии невозмущенных состояний и матричных элементов связи для матрицы гамильтониана в каноническом виде (2) решается точно на основе алгебраических методов.

Полученный алгоритм реализован нами в виде фортрановской программы. С ее помощью и с использованием данных по положению и интенсивности линий в спектрах возбуждения флуоресценции в области 0–0-перехода $S_0 \rightarrow S_2$ трех порфириновых соединений, а именно: мезо-тетраазапорфина, мезо-тетрапропилпорфина [4] и 2,3,12,13-тетраметилдибензо[*g, q*]порфина [5] (для двух типов внедрения в поликристаллическую матрицу каждой молекулы) проведены расчеты параметров вибронной связи a_i и b_i . Полученные результаты по энергиям невозмущенных колебательных состояний электронного уровня S_1 a_i и по соответствующим матричным элементам связи с электронным состоянием S_2 b_i полностью совпали с данными, ранее вычисленными на основе алгоритма [10; 11].

Литература

1. Wessel J., McClure D. S. // Mol. Cryst. Liq. Cryst. 1980. Vol. 58. P. 121–153.
2. Tan X., Salama F. // J. Chem. Phys. 2005. Vol. 123. P. 014312-1–014312-7.
3. Поводайло В. А., Яковлев Д. Л. // Журн. прикл. спектр. 2008. Т. 75. С. 319–323.
4. Арабей С. М., Кузьмицкий В. А., Соловьев К. Н. // Оптика и спектр. 2007. Т. 102. С. 765–777.
5. Arabei S. M., Kuzmitsky V. A., Solovyov K. N. // Chem. Phys. 2008. Vol. 352. P. 197–204.
6. Макаров А. А., Малиновский А. Л., Рябов Е. А. // Успехи физ. наук. 2012. Т. 182. С. 1047–1080.
7. Lawrence W. D., Knight A. E. W. // J. Phys. Chem. 1985. Vol. 89. P. 917–925.
8. Lehman K. K. // J. Phys. Chem. 1991. Vol. 95. P. 7556–7557.
9. Lawrence W. D., Knight A. E. W. // J. Phys. Chem. 1991. Vol. 95. P. 7557–7558.
10. Кузьмицкий В. А. // Докл. НАН Беларуси. 2006. Т. 50, № 4. С. 34–39.
11. Кузьмицкий В. А. // Оптика и спектр. 2006. Т. 101. С. 711–717.

V. A. KUZMITSKY

llum07@mail.ru

JACOBI ROTATIONS IN THE INVERSE TASK OF DETERMINATION OF VIBRONIC COUPLING PARAMETERS AT RESONANCE CONDITIONS

Summary

We have found an exact solution to the task of determination of the energies of the non-perturbed states a_i and vibronic coupling matrix elements b_i that describe the vibronic analogue of the complex Fermi resonance, using the experimental data represented by the energies $e_k^{(obs)}$ and the transition intensities $I_k^{(obs)}$ ($k = 1, 2, \dots, n$) in an observed absorption spectrum. The algorithm consists of two stages. At the first stage, the Jacobi rotations are used to construct a similarity transformation X with the requirement $(X_{1k})^2 = I_k^{(obs)}$ that corresponds to the condition that there is only one non-perturbed “bright” state. At the second stage, the algebraic eigenvalue problem for the matrix $X \text{diag}(\{e_k^{(obs)}\})X^{-1}$ is employed to find a_i and b_i values.

ХИМИЯ

УДК 547.788

А. В. КЛЕЦКОВ¹, Н. А. БУМАГИН², П. В. КУРМАН³, Р. М. ЗОЛОТАРЬ³,
О. П. ЧЕПИК³, член-корреспондент В. И. ПОТКИН¹

СИНТЕЗ ЗАМЕЩЕННЫХ *n*-БИФЕНИЛ(1-НАФТИЛ)ИЗОТИАЗОЛ-3-ИЛКЕТОНОВ¹Институт физико-органической химии НАН Беларуси, Минск²МГУ им. М. В. Ломоносова, Химический факультет, Москва³Институт биоорганической химии НАН Беларуси, Минск

Поступило 23.03.2015

Интерес к производным изотиазола постоянно растет, что связано, прежде всего, с высокой биологической активностью этих соединений [1]. На основе изотиазолов получены эффективные антибактериальные агенты, иммунодепрессанты, ингибиторы киназ и другие лекарственные средства, синтезированы химические средства защиты растений широкого спектра действия [2–7]. В ходе предшествующих исследований нами было установлено, что 4,5-дихлоризотиазол-3-ил(*n*-толил)кетон является эффективным синергистом инсектицида циперметрина в отношении колорадского жука [8], а недавно мы впервые показали, что функционально замещенные изотиазолы могут быть использованы в качестве лигандов для комплексов палладия(II), проявляющих высокую каталитическую активность в процессах кросс-сочетания в водных средах [9]. Таким образом, синтез новых производных изотиазола, перспективных для исследования в качестве биологически активных агентов и потенциальных лигандов для металлокомплексных катализаторов, представляется актуальным.

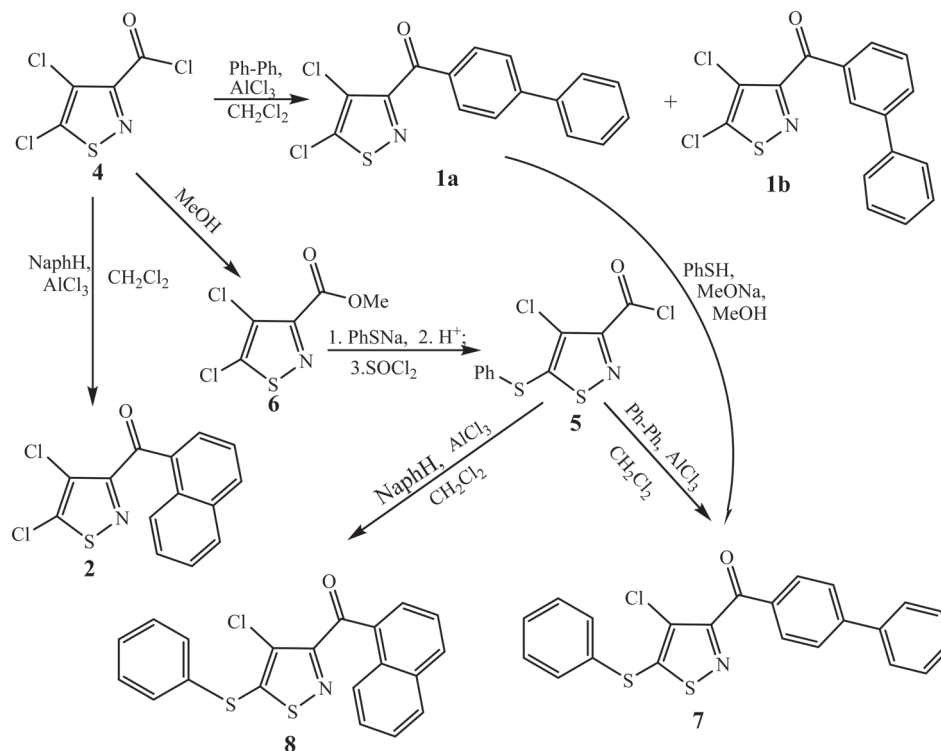
Цель нашей работы заключалась в получении замещенных арилизоиазол-3-илкетонов, содержащих бифенильный или нафтильный остатки, поскольку введение нескольких ароматических фрагментов в молекулы производных изотиазола, как правило, увеличивает их биологическое действие [8]. Наличие бифенильного или нафтильного остатка в изотиазольном лиганде способствует также комплексообразованию с палладием и открывает путь к созданию многоразовых гетерогенных катализаторов путем нанесения металлокомплексов на различные носители и их закрепления на поверхности за счет π – π стекинга [10]. Кроме того, с помощью реакций по кетогруппе можно получить конъюгаты изотиазольных лигандов с аминогруппами соответствующих реакционноспособных полимеров – основу катализаторов на полимерных носителях.

Целевые замещенные *n*-бифенил- и 1-нафтилизоиазолилкетоны **1,2** с атомами хлора в положениях **4,5** гетероцикла мы синтезировали ацилированием соответственно бифенила и нафталина 4,5-дихлоризотиазолил-3-карбонилхлоридом **4** в условиях реакции Фриделя–Крафтса с использованием хлорида алюминия в качестве катализатора. Синтез хлорангидрида **4** путем последовательных превращений трихлорэтилена описан нами ранее [11] и недавно усовершенствован [12].

Мы обнаружили существенные отличия в процессах ацилирования бифенила и нафталина. Оказалось, что ацилирование бифенила в дихлорметане протекает неизбирательно, одновременно в *пара*- и *мета*-положения ароматического остатка, и по данным ЯМР спектроскопии, а также хромато-масс-спектрометрии приводит к смеси соответствующих региоизомерных кетонов **1a** и **1b** в равном соотношении с общим выходом 56 %. В результате варьирования условий был найден подход к селективному проведению реакции. Установлено, что осуществление процесса в среде нитробензола позволяет провести ацилирование исключительно в *пара*-положение с образованием *n*-бифенил-(4,5-дихлоризотиазол-3-ил)кетона **1a**, идентифицированного с использо-

ванием ЯМР ^1H и ^{13}C спектроскопии. Реакция сопровождается значительным осмолением, и выход кетона **1a** не превышает 38 %.

Ацилирование нафталина в дихлорметане также сопровождалось осмолением смеси, но, в отличие от бифенила, приводило к одному региоизомеру – 4,5-дихлоризотиазол-3-ил-(нафт-1-ил)кетону **2**, который был выделен с выходом 30 %. Образование 1-ацилпроизводного нафталина однозначно следует из данных спектра ^1H ЯМР соединения **2**, в котором не наблюдается синглетного сигнала, характерного для 2-нафтилзамещенного региоизомера.



С целью увеличения количества aromaticких заместителей в молекулах кетонов **1a,b** и введения дополнительных лигандных центров, способных координироваться по палладию, нами изучена возможность получения их производных, содержащих в положении 5 гетероцикла фенилтиогруппу. Первоначально мы осуществили ацилирование бифенила и нафталина 5-фенилтио-4-хлоризотиазол-3-илкарбонилхлоридом **5** в дихлорметане в присутствии AlCl_3 . Хлорангидрид **5** является доступным соединением и легко получается на основе метилового эфира 4,5-дихлоризотиазол-3-карбоновой кислоты **6** [13]. Оказалось, что реакция ацилирования хлорангидридом **5** сопровождается еще более значительным смолообразованием, чем хлорангидридом **4**. Выход *n*-бифенил-(5-фенилтио-4-хлоризотиазол-3-ил)кетона **7** составлял 22 %, а соответствующее нафтильное производное **8** было идентифицировано лишь хромато-масс-спектрометрически. Его содержание в реакционной смеси не превышало 15 %, и в связи со сложностью разделения и очистки в индивидуальном виде кетон **8** не выделяли.

Нами показано, что 5-фенилтио-4-хлоризотиазол-3-ил(*n*-бифенил)кетон **7** можно получить путем нуклеофильного замещения атома хлора в положении 5 гетероцикла кетона **1a** действием тиофенолята натрия. Реакция гладко протекала в растворе метанола и приводила к целевому кетону **7** с выходом 80 %.

Состав и структура полученных кетонов **1a**, **2**, **7** установлены на основании данных ИК, ЯМР ^1H и ^{13}C спектроскопии и масс-спектрометрии. В ИК спектрах веществ присутствуют характерные полосы колебаний C=O связей кетогрупп в области $1663\text{--}1668\text{ см}^{-1}$. В спектрах ЯМР ^1H наблюдаются сигналы aromaticких остатков, мультиплетность которых соответствует *пара*-замещенному бифенильному остатку в случае кетонов **1a**, **7** и 1-нафтильному молекулярно-му фрагменту в случае продукта **2**. В спектрах ЯМР ^{13}C присутствуют сигналы атомов углерода

ароматических фрагментов, причем некоторые пары сигналов обобщены в связи с одинаковыми химическими сдвигами, а также сигналы атомов углерода изотиазольного гетероцикла и С=О групп. В масс-спектрах зафиксированы пики молекулярных ионов и продуктов их фрагментации под действием электронного удара. Отношение интенсивностей изотопных составляющих в группах пиков молекулярных ионов (100 : 65 : 1,1 для **1**, **2** и 100 : 33 для **7**) указывает на содержание соответственно двух и одного атома хлора в молекуле [14; 15].

Синтезированные кетоны **1a**, **2**, **7** переданы для биотестирования и модифицирования полимерных носителей с целью последующей разработки металлокомплексных катализаторов процессов кросс-сочетания.

Экспериментальная часть. ИК спектры соединений записаны на фурье-спектрофотометре Protege-460 фирмы Nicolet. Спектры ЯМР ^1H и ^{13}C сняты на спектрометре Bruker Avance-500 в CDCl_3 . Химические сдвиги измерены относительно остаточных сигналов растворителя: CDCl_3 ($\delta = 7,26$ м. д. в спектрах ЯМР ^1H и $\delta = 77,2$ м. д. в спектрах ЯМР ^{13}C). Масс-спектры получены на приборе Agilent 5975 inert MSD / 6890N Network GC System в режиме ионизации электронным ударом с энергией электронов 70 эВ; капиллярная колонка HP-5MS (30 м $\times$ 0,25 мм $\times$ 0,25 мкм); фаза – 5 % PhMe Silicone; температура испарителя 250 $^\circ\text{C}$.

Синтез *n*-бифенил-(4,5-дихлоризотиазол-3-ил)кетона **1a.** В 10 мл нитробензола растворяли 1,52 г (7 ммоль) 4,5-дихлоризотиазолил-3-карбонилхлорида **4**, 1,08 г (7 ммоль) 1,1'-бифенила, 1,20 г (9 ммоль) безводного хлорида алюминия и перемешивали при 100 $^\circ\text{C}$ в течение 8 ч. Далее реакционную смесь охлаждали до комнатной температуры и добавляли 10 мл 15 %-ной соляной кислоты, 5 мл хлороформа и перемешивали еще 1,5 ч. Органический слой отделяли, промывали насыщенным раствором карбоната натрия, водой и сушили над сульфатом натрия. Растворитель отгоняли в вакууме, продукт очищали хроматографией на силикагеле 100/160 μ , элюент гексан – этилацетат 1 : 1. Получили 0,89 г продукта **1a**. Выход 38 %, т. пл. 73–75 $^\circ\text{C}$. ИК спектр, см^{-1} : 3065, 3056, 3035, 1668, 1603, 1480, 1465, 1455, 1405, 1384, 1346, 1232, 1200, 1099, 995, 897, 860, 845, 751, 736, 694. Спектр ЯМР ^1H , δ , м. д.: 7,43 дд ($1\text{H}_{\text{аром}}, ^3J 7,3$ Гц), 7,49 т ($2\text{H}_{\text{аром}}, ^3J 7,3$ Гц), 7,65 д ($2\text{H}_{\text{аром}}, ^3J 7,3$ Гц), 7,74 д ($2\text{H}_{\text{аром}}, ^3J 8,3$ Гц), 8,14 д ($2\text{H}_{\text{аром}}, ^3J 8,3$ Гц). Спектр ЯМР ^{13}C , δ , м. д.: 127,36 ($2\text{CH}_{\text{аром}}$), 127,49 ($2\text{CH}_{\text{аром}}$), 128,64 ($\text{CH}_{\text{аром}}$), 129,15 ($2\text{CH}_{\text{аром}}$), 131,47 ($2\text{CH}_{\text{аром}}$), 125,07, 133,99, 139,77, 146,99, 150,04, 161,55 ($6\text{C}_{\text{четв}}$), 186,02 ($\text{C}=\text{O}$). Найдено, %: С 57,88, Н 3,05, Cl 21,11, N 4,23, S 9,49. $[\text{M}]^+$ 333. $\text{C}_{16}\text{H}_9\text{Cl}_2\text{NOS}$. Вычислено, %: С 57,50, Н 2,71, Cl 21,21, N 4,19, S 9,59. M 334,21.

4,5-Дихлоризотиазол-3-ил-(1-нафтил)кетон **2.** В 20 мл дихлорметана растворяли 1,52 г (7 ммоль) 4,5-дихлоризотиазолил-3-карбонилхлорида **4**, 0,90 г (7 ммоль) нафталина, 1,20 г (9 ммоль) безводного хлорида алюминия и кипятили в течение 8 ч. Далее к остывшей реакционной смеси добавляли 10 мл 15 %-ной соляной кислоты, 5 мл хлороформа и перемешивали еще 1,5 ч. Органический слой отделяли, промывали насыщенным раствором карбоната натрия, водой и сушили над сульфатом натрия. Растворитель отгоняли в вакууме, продукт очищали хроматографией на силикагеле 100/160 μ , элюент гексан – этилацетат 1 : 1. Получили 0,65 г продукта **2**. Выход 30 %, масло. ИК спектр, см^{-1} : 3100, 3030, 1663, 1621, 1520, 1489, 1440, 1350, 1264, 1209, 1086, 974, 962, 847, 711, 693. Спектр ЯМР ^1H , δ , м. д.: 7,27 т ($1\text{H}_{\text{аром}}, ^3J 7,7$ Гц), 7,35–7,42 м ($5\text{H}_{\text{аром}}$), 7,81 д ($1\text{H}_{\text{аром}}, ^3J 7,5$ Гц). Спектр ЯМР ^{13}C , δ , м. д.: 120,97 ($2\text{CH}_{\text{аром}}$), 125,32 ($2\text{CH}_{\text{аром}}$), 128,83 ($\text{CH}_{\text{аром}}$), 130,09 ($2\text{CH}_{\text{аром}}$), 121,47, 127,38, 129,65, 141,01, 147,48, 148,75 ($6\text{C}_{\text{четв}}$), 167,90 ($\text{C}=\text{O}$). Найдено, %: С 54,83, Н 2,45, Cl 23,11, N 4,67, S 10,57. $[\text{M}]^+$ 307. $\text{C}_{14}\text{H}_7\text{Cl}_2\text{NOS}$. Вычислено, %: С 54,56, Н 2,29, Cl 23,01, N 4,55, S 10,40. M 308,18.

***n*-Бифенил-(5-фенилтио-4-хлоризотиазол-3-ил)кетон **7**.** В 5 мл сухого метанола растворяли 0,070 г (3 ммоль) металлического натрия и приливали 0,36 г (3,3 ммоль) фенилмеркаптана, перемешивали 15 мин, добавляли 1,01 г (3 ммоль) кетона **1a** и перемешивали еще 12 ч. Далее к реакционной смеси приливали 2 мл концентрированной соляной кислоты, выпавший осадок отфильтровывали, промывали холодным диэтиловым эфиром и сушили в вакууме. Получили 0,98 г. Выход 80 %, масло. ИК спектр, см^{-1} : 3053, 3024, 1663, 1600, 1476, 1439, 1400, 1375, 1346, 1228, 1181, 1093, 1005, 892, 743, 690. Спектр ЯМР ^1H , δ , м. д.: 6,99–7,68 м ($12\text{H}_{\text{аром}}$), 7,69–8,22 м ($2\text{H}_{\text{аром}}$). Спектр ЯМР ^{13}C , δ , м. д.: 127,13 ($3\text{CH}_{\text{аром}}$), 127,72 ($2\text{CH}_{\text{аром}}$), 129,42 ($4\text{CH}_{\text{аром}}$), 129,74 ($\text{CH}_{\text{аром}}$), 130,43 ($\text{CH}_{\text{аром}}$), 131,47 ($\text{CH}_{\text{аром}}$), 133,81 ($2\text{CH}_{\text{аром}}$), 120,44, 125,21, 141,38, 141,69, 146,51,

160,88, 161,88 ($7C_{\text{четв}}$), 186,73 ($C=O$). Найдено, %: C 64,92, H 3,68, Cl 8,76, N 3,54, S 15,87. $[M]^+$ 407. $C_{22}H_{14}ClNOS_2$. Вычислено, %: C 64,78, H 3,46, Cl 8,69, N 3,43, S 15,72. M 407,93.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты 12-08-90025-Бел_а, 14-08-90012-Бел_а) и Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (гранты X12P-024, X14P-003).

Литература

1. Clerici F., Gelmi M. L., Pellegrino S., Pocar D. // Bioactive Heterocycles III / ed. M. Khan. Berlin-Heidelberg: Springer, 2007. P. 179–264.
2. Hara R., Nakai E., Hisamichi H., Nagano N. // J. Antibiot. 1994. Vol. 47, N 4. P. 477–486.
3. Lipnicka U., Machon Z. // Acta Pol. Pharm. 1997. Vol. 54, N 3. P. 207–213.
4. Beebe J. S., Jani J. P., Knauth E. et al. // Cancer Res. 2003. Vol. 63, N 21. P. 7301–7309.
5. Larson G., Yan Sh., Chen H. et al. // Bioorg. Med. Chem. Lett. 2007. Vol. 17, N 1. P. 172–175.
6. Elgazwy H. A.-S. S. // Tetrahedron. 2003. Vol. 59, N 38. P. 7445–7463.
7. Кабердин Р. В., Поткин В. И. // Усп. хим. 2002. Т. 71, № 8. С. 764–786.
8. Бинарная инсектицидная композиция: пат. РБ № 11593 / В. И. Поткин, А. И. Быховец, Н. И. Нечай, Р. М. Золотарь, С. К. Петкевич, В. М. Гончарук. Опубл. 28.02.2009. // Офиц. бюл. 2009. № 3(68). С. 42.
9. Bumagin N. A., Petkevitch S. K., Kletskov A. V. et al. // Chem. Het. Comp. 2014. Vol. 49, N 10. P. 1515–1529.
10. Поткин В. И., Бумагин Н. А., Петкевич С. К. и др. // Докл. НАН Беларуси. 2013. Т. 57, № 1. С. 67–72.
11. Нечай Н. И., Дикусар Е. А., Поткин В. И., Кабердин Р. В. // ЖОрХ. 2004. Т. 40, вып. 7. С. 1050–1055.
12. Поткин В. И., Петкевич С. К., Клецков А. В. и др. // ЖОрХ. 2013. Т. 49, вып. 10. С. 1543–1553.
13. Поткин В. И., Клецков А. В., Зубенко Ю. С. и др. // Докл. НАН Беларуси. 2013. Т. 57, № 3. С. 76–83.
14. Тахистов В. В. Практическая масс-спектрометрия органических соединений. Л.: Изд-во ЛГУ, 1977. С. 265.
15. Тахистов В. В., Родин А. А., Максимова Б. Н. // Усп. хим. 1991. Т. 60, № 10. С. 2143–2166.

A. V. KLETSKOV, N. A. BUMAGIN, P. V. KURMAN, R. M. ZOLOTAR, O. P. CHEPIK, V. I. POTKIN

potkin@ifoch.bas-net.by, bna51@mail.ru

SYNTHESIS OF SUBSTITUTED *P*-BIPHENYL(1-NAPHTYL)ISOTHIAZOL-3-YL KETONES

Summary

By acylation of biphenyl and naphthalene 4,5-dichloroisothiazol-3-carbonyl chloride under Friedel-Crafts reaction conditions *p*-biphenyl- and 1-naphthyl-(4,5-dichloroisothiazol-3-yl) ketones, respectively, were synthesized. It was found that acylation of biphenyl in the dichloromethane medium proceeds nonselectively and leads to a mixture of *para*- and *meta*-isomers but in the nitrobenzene solution only the *para*-isomer is formed. By the reaction of *p*-biphenyl-(4,5 dichlorisothiazol-3-yl) ketone with sodium phenolate *p*-biphenyl (5-phenylthio-4-chlorisothiazol-3-yl) ketone was obtained.

УДК 661.551.546.621

*Т. В. СВИРИДОВА, А. С. ЛОГВИНОВИЧ, член-корреспондент Д. В. СВИРИДОВ***ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ МЕТАЛЛ-МАТРИЧНЫХ КОМПОЗИТОВ
НА ОСНОВЕ ДИСПЕРСНЫХ ЧАСТИЦ MoO_3/WO_3 СО СТРУКТУРОЙ
«ЯДРО–ОБОЛОЧКА»***Белорусский государственный университет, Минск**Поступило 04.02.2015*

Введение. Металл-матричные композиты, представляющие собой металл, содержащий дисперсные частицы различной природы (оксиды, карбиды, бориды, др.), рассматриваются в настоящее время в качестве перспективных конструкционных материалов, прежде всего в силу присущей им высокой износостойкости и микротвердости [1]. Одним из наиболее эффективных методов получения металл-матричных композитов является их гальваническое осаждение из электролитов-суспензий [1–3]. Широкое практическое применение гальванических композитов, тем не менее, ограничивается необходимостью использования для осаждения высококонцентрированных суспензий и трудностями обеспечения долговременной стабильности суспензионных электролитов такого рода.

Ранее авторами была продемонстрирована возможность высокоэффективного электрохимического соосаждения никеля с дисперсными триоксидом молибдена и триоксидом вольфрама [4–6], полученными с использованием метода сольвотермического синтеза (т. е. за счет термостимулированной поликонденсации соответствующих оксосоединений в водном растворе [4]), а также изучены свойства получаемых таким образом композитов. Выполненное исследование показало, что из-за наличия собственной редокс-активности дисперсный триоксид молибдена легко инкорпорируется в металлическую матрицу и, вследствие присущего ему слоистого строения, способен придать поверхности образующегося композита самосмазывающие свойства [5]. В то же время практическое использование дисперсного триоксида молибдена в качестве фаз внедрения для получения металл-матричных композитов затруднено его относительно низкой стабильностью в электролитах гальванического осаждения. Продуктами растворения дисперсного MoO_3 являются молибдаты различной степени полимеризации, способные выступать в качестве катализаторов процесса выделения водорода, результатом чего является подавление катодного осаждения композита.

В связи с этим целью настоящего исследования являлось изучение возможности стабилизации дисперсного триоксида молибдена в растворах гальванического осаждения при сохранении возможности эффективного захвата дисперсной фазы растущим гальваническим осадком за счет капсулирования частиц триоксида молибдена оболочками из триоксида вольфрама, также являющегося редокс-активным материалом, и изучение свойств металл-матричных композитов, получаемых при электрохимическом соосаждении никеля с частицами типа «ядро (MoO_3)–оболочка (WO_3)».

Материалы и методы исследований. Для получения композитных пленок в качестве электролита использовали стандартный сульфатный электролит никелирования следующего состава [7]: NiSO_4 – 200 г/л, NiCl_2 – 50 г/л, H_3BO_3 – 35 г/л, pH 4,5–5,5. Осаждение проводили при плотности катодного тока 2 А/дм². В качестве фаз внедрения использовали полученный сольвотермическим методом [4] микрокристаллический гексагональный триоксид молибдена, частицы которого имели вид правильных призм размером 3–10 мкм. Концентрация оксидной фазы, суспендированной в электролите осаждения, составляла 0,5 г/л. Оболочки из триоксида вольфрама

на поверхности частиц триоксида молибдена также выращивались сольвотермическим методом. Растворы молибденовой и вольфрамовой кислот были получены с помощью ионного обмена.

Исследование размерно-морфологических характеристик частиц дисперсной фазы, а также микрорельефа поверхности электрохимически сформированных композитов проводили с помощью сканирующего электронного микроскопа Leo-1420. Концентрация оксидов в композите определялась путем его растворения в HCl в присутствии H_2O_2 с последующей нейтрализацией аммиаком и анализом полученных растворов методом эмиссионной спектроскопии (спектрометр Spectroflame ICP-P). Электрохимические исследования выполняли в потенциостатических условиях с использованием потенциостата Autolab PGSTAT 204. Для приготовления угольного пастового электрода использовалась смесь из 100 мг оксидной фазы, 66 мг ультрадисперсного графита и 0,05 мл дибутилфталата в качестве пластификатора. Все потенциалы приведены относительно насыщенного хлорсеребряного электрода сравнения. Износостойкость композитов (определяемая как отношение глубины лунки износа к длине пути трения – безразмерная величина) оценивали в условиях сухого трения при нагрузке 1,1 кг/см² (продолжительность воздействия 2 ч).

Результаты и их обсуждение. Условия химического осаждения триоксид-вольфрамовых оболочек на ядрах из триоксида молибдена были определены на основе исследования кинетики термостимулированной поликонденсации вольфрамовой кислоты в водном растворе, что позволило установить временной интервал, в пределах которого возможно эпитаксиальное осаждение триоксида вольфрама при отсутствии спонтанного зародышеобразования в реакционном объеме. Как видно на рис. 1, в случае термостатирования 0,1 М раствора вольфрамовой кислоты при 50 °С зависимость изменения светорассеяния во времени, позволяющая следить за начальными стадиями фазообразования, и гравиметрическая кинетическая кривая, полученная на основании данных о количестве оксидной фазы, способной к седиментации, сдвинуты относительно друг друга, что позволяет заключить, что имеется временное окно, достигающее 20 мин, в пределах которого возможно осаждение оболочки из WO_3 при отсутствии паразитного образования оксидных частиц в растворе. Это обстоятельство было использовано для выращивания оболочек WO_3 на суспендированных в растворе вольфрамовой кислоты ядрах MoO_3 .

Из электронно-микроскопических изображений, представленных на рис. 2, можно сделать вывод о том, что фаза гидратированного WO_3 осаждается на поверхность частиц MoO_3 в виде дискретных зародышей, которые по мере протекания осаждения срастаются, формируя сплошную оболочку.

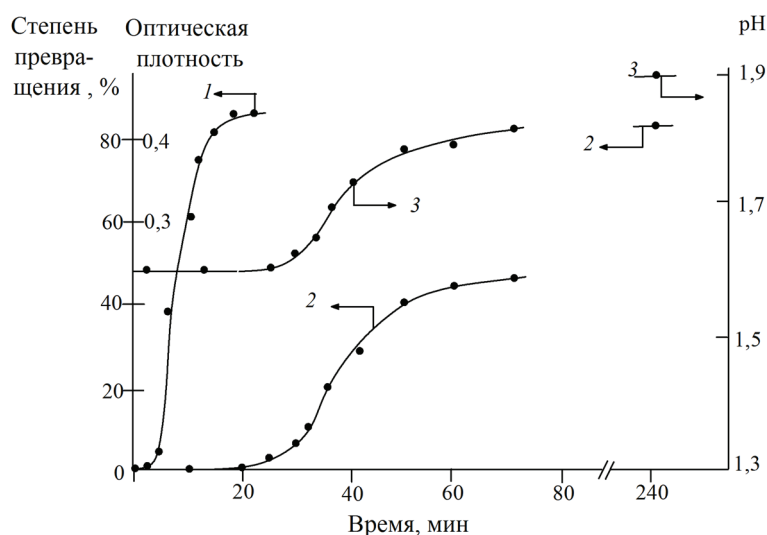


Рис. 1. Изменение во времени оптической плотности за пределами оптического поглощения коллоидных частиц (меняется симбатно светорассеянию) (1), степени превращения (2) и pH реакционной среды (3) для процесса термоиндуцированной поликонденсации 0,1 М раствора вольфрамовой кислоты. Степень превращения оценена из данных о седиментации образующейся дисперсной фазы в процессе центрифугирования при 16000 об/мин

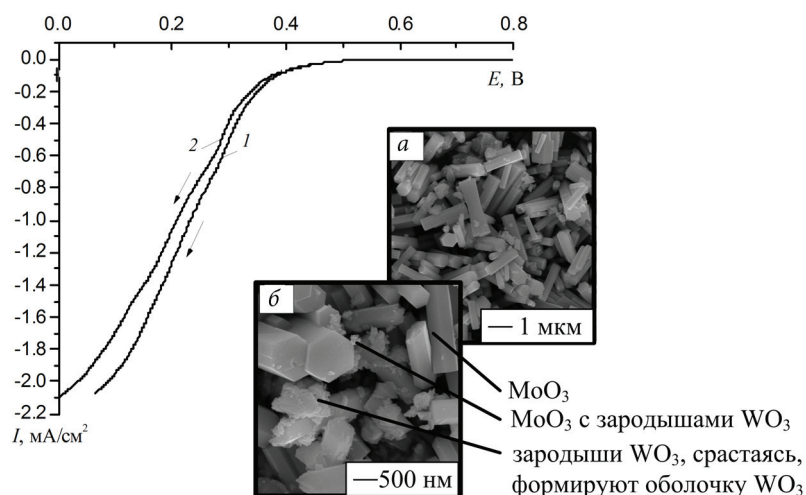


Рис. 2. Поляризационные кривые для угольного пастового электрода, содержащего частицы MoO₃ (1); частицы MoO₃ с оболочкой из WO₃ (2). Скорость развертки потенциала $2 \cdot 10^{-2}$ В · с⁻¹. На врезках представлены электронно-микроскопические изображения частиц микрокристаллического триоксида молибдена до (а) и в ходе (б) нанесения на их поверхность оболочек из триоксида вольфрама

Электрохимические измерения, выполненные с использованием угольного пастового электрода, свидетельствуют о том, что частицы MoO₃ с осажденной оболочкой из гидратированного триоксида вольфрама сохраняют свою электрохимическую активность, что обусловлено возможностью протекания редокс-превращений в осажденном WO₃ (рис. 2). Последнее обстоятельство создает условия для реализации редокс-механизма соосаждения матричного металла с оксидной фазой и способствует быстрому инкапсулированию частиц типа «ядро–оболочка» в никелевой матрице в процессе электрохимического осаждения композита. При этом осаждение оболочки из гидратированного триоксида вольфрама обеспечивает стабилизацию дисперсного MoO₃ в стандартном сульфатном электролите никелирования в течение продолжительного срока (не менее месяца). Отметим, что использование микрокристаллов слоистого MoO₃ с оболочкой из WO₃ для электрохимического осаждения композитов обеспечивает практически тот же уровень захвата оксидной фазы, что и в случае соосаждения никеля с индивидуальным триоксидом молибдена, и позволяет получать композиты, в случае которых содержание оксидной фазы в металлической матрице составляет 2,8 мас. % при концентрации в растворе, не превышающей 0,5 г/л (в то же время содержание MoO₃ в композитных пленках, полученных из суспензионного электролита на основе MoO₃, составляет 2,2 мас. %).

Выполненное электронно-микроскопическое исследование свидетельствует о том, что по своей морфологии поверхность композитных пленок, полученных соосаждением никеля и частиц MoO₃/WO₃, аналогична поверхности гальванического никеля (рис. 3). Формирование развитой поверхности с высоким уровнем шероховатости, наблюдающееся в случае соосаждения никеля с дисперсным триоксидом молибдена (рис. 3), по-видимому, является результатом осаждения композитных осадков в условиях конкурентного катодного выделения водорода. В то же время микрорельеф композитов с частицами типа «ядро–оболочка» оказывается более однород-

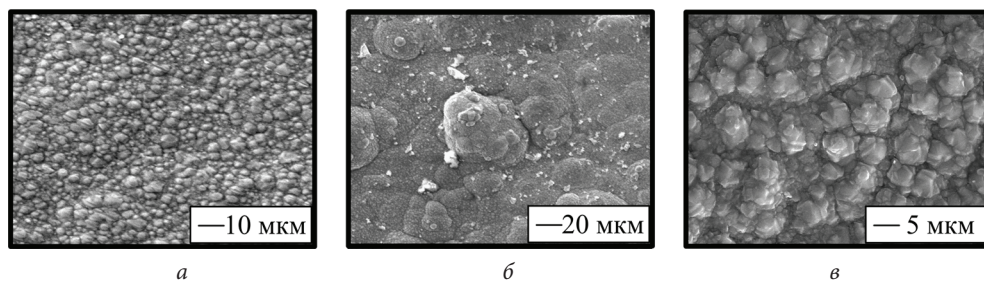


Рис. 3. Электронно-микроскопические изображения поверхности электрохимически осажденных пленок никеля (а) и композитов Ni–MoO₃ (б), Ni–MoO₃/WO₃ (в)

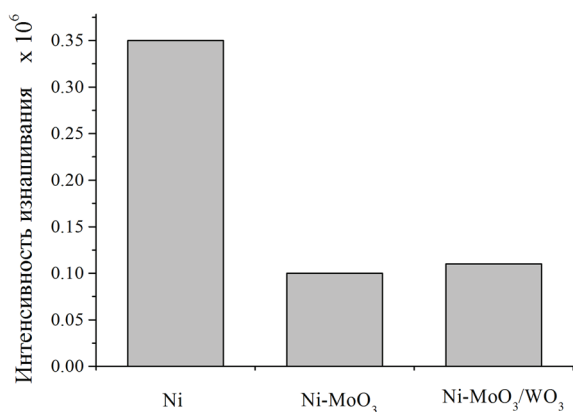


Рис. 4. Интенсивность изнашивания пленки гальванического никеля и композитов, полученных путем соосаждения никеля с оксидными частицами

ным и сглаженным без видимых признаков присутствия протяженных дефектов (рис. 3).

Износостойкость композиционных покрытий Ni-MoO₃/WO₃ превышает износостойкость гальванического никеля более чем в 3 раза и незначительно отличается от износостойкости композита Ni-MoO₃ (рис. 4). Высокая износостойкость, присущая полученным композиционным покрытиям, позволяет заключить, что способность частиц MoO₃ слоистого строения придавать поверхности композита антифрикционные свойства [5] сохраняется и в случае нанесения на их поверхность оболочки из WO₃. Об этом свидетельствуют и результаты измерения коэффициента трения: в пределах дорожки трения (т. е. после приработки) коэффициент трения снижается до 0,05–0,07, в то время

как в случае свежесозданного гальванического никеля коэффициент трения составляет 0,3.

Заключение. Таким образом, нанотехнологии фаз внедрения и, в частности, использование для синтеза металл-матричных композитов дисперсий гетерогенных частиц MoO₃/WO₃, построенных по схеме «ядро–оболочка», позволяет стабилизировать процесс осаждения композитных пленок из суспензионных электролитов и, одновременно, сохранить возможность реализации редокс-механизма соосаждения оксидной и металлической фаз, что обеспечивает эффективное зарастание оксидных частиц матричным металлом и формирование износостойкого композита с антифрикционными свойствами.

Литература

1. Свиридова Т. В. Композиционные материалы: металл-матричные композиты. Минск, 2012. – 272 с.
2. Hovestad A., Janssen L. J. J. // J. Appl. Electrochem. 1995. Vol. 25. P. 519–527.
3. Musiani M. // Electrochim. Acta. 2000. Vol. 45. P. 3397.
4. Sviridova T. V., Stepanova L. I., Sviridov D. V. // Molybdenum: Characteristics, Production and Applications / ed. by M. Ortiz et al. NY, 2012. P. 147–179.
5. Sviridova T. V., Stepanova L. I., Sviridov D. V. // J. Solid-State Electrochem. 2012. Vol. 16, N 12. P. 3799–3803.
6. Степанова Л. И., Бодрых Т. И., Пуровская О. Ф., Свиридова Т. В. // Нанотехника. 2005. № 2. С. 54–60.
7. Modern electroplating / ed. by F. A. Lowenheim. NY, 1974. – 802 p.

T. V. SVIRIDOVA, A. S. LOGVINOVICH, D. V. SVIRIDOV

sviridov@bsu.by

ELECTROCHEMICAL SYNTHESIS OF METAL-MATRIX COMPOSITES BASED ON DISPERSED PARTICLES OF MoO₃ (CORE)–WO₃ (SHELL) STRUCTURE

Summary

The possibility of synthesis of metal-matrix composites via coprecipitation of nickel with the particles of MoO₃ (core)–WO₃ (shell) structure was demonstrated. It has been shown that the deposition of WO₃ shell permits one to stabilize the dispersed molybdenum trioxide in the nickel plating bath, with the particles of second phase retaining the redox activity that facilitates their overgrowing with matrix metal and ensures large oxide loading in the nickel deposit at a low concentration of oxide in the electrolyte. It is shown that due to the lamellar structure inherent in the MoO₃ core the Ni-MoO₃/WO₃ composites exhibit enhanced wear resistance that is more than 3 times as high as that of bare galvanic nickel.

УДК 546.26+544.032.2+544.18

ВАДИМ Э. МАТУЛИС¹, ВИТАЛИЙ Э. МАТУЛИС¹, Ю. Е. НАГОРНЫЙ²,
В. И. РЕПЧЕНКОВ², академик О. А. ИВАШКЕВИЧ¹

ОСОБЕННОСТИ ДЕФОРМИРОВАНИЯ РАЗЛИЧНЫХ МОДЕЛЕЙ ГРАФЕНА ПРИ РАСТЯЖЕНИИ

¹НИИ физико-химических проблем БГУ, Минск²Белорусский государственный университет, Минск

Поступило 13.04.2015

Предложены различные способы расчета механических свойств графена [1–4]. В их основе могут лежать разные молекулярные модели, а также разные способы описания межатомных взаимодействий.

В настоящей работе выполнены расчеты величин модуля Юнга и коэффициента Пуассона моделей графена в зависимости от их размера. Сопоставлены результаты расчетов, полученные с использованием трех принципиально различающихся методов: конечных элементов (МКЭ), полуэмпирических квантовохимических методов, методов *ab initio* и DFT. В МКЭ взаимодействия между атомами описываются простыми функциями. Эти потенциальные функции, определяющие силовое поле молекулы, содержат некоторые параметры (длины связей, валентные углы, силовые постоянные и др.). Полагается, что химические связи характеризуются некоторыми «естественными» длинами и валентными углами, и молекулы строятся так, чтобы в простых случаях сохранить эти величины. Достоинством МКЭ является возможность легко оценить вклад отдельных составляющих в энергию молекул. Однако существенным недостатком МКЭ является множественность силовых полей. Кроме того, предположение о том, что параметры потенциальных функций можно переносить из одной молекулы в другую, часто является некорректным и приводит к существенным ошибкам. При квантовохимических расчетах молекула рассматривается как совокупность ядер и электронов. Расчет свойств молекул сводится к решению уравнения Шредингера. Квантовохимические методы лишены недостатков, присущих МКЭ, однако их использование для расчетов больших систем ограничивается возможностями современной вычислительной техники.

Расчеты в рамках МКЭ были выполнены в приближениях поля центральных сил (CFF) и поля валентных сил (VFF). В первом случае учитывались взаимодействия между химически связанными и ближайшими химически несвязанными атомами [1]. В приближении VFF учитывались только вклады в потенциальную функцию, описывающие деформации валентных связей и валентных углов [1]. Квантовохимические расчеты выполнены с использованием программного пакета Gaussian-09 [5], в рамках полуэмпирического метода PM6 [6] и методов DFT [7] и MP2 [8]. Для расчета величин модуля Юнга и коэффициента Пуассона были рассмотрены регулярные пластины графена, размерами от 3×3 до $L0 \times M0$ с шагом по горизонтали в одну, а по вертикали – в две ячейки. Пластины подвергались свободному растяжению по вертикали под действием нагрузки, равномерно распределенной по узлам горизонтальных границ типа «зигзаг». При проведении квантовохимических расчетов свободные валентности краевых атомов углерода были насыщены необходимым количеством атомов водорода. Модуль Юнга и коэффициент Пуассона рассчитывали по следующей схеме:

- а) проводили полную оптимизацию геометрии свободной пластины графена;
- б) расстояние между краевыми атомами углерода, расположенными на вертикальных границах (рис. 1), увеличивали на 1 % и проводили оптимизацию геометрии при фиксированном увеличенном расстоянии;

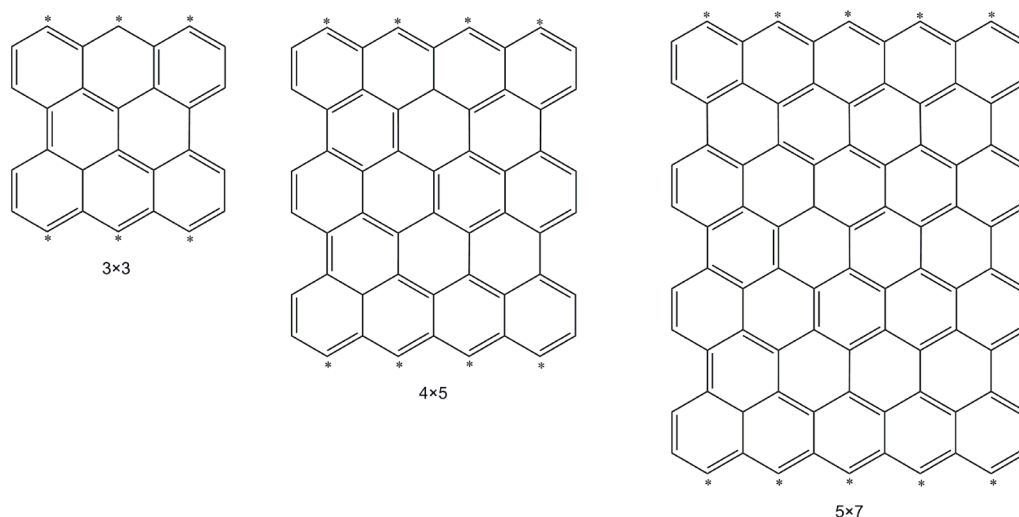


Рис. 1. Модели графена для расчета размерной зависимости упругих свойств

в) рассчитанные значения градиента энергии на указанных атомах использовали для вычисления сил;

г) модули Юнга (E) и коэффициент Пуассона (ν) вычисляли по формулам

$$E = \frac{F\ell}{S\Delta l}; \quad \nu = \left| \frac{\varepsilon'}{\varepsilon} \right|,$$

где F – нормальная составляющая силы; S – площадь поверхности, по которой распределено действие силы; ℓ – длина пластины; Δl – модуль изменения длины пластины; ε' и ε – относительные поперечные и продольные деформации соответственно.

Площадь поверхности S рассчитывалась как расстояние между крайними фиксированными атомами, суммированное с удвоенным ван-дер-ваальсовым радиусом (1,7 Å), умноженное на межслоевое расстояние в графите (3,4 Å).

С целью исследования влияния уровня теории на результаты вычислений для структур 3×3 , 4×5 и 5×7 выполнены расчеты величин модуля Юнга и коэффициента Пуассона в приближении МКЭ, полуэмпирическим методом PM6, методами DFT и неэмпирическими методами (табл. 1, 2).

Таблица 1. Значения модуля Юнга (E) и коэффициента Пуассона (ν) пластин, моделирующих графен, рассчитанные с использованием различных методов (нагрузка приложена к границам типа «зигзаг»)

Структура	F , 10^{-9} Н	S , Å ²	E , ТПа	ν
B3LYP/6-31G(d)				
3×3	2,34	28,29	0,827	0,2340
4×5	3,23	36,58	0,883	0,2224
5×7	4,17	44,90	0,929	0,1995
B3LYP/6-311+G(d,p)				
3×3	2,32	28,25	0,821	0,2304
B3LYP/cc-pVDZ				
3×3	2,33	28,29	0,824	0,2376
MP2/6-31G(d)				
3×3	2,35	28,29	0,832	0,2370

Данные табл. 1 показывают, что результаты DFT и неэмпирических расчетов для малых структур графена хорошо согласуются между собой (табл. 1). Величины модуля Юнга и коэффициента Пуассона, рассчитанные полуэмпирическим методом PM6, удовлетворительно согласуются с данными DFT и неэмпирических расчетов (табл. 1 и 2). При использовании МКЭ наблю-

дается более заметное отклонение рассчитанных характеристик малых пластин, моделирующих графен, от соответствующих величин, вычисленных DFT и неэмпирическими методами.

В связи с тем, что DFT и неэмпирические расчеты больших моделей графена требуют значительных затрат компьютерного времени, исследования размерной зависимости упругих свойств выполнялись в рамках МКЭ и полуэмпирического метода PM6 (табл. 2, рис. 2).

Таблица 2. Рассчитанные в рамках МКЭ и полуэмпирического метода PM6 параметры упругости различных молекул, моделирующих графен (нагрузка приложена к границам типа «зигзаг»)

Структура	CFF		VFF		PM6	
	E , ТПа	ν	E , ТПа	ν	E , ТПа	ν
3×3 C ₂₈	0,879	0,5057	0,687	0,3448	0,805	0,4157
4×5 C ₅₄	1,012	0,5248	0,728	0,3278	0,879	0,4120
5×7 C ₈₈	1,087	0,5311	0,748	0,3169	0,934	0,4144
6×9 C ₁₃₀	1,135	0,5336	0,759	0,3096	0,964	0,4059
7×11 C ₁₈₀	1,168	0,5345	0,767	0,3043	0,988	0,4045
8×13 C ₂₃₈	1,193	0,5349	0,773	0,3003	1,001	0,4014
9×15 C ₃₀₄	1,211	0,5350	0,777	0,2973	1,009	0,3994
10×17 C ₃₇₈	1,226	0,5349	0,780	0,2948	1,010	0,3989
11×19 C ₄₆₀	1,238	0,5347	0,782	0,2928	1,010	0,3990

Все три метода предсказывают монотонное увеличение модуля Юнга с ростом размера образца с выходом графиков на асимптоту (рис. 2). При этом значения, полученные в результате квантовохимических расчетов, лежат между величинами, вычисленными в приближениях CFF и VFF. Из данных табл. 2 и рис. 2 видно, что рассчитанное в рамках полуэмпирического метода PM6 значение модуля Юнга сходится к 1,01 ТПа, достигая указанного значения для модели 9×15 (C₃₀₄H₅₀). Эта величина хорошо согласуется с имеющимися литературными данными, полученными экспериментальными и расчетными методами [4] для массивного образца графена.

Рассчитанные методом PM6 и в приближении VFF значения коэффициента Пуассона монотонно убывают с ростом размера образца (табл. 2 и рис. 2). Для массивного образца эти два метода предсказывают значение коэффициента Пуассона, равное 0,29 (VFF) и 0,40 (PM6). Приближение CFF, по-видимому, физически не корректно (рис. 2).

Выполненные расчеты показывают, что приближение VFF, основанное на классических представлениях о валентных связях, позволяет получить данные о размерных зависимостях упругих

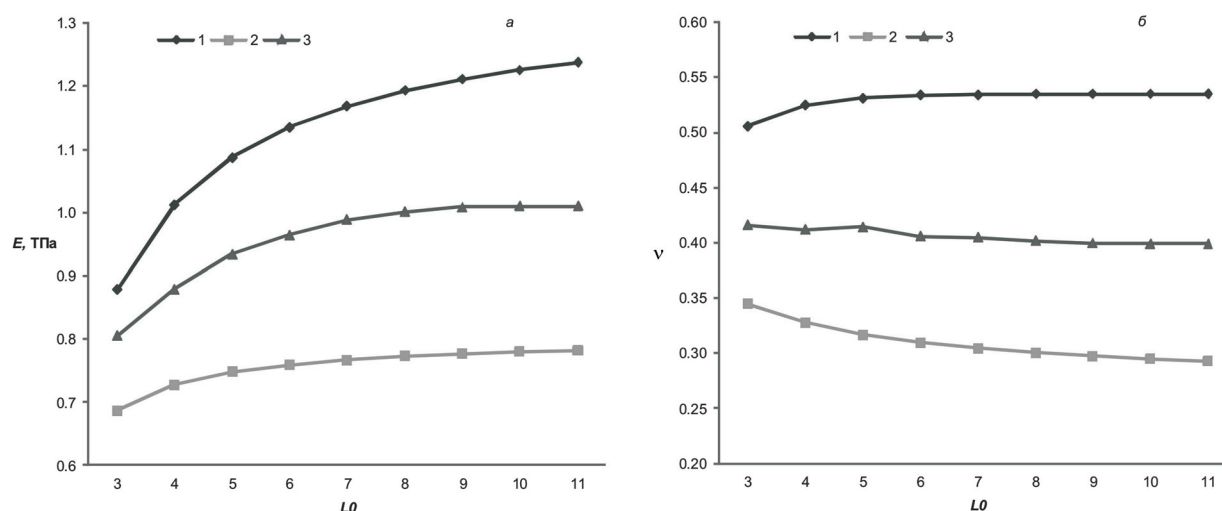


Рис. 2. Расчетные величины модуля Юнга (а) и коэффициента Пуассона (б) в зависимости от числа ячеек вдоль горизонтальной оси (L_0): 1 – CFF, 2 – VFF, 3 – PM6 (нагрузка приложена к границам типа «зигзаг»)

свойств моделей графена, качественно согласующиеся с результатами квантовохимических методов. В свою очередь результаты квантовохимических расчетов (значения силовых постоянных) могут быть использованы для уточнения параметров VFF, что позволит повысить достоверность расчетных данных в рамках МКЭ.

Литература

1. Li C. // Int. J. Solids Struct. 2003. Vol. 40. P. 2487–2499.
2. Гольдштейн Р. В., Ченцов А. В. // Изв. РАН МТТ. 2005. № 4. С. 57–74.
3. Журавков М. А., Нагорный Ю. Е., Репченко В. И. // Российские нанотехнологии. 2011. Т. 6, № 9–10. С. 92–99.
4. Van Lier G., Van Alsenoy C., Van Doren V., Geerlings P. // Chem. Phys. Lett. 2000. Vol. 326, N 1–2. P. 181–185.
5. Frisch M. J. et al. // Gaussian 09, Revision A.02. Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.
6. Stewart J. J. P. // J. Mol. Model. 2007. Vol. 13, N 12. P. 1173–1213.
7. Becke A. D. // J. Chem. Phys. 1993. Vol. 98, N 7. P. 5648–5652.
8. Head-Gordon M., Pople J. A., Frisch M. J. // Chem. Phys. Lett. 1998. Vol. 153, N 6. P. 503–506.

VADIM E. MATULIS, VITALY E. MATULIS, Yu. E. NAGORNY, V. I. REPCHENKOV, O. A. IVASHKEVICH

matulisvad@gmail.com

BEHAVIOR OF DIFFERENT MODELS OF GRAPHENE UNDER TENSION

Summary

Young's modulus and Poisson's ratio for graphene sheet models have been calculated in the framework of the finite element method as well as using semi-empirical PM6 and *ab initio* and DFT approaches. All three groups of the methods predict a monotonic increase of Young's modulus with increasing a sample size with turning the curves to asymptote for bulk samples. Young's modulus value calculated using quantum-chemical method PM6 converges to 1.01 TPa, reaching this value for the 9×15 model ($C_{304}H_{50}$). This value is in a good agreement with the literature data obtained both experimentally and theoretically for a bulk sample of graphene.

УДК 544.77.051

*Т. В. ПЛИСКО, академик А. В. БИЛЬДЮКЕВИЧ, В. М. ЗЕЛЕНКОВСКИЙ***СТРУКТУРА И СВОЙСТВА ДИСПЕРСИЙ ДИОКСИДА КРЕМНИЯ
В ПОЛИЭТИЛЕНГЛИКОЛЕ-400***Институт физико-органической химии НАН Беларуси, Минск**Поступило 03.04.2015*

Введение. Диоксид кремния в виде коммерческого аэросила образует устойчивые визуально прозрачные коллоидные системы при его смешении с этиленгликолем, пропиленгликолем, пропанолом-1, полиэтиленгликолем с $M_n = 300 \text{ г} \cdot \text{моль}^{-1}$ (ПЭГ-300), полипропиленгликолем (ППГ) с $M_n = 425\text{--}3000 \text{ г} \cdot \text{моль}^{-1}$ и с монозамещенными простыми алкильными эфирами ПЭГ и ППГ ($M_n = 200\text{--}425 \text{ г} \cdot \text{моль}^{-1}$) [1]. Дисперсии наночастиц диоксида кремния в перечисленных средах представляют собой низковязкие неструктурированные золи, состоящие из отдельных некоагулированных частиц. Они являются прозрачными и не проявляют признаков фазового разделения, осаждения или помутнения в течение длительного времени [1]. Известно, что аэросил повышает вязкость среды за счет образования связей между коллоидными частицами с образованием золя или геля. Показано [1; 2], что причиной образования золя или геля является способность дисперсионной среды к образованию водородных связей. Аэросил образует устойчивые золи в жидкостях, которые создают достаточно сильные водородные связи, и гели в средах, которые не способны к образованию сильных водородных связей (минеральные масла, циклогексан, нефтепродукты и другие углеводороды) [1; 2].

Анализ литературы выявил, что дисперсии SiO_2 в среде полиэтиленгликолей практически не изучены, несмотря на перспективы использования таких систем в качестве полимерных электролитов [3] и при получении полимерных мембран для разделения жидкостей и газов [4].

Цель работы – изучение свойств дисперсий диоксида кремния в полиэтиленгликоле с $M_n = 400 \text{ г} \cdot \text{моль}^{-1}$ (ПЭГ-400). Для выяснения характера взаимодействия ПЭГ-400 с SiO_2 было проведено квантовохимическое моделирование и спектроскопические исследования дисперсии SiO_2 в ПЭГ-400.

Актуальность работы обусловлена широким применением ПЭГ-400 в косметической и фармацевтической промышленности, а также в качестве порообразователя при получении полимерных мембран методом инверсии фаз [4].

Основное внимание исследователей уделено изучению адсорбции ПЭГ и полиэтиленоксидов (ПЭО) (с молекулярной массой 5–600 кДа [5–8]) на поверхности коллоидных частиц SiO_2 из водного раствора. В [6] проведено моделирование комплекса аэросила с ПЭО (600 кДа) в водной среде. Свободная энергия сольватации (ΔG_s), а также структурные и электронные параметры кластеров SiO_2 с адсорбированными фрагментами ПЭО были рассчитаны с использованием сольватационной модели SM5.42R/HF/6-31(d)//6-31G(d,p).

Материалы и методы исследования. Для получения дисперсий использовали пирогенный диоксид кремния гидрофильной марки А-300 (аэросил, диаметр частиц – 5–20 нм, удельная поверхность – $300 \pm 30 \text{ м}^2 \cdot \text{г}^{-1}$) производства Государственного предприятия «Калушский опытно-экспериментальный завод Института химии поверхности Национальной академии наук Украины» (г. Калуш, Украина) и ПЭГ-400 (BASF). Для получения дисперсий SiO_2 в ПЭГ-400 с концентрацией 0,5–12 % навеску SiO_2 небольшими порциями вносили в рассчитанное количество ПЭГ-400 и интенсивно перемешивали при комнатной температуре.

Вязкость дисперсий аэросила в ПЭГ-400 (η) определяли при помощи ротационного вискозиметра Brookfield DV III-Ultra при 25 °С. Записи ИК-спектров аэросила и дисперсий проводили при помощи ИК фурье-спектрометра Protege-460 (Nicolet).

Рассматривалась молекулярная модель аморфного аэросила, включающая 5 атомов кремния. Как известно, аэросил представляет собой аморфный тектосиликат, т. е. имеет полимерное строение, где каждый атом кислорода тетраэдра $[\text{SiO}_4]$ связан с двумя атомами кремния соседних тетраэдров. Кластеры аэросила имеют плотноупакованную структуру и содержат силоксановые циклы, содержащие от 3 до 6 атомов Si [9]. Нами рассмотрена модель кластера аэросила с плоским шестичленным циклом, содержащим три атома кремния.

В качестве модели ПЭГ-400 была использована молекула диэтиленгликоля (ДЭГ). Расчеты выполнены методом функционала плотности (DFT) с использованием уровня теории B3LYP/6-31G(d) в программе GAMESS [10; 11]. Для визуализации и анализа результатов использовалась программа FACIO [12; 13].

Результаты и их обсуждение. На рис. 1 представлена структура, моделирующая взаимодействие кластера SiO_2 с молекулой ДЭГ. Пунктиром показаны водородные связи между простым атомом кислорода эфирной группы ДЭГ и атомом водорода силанольной группы, а также между атомом кислорода концевой гидроксильной группы ДЭГ и атомом водорода силанольной группы. Из рис. 1 следует, что возможно также одновременное образование водородной связи между атомом водорода концевой гидроксильной группы ДЭГ и атомом кислорода силанольной группы на поверхности аэросила.

Рассчитанное среднее значение энергии водородной связи при взаимодействии SiO_2 –ДЭГ составляет $22 \text{ кДж} \cdot \text{моль}^{-1}$, свободная энергия Гиббса и энтальпия процесса образования одной водородной связи составляют $-3,2 \text{ кДж} \cdot \text{моль}^{-1}$ и $-19,8 \text{ кДж} \cdot \text{моль}^{-1}$ соответственно, что указывает на то, что процесс образования указанных водородных связей является термодинамически выгодным изотермическим процессом. Образование водородной связи сопровождается увеличением длины $\text{O}–\text{H}$ связи концевой гидроксильной группы ДЭГ (с $0,966$ до $0,981 \text{ \AA}$, $\Delta l = 0,015 \text{ \AA}$) и силанольной группы аэросила (с $0,965$ до $0,985 \text{ \AA}$, $\Delta l = 0,020 \text{ \AA}$). При образовании водородной связи силанольной группы с атомом кислорода эфирной группы молекулы ДЭГ увеличение длины связи $\text{O}–\text{H}$ силанольной группы составляет $0,021 \text{ \AA}$, что близко к результату, полученному в работе [6] – $0,014 \text{ \AA}$. Рассчитанное значение энергии водородной связи для комплекса аэросила с ПЭО (600 кДа) в газовой фазе в работе [6] составляет $\sim 29 \text{ кДж} \cdot \text{моль}^{-1}$, однако в водной среде это значение снижается до $\sim 22 \text{ кДж} \cdot \text{моль}^{-1}$. Отмечается, что энергия взаимодействия аэросила и ПЭО достаточно высока даже в водной среде, поэтому молекулы ПЭО способны вытеснять молекулы воды, адсорбированные на поверхности аэросила [6].

На рис. 2 представлены ИК-спектры аэросила, ПЭГ-400 и дисперсии аэросила в ПЭГ-400.

В таблице представлены волновые числа колебаний (ν , см^{-1}) в ИК-спектрах аэросила, ПЭГ-400 и дисперсии аэросила в ПЭГ-400, сдвиг полос поглощения групп ПЭГ-400 и аэросила по отношению к дисперсии SiO_2 –ПЭГ-400 ($\Delta\nu_1$, $\Delta\nu_2$), где

$$\begin{aligned}\Delta\nu_1 &= \nu(\text{OH}_{\text{ПЭГ-400}}) - \nu(\text{OH}_{\text{дисперсии}}), \\ \Delta\nu_2 &= \nu(\text{OH}_{\text{SiO}_2}) - \nu(\text{OH}_{\text{дисперсии}}).\end{aligned}$$

Как видно из данных таблицы, в дисперсии аэросила в ПЭГ-400 наблюдается существенный сдвиг полосы поглощения валентных колебаний OH -группы в область более низких частот относительно полос колебаний ПЭГ-400 и аэросила соответственно ($\Delta\nu_1 = -48 \text{ см}^{-1}$, $\Delta\nu_2 = -67 \text{ см}^{-1}$).

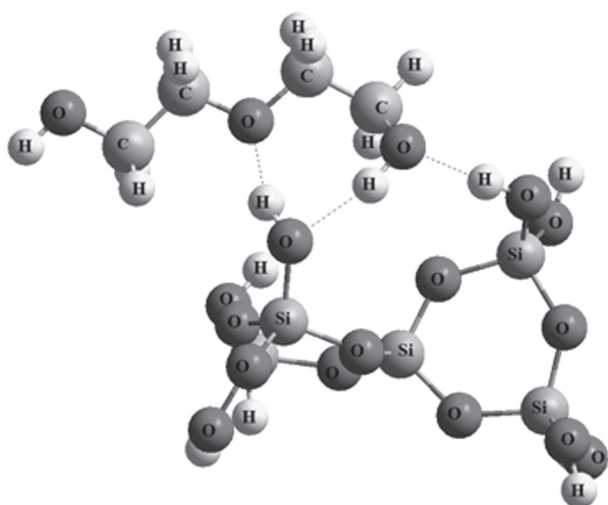


Рис. 1. Структура, моделирующая взаимодействие кластера SiO_2 с молекулой ДЭГ

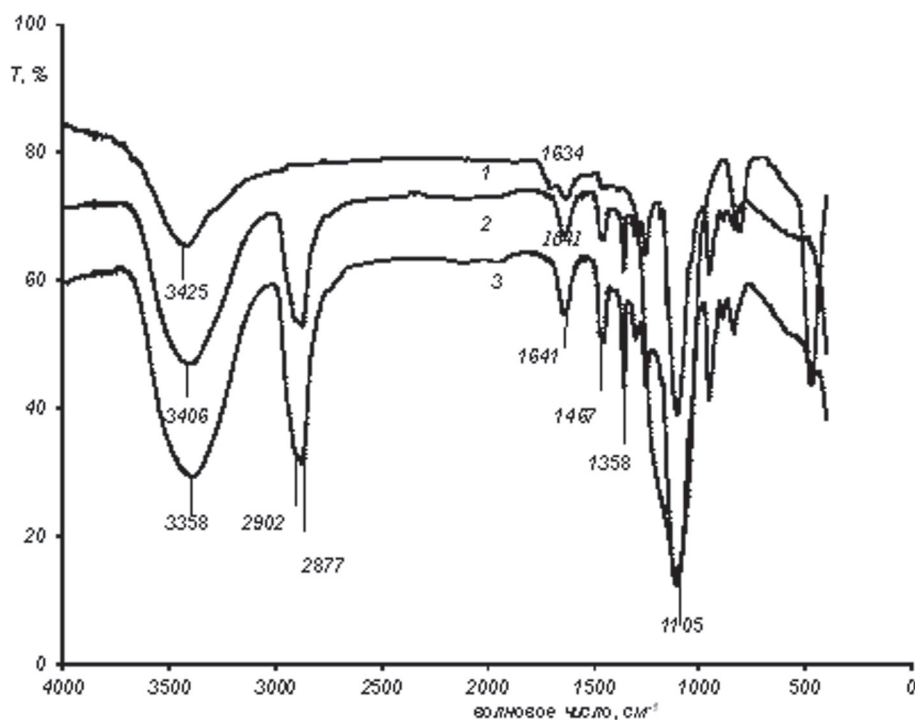


Рис. 2. ИК-спектры: 1 – аэросил, 2 – ПЭГ-400, 3 – дисперсия аэросила в ПЭГ-400 ($c = 12\%$)

Волновые числа колебаний и сдвиг полос поглощения групп ПЭГ-400 и аэросила по отношению к дисперсии SiO_2 –ПЭГ-400

Тип колебания	ПЭГ-400	Дисперсия SiO_2 в ПЭГ-400	SiO_2	$\Delta\nu_1, \text{cm}^{-1}$	$\Delta\nu_2, \text{cm}^{-1}$
Валентные колебания ОН-группы	3406	3358	3425	–48	–67
Деформационные колебания О–Н-групп воды	1641	1641	1634	–	–
Валентные колебания С–О–С-	1095	1105	–	–	–
Валентные колебания Si–O–Si		Сложное колебание, которое включает в себя валентные колебания С–О–С и Si–O–Si	1089	–	–

Данный сдвиг полос поглощения косвенно свидетельствует об образовании водородной связи между концевыми гидроксильными группами ПЭГ-400 и силанольными группами аэросила.

На рис. 3 представлена зависимость вязкости дисперсии аэросила в ПЭГ-400 от концентрации аэросила в полулогарифмических координатах. Как видно на рис. 3, зависимость логарифма вязкости дисперсий от концентрации SiO_2 удовлетворительно аппроксимируется двумя линейными зависимостями, угол наклона которых существенно различается. С ростом концентрации SiO_2 от 0,5 до 3 % наблюдается постепенное увеличение вязкости системы в 6 раз. Дальнейшее повышение концентрации диоксида кремния от 3 до 4 % приводит к увеличению вязкости дисперсий в 42 раза.

На рис. 4 представлены кривые течения дисперсий с различной концентрацией SiO_2 . Установлено, что дисперсии с концентрацией SiO_2 до 3 % характеризуются ньютоновским характером течения в диапазоне напряжений сдвига (σ) 9,8–32 $\text{H} \cdot \text{м}^{-2}$, что проявляется в зависимости вязкости от напряжения сдвига. Однако следует отметить, что для дисперсии с концентрацией SiO_2 3 %

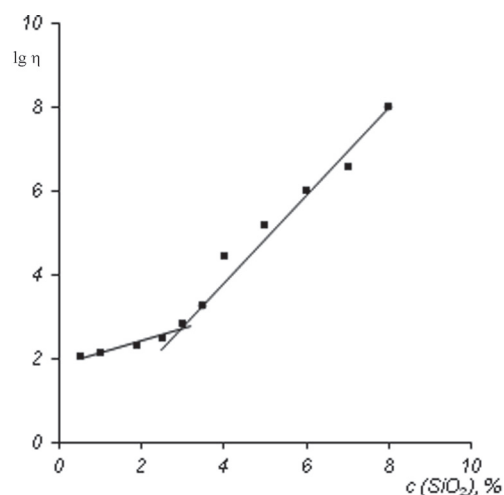


Рис. 3. Зависимость логарифма вязкости (при $\sigma = 17 \text{ H} \cdot \text{м}^{-2}$) дисперсии SiO_2 в ПЭГ-400 от концентрации SiO_2

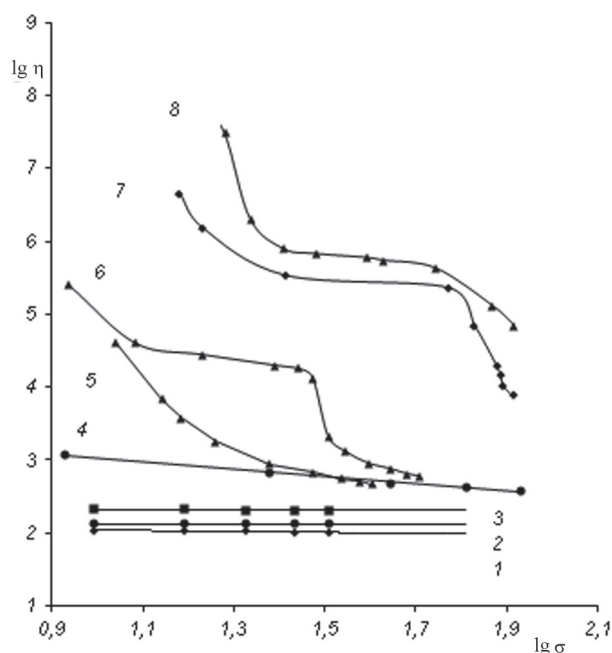


Рис. 4. Кривые течения дисперсий SiO_2 в ПЭГ-400 различных концентраций: 1 – 0,5 %, 2 – 1 %, 3 – 2 %, 4 – 3 %, 5 – 3,5 %, 6 – 4 %, 7 – 5 %, 8 – 8 %

место золь–гель переход. Подтверждением указанных структурных изменений является установленный нами факт, что при повышении температуры до 44–45 °С дисперсии с концентрацией SiO_2 до 4,5 % становятся мутными и наблюдается коагуляция SiO_2 , а при более высокой концентрации SiO_2 (5–12 %) коагуляция дисперсий происходит при 73–75 °С. Уменьшение агрегативной устойчивости зольей при нагревании обусловлено десорбцией ПЭГ-400 с поверхности частиц SiO_2 , в то время как в случае геля трехмерная сетка зацеплений выполняет стабилизирующую функцию, и коагуляция происходит при более высокой температуре.

Показано, что в отличие от систем, рассмотренных в [1], которые представляют собой золи при концентрации аэросила 10 % в ПЭГ-300, в случае ПЭГ-400 наблюдается структурирование дисперсий при концентрации SiO_2 свыше 3,5–4 % SiO_2 , о чем свидетельствуют резкое увеличение их вязкости и изменение характера течения. Указанные различия в структуре дисперсий в нашем случае и в работе [1] обусловлены различиями в молекулярной массе ПЭГ и, следовательно, в относительной доли концевых гидроксильных групп, а также различиями в свойствах используемого аэросила: различная удельная площадь поверхности ($200 \text{ м}^2 \cdot \text{г}^{-1}$ [1] и $300 \text{ м}^2 \cdot \text{г}^{-1}$ соответственно), различная форма и размер частиц.

Таким образом, методом квантовохимического моделирования показана возможность образования водородной связи между силанольными группами аэросила и концевыми гидроксильными группами и атомом кислорода эфирной группы ПЭГ-400. Среднее значение энергии водородной связи хорошо согласуется с расчетными литературными данными [5], полученными для подобной системы. На основании изучения реологических свойств дисперсий SiO_2 в ПЭГ-400 установлено, что дисперсии с концентрацией SiO_2 0,5–3 % являются золями, а при повышении концентрации SiO_2 имеет место золь–гель переход и структура дисперсий изменяется, что обуславливает различную устойчивость дисперсий к термокоагуляции в зависимости от концентрации.

Литература

1. Raghavan S. R. et al. // *Langmuir*. 2000. Vol. 16. P. 7920–7930.
2. Jun Hou et al. // *Langmuir*. 2000. Vol. 16. P. 1066–1077.
3. Walls H. J. et al. // *J. of Power Sources*. 2000. Vol. 89. P. 156–162.
4. Zheng Q.-Zh., Wang P., Yang Y.-N. // *J. Memb. Sci.* 2006. Vol. 279. P. 230–237.

5. Kawaguchi M., Yamamoto T., Kato T. // J. Colloid Interface Sci. 2001. Vol. 241. P. 293–295.
6. Voronin E. F. et al. // J. Colloid Interface Sci. 2004. Vol. 279. P. 326–340.
7. Esumi K., Iitaka M., Koide Y. // J. Colloid Interface Sci. 1998. Vol. 208. P. 178–182.
8. Wisniewska M., Szewczuk-Karpisz K., Ostolska I. // Fluid Phase Equilibria. 2013. Vol. 360. P. 10–15.
9. Khavryuchenko D., Sheka E. F. // J. of Structural Chemistry. 1994. Vol. 35, N 3. P. 291–298.
10. Schmidt M. W. et al. // J. Comp. Chem. 1993. Vol. 14. P. 1347–1363.
11. Немухин А. В., Григоренко Б. Л., Грановский А. А. // Вестн. Моск. гос. ун-та. Химия. 2004. Т. 45. С. 75–102.
12. Suenaga M. // J. of Computer Chemistry, Japan. 2005. Vol. 4, N 1. P. 25–32.
13. Suenaga M. // J. of Computer Chemistry, Japan. 2008. Vol. 7, N 1. P. 33–53.

T. V. PLISKO, A. V. BILDYUKEVICH, V. M. ZELENKOVSKY

sumire-san@tut.by

STRUCTURE AND PROPERTIES OF THE DISPERSIONS OF SILICA IN POLYETHYLENE GLYCOL-400

Summary

The possibility of hydrogen bond formation between the silanol group and the oxygen atom of the ether group or the terminal hydroxyl group of polyethylene glycol ($M_n = 400 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1}$, PEG-400) in the silica (aerosil) dispersions in PEG-400 was proved by quantum chemical simulation and IR-spectroscopy. The silica dispersions in PEG-400 over the concentration range of 0.5–3 % were found to be sols, but with increasing the silica concentration the sol–gel transition was shown to occur that yields different thermocoagulation stability of the dispersions depending on the silica concentration.

УДК 51-76:577.322:539.19

*И. А. КАШИН¹, член-корреспондент А. В. ТУЗИКОВ², А. М. АНДРИАНОВ¹***КОМПЬЮТЕРНЫЙ СКРИНИНГ НИЗКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ ИНГИБИТОРОВ ПРОНИКНОВЕНИЯ ВИЧ-1 НА ОСНОВЕ НЕЙТРАЛИЗУЮЩЕГО АНТИТЕЛА 10Е8**¹Институт биоорганической химии НАН Беларуси, Минск²Объединенный институт проблем информатики НАН Беларуси, Минск

Поступило 06.05.2015

Введение. В настоящее время большое внимание уделяется разработке лекарственных препаратов против ВИЧ-1, терапевтическое действие которых основано на блокаде различных этапов репликационного цикла вируса [1]. В зависимости от механизма действия противовирусные препараты делятся на классы, включающие ингибиторы обратной транскриптазы (нуклеозидные, нуклеотидные и нуклеотидные), протеазы, интегразы, а также ингибиторы проникновения (слияния) [1]. Совместное использование этих препаратов формирует основу для высокоактивной антиретровирусной терапии (ВААРТ), которая значительно повысила выживаемость многих пациентов, инфицированных ВИЧ [1]. Однако одной из главных проблем ВААРТ является высокая генетическая изменчивость ВИЧ-1, которая приводит к выработке устойчивости (резистентности) к определенному препарату через некоторое время после начала его применения [1]. Использование ВААРТ эффективно подавляет не только имеющуюся в организме разновидность вируса, но и существенно снижает уровень его мутаций, которые в дальнейшем могут привести к резистентности. Тем не менее, случаи проявления резистентности наблюдаются для всех типов используемых анти-ВИЧ-1 препаратов [1]. Кроме того, несмотря на то что используемые режимы ВААРТ являются эффективными для многих пациентов, их токсичность (вплоть до индивидуальной непереносимости), взаимодействие лекарств между собой, появление и передача резистентных штаммов [1] приводят к необходимости поиска новых антивирусных агентов с новыми механизмами действия. К числу таких агентов следует отнести ингибиторы проникновения ВИЧ-1 – химические соединения, способные вмешиваться в ранние стадии жизненного цикла вируса [2]. Преимуществами этих соединений являются создание ими препятствия проникновению вируса в новые целевые клетки и уменьшение числа латентных резервуаров ВИЧ, а также возможность использования для профилактики ВИЧ-инфекции [3].

ВИЧ-1 проникает в клетку хозяина путем последовательного взаимодействия белка gp120 оболочки вируса с первичным рецептором CD4 и хемокиновыми корецепторами CCR5 или CXCR4 [4; 5]. В результате этих взаимодействий происходят структурные изменения gp120, которые активируют трансмембранный белок gp41, что приводит к слиянию оболочки вируса с клеточной мембраной и последующему внедрению генома ВИЧ в клетку-мишень [4; 5]. В последние годы обнаружены моноклональные антитела (МКА) к ВИЧ-1 с широкой нейтрализацией, распознающие консервативные участки связывания белка gp120 с рецептором CD4 и корецепторами, а также важный для слияния мембраны вируса с мембраной клетки-мишени участок MPER (membrane-proximal external region) белка gp41 [6]. Среди этих МКА следует особо отметить антитела VRC01, PG9, PGT128 и 10E8, нейтрализующая активность которых превышает 90 % [6]. В частности, одно из самых эффективных антител к ВИЧ-1 – МКА 10E8 – нейтрализует около 98 % вирионов из различных подтипов вируса путем специфического связывания с участком MPER белка gp41 [7]. Этот консервативный гидрофобный участок эктодомена gp41 состоит из двух α -спиралей, соединенных короткой «шарнирной» областью (петлей), включает 22 ами-

нокислотных остатка и формирует линейные эпитопы для связывания ряда антител с широкой вирусной нейтрализацией [7].

Очевидно, что обнаружение антител с широким спектром нейтрализующей активности и установление механизмов их действия является важным шагом к разработке эффективной вакцины против ВИЧ-1. Тем не менее, уникальные свойства вируса, такие как экстраординарная изменчивость, способность избегать реакций системы приобретенного иммунитета, неспособность вызывать выработку разных антител, раннее наступление латентной фазы в его жизненном цикле и отсутствие здоровой иммунной системы, создают беспрецедентные препятствия на этом пути [6]. В связи с этим представляется актуальным поиск низкомолекулярных соединений, способных имитировать фармакофорные свойства антиген-связывающих фрагментов антител с широкой вирусной нейтрализацией.

В настоящей работе проведен компьютерный скрининг химических соединений – потенциальных пептидомиметиков МКА 10E8 – и выполнена оценка их ингибиторной активности с последующим отбором молекул, представляющих наиболее вероятные ингибиторы проникновения ВИЧ-1, механизм действия которых основан на блокировании сегмента MPER оболочки вируса, критического для ее слияния с мембраной клетки-мишени.

Для достижения поставленной цели в работе решены следующие задачи:

1. На основе аминокислотных остатков Fab-фрагмента МКА 10E8, ответственных за связывание с участком MPER белка gp41 ВИЧ-1 [7; 8], сформирован набор входных данных для компьютерного скрининга потенциальных пептидомиметиков антитела, и с помощью методов, реализованных в программном обеспечении веб-сервера perMMsMIMIC [9], идентифицированы химические соединения, удовлетворяющие заданным критериям поиска.

2. Методами молекулярного докинга построены структурные комплексы найденных соединений с пептидом MPER ВИЧ-1 и, исходя из величин оценочной функции, осуществлен отбор лучших по данным докинга соединений.

3. Методами молекулярной динамики рассчитаны динамические траектории комплексов, проведена оценка свободной энергии их образования и определены вклады индивидуальных аминокислотных остатков белка gp41 в энтальпию связывания.

В результате проведенных исследований отобраны химические соединения, представляющие наиболее вероятные пептидомиметики МКА 10E8. Идентифицированные соединения рассматриваются как перспективные базовые структуры для разработки новых ингибиторов проникновения ВИЧ с широким спектром нейтрализующего действия.

Материалы и методы исследования. Для виртуального скрининга химических соединений с заданными свойствами веб-сервер perMMsMIMIC использует данные об аминокислотных остатках лиганда пептидной природы, играющих ключевую роль в специфическом связывании с белком-рецептором [9]. При этом на вход сервера могут быть поданы элементы структуры лиганда, включающие различные группы критических для связывания аминокислот, которые взаимодействуют с разными функционально важными участками молекулярной мишени [9]. Следуя этой стратегии, при формировании набора входных данных для веб-сервера perMMsMIMIC использовали аминокислотные остатки Fab-фрагмента МКА 10E8, которые вносят основной вклад в энтальпию связывания антитела с белком gp41 согласно результатам молекулярной динамики структурного комплекса 10E8/gp41 [7], проведенной нами ранее в работе [8], где было показано, что важная роль в образовании стабильного комплекса МКА 10E8 с пептидом MPER белка gp41 ВИЧ-1 принадлежит остаткам Trp-33, Tyr-99–Asp-100–Phe-100a–Trp-100b и Gly-100d тяжелой цепи иммуноглобулина, для которых абсолютные значения энергии связывания превышают 2 ккал/моль. Поэтому эти остатки МКА 10E8, образующие «горячие» точки связывания антитела с белком gp41, были включены в набор входных данных в качестве базовой модели фармакофора для компьютерного скрининга потенциальных пептидомиметиков антитела. Для расширения набора входных данных проводили разбиение этой модели на отдельные фрагменты, а также привлекали остатки Glu-53, Lys-97 и Tyr-98, участвующие в прямых межмолекулярных контактах с пептидом MPER белка gp41 [7; 8]. Полученный таким образом набор входных данных включал тринадцать различных элементов структуры Fab-фрагмента МКА 10E8 (табл. 1).

**Т а б л и ц а 1. Набор входных данных, использованный
для компьютерного скрининга потенциальных пептидомиметиков МКА 10Е8**

Входные данные
1. Trp-33 ^H Tyr-99 ^H Asp-100 ^H Phe-100a ^H Trp-100b ^H Gly-100d ^H
2. Trp-33 ^H Glu53 ^H Lys97 ^H Tyr98 ^H Tyr99 ^H
3. Tyr-99 ^H Asp-100 ^H Phe-100A ^H Trp-100B ^H
4. Lys-97 ^H Tyr-98 ^H Tyr-99 ^H
5. Trp-33 ^H Tyr-98 ^H Tyr-99 ^H
6. Glu-53 ^H Tyr-98 ^H Tyr-99 ^H
7. Trp-33 ^H Lys-97 ^H Tyr-99 ^H
8. Glu-53 ^H Lys-97 ^H Tyr-99 ^H
9. Trp-33 ^H Glu-53 ^H Tyr-99 ^H
10. Trp-33 ^H Lys-97 ^H Tyr-98 ^H
11. Glu-53 ^H Lys-97 ^H Tyr-98 ^H
12. Trp-33 ^H Glu-53 ^H Tyr-98 ^H
13. Trp-33 ^H Glu-53 ^H Lys-97 ^H

П р и м е ч а н и е. Верхние индексы Н обозначают аминокислотные остатки тяжелой цепи МКА 10Е8.

Поиск пептидомиметиков осуществляли в базе данных MMsINC (<http://mms.dsfarm.unipd.it/MMsINC.html>) [10], содержащей 17 млн конформеров, рассчитанных для 3,9 млн коммерчески доступных химических соединений, с привлечением пяти методов, предлагаемых программным обеспечением веб-сервера pepMMsMIMIC [9]. Эти методы включают различные комбинации алгоритма «сверхбыстрого распознавания формы», суть которого состоит в обнаружении молекул, геометрически соответствующих заданному пептиду, с алгоритмами поиска по фармакофорам – молекулярным остовам, несущим существенные признаки, ответственные за биологическую активность [9]. В результате получали набор потенциальных пептидомиметиков МКА 10Е8, из которого для дальнейших исследований отбирали химические соединения, удовлетворяющие «правилу пяти» Липинского, которое накладывает на лиганд, взаимодействующий с молекулой-мишенью, условия подобия лекарству [11]. С этой целью использовали «фильтр» Липинского, реализованный в веб-приложении на сайте http://www.niper.gov.in/pi_dev_tools/DruLiToWeb/DruLiTo_index.html. Эффективность связывания идентифицированных соединений с участком MPER белка gp41 ВИЧ-1 оценивали методами молекулярного докинга.

Молекулярный докинг выполняли с помощью программы AutoDock Vina [12] с учетом конформационной подвижности лиганда, перебирая все его возможные ориентации относительно молекулы-рецептора. Структуру пептида MPER белка gp41 выделяли из комплекса с Fab-фрагментом МКА 10Е8 [7] (код 4G6F в Банке данных белков; <http://www.rcsb.org/pdb/>). Атомы водорода добавляли с привлечением пакета AutoDockTools (<http://autodock.scripps.edu/resources/adt>). При ранжировании структурных комплексов по величине энергии связывания использовали семь оценочных функций, реализованных в AutoDock Vina [12], AutoDock 4 (<http://autodock.scripps.edu/resources/adt>), NNScore1 [13], NNScore 2.01 (<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ci2003889>), RFScore-PDBbind2007, RFScore-PDBbind2012 (<http://bioinformatics.oxfordjournals.org/content/26/9/1169>) и Cyscore_V1.1.2 (<http://bioinformatics.oxfordjournals.org/content/30/12/1674>). Для каждой оценочной функции выбирали пять лучших решений докинга, что позволило идентифицировать 35 соединений-лидеров, структурные комплексы которых с пептидом MPER белка gp41 исследовали методами молекулярной динамики (МД).

МД расчеты проводили с помощью программного пакета Amber 11 (<http://ambermd.org/>) [14] в силовом поле Amber (набор параметров ff10) с явным заданием растворителя (трехточечная мо-

дель воды TIP3P). Для параметризации лигандов использовали обобщенное силовое поле GAFF (<http://ambermd.org/>). Начальные координаты атомов водорода пептида MPER белка gp41 определяли с привлечением модуля xleap пакета AMBERTools 1.5 (<http://ambermd.org/>) [14]. Структурный комплекс помещали в ячейку в форме усеченного октаэдра таким образом, чтобы наименьшее расстояние между ее гранями и атомами исследуемой системы превосходило 10 Å, после чего свободное пространство заполняли молекулами воды. Перед проведением МД расчетов энергию структурного комплекса минимизировали методами наискорейшего спуска (1000 шагов) и сопряженных градиентов (1000 шагов). Затем осуществляли нагрев системы от 0 до 310 К в течение 2 нс при постоянном объеме ячейки. На следующем шаге в течение 1 нс уравнивали давление в системе, установленное на значении 1 атм, посредством динамического изменения размеров ячейки с характерной частотой 2,0 пс⁻¹ (<http://ambermd.org/>) [14]. На этапах нагрева и уравнивания давления накладывали дополнительные ограничения на положения атомов системы с помощью потенциала параболической формы с силовыми постоянными, равными соответственно 1,0 и 0,5 ккал/моль. Далее эти ограничения снимали и вновь подвергали систему релаксации в течение 1 нс. На заключительном шаге моделирования проводили расчет МД траектории длительностью 30 нс в изобарно-изотермических условиях ($P = 1,0$ атм, $T = 310$ К). Контроль давления в ячейке осуществляли с помощью баростата Берендсена [14] с характерным временем 2,0 пс. Для контроля температуры использовали термостат Ланжевена (<http://ambermd.org/doc10/>) [14] с частотой столкновений 5,0 пс⁻¹. Интегрирование уравнений движения Ньютона осуществляли с помощью алгоритма «leap-frog» (<http://ambermd.org/doc10/>) [14] с шагом интегрирования 2,0 фс. Для фиксации длин всех связей, в образовании которых участвуют атомы водорода, применяли алгоритм SHAKE (<http://ambermd.org/>). Максимальное расстояние, на котором учитывали невалентные взаимодействия, задавали равным 8,0 Å.

Средние значения свободной энергии образования комплексов и вклады индивидуальных остатков пептида MPER в энтальпию связывания вычисляли с помощью процедуры MM-GB/SA, входящей в состав пакета AmberTools 1.5 [14]. При этом первые 5 нс МД моделирования отводили на релаксацию системы и не учитывали в расчетах. Свободную энергию связывания рассчитывали для 500 «точек» МД траектории, разделенных временным интервалом длительностью 50 пс.

Специфические π – π взаимодействия и межмолекулярные водородные связи в структурных комплексах потенциальных пептидомиметиков МКА 10E8 с пептидом MPER белка gp41 ВИЧ-1 анализировали с помощью программы BINANA (<http://nbc.ucs.d.edu/data/sw/hosted/binana/>). Ван-дер-ваальсовы взаимодействия идентифицировали средствами программы Ligplot (<http://ebi.ac.uk/thornton-srv/software/LIGPLOT/>).

Расчеты проводили на компьютерном кластере «СКИФ-ОИПИ» Объединенного института проблем информатики НАН Беларуси.

Результаты и их обсуждение. Использование набора входных данных, приведенных в табл. 1, позволило обнаружить в базе данных MMsINC 4493 потенциальных пептидомиметика МКА 10E8, из которых 3036 соединений удовлетворяли «правилу пяти» Липинского [11]. В результате оценки эффективности их связывания с пептидом MPER методами молекулярного моделирования были идентифицированы восемь соединений, характеризующихся отрицательными значениями свободной энергии образования надмолекулярных структур. Поэтому эти соединения (рис. 1) были отобраны в качестве наиболее вероятных миметиков антитела.

Анализ структурных комплексов идентифицированных соединений с пептидом MPER белка gp41 (рис. 2) показывает (табл. 2), что для них характерно наличие специфических π – π взаимодействий между π -сопряженными системами лигандов (рис. 1) и молекулы-мишени. При этом во всех рассматриваемых надмолекулярных структурах ароматические кольца лигандов образуют π - и/или T-стэкинг с боковой цепью консервативного остатка Trp-672 белка gp41 (табл. 2). Для пяти соединений (MMs03769994, MMs02374310, MMs03064646, MMs01100460, MMs00760407) реализуются π – π взаимодействия с участием остатка Trp-670 белка gp41, а в двух случаях наблюдается π -стэкинг с Trp-666 (MMs03769994) и Trp-678 (MMs01288397). Существенный вклад в энергетическую стабилизацию структурных комплексов вносят ван-дер-ваальсовы взаимодействия (табл. 2), образующие широкую сеть межмолекулярных контактов, суммарное число кото-

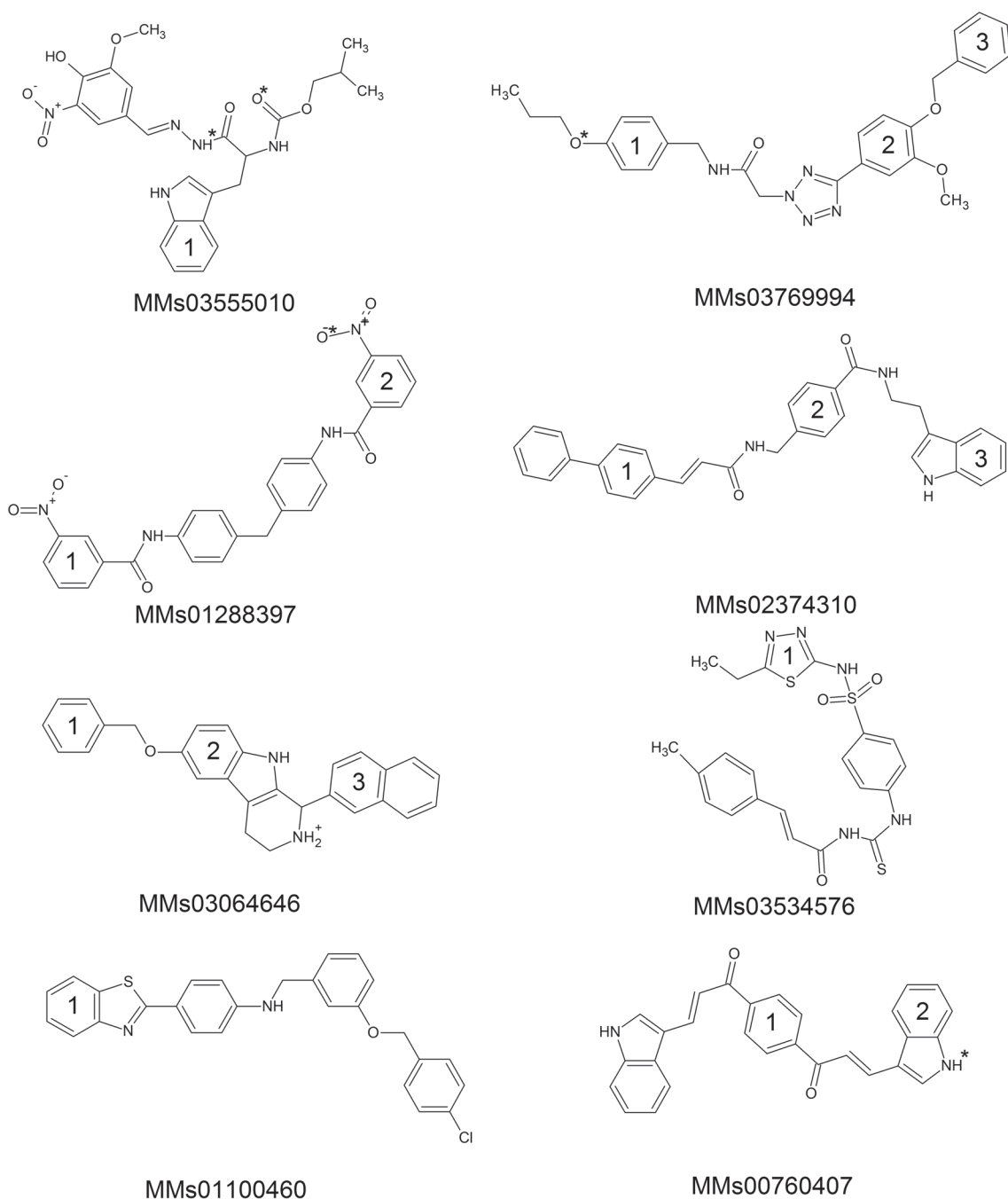


Рис. 1. Двумерные структуры химических соединений – потенциальных пептидомиметиков МКА 10Е8. Указаны коды соединений в базе данных MMsINC [10]. Цифрами обозначены ароматические кольца молекул, участвующие в π - π взаимодействиях с участком MPER белка gp41 (см. текст). Надстрочными звездочками отмечены элементы структуры, образующие межмолекулярные водородные связи (см. текст)

рых варьирует от 39 (MMs01100460) до 68 (MMs02374310). Данные, приведенные в табл. 2, свидетельствуют о том, что все идентифицированные соединения участвуют в ван-дер-ваальсовых взаимодействиях с консервативными остатками Trp-666, Trp-670 и Trp-672, расположенными в N-концевой спирали участка MPER белка gp41 (рис. 2). Полученные результаты представляют интерес в связи с тем, что указанные остатки триптофана оказывают существенное влияние на процесс слияния мембран: известно [15; 16], что их замещение на аланин предотвращает проникновение вируса в клетку-мишень. За исключением MMs01288397 и MMs03064646 идентифицированные соединения образуют ван-дер-ваальсовы контакты с остатками Asn-671 и/или Asp-674

белка gp41, которые также являются критическими для функционирования участка MPER белка gp41 ВИЧ-1 (<http://nrs.harvard.edu/urn-3:HUL.InstRepos:12269838>). Кроме π – π взаимодействий и ван-дер-ваальсовых контактов, соединения MMs03555010, MMs03769994, MMs01288397 и MMs00760407 формируют водородные связи с Trp-670 (MMs03555010 и MMs00760407), Asn-671 (MMs03769994), Trp-672 (MMs03555010) и Trp-678 (MMs01288397).

Т а б л и ц а 2. Данные о межмолекулярных взаимодействиях, реализующихся в структурных комплексах потенциальных пептидомиметиков МКА 10Е8 с пептидом MPER белка gp41 ВИЧ-1

Пептидомиметик	π – π взаимодействия ¹	Ван-дер-ваальсовы контакты ²	Водородные связи ³
MMs03555010	1...W672(π)	W666(6), A667(5), S668(3), L669(2), W670(13), N671(3), W672(28), I675(7)	O*...HN[W672] NH*...N[W670]
MMs03769994	1... W670(T) 2... W666(π) 3... W672(π)	W666(3), A667(12), L669(1), W670(23), N671(2), W672(11), D674(1), I675(10), W678(1), L679(2)	O*...HN[N671]
MMs01288397	2... W678(π) 1... W672(T)	W666(1), A667(11), W670(2), W672(8), I675(8), W678(13), L679(1), I682(1)	O*...HN[W678]
MMs02374310	1... W672(T) 2... W670(T) 3... W670(T)	W666(4), A667(10), S668(3), W670(19), N671(3), W672(13), D674(2), I675(11), W678(3)	–
MMs03064646	1... [W672](π) 2... W672(T) 3... W670(T)	W666(4), A667(9), W670(11), W672(22), I675(10)	–
MMs03534576	1... W672(T)	W666(7), A667(10), S668(3), W670(6), N671(3), W672(7), D674(3), I675(12), W678(5)	–
MMs01100460	1... W672(T) 2... W670(T)	W666(1), A667(5), W670(5), N671(1), W672(8), D674(1), I675(14), W678(3), L679(1)	–
MMs00760407	1... W670(T) 2... W672(T)	W666(1), A667(10), S668(2), W670(11), W672(11), D674(1), I675(13), W678(5)	NH*...[W670]

П р и м е ч а н и я: ¹Первыми указаны номера ароматических колец пептидомиметиков (рис. 1), а вторыми – аминокислотные остатки белка gp41. В круглых скобках приведен тип π – π взаимодействий: π – π -стэкинг, T – T-стэкинг. ²Представлены аминокислотные остатки белка gp41, формирующие ван-дер-ваальсовы контакты с пептидомиметиками. В круглых скобках указано число контактов. ³Первыми указаны доноры или акцепторы водородной связи, принадлежащие молекуле пептидомиметика (рис. 1), а вторыми – соответствующие функциональные группы остатков белка gp41, приведенных в квадратных скобках в однобуквенном коде.

Визуализация структурных комплексов, построенных методами молекулярного докинга (рис. 2), показывает, что во всех рассматриваемых случаях обнаруженные в базе данных MMsINC соединения блокируют расположенную между двумя α -спиралями «шарнирную» область пептида MPER белка gp41. Эта область эктодомена gp41 обеспечивает конформационную подвижность участка MPER, необходимую для проявления им функциональной активности в процессе слияния мембран (<http://nrs.harvard.edu/urn-3:HUL.InstRepos:12269838>). При этом важную роль играют остатки Asn-671 и Asp/Asn-674 белка gp41, о чем свидетельствуют эксперименты с мутантными формами пептида MPER, в которых эти аминокислоты замещены на аланин (<http://nrs.harvard.edu/urn-3:HUL.InstRepos:12269838>). Согласно данным рентгеноструктурного анализа [7], МКА 10Е8 взаимодействует с «шарнирной» областью участка MPER белка gp41. При этом Trp-672, непосредственно примыкающий к данной области, представляет одну из ключевых аминокислот линейного эпитопа, используемого антителом для специфического связывания с белком gp41 [7]. Полученные структурные данные о межмолекулярных взаимодействиях, реализующихся в структурных комплексах лиганд/gp41 (рис. 2), позволяют предположить, что, как и в случае МКА 10Е8, именно этот консервативный остаток триптофана участка MPER может выступать в роли триггера, запускающего механизм «узнавания» лигандами белка gp41, базирующийся на специфических π – π взаимодействиях между π -сопряженными системами их ароматических колец и боковой цепи Trp-672.

Результаты молекулярного докинга показывают, что соединения, найденные с помощью компьютерного скрининга базы данных MMsINC, могут проявлять функциональную мимикрию с МКА 10E8. Согласно расчетным данным, эти соединения, как и антитело, связываются с линейным эпитопом, расположенным в шарнирной области участка MPER, и блокируют аминокислотные остатки белка gp41, ответственные за слияние мембран вируса и клетки-мишени. На рис. 3 показаны совмещенные структуры комплексов пептида MPER с Fab-фрагментом МКА 10E8 и идентифицированными соединениями. Как видно из рис. 3, эти соединения перекрываются в пространстве с сегментом Trp-33, Gly-52c, Pro-52b, Glu-53, Lys-97 тяжелой цепи антитела, частично имитируя его взаимодействия с участком MPER белка gp41. В связи с этим отметим, что данный сегмент паратопа МКА 10E8 включает остатки, формирующие межатомные контакты с функционально важными аминокислотами белка gp41. В частности, Trp-33, Glu-53 и Lys-97 антитела взаимодействуют с Trp-672 белка gp41, а Gly-52c – с Trp-670 [7]. Как уже отмечалось, все анализируемые соединения вовлечены в специфические взаимодействия с этими консервативными остатками триптофана (табл. 2), участвующими в дестабилизации вирусной мембраны в процессе ее слияния с клеткой-хозяином [15; 16]. Кроме того, Glu-53 и Trp-33 МКА 10E8 контактируют с Phe-673 пептида MPER, а Gly-52c – с Ser-668 и Leu-669 [7]. Завершая анализ результатов молекулярного докинга, отметим, что, несмотря на небольшие размеры, обнаруженные соединения формируют большее, по сравнению с МКА 10E8, число контактов с участком MPER белка gp41. По данным работы [7], антитело 10E8 образует 32 межатомных контакта с gp41, которые включают водородные связи, солевые мостики и ван-дер-ваальсовы взаимодействия (см. дополнительную информацию к статье [7] на сайте <http://www.nature.com/nature/journal/v491/n7424/full/nature11544.html#supplementary-information>). В то же время для потенциальных пептидомиметиков 10E8 их минимальное количество (без учета π - π взаимодействий) равно 39 (соединение MMs01100460), а максимальное – 69 (MMs03555010) (табл. 2).

Таким образом, проведенные расчеты показывают, что найденные в базе данных MMsINC химические соединения характеризуются близким механизмом взаимодействия с участком MPER ВИЧ-1, основу которого формируют специфические π - π взаимодействия и ван-дер-ваальсовы контакты, приводящие к блокаде аминокислотных остатков белка gp41, ответственных за слияние оболочки вируса с мембраной клетки-мишени.

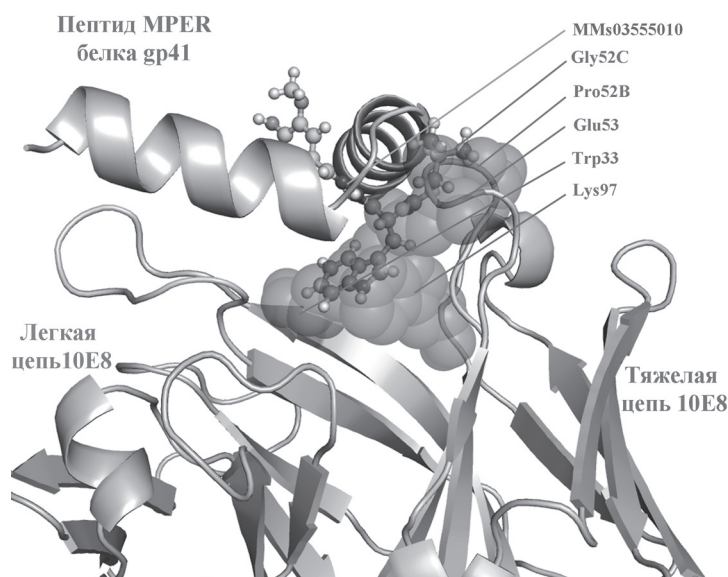


Рис. 3. Совмещенные структуры комплексов пептида MPER gp41 с Fab-фрагментом МКА 10E8 и соединением MMs03555010. Координаты атомов комплекса gp41/10E8 заимствованы из Банка данных белков (код 4G6F; <http://www.rcsb.org/pdb/>). Комплексы пептида с остальными семью лигандами перекрываются с надмолекулярной структурой gp41/MMs03555010. Молекула MMs03555010 изображена с использованием модели «шарик–палочка». Сегмент Trp-33, Gly-52c, Pro-52b, Glu-53, Lys-97 тяжелой цепи антитела показан с помощью модели «шары»

Данные молекулярной динамики структурных комплексов потенциальных пептидомиметиков МКА 10Е8 с пептидом МРЕР белка gr41 согласуются с выводами, сделанными на основе анализа результатов молекулярного докинга. Структурные комплексы, построенные методами молекулярного докинга, энергетически стабильны, о чем свидетельствуют средние значения свободной энергии их образования и соответствующие им величины стандартных отклонений (табл. 3). Анализ средних значений энтальпии связывания с лигандами, вычисленных для каждого остатка пептида МРЕР (табл. 4), позволил идентифицировать аминокислоты белка gr41, играющие ключевую роль в стабилизации структурных комплексов. Из данных табл. 4 следует, что практически во всех рассматриваемых случаях весомый вклад в энтальпийную составляющую свободной энергии образования комплексов вносят консервативные остатки Trp-666, Trp-670 и Trp-672 белка gr41, наличие которых необходимо для функционирования участка МРЕР ВИЧ-1 [15; 16]. Этот вывод также относится к остатку Ile-675 (табл. 4), расположенному в функционально важной «шарнирной» области эктодомена gr41. Семь из восьми лигандов используют в качестве «горячих» точек связывания остатки Trp-678 и Leu-679 белка gr41 (в первом случае исключение составляет соединение MMs03555010, а во втором – MMs03064646). Шесть соединений – MMs03555010, MMs03769994, MMs01288397, MMs02374310, MMs01100460 и MMs00760407 – эффективно взаимодействуют с остатком Arg-683 белка gr41, представляющим одну из четырех аминокислот, критических для специфического связывания МКА 10Е8 с молекулярной мишенью [7].

Таблица 3. Средние значения свободной энергии $\langle \Delta G \rangle$ образования комплексов потенциальных пептидомиметиков МКА 10Е8 с пептидом МРЕР белка gr41 ВИЧ-1 и соответствующие им стандартные отклонения ΔG_{STD}

Пептидомиметик	$\langle \Delta H \rangle$, ккал/моль	$(\Delta H)_{\text{STD}}$, ккал/моль	$\langle T\Delta S \rangle$, ккал/моль	$(T\Delta S)_{\text{STD}}$, ккал/моль	$\langle \Delta G \rangle$, ккал/моль	ΔG_{STD} , ккал/моль
MMs03555010	-35,2	4,0	-19,2	2,9	-16,1	3,4
MMs03769994	-29,3	5,7	-17,3	4,0	-12,0	4,8
MMs01288397	-30,3	6,3	-23,0	3,7	-7,3	4,8
MMs02374310	-26,8	4,5	-19,9	3,4	-7,2	3,9
MMs03064646	-23,7	5,5	-17,1	3,6	-6,6	4,4
MMs03534576	-25,4	4,6	-19,7	3,6	-5,7	4,0
MMs01100460	-24,9	3,5	-19,5	3,7	-5,4	3,6
MMs00760407	-21,8	3,6	-16,5	5,5	-5,3	4,5

Примечание. $\langle \Delta H \rangle$ и $\langle T\Delta S \rangle$ – соответственно средние значения энтальпийной и энтропийной составляющих свободной энергии; $(\Delta H)_{\text{STD}}$ и $(T\Delta S)_{\text{STD}}$ – соответствующие этим значениям стандартные отклонения.

Таблица 4. Средние значения энтальпии связывания аминокислотных остатков участка МРЕР белка gr41 с потенциальными миметиками МКА 10Е8

Остаток белка gr41	Пептидомиметик МКА 10Е8							
	MMs 03555010	MMs 03769994	MMs 01288397	MMs 02374310	MMs 03064646	MMs 03534576	MMs 01100460	MMs 00760407
	Энтальпия связывания (ккал/моль)							
Glu-662	-3,3	-0,3	-0,5	-0,2	-0,1	-0,1	-0,1	-0,1
Leu-663	-2,9	-3,5	-1,9	-1,4	-1,5	-1,1	-1,4	-1,3
Asp-664	-0,1	-0,2	-0,1	-0,1	-1,6	-0,1	-0,02	-0,04
Lys-665	-0,2	-0,2	-0,2	-0,2	-0,3	-0,1	-0,3	-0,14
Trp-666	-2,5	-3,3	-3,4	-2,9	-2,1	-5,0	-3,4	-2,3
Ala-667	-5,4	-0,8	-0,6	-1,5	-2,0	-3,1	-0,9	-0,4
Ser-668	-2,1	-0,04	-0,03	-0,1	-0,1	-1,7	-0,1	-0,1
Leu-669	-0,9	-0,2	-0,1	-0,2	-0,3	-2,8	-0,4	-1,2
Trp-670	-6,4	-2,0	-1,2	-1,7	-1,8	-3,8	-3,9	-4,2
Asn-671	-2,7	-0,1	-0,1	-0,5	-1,5	-0,04	-0,6	-0,3
Trp-672	-3,6	-1,2	-3,7	-1,9	-5,6	-0,02	-1,8	-1,3

Остаток белка gp41	Пептидомиметик МКА 10Е8							
	MMs 03555010	MMs 03769994	MMs 01288397	MMs 02374310	MMs 03064646	MMs 03534576	MMs 01100460	MMs 00760407
	Энтальпия связывания (ккал/моль)							
Phe-673	-0,2	-0,03	-1,0	0,01	-0,4	-0,01	-0,05	-0,12
Asp-674	-0,2	-0,3	-0,2	-0,1	-0,5	-0,1	-0,2	-0,4
Ile-675	-2,8	-2,7	-2,4	-1,7	-1,5	-1,4	-2,8	-2,0
Thr-676	-0,8	-0,2	-2,5	-0,1	-0,03	-0,1	-0,4	-0,6
Asn-677	-0,02	-0,1	-0,2	-0,04	-0,1	-0,1	-0,1	-0,14
Trp-678	-0,1	-4,5	-3,2	-1,8	-1,7	-2,5	-1,9	-2,3
Leu-679	-0,8	-1,9	-2,6	-1,9	-0,1	-0,9	-1,6	-1,6
Trp-680	-0,01	-0,1	-0,6	-0,1	0,0	-0,2	-0,1	-0,1
Tyr-681	0,0	-0,1	-0,4	-0,9	-0,04	-1,4	-0,2	-0,1
Ile-682	-0,2	-0,8	-1,6	-3,2	-0,04	-1,7	-0,8	-1,4
Arg-683	-2,4	-0,9	-1,0	-3,2	0,02	-0,2	-0,9	-1,1

Заключение. Совместный анализ статических и динамических моделей структурных комплексов потенциальных миметиков МКА 10Е8 с пептидом МРЕР ВИЧ-1 свидетельствует о наличии специфических и эффективных взаимодействий между ними, приводящих к блокаде аминокислотных остатков белка gp41, критических для слияния вируса с клеткой-хозяином. По данным молекулярной динамики, комплексы этих соединений с пептидом МРЕР белка gp41 проявляют конформационную стабильность в течение МД расчетов и характеризуются низкими значениями свободной энергии образования надмолекулярных структур (табл. 3). В связи с этим найденные соединения, удовлетворяющие «правилу пяти» Липинского, могут рассматриваться как перспективные базовые структуры для разработки новых лекарственных препаратов против ВИЧ с широким спектром нейтрализующего действия.

Работа выполнена при финансовой поддержке БРФФИ (грант X15-022).

Литература

1. Arts E. J., Hazuda D. J. // Cold Spring Harb. Perspect. Med. 2012. Vol. 2. P. a007161.
2. Tilton J. C., Doms R. W. // Antiviral Res. 2010. Vol. 85. P. 91–100.
3. Vermeire K., Schols D., Bell T. W. // Curr. Med. Chem. 2006. Vol. 13. P. 731–743.
4. Sirois S., Sing T., Chou K. C. // Curr. Protein Pept. Sci. 2005. Vol. 6. P. 413–422.
5. Andrianov A. M. // Expert Opin. Drug Discov. 2011. Vol. 6. P. 419–435.
6. McCoy L. E., Weiss R. A. // J. Exp. Med. 2013. Vol. 210. P. 209–223.
7. Huang J., Ofek G., Laub L. et al. // Nature. 2012. Vol. 491. P. 406–414.
8. Кашиш И. А., Тузилов А. В., Андрианов А. М. // Докл. НАН Беларуси. 2015. Т. 59, № 1. С. 68–73.
9. Floris M., Masciocchi J., Fanton M., Moro S. // Nucl. Acids Res. 2011. Vol. 39 (suppl. 2). P. W261–W269.
10. Masciocchi J., Frau G., Fanton M. et al. // Nucl. Acids Res. 2009. Vol. 37. P. D284–D290.
11. Lipinski C. A., Lombardo F., Dominy B. W., Feeney P. J. // Adv. Drug Delivery Rev. 2001. Vol. 46. P. 3–26.
12. Trott O., Olson A. J. // J. Comput. Chem. 2010. Vol. 31. P. 455–461.
13. Durrant J. D., McCammon J. A. // J. Chem. Inf. Model. 2010. Vol. 50. P. 1865–1871.
14. Case D. A., Darden T. A., Cheatham T. E. et al. // AMBER 11, University of California, San Francisco, 2010.
15. Munoz-Barroso I., Salzwedel K., Hunter E., Blumenthal R. // J. Virol. 1999. Vol. 73. P. 6089–6092.
16. Salzwedel K., West J. T., Hunter E. // J. Virol. 1999. Vol. 73. P. 2469–2480.

I. A. KASHYN, A. V. TUZIKOV, A. M. ANDRIANOV

andrianov@iboch.bas-net.by

COMPUTER-AIDED SCREENING OF SMALL-MOLECULE HIV-1 ENTRY INHIBITORS BASED ON NEUTRALIZING ANTIBODY 10E8

Summary

Computer-based screening of small-molecule HIV-1 entry inhibitors presenting potential peptidomimetics of broadly neutralizing monoclonal antibody 10E8 is carried out. Eight chemical compounds able to block the HIV-1 gp41 segment critical for fusion of the virus membrane with a target cell were identified using molecular modeling. These compounds are considered as promising basic structures for the design of novel broad anti-HIV drugs.

БИОЛОГИЯ

УДК 577.21:631.524.86:632.4:633.111

Т. В. ДОЛМАТОВИЧ, А. А. БУЛОЙЧИК

МОЛЕКУЛЯРНАЯ ИДЕНТИФИКАЦИЯ ГЕНОВ УСТОЙЧИВОСТИ К БУРОЙ РЖАВЧИНЕ В СОРТАХ ЯРОВОЙ МЯГКОЙ ПШЕНИЦЫ (*TRITICUM AESTIVUM* L.)

(Представлено академиком Л. В. Хотылёвой)

Институт генетики и цитологии НАН Беларуси, Минск

Поступило 13.04.2015

Введение. В условиях Беларуси одним из вредоносных и распространенных заболеваний пшеницы является бурая ржавчина. Возбудитель болезни – биотрофный грибной патоген *Puccinia triticina* Erikss. Поражение посевов бурой ржавчиной приводит к значительным потерям урожая, а также к ухудшению качественных показателей зерна. Проблема устойчивости мягкой пшеницы к возбудителю бурой ржавчины в Беларуси приобретает большое значение. Это связано с изменением климата и недостаточной изученностью разрешенных к выращиванию сортов пшеницы на наличие генов устойчивости. Одной из причин массового развития этой болезни является возделывание сортов пшеницы однотипных по устойчивости и появление новых вирулентных рас патогена, что неизбежно приводит к быстрой потере их иммунитета. Химические средства защиты пшеницы от бурой ржавчины являются мало эффективными, так как возбудитель данного заболевания способен давать несколько генераций в течение вегетационного периода растений, распространяться ветром на значительные расстояния и адаптироваться к фунгицидам. В связи с этим наиболее экономически выгодным и экологически чистым средством борьбы является выведение и возделывание устойчивых к болезням сортов.

Применение молекулярных маркеров дает возможность идентифицировать гены устойчивости в сортах, гибридах и селекционных линиях, что ускоряет отбор целевых генотипов и повышает эффективность селекционного процесса. Идентификация генотипов с помощью молекулярно-генетических маркеров особенно значима при выявлении высокоэффективных генов, вирулентность к которым в природных популяциях патогена практически отсутствует, и генов «возрастной» устойчивости, эффективность которых проявляется на более поздних этапах онтогенеза пшеницы [1].

По состоянию на 2015 г., согласно каталогу McIntosh с соавт. [2], идентифицировано 86 генов устойчивости и аллелей к бурой ржавчине. К настоящему времени различные типы ДНК маркеров разработаны более чем для тридцати из них. Конечно, предпочтение для нужд MAS селекции отдается ген-специфическим маркерам, но, учитывая то небольшое число клонированных *Lr*-генов (*Lr1*, *Lr10*, *Lr21*, *Lr34*), в большинстве случаев используются диагностические маркеры, сцепленные с генами устойчивости.

Цель работы – скрининг сортов, районированных на территории Республики Беларусь, на присутствие генов устойчивости к бурой ржавчине и выделение среди них источников генов устойчивости к этому заболеванию.

Материалы и методы исследования. Исследование проводилось на 22 сортах мягкой яровой пшеницы, внесенных в Государственный реестр Республики Беларусь по состоянию на 2013 год, в том числе 10 сортов белорусской селекции, 5 – польской, 6 – немецкой, 1 сорт из Сербии.

Экстракцию ДНК осуществляли из десяти индивидуальных проростков для каждого сорта по методу Plaschke с соавт. [3]. Праймеры к генам устойчивости отбирали из литературных ис-

точников [1; 4–9]. Перечень изученных генов устойчивости к бурой ржавчине и данные об использованных маркерах приведены в табл. 1. Амплификацию фрагментов ДНК проводили на термоциклере BioRad, используя режим и условия, как описано в [10]. Положительным контролем служили изогенные линии пшеницы и сорта, в которых гены устойчивости идентифицированы, в качестве отрицательного контроля – сорта, в которых гены устойчивости не выявлены. Анализ полученных фрагментов амплификации проводили в 2 %-ном агарозном геле в трис-ацетатном буфере. В качестве маркера молекулярного веса использовали GeneRulertm 100bp DNA Ladder Plus (ThermoScientific).

Таблица 1. Характеристика маркеров, использованных для идентификации генов устойчивости к бурой ржавчине

Идентифицируемый Lr-ген	Локализация на хромосоме	Источник гена	Название маркера (праймера)	Длина фрагмента амплификации
<i>Lr1</i>	5DL	<i>Triticum aestivum</i>	RGA567-5	510 п. н.
<i>Lr9</i>	6BL	<i>Aegilops umbellulata</i>	SCS ₅₅₀	550 п. н.
<i>Lr10</i>	1AS	<i>Triticum aestivum</i>	F12245/Lr10-6/r2	310 п. н.
<i>Lr19</i>	7DL	<i>Thinopyrum elongatum</i>	SCS ₂₆₅ ; SCS ₂₅₃	737 п. н. 512 п. н.
<i>Lr19</i>	7DL	<i>Thinopyrum elongatum</i>	AG15	811 п. н. 1073 п. н.
<i>Lr20</i>	7AL	<i>Triticum aestivum</i>	STS648-L/R	638 п. н.
<i>Lr21</i>	5DS	<i>Aegilops tauschii</i>	D14LN-RN	669/757 п. н. 774 п. н.
<i>Lr22a</i>	2DS	<i>Aegilops squarrosa</i>	GWM296	131–178 п. н.
<i>Lr24</i>	3DL	<i>Thinopyrum elongatum</i>	SCS1302 ₆₁₅	613 п. н.
<i>Lr24</i>	3DL	<i>Thinopyrum elongatum</i>	SCS1326 ₆₀₇	607 п. н.
<i>Lr24</i>	3DL	<i>Thinopyrum elongatum</i>	SCS73 ₇₁₉	719 п. н.
<i>Lr25</i>	4BS	<i>Secale cereale</i>	Lr25F20/R19	1800 п. н.
<i>Lr26</i>	1BL	<i>Secale cereale</i>	Iag95	260 п. н. 360 п. н.
<i>Lr26</i>	1BL	<i>Secale cereale</i>	IB-267	200–300 п. н.
<i>Lr26</i>	1BL	<i>Secale cereale</i>	P6M12-P	1050 п. н.
<i>Lr28</i>	4AL	<i>Aegilops speltoides</i>	SCS421570	570 п. н.
<i>Lr29</i>	7DS	<i>Thinopyrum elongatum</i>	29F24/29R24	900 п. н.
<i>Lr34</i>	7DS	<i>Triticum aestivum</i>	L34SPF/L34DINT13R2	751 п. н.
<i>Lr34</i>	7DS	<i>Triticum aestivum</i>	L34DINT9F/ Lr34MINUS	523 п. н.
<i>Lr35</i>	2BL	<i>Aegilops speltoides</i>	BCD260F1/35R2	900 п. н.
<i>Lr37</i>	2AS	<i>Aegilops ventricosa</i>	VENTRIUP/ LN2	262 п. н.
<i>Lr42</i>	1DS	<i>Aegilops tauschii</i>	CFD15	178 п. н. 220 п. н.
<i>Lr46</i>	1BL	<i>Triticum aestivum</i>	WMC44	250 п. н. 280 п. н.
<i>Lr47</i>	7AS	<i>Aegilops speltoides</i>	PS10L/10R	282 п. н.
<i>Lr48</i>	2BL	<i>Triticum aestivum</i>	WMC175	219 п. н. 233 п. н.

Разделение и анализ микросателлитных последовательностей, полученных в результате ПЦР, выполняли на автоматическом лазерном флуоресцентном секвенаторе (ALFexpress II) (Pharmacia) с использованием коротких гель-кассет. Разделение продуктов амплификации проводили в 6 %-ном полиакриламидном геле. Каждая дорожка акриламидного геля помимо образца содержала в качестве стандарта фрагменты ДНК с уже известным размером. Расчет анализируемых фрагментов амплификации производили относительно этих стандартов с использованием программного обеспечения Fragment Analyser 1.2 (Pharmacia).

Результаты и их обсуждение. Исследование районированных сортов мягкой яровой пшеницы проводили с помощью 25 маркеров (табл. 1) к 19 генам устойчивости к бурой ржавчине: *Lr1*, *Lr9*, *Lr10*, *Lr19*, *Lr20*, *Lr21*, *Lr22a*, *Lr24*, *Lr25*, *Lr26*, *Lr28*, *Lr29*, *Lr34*, *Lr35*, *Lr37*, *Lr42*, *Lr46*, *Lr47* и *Lr48*. Большинство изученных нами *Lr*-генов относится к ювенильным (или проростковым), за исключением *Lr22a*, *Lr34*, *Lr35*, *Lr37*, *Lr46* и *Lr48*, которые являются возрастными.

В результате проведенных исследований в сортах, внесенных в Государственный реестр Республики Беларусь, выявлены только гены устойчивости *Lr1*, *Lr9*, *Lr10* и *Lr20* (табл. 2).

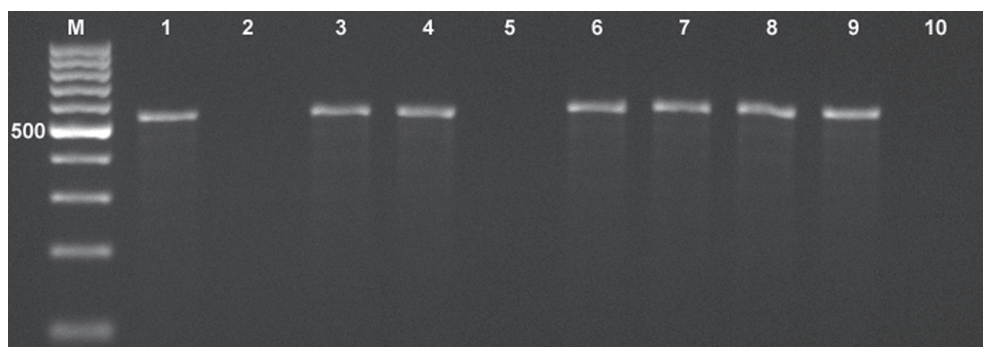
Таблица 2. ПЦР-детекция локусов, сцепленных с генами устойчивости к бурой ржавчине в сортах мягкой яровой пшеницы, внесенных в Государственный реестр Республики Беларусь на 2013 год

Название сорта	Происхождение	<i>Lr</i> -гены
Munk	Германия	<i>Lr1</i>
Banti	Польша	<i>Lr20</i>
Виза	Республика Беларусь	<i>Lr20</i>
Ростань	Республика Беларусь	–
Quattro	Германия	<i>Lr20</i>
Fasan	Германия	<i>Lr1</i> + <i>Lr20</i>
Дарья	Республика Беларусь	<i>Lr20</i>
Triso	Германия	<i>Lr20</i>
Рассвет	Республика Беларусь	<i>Lr20</i>
Koksa	Польша	<i>Lr1</i>
Тома	Республика Беларусь	–
Korynta	Польша	<i>Lr20</i>
Bombona	Польша	<i>Lr20</i>
Сабина	Республика Беларусь	<i>Lr20</i>
Василиса	Республика Беларусь	<i>Lr20</i>
Венера	Сербия	<i>Lr1</i> + <i>Lr10</i>
Любава	Республика Беларусь	<i>Lr20</i>
Ласка	Республика Беларусь	<i>Lr20</i>
Verbena	Польша	<i>Lr1</i>
Melissos	Германия	–
Сударыня	Республика Беларусь	–
Ethos	Германия	–

Примечание. Локусов, сцепленных с генами *Lr19*, *Lr21*, *Lr22a*, *Lr24*, *Lr25*, *Lr26*, *Lr28*, *Lr29*, *Lr34*, *Lr35*, *Lr37*, *Lr42*, *Lr46*, *Lr47* и *Lr48* не выявлено.

Для большинства сортов, районированных на территории Республики Беларусь характерно присутствие гена устойчивости *Lr20* (табл. 2, рисунок). Ген *Lr20* относится к собственно пшеничным и тесно сцеплен с генами устойчивости к стеблевой ржавчине (*Sr15*) и мучнистой росе (*Pm1*). Для скрининга локуса устойчивости *Lr20–Pm1* в селекционном материале использовали STS маркер STS638 [9]. Частота рекомбинации между маркером и локусом *Lr20–Pm1* составляет 7,1 сМ, поэтому эффективность диагностики гена *Lr20* с помощью данного маркера в сортах и линиях не всегда достаточно точная. Фрагмент амплификации, сцепленный с локусом *Lr20–Pm1*, выявлен у сортов польской селекции (Banti, Bombona, Korynta), немецкой селекции (Quattro, Fasan, Triso), а также белорусской селекции (Василиса, Виза, Дарья, Ласка, Любава, Рассвет, Сабина). В настоящее время ген устойчивости *Lr20* полностью преодолен белорусской популяцией бурой ржавчины [11].

Фрагмент амплификации, соответствующий гену *Lr1* выявлен у сортов Fasan, Munk (Германия), Verbena, Koksa (Польша) и сорта Венера (Сербия).



Результаты разделения методом электрофореза продуктов амплификации в 1,5 %-ном агарозном геле, полученные с помощью ПЦП со SCAR маркером STS638 к гену устойчивости к бурой ржавчине *Lr20*: М – маркер молекулярного веса (100bp DNA Ladder; Thermo Scientific); лунка 1 – изогенная линия мягкой пшеницы Thatcher*6/Timmo (Tc + *Lr20*) (положительный контроль); сорта мягкой яровой пшеницы: 2 – Ростань, 3 – Дарья, 4 – Рассвет, 5 – Тома, 6 – Сабина, 7 – Василица, 8 – Любава, 9 – Ласка, 10 – Сударыня

В настоящее время ген *Lr1*, также как и гены устойчивости *Lr10* и *Lr20* утратил свою эффективность к белорусской популяции бурой ржавчины [11], поэтому рекомендуется его использование в сочетании с другими генами или локусами.

Комбинация генов *Lr1* и *Lr10* выявлена у сорта Венера, а комбинация *Lr1* и *Lr20* у сорта Fasan (Германия).

В сортах, районированных на территории Республики Беларусь, нами не выявлены гены возрастной устойчивости *Lr22a*, *Lr34*, *Lr35*, *Lr37*, *Lr46* и *Lr48*. Среди изученных сортов не оказалось и эффективных генов с расоспецифической устойчивостью.

Заключение. Проведен скрининг 19 генов устойчивости к бурой ржавчине у 22 сортов мягкой яровой пшеницы, внесенных в Государственный реестр Республики Беларусь. Ген *Lr1* обнаружен у сортов Munk, Fasan (Германия), Koksa, Verbena (Польша); ген *Lr10* – у сорта Василица (Беларусь); фрагмент, сцепленный с геном *Lr20*, – у сортов польской селекции (Banti, Bombona, Korynta), немецкой селекции (Quattro, Fasan, Triso), а также белорусской селекции (Василица, Виза, Дарья, Ласка, Любава, Рассвет, Сабина). Не обнаружены локусы, сцепленные с генами устойчивости *Lr9*, *Lr12*, *Lr19*, *Lr21*, *Lr22a*, *Lr24*, *Lr25*, *Lr26*, *Lr28*, *Lr29*, *Lr34*, *Lr35*, *Lr37*, *Lr42*, *Lr46*, *Lr47*, *Lr48*.

Таким образом, установлено, что в селекционном процессе мягкой яровой пшеницы в Республике Беларусь ограничено задействован потенциал мирового генофонда, и, как следствие, отсутствуют гены, широко и успешно используемые селекционерами других регионов. Показана возможность и необходимость использования маркеров для идентификации генов устойчивости к бурой ржавчине *Lr1*, *Lr9*, *Lr19*, *Lr20*, *Lr22a*, *Lr24*, *Lr26*, *Lr34*, *Lr35*, *Lr37*, *Lr42*, *Lr46* и *Lr48* в маркер-сопутствующей селекции.

Литература

1. McIntosh R. A., Yamazaki Y., Dubcovsky J. et al. Catalogue of gene symbols for wheat. 2014. – Mode of access: <http://www.shigen.nig.ac.jp/wheat/komugi/genes/download.jsp>. – Date of access: 25.03.2015.
2. Vida G., Ga M., Uhrin A. et al. // Euphytica. 2009. Vol. 170. P. 67–76.
3. Plaschke J., Börner A., Xie D. X. et al. // Theoretical and Applied Genetics. 1993. Vol. 85, N 8. P. 1049–1054.
4. Qiu Ji-Wen, Schürch A. C., Yahiaoui N. et al. // Theoretical and Applied Genetics. 2007. Vol. 115, N 2. P. 159–168.
5. Gupta S. K., Charpe A., Prabhu K. V., Haqu Q. M. R. // Theoretical and Applied Genetics. 2006. Vol. 113, N 6. P. 1027–1036.
6. Prabhu K. V., Gupta S. K., Charpe A., Koul S. // Plant Breeding. 2004. Vol. 123. P. 417–420.
7. Gupta S. K., Charpe A., Koul S. et al. // Euphytica. 2006. Vol. 150, N 1–2. P. 233–240.
8. Mago R., Miah H., Lawrence G. J. et al. // Theoretical and Applied Genetics. 2005. Vol. 112, N 1. P. 41–50.
9. Neu C., Stein N., Keller B. // Genome. 2002. Vol. 45. P. 737–744.

10. Долматович Т. В., Булойчик А. А. ДНК-технология идентификации генов устойчивости пшеницы к возбудителю бурой ржавчины: Методические рекомендации / Мин-во сельского хозяйства и продовольствия Респ. Беларусь, Нац. акад. наук Беларуси, ГНУ «Ин-т генетики и цитологии НАН Беларуси». Минск, 2013. – 64 с.

11. Булойчик А. А., Борзяк В. С., Волуевич Е. А. // Микология и фитопатология. 2011. Т. 45, № 5. С. 436–442.

T. V. DOLMATOVICH, A. A. BULOICHIK

A.Buloichik@igc.bas-net.by; T.Dolmatovich@igc.bas-net.by

**MOLECULAR IDENTIFICATION OF LEAF RUST RESISTANCE GENES IN COMMON
WHEAT VARIETIES (*TRITICUM AESTIVUM* L.)**

Summary

The leaf rust resistance genes *Lr1* was revealed in cultivars Fasan, Koksa, Munk, Verbena; the gene *Lr10* – in cultivar Vasilisa; the locus linked with the gene *Lr20* – in cultivars Banti, Bombona, Korynta, Quattro, Fasan, Triso, Vasilisa, Viza, Darja, Laska, Lubava, Passvet, Sabina. The loci linked with the gene resistance genes *Lr9*, *Lr12*, *Lr19*, *Lr21*, *Lr22a*, *Lr24*, *Lr25*, *Lr26*, *Lr28*, *Lr29*, *Lr34*, *Lr35*, *Lr37*, *Lr42*, *Lr46*, *Lr47* and *Lr48* were not identified in the investigated varieties.

УДК 591.53:597:556.55(212)

Ж. Ф. БУСЕВА, М. В. ПЛЮТА

ПИТАНИЕ МОЛОДИ РЫБ В ЛИТОРАЛИ МЕЛКОВОДНОГО ОЗЕРА

(Представлено членом-корреспондентом В. П. Семенченко)

НПЦ НАН Беларуси по биоресурсам, Минск

Поступило 23.02.2015

Введение. Водные местообитания в пределах одного озера часто различаются по физическим и химическим свойствам, а также трофности и кормовой базе, что в совокупности может отражаться на различиях в рационе рыб. В водоемах молодь рыб является основным потребителем планктона. Различия в потреблении пищи могут быть обусловлены использованием тех или иных местообитаний рыбами в течение сезона, а также связаны с увеличением размеров рыб. Поэтому очень важно учитывать влияние пространственного (топический) и временного факторов на взаимодействия, происходящие в пищевой цепи. Многие исследования указывают на преимущественное выедание рыбами наиболее заметной составляющей зоопланктонного сообщества. Было установлено [1], что в олиго-мезотрофном озере пропорция крупных дафниид в общей численности зоопланктона отрицательно коррелировала с биомассой планктоноядных рыб рода *Coregonus*. Также было показано, что прессу рыб в мелководных водоемах подвергаются массовые виды зоопланктона, в том числе наиболее крупные животные [2–4]. Существуют достаточно противоречивые данные о том, что именно молодь рыб ответственна за снижение численности крупных дафниид в середине летнего сезона. Значимость хищничества молоди рыб все еще остается объектом противоречий: одни исследования показывают четкую прямую связь между численностью молоди рыб и снижением численности зоопланктона [1; 5], другие ее не подтверждают [6].

Исходя из сложности проблемы, многообразия пресноводных водоемов и их геоморфологической структуры, цель данного исследования – изучение особенностей питания молоди рыб возраста 0+ в литорали мелководного озера, оценка его видовой и топической специфичности.

Материал и методы исследования. Полевые исследования проводились в первой декаде июля в литоральной зоне мезо-эвтрофного мелководного озера Обстерно (северная часть Беларуси). Озеро имеет площадь 9,89 км², средняя глубина – 5,3 м, прозрачность в летние месяцы по диску Секки достигает 4,5 м. Для озера характерна довольно широкая (50–150 м), но разреженная полоса тростника и камыша. По рыбохозяйственной классификации это лещево-судачий водоем. Обследовали два типа литорали: литораль без зарослей (чистая литораль) и литораль с зарослями камыша озерного (*Schoenoplectus lacustris*), расположенные в западной части озера, глубина станций 0,5–0,7 м. Отбор проб зоопланктона проводился общепринятыми гидробиологическими методами с помощью сети Апштейна (размер ячеек 100 мкм). Сеть протягивали горизонтально 1–2 раза в литорали без зарослей и 2–3 раза от дна до поверхности в литорали с зарослями макрофитов, пробы фиксировали 4 %-ным раствором формалина. Молодь рыб (возраст 0+) отлавливали сачком и фиксировали в 4 %-ном растворе формалина с добавлением NaCl. Длина рыб измерялась от кончика рыла до конца чешуйного покрова. Содержимое всего желудочно-кишечного тракта (ЖКТ) каждой особи обрабатывали счетным методом, пищевые объекты зоопланктона (*Cladocera*, *Copepoda*) определяли до вида или рода, личинок *Insecta* идентифицировали до семейства. Наиболее массово потребляемые животные были объединены в следующие группы: *Cladocera* (с делением на 2 группы: планктонные и планкто-бентические),

Chironomidae (в группу объединены все стадии развития – личинки, куколки и имаго) и «прочие». Так, в группу «прочие» отнесли всех жертв, редко или спорадически идентифицированных в пищевом комке: это – *Ceratopogonidae* (личинки), не идентифицированные остатки *Insecta*, а также встречающиеся единичными экземплярами представители *Nematoda*, *Ostracoda*, *Rotatoria*, *Ephemeroptera*, *Trichoptera* и *Odonata*. Не менее 20 экземпляров каждого вида потребляемого зоопланктона (*Cladocera* и *Copepoda*) были измерены. По размерам животных-жертв рассчитывали восстановленную сырую массу тела каждого вида, используя уравнение Балушкиной–Винберга. В качестве показателя селективности потребляемого зоопланктона использовали индекс Ивлева (Е) [7].

Результаты и их обсуждение. *Размерная и видовая структура молоди рыб в разных типах литорали.* В исследуемый период в литоральной зоне оз. Обстерно было зарегистрировано 5 видов молоди рыб: плотва (*Rutilus rutilus* (L.)), верховка (*Leucaspis delineatus* (Heckel)), красноперка (*Scardinius erythrophthalmus* (L.)), уклейка (*Alburnus alburnus* (L.)), лещ (*Abramis brama* (L.)). Всего отловлено и проанализировано содержимое ЖКТ у 321 экземпляра молоди рыб (табл. 1).

Таблица 1. Количество отловленного материала (молоди рыб) в литоральной зоне оз. Обстерно

Биотоп	Вид рыб					
	плотва	красноперка	верховка	уклейка	лещ	всего
Камыш	3	78	7	33	29	150
Чистая литораль	61	36	7	67	0	171
Всего рыб (экз.)	64	114	14	100	29	321

Все рассматриваемые виды рыб на данной стадии развития относятся к планкто- и бентофагам. Линейные размеры молоди рыб в исследованный период колебались от $1,08 \pm 0,22$ см у верховки до $2,25 \pm 0,24$ см у плотвы (табл. 2). Размеры плотвы были достоверно выше в литорали без макрофитов по сравнению с плотвой из зарослей камыша. Линейные размеры верховки были значительно меньше размеров молоди других видов, но не различались у молоди данного вида в разных типах литорали ($1,26 \pm 0,07$ см в камыше и $1,08 \pm 0,22$ см в чистой литорали). Размеры красноперки и уклейки из разных биотопов достоверно не различались.

Таблица 2. Размеры молоди рыб в литоральной зоне оз. Обстерно

Биотоп	Вид рыб				
	плотва	красноперка	верховка	уклейка	лещ
Камыш	$1,53^* \pm 0,05$	$1,68 \pm 0,39$	$1,26 \pm 0,07^{**}$	$1,77 \pm 0,29$	$1,81 \pm 0,07$
Чистая литораль	$2,25^* \pm 0,24$	$1,98 \pm 0,35$	$1,08 \pm 0,22^{**}$	$1,64 \pm 0,36$	–

Примечания. Размеры рыб даны в сантиметрах; * – различия в размерной структуре рыб между биотопами достоверны; ** – размеры молоди данного вида достоверно отличаются от размеров молоди других видов.

Структура зоопланктонного сообщества в разных типах литорали. В период исследований сообщество зоопланктона озера Обстерно характеризовалось высоким видовым разнообразием. В литорали с зарослями камыша обнаружено больше видов зоопланктона, чем в биотопе без зарослей (табл. 3), что согласуется с данными наших исследований за предыдущие годы [8]. Как численность, так и биомасса зоопланктона в биотопе с зарослями камыша была выше по сравнению с литоралью без зарослей, но различия не достоверны, что может свидетельствовать о высокой мобильности сообществ зоопланктона, возможно, обусловленное прессом мальков рыб и перераспределением его в смежных местообитаниях. Так, численность зоопланктона в исследованный период в зарослях камыша и чистой литорали была $149,2 \pm 71,6$ и $125,8 \pm 40,0$ тыс. экз/м³, биомасса – $946,3 \pm 374,9$ и $600,6 \pm 281,9$ мг/м³ соответственно. Основную долю от общей численности составляли представители *Copepoda*, их доминирование обусловлено высокой численностью ювенильных стадий циклопов и несколько сильнее выражено в чистой литорали по сравнению с биотопом с зарослями. Доля планктонных *Cladocera* в биотопах значительно меньше,

доминирует в двух биотопах *Ceriodaphnia pulchella*, доля других планктонных видов (*Diaphanosoma brachyurum*, виды рода *Daphnia* и *Bosmina*) составляет не более 5 % от общей численности зоопланктона литорали. Наибольшее число видов планкто-бентических *Cladocera* отмечено в биотопе с зарослями, однако их численность в двух биотопах очень низкая (табл. 3).

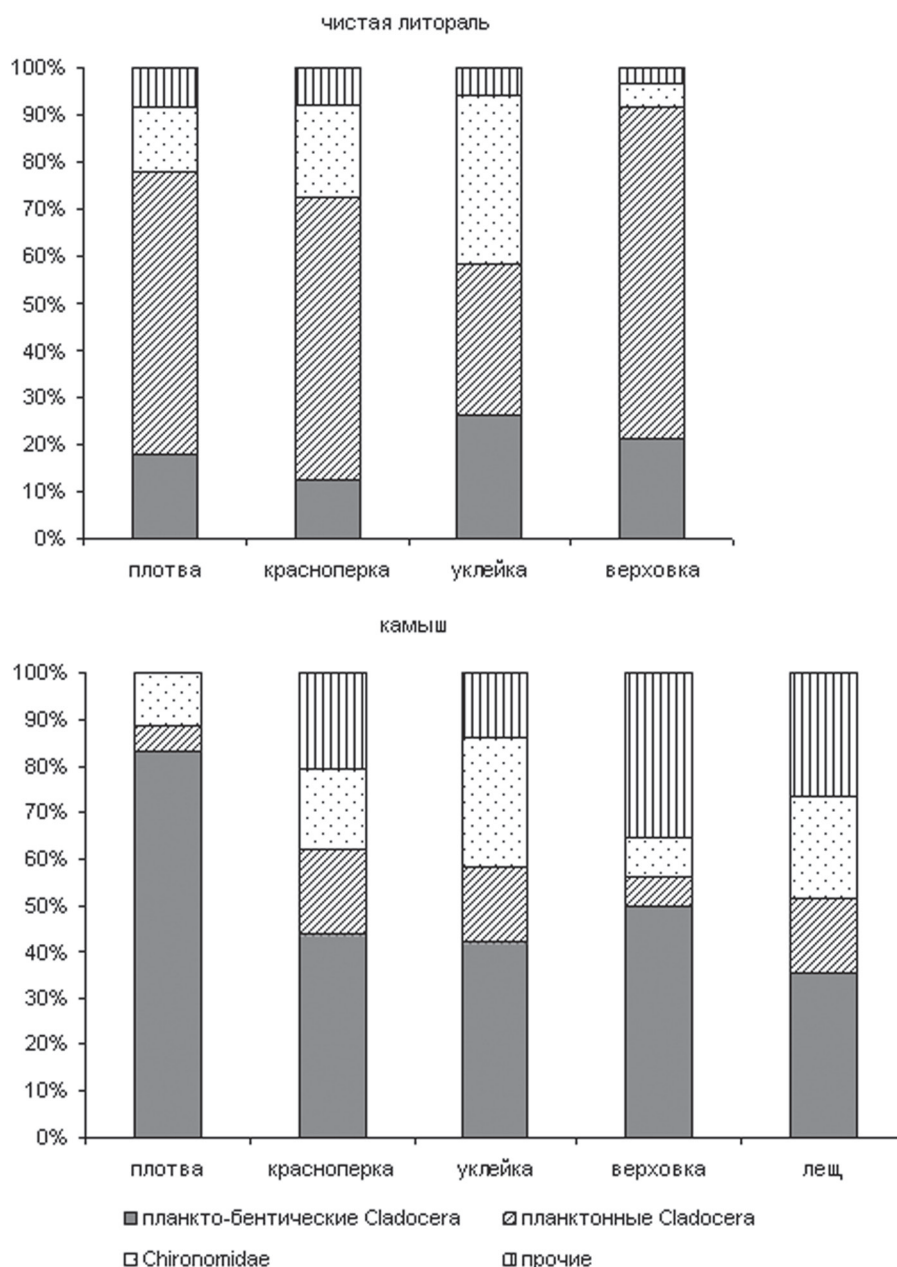
Таблица 3. Структурные показатели сообщества зоопланктона в литоральной зоне оз. Обстерно

Показатель	Биотоп	
	ЧЛ	камыш
Число видов, <i>n</i>	18,7 ± 2,50	28,3 ± 5,03
Доля <i>Copepoda</i> , %	0,84 ± 0,11	0,73 ± 0,07
<i>Cladocera</i> планктонные, %	0,16 ± 0,11	0,25 ± 0,07
<i>Cladocera</i> планктобентические, %	0,01 ± 0,002	0,02 ± 0,002

Примечания. ЧЛ – чистая литораль (литораль без зарослей макрофитов); камыш – литораль с зарослями камыша озерного.

Содержимое ЖКТ молоди рыб. Как показал анализ содержимого ЖКТ, практически вся молодь рыб в исследуемый период уже активно питается бентосными организмами. Процентное содержание хирономид в желудочно-кишечном тракте рыб было достаточно высоким, однако не превышало 22 %, за исключением уклейки, у которой содержание этого компонента составляло около 1/3 пищевого комка от численности потребленных объектов как в чистой литорали, так и в зарослях камыша (35,86 % и 27,94 % соответственно). В то же время молодь все еще активно питается зоопланктоном, максимальный процент по количеству потребленных зоопланктонных организмов составляет 88,77 % у плотвы в литорали с зарослями и верховки в чистой литорали (90 %) (рисунок). Как показал анализ содержимого ЖКТ, пищей для рыб служили в основном планкто-бентические и планктонные *Cladocera*. Причем наблюдаются существенные различия в потребленной пище в разных биотопах. В целом в литорали без зарослей макрофитов пищевые предпочтения рыб составляют планктонные *Cladocera* и представители *Chironomidae*, в то время как в зарослях камыша молодь рыб отдает предпочтение планкто-бентическим *Cladocera* и пище, отнесенной нами в раздел «прочие».

Оценка пищевой избирательности молоди рыб. Как показал анализ, избирательность потребления таких планктонных видов, как *B. crassicornis* и *C. pulchella*, а также крупной *L. kindti* и планкто-бентических *Harpacticoida sp.* увеличивается с увеличением размеров молоди рыб. Так, коэффициенты корреляции *r* (размер рыб – коэффициент селективности) для перечисленных выше видов соответственно равны 0,69, 0,71, 0,83 и 0,74 (*df* = 7, *p* < 0,05), т. е. более крупные мальки начинают потреблять более крупные пищевые объекты, такие как *Leptodora* и *Harpacticoida*, и более подвижные мелкие планктонные кладоцеры, как *Ceriodaphnia* и *Bosmina*. Однако установлено, что индекс селективности Ивлева наиболее высок и равен или близок к +1 практически для всех планкто-бентических видов кладоцер и не зависит от размеров их потребителей. Лимитирующим фактором, влияющим на отрицательную селективность или отсутствие избирательности для планкто-бентических видов, может быть только их низкая численность и, как следствие этого, низкая доступность для потребителей. Среди видов, которые спорадически обнаруживались в ЖКТ, такие виды, как *Alona costata*, *A. guttata*, *A. rectangula*, *Alonella exigua*, *A. nana*, *Chydorus gibbus*, *Ch. globosus*, *Eurycercus lamellatus*, *Graptoleberis testudinaria*, *Pleuroxus uncinatus*. Перечисленные виды регистрировались как редкие в зоопланктоне и поэтому демонстрировали или высокую (+1), или низкую (–1) избираемость. Спектр потребляемых планкто-бентических видов более широк в чистой литорали, чем в литорали с зарослями камыша. Количество обнаруженных в ЖКТ рыб планкто-бентических видов *Cladocera* в чистой литорали более чем в 2 раза выше, чем у рыб из зарослей камыша – 17 против 8 видов соответственно. Кроме того, в пищевом комке некоторых видов рыб из чистой литорали чаще и в большем количестве (однако спорадически) обнаруживаются планктонные виды кладоцер – *B. crassicornis*, *C. pulchella* и *D. brachyurum*, исключение составляет *B. longispina* (например, индекс селективности в чистой



Состав пищевого комка молоди рыб разных видов в литорали оз. Обстерно

литорали для нее равен 0,95). Следует также отметить, что *P. pediculus* выедается мальками во всех биотопах, средние значения индекса селективности (для всех видов молоди рыб) равен 0,92 и 0,88 в камыше и чистой литорали соответственно, что еще раз подтверждает гипотезу о потреблении рыбами наиболее заметной фракции зоопланктона. В то же время планктонные *Copepoda* и их ювенильные стадии, доминирующие в планктонном сообществе, практически не используются в пищу молодью рыб, коэффициент селективности (E) для данного компонента во всех местообитаниях отрицательный, часто до максимального значения (-1), т. е. при доминировании данных животных в планктоне (84 % и 73 %, табл. 3) практически наблюдается их избегание как пищевого компонента. Скорее всего это связано с большими энергетическими затратами на их добычу и/или с большей доступностью другого компонента – кладоцерной составляющей планктона (согласно теории *optimal foraging*, [2]), что может также свидетельствовать о достаточных запасах данного ресурса в изученный период времени. Исходя из наших данных, оба положения данной теории верны. В частности, наблюдается хорошая обеспеченность пищевыми

ресурсами данных местообитаний (высокая численность и высокая биомасса зоопланктона в литорали озера).

Многие виды рыб используют в пищу любые доступные ресурсы, эксплуатируя при этом большую площадь литорали, перемещаясь между биотопами, а поскольку ресурсы данного местообитания (или водоема в целом) ограничены, наблюдается перекрывание рационов у некоторых видов рыб. Мы рассчитывали индекс Чекановского–Сьеренсена (по количественному признаку содержания пищевых объектов *Cladocera* и *Copepoda* в ЖКТ), и установили, что у плотвы, красноперки и уклейки наблюдается перекрывание рационов во всех литоральных биотопах (значения индекса Ч–С превышают 0,5 в камыше и 0,62 в чистой литорали). Причем данные виды рыб демонстрируют сходство селективного поведения. Так, все три вышеперечисленных вида рыб игнорируют цериодафнию и представителей *Copepoda* в литорали с зарослями (среднее значение E для *C. pulchella* равно $-0,58$), предпочитая планкто-бентические виды кладоцер.

Ранее для этого же озера было показано [9], что при питании личинок рыб последние предпочитали неполовозрелые стадии *Copepoda*, значения индекса Ивлева (E), рассчитанное для науплиусов, равнялось $+0,17$ и было наибольшим, по сравнению с другими видами потребленных пищевых объектов. В состав пищевого комка входили также *Cladocera* – *B. longirostris* и *C. pulchella*, т. е. мелкие виды, достигающие массового развития в летнее время в озере. Многие исследования [10; 11] показывают, что структурная неоднородность местообитаний литоральной зоны озер может служить главным фактором, который влияет на межвидовые взаимодействия между хищниками и жертвами. Так, в литорали с полупогруженными или с погруженными водными макрофитами, зоопланктон находит защиту от хищников, подходящие условия для развития многих функциональных групп, а также «транзитную зону» для временного укрытия в разное время суток. В литорали подобных мелководных макрофитных озер в массе развиваются и нагуливаются личинки молоди рыб, в рационе которых зоопланктон составляет значительную часть. При изучении трофических взаимодействий в литорали [12] было показано, что наблюдается высокий процент перекрывания спектров питания у разных видов рыб. В наших исследованиях мы также не отметили каких-либо пищевых предпочтений у разных видов рыб к какому-то виду пищи (виду/видам зоопланктона). В литорали оз. Обстерно нами отмечен высокий коэффициент избирательности для некоторых планкто-бентических видов кладоцер (*Alona affinis*, *A. quadrangularis*, *Acroperus harpae*, *A. angustatus*, *Disparalona rostrata*, *Rhynchotalona falcata*, *Camptocercus rectirostris*, *Chydorus sphaericus*, *Peracantha truncata*, *Pleuroxus aduncus*), причем этот вид пищи предпочитается всеми мальками рыб во всех типах биотопов, что говорит о высоком перекрывании спектров питания мальков рыб. Так как планкто-бентические виды характеризуются невысокой численностью, можно констатировать селективное пищевое поведение мальков рыб к данному виду пищи. В противоположность этому, массовые виды зоопланктона, составляющие основу сообщества консументов I-го порядка, слабо подвержены прессу мальков рыб. Как было показано ранее в некоторых исследованиях, успех нагула хищника снижается с повышением сложности строения местообитания, и выживаемость жертв, как правило, выше в более сложноорганизованных биотопах, например, в зарослях макрофитов [3; 13]. Было установлено, что влияние хищников на биомассу зоопланктона, также как и на бентосное сообщество, незначительно как в открытых местообитаниях, так и в зарослях макрофитов [14], что подтверждают и наши исследования в отношении эупланктонных видов зоопланктонного сообщества. Между тем, наши данные показали, что избирательность пищевых компонентов для рыб обусловлена не только тем, какой вид доминирует в данный момент в планктоне, но и их подвижностью и заметностью в биотопе. Большинство мальков рыб, независимо от вида и типа питания взрослых стадий, питаются посредством активного схватывания пищи [15]. Преимущественное выедание рыбами наиболее заметных крупных зоопланктеров подтверждается как экспериментальными [16], так и полевыми исследованиями. Так, оценивая по содержимому желудков состав пищи рыб-планктофагов из оз. Белое (Вологодская обл., Россия), было обнаружено, что у снетка (*Osmerus eperlanus*) до 78 % массы пищевого комка приходится на крупного веслоногого рачка *Heterocope appendiculata*, хотя в планктоне этот вид был малочислен [17]. Как показали данные [7], по мере уменьшения скорости жертв их избираемость увеличивается, что вполне согласуется с результатами

нашего исследования, где мы установили, что прессу мальков рыб подвергаются наиболее заметные и медленно передвигающиеся виды, а именно – планкто-бентические виды *Cladocera*, имеющие в природе более темную, красноватую или желтовато-коричную окраску раковинки.

Закключение. Анализ данных по питанию молоди рыб возраста 0+ в литорали мелководного озера показал, что, несмотря на перекрывание спектров питания в пределах каждого из изученных участков литорали, наблюдаются существенные различия в соотношении разных групп животных в ЖКТ молоди рыб в разных биотопах. Так, в литорали без зарослей макрофитов потребляются в большей степени планктонные *Cladocera* и представители *Chironomidae*, в то время как в зарослях камыша молодь рыб отдает предпочтение планкто-бентическим видам *Cladocera*. Таким образом, в литорали молодь рыб избирательно выедает малоподвижных, более интенсивно окрашенных, и поэтому хорошо заметных кладоцер семейства *Chydoridae*, не оказывая при этом сильного пресса на сообщество эупланктонных видов и зоопланктонное сообщество литорали в целом. Однако наблюдаемая низкая численность и редкая встречаемость планкто-бентических кладоцер семейства *Chydoridae* может быть обусловлена сильным «пищевым» прессом на эту группу планктонных животных со стороны молоди рыб.

Литература

1. Mehner T., Padisak J., Kasprzak P. et al. // Limnologica. 2008. Vol. 38. P. 179–188.
2. Werner E. E., Hall D. J. // Ecology. 1974. Vol. 55, N 5. P. 1042–1052.
3. Gliwicz Z. M., Slon J., Szynkarczyk I. // Freshwater Biology 2006. Vol. 51. P. 823–839.
4. Gliwicz Z. M., Wrzosek D. // Amer. Natur. 2008. Vol. 172. P. 358–374.
5. Mills E. L., Forney J. L. // Transactions of the American Fisheries Society 1983. Vol. 112. P. 154–161.
6. Wu L., Culver D. A. // J. of Great Lakes Research. 1994. Vol. 20. P. 537–545.
7. Ивлев В. С. Экспериментальная экология питания рыб. М., 1955. – 251 с.
8. Семенченко В. П., Разлуцкий В. И., Бусева Ж. Ф., Палаш А. Л. Зоопланктон литоральной зоны озер разного типа. Минск, 2013. – 172 с.
9. Шевцова Т. М., Нехаева Т. И., Лях А. Н. Экология промысловых рыб Белоруссии. Минск, 1986. – 143 с.
10. Meerhoff M., Iglesias C., Teixeira De Mello F. et al. // Freshwat. Biol. 2007. Vol. 52. P. 1009–1021.
11. Burks R. L., Jeppesen E., Lodge D. M. // Limn. Oceanogr. 2001. Vol. 46, N 2. P. 230–237.
12. Okun N., Mehner T. // Ecol. of Freshwater Fish. 2005a. Vol. 14. P. 139–149.
13. Winfield I. J. // J. of Fish Biol. 1986. Vol. 29. P. 37–48.
14. Okun N., Mehner T. // Ecol. of Freshwater Fish. 2005. Vol. 14. P. 150–160.
15. Гуляров А. М. // Вопр. ихтиол. 1987. Т. 27, № 3. С. 446–457.
16. Wetterer J. K. // Anim. Behav. 1989. Vol. 37. P. 955–967.
17. Пухтова Т. С. Основы изучения пресноводных экосистем. Л., 1981. – 171 с.

Zh. F. BUSEVA, M. V. PLJUTA

buseva_J@mail.ru, micle58@mail.ru

FEEDING OF YOY FISH IN THE LITTORAL ZONE OF A SHALLOW LAKE

Summary

We have studied the foraging activity and stomach contents of YOY fish in 2 different habitat types: in the bare littoral zone with a sandy or slightly silty bottom and in the littoral zone with reed stands (*Schoenoplectus lacustris*) of meso-eutrophic Lake Obsterno (north-west of Belarus). The gut content in 5 species of YOY fish (bleak, bream, roach, rudd and sunbleak) during the first decade of July was analyzed and the food selectivity was estimated by Ivlev Selectivity Index. It has been shown that the high food selectivity pointed out for tichoplanktonic species of *Cladocera* (*Chydoridae* family) in contrast with euplanktonic species. The overlap trophic niches for 3 studied species (YOY's bleak, roach and rudd) were well-defined in the bare littoral zone to compare with the littoral zone with reed stands. We also speculate that the rarity and low density in some *Chydoridae* family species may be coupled with high YOY pressure.

УДК 577.161.4:615.2.356

В. В. ВИНОГРАДОВ, И. И. СТЕПУРО, С. А. ЛАБОР, С. В. ВИНОГРАДОВ,
А. В. ТУМАНОВ

**МЕХАНИЗМЫ НЕКОФЕРМЕНТНОГО ДЕЙСТВИЯ КОМПОНЕНТОВ
НЕЙРОВАЗОТРОПИНА ПРИ ОКСИДАТИВНОМ СТРЕССЕ И РАЗРАБОТКА
АНТИСТРЕССОРНЫХ ТИАМИНСОДЕРЖАЩИХ ПРЕПАРАТОВ**

(Представлено академиком С. А. Усановым)

Институт биохимии биологически активных соединений НАН Беларуси, Гродно

Поступило 06.04.2015

Введение. Поливитаминный комплекс «антистрессин В» (включающий максимальные фармакопейные дозы витаминов V_1 , V_6 и V_{12}), способный за счет нивелирования стероидообусловленной иммуносупрессии (путем активации тиамином синтеза инсулина, уравнивающего супрессивные эффекты кортикостероидов, блокирования пиридоксином рецепции стероидных гормонов, усиления цианкобаламином катаболизма стероидов) и повышения эффективности иммуномодулирующей терапии в 2–3 раза снизить уровень летальности больных в условиях проведения интенсивного комплексного лечения сепсиса, для внутривенного применения более 25 лет назад был разработан на базе теории некоферментного действия витаминов [1–3] в лаборатории биохимии эндокринных желез Института биохимии НАН Беларуси. Начиная с 1994 года витамин $V_1+V_6+V_{12}$ в комбинации с иммуностимулирующей терапией в клинике Гродненского медицинского университета стали базисным лечением септических больных. Данный подход позволил снизить летальность в группе больных, подвергавшихся гемосорбции, с 37,4 % до 13,3 % и с 25 % до 8,3 % в группе больных, получавших ронколейкин [4].

В принципе, «антистрессин В» можно использовать и в диабетологии в лечебных целях, однако учитывая специфический оксидантный характер диабетических повреждений, требуется его корректировка по составу витаминных ингредиентов с учетом как системного (гормонально опосредованного), так и внутриклеточного антиоксидантного механизмов их действия. В связи с этим представлялось необходимым обозначить новое лекарственное средство как нейроразотропин и включить в его состав вместо витамина V_{12} широко используемую в диабетологии липоевую кислоту, обладающую мощным антиоксидантным потенциалом [5].

Материалы и методы исследования. В экспериментах *in vitro*, которые проводили в присутствии пероксида водорода, использовали миоглобин из сердца лошади, а также парацетамол (фирма Sigma – Aldrich) и тирозин (фирма Sigma). Все другие реагенты высокой очистки производства России и Беларуси. Количество метмиоглобина в растворе определяли, используя молярный коэффициент поглощения ($M^{-1}cm^{-1}$): $\epsilon_{630} = 3700$ [6]. Оксоферрильные формы миоглобина получали, добавляя 100–1000-кратные молярные избытки пероксида водорода к водному раствору метмиоглобина. Полоса Соре миоглобина с максимумом при 407 нм после добавления пероксида водорода смещалась до 418 нм. Концентрацию пероксида водорода определяли спектрофотометрически, используя молярные коэффициенты поглощения при 240 нм ($\epsilon_{240} = 39,4 M^{-1}cm^{-1}$) [7]. Образование димера парацетамола и тирозина контролировали спектрофотометрически. Расчет концентраций дитирозина или парацетамола проводили путем вычитания поглощения соединений пиридоксаль-5-фосфат, присутствующих в растворе, по формуле

$$\Sigma(\text{общее поглощение}) - \Sigma(\text{сумма поглощений всех соединений пиридоксаль-5-фосфат}) = \text{поглощение димеров тирозина или парацетамола.}$$

Используя молярный коэффициент поглощения $\epsilon_{320} = 5000 \text{ M}^{-1}\text{см}^{-1}$ определяли концентрацию димеров [8].

Результаты и их обсуждение. Димеры парацетамола, являющиеся важными маркерами окислительного стресса [9], позволяют проводить оценку антиоксидантной активности липоевой кислоты по степени ингибирования синтеза димеров, концентрация которых свидетельствует об уровне образования свободных радикалов в системе *in vitro*.

Из данных таблицы видно, что при инкубации миоглобина в присутствии гидропероксида липоевая кислота эффективно ингибирует образование димеров ($13,9 \cdot 10^{-5} \text{ M}$ против $19,5 \cdot 10^{-5} \text{ M}$) и, следовательно, проявляет антиоксидантное действие, инактивируя свободные радикалы парацетамола. Компоненты нейровазотропина: пиридоксальфосфат в меньшей степени ($5,78 \cdot 10^{-5} \text{ M}$), а тиамин в большей ($3,3 \cdot 10^{-5} \text{ M}$) потенцируют антиоксидантную активность липоевой кислоты, что фактически обосновывает необходимость их совместного применения.

Ингибирование образования димеров парацетамола (ПА) и разрушения гема миоглобина (Mb) компонентами нейровазотропина (Лк – липоевая кислота, Т – тиамин, пиридоксаль-5-фосфат)

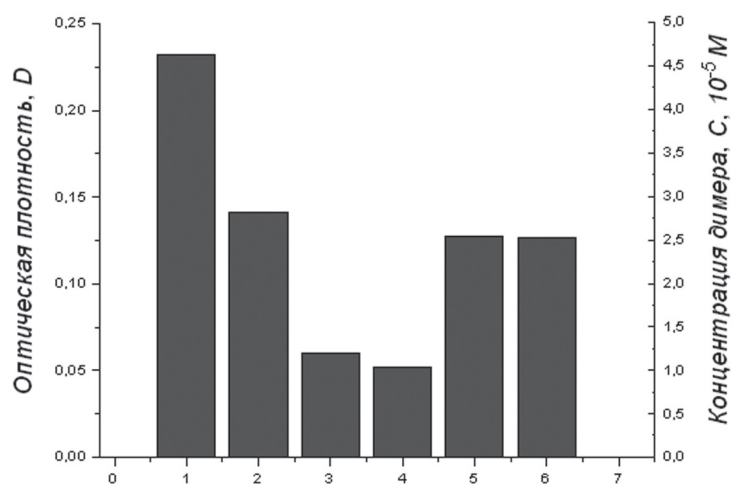
Группа	Значение $\Delta D_{320}^{\text{нм}}$	Концентрация димера	Значение $\Delta D_{415}^{\text{нм}}$	Концентрация разрушенного гема
Mb (10 мкМ) + ПА (1 мМ) + H ₂ O ₂ (1 мМ)	0,977	$19,5 \cdot 10^{-5}$	0,213	$13,0 \cdot 10^{-7}$
Mb (10 мкМ) + ПА (1 мМ) + Лк (0,5 мМ) + H ₂ O ₂ (1 мМ)	0,699	$13,9 \cdot 10^{-5}$	0,155	$9,57 \cdot 10^{-7}$
Mb (10 мкМ) + ПА (1 мМ) + Т (1 мМ) + H ₂ O ₂ (1 мМ)	0,638	$12,8 \cdot 10^{-5}$	0,078	$4,8 \cdot 10^{-7}$
Mb (10 мкМ) + Т (1 мМ) + ПА (1 мМ) + Лк (0,5 мМ) + H ₂ O ₂ (1 мМ)	0,165	$3,30 \cdot 10^{-5}$	0,106	$6,5 \cdot 10^{-7}$
Mb (10 мкМ) + пиридоксаль-5-фосфат (0,5 мМ) + ПА (1 мМ) + H ₂ O ₂ (1 мМ).	0,623	$12,5 \cdot 10^{-5}$	0,081	$5 \cdot 10^{-7}$
Mb (10 мкМ) + пиридоксаль-5-фосфат (0,5 мМ) + ПА (1 мМ) + Лк (0,5 мМ) + H ₂ O ₂ (1 мМ).	0,289	$5,78 \cdot 10^{-5}$	0,116	$7,16 \cdot 10^{-7}$

Антиоксидантный потенциал липоевой кислоты, тиамина и пиридоксальфосфата подтверждают данные о снижении разрушения гема миоглобина свободными радикалами парацетамола в системе *in vitro*, что является прямым следствием альтерирующего действия окислительного стресса. По степени антистрессорной эффективности ингредиенты нейровазотропина составляют следующий ряд: тиамин ($4,8 \cdot 10^{-7} \text{ M}$) – пиридоксальфосфат ($5,0 \cdot 10^{-7} \text{ M}$) – липоевая кислота ($9,57 \cdot 10^{-7} \text{ M}$). В контроле концентрация разрушенного гема составляла $13,0 \cdot 10^{-7} \text{ M}$. Следовательно, именно липоевая кислота усиливает антиоксидантное действие витаминов В₁ и В₆, а не наоборот. Этот вывод подтверждают данные по димерам тирозина, биосинтез которых наряду с образованием димеров парацетамола служит равноправным маркером окислительного стресса.

Важным патогенетическим фактором диабетического повреждения тканей является неэнзиматическое гликозилирование белков, в процессе которого происходит генерация активных форм кислорода и образование тирозильных радикалов. Была изучена эффективность инактивирования свободных радикалов тирозина субстанциями создаваемого поливитаминного комплекса. Критерием инактивации служила степень ингибирования синтеза димеров, концентрация которых прямо пропорциональна содержанию свободных радикалов в системе *in vitro* [10].

На рисунке видно, что тиамин по эффективности ингибирующего действия на тирозильные радикалы (3 столбик) является гораздо более сильным антиоксидантом, чем липоевая кислота (2 столбик), но ее добавка позволяет достичь максимального защитного эффекта (4 столбик).

Антиоксидантный потенциал тиамина повышает не только липоевая кислота, но и сам тирозин (3 столбик) за счет окислительного превращения молекулы витамина в более реакционно-



Образование димеров тирозина в пероксидазных реакциях катализируемых метмиоглобином: 1 – Mb (10 мкМ) + Туг (1 мМ) + H₂O₂ (1 мМ); 2 – Mb (10 мкМ) + Туг (1 мМ) + Лк (0,5 мМ) + H₂O₂ (1 мМ); 3 – Mb (10 мкМ) + Туг (1 мМ) + Т (1 мМ) + H₂O₂ (1 мМ); 4 – Mb (10 мкМ) + Туг (1 мМ) + Лк (0,5 мМ) + Т (1 мМ) + H₂O₂ (1 мМ); 5 – Mb (10 мкМ) + пиридоксаль-5-фосфат (0,5 мМ) + Туг (1 мМ) + H₂O₂ (1 мМ); 6 – Mb (10 мкМ) + пиридоксаль-5-фосфат (0,5 мМ) + Туг (1 мМ) + Лк (0,5 мМ) + H₂O₂ (1 мМ)

способные окисленные метаболиты (тиохром, оксидигидротиохром, тиаминдисульфид, а также тиольные и трициклические продукты), обезвреживающие свободные радикалы.

Кстати, 4 столбик представляет собой макет нового, возможно, еще более сильного, чем «нейровазотропин» антиоксиданта «гомеостазина», содержащего тиамин, липоевую кислоту и тирозин вместо пиридоксаля, поскольку пиридоксаль-5-фосфат в сочетании с тирозином и липоевой кислотой (5 и 6 столбики) был менее эффективен, чем тиамин (3 и 4 столбики).

На интенсивность свободнорадикальных процессов, как известно, в значительной мере влияет содержание ионов Fe²⁺. Увеличение внутриклеточной концентрации Fe²⁺ происходит при окислительном стрессе за счет высвобождения извне- и внутриклеточных депо, разрушения Fe-S-кластеров аконитазы супероксидным радикалом, а также распада других Fe²⁺-содержащих белков и восстановления Fe³⁺ в составе ферритина [9]. Антиоксидантные свойства липоевой кислоты объясняются ее способностью переводить Fe²⁺ в Fe³⁺, а также хелатировать двухвалентные катионы (Fe²⁺, Cu²⁺, Cd²⁺) и выводить их из организма. Хелатирование ионов металлов липоевой кислотой ведет к снижению интенсивности протекания реакции Фентона. Аналогичный эффект вызывает и тиамин, замыкая на себя высокоактивные гидроксильные радикалы.

Механизм окисления тиамин в реакции Фентона может быть следующим [10]: разрыв связи НО–ОН под действием иона железа Fe²⁺ приводит к образованию радикалов •ОН и анионов гидроксила ОН⁻. Затем ОН-радикал взаимодействует с молекулой тиамин, со вторым углеродом тиазолового компонента, давая радикал тиамин. Взаимодействие радикала тиамин со вторым гидроксил-радикалом приводит к образованию продукта гидроксирования тиамин Т-ОН. Гидроксил внедряется в тиазоловый компонент и затем взаимодействует с аминогруппой пиримидинового компонента с образованием циклического продукта. Однако данная реакция эффективно протекает в кислой среде, когда протонирован 1-азот пиримидина. Нейтральная форма тиамин после образования свободного радикала тиамин, централизованного на втором углероде тиазола, трансформируется в свободно радикальную трициклическую форму тиамин. Второй гидроксил радикал или супероксид-анион окисляют свободно радикальную форму тиамин в тиохром.

Об участии гидроксильных радикалов в окислении тиамин в тиохром свидетельствуют данные об ингибировании окисления тиамин алифатическими спиртами. После добавления в раствор, содержащий тиамин, ионы железа Fe²⁺ и пероксид водорода высоких концентраций этанола наблюдали практически полное ингибирование образования тиохрома [11] за счет высокой скорости взаимодействия гидроксильных радикалов с этанолом ($k = 7,2 \cdot 10^8 \text{ M}^{-1}\text{s}^{-1}$).

На фоне липоевой кислоты при окислительном стрессе тиамин также уменьшает выход тиохрома. Однако антиоксидантное действие тиамина проявляется и в этих условиях, что отражает резкое снижение синтеза димеров парацетамол и дитиозина по сравнению с инкубационной средой, содержащей одну липоевую кислоту (таблица, рисунок). Из таблицы и рисунка видно, что аналогичным (но менее выраженным) действием в принятых условиях обладает и пиридоксальфосфат. Известно, что пиридоксаль и пиридоксальфосфат образуют с первичными аминогруппами белков основания Шиффа, которые являются сильными хелаторами ионов металла. Образование хелатов металлов, в том числе хелатов ионов железа сильно ингибирует протекание реакций гидроксилирования, инициированных реагентом Фентона [6].

Исходя из вышеизложенного можно полагать, что усиленный субстанцией антидиабетического действия (где тиоктовая кислота заменила витамин B_{12}) разработанный нами ранее антистрессорный витаминный комплекс («антистрессин В»), теперь обозначенный как «нейровазотропин», будет эффективным средством профилактики диабетических ангио- и полинейропатий. Предполагается, что нейровазотропин будет более эффективным в профилактике и коррекции стрессобусловленных осложнений сахарного диабета, чем зарубежные аналоги, что позволит в этой части решить проблему импортозамещения.

Заключение. Арсенал средств некоферментной витаминологии, которая не нуждается в гипотезе коферментного механизма действия вводимых витаминов, пополнила линейка новых антистрессорных тиаминсодержащих препаратов. Замена цианкобаламина в составе успешно апробированного в клинической сепсисологии иммуностропного антистрессина В ($B_1+B_6+B_{12}$) на липоевую кислоту привела к созданию нейровазотропина – противодиабетического лекарственного средства с усиленным антиоксидантным потенциалом. При инкубации миоглобина в присутствии гидропероксида компоненты нейровазотропина (тиамин, липоевая кислота и в меньшей степени пиридоксальфосфат) ингибируют образование димеров парацетамол и тирозина – маркеров оксидативного стресса, свидетельствующих об уровне образования свободных радикалов в системе *in vitro*. Дальнейшая модификация нейровазотропина за счет включения в его состав тирозина (или замены пиридоксинального ингредиента на тирозин) приведет к созданию нового лекарственного средства «гомеостазин» с возможно еще более выраженными антиоксидантными свойствами, что необходимо для коррекции различной патологии, сопряженной с окислительным стрессом (инфаркт миокарда, инсульт головного мозга и др.).

Создание антистрессина В, а затем – нейровазотропина и последующая разработка гомеостазина, способных нивелировать повреждающее действие системного (гормонального) и клеточных видов стресса (оксидативного, нитрозильного, карбонильного), является существенным вкладом в дальнейшее развитие некоферментной витаминологии как отдельной научно-практической дисциплины в медицине.

Литература

1. Виноградов В. В. Гормональные механизмы метаболического действия тиамина. Минск, 1984.
2. Vinogradov V., Vodoyevich V., Rozcho A. Concept of the noncoenzymatic thiamine effects // Medical Hypotheses. 1997. Vol. 49. P. 487–495.
3. Виноградов В. В. Некоферментная витаминология. Гродно, 2000.
4. Виноградов В. В. Стресс и патология. Минск, 2007.
5. Виноградов В. В., Степура И. И., Надольник Л. И. и др. // Новости медико-биологических наук. 2013. Т. 7, № 2. С. 151–158.
6. Antonini E., Brunori M. Hemoglobin and myoglobin in their reactions with ligands. North-Holland, Amsterdam, 1971.
7. Fenwick C. W., English A. M., Wishart J. F. // J. Am. Chem. Soc. 1977. Vol. 119. P. 4758–4764.
8. Ostdal H., Daneshvar B., Skibsted L. H. // Free Radic. Res. 1996. Vol. 24. P. 429–438.
9. Степура И. И., Степура В. И. Окисленные производные тиамина. Механизмы образования под действием активных форм азота, кислорода и в реакциях, катализируемых гемопротеинами. LAP LAMBERT Academic Publishing. Saarbruchen, Deutschland, 2014.
10. Степура А. И., Адамчук Р. И., Опарин А. Ю., Степура И. И. // Биохимия. 2008. Т. 73, № 9. С. 1281–1293.
11. Aechbach R., Amado R., Neukom H. // Biochem. Biophys. Acta. 1976. Vol. 430. P. 292–301.

**MECHANISMS OF NONCOEZYME ACTION OF NEUROVASOTROPIN
COMPONENTS DURING OXIDATIVE STRESS AND DEVELOPMENT OF ANTI-STRESS
THIAMINE-CONTAINING DRUGS**

Summary

The substitution of cyanocobalamine for lipoic acid in the composition of immunotropic anti-stressin B ($B_1+B_6+B_{12}$), which was successfully tested in clinical sepsiology, resulted in the development of neurovasotropin, an antidiabetic drug with enhanced antioxidant capacity. During incubation of myoglobin in the presence of hydroperoxide, components of neurovasotropin (thiamine, lipoic acid, and to a lesser extent pyridoxal phosphate) inhibited the production of dimers of paracetamol and tyrosine, markers of oxidative stress indicating the level of free radical formation in the system *in vitro*. Further modification of neurovasotropin due to its incorporation in tyrosine (or substitution of the pyridoxine constituents for tyrosine) will result in the development of a new drug "homestasin" with probably more pronounced antioxidant properties, which is necessary for correction of different pathologies related to oxidative stress (myocardial infarction, cerebral stroke, etc).

УДК 577.3'32/.36

Г. Г. МАТИНОВИЧ¹, И. В. МАТИНОВИЧ¹, Е. Б. МЕНЬЩИКОВА²,
Н. К. ЗЕНКОВ², академик С. Н. ЧЕРЕНКЕВИЧ¹

РЕДОКС-СВОЙСТВА ОПУХОЛЕВЫХ КЛЕТОК И ИХ ПРОЛИФЕРАТИВНАЯ АКТИВНОСТЬ ПРИ ДЕЙСТВИИ ФЕНОЛЬНЫХ АНТИОКСИДАНТОВ

¹Белорусский государственный университет, Минск

²НИИ экспериментальной и клинической медицины СО РАМН, Новосибирск, Россия

Поступило 06.04.2015

Введение. Важная роль редокс-процессов для поддержания жизнедеятельности клеток и необходимость изучения данных процессов для понимания патогенеза и коррекции многих функциональных нарушений, реализуемых при окислительном стрессе, обуславливает актуальность их изучения на протяжении многих лет [1; 2]. Показано, что эндогенные (пероксид водорода, глутатион, аскорбиновая кислота и др.) и экзогенные (антиоксиданты, прооксиданты и др.) редокс-активные соединения участвуют в регуляции широкого спектра биохимических и физиологических процессов, включая регенеративные и адаптационные процессы, иммунный ответ, дифференцировку стволовых клеток, пролиферацию и апоптоз [3; 4]. С другой стороны, увеличение концентрации окислителей при нарушении редокс-гомеостаза играет важную роль в процессах старения организма и развитии различных заболеваний, включая онкологические [1]. Поэтому фармакологические препараты, способные регулировать клеточные редокс-процессы, используются в сердечно-сосудистой, противоопухолевой и противовирусной терапии [5]. Несмотря на обилие литературных данных, посвященных изучению действия редокс-активных соединений в биологических системах, вопрос о механизмах регуляции редокс-гомеостаза остается открытым, что является существенным препятствием для разработки новых лекарственных препаратов антиоксидантного и прооксидантного действия. На необходимость поиска и изучения механизмов регуляции редокс-гомеостаза указывает и тот факт, что природные и синтетические антиоксиданты, использование которых ориентировано на ингибирование известных окислительных процессов, часто не обладают ожидаемой клинической эффективностью при лечении и профилактике заболеваний, в патогенезе которых важную роль играют окислители.

Внутриклеточные электрон-транспортные процессы, протекающие с участием редокс-активных соединений, рассматриваются как один из способов передачи информации в клетках [3; 4]. В отличие от вторичных мессенджеров, участвующих во внутриклеточной передаче информационных сигналов, редокс-активные соединения функционируют как мессенджеры, переносящие электроны, или редокс-мессенджеры [4; 6]. Поскольку направленность переноса электронов обусловлена физико-химическими характеристиками участников редокс-процессов, трансдукция сигнала с участием редокс-мессенджеров может модулироваться изменением величин различных физико-химических параметров, включая параметры редокс-гомеостаза. Количественными характеристиками редокс-гомеостаза, обусловленного сопряженным функционированием транспортных белков, оксидоредуктаз и низкомолекулярных редокс-активных соединений, являются введенные нами параметры – эффективный редокс-потенциал ($E^{\text{эфф}}$) [7] и редокс-буферная емкость (r) [8]. Однако роль величин физико-химических параметров редокс-гомеостаза в реализации определенного отклика опухолевых клеток на действие редокс-активных соединений экспериментально не обоснована.

Ранее нами было обнаружено, что водорастворимый фенольный антиоксидант 3-(3'-трет-бутил-4'-гидроксифенил)-пропилтиосульфат натрия (ТС-13), индуктор сигнальной системы

Kear1/Nrf2/ARE, вызывает гибель опухолевых клеток через митохондриально-опосредованный путь [9]. В настоящем исследовании изучено действие водорастворимых фенольных антиоксидантов ТС-13 и 3,5-диметил-4-гидроксibenзилтиоэтаной кислоты калия (БЭК-11-К) на редокс-свойства опухолевых клеток, количественно характеризуемые $E^{\text{эфф}}$ и r , а также изучена роль внутриклеточного редокс-состояния в опосредовании эффектов указанных антиоксидантов на пролиферативную активность опухолевых клеток.

Материалы и методы исследования. Водорастворимые фенольные антиоксиданты ТС-13 и БЭК-11-К (рис. 1), любезно предоставленные проф. Н. В. Кандалинцевой, синтезированы в НИИ химии антиоксидантов (Новосибирск, Россия) как описано ранее [10]. В работе использовали клетки карциномы гортани человека линии НЕР-2, которые культивировали в среде МЕМ (Sigma-Aldrich, США) с добавлением 8–10 % эмбриональной бычьей сыворотки и гентамицина (0,08 мг/мл) при температуре 37 °С в атмосфере 5 % CO₂. При определении влияния препаратов на пролиферативную активность опухолевых клеток исследуемое соединение добавляли в чашки Петри через 24 ч после пересева клеток. Подсчет клеток проводили на 4-е сутки культивирования. Для получения суспензии клетки снимали раствором трипсин–версен в соотношении 1 : 1 на 6–7-е сутки.

Оценку внутриклеточной продукции активных форм кислорода (АФК) проводили на основе анализа скорости окисления флуоресцентного зонда 2',7'-дихлордигидрофлуоресцеина (H₂DCF) эндогенными окислителями [11]. Значения параметров внутриклеточного редокс-состояния клеток определяли путем редокс-титрования на основе анализа скорости окисления H₂DCF вводимым в систему пероксидом водорода [8; 12]. Параметры $E^{\text{эфф}}$ и r характеризуют стационарное редокс-состояние в клетках. Добавление окислителя ($c_{\text{ок}}$) к клеткам вызывает переход из одного стационарного состояния в другое. Новое стационарное состояние характеризуется величиной $E^{\text{эфф}} = E_0^{\text{эфф}} + \Delta E^{\text{эфф}}$. Зависимость $\Delta E^{\text{эфф}}$ от концентрации введенного в систему окислителя в двойных обратных координатах описывается уравнением прямой с наклоном $r = k_{\text{ем}} / \Delta E_{\text{max}}^{\text{эфф}}$ и пересечениями: по оси ординат в точке $1 / \Delta E_{\text{max}}^{\text{эфф}}$ и по оси абсцисс в точке $-1 / k_{\text{ем}}$ [12]:

$$\frac{1}{\Delta E^{\text{эфф}}} = \frac{1}{\Delta E_{\text{max}}^{\text{эфф}}} + \frac{k_{\text{ем}}}{\Delta E_{\text{max}}^{\text{эфф}}} \frac{1}{c_{\text{ок}}},$$

где

$$k_{\text{ем}} = \frac{\sum_{i=1}^n c_i z_i}{z_{\text{ок}}};$$

$\Delta E_{\text{max}}^{\text{эфф}} = E_{\text{ок}}^{0'} - E_0^{\text{эфф}}$ – максимальное изменение величины эффективного редокс-потенциала, возможное при условии $c_{\text{ок}} \gg c_{\text{вос}}$; $z_{\text{ок}}$ – число электронов, которые присоединяет молекула окислителя, переходя в восстановленную форму; c_i – концентрация i -го редокс-активного соединения

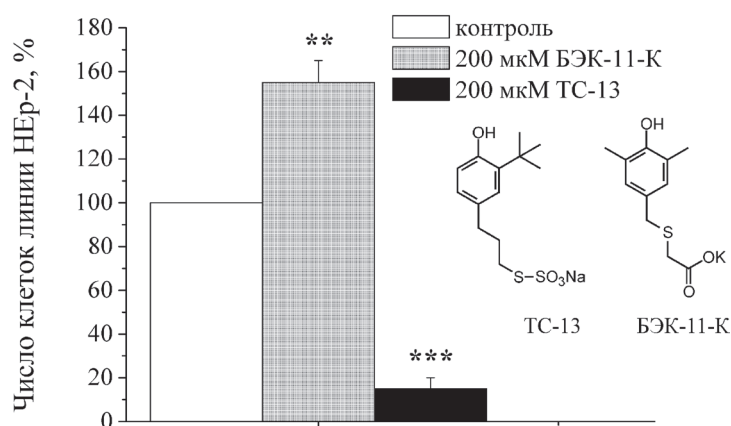


Рис. 1. Изменение числа клеток линии НЕР-2 при культивировании с антиоксидантами ТС-13 и БЭК-11-К. ** – $p < 0,01$; *** – $p < 0,001$ по сравнению с контролем

в биологической жидкости; z_i – число электронов, которые присоединяет молекула окисленной формы вещества, переходя в восстановленную форму; n – число различных типов редокс-пар, участвующих в формировании редокс-состояния; $E_{ок}^{0'}$ – редокс-потенциал окислителя при pH 7,0. Константа $k_{ем}$ имеет размерность концентрации и численно равна концентрации окислителя, при которой изменение величины эффективного редокс-потенциала составляет половину своего максимального значения.

В основе метода использована экспериментально и теоретически обоснованная зависимость между величиной индуцированного увеличением концентрации окислителей изменения $E^{эфф}$ и скоростью окисления H_2DCF ($V_{ф}$) [12]

$$V_{ф} = k_0 \Delta E^{эфф}. \quad (1)$$

Согласно (1), скорость изменения интенсивности флуоресценции DCF пропорциональна величине изменения эффективного редокс-потенциала, поэтому r и $E^{эфф}$ определяются при анализе построенной на основании экспериментальных исследований зависимости $V_{ф}$ от $c_{ок}$.

Измерения проводили при температуре 37 °C в сбалансированном буферном солевом растворе (СБСР) следующего состава: NaCl – 131 мМ, KCl – 5 мМ, CaCl₂ – 1,3 мМ, MgSO₄ – 1,3 мМ, KH₂PO₄ – 0,4 мМ, Hepes – 20 мМ, глюкоза – 6 мМ, pH 7,4. Загрузку клеток диацетатом H_2DCF (H_2DCF -DA, Sigma-Aldrich) проводили при температуре 37 °C в СБСР, инкубируя с 10 мкМ зонда в течение 45 мин. Интенсивность флуоресценции DCF, образующегося при окислении H_2DCF , измеряли с использованием спектрофлуориметра CM 2203 научно-производственного центра «СОЛАР» (Минск, Беларусь). Длина волны возбуждения составляла 488 нм, длина волны испускания – 530 нм. Результаты представлены как средние значения плюс-минус стандартное отклонение среднего для 3–5 независимых экспериментов. Достоверность значений определяли с помощью t -критерия Стьюдента, принимая различия достоверными при уровне значимости $p < 0,05$.

Результаты и их обсуждение. Установлено, что при внесении в культуру клеток карциномы гортани человека линии НЕР-2 антиоксидант БЭК-11-К стимулирует их рост, тогда как ТС-13, напротив, снижает. На рис. 1 показано изменение числа опухолевых клеток при культивировании с антиоксидантами ТС-13 и БЭК-11-К. Внесение БЭК-11-К в концентрации 200 мкМ вызывало увеличение числа клеток в культуре на 55 ± 10 % в сравнении с контролем. Число выживших клеток при их культивировании с ТС-13 в той же концентрации составляло 15 ± 5 %. При этом начальный отклик внутриклеточных редокс-систем на введение данных антиоксидантов различается. На рис. 2 представлены зависимости скорости изменения интенсивности флуоресценции DCF при внесении в суспензию клеток ТС-13 и БЭК-11-К в концентрациях 200 мкМ. При добавлении антиоксиданта ТС-13 скорость изменения интенсивности флуоресценции DCF сначала увеличивается, а затем снижается. При добавлении БЭК-11-К – сразу снижается.

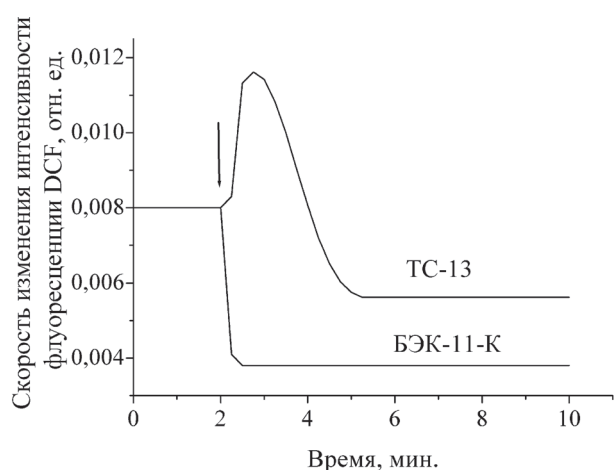


Рис. 2. Влияние антиоксидантов на продукцию АФК в клетках линии НЕР-2. Концентрация антиоксидантов в суспензии клеток – 200 мкМ

Таким образом, при действии антиоксиданта ТС-13 наблюдается кратковременное повышение внутриклеточной продукции АФК в опухолевых клетках.

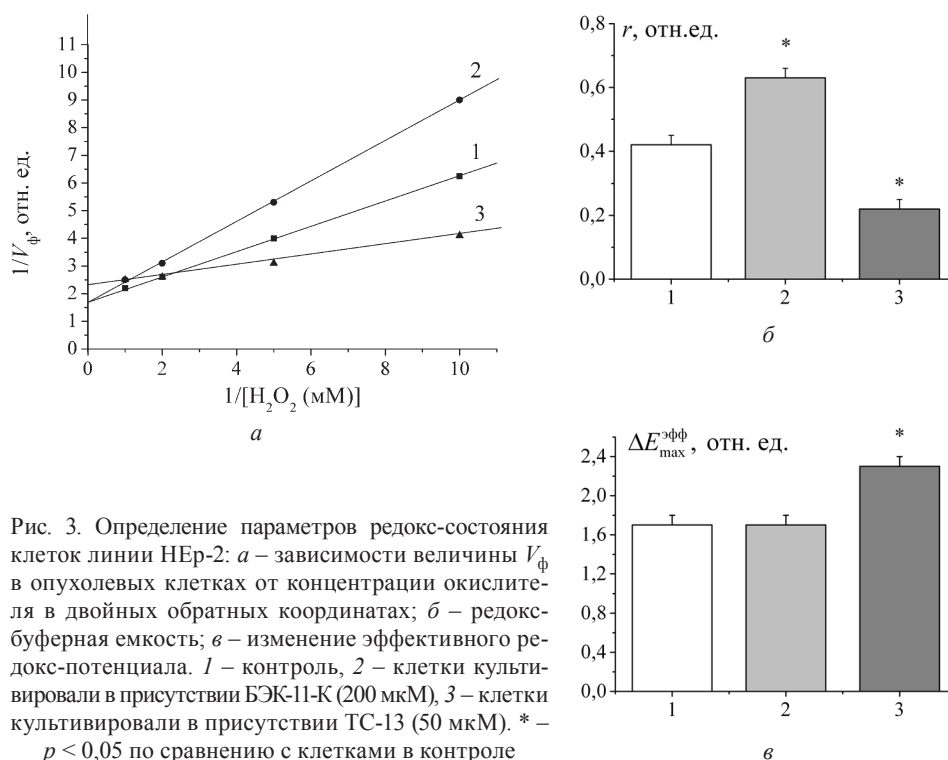
Ранее нами было показано, что ингибитор открытия пор высокой проводимости циклоспорин А полностью блокирует токсическое действие агента [9]. По-видимому, ТС-13 в результате прямого или опосредованного АФК окисления сульфгидрильных групп аденин-нуклеотидного транспортера индуцирует открытие пор высокой проводимости и запуск программы митохондриально-опосредованного

апоптоза. Открытие пор высокой проводимости, в свою очередь, приводит к уменьшению продукции АФК митохондриями, что вызывает снижение скорости окисления H_2DCF .

При длительном инкубировании клеток с фенольными антиоксидантами снижение внутриклеточной продукции АФК опухолевыми клетками наблюдается при действии обоих соединений. В свою очередь, изменение величин параметров редокс-гомеостаза при культивировании клеток с указанными антиоксидантами существенно различается. На рис. 3, *а* показаны зависимости величины флуоресцентного индекса V_{ϕ} от концентрации окислителя в двойных обратных координатах для опухолевых клеток в контроле и при их культивировании с антиоксидантами БЭК-11-К и ТС-13. Определенные с использованием экспериментальных данных величины редокс-буферной емкости и изменения эффективного редокс-потенциала представлены на рис. 3, *б* и рис. 3, *в*.

Редокс-буферная емкость клеток при культивировании с БЭК-11-К в концентрации 200 мкМ увеличивается на $51 \pm 9 \%$, а при культивировании клеток с ТС-13 в концентрации 50 мкМ – уменьшается на $49 \pm 9 \%$. В свою очередь, величина эффективного редокс-потенциала не изменяется при культивировании клеток линии НЕР-2 с антиоксидантом БЭК-11-К, а при культивировании с ТС-13 – повышается. Таким образом, в клетках линии НЕР-2 при культивировании с ТС-13 в сравнении с клетками в контрольной культуре наблюдается усиление внутриклеточных окислительных процессов, что приводит к уменьшению величины редокс-буферной емкости и повышению значения эффективного редокс-потенциала. Поскольку концентрация добавляемых антиоксидантов значительно ниже, чем эндогенных антиоксидантов, то наблюдаемые изменения редокс-свойств клеток, очевидно, обусловлены активацией специфических редокс-сигнальных механизмов.

Одним из механизмов ответа клеток на действие ряда факторов, включая противоопухолевые препараты, является генерация АФК митохондриями. Преобразование внутриклеточного сигнала митохондриями включает три этапа. На первом этапе осуществляется рецепция и преобразование внутриклеточного сигнала, в результате которого усиливается генерация АФК митохондриями. Ранее нами показано, что механизм аскорбат-зависимой регуляции Ca^{2+} -сигналикации клеток включает усиление локальной продукции АФК в клетках за счет участия специфических оксидоредуктаз – НАДН : убихинон-оксидоредуктазы (Е.С. 1.6.5.3) и убихинол : цитохром *c*-оксидоредуктазы (Е.С. 1.10.2.2) [13]. На втором этапе с участием АФК осуществляется транс-



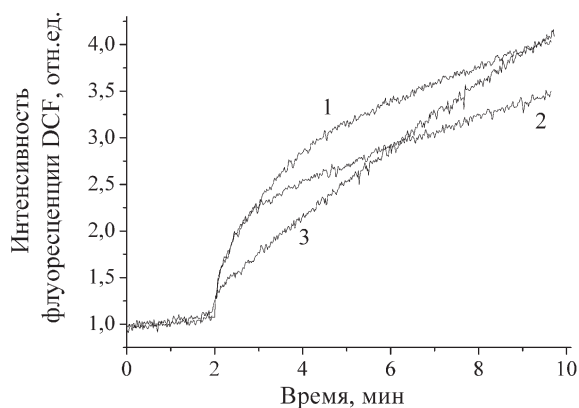


Рис. 4. Влияние H_2O_2 (100 мкМ) на интенсивность флуоресценции DCF в суспензии клеток линии Нер-2: 1 — контроль; 2 — клетки культивировали в присутствии БЭК-11-К (200 мкМ); 3 — клетки культивировали в присутствии ТС-13 (50 мкМ)

дукция сигнала на соответствующий белковый сенсор. Третий этап — это активация сенсора, в результате которой запускается клеточный ответ. Роль сенсора изменений редокс-свойств окружения при активации митохондриально-опосредованной гибели клеток, вероятно, выполняет адениннуклеотидный транспортер. Образование дисульфидов в адениннуклеотидном транспортере ANT индуцирует его связывание с порином VDAC и циклофилином D, что приводит к формированию пор высокой проводимости и запуску программируемой гибели клеток [14]. Активация сенсора (а следовательно, и активация апоптоза) осуществляется при достижении определенной величины внутриклеточного эффективного редокс-потенциала и зависит от редокс-буферной емкости. Снижение редокс-буферной емкости понижает порог активации апоптоза при действии эндогенных и экзогенных факторов, увеличение редокс-буферной емкости — повышает. Таким образом, в результате изменения редокс-состояния отклик клеток при действии редокс-активных соединений также изменяется.

В модельных условиях в клетках функции сенсора изменений внутриклеточного редокс-состояния выполняет также флуоресцентный зонд H_2DCF . Кинетика интенсивности флуоресценции DCF, образующегося после добавления пероксида водорода, существенно различается в клетках, культивируемых с антиоксидантами БЭК-11-К, ТС-13 и без них (рис. 4). Уменьшение величины редокс-буферной емкости и повышение значения эффективного редокс-потенциала, наблюдаемые в клетках, культивируемых с антиоксидантом ТС-13, приводят к увеличению скорости окисления зонда H_2DCF . Введение антиоксиданта БЭК-11-К в культуру опухолевых клеток запускает компенсаторный адаптационный ответ, в результате которого изменяется внутриклеточное содержание редокс-активных соединений, в первую очередь, восстановителей. В клетках линии Нер-2, культивируемых с антиоксидантом БЭК-11-К, рост концентрации восстановителей в сравнении с немодифицированными клетками приводит к снижению количества окисляемого пероксидом водорода зонда, что отражается в уменьшении интенсивности флуоресценции DCF, образующегося в клетках при окислении H_2DCF пероксидом водорода.

Аналогичный эффект наблюдается и при трансдукции сигнала в клетках с участием АФК. Увеличение содержания восстановителей в клетке вызывает снижение уровня АФК, взаимодействующих с белком-мишенью, в результате изменяется функциональный отклик клеток. Нами показано, что при изменении функционального состояния клеток, индуцированного БЭК-11-К, наблюдается увеличение их резистентности к ТС-13: в культуре клеток, модифицированных БЭК-11-К, количество выживших при действии ТС-13 клеток было в 2 раза выше. В свою очередь, добавление БЭК-11-К в культуру клеток Нер-2 с высокой буферной емкостью не приводило к увеличению их роста.

Таким образом, фенольные антиоксиданты могут участвовать в регуляции редокс-гомеостаза через активацию различных сигнальных механизмов, вызывая как увеличение, так и снижение роста опухолевых клеток в культуре. Одними из основных факторов, определяющих специфичность отклика опухолевых клеток на действие редокс-активных соединений, являются параметры внутриклеточного редокс-состояния — эффективный редокс-потенциал и редокс-буферная емкость.

Литература

1. Меньщикова Е. Б., Зенков Н. К., Ланкин В. З. и др. Окислительный стресс: Патологические состояния и заболевания. Новосибирск, 2008. — 284 с.
2. Мартинович Г. Г., Черенкевич С. Н. Окислительно-восстановительные процессы в клетках. Минск, 2008. — 159 с.
3. Jones D. P. // J. of Internal Medicine. 2010. Vol. 268, N 5. P. 432–448.

4. Черенкевич С. Н., Мартинович Г. Г., Мартинович И. В. и др. // Весці НАН Беларусі. Сер. біял. навук. 2013. № 1. С. 92–108.
5. Wondrak G. T. // Antioxid. Redox Signal. 2009. Vol. 11. P. 3013–3069.
6. Мартинович Г. Г., Мартинович И. В., Черенкевич С. Н. // Биофизика. 2011. Т. 56, № 3. С. 465–474.
7. Martinovich G. G., Cherenkevich S. N., Sauer H. // Eur. Biophys. J. 2005. Vol. 34, N 7. P. 937–942.
8. Martinovich G. G., Martinovich I. V., Cherenkevich S. N., Sauer H. // Cell Biochem. Biophys. 2010. Vol. 58, N 2. P. 75–83.
9. Мартинович Г. Г., Мартинович И. В., Зенков Н. К. и др. // Биофизика. 2015. Т. 60, № 1. С. 120–128.
10. Зенков Н. К., Меньщикова Е. Б., Кандалицева Н. В. и др. // Биохимия. 2007. Т. 72. С. 790–798.
11. Мартинович Г. Г., Черенкевич С. Н. // Биомед. химия. 2005. Т. 5, № 6. С. 626–633.
12. Мартинович Г. Г., Мартинович И. В., Черенкевич С. Н. // Биофизика. 2008. Т. 53, № 4. С. 618–623.
13. Martinovich G. G., Golubeva E. N., Martinovich I. V., Cherenkevich S. N. // J. of Biophysics. Vol. 2012. Article ID 921653. – 6 p.
14. Tsujimoto Y., Nakagawa T., Shimizu S. // Biochim. Biophys. Acta. 2006. Vol. 1757. P. 1297–1300.

*G. G. MARTINOVICH, I. V. MARTINOVICH, E. B. MENSCHIKOVA, N. K. ZENKOV,
S. N. CHERENKEVICH*

martinovichgg@bsu.by

REDOX PROPERTIES OF TUMOR CELLS AND THEIR PROLIFERATIVE ACTIVITY UNDER THE ACTION OF PHENOLIC ANTIOXIDANTS

Summary

It was established that the response of tumor cells to the action of the redox-active compound is regulated by the intracellular redox state quantitatively characterized by the effective redox potential and the redox buffer capacity. Phenolic antioxidant 3,5-dimethyl-4-hydroxybenzyl thioetanoate (BEP-11-K) was found to stimulate the proliferation in culture and an increase of the redox buffer capacity. Phenolic antioxidant 3-(3'-tert-butyl-4'-hydroxyphenyl)propyl thiosulfonate (TS-13) inhibits the growth of tumor cells in culture. The action of TS-13 results in a decrease of the redox buffer capacity and an increase of the effective redox potential. The toxic effect of TC-13 is reduced by an increase of the cellular redox buffer capacity.

МЕДИЦИНА

УДК 612.821.2

Г. П. МИРОНОВА, Л. С. ХАНИЛО, С. Г. ПАШКЕВИЧ

ВЛИЯНИЕ СНИЖЕНИЯ НАПРЯЖЕНИЯ КИСЛОРОДА НА КОГНИТИВНЫЕ
ФУНКЦИИ КРЫС

(Представлено членом-корреспондентом В. А. Кульчицким)

Институт физиологии НАН Беларуси, Минск

Поступило 23.03.015

Введение. Мозг составляет 2 % от общей массы тела, а потребляет 20 % всего кислорода. Работа нейронных популяций напрямую зависит от насыщения крови кислородом. Недостаточное кровоснабжение головного мозга функционального характера, например, при проведении ортостатической пробы, может сопровождаться обморочным состоянием у людей с вегетативными дисфункциями [1; 2]. Острые нарушения мозгового кровотока становятся причиной развития неврологических и психических расстройств, одним из проявлений которых является нарушение когнитивных функций (память, внимание, речь, психомоторная координация) [3]. Гиппокамп «кодирует» информацию для последующего хранения в мозге, что является основой процессов запоминания. Короткий период ишемического воздействия сопровождается повреждением СА1 области, тогда как СА3 область и зубчатая фасция устойчивы к нему [4].

Известно, что многократно повторяющаяся гипоксия легкой и средней степени оказывает своеобразный защитный эффект на когнитивные функции мозга [5; 6]. В опытах на монгольских песчанках продемонстрировано, что кратковременные интервальные воздействия сублетальной ишемии предотвращают гибель чувствительных пирамидных нейронов области СА1 гиппокампа в ответ на последующую глобальную ишемию [7]. Гипобарическое прекондиционирование ослабляет не только структурные повреждения при повторном воздействии гипоксии, но и нарушения высших функций мозга, в частности, способствует сохранению памяти [8]. У мышей после 8-минутной билатеральной окклюзии общих сонных артерий отмечен нейрогенез и миграция нейробластов из субвентрикулярной зоны в стриатум и неокортекс [9]. Аноксическое 5-минутное прекондиционирование у новорожденных крыс не вызывает гибель нейронов и на протяжении 3 недель активизирует образование нейроноподобных элементов в зубчатой извилине и субвентрикулярной зоне. Новообразованные клетки мигрируют преимущественно в высокочувствительные к ишемии зоны головного мозга, к примеру, такие как СА1 зона гиппокампа. [10]. Таким образом, одним из компенсаторных механизмов защиты нейронов головного мозга при изменении напряжения кислорода в нервной ткани является процесс нейрогенеза.

Эти фундаментальные знания обосновывают адекватность повышения резистентности нейронов к гипоксическим воздействиям путем «тренировки» прекондиционирующими умеренными гипоксическими и/или кратковременными ишемическими воздействиями. Изменение кислородного режима организма является одним из факторов, координирующим взаимосвязь кардиоритма с изменениями тонуса сосудов мозга, что также влияет на когнитивно-мнестическую деятельность человека [11]. В условиях гипоксии существенная часть компенсаторных реакций осуществляется посредством взаимодействия бульбарного дыхательного центра и супрабульбарных образований. Одним из важнейших комплексов супрабульбарных структур, обеспечивающих адаптивную регуляцию дыхания, является лимбическая система, и в частности, гиппокамп [12]. Феномен прекондиционирования является наиболее изученной кардиопротективной

стратегией. При этом механизмы повышения устойчивости к недостатку кислорода нейронов мозга и в настоящее время являются дискутабельными.

Установлено, что важными критериями сохранения функционального состояния нейронов после ишемического инсульта являются предшествующий воздействию уровень внутриклеточного аденозинтрифосфата (АТФ) и особенности ионного гомеостаза [1]. При возбуждении ускоряется расходование АТФ и креатинфосфата, а при торможении замедляется. При дополнительном воздействии сильного внешнего раздражителя защитные рефлексы млекопитающих могут развиваться по типу «борьба–бегство», соответственно с активным расходом или экономией эндогенных ресурсов.

Учитывая вышесказанное, для выяснения механизмов кратковременной гипоксической активации функций мозга проведены эксперименты на белых крысах с предварительно выработанным условным рефлексом избегания в челночной камере по методике Я. Буреша, О. Бурешовой, Дж. Хьюстон [13].

Материалы и методы исследования. Опыты проведены на белых беспородных крысах-самцах ($n = 28$) массой 170–200 г. Животные содержались в стандартных условиях вивария (температура воздуха 23 ± 1 °C, вентиляционный режим 30 мин/ч) при свободном доступе к воде и пище, 12/12-часовом режиме освещения и темноты с учетом рекомендаций Европейской конвенции о гуманном обращении с лабораторными животными [14].

Для изучения процессов запоминания у животных в качестве модели обучения с отрицательным подкреплением использован тест выработки условных рефлексов в челночной камере [13].

До начала выработки условного рефлекса крыс ($n = 18$) в течение 4–5 суток проведен хэндлинг (держали каждую крысу в руках по 2–3 мин в день) и адаптация к экспериментальным условиям (нивелирование проявлений ориентировочного рефлекса). Затем в течение 5–6 суток у животных выработан условный рефлекс избегания в челночной камере, состоящей из двух разных по площади отсеков – большого ($41 \times 47 \times 30$ см) и малого ($15 \times 25 \times 30$ см). В каждом отсеке камеры имеется металлический решетчатый пол и предусматривается селективное включение света. Между камерами находится отверстие, имитирующее вход «в норку». Отверстие при необходимости перекрывается дверцей. За один сеанс обучения осуществляется 8–10 сочетаний условного раздражителя (включение света) с безусловным ноцицептивным стимулом (пропускание тока силой 0,008–0,01 мА в течение 1–2 сек по решетчатому полу в отсеках большой или малой камеры, где находится крыса). Животных, у которых условный рефлекс долгое время не вырабатывается, не берут в эксперимент.

После выработки условного рефлекса избегания (критерием чего было проявление защитного рефлекса на включение света без подкрепления) у всех крыс измеряют латентный период реакции избегания (ЛПРИ) в течение 2–3 суток (фон). После измерения фоновых показателей ЛПРИ животных разделяют на 2 группы. В соответствии с протоколом опытов в день основного эксперимента крыс опытной группы ($n = 12$) подвергают кратковременной (5 мин) гипобарической гипоксии. Контрольные животные ($n = 6$) с выработанным условным рефлексом избегания гипоксии не подвергают.

Для моделирования сдвига газового гомеостаза создают гипобарическую гипоксию (в соуде, объемом 2 л в течение 5 мин, условный подъем на высоту 2300 м над уровнем моря, снижение барометрического давления до 577,6 мм рт. ст., что сопровождается снижением парциального давления кислорода PO_2 до 121 мм рт. ст.) *in vivo* с применением декомпрессора. Для измерения давления разреженных газов используют вакуумметр (100 КПа, Россия). С целью исключения влияния гиперкапнии с помощью химического поглотителя $Ca(OH)_2$ 96 % и NaOH 4 % адсорбируют CO_2 .

Измерение ЛПРИ в день проведения эксперимента у крыс проводят спустя 15–20 мин ($n = 6$) и 1,5 ч ($n = 6$) после 5 мин гипоксии. Параллельно измеряют ЛПРИ и у контрольной группы животных ($n = 6$). Динамику изменений ЛПРИ у всех крыс прослеживают на 3-и, 7-е, 14, 21, 28, 35, 42-е сутки после проведения основного эксперимента.

Для оценки пассивно-оборонительного рефлекса ($n = 10$) применяют анальгезиметр Hotplate LE 7406 (Stoelting, США). Моделью ноцицептивной реакции служит тепловое воздействие ($t = 55$ °C)

на конечности животных согласно стандартной методике N. B. Eddy, D. Leimbach (1953). В этих условиях регистрируют суммарную двигательную активность (СДА): количество вертикальных стоек, горизонтальных перемещений, актов груминга. Защитные рефлексы сопровождаются соответственно активным расходом (гипералгезия, увеличение СДА) или экономией эндогенных ресурсов (гипоалгезия, уменьшение СДА). При этом укорочение латентного периода ноцицептивного рефлекса (ЛПНР) свидетельствует о развитии гипералгезии, а увеличение – гипоалгезии.

Полученные данные статистически обрабатывают методом ANOVA с применением *t*-критерия Стьюдента. Для построения графиков используют программу Origin-6.1.

Результаты и их обсуждение. Величина ЛПРИ у крыс ($n = 18$) до проведения эксперимента с гипоксией (фон) при переходе из большой камеры в малую составляла в среднем $2,4 \pm 0,1$ с, из малой камеры в большую – $4,6 \pm 0,2$ с.

Показано, что через 15–20 мин после 5-минутной гипоксии у крыс опытной группы наблюдалось достоверное ($p < 0,05$) увеличение (в 5 раз – от $4,6 \pm 0,2$ до $22,7 \pm 4,0$ с) ЛПРИ при переходе из малой камеры в большую. Латентный период реакции перехода из большой камеры в малую также в 1,5 раза возрос по сравнению с фоном (рис. 1, а).

Спустя 1,5 ч наблюдений изменения ЛПРИ стали более выраженными, а именно, латентный период (ЛП) реакции перехода из малой камеры в большую возрос в 7,6 раз по сравнению с фоном, а из большой камеры в малую – в 3,2 раза (рис. 1, б).

На 3-и сутки после проведения эксперимента с гипоксией ЛПРИ при переходе из большой камеры в малую у крыс контрольной и опытной групп практически не отличался от фона (рис. 1, 2). Величина ЛП реакции перехода из малой камеры в большую у крыс контрольной группы сохранялась на уровне фоновых значений, а у крыс опытной группы была в 2–2,5 раза выше фона.

На 7-е сутки наблюдения (или 14–15-е сутки с момента образования условного рефлекса) у крыс контрольной и опытной групп различий между величиной ЛПРИ и фоновым уровнем при переходе из большой камеры в малую не выявлено. В то время как ЛПРИ у крыс опытной группы при переходе из малой камеры в большую возрос по отношению к фону в 1,3 раза (рис. 1), а у крыс контрольной группы – в 3–3,5 раза (рис. 2).

На 14-е сутки наблюдения у животных контрольной группы величина ЛПРИ при переходе из малой камеры в большую превышала уровень фоновых значений почти в 5 раз, а у крыс опытной группы, подвергавшихся гипоксии, – в 1,5–2 раза (рис. 1, 2). Рефлекс перехода из большой камеры в малую у крыс обеих групп сохранялся на уровне фона.

Только на 21-е сутки у животных опытной группы зафиксировано достоверное ($p < 0,05$) увеличение в 2–2,5 раза по отношению к фону ЛПРИ при переходе из большой камеры в малую. Далее на 28, 35, 42-е сутки наблюдения ЛП реакции перехода из большой камеры в малую оставался фактически стабильным вплоть до окончания периода наблюдения (42-е сутки). Этот факт можно объяснить естественной защитной реакцией – избежать опасного открытого пространства в большом отсеке.

Величина ЛП реакции перехода из малой камеры в большую к 21-м суткам наблюдения продолжала нарастать у животных обеих групп, а к концу периода наблюдения (42-е сутки) величина ЛПРИ у контрольных крыс была выше фоновое уровня в 5–6 раз, а у крыс опытной группы – в 2–2,5 раза (рис. 1, 2). Достоверное ($p < 0,05$) увеличение ЛПРИ при переходе из малой камеры в большую является характерным признаком угасания выработанного условного рефлекса. Такая же картина развития уга-

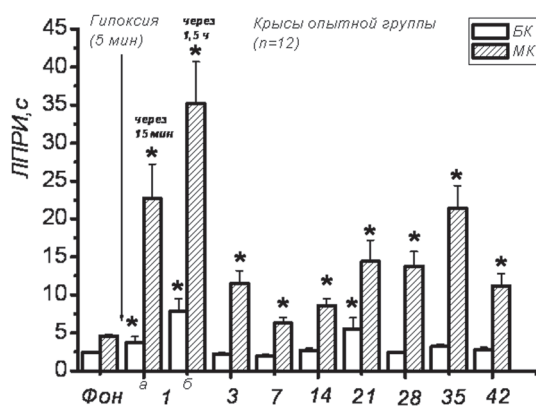


Рис. 1. Динамика величины ЛПРИ у крыс опытной группы, подвергавшихся кратковременной (5 мин) гипоксии. Фон – среднее значение ЛПРИ до гипоксии; белые столбики – ЛПРИ при переходе крыс из большой камеры в малую (БК); заштрихованные столбики – при переходе крыс из малой камеры в большую (МК); стрелкой указан момент предъявления 5 мин гипоксического стимула; а – ЛПРИ через 15–20 мин, б – через 1,5 ч после окончания воздействия гипоксии. По оси абсцисс указаны дни измерения ЛПРИ после проведения эксперимента с гипоксией; * – $p < 0,05$ по отношению к фону

сания условного рефлекса зарегистрирована ранее в экспериментах, проведенных на интактных животных [15]. Необходимо отметить, что у крыс опытной группы, подвергавшихся кратковременной гипоксии, угасание условного рефлекса происходило примерно в два раза медленнее, чем у крыс контрольной группы, которые гипоксии не подвергались.

Для оценки поведенческой активности и характера защитных рефлексов в тесте горячая пластина предварительно животных ($n = 10$) подвергали воздействию гипобарической гипоксии, по методике, которая изложена выше.

Установлено, что через 1,5 ч после 5-минутной гипоксии СДА снижается в среднем на 20 % ($p < 0,05$), через 3 суток возвращается в исходный уровень, и на 7-е сутки через 1,5 ч после моделирования более продолжительной 10-минутной гипоксии – снижается в среднем на 60 % ($p < 0,05$). ЛПНР через 1,5 ч после 5-минутной гипоксии увеличивается в среднем на 29 % ($p < 0,05$), через 3 суток возвращается в исходный уровень, на 7-е сутки через 1,5 ч после повторного моделирования более продолжительной 10-минутной гипоксии – возрастает в среднем на 51 % ($p < 0,05$) (рис. 3).

Таким образом, прекондиционирующий эффект 5-минутной гипоксии выявлен через 7 суток при повторной более длительной 10-минутной гипоксии. Поскольку снижение СДА сопровождается увеличением ЛПНР, подобный характер пассивно-оборонительного рефлекса свидетельствует о переходе организма в режим экономии эндогенных ресурсов, который позволяет сохранить энергетические ресурсы, в том числе для клеток мозга и выжить в условиях снижения напряжения кислорода. Результаты опытов подтвердили высказанную гипотезу об адаптивном характере повторных кратковременных гипоксических воздействий в отношении тяжелого гипоксического фактора.

Заключение. На основании полученных данных заключили, что кратковременная гипобарическая гипоксия сопровождается перестройкой интегративной деятельности мозга и механизмов обучения и памяти, которые уязвимы в условиях внезапного снижения напряжения кислорода в тканях мозга. Так, 5-минутная гипоксия сопровождается угнетением условного рефлекса, что наиболее выражено через 1,5 ч после воздействия. Кроме того, при кратковременной гипоксии замедляется естественный процесс угасания условного рефлекса (по сравнению с животными без гипоксии) и более длительно сохраняется выработанный условный рефлекс. Динамика пассивно-оборонительных рефлексов при этом свидетельствует об экономии эндогенных ресурсов организма.

Таким образом, систематические кратковременные гипоксические воздействия легкой степени сопровождаются пластическими перестройками в центральной нервной системе и оптимизацией контроля когнитивных функций, обеспечивающих процесс познания окружающего мира.

Литература

1. Иванов К. П. // Успехи физиол. наук. 2012. Т. 43, № 1. С. 95–110.
2. Орлов Р. С., Ноздрачев А. Д. Нормальная физиология. М., 2009. С. 88–93.
3. Гусев Е. И., Скворцова В. И. Ишемия головного мозга. М., 2001.
4. Vallet P. G., Charpiot A. // Encephale. 1994. Vol. 20, N 2. P. 131–137.

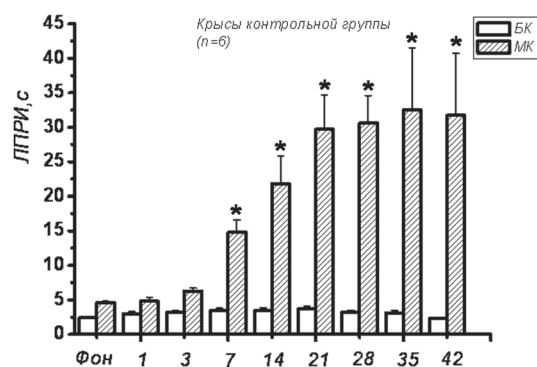


Рис. 2. Динамика величины ЛПНР у крыс контрольной группы (без гипоксии) в течение 42 суток после проведения эксперимента с гипоксией. Обозначения те же, что на рис. 1

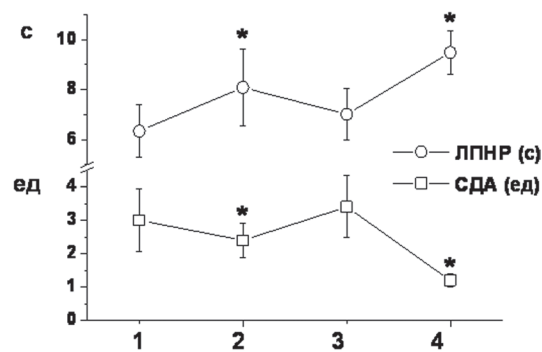


Рис. 3. Изменение суммарной двигательной активности (СДА) в единицах (ед) и латентного периода ноцицептивного рефлекса (ЛПНР, с): 1 – контроль; 2 – через 1,5 ч после 5-минутной гипоксии; 3 – через 3 суток после 5-минутной гипоксии; 4 – через 1,5 ч после 10-минутной гипоксии у крыс-самцов ($n = 10$). * – $p < 0,05$ по отношению к контролю

5. Щербак Н. С., Выболдина Т. Ю., Галагудза М. М. и др. // Российский физиол. журн. 2012. № 8. С. 990–999.
6. Туровская М. В., Туровский Е. А., Кононов А. В. и др. // Биологические мембраны. 2013. Т. 30, № 5–6. С. 479–490.
7. Kitagawa K., Matsumoto M., Tagaya M. et al. // Brain Res. 1990. Vol. 528, N 1. P. 21–24
8. Самойлов М. О., Рыбникова Е. А., Чурилова А. В. // Патологическая физиология и экспериментальная терапия. 2012. № 3. С. 3–10.
9. Li Y., Yu S. P., Mohamad O. et al. // Transl. Stroke Res. 2010. Vol. 1, N 3. P. 184–196.
10. Pourie G., Blaise S., Tralalon M. et al. // Neuroscience. 2006. Vol. 140. P. 1369–1379.
11. Бурых Э. А., Сергеева Е. Г. // Физиология человека. 2008. Т. 34, № 6. С. 51–62.
12. Акопян Н. С., Адамян Н. Ю., Арутюнян Р. С. и др. // Нейронауки: теоретические и клинические аспекты. 2005. Т. 1, № 1 (приложение). С. 4–5.
13. Буреш Я., Бурешова О., Хьюстон Д. Методика и основные эксперименты по изучению мозга и поведения. М., 1991.
14. European Convention for the protection of vertebrate animals used for experimental and other scientific purposes. Strasbourg : Europ. Treaty Series, 1986. N 123. – 48 p.
15. Миронова Г. П., Стрижак И. В. // Весці НАН Беларусі. Сер. мед. навук. 2011. № 1. С. 52–55.

G. P. MIRONOVA, L. S. KHANILO, S. G. PASHKEVICH

skypasht@mail.ru

EFFECT OF AN OXYGEN TENSION REDUCTION ON THE COGNITIVE FUNCTION OF RATS

Summary

In experiments on 22 sexually mature male rats it was found that short-term hypobaric hypoxia is accompanied by restructuring the integrative activity of the brain and the mechanisms of learning and memory that are vulnerable to the oxygen tension in the tissues of the brain. The oxygen tension reduction during 5 minutes contributes to a two-fold increase of the safety period of the conditioned reflex of active avoidance. The preconditioning effect of 5 minute hypoxia is revealed in 7 days after repeated more prolonged 10 minute hypoxia. The decrease in the total motor activity (an average of 60 %) and the increase in the latency period of nociceptive reflexes (an average of 51 per cent) were accompanied in a test of the hot plate. A similar nature of passive-defensive reflex signals is indicative of the shift of the organism to the endogenous resources saving that allows us to save energy resources, including for brain cells, and to survive under the conditions of lower oxygen tension.

УДК 616-13-008.21

*Е. И. ГАЙШУН¹, академик И. В. ГАЙШУН², А. М. ПРИСТРОМ³***ИЗМЕНЕНИЕ РАСТЯЖИМОСТИ АРТЕРИЙ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ СУТОЧНОЙ ЧАСТОТЫ СЕРДЕЧНЫХ СОКРАЩЕНИЙ**¹*1-ая городская клиническая больница, Минск*²*Институт математики НАН Беларуси, Минск*³*Белорусская медицинская академия последипломного образования, Минск**Поступило 04.03.2015*

Введение. Нарушение упруго-эластических свойств крупных артерий в настоящее время рассматривается как важнейший независимый фактор риска, увеличивающий смертность от сердечно-сосудистых заболеваний (ССЗ) [1–4]. По-видимому, многие известные факторы риска развития ССЗ реализуются именно через изменения растяжимости и эластичности сосудистой стенки.

Важность упруго-эластических свойств артерий требует простых и надежных неинвазивных методов их оценки. К числу таких методов, прежде всего, относится измерение скорости распространения пульсовой волны (СРПВ) [5–7]. Широко используются также различные показатели, позволяющие по данным об артериальном давлении (АД), относительном изменении диаметра сосуда в течение сердечного цикла и толщине комплекса интима-медиа судить о растяжимости и эластичности сосудистой стенки [5; 8]. Однако и СРПВ, и большинство известных показателей существенно зависят от АД [9; 10] и частоты сердечных сокращений (ЧСС) [11], что предполагает проведение контрольных исследований в изобарических (при одинаковом АД) и изоритмических (при одной и той же ЧСС) условиях.

Чтобы исключить влияние АД на оценку упруго-эластических свойств артерий, следует применять методы, мало зависящие от АД. Сегодня к таким методам можно отнести, по крайней мере, два показателя: известный индекс жесткости β [12] и разработанный в [13] индекс растяжимости α . Оценки растяжимости, полученные на основе этих индексов, достаточно адекватно характеризуют морфофункциональное состояние сосудистой стенки, поскольку они практически не связаны с напряжением, вызванным АД. Некоторые другие показатели с низкой зависимостью от АД представлены в работах [14; 15]; однако они требуют настройки входящего в них параметра на ту или иную категорию пациентов, что затрудняет их использование.

Заметим, что все известные показатели (в том числе индексы α и β) получены в предположении, что растяжимость сосудистой стенки подчиняется закону Гука, при этом сам показатель определяется как постоянный множитель, входящий в коэффициент растяжимости [14; 15]. Поэтому с их помощью нельзя получить оценку статической (абсолютной) растяжимости артерий. Дело в том, что сосудистая стенка в ходе каждого сердечного цикла подвергается периодической деформации, вызванной пульсовым давлением и вязким напряжением сдвига, что в силу вязкоупругости материала стенки приводит к снижению растяжимости. Этот факт не отражается в применяемых сегодня показателях. Поэтому для уточнения оценок растяжимости артериальных сосудов желательно получить зависимость значений того или иного показателя от ЧСС, при этом, по причине высокой вариабельности ЧСС, указанную зависимость целесообразно определять по результатам суточного мониторингирования ЧСС.

Цель исследования – установить связь между оценками статической растяжимости сосудистой стенки и оценками растяжимости, получаемыми с учетом влияния на нее суточных значений ЧСС.

Материалы и методы исследования. Как уже отмечалось, большинство методов оценки упруго-эластических свойств артерий основано на законе Гука и, следовательно, на предположении об идеальной упругости материала сосудистой стенки, т. е. его способности деформироваться под действием приложенной силы и мгновенно, без какой-либо диссипации энергии, принимать исходную форму при снятии нагрузки. Однако на самом деле сосудистая стенка не является чисто упругой, а обладает четко выраженными вязкоупругими свойствами, которые проявляются, в частности, в том, что под действием стационарного напряжения деформация достигается не мгновенно, за начальной деформацией наступает ползучесть материала, протекающая до достижения равновесного значения. Напряжение же, необходимое для поддержания определенной деформации, релаксирует от начального значения до равновесного. Вязкоупругость существенна лишь тогда, когда напряжение или деформация меняются во времени, что и происходит в кровеносных сосудах под действием пульсового давления. Вследствие этого колебания деформации отстают от колебаний напряжения и имеют меньшую амплитуду, чем для чисто упругого материала.

Упругость материала сосудистой стенки в статике характеризуется модулем Юнга E (размерность $H \cdot m^{-2} = кг \cdot m^{-1} \cdot c^{-2}$), а в случае колебаний напряжения, вызванных пульсовым давлением, – динамическим модулем Юнга $E_{дин}$ [16]. Величина $E_{дин}$ зависит от ЧСС f (измеряемой в Гц $= c^{-1}$), при этом $E_{дин} > E$, если $f > 0$. На основании данных, представленных в [16], можно сделать вывод, что в диапазоне «рабочих» часто $f < 2-2,5$ Гц относительное приращение $(E_{дин} - E) / E$ модуля Юнга примерно пропорционально частоте f , т. е.

$$\frac{E_{дин} - E}{E} = kf; \quad (1)$$

коэффициент k измеряется в секундах и равен относительному приращению модуля Юнга, вызванному ЧСС в 1 Гц. Этот коэффициент не зависит от ЧСС и определяется только типом артерии, при этом его значение тем выше, чем артерия мельче и больше мышечных волокон в ее стенке, т. е. чем более четко выражены ее вязкоупругие свойства. В частности, для брюшной аорты $k \approx 0,1$ с, для общей сонной артерии (ОСА) $k \approx 0,3-0,4$ с [16; 17]. Таким образом, величина k в какой-то мере характеризует вязкоупругие свойства сосудистой стенки. Вследствие этого, будем называть ее *коэффициентом вязкоупругости*.

Пусть теперь γ – некоторый индекс растяжимости, слабо зависящий от АД, например, один из показателей [12; 13]

$$\alpha = \ln(D_s / D_d) / \ln(P_s / P_d), \quad \beta^{-1} = (D_s - D_d) / (D_d \ln(P_s / P_d)).$$

Учитывая (1), легко убедиться [17], что значение $\gamma_{чсс}$ индекса γ , полученное для некоторой артерии с коэффициентом вязкоупругости k при ЧСС в f Гц, отличается примерно в $(1 + kf)$ раз от статического значения $\gamma_{ст}$ этого индекса, рассчитанного в предположении, что на стенку сосуда не действует пульсовое давление, т. е.

$$\gamma_{чсс} = \frac{\gamma_{ст}}{1 + kf}. \quad (2)$$

Равенство (2) показывает, что ЧСС непосредственно влияет на растяжимость. Однако в силу высокой вариабельности ЧСС, величина $\gamma_{чсс}$, определенная при случайном измерении ЧСС, не является достаточно объективной характеристикой растяжимости сосудистой стенки. Поэтому представляется целесообразным оценить среднее значение $\gamma_{чсс}$ по результатам $f_1, f_2, \dots, f_{24}$ суточного мониторингирования ЧСС. На основании (2) нетрудно установить, что указанное среднее описывается соотношением

$$\overline{\gamma_{чсс}} = \gamma_{ст} \left(1 - \frac{k}{n} \sum_{i=1}^{24} \frac{f_i}{1 + kf_i} \right)$$

(здесь и далее черта над какой-либо величиной обозначает среднее значение этой величины, вычисленное по данным суточного мониторингирования ЧСС). Поскольку $\gamma_{ст}(1 + kf_i)^{-1} = \gamma_{чсси}$, где $\gamma_{чсси}$ – значение индекса γ при частоте f_i , то

$$\overline{\gamma_{ст}} = \overline{\gamma_{чсс}} + k \overline{f \gamma_{чсс}}. \quad (3)$$

Таким образом, среднее значение $\overline{\gamma_{чсс}}$ индекса γ , полученное в результате суточного мониторингирования ЧСС, меньше статического значения этого индекса на величину $k \overline{f \gamma_{чсс}}$, которую назовем *модулем потерь индекса γ* . Модуль потерь оценивает снижение (потерю) растяжимости сосудистой стенки за счет воздействия периодически изменяющегося напряжения в ходе сердечного цикла.

Результаты и их обсуждение. Из (3) следует, что потеря растяжимости артерии пропорциональна ЧСС и коэффициенту вязкоупругости сосудистой стенки, т. е. чем больше ЧСС и четче выражены вязкоупругие свойства, тем выше потеря. Коэффициент вязкоупругости k определяется экспериментально путем воздействия на некоторый фрагмент сосудистой стенки периодически изменяющегося напряжения [16]; соответствующие значения величины k для различных артерий легко получить [17] на основании данных из [16]. Средние значения $\overline{\gamma_{чсс}}$ и $\overline{f \gamma_{чсс}}$ оцениваются следующим образом: 1) измеряются систолическое и диастолическое АД; 2) путем ультразвукового исследования соответствующей артерии устанавливается ее диаметр в систолу и диастолу при ЧСС f_0 , наблюдаемой в момент исследования; 3) по данным об АД и диаметре вычисляется значение γ_0 индекса γ ; тогда

$$\overline{\gamma_{чсс}} = (1 + k f_0) \gamma_0 (1 + k f)^{-1}, \quad \overline{f \gamma_{чсс}} = (1 + k f_0) \gamma_0 [f (1 + k f)^{-1}].$$

Таким образом, все параметры, входящие в формулу (3), достаточно просто определяются с помощью стандартных методов, что позволяет дать оценку статической (абсолютной) растяжимости сосудистой стенки, т. е. растяжимости в чистом виде вне зависимости от воздействия ЧСС.

Проиллюстрируем полученные результаты следующим примером. Путем исследования ОСА и суточного мониторингирования ЧСС у женщин 25 лет получены следующие показатели: $P_s = 120$ мм рт. ст., $P_d = 80$ мм рт. ст., $f_0 = 1,5$, $f_1 = 1,92$, $f_2 = 1,88$, $f_3 = 1,77$, $f_4 = 1,82$, $f_5 = 1,58$, $f_6 = 1,75$, $f_7 = 1,92$, $f_8 = 1,88$, $f_9 = 1,77$, $f_{10} = 1,73$, $f_{11} = 1,67$, $f_{12} = 1,72$, $f_{13} = 1,63$, $f_{14} = 1,57$, $f_{15} = 1,43$, $f_{16} = 1,50$, $f_{17} = 1,35$, $f_{18} = 1,40$, $f_{19} = 1,35$, $f_{20} = 1,33$, $f_{21} = 1,30$, $f_{22} = 1,33$, $f_{23} = 1,77$, $f_{24} = 1,65$, среднесуточная ЧСС $\overline{f} = 1,6$ (все частоты f_i , $\overline{f}$ измерены в Гц). В качестве индекса растяжимости γ был использован показатель α . Коэффициент k считался равным 0,3 с. Простые расчеты, проведенные нами, привели к следующим выводам: $\gamma_0 = 0,37$, $1 + k f_0 = 1,45$, $(1 + k f)^{-1} = 0,67$, $[f (1 + k f)^{-1}] = 1,09$. Следовательно, $\overline{\gamma_{чсс}} = 1,45 \cdot 0,37 \cdot 0,67 = 0,36$, $\overline{k f \gamma_{чсс}} = 0,3 \cdot 1,45 \cdot 0,37 \cdot 1,09 = 0,17$, $\gamma_{ст} = 0,36 + 0,17 = 0,53$. Значит модуль потерь равен 0,17, а величина $\gamma_{ст}$ больше величины $\overline{\gamma_{чсс}}$ примерно на 42 %, т. е. потери растяжимости ОСА за счет ЧСС в рассматриваемом случае можно оценить в 42 %. Такая оценка, на наш взгляд, хорошо согласуется с известными данными (см., напр., [11; 18]), что снижение ЧСС с 90 уд/мин до 60 уд/мин приводит к уменьшению такого показателя ригидности аорты, как каротидно-феморальная СРПВ с 7,6 до 6,2 м/с, т. е. на 22 %. Поскольку коэффициент вязкоупругости ОСА примерно в 2–3 раза больше, чем аорты [16], и в анализируемом примере увеличение растяжимости ОСА определялось в соответствии со снижением ЧСС от 1,6 Гц = 96 уд/мин до нуля (а не от 90 уд/мин до 60 уд/мин, как в случае аорты), то оценки 42 % и 22 % представляются вполне сопоставимыми.

Выводы. Установленная связь (3) между статическим и динамическим значениями индекса растяжимости и ЧСС позволяет оценить статическую (абсолютную) растяжимость артерии, что является важным как для сопоставимости результатов контрольного обследования, так и для анализа динамики изменений сосудистой стенки, в частности, для анализа эффективности методов коррекции ее упруго-эластических свойств.

Литература

1. Oliver J. J., Webb D. J. // Arterioscler. Thromb. Vasc. Biol. 2003. Vol. 23. P. 554–566.
2. Mitchell G. F. // Circulation. 2010. Vol. 121, N 4. P. 505–511.
3. Vlachopoulos C. // Eur. Heart. J. 2010. Vol. 31. P. 1865–1871.
4. Willum-Hansen T. // Circulation. 2006. Vol. 113, N 5. P. 664–670.
5. Лелюк В. Г., Лелюк С. Э. Ультразвуковая ангиология. М., 2007.

6. *Moens A. I.* Die Pulscurve. Leiden, 1878.
7. *Bramwell J. S., Hill A. V.* // Proc. Roy. Soc. 1922. Vol. 93. P. 298–306.
8. *Манак Н. А., Пристром А. М., Гайшун Е. И.* // Здоровоохранение. 2010. № 6. С. 36–38.
9. *Манак Н. А., Пристром А. М., Гайшун Е. И.* // Кардиология в Беларуси. 2010. № 3. С. 72–81.
10. Ультразвуковая диагностика сосудистых заболеваний: рук-во для врачей / Под ред. В. П. Куликова. М., 2011.
11. *Hayward C. S., Avolio A. P., O'Rourke M. F.* et al. // J. Hypertension. 2002. Vol. 40. P. 8–9.
12. *Kawasaki T., Sasyama S., Yagi S.* et al. // Cardiovasc. Res. 1987. Vol. 21. P. 678–687.
13. *Астровский А. И., Гайшун Е. И., Гайшун И. В., Пристром А. М.* // Весці НАН Беларусі. Сер. мед. навук. 2014. № 1. С. 12–18.
14. *Манак Н. А., Пристром А. М., Гайшун Е. И.* // Докл. НАН Беларусі. 2010. Т. 54, № 4. С. 105–108.
15. *Гайшун И. В., Манак Н. А., Гайшун Е. И., Пристром А. М.* // Весці НАН Беларусі. Сер. мед. навук. 2010. № 4. С. 25–31.
16. *Каро К., Педли Т., Шротер Р., Сид У.* Механика кровообращения. М., 1981.
17. *Гайшун Е. И., Гайшун И. В., Пристром А. М.* // Весці НАН Беларусі. Сер. мед. навук. 2014. № 4. С. 26–31.
18. *Рогоза А. Н.* // Функциональная диагностика. 2007. № 7. С. 17–32.

E. I. GAISHUN, I. V. GAISHUN, A. M. PRYSTROM

gaishun@im.bas-net.by

CHANGE OF THE ARTERIAL DISTENSIBILITY DEPENDING ON A 24-HOUR AMBULATORY HEART RATE

Summary

Associations between the static arterial distensibility and the arterial distensibility obtained with regard to a 24-hour ambulatory heart rate are established.

НАУКИ О ЗЕМЛЕ

УДК 665.7.032.54

*Академик И. И. ЛИШТВАН, В. М. ДУДАРЧИК, В. М. КРАЙКО***ТВЕРДЫЕ ГОРЮЧИЕ ИСКОПАЕМЫЕ БЕЛАРУСИ И ОСОБЕННОСТИ
ИХ ГЛУБОКОЙ ПЕРЕРАБОТКИ***Институт природопользования НАН Беларуси, Минск**Поступило 29.04.2015*

Введение. В настоящее время в качестве основных источников сырья для химической промышленности рассматривают нефть и природный газ. Вместе с тем для устойчивого развития любой страны сырьевая база промышленности должна быть достаточно гибкой и основываться на применении различных взаимозаменяемых видов органического сырья. В Беларуси имеются такие твердые энергоносители, как торф и потенциальные пока неразрабатываемые бурые угли и горючие сланцы. Для ряда регионов их использование может быть экономически оправдано уже сейчас.

Уголь как альтернативное сырье для органического синтеза приобретает в последнее время все большее значение. Многие научные исследования направлены на разработку новых методов получения различных органических веществ из синтез-газа, образующегося при газификации угля либо горючих сланцев, а также на модернизацию уже существующих процессов. Сегодня топливная система нашей республики зависит от внешних поставщиков и прежде всего от российского газа и нефти, составляющих примерно 70 % от всех потребляемых энергоносителей, и одна из самых актуальных задач республики – это уменьшить энергозависимость от стран-соседей.

В комплексных схемах глубокой переработки белорусских энергоносителей наиболее экономически оправдано предусматривать наряду с топливной составляющей их нетопливное использование, которое предлагает не одно, а ряд направлений. Из них наиболее важными являются следующие: получение химических продуктов при полукоксовании бурых углей, гидрирование и газификация углей, сланцев, торфа и древесных отходов, получение технологических газов, адсорбентов и других продуктов. При этом надо учитывать возможность утилизации минеральных отходов добычи и переработки топлива.

Бурые угли Республики Беларусь. В Беларуси прогнозные общие запасы неогеновых бурых углей составляют около 1,5 млрд т: разведанные (балансовые экономически целесообразные) ~160 млн т, в перспективе ~250 млн т; детально разведанные к настоящему времени – 100 млн т. Наиболее перспективными для промышленного освоения являются месторождения бурых углей в западной части Гомельской области – Житковичское, Бриневское и Тонежское. Средняя мощность пластов – 3–4 м, максимальная – 19,9 м, вскрыши – от 21 до 81 м [1; 2]. Влажность углей колеблется в пределах 38–68 %, зольность – 8–42 %, содержание гуминовых веществ составляет 61–68 % и до 9 % битумов, выход летучих веществ – 55–64 %. Низкое содержание серы (0,6–1,5 %) позволяет отнести бурые угли к категории малосернистых, что имеет существенное экологическое значение для термохимической переработки. Низшая рабочая теплота сгорания в зависимости от влажности углей и содержания в них золы составляет 6,3–8,4 МДж/кг сухого вещества [3].

Кроме указанных неогеновых углей, относящихся к классу Б1, выявлено также Лельчицкое месторождение бурых углей класса Б3. В Институте природопользования НАН Беларуси прове-

ден комплекс исследований по составу этих углей, их качественным характеристикам, направлениям использования. Средние показатели качества бурых углей Беларуси приведены в таблице.

Для промышленного освоения неогеновых бурых углей подготовлены 2 залежи Житковичского месторождения – Найдинская и Северная – с общими запасами 46,7 млн т. по категориям А+В+С₁. На базе этих запасов возможно проектирование и строительство двух разрезов суммарной производственной мощностью 2,2 млн т/год.

Основные средние показатели качества бурых углей месторождений Беларуси

Показатель	Месторождения				
	Житковичское		Бринев- ское	Тонежское	Лель- чицкое
	Северная залежь	Найдинская залежь		Основной пласт	
	Неогеновые, класс Б1				
Глубина залежи, м	21–60		66–99	26,3–103,3	90–390
Зольность, %	21,2	16,7	25,6	22,0	30,3
Влажность естеств., %	55,8	61,7	55,3	55,1	13,0
Элементный состав, %					
С	64,0	64,5	66,9	65,1	69,0
Н	5,0	4,8	5,0	5,6	4,7
N	0,9	0,6	0,7	1,5	1,1
О (по разности)	29,4	29,3	26,4	27,3	23,2
S	0,7	0,8	1,0	0,5	2,0
Выход летучих веществ, % на ОВ	55,8	61,7	61,3	57,7	43,8
Спирто-бензолные битумы, % на ОВ	6,0 5,5–10,7	Не опр.	8,1 7,5–8,9	4,7 2,8–9,2	1,0
Гуминовые вещества, % на ОВ	77,0	74,2	58,5 50,6–71,0	70	10,0
Выход смолы по Фишеру, % на с. в.	9,0	9,1 4,5–13,8	11,2 9,2–13,3	Не опр.	Не опр.
Низшая удельная теплота сгорания, МДж/кг	6,7	5,8	5,7	5,4–10,1	14,7–19,4
Высшая удельная теплота, МДж/кг	24,6	24,5	24,6	23,3–29,2	25,8–34,2

Добычу их наиболее целесообразно осуществлять карьерным способом на всех трех месторождениях в следующей последовательности: сначала Житковичское, затем Бриневское и последним Тонежское. Последовательность отработки месторождений позволяет использовать одно горно-добычное и транспортное оборудование на всех месторождениях. Этим экономятся вложения на приобретение оборудования.

Мировые цены на уголь как энергоноситель являются самыми низкими и с учетом этого, а также экологических условий в промышленно развитых странах разрабатывается новая концепция использования угля с целью повышения его удельного веса в топливно-энергетическом балансе государства. Суть ее заключается в глубокой переработке углей, в том числе бурых с получением более дорогих видов продукции. Существует несколько основных вариантов такой переработки. Один из них – получение моторных топлив, цены на которые в разы превышают исходный продукт. По такому пути идут Германия, Южно-Африканская республика и Чехия. Наиболее полно в промышленном масштабе эта проблема решена в ЮАР. Технология производства моторного топлива из бурого угля – технология Фишера–Тропша была освоена в 1930-е годы в Германии в промышленном масштабе и успешно эксплуатировалась. В настоящее время особенно преуспела в реализации данной технологии южноафриканская компания «Сасол». Перерабатывая 33 млн т/год бурого угля, на предприятиях компании производится свыше 4,5 млн т/год жидких топлив (бензин, дизельное топливо, керосин и др.). Технология переработки бурых углей базируется на сочетании двух методов: газификация угля по методу Лурги и превращение синтез-газа в жидкие продукты с применением каталитического процесса Фишера–Тропша.

Жидкие углеводороды представляют собой смесь парафиновых углеводородов (главным образом нормального строения) и олефинов с присутствием ароматических углеводородов, циклопарафинов, смол и других продуктов пиролиза. При применении специальных катализаторов возможно повышенное образование ароматических и циклопарафиновых углеводородов. Полученные жидкие углеводороды предполагается использовать в качестве сырья на нефтеперерабатывающих заводах при производстве моторных топлив с доведением их качества до требуемых параметров. Попутными продуктами термохимической переработки бурых углей являются сульфат аммония, серная кислота и щебень для строительных работ из плавленного шлака печей пиролиза.

Бурые угли Житковичского, Бриневского и Тонезского месторождений по своему составу относятся к гуминовым (таблица), так как основную часть их органической массы составляют гуминовые вещества. С этих позиций они фактически близки к торфу высокой степени разложения и пригодны для получения разнообразной нетопливной продукции, о чем свидетельствуют материалы научных и опытно-промышленных исследований. Уже разработаны технологии получения биологически активных веществ для земледелия в виде стимуляторов роста растений и стимулирующих добавок к минеральным удобрениям, мелиорантов почв, сорбционных материалов для очистки жидких и газовых сред, углещелочных реагентов, применяемых для бурения скважин и других продуктов нетопливного назначения (органоминеральных удобрений различных марок, восков, красителей и др.). Многие из указанных продуктов испытаны в производственных условиях, прошли санитарно-гигиеническую и токсикологическую проверку.

Лельчицкие бурые угли. Прогнозные ресурсы бурых углей Лельчицкого месторождения составляют 250 млн т. Пласты имеют толщину 1,2–12,2 м, глубина залегания от 90 до 390 м. Запасы угля на наиболее изученном участке «Северный» около 110 млн т, площадь 14 км². Установлено, что бурые угли Лельчицкого месторождения представляют собой твердые горючие ископаемые с более высокой степенью метаморфизма, чем угли неогенового периода формирования и относятся к углям марки БЗ. По теплотворной способности указанные угли в два раза превосходят неогеновые, что позволяет рекомендовать их для прямого сжигания.

Исследование состава смолы бурых углей Лельчицкого месторождения показало, что суммарное содержание в смоле легкой и средней фракции составило 20–36 %, антраценовой фракции – 38–50 %; элементный состав: С – 82–84 %, Н – 8–10 %, N – 1,5 %, S – 2,2 %, О – 3,5 %. Оценена теплота сгорания смолы, которая составила 30–32 МДж/кг. Фракционный состав смолы лельчицких бурых углей содержит высокое количество полициклических ароматических углеводородов, что указывает на близость ее состава к смоле каменных углей [4].

Возможные пути использования лельчицких бурых углей:

прямое сжигание разными известными способами, разработанными для бурых и каменных углей для крупных энергоисточников, а также целесообразно использование в коммунально-бытовом секторе, на мини-ТЭЦ;

термохимическая переработка с получением газообразных и высококалорийных жидких энергоносителей (котельные и моторные топлива).

Одним из перспективных направлений использования лельчицких бурых углей кроме сжигания и газификации может стать их использование в качестве смесевых топлив совместно с горючими сланцами Беларуси на установке с твердым теплоносителем УТТ–3000 с получением «сланцевой нефти», пригодной для изготовления моторных топлив и других органических материалов. Идея такого подхода к переработке белорусских сланцев состоит в том, что они по качеству (содержанию керогена) уступают перерабатываемым в настоящее время эстонским сланцам и если их обогатить лельчицкими бурными углями в соотношении 8 : 2, то полученная смесь по содержанию органического вещества будет соответствовать горючим сланцам Эстонии, которая успешно и с экономической выгодой десятки лет получает моторные топлива и другие химические материалы на установках УТТ–3000, рекомендуемых также и для переработки белорусских сланцев [5].

Кроме того, в составе золы бурых углей Лельчицкого месторождения обнаружен спектр ценных редкоземельных элементов, которые при детальном изучении в перспективе смогут также стать важным направлением в использовании указанных бурых углей.

Технологии переработки сланцев. Белорусские горючие сланцы не соответствуют по своим показателям качеству топлива для сжигания на электростанциях в исходном виде. Использование энергетического, а также химического потенциала органической части горючих сланцев возможно путем их термической переработки в агрегатах соответствующей конструкции [6].

В настоящее время основными промышленными способами термической переработки горючих сланцев с получением высококалорийных энергоносителей являются полукоксование в газогенераторах и пиролиз с твердым теплоносителем. Переработка горючих сланцев в газогенераторах заключается в полукоксовании сланца в потоке газового теплоносителя с температурой 800–900 °С, получаемого за счет сжигания генераторного газа. При термическом разложении сланца образуются следующие продукты: смола, вода и генераторный газ. Остатком переработки является полукокс. Недостатком газогенераторов является ограничение размера перерабатываемых кусков сланца до 25–125 мм и содержания мелочи не более 7 %, в то время как с использованием механизированной системы разработки пластов при добыче количество образующейся мелочи достигает 50–60 %.

Из существующих технологий наиболее эффективной и освоенной в промышленном масштабе является технология термической переработки с твердым теплоносителем. Для нагрева сырья по этой технологии в качестве твердого теплоносителя используется собственная горячая зола сланца. На установках с твердым теплоносителем перерабатывают мелкозернистые фракции с размером частиц до 25 мм. Данные фракции составляют до 60 % общего количества сланца при его механизированной добыче.

Технология термической переработки сланцев широко используется в настоящее время для переработки горючих сланцев в Эстонии, Китае. Так, в Эстонии к 2015 г. 90 % сланцев будут перерабатывать этим методом. Установки УТТ–3000, созданные в промышленном масштабе, не имеют аналогов в мире. Опыт их эксплуатации показал, что энерготехнологическая установка в составе двух агрегатов способна обеспечить высококачественным жидким и газообразным топливом энергоблок мощностью около 150 Мвт. При переработке 500 тыс. т/год установка становится рентабельной, а при дальнейшем увеличении количества перерабатываемого сланца – прибыльной.

Указанная технология наиболее эффективна для переработки белорусских горючих сланцев. Технологическая схема установок предусматривает получение сланцевой смолы и полукоксового газа, являющихся альтернативными заменителями нефти и природного газа. Дальнейшая их переработка обеспечивает получение моторного, котельного и газотурбинного топлива, а также ценного сырья для химического производства.

При переработке сланцев Туровского месторождения на УТТ–3000 производительностью 1 млн т/год выход продуктов составит: смолы – около 65 тыс. т, газового бензина – 9,6–10,6 тыс. т, газа – 36–58 млн м³, пирогенетической воды – 21–29 тыс. т и золы – 740–800 тыс. т.

Заслуживает внимания и тот факт, что на УТТ возможна переработка со сланцем органических отходов. Эффективность термохимической переработки сланцев можно значительно повысить за счет их совместной переработки с торфом, сапропелем, бурыми углями или полимерными отходами (изношенные автопокрышки, полиэтилен и др.), что позволяет существенно повысить выход целевых продуктов и соответственно снизить их себестоимость.

Промышленное освоение месторождений горючих сланцев будет экономически и экологически оправдано лишь при условии полной утилизации всех продуктов переработки, прежде всего золы, которая может найти применение в производстве стройматериалов, сельском хозяйстве и дорожном строительстве.

В целом можно отметить, что твердые горючие ископаемые Республики Беларусь – важные для страны природные ресурсы и их глубокая комплексная переработка является достаточно эффективной в современных экономических отношениях.

Литература

1. Полезные ископаемые Беларуси / Под ред. П. З. Хомича. Минск, 2002.
2. Ажгиревич Л. Ф. Закономерности размещения и образования горючих ископаемых. Минск, 1986.
3. Лиштва И. И., Фалюшин П. Л., Дударчик В. М. и др. // ХТТ. 2009. № 3. С. 20–25.
4. Лиштва И. И., Фалюшин П. Л., Крайко В. М. и др. // ИФЖ. 2012. Т. 85, № 6. С. 1235–1241.
5. Лиштва И. И., Дударчик В. М., Крайко В. М. и др. // ХТТ. 2014. № 2. С. 3–7.
6. Горький Ю. И., Лукьянова З. К., Стельмах Г. П. и др. Проблемы комплексного использования горючих сланцев Белорусской ССР. Минск, 1983.

I. I. LISHTVAN, U. M. DUDARCHYCK, V. M. KRAIKO

vvkraiko@gmail.com

FUELS OF BELARUS AND THE PECULIARITIES OF THEIR DEEP PROCESSING

Summary

This work presents the data on the existing stock, quality indicators of brown coal and oil shale in Belarus, as well as the most appropriate and cost-effective technologies of their deep and complex processing.

ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ

УДК 621.372.413

В. Ф. КРАВЧЕНКО¹, Е. В. КРИВЕНКО², С. А. ЛЕВЧЕНКО³,
В. И. ЛУЦЕНКО², С. В. ПЛЮТА³

СМАРТ-ГРИД ТЕХНОЛОГИИ –
ОСНОВА МОДЕРНИЗАЦИИ СИСТЕМЫ ВОДОСНАБЖЕНИЯ

(Представлено академиком О. Г. Пенязьковым)

¹Институт радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова РАН, Москва²Институт радиофизики и электроники им. А. Я. Усикова НАН Украины, Харьков³Институт тепло- и массообмена им. А. В. Лыкова НАН Беларуси, Минск

Поступило 09.02.2015

Введение. Одной из ключевых проблем XXI в. является обеспечение человечества водой необходимого количества и качества. В связи с этим значительный интерес представляют новые технологии интеллектуальных сетей, получившие название смарт-грид технологии. Такие технологические решения смогут взять на себя функции мониторинга здоровья пользователей, управления качеством воды, а также транспортной и энергетической инфраструктурой городов [1]. Их разработка напрямую связана с созданием интеллектуальных датчиков контроля качества поступающей к потребителю воды, сочетающих ряд особенностей [2; 3].

Основная идея состоит в использовании общей инфраструктуры для транспортировки как технической, так и питьевой воды при временном разделении этих потоков и доводки для требуемого качества воды уже для каждого индивидуального потребителя, что позволит существенно снизить затраты на обеспечение потребителя водой.

Необходимость использования смарт-грид технологий для минимизации затрат на обеспечение потребителей водой. Обычно для подачи воды потребителю используется единая система водоснабжения. Дополнительные системы водоснабжения технической водой в ряде случаев используются для потребителей с большими объемами ее использования и при компактном их расположении, например, в горно-металлургических процессах. Такая вода по содержанию примесей (твёрдых взвесей, эмульсий и растворённых веществ) пригодна для использования в технологических процессах, но непригодна для питья.

Если объем потребляемой питьевой воды составляет $V_0 = \alpha_0 V$, а технической $V_{-1} = \alpha_{-1} V = (1 - \alpha_0) V$ и удельные расходы на подготовку питьевой воды на центральной станции C_0 , технической C_{-1} , то минимальные затраты по обеспечению потребителей водой составляют

$$Z_{\min} = (C_0 \alpha_0 + C_{-1} (1 - \alpha_0)) V.$$

В большинстве случаев потребителям доставляется питьевая вода, которая ими расходуется не только по прямому назначению, но и для технических и бытовых нужд. Затраты при этом составляют

$$Z = C_0 V. \quad (1)$$

Затраты оптимального водоснабжения в существующей схеме составляют

$$\Delta = \frac{Z_{\min}}{Z} = (\alpha_0 + \beta_1 (1 - \alpha_0)), \quad (2)$$

где $\beta_1 = \frac{C_{-1}}{C_0}$ – относительные затраты на приготовление технической воды по сравнению с бытовой (питьевой), а $\alpha_0 = \frac{V_0}{V}$ – определяет часть питьевой воды в общем объеме потребления.

Относительное снижение затрат при этом

$$\Delta_0 = \Delta - 1 = -(1 - \beta_1)(1 - \alpha_0). \quad (3)$$

При оптимальном способе обеспечения потребителя водой затраты составляют (2) примерно 28–55 % от стоимости подготовки воды стандартным способом, т. е. изменение способа подачи воды может дать экономию от 45 до 72 %.

Можно потребителю доставлять только техническую воду и уже он будет доводить ее до необходимой кондиции с удельными затратами средств C_1 . Причем эти расходы $C_1 = C_0 \gamma_1$, где $\gamma_1 \geq 2-3$, т. е. расходы при индивидуальной подготовке воды потребителем обычно более чем в 2–3 раза выше, чем при ее подготовке централизованным способом. Если потребителю подавать техническую воду, а он будет из нее готовить необходимое количество питьевой воды, то затраты составят

$$Z_{\max} = ((C_1 + C_{-1})\alpha_0 + C_{-1}(1 - \alpha_0))V. \quad (4)$$

Как видно из (1), (4) затраты на приготовление питьевой воды при этом будут выше, но поскольку для технических нужд будет использоваться техническая вода, которая приготовлена централизованным способом, то общие затраты могут быть при этом даже меньше, чем при стандартном способе на Δ_1

$$\Delta_1 = (Z_{\max} - Z_0)/Z_0 = (\gamma_1 \alpha_0 + \beta_1(1 - \alpha_0)) - 1, \quad (5)$$

т. е. примерно на 25–67 %.

Следует отметить, что при возрастании затрат потребителя на подготовку питьевой воды из технической γ_1 , как видно из соотношения (5), могут возникать ситуации, когда общие затраты будут выше, чем при стандартном способе поставки потребителю только питьевой воды, в том числе и для технических нужд. Это означает, что при использовании общего водовода для подачи технической и питьевой воды экономические затраты могут снизиться на 45–70 % при согласовании режимов подачи с режимами потребления технической и питьевой воды. В то же время если использовать подачу только технической воды и готовить из нее питьевую индивидуально каждым потребителем, затраты могут снизиться примерно от 25 до 67 %. Задачей предлагаемой смарт-грид технологии подготовки воды и является минимизация экономических затрат на подготовку воды нужного качества.

Если $i \in (0, 1)$ обозначить фазовые состояния подаваемой потребителю воды, причем $i = 0$ будет соответствовать подаче питьевой воды, а $i = 1$ – технической, а под $j \in (0, 1)$ понимать те фазовые состояния воды, потребность в которых имеет потребитель, то все возможные ситуации будут описываться графом переходов, приведенным на рис. 1. При этом возможны следующие ситуации: H_{00} – централизованно подается питьевая вода, когда потребителю тоже необходима питьевая вода, H_{01} – подается питьевая вода, а потребителю в это время необходима техническая вода, H_{11} – подается техническая вода и потребителю необходима в это время техническая вода и H_{10} – подается техническая вода в то время, когда потребителю необходима питьевая вода.

Пусть каждая из ситуаций H_{ij} имеет вероятность p_{ij} . При этом возможны ситуации, когда совпадают потребности в питьевой или технической воде с режимами их подачи (H_{11} , H_{00})

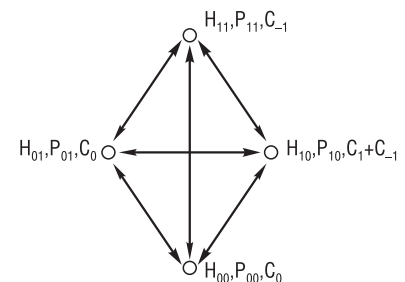


Рис. 1. Граф-схема состояний системы при обеспечении потребителя водой

и когда они не совпадают (H_{10} , H_{01}). При несовпадении потребностей с режимом подачи возникают дополнительные затраты: в H_{10} состоянии C_1 – на индивидуальную подготовку из технической воды – питьевой и в H_{01} состоянии C_0 – за счет использования питьевой воды в качестве технической. Уравнение для затрат на подготовку воды потребителю в общем случае приобретает вид

$$3(P) = (C_0(p_{00} + p_{01}) + C_1 p_{10} + C_{-1}(p_{11} + p_{10}))V. \quad (6)$$

Если вероятности p_{ij} определить через условные вероятности P_{ij} наступления j -го события, при условии, что имело место i -е событие и безусловные вероятности, которые при $i = 0$ равны $p_0 = \alpha_0$, а при $i = 1$ соответственно $p_1 = 1 - \alpha_0$, то, учитывая, что $p_{ij} = p_i P_{ij}$, а $p_{00} + p_{01} = p_0 = \alpha_0$, $p_{10} + p_{11} = p_1 = 1 - \alpha_0$ выражение (6) приобретает вид

$$3(P) = 3_{\min} + C_1(1 - \alpha_0)P_{10}V.$$

Видно, что затраты на подготовку воды при этом превышают минимально возможные на стоимость индивидуальной подготовки из технической воды питьевой.

Изменение затрат по сравнению со стандартным способом подготовки воды составит

$$\Delta(P) = \frac{3(P) - 3_0}{3_0} = -(1 - \beta_1)(1 - \alpha_0) + \gamma_1(1 - \alpha_0)P_{10}. \quad (7)$$

При $\Delta(P_{10} = 0) = -(1 - \beta_1)(1 - \alpha_0)$ (7) совпадает с выражением (3), а при $\Delta(\max P_{10} = \alpha_0) = (1 - \beta_1)(1 - \alpha_0) + \gamma_1\alpha_0(1 - \alpha_0)$.

Процесс, описываемый графом переходов (рис. 1), в общем случае относится к классу полумарковских случайных процессов и его математическое описание может основываться на подходах, изложенных в [4; 5; 15].

Обобщенная модель смарт-грид системы обеспечения потребителя водой. Из природных резервуаров (водоемов, рек и т. п.) вода попадает на станцию очистки, где с использованием различных процедур доводится сначала до качества технической, а при необходимости и питьевой воды. На выходе станции очистки в водопроводную систему в различные интервалы времени суток поступает либо техническая, либо питьевая вода. Они отличаются качеством и соответственно затратами средств на их подготовку. Управляет этим процессом центральный процессор, на который по обратной связи поступает информация от процессоров индивидуальных потребителей о времени использования ими питьевой и технической воды и их расходе. Это позволяет оптимизировать режимы их подачи по центральному водоводу. В процессе транспортировки по водоводу вода подвергается загрязнению. Они могут быть связаны как с подсосыванием загрязнений извне водовода за счет его дефектов, так и внутренними загрязнениями, возникающими, например, при переходе от транспорта технической воды к питьевой воде. Вода, поступив к индивидуальному потребителю, контролируется датчиками контроля качества и используется для заполнения его буферных резервуаров технической и питьевой воды. В случае необходимости пополнения резервуара питьевой воды, при наличии в центральном водоводе технической, подключается фильтр очистки воды индивидуального потребителя. Управляет этим процессор индивидуального потребителя. Датчики воды контролируют ее качество как на входе системы, так и на ее выходах для подачи технической и питьевой воды. Буферные резервуары обеспечивают подачу потребителю воды требуемого качества не зависимо от того, какой тип воды в это время подается по центральному водоводу.

Математическая модель смарт-грид системы водоснабжения. Питьевая вода от технической отличается качеством Q_i , которое является многокритериальной характеристикой, зависящей, в частности, от наличия в воде физических и химических примесей. Качество, по-видимому,

необходимо оценивать относительно некоторого выбранного эталона, которым не может выступать дистиллированная вода, традиционно получаемая в процессе опреснения. В первом приближении для упрощения можно полагать качество воды величиной обратной концентрации вредных примесей $Q \approx c^{-1}$. Затраты на подготовку воды $C = f(c)$ пропорциональны концентрации примесей, а это означает, что они нелинейным образом будут зависеть от требуемого качества воды. При смене режима подачи с питьевой воды на техническую происходит изменение концентрации с c_0 до c_1 . Аналогичным образом при переходе от технической воды к питьевой наблюдается обратное изменение концентрации примесей от c_1 до c_0 . Если длина водовода до i -го потребителя l_i , а скорость распространения потока V_i , то через время $t_i = \frac{l_i}{V_i}$ этот перепад концентрации дойдет до потребителя. Вследствие явления диффузии происходит размывание концентрации, которое описывается уравнением диффузии (теплопереноса) [6].

В одномерном случае фундаментальное решение однородного уравнения (при начальном условии, выражаемом дельта-функцией $c(x, 0) = \delta(x)$ и граничном условии $c(\infty, t) = 0$) есть [6]

$$c(x, t) = \sqrt{\frac{1}{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right). \quad (8)$$

В этом случае $c(x, t)$ можно интерпретировать как плотность вероятности того, что одна частица, находившаяся в начальный момент времени в исходном пункте, через время t перейдет в пункт с координатой x . В случае произвольного начального распределения $c(x, 0)$ общее решение уравнения диффузии представляется в интегральном виде как свёртка [6]:

$$c(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} c(x_1, 0) \sqrt{\frac{1}{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{(x-x_1)^2}{4Dt}\right) dx_1. \quad (9)$$

В случае, если происходит переход от режима подачи питьевой воды к технической, то $c(x_1, 0) = c_0 + (c_1 - c_0)l(x_1)$, где $l(x_1)$ – функция единичного скачка, выражение (9) приобретает вид

$$c(x, t) = c_1 - (c_1 - c_0) \Phi\left(-\frac{x}{\sqrt{2Dt}}\right). \quad (10)$$

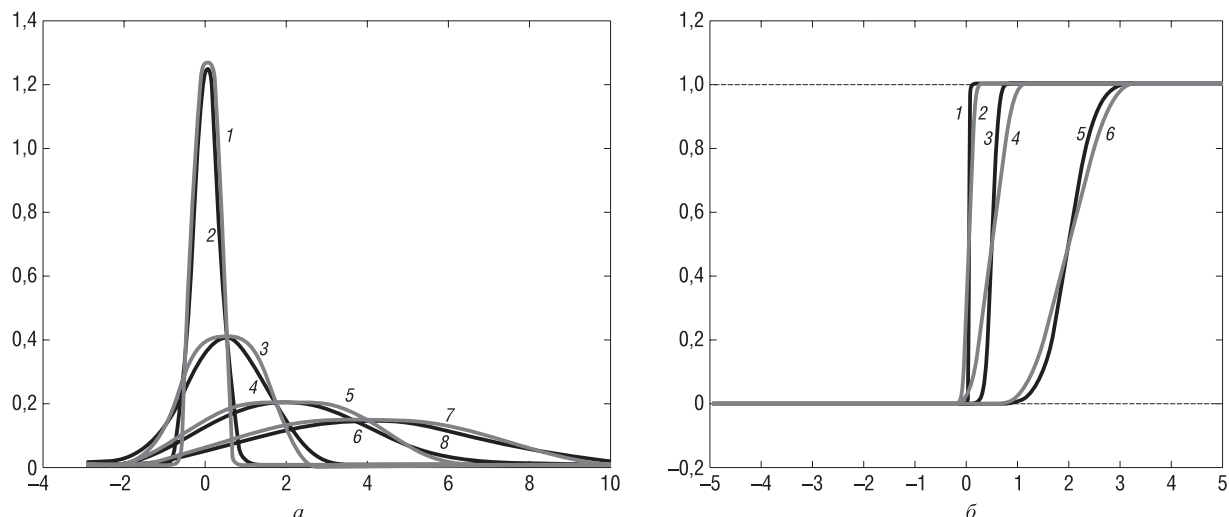


Рис. 2. Распределение плотности (а) и концентрации (б) в различные временные сечения по длине при переходе от питьевой воды к технической: 2, 4, 6, 8 – при использовании гауссовой функции; 1, 3, 5, 7 – при использовании финитных атомарных функций Кравченко; $D = 0,1$; $V_0 = 1$; 1, 2 – $t = 0,05$; 3, 4 – $t = 0,5$; 5, 6 – $t = 2$; 7, 8 – $t = 4$

Из соотношений (9), (10) следует, что с увеличением времени с момента начала импульса происходит увеличение дисперсии флуктуаций концентрации $\sigma_c^2 = 2Dt$ пропорционально коэффициенту диффузии D , а также $\lim_{x \rightarrow \infty} c(x, t) = c_1$, $\lim_{x \rightarrow -\infty} c(x, t) = c_0$.

Соотношение (9) позволяет проследить изменение концентрации примесей в воде как по сечению трубопровода, так и во времени. В качестве примера на рис. 2 показано, как выглядит нормированное распределение концентраций $\hat{c}(x, t) = c(x, t)/c_1$ при $c_0/c_1 \approx 0$ в различных сечениях в разные моменты времени при переходе от подачи питьевой воды к технической.

Следует отметить, что для получения выражений при переходе от подачи технической воды к питьевой необходимо в выражениях (9) поменять $c_1 \rightarrow c_0$, а $c_0 \rightarrow c_1$.

Как видно из приведенных соотношений (8), (9), изменение концентрации по пространственным координатам и во времени подчиняется нормальному закону распределения. Однако для такого закона распределения существует положительная, отличная от нуля вероятность существования неограниченно больших положительных и отрицательных отклонений концентрации относительно медианного значения. Вместе с тем реально они ограничены по величине. Для того чтобы учесть финитность реальных величин, можно использовать для описания распределения не гауссову плотность, а плотность распределения, полученную на основе финитных атомарных функций Кравченко–Рвачева [7–10; 15].

Атомарные функции $up(\xi)$ можно использовать для аппроксимации гауссовых функций (8), (9), которые являются решением уравнения диффузии (теплопереноса) (8). Для этого в уравнениях (8), (9) необходимо гауссовы плотности заменить на плотности, описываемые атомарной функцией Кравченко–Рвачева [7–10; 15]

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(x-m_x)^2}{2\sigma^2}\right) &\rightarrow up\left(\frac{x-m_x}{b}\right), \\ \Phi\left(\frac{(x-m_x)}{\sigma}\right) &= \int_{-\infty}^x \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(x-m_x)^2}{2\sigma^2}\right) dx \rightarrow \\ \Phi up\left(\frac{(x-m_x)}{b}\right) &= \int_{-\infty}^x \frac{1}{b} up\left(\frac{(x-m_x)}{b}\right) dx, \end{aligned}$$

где $m_x = V_0 t$, $b = \sqrt{2\pi}\sigma$.

При этом $b \approx \sigma$, т. е. при аппроксимации гауссова распределения, задаваемого атомарной функцией Кравченко, среднеквадратичные значения их примерно одинаковы.

На рис. 2 показаны эти аппроксимации для разных временных сечений для ситуации перехода от подачи питьевой к технической воде. Видно, что в отличие от стандартного закона в этом случае в энергичной области наблюдаются несколько большие значения, в то время как на хвостах они меньше.

Система управления смарт-грид водоснабжением с применением математики нечетких множеств. В системах управления интеллектуальным водоснабжением жилых зданий или городских кварталов, в случаях неполноты данных, применяются системы, основанные на математике нечетких множеств (fuzzy sets) и нечеткой логике (fuzzy logics). В ситуациях, когда некоторые параметры функционирования системы не известны с достаточной точностью, и необходимо применять нечеткие знания или экспертные оценки, подобный подход успешно решает задачи управления с высокой степенью надежности. Задача обеспечения потребителей достаточным количеством воды различной степени очистки является многокритериальной задачей оптимизации модели с неизвестными параметрами [14], которые могут быть представлены нечеткими числами. Даже сама цель управления – «обеспечение достаточным количеством», имеет ярко выраженную нечет-

кость в самой постановке [12; 13]. С одной стороны, необходимо обеспечить надежность водоснабжения, а с другой стороны – обеспечить эффективность и минимум затрат реализации решения.

Для этого случая задача многокритериального анализа определена как процесс нахождения минимума нечеткого отклика $\tilde{Z}$ от вектора $\tilde{X}$ решения на наборах нечетких функций

$$\tilde{Z}(\tilde{X}) = \{\tilde{f}_1(\tilde{x}), \tilde{f}_2(\tilde{x}), \dots, \tilde{f}_n(\tilde{x})\},$$

где $\tilde{f}_j(\tilde{x})$ – целевые нечеткие функции, определенные на векторах $\tilde{X}$ нечетких критериев.

Для нахождения решения используются модифицированные для математики нечетких чисел градиентные и неградиентные методы поиска оптимума регрессионных моделей [14].

В нашем случае используется метод нахождения решения по градиентному методу, а именно, метод нахождения нулей градиента функции отклика $Y(X)$ вблизи точки $X^0(X_1^0, X_2^0, \dots, X_n^0)$:

$$\text{grad}Y(X) = \left(\frac{\partial Y}{\partial X_1} \Big|_{X_0}, \frac{\partial Y}{\partial X_2} \Big|_{X_0}, \dots, \frac{\partial Y}{\partial X_n} \Big|_{X_0} \right).$$

Или для приближенного случая и переходя к нечетким числам, решение нечеткого полинома вида

$$\tilde{B}_0 - \tilde{B}_1(\tilde{X}_1 - X_1^0) + \tilde{B}_2(\tilde{X}_2 - X_2^0) - \dots + \tilde{B}_n(\tilde{X}_n - X_n^0).$$

Таким образом, в случае неполноты данных достигается оптимизированное решение распределения ресурсов для смарт-сетей водоснабжения.

Заключение. Применение принципов временного разделения при подаче в водовод технической и питьевой воды в сочетании со смарт-грид технологиями контроля и доводки до необходимого качества воды для отдельных потребителей позволят существенно снизить затраты и служат основой для будущего устойчивого развития общества.

Математическая модель смарт-грид системы водоснабжения может строиться с использованием нестационарного уравнения диффузии. Для учета конечности изменения концентрационных зависимостей вместо гауссовых плотностей распределения могут использоваться финитные атомарные функции Кравченко–Рвачева.

Литература

1. Кривенко Е. В., Левченко С. А., Луценко В. И. // Наука и технология как основы модернизации для будущего устойчивого развития. Конференция 18–21 сент. 2014. Минск, 2014. С. 57–61.
2. Golubnichaya G. V., Kirichenko A. Ya., Krivenko E. V., Lutsenko V. I. // The 42nd European Microwave Conference, 2012, EuMA, 29 Oct–1 Nov 2012, Amsterdam. Amsterdam, 2012. P. 1324–1327.
3. Голубничая Г. В., Кириченко А. Я., Кривенко Е. В., Луценко В. И. // Радиофизика и электроника. 2014. Т. 5(19), № 2. С. 94–99.
4. Кравченко В. Ф., Луценко В. И., Масалов С. А., Пустовойт В. И. // ДАН РАН. 2013. Т. 453, № 2. С. 151–154.
5. Kravchenko V. F., Lutsenko V. I., Lutsenko I. V., Popov D. O. // J. of Measurement Science and Instrumentation. 2014. Vol. 5, N 3. P. 25–32.
6. Тихонов А. Н., Самарский А. А. Уравнения математической физики. М, 1972. – 735 с.
7. Рвачев В. Л., Рвачев В. О. // Доповіді академії наук УРСР. Серія А. 1971. Вип. 7. С. 705–707.
8. Кравченко В. Ф., Кравченко О. В., Пустовойт В. И., Чуриков Д. В. // Физические основы приборостроения: спец. вып. Ноябрь. 2011. С. 3–48.
9. Kravchenko V. F., Churikov D. V., Kravchenko O. V. // J. of Measurement Science and Instrumentation. 2013. Vol. 4, N 3. P. 231–237.
10. Кравченко В. Ф., Кравченко О. В., Сафин А. Р. // Успехи современной радиоэлектроники. 2009. № 5. С. 23–37.
11. Красовский Г. И., Филаретов Г. Ф. Планирование эксперимента. Минск, 1982.
12. Беллман Р., Заде Л. // Вопросы анализа и процедуры принятия решений: сб. переводов / под ред. И. Ф. Шахнова. М., 1976. С. 173–215.
13. Lotfi A. Zadeh // Information Sciences. 2008. Vol. 178. P. 2751–2779.

14. Плюта С. В., Левченко С. А. // Наука и технология как основы модернизации для будущего устойчивого развития SSF-2014: материалы научн. конф. (18–21 сент. 2014 г., г. Минск) / редкол.: С. А. Левченко, Е. А. Кузей. Минск, 2014. С. 26–27.

15. Кравченко В. Ф., Кравченко О. В., Пустовойт В. И., Чуриков Д. В. // Раднотехника и електроника. 2014. Т. 59, № 10. С. 949–978.

V. F. KRAVCHENKO, O. V. KRIVENKO, S. A. LEVCHENKO, V. I. LUTSENKO, S. V. PLUYTA

kvf-ok@mail.ru; lutsenko@ire.kharkov.ua; lev@hmti.ac.by

SMART GRID TECHNOLOGY IS THE BASIS OF MODERNIZATION OF A WATER SUPPLY SYSTEM

Summary

It is shown that the possibility of using the smart grid technology for organizing a water supply system, which will ensure the future sustainable development of society, is described by the mathematical model.

УДК 621.382.019.3

С. М. БОРОВИКОВ, Е. Н. ШНЕЙДЕРОВ, И. А. БУРАК

**МОДЕЛИ НА ОСНОВЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ВЕЙБУЛЛА–ГНЕДЕНКО
ДЛЯ ОПИСАНИЯ ДЕГРАДАЦИИ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ПАРАМЕТРОВ ИЗДЕЛИЙ
ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕХНИКИ**

(Представлено академиком А. П. Достанко)

*Белорусский государственный университет информатики
и радиоэлектроники, Минск**Поступило 28.01.2015*

Введение. При работе изделия электронной техники (ИЭТ) его электрический функциональный параметр (обозначим через y) изменяется, говорят деградирует, и может рассматриваться как функция времени t . Деградация функционального параметра обуславливает появление постепенного отказа ИЭТ. Критериями этого отказа являются уровни изменения функционального параметра, ниже или выше которых ИЭТ, согласно технической документации или требований потребителя, считается отказавшим. Постепенные отказы определяют такое понятие, как параметрическая надёжность, которая характеризует способность ИЭТ сохранять уровень функционального параметра $y(t)$ в пределах норм (от α до β) в течение заданного времени работы (наработки) t_3 при выбранных режимах и условиях работы. Количественной мерой параметрической надёжности является вероятность нахождения параметра $y(t)$ в пределах этих норм в течение заданной наработки t_3 , т. е.

$$P_{\Pi}(t_3) = \text{Вер}\{\alpha \leq y(t) \leq \beta, t \leq t_3\} = P\{\alpha \leq y(t) \leq \beta, t \leq t_3\}, \quad (1)$$

где запись «Вер» означает вероятность, далее её будем заменять символом P .

Прогнозирование параметрической надёжности ИЭТ может быть выполнено по модели деградации функционального параметра (модели постепенного отказа), обычно применяется для высоконадёжных изделий и позволяет в условиях производства эффективно выполнять нормирование уровня параметрической надёжности выборок ИЭТ, поставляемых потребителям [1; 2].

Актуальность исследований. В работах [3; 4] для прогнозирования параметрической надёжности выборок ИЭТ было предложено использовать математическую модель деградации функционального параметра $y(t)$ в виде условной плотности его распределения $f(y | t)$ для заданной наработки изделий t . Эту модель для интересующего типа ИЭТ получают один раз с помощью предварительного экспериментального исследования, называемого обучающим экспериментом, определённой выборки, взятой случайным образом из партии ИЭТ [3; 4]. Полученную модель деградации функционального параметра $y(t)$ можно использовать в начальный момент времени ($t = 0$) для прогнозирования параметрической надёжности новых выборок этого же типа ИЭТ для интересующих будущих наработок. Под новыми здесь понимают те выборки, входящие в рассматриваемую партию ИЭТ, экземпляры которых не принимали участия в обучающем эксперименте.

Прогнозирование надёжности новых выборок ИЭТ основано на гипотезе о том, что количественная характеристика параметрической надёжности $P_{\Pi}(t_3)$, определяемая выражением (1), может быть получена на основе знания закона распределения функционального параметра $y(t)$ в начальный момент времени, например, условной плотности распределения $f(y | t = 0)$, а также её изменения при наработке ИЭТ. Интересующее значение $P_{\Pi}(t_3)$ является результатом изменения статистического распределения $f(y | t)$ при наработке ИЭТ.

Приближённое аналитическое выражение условной плотности распределения $f(y | t)$ для любой интересующей наработки $t = t_3$ может быть получено путём математических преобразований начального распределения $f(y | t = 0)$:

$$f(y | t = t_3) = \psi[f(y | t = 0), t_3], \quad (2)$$

где ψ – символ функциональной зависимости.

Физико-химические характеристики деградации функционального параметра $y(t)$, получаемые усреднением по исследуемой выборке ИЭТ, войдут в виде коэффициентов в правую часть выражения (2).

Прогнозное значение количественной характеристики параметрической надёжности $P_n(t_3)$ определяют по принятым в теории вероятностей правилам нахождения вероятностей вида $P_n(t_3) = P\{\alpha \leq y(t) \leq \beta, t \leq t_3\}$, используя закон распределения случайных величин [4].

В работах [2; 3] за основу получения модели деградации взят традиционно используемый в электронике [6] нормальный закон распределения функционального параметра $y(t)$. Условная плотность распределения $f(y | t)$ для рассматриваемого временного сечения t в этом случае зависит от двух параметров – $m(y | t)$ и $\sigma(y | t)$, представляющих собой соответственно среднее значение и среднее квадратическое отклонение функционального параметра $y(t)$ во временном сечении t . В соответствии с (2) значения $m(y | t)$ и $\sigma(y | t)$ определяются как функции наработки t и величин $m(y | t = 0)$ и $\sigma(y | t = 0)$, являющихся параметрами нормального закона в начальный момент времени ($t = 0$):

$$m(y | t) = \varphi_1[t, m(y | t = 0), \sigma(y | t = 0)]; \quad (3)$$

$$\sigma(y | t) = \varphi_2[t, m(y | t = 0), \sigma(y | t = 0)]. \quad (4)$$

Модель деградации, основанная на нормальном законе распределения, является классической и имеет недостатки из-за того, что в ряде случаев закон распределения функциональных параметров ИЭТ может значительно отличаться от нормального. Например, для ИЭТ большой мощности выполняемые выходные контрольные операции, проведение тренировки и затем дальнейшая эксплуатация могут заметно деформировать нормальный закон распределения параметра $y(t)$ во временных сечениях. Это приведёт к значительным ошибкам прогнозирования параметрической надёжности новых выборок ИЭТ при использовании модели деградации параметров, основанной на гипотезе о нормальном законе распределения. Поэтому актуальной является задача выбора такой модели деградации, которая давала бы хорошие результаты прогнозирования в случае нормального закона распределения функционального параметра ИЭТ и в то же время реагировала бы на возможные отклонения закона распределения от нормального. При этом для практики модель деградации функциональных параметров ИЭТ желательно получать, основываясь на каком-то одном, в определённой степени универсальном, законе распределения.

Новая модель деградации. Предлагается модель на основе смещённого (трёхпараметрического) распределения Вейбулла–Гнеденко [5; 7], в соответствии с которым условная плотность распределения функционального параметра y выборки ИЭТ в любом временном сечении t (модель деградации) запишется в виде

$$f(y | t) = \frac{b}{a} \left(\frac{y | t - c}{a} \right)^{b-1} \exp \left[- \left(\frac{y | t - c}{a} \right)^b \right] \text{ при } y | t > c, \quad (5)$$

где $y | t$ – значение рассматриваемого функционального параметра ИЭТ, соответствующее наработке t ; a, b, c – параметры распределения, найденные для временного сечения t ; a – параметр масштаба ($a > 0$); b – параметр формы ($b > 0$); c – параметр сдвига (смещения), показывающий смещение y относительно его нулевого значения.

Аргументом в пользу выбора трёхпараметрического распределения Вейбулла–Гнеденко в качестве основы модели деградации для ИЭТ является вид гистограмм распределения их функциональных параметров, полученных по экспериментальным данным. На рис. 1 и 2 показаны гистограммы распределения, построенные по опытным данным для временного сечения $t = 17280$ ч,

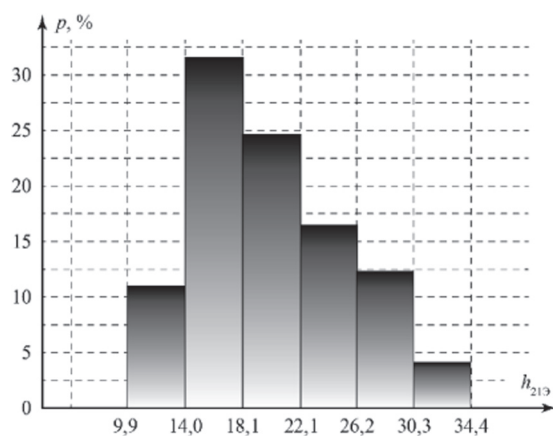


Рис. 1. Гистограмма распределения параметра $h_{21Э}$ для наработки $t = 17280$ ч

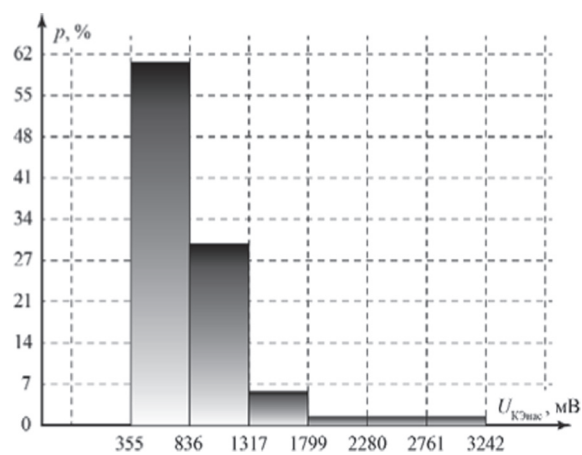


Рис. 2. Гистограмма распределения параметра $U_{КЭнас}$ для наработки $t = 17280$ ч

таких функциональных параметров биполярных транзисторов (БТ) большой мощности типа КТ872А, как $h_{21Э}$ – статический коэффициент передачи тока базы в схеме с общим эмиттером и $U_{КЭнас}$ – напряжение насыщения коллектор-эмиттер. На вертикальных осях координатных сеток указаны относительные частоты p (в %) попадания функциональных параметров в интервалы значений.

На рис. 1 видно, что огибающая линия гистограммы распределения параметра $h_{21Э}$ напоминает колоколообразную кривую, похожую на кривую Гаусса, однако гипотеза о нормальном законе распределения не подтверждается статистическими критериями согласия χ^2 -Пирсона и Колмогорова. Гипотеза о трёхпараметрическом распределении Вейбулла–Гнеденко не противоречит статистическим критериям согласия. По экспериментальным данным получены оценки параметров a , b и c этого распределения, указанные в табл. 1.

Таблица 1. Значения параметров распределений, полученных по опытным данным

Функциональный параметр БТ	Временное сечение t , ч	Параметры нормального закона		Параметры распределения Вейбулла–Гнеденко		
		m	σ	a	b	c
$h_{21Э}$	0	22,12	5,83	17,04	3,02	6,94
	17 280	19,82	5,16	14,53	2,73	6,91
$U_{КЭнас}$	0	604,1 мВ	187,1 мВ	181,8 мВ	0,98	352 мВ
	17 280	878,4 мВ	479,0 мВ	350,4 мВ	0,82	467 мВ

Для функционального параметра $U_{КЭнас}$, как видно на рис. 2, распределение заметно отличается от нормального закона, его экспериментальные данные не противоречат гипотезе о трёхпараметрическом распределении Вейбулла–Гнеденко с оценками параметров распределения a (в мВ), b и c (в мВ), указанными в табл. 1. Для обоих функциональных параметров ($h_{21Э}$ и $U_{КЭнас}$) приводятся также оценки a , b и c для временного сечения $t = 0$ (начальный момент времени) и оценки величин m и σ в предположении нормального закона распределения.

Предлагаемая модель деградации (5) является в определённой степени универсальной, поскольку для выборок ИЭТ достаточно хорошо описывает изменение функционального параметра y при любом характере его деградации, т. е. при любом виде кривой его плотности распределения, которая реально может иметь место для ИЭТ. Например, при $b = 1$ распределение (5) совпадает с двухпараметрическим экспоненциальным распределением, при $c = 0$ – классическим (двухпараметрическим) распределением Вейбулла–Гнеденко, при $b = 2$ – распределением Рэлея с параметром масштаба $a / \sqrt{2}$. В случае $b > 3 \dots 5$ распределение (5) незначительно отличается от нормального закона.

В соответствии с выражением (2) значения a , b и c модели (5) для заданной наработки t можно получать как функции наработки t и величин a_0 , b_0 и c_0 , являющихся параметрами трёхпараме-

трического распределения Вейбулла–Гнеденко для временного сечения $t = 0$ (начальный момент времени). Однако для практических приложений интерес представляет определение значений a , b и c как функций наработки t и основных числовых характеристик функционального параметра y в начальный момент времени – среднего значения $m(y | t = 0)$ и среднего квадратического отклонения $\sigma(y | t = 0)$:

$$a = \varphi_1[t, m(y | t = 0), \sigma(y | t = 0)]; \quad (6)$$

$$b = \varphi_2[t, m(y | t = 0), \sigma(y | t = 0)], \quad (7)$$

$$c = \varphi_3[t, m(y | t = 0), \sigma(y | t = 0)]. \quad (8)$$

Для получения операторов φ_1 , φ_2 , φ_3 функциональных зависимостей (6)–(8) предлагается метод [2], согласно которому обучающая выборка (ОВ) после завершения ускоренных испытаний разбивается на несколько групп и формируется таблица результатов пассивного факторного эксперимента (табл. 2), в которой приняты следующие обозначения: $n_1, n_2, \dots, n_q$ – номер экземпляра обучающей выборки, отвечающий последнему элементу соответствующей группы; q – число групп; k – число временных сечений; t_i – момент времени (временное сечение), для которого контролировались значения функциональных параметров при их деградации в процессе ускоренных испытаний ИЭТ, $i = 0, 1, \dots, k$.

Т а б л и ц а 2. Результаты пассивного факторного эксперимента

Номер экземпляра ОВ	Номер группы	Факторы			Функция отклика				
		$m_0 = m(y t=0)$	$\sigma_0 = \sigma(y t=0)$	Временное сечение t_i	a	b	c	$m(y t_i)$	$\sigma(y t_i)$
$1 \dots n_1$	1	$m_0^{(1)}$	$\sigma_0^{(1)}$	t_0	$a^{(1)}(t_0)$	$b^{(1)}(t_0)$	$c^{(1)}(t_0)$	$m^{(1)}(y t_0)$	$\sigma^{(1)}(y t_0)$
$(n_1 + 1) \dots n_2$	2	$m_0^{(2)}$	$\sigma_0^{(2)}$	t_0	$a^{(2)}(t_0)$	$b^{(2)}(t_0)$	$c^{(2)}(t_0)$	$m^{(2)}(y t_0)$	$\sigma^{(2)}(y t_0)$
...	...	...	...	...	...	...	...	...	...
$(n_{q-1} + 1) \dots n_q$	q	$m_0^{(q)}$	$\sigma_0^{(q)}$	t_0	$a^{(q)}(t_0)$	$b^{(q)}(t_0)$	$c^{(q)}(t_0)$	$m^{(q)}(y t_0)$	$\sigma^{(q)}(y t_0)$
$1 \dots n_1$	1	$m_0^{(1)}$	$\sigma_0^{(1)}$	t_1	$a^{(1)}(t_1)$	$b^{(1)}(t_1)$	$c^{(1)}(t_1)$	$m^{(1)}(y t_1)$	$\sigma^{(1)}(y t_1)$
$(n_1 + 1) \dots n_2$	2	$m_0^{(2)}$	$\sigma_0^{(2)}$	t_1	$a^{(2)}(t_1)$	$b^{(2)}(t_1)$	$c^{(2)}(t_1)$	$m^{(2)}(y t_1)$	$\sigma^{(2)}(y t_1)$
...	...	...	...	...	...	...	...	...	...
$(n_{q-1} + 1) \dots n_q$	q	$m_0^{(q)}$	$\sigma_0^{(q)}$	t_1	$a^{(q)}(t_1)$	$b^{(q)}(t_1)$	$c^{(q)}(t_1)$	$m^{(q)}(y t_1)$	$\sigma^{(q)}(y t_1)$
...	...	...	...	...	...	...	...	...	...
$1 \dots n_1$	1	$m_0^{(1)}$	$\sigma_0^{(1)}$	t_k	$a^{(1)}(t_k)$	$b^{(1)}(t_k)$	$c^{(1)}(t_k)$	$m^{(1)}(y t_k)$	$\sigma^{(1)}(y t_k)$
$(n_1 + 1) \dots n_2$	2	$m_0^{(2)}$	$\sigma_0^{(2)}$	t_k	$a^{(2)}(t_k)$	$b^{(2)}(t_k)$	$c^{(2)}(t_k)$	$m^{(2)}(y t_k)$	$\sigma^{(2)}(y t_k)$
...	...	...	...	...	...	...	...	...	...
$(n_{q-1} + 1) \dots n_q$	q	$m_0^{(q)}$	$\sigma_0^{(q)}$	t_k	$a^{(q)}(t_k)$	$b^{(q)}(t_k)$	$c^{(q)}(t_k)$	$m^{(q)}(y t_k)$	$\sigma^{(q)}(y t_k)$

Первые два столбца табл. 2 задают номер опыта пассивного эксперимента. Величины m_0 , σ_0 и t_i ($i = 0, 1, \dots, k$) рассматриваются в роли факторов (аргументов), а интересующие параметры a , b и c модели (5) – в качестве функций отклика. Нижний индекс нуль величин m и σ указывает, что они относятся к начальному моменту времени $t = 0$. Верхние индексы всех величин указывают на номер группы, которой соответствуют величины. В последние два столбца помещены значения величин $m(y | t_i)$, $\sigma(y | t_i)$, рассматриваемых также в качестве функций отклика и используемых для построения модели деградации, основанной на гипотезе о нормальном законе распределения функционального параметра y во временных сечениях, при этом $m^{(r)}(y | t_0) = m_0^{(r)}$ и $\sigma^{(r)}(y | t_0) = \sigma_0^{(r)}$, где $r = 1, 2, \dots, q$.

Вид операторов φ_1 , φ_2 , φ_3 зависимостей (6)–(8) определяется путём обработки результатов пассивного факторного эксперимента. Условная плотность распределения (5), полученная с учётом выражений (6)–(8), является моделью деградации рассматриваемого функционального параметра y и может быть использована для прогнозирования параметрической надёжности новых выборок ИЭТ исследуемого типа.

Групповое прогнозирование параметрической надёжности по предлагаемой модели. При таком прогнозировании прогноз получают в виде вероятности того, что функциональный параметр y выборки ИЭТ в течение интересующей наработки t_i не выйдет за пределы норм (от α до β), указанных в технической документации или установленных потребителем ИЭТ [2]. Для расчёта этой вероятности $P_{\Pi}(t_i)_{\text{пр}}$ в соответствии с выражением (2) и моделью деградации (5) получена следующая формула:

$$P_{\Pi}(t_i)_{\text{пр}} = \exp \left\{ - \left[\frac{\alpha - c(t_i)}{a(t_i)} \right]^{b(t_i)} \right\} - \exp \left\{ - \left[\frac{\beta - c(t_i)}{a(t_i)} \right]^{b(t_i)} \right\}, \quad (9)$$

где α , β – нижняя и верхняя границы норм, устанавливаемых на параметр y ; $a(t_i)$, $b(t_i)$ и $c(t_i)$ – значения величин a , b и c модели (5), рассчитанные по выражениям (6)–(8) для наработки t_i .

Экспериментальные испытания и методика их проведения. Предложенная модель деградации (5) была апробирована на БТ большой мощности типа КТ872А (как группы ИЭТ). В качестве функциональных параметров рассматривались $h_{21Э}$ и $U_{КЭнас}$, электрические режимы измерения которых отвечали требованиям технической документации БТ. Модель деградации вида (5) строилась по обучающей выборке объёмом $n = 100$ экземпляров. Для получения данных о деградации функциональных параметров использовалось физическое моделирование наработок транзисторов, состоящее в проведении для них по типовым методикам ускоренных форсированных испытаний [8–10], эквивалентных наработке 17280 ч в нормальных условиях работы.

Проверка эффективности построенной модели деградации выполнялась на контрольной выборке объёмом также 100 экземпляров. Применительно к ней по предложенной модели деградации с использованием (9) решалась задача группового прогнозирования параметрической надёжности для четырёх временных сечений t_i (3840, 8320, 12800 и 17280 ч). Далее выполнялись ускоренные форсированные испытания транзисторов и контролировались значения их функциональных параметров $h_{21Э}$ и $U_{КЭнас}$ в указанных временных сечениях. Используя полученные данные, с учётом норм, назначаемых на параметры $h_{21Э}$ и $U_{КЭнас}$, были определены экспериментальные оценки уровня параметрической надёжности контрольной выборки для указанных временных сечений.

Сравнивая экспериментальный (действительный) и прогнозный уровни параметрической надёжности, была рассчитана средняя ошибка прогнозирования $\Delta_{\text{ср}}$ [2], по значению которой делался вывод об эффективности предлагаемой модели деградации.

Эффективность модели деградации. Для получения выражений (6)–(8), используемых для расчёта параметров a , b и c предлагаемой модели деградации (5), обучающая выборка разбивалась на три группы по 33 экземпляра в каждой из них. Для каждой группы и всех рассматриваемых временных сечений t_i ($i = 0, 1, \dots, 4$) были получены значения a , b , c модели (5) и значения $m(y | t)$, $\sigma(y | t)$ модели деградации, основанной на нормальном законе, и с учётом этого сформированы результаты пассивного факторного эксперимента согласно данным табл. 2.

По результатам обработки пассивного факторного эксперимента выражения вида (6)–(8) для параметра $h_{21Э}$ получены в виде

$$a = -7,1994m_0 + 30,8412\sigma_0 - 0,442t^{0,2}; \quad (10)$$

$$b = 0,1391m_0 - 0,002246t^{0,5}; \quad (11)$$

$$c = 8,0045m_0 - 29,7228\sigma_0, \quad (12)$$

где $m_0 = m(y | t = 0)$, $\sigma_0 = \sigma(y | t = 0)$ – среднее значение и среднее квадратическое отклонение функционального параметра y , соответствующие начальному моменту времени для новой выборки ИЭТ, параметрическая надёжность которой будет прогнозироваться; t – заданная наработка, для которой интересуются параметрической надёжностью ИЭТ.

Уравнения регрессии, аналогичные (10)–(12), получены и для параметра $U_{КЭнас}$.

Чтобы сравнить эффективность предложенной модели деградации (5) с моделью, основанной на нормальном законе распределения функционального параметра y , были получены также уравнения регрессии для величин $m(y | t)$ и $\sigma(y | t)$ с учётом выражений (3) и (4).

При выполнении группового прогнозирования параметрической надёжности контрольной выборки условие (1) для функциональных параметров $h_{21Э}$ и $U_{КЭнас}$ выбрано в виде $h_{21Э} \geq h_{потр}$ и $U_{КЭнас} \leq U_{потр}$, где $h_{потр}$, $U_{потр}$ – устанавливаемая потребителем норма на соответствующий функциональный параметр. Само прогнозирование выполнялось для всех временных сечений t_i , кроме $t = 0$ (начальный момент времени). В случае использования модели деградации (5) характеристика надёжности $P_n(t_i)$ определялась по формуле (9) с учётом параметров a , b и c , рассчитанных по уравнениям регрессии для соответствующего временного сечения t_i ($i = 1, 2, \dots, 4$). В случае модели деградации, основанной на гипотезе о нормальном законе, для прогнозирования использовалась общепринятая формула определения вероятности попадания случайной величины в интервал значений [5] с учётом величин $m(y | t_i)$ и $\sigma(y | t_i)$, рассчитанных по полученным уравнениям регрессии для временного сечения t_i .

Значения средней ошибки прогнозирования $\Delta_{ср}$, подсчитанные для разных норм, устанавливаемых на функциональные параметры $h_{21Э}$ и $U_{КЭнас}$, приведены в табл. 3 и 4. Ошибка определена для двух гипотез распределения $h_{21Э}$ и $U_{КЭнас}$ во временных сечениях t_i : нормальный закон и трёхпараметрическое распределение Вейбулла–Гнеденко.

Таблица 3. Значения средней ошибки прогнозирования $\Delta_{ср}$ параметрической надёжности, параметр $h_{21Э}$

Закон, используемый для получения модели деградации	Средняя ошибка прогнозирования $\Delta_{ср}$ (%) при норме на параметр $h_{потр}$								
	15	16	17	18	19	20	21	22	23
Нормальный	5,4	6,5	9,4	9,8	7,8	9,4	9,9	12,9	20,1
Распределение Вейбулла–Гнеденко	3,2	3,8	3,4	4,0	5,2	8,4	9,4	12,9	5,8

Таблица 4. Значения средней ошибки прогнозирования $\Delta_{ср}$ параметрической надёжности, параметр $U_{КЭнас}$

Закон, используемый для получения модели деградации	Средняя ошибка прогнозирования $\Delta_{ср}$ (%) при норме на параметр $U_{потр}$, В								
	0,7	0,8	0,9	1,0	1,2	1,4	1,6	1,8	2,0
Нормальный	24,9	16,1	15,2	11,7	6,1	1,7	2,2	1,9	2,6
Распределение Вейбулла–Гнеденко	5,6	6,2	3,2	2,4	2,3	0,8	0,9	0,8	0,9

Заключение. На примере биполярных транзисторов показано, что математическая модель деградации функционального параметра в виде условной плотности его распределения для заданной наработки, получаемая на основе трёхпараметрического распределения Вейбулла–Гнеденко, обеспечивает меньшие ошибки прогнозирования параметрической надёжности новых выборок БТ по сравнению с моделью деградации на основе нормального закона распределения для случаев, когда функциональный параметр во временных сечениях распределён по закону как близкому к нормальному (функциональный параметр $h_{21Э}$, табл. 3), так и заметно отличающемуся от него (функциональный параметр $U_{КЭнас}$, табл. 4).

Трёхпараметрическое распределение Вейбулла–Гнеденко в определённой степени следует считать универсальным, поскольку для выборок ИЭТ оно достаточно хорошо описывает деградацию функционального параметра при любом виде экспериментального закона распределения, который может иметь место для функциональных параметров ИЭТ.

Литература

1. Coit D. W., Evans J. L., Vogt N. T., Thomson J. R. // Quality and Reliability Engineering International. 2005. N 21. P. 715–726.
2. Боровиков С. М. Статистическое прогнозирование для отбраковки потенциально ненадёжных изделий электронной техники. М., 2013.
3. Боровиков С. М., Шалак А. В., Бересневич А. И., Емельянов А. В. // Докл. НАН Беларуси. 2007. Т. 51, № 6. С. 105–109.
4. Боровиков С. М., Шалак А. В., Бересневич А. И. и др. // Докл. БГУИР: электроника, материалы, технологии, информатика. 2008. № 6 (36). С. 32–39.
5. Вадзинский Р. Н. Справочник по вероятностным распределениям. СПб., 2001.
6. Физические основы надёжности интегральных схем / Под ред. Ю. Г. Миллера. М., 1976.

7. Прикладная статистика: Правила определения оценок и доверительных границ для параметров распределения Вейбулла: ГОСТ 11.007–75. М., 1980.
8. Peattie D. S., Adams J. D., Carreli S. L. et al. // Proc. IEEE. 1974. Vol. 62, N 2. P. 149–168.
9. Quick Logic Reliability Report / pASIC, Vialink and Quick Logic Corp. Orleans, 1998.
10. Reliability Audit Report 1999. Life Test Data. ON Semiconductor L. L. C., Formerly a Division of Motorola, 1999.

S. M. BOROVIKOV, E. N. SHNEIDEROV, I. A. BURAK

shneiderovevgeni@gmail.com; bsm@bsuir.by

**MODELS BASED ON THE WEIBULL–GNEDENKO DISTRIBUTION FOR THE DESCRIPTION
OF THE DEGRADATION OF FUNCTIONAL PARAMETERS OF ELECTRONIC DEVICES**

Summary

The authors offer to get a mathematical model of degradation of a functional parameter in the form of the conditional density of its distribution for a given operating time on the basis of the three-parameter Weibull-Gnedenko distribution. This provides prediction errors of reliability for samples of electronic devices, which are smaller than the errors after using the degradation model on the basis of a normal distribution of the functional parameter.

АГРАРНЫЕ НАУКИ

УДК 636.4.082.12

Академик И. П. ШЕЙКО, Р. И. ШЕЙКО

ОЦЕНКА ОБЩЕЙ, СПЕЦИФИЧЕСКОЙ И АССОЦИАТИВНОЙ
КОМБИНАЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ МАТЕРИНСКИХ И ОТЦОВСКИХ ФОРМ
РАЗЛИЧНЫХ ПОРОД СВИНЕЙ

НПЦ НАН Беларуси по животноводству, Жодино

Поступило 23.03.2015

Введение. Увеличение откормочной и мясной продуктивности свиней, получение стабильного эффекта гетерозиса при скрещивании и гибридизации требует совершенствования существующих и создания новых линий с высокой мясностью, хорошо сочетающихся на гетерозисный эффект и стойко передающих свои качества потомкам, помесям и гибридам не только в первом, но и в последующих поколениях. В результате линейного разведения создаются животные с высокой наследственной устойчивостью. Возрастает гомозиготность и в то же время сохраняется достаточная изменчивость хозяйственно полезных признаков [1–5].

Используя только характеристику абсолютных показателей продуктивности, трудно дать объективную оценку породе или линии и определить их значимость при отборе. На основании концепции ассоциативного отбора наиболее ценным генотипом для селекции является высоко интегрированный генотип, поэтому выявление и анализ структуры связей признаков, а также количественной характеристики комплекса признаков представляет собой одну из важнейших задач ассоциативного отбора [6–10].

Материалы и методы исследований. Для выбора оптимальной программы селекции свиней крупной белой, белорусской черно-пестрой, белорусской мясной и породы дюрок нами проведена оценка их общей (ОКС), специфической (СКС) и ассоциативной (АКС) комбинационной способности по методу В. К. Савченко и ассоциативный подбор отцовских и материнских форм для расчета гетерозисного потенциала сочетаний.

Генетическому анализу подвергнуты показатели продуктивности 2718 маток крупной белой породы (КБ), 1009 – белорусской черно-пестрой (БЧ), 1048 – белорусской мясной (БМ) и 625 – дюрок (Д) из ведущих племзаводов и СГЦ. У 2545 голов чистопородного и 646 голов гибридного молодняка проведен генетический анализ показателей откормочной и мясной продуктивности.

Результаты и их обсуждение. Установлено, что положительная комбинационная способность по многоплодию имеет место у животных крупной белой и белорусской черно-пестрой пород, а также у материнской формы белорусской мясной, отрицательная – у отцовской формы белорусской мясной и дюрок (табл. 1).

Таблица 1. Эффекты общей комбинационной способности репродуктивных качеств

Показатель продуктивности	Материнские формы				Отцовские формы			
	КБ	БЧП	БМ	Д	КБ	БЧП	БМ	Д
Многоплодие	0,10	0,22	0,13	0,11	0,18	0,24	–0,06	–0,07
Молочность	0,83	1,32	0,49	0,42	–1,68	0,46	1,23	0,42
Масса гнезда в 2 месяца	9,01	2,03	6,97	1,94	3,60	–3,01	3,63	1,79
Количество поросят в 2 месяца	0,01	0,15	–0,16	0,10	0,33	0,26	0,10	0,15

Наибольший положительный эффект ОКС по этому показателю проявился у животных белорусской черно-пестрой породы (0,22 и 0,24). Несколько меньшей величиной эффекта характеризовались животные крупной белой породы (0,10 и 0,18). Белорусская мясная и порода дюрок в качестве материнской имели положительное значение ОКС, а в качестве отцовской проявили отрицательный эффект (в первом случае соответственно 0,13–0,11, во втором – –0,06...–0,07).

Положительным эффектом ОКС по молочности обладали все родительские формы, за исключением отцовской крупной белой породы (–1,68), использование которой привело к снижению данного показателя при скрещивании. Высокие показатели ОКС имели матки белорусской черно-пестрой и хряки белорусской мясной пород (1,32 и 1,23 соответственно). Наиболее высокими показателями ОКС по массе гнезда в 2 месяца обладали материнские формы крупной белой породы (9,01), несколько ниже этот показатель был у маток белорусской мясной породы (6,97). Отцовские формы белорусской черно-пестрой породы оказали отрицательное влияние на формирование данного признака. Положительное влияние на значение показателя количества поросят в 2 месяца имели отцовские формы крупной белой и черно-пестрой пород.

Таким образом, установлено, что лучшими при оценке эффектов ОКС по многоплодию, молочности, массе гнезда в 2 месяца и количеству поросят в 2 месяца были свиноматки крупной белой и белорусской черно-пестрой пород, имеющие положительные значения ОКС по всем изучаемым показателям. Следовательно, матки этих пород при скрещивании будут оказывать значительное положительное влияние на формирование репродуктивных качеств [11; 13].

Вариансы специфической комбинационной способности (табл. 2) свидетельствуют, что популяции могут образовывать удачные гибридные комбинации. Показатели СКС по многоплодию незначительны, хотя наиболее высокие у белорусской мясной и крупной белой пород (0,05 и 0,07). Данный факт указывает, что на формирование многоплодия влияние неаддитивных эффектов (эпистаз и доминирование) невелико и при гибридизации увеличение данного признака будет несущественно.

Т а б л и ц а 2. **Вариансы специфической комбинационной способности репродуктивных качеств**

Показатель продуктивности	Вариансы СКС			
	КБ	БЧП	БМ	Д
Многоплодие	0,07	0,03	0,05	0,02
Молочность	0,39	0,13	0,11	0,10
Масса гнезда в 2 месяца	5,43	2,95	3,83	2,85
Количество поросят в 2 месяца	0,29	0,11	0,18	0,12

По величине варианты молочности выделяется крупная белая порода (0,39). Высокая специфическая комбинационная способность признака масса гнезда в 2 месяца крупной белой породы (5,43) стала следствием больших различий показателей в гибридных комбинациях с ее участием. По признаку количество поросят в 2 месяца варианты СКС невысокие, за исключением крупной белой (0,29).

Во всех случаях по репродуктивным признакам значение ОКС превышало СКС, то есть их величины определяются преобладанием аддитивных эффектов, что позволяет проводить отбор по фенотипу. Следовательно, эффект гетерозиса по репродуктивным признакам обусловлен высокой общей комбинационной способностью, а рассматриваемые для использования в скрещивании породы отличаются высокой разнородностью и фактически не прошли надлежащего отбора по ОКС [14].

Для оценки материнской и отцовской форм исходных пород нами проведено их ранжирование по общей комбинационной способности репродуктивных признаков (табл. 3).

Установлено удачное совпадение оценок комбинационной способности отцов и матерей крупной белой и белорусской мясной пород, характерное почти для всех признаков. У белорусской черно-пестрой породы не наблюдается полного совпадения оценок. Так, по полученным данным, у животных этой породы материнская форма может являться причиной снижения у гибридов таких признаков, как молочность и масса гнезда в 2 месяца. У животных крупной белой породы

отцовская форма может снизить уровни признаков молочности и массы гнезда в 2 месяца, одновременно положительно влияя на многоплодие и количество поросят в 2 месяца. Хряки черно-пестрой породы при скрещиваниях являются ухудшателями таких признаков, как молочность, масса гнезда и количество поросят в 2 месяца.

Оценки эффектов общей и варианс специфической комбинационной способности родительских форм по откормочным и мясным качествам представлены в табл. 4 и 5.

Таблица 3. Ранжирование оценок общей комбинационной способности репродуктивных качеств материнских и отцовских форм

Показатель продуктивности	Материнские формы				Отцовские формы			
	КБ	БЧП	БМ	Д	КБ	БЧП	БМ	Д
Многоплодие	3	1	2	4	2	1	3	4
Молочность	2	4	1	3	3	2	1	3
Масса гнезда в 2 месяца	1	3	2	4	2	3	1	3
Количество поросят в 2 месяца	2	1	3	4	1	2	3	2

Таблица 4. Оценка общей комбинационной способности откормочных и мясных качеств у материнских и отцовских форм

Показатель продуктивности	Материнские формы				Отцовские формы			
	КБ	БЧП	БМ	Д	КБ	БЧП	БМ	Д
Возраст достижения живой массы 100 кг	0,46	−1,23	0,78	1,14	0,84	0,62	1,45	1,76
Среднесуточный прирост	−14,32	22,81	−8,49	21,3	−16,94	11,80	15,13	16,20
Затраты корма на 1 кг прироста	−0,01	−0,04	0,05	0,06	−0,03	−0,01	0,04	0,06
Длина туши	−0,32	−0,08	−0,23	−0,07	0,04	0,03	0,05	0,06
Толщина шпика	0,37	−0,43	0,07	0,07	−0,15	0,23	0,39	0,41
Масса окорока	−0,06	0,07	−0,02	0,11	−0,07	0,09	0,16	0,19
Площадь «мышечного глазка»	−0,01	0,09	−0,09	0,12	−0,18	−0,21	0,38	0,42

Таблица 5. Оценка варианс специфической комбинационной способности откормочных и мясных качеств

Показатель продуктивности	Вариансы СКС			
	КБ	БЧП	БМ	Д
Возраст достижения живой массы 100 кг	2,53	1,64	3,27	4,7
Среднесуточный прирост	2,12	4,23	5,80	5,9
Затраты корма на 1 кг прироста	0,02	0,01	0,06	0,05
Длина туши	0,79	0,55	1,28	1,21
Толщина шпика	1,11	0,60	3,06	3,30
Масса окорока	0,01	0,01	0,02	0,02
Площадь «мышечного глазка»	0,70	0,53	2,44	2,49

Оценка эффектов ОКС позволила установить, что по откормочным качествам отцовские формы породы дюрок и белорусской мясной характеризуются в целом как положительные общие комбинаторы, так как способствуют снижению у потомков возраста достижения живой массы 100 кг, увеличению среднесуточного прироста, уменьшению затрат корма на 1 кг прироста, снижению толщины шпика, увеличению массы окорока и площади «мышечного глазка».

Аналогичные результаты по эффектам ОКС большинства признаков получены у отцовских форм белорусской черно-пестрой породы, что способствует улучшению в потомстве показателей среднесуточного прироста и толщины шпика (11,80 и 0,23).

Незначительные эффекты ОКС по массе окорока имели свиноматки и хряки крупной белой породы (−0,06 и −0,07), что указывает на несущественное влияние данной породы на увеличение массы окорока при гибридизации.

Проведенный анализ указывает, что на улучшение мясных качеств у помесного молодняка существенное влияние оказывают отцовские формы породы дюрок и несколько меньше белорусской мясной [12; 14].

Анализ вариантов специфической комбинационной способности (табл. 5) показал, что по возрасту достижения живой массы 100 кг у всех родительских форм СКС выше ОКС, что указывает на основополагающую роль эффектов доминирования и эпистаза.

При отрицательных эффектах ОКС по этому признаку у материнской формы черно-пестрой породы отмечена высокая положительная варианса СКС. Очевидно, данная форма эффективна при селекции на гетерозис, поскольку дает разнообразные результаты при скрещивании. Дюрок, белорусская мясная и белорусская черно-пестрая породы характеризовались высокими вариансами СКС по среднесуточному приросту, причем у дюроков (5,90), у белорусской мясной (5,80) данные показатели значительно превышали аналогичный у крупной белой (2,12). Признак затраты корма на 1 кг прироста и массы окорока имел невысокие значения варианс СКС, что, вероятно, в первом случае связано с косвенной селекцией по этому признаку, во втором – на формирование данного признака влияют аддитивные факторы отцовской формы пород дюрок и белорусской мясной.

Оценивая значения вариансы СКС по признакам длины туши и толщины шпика всех исходных форм следует отметить, что они были выше значений эффектов ОКС. Это дает основание предполагать возможность получения высоких результатов у гибридов при скрещивании.

Материнская форма породы дюрок и белорусской мясной по площади «мышечного глазка» имеет высокое положительное значение вариансы СКС (соответственно 2,49 и 2,44), что подтверждается колебаниями в эффектах СКС с участием этой формы от –0,91 до 0,45.

Следовательно, принимая во внимание величину эффектов ОКС и варианс СКС, для гибридизации наиболее приемлемым следует считать скрещивание свиней крупной белой породы с белорусской мясной и дюрок, причем последнюю целесообразно использовать в качестве отцовской, так как она характеризуется более высокой специфической способностью.

Ранжирование родительских форм по имеющимся оценкам ОКС (табл. 6) значительно повышает точность и разрешающую способность сетевых пробных скрещиваний при использовании их для проведения генетического анализа.

Таблица 6. Ранжирование оценок общей комбинационной способности материнских и отцовских форм откормочных и мясных качеств

Показатель продуктивности	Материнские формы				Отцовские формы			
	КБ	БЧП	БМ	Д	КБ	БЧП	БМ	Д
Возраст достижения живой массы 100 кг	3	4	1	2	3	4	2	1
Среднесуточный прирост	4	1	3	2	4	2	3	1
Затраты корма на 1 кг прироста	3	4	2	1	2	4	3	1
Длина туши	3	4	1	2	3	4	2	1
Толщина шпика	3	4	1	2	3	4	2	1
Масса окорока	3	4	2	1	3	4	2	1
Площадь «мышечного глазка»	3	4	2	1	4	3	2	1

Как следует из данных табл. 6, по откормочным и мясным признакам наблюдается большое несовпадение в результатах ранжирования материнской и отцовской форм различных пород свиней.

Так, хряки породы дюрок при использовании в качестве отцовской формы являются стабильными улучшателями у гибридов таких признаков, как возраст достижения живой массы 100 кг, среднесуточный прирост, длина туши, толщина шпика, но особо не влияют на уровень признаков затраты корма на 1 кг прироста, массу окорока и площадь «мышечного глазка» при использовании в качестве материнской формы.

Ранги маток и хряков крупной белой и белорусской черно-пестрой пород совпадают практически по всем признакам, однако использование этих пород в качестве отцовской снижает у гибридов показатели затрат корма на 1 кг прироста.

Материнские формы белорусской черно-пестрой породы несколько ухудшают значения мясных и откормочных признаков. Отцовские формы, напротив, ухудшают уровни таких признаков, как среднесуточный прирост и площадь «мышечного глазка».

Полученные в сетевых пробных скрещиваниях достаточно полные данные о комбинационной способности отцовских и материнских форм изучаемых пород использованы нами при проведении экспериментов и получении породно-линейных гибридов.

Уровень продуктивности исходных родительских форм в ряде случаев не совпадает с их способностью положительно влиять на продуктивность гибридных комбинаций. Высокопродуктивные породы при низкой комбинационной способности могут понизить уровень продуктивности в гибридном потомстве, и, напротив, при скрещивании пород, обладающих высокой комбинационной способностью, возможно получение гибридов с повышенным уровнем продуктивности. В случае анализа комбинационной способности важным является не только прямое влияние генов на уровень признака, но и совместное действие на признак объединенных генетических систем обеих родительских форм.

В целом анализ полученных оценок комбинационной способности, их ранжирования, указывает на то, что при проведении сетевых пробных скрещиваний можно получить информацию, позволяющую достаточно надежно выбрать родительские формы, пригодные для синтеза гетерозисных гибридов.

Однако поиск генетической формулы гибрида затрудняется наличием у родительских форм положительных оценок комбинационной способности по одним признакам, и отрицательных – по другим. Это в значительной мере усложняет определение истинной ценности отдельных пород или линий как генетически целостной единицы, так как ассоциативный отбор ориентирован на изучение динамики не отдельно взятого признака, а их системы, взаимосвязанного комплекса. Поэтому для характеристики родительских форм по комплексу признаков предложено использовать оценки АКС, которая дала возможность связать представления о фенотипической ассоциации с понятием комбинационной способности и описать способность родительской формы как целостной системы, при скрещивании определенным образом влиять на комплекс ассоциированных признаков у гибридов (табл. 7).

Таблица 7. Оценка родительских форм по ассоциативной комбинационной способности

Родительская форма	Показатели АКС	
	репродуктивные качества	откормочные и мясные качества
Материнские		
КБ	12,33	1,92
БЧ	7,05	0,77
БМ	9,85	–0,49
Д	5,42	1,46
Отцовские		
КБ	3,38	–5,78
БЧ	1,37	1,04
БМ	6,79	1,84
Д	2,17	2,78

Установлено, что наиболее высокими значениями АКС по репродуктивным качествам характеризовались материнские формы КБ (12,3) и БМ (9,8) пород. Характерно, что показатели АКС материнских форм выше аналогичных показателей отцовских. Значения результирующего параметра у крупной белой породы также выше, чем у черно-пестрой, белорусской мясной и дюрок. Это указывает на преобладание материнского эффекта в формировании репродуктивных качеств [15–18].

По откормочным и мясным качествам наиболее высокими значениями ассоциативной комбинационной способности и результирующего параметра характеризовались материнские формы крупной белой (1,92) и отцовские дюрока (2,78) и белорусской мясной породы (1,84). В данном случае показатели отцовских форм в целом выше материнских, что указывает на влияние отцовского эффекта в детерминации признаков откормочной и мясной продуктивности.

Заключение. Проведенный генетический анализ дал возможность предположить, что породы с высокими показателями ассоциации системы количественных признаков, результирующего параметра и АКС по репродуктивным, откормочным и мясным качествам при скрещивании образуют лучшие комбинации для последующего синтеза гетерозисных гибридов.

Количественная оценка показателя АКС является завершающим этапом генетического анализа в сетевых пробных скрещиваниях. В результате проведенных исследований подтвердился прогноз и произошло совпадение прогнозируемых данных с фактическими.

Выявлено, что на формирование воспроизводительных качеств существенное влияние оказывает аддитивное действие эффектов генов материнских пород и часть эпистатического эффекта, взаимодействующая с аддитивным, что дает возможность проводить успешную селекцию в родительских стадах. В детерминации признаков откормочной и мясной продуктивности участвуют как аддитивные, так и эпистатические эффекты.

Лучшими при оценке эффектов ОКС по репродуктивным признакам оказались свиноматки крупной белой и белорусской черно-пестрой пород, по откормочным качествам отцовские формы белорусской мясной и породы дюрок, которые характеризовались в целом как положительные общие комбинаторы.

Выявлена высокая взаимосвязь (0,76–0,97) между ОКС и уровнем откормочных и мясных качеств родительских форм.

Анализ эффектов СКС гибридных сочетаний позволил установить лучшие варианты скрещивания, хорошо сочетающиеся на гетерозисный эффект: по репродуктивным качествам сочетания, у которых в качестве материнской формы используется крупная белая порода, по откормочным и мясным – комбинации БЧ × БМ и КБ × Д. Эти же формы имеют и наиболее высокие значения АКС.

Количественная оценка ОКС и СКС позволяет рекомендовать для селекционного процесса породы, сочетающиеся на аддитивный и гетерозисный эффект.

Литература

1. Бекенев В. А. Селекция свиней. Новосибирск, 1997. – 182 с.
2. Беляев Д. К. // Генетика. 1966. № 10. С. 36–38.
3. Березовский Н. Д., Трусов Б. А., Бабич К. И. // Свиноводство: межвед. сб. К., 1979. Вып. 31. С. 15–20.
4. Гарт В. В. Генофонд пород свиней Западной Сибири: автореф. дис. ... д-ра с.-х. наук: 06.02.01, 06.02.04. Новосибирск, 2006. – 42 с.
5. Кленовицкий П. М. и др. Генные карты сельскохозяйственных животных. Дубровицы, 2003. – 91 с.
6. Горин В. В. Повышение эффективности селекционного процесса в свиноводстве на основе разработки генетико-популяционных методов: дис. ... д-ра с.-х. наук в форме науч. докл.: 06.02.01. СПб.; Пушкин, 1992. – 50 с.
7. Горин В. Т., Никитченко И. Н. // Научные основы развития животноводства в Белоруссии: межвед. сб. Минск, 1974. Вып. 4. С. 66–70.
8. Горин В. Т., Никитченко И. Н. // Научные основы развития животноводства в Беларуси: межвед. сб. Минск, 1980. Вып. 10. С. 14–17.
9. Горин В. Т., Никитченко И. Н. Выведение высокопродуктивных линий и гибридов свиней. М., 1973. С. 76–98.
10. Зиновьева Н. А., Эрнст Л. К. Современное состояние и перспективы биотехнологии в животноводстве. Дубровицы, 2006. – 375 с.
11. Капелист И. В. Теория и практика селекционно-племенной работы в свиноводстве. М., 1984. С. 69–73.
12. Капелист И. В. Разведение, кормление и технология содержания свиней. М., 1986. С. 12–16.
13. Кедров-Зихман О. О., Шарено Т. И., Белько Т. И. Теоретические основы селекции зерновых культур на продуктивность. Минск, 1987. С. 77–87.
14. Коваленко В. П., Лесной В. А. // Цитология и генетика. 1986. Т. 20, № 5. С. 360–365.
15. Савченко В. К. Биологические основы селекции растений на продуктивность. Таллин, 1981. С. 86–101.

16. Савченко В. К. Генетический анализ в сетевых пробных скрещиваниях. Минск, 1984. – 223.
17. Федоренкова Л. А., Шейко Р. И. Селекционно-генетические основы выведения белорусской мясной породы свиней. Минск, 2001. – 223 с.
18. Эрнст Л. К. // Современные достижения и проблемы биотехнологии сельскохозяйственных животных: материалы 6-й междунар. науч. конф. Дубровицы, 2006. С. 12–23.

I. P. SHEYKO, R. I. SHEYKO

belniig@tut.by

**ESTIMATION OF THE OVERALL, SPECIFIC AND ASSOCIATIVE COMBINING ABILITY
OF MATERNAL AND PATERNAL FORMS OF DIFFERENT BREEDS OF PIGS**

Summary

The highest values of the associative combining ability on reproductive traits were typical for maternal forms of Belarusian Large white breed of pigs (12.3) and Belarusian Meat breed of pigs (9.8). On fattening and meat traits the highest values of the associative combining ability and the resulting parameter were typical for the paternal forms of Duroc breed (2.78).

РЕФЕРАТЫ

УДК 517.538.52+517.538.53+517.518.84

Астафьева А. В., Старовойтов А. П. Асимптотические свойства многочленов Эрмита // Докл. НАН Беларуси. 2015. Т. 59, № 3. С. 5–11.

Изучаются асимптотические свойства диагональных аппроксимаций Эрмита–Паде I типа для системы экспонент $\{e^{\lambda_j z}\}_{j=0}^k$ с произвольными различными действительными показателями $\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_k$. Доказанные теоремы дополняют известные результаты П. Борвейна, Ф. Вилонского и А. П. Старовойтова.

Библиогр. – 12 назв.

УДК 517.926.4

Красовский С. Г. Изменение знака центрального и особого показателей линейных сингулярных систем // Докл. НАН Беларуси. 2015. Т. 59, № 3. С. 12–16.

Доказано существование двумерных линейных дифференциальных систем с кусочно-непрерывными ограниченными коэффициентами и отрицательным старшим особым показателем, таких, что старший центральный показатель соответствующей сингулярной системы оказывается положительным на счетном множестве значений положительного параметра при производной. Также доказано существование двумерных линейных сингулярных дифференциальных систем, обладающих эффектом одновременной смены знака у старшего центрального и старшего особого показателей под действием малых возмущений на бесконечном (счетном) числе значений малого положительного параметра при производной. Результат может быть обобщен на случай систем произвольной размерности, а также установлен и в классе линейных систем с бесконечно дифференцируемыми коэффициентами.

Библиогр. – 9 назв.

УДК 511.42

Бударина Н. В., Диккинсон Д., Берник В. И. Распределение дискриминантов целочисленных многочленов с заданными законами их факторизации // Докл. НАН Беларуси. 2015. Т. 59, № 3. С. 17–20.

Рассмотрен класс целочисленных многочленов степени n , у которых модули коэффициентов не превосходят некоторой величины Q , а дискриминанты делятся на степень простого числа. В работе получена оценка снизу для количества таких полиномов. При $n = 3$ эта оценка совпадает с оценкой сверху.

Библиогр. – 11 назв.

УДК 539.12

Кисель В. В., Овсюк Е. М., Веко О. В., Редьков В. М. Нерелятивистское приближение в теории частицы со спином 2 // Докл. НАН Беларуси. 2015. Т. 59, № 3. С. 21–27.

В 30-компонентном уравнении первого порядка Федорова (1951) для массивной частицы со спином 2 выполнена процедура нерелятивистского приближения. Выведено уравнение типа Паули для частицы со спином 2, учитывающее присутствие произвольного электромагнитного поля. Нерелятивистской волновой функцией является неприводимый симметричный 3-тензор второго ранга, содержащий только пять независимых компонент.

Библиогр. – 8 назв.

УДК 530.1.535.3

Гончаренко А. М. **О распространении солитонов в отрицательных средах** // Докл. НАН Беларуси. 2015. Т. 59, № 3. С. 28–29.

Исследованы основные свойства переменных солитонов в отрицательных средах. Показано, что солитон представляет собой осциллирующий импульс.

Библиогр. – 5 назв.

УДК 535.42

Апанасевич П. А. **Условия применимости уравнений переноса интенсивности для описания вынужденного комбинационного рассеяния** // Докл. НАН Беларуси. 2015. Т. 59, № 3. С. 30–33.

Показано, что уравнение переноса интенсивности может быть использовано для описания вынужденного комбинационного рассеяния (ВКР) в широкой области интенсивностей излучения накачки без учета влияния процесса ВКР на заселенности уровней колебания, на котором происходит ВКР. Развита простая методика учета этого эффекта, если им пренебречь нельзя.

Библиогр. – 7 назв.

УДК 535.34+539.19

Кузьмицкий В. А. **Вращения Якоби в обратной задаче нахождения параметров вибронной связи в условиях резонанса** // Докл. НАН Беларуси. 2015. Т. 59, № 3. С. 34–38.

Найдено точное решение задачи определения из экспериментальных данных (энергий $e_k^{(obs)}$ и интенсивностей переходов $I_k^{(obs)}$) наблюдаемого спектра поглощения, $k = 1, 2, \dots, n$) энергий невозмущенных состояний a_i и матричных элементов вибронной связи b_i , описывающих вибронный аналог сложного резонанса Ферми, $n \geq 3$. В первой части алгоритма используются элементарные вращения Якоби для построения преобразования подобия X с требованием для элементов первой строки матрицы X $(X_{1k})^2 = I_k^{(obs)}$, в соответствии с тем, что только одно невозмущенное состояние является «светлым». Во второй части для нахождения величин a_i и b_i решается алгебраическая проблема собственных значений матрицы $X \text{diag}\{e_k^{(obs)}\} X^{-1}$.

Библиогр. – 11 назв.

УДК 547.788

Клецков А. В., Бумагин Н. А., Курман П. В., Золотарь Р. М., Чепик О. П., Поткин В. И. **Синтез замещенных *n*-бифенил(1-нафтил)изотиазол-3-илкетон** // Докл. НАН Беларуси. 2015. Т. 59, № 3. С. 39–42.

Ацилированием бифенила и нафталина 4,5-дихлоризотиазол-3-карбонилхлоридом в условиях реакции Фриделя–Крафтса синтезированы *n*-бифенил- и 1-нафтил-(4,5-дихлоризотиазол-3-ил)кетоны с выходом 38 % и 30 % соответственно. Установлено, что в среде дихлорметана ацилирование бифенила протекает неизбирательно и приводит к смеси *пара*- и *мета*-изомеров, а в растворе нитробензола образуется только *пара*-изомер. Реакцией *n*-бифенил-(4,5-дихлоризотиазол-3-ил)кетона с фенолятом натрия с выходом 80 % получен *n*-бифенил-(5-фенилтио-4-хлоризотиазол-3-ил)кетон. Синтезированные соединения представляют интерес для биотестирования в качестве синергистов инсектицидов и являются перспективными лигандами для металлокомплексных катализаторов реакций-кросс-сочетания.

Библиогр. – 15 назв.

УДК 661.551.546.621

Свиридова Т. В., Логвинович А. С., Свиридов Д. В. **Электрохимический синтез металл-матричных композитов на основе дисперсных частиц MoO_3/WO_3 со структурой «ядро–оболочка»** // Докл. НАН Беларуси. 2015. Т. 59, № 3. С. 43–46.

Продемонстрирована возможность получения металл-матричных композитов за счет соосаждения никеля с частицами типа «ядро (MoO_3)–оболочка (WO_3)». Показано, что нанесение оболочек из триоксида вольфрама позволяет стабилизировать дисперсный триоксид молибдена в растворах электрохимического никелирования при сохранении частицами редокс-активности, что положительно сказывается на враща-

нии частиц дисперсной фазы в металлическую матрицу и позволяет обеспечить высокое содержание оксида в никелевом покрытии при его небольшой концентрации в электролите. Показано, что благодаря слоистому строению частиц дисперсной фазы композиты Ni–MoO₃/WO₃ характеризуются высокими уровнями износостойкости (превышающим износостойкость гальванического никеля более чем в 3 раза).

Ил. 4. Библиогр. – 7 назв.

УДК 546.26+544.032.2+544.18

Матулис Вадим Э., Матулис Виталий Э., Нагорный Ю. Е., Репченко В. И., Ивашкевич О. А. **Особенности деформирования различных моделей графена при растяжении** // Докл. НАН Беларуси. 2015. Т. 59, № 3. С. 47–50.

Выполнены расчеты величин модуля Юнга и коэффициента Пуассона моделей графена в зависимости от их размера с использованием трех принципиально различающихся методов: конечных элементов, полуэмпирического квантовохимического метода PM6, методов *ab initio* и DFT. Все три группы методов предсказывают монотонное увеличение модуля Юнга с ростом размера образца с выходом графиков на асимптоту. Рассчитанное в рамках полуэмпирического метода PM6 значение модуля Юнга сходится к 1,01 ТПа, достигая указанного значения для модели 9 × 15 (C₃₀₄H₅₀). Эта величина хорошо согласуется с имеющимися литературными данными, полученными экспериментальными и расчетными методами для массивного образца графена.

Табл. 2. Ил. 2. Библиогр. – 8 назв.

УДК 544.77.051

Плиско Т. В., Бильдюкевич А. В., Зеленковский В. М. **Структура и свойства дисперсий диоксида кремния в полиэтиленгликоле-400** // Докл. НАН Беларуси. 2015. Т. 59, № 3. С. 51–55.

Квантовохимическим моделированием и спектроскопическими исследованиями дисперсии диоксида кремния в полиэтиленгликоле с $M_n = 400 \text{ г} \cdot \text{моль}^{-1}$ (ПЭГ-400) подтверждена возможность образования водородной связи между силанольной группой и эфирным атомом кислорода или концевой гидроксильной группой ПЭГ-400. Показано, что дисперсии SiO₂ в ПЭГ-400 с концентрацией 0,5–3 % являются золями, а при повышении концентрации SiO₂ имеет место золь–гель переход, что обуславливает различную устойчивость дисперсий к термокоагуляции в зависимости от концентрации.

Табл. 1. Ил. 4. Библиогр. – 13 назв.

УДК 51-76:577.322:539.19

Кашин И. А., Тузиков А. В., Андрианов А. М. **Компьютерный скрининг низкомолекулярных ингибиторов проникновения ВИЧ-1 на основе нейтрализующего антитела 10E8** // Докл. НАН Беларуси. 2015. Т. 59, № 3. С. 56–65.

Проведен компьютерный скрининг низкомолекулярных ингибиторов проникновения ВИЧ-1 – потенциальных пептидомиметиков моноклонального антитела 10E8, проявляющего широкую вирусную нейтрализацию. Методами молекулярного моделирования идентифицированы восемь химических соединений, способных к блокаде сегмента белка gp41 ВИЧ-1, критического для слияния мембраны вируса с клеткой-мишенью. Найденные соединения рассматриваются как перспективные базовые структуры для разработки новых лекарственных препаратов против ВИЧ с широким спектром нейтрализующего действия.

Ил. 3. Табл. 4. Библиогр. – 16 назв.

УДК 577.21:631.524.86:632.4:633.111

Долматович Т. В., Булойчик А. А. **Молекулярная идентификация генов устойчивости к бурой ржавчине в сортах яровой мягкой пшеницы (*Triticum aestivum* L.)** // Докл. НАН Беларуси. 2015. Т. 59, № 3. С. 66–70.

Проведен скрининг 19 генов устойчивости к бурой ржавчине у 22 сортов мягкой яровой пшеницы, внесенных в Государственный реестр Республики. Ген устойчивости к бурой ржавчине *Lr1* обнаружен у сортов Fasan, Koksa, Munk и Verbena; ген *Lr10* – у сорта Василиса; фрагмент, сцепленный с геном *Lr20*, – у сортов Banti, Bombona, Korynta, Quattro, Fasan, Triso, Василиса, Виза, Дарья, Ласка, Любава, Рассвет, Сабина. Не обнаружены локусы, сцепленные с генами устойчивости *Lr9*, *Lr12*, *Lr19*, *Lr21*, *Lr22a*, *Lr24*, *Lr25*, *Lr26*, *Lr28*, *Lr29*, *Lr34*, *Lr35*, *Lr37*, *Lr42*, *Lr46*, *Lr47*, *Lr48*.

Табл. 2. Ил. 1. Библиогр. – 11 назв.

Бусева Ж. Ф., Плюта М. В. **Питание молоди рыб в литорали мелководного озера** // Докл. НАН Беларуси. 2015. Т. 59, № 3. С. 71–76.

Дана оценка особенностей питания молоди рыб возраста 0+ нескольких наиболее массовых видов (плотвы (*Rutilus rutilus*), верховки (*Leucaspis delineatus*), красноперки (*Scardinius erythrophthalmus*), уклеи (*Alburnus alburnus*), леща (*Abramis brama*)), его видовой и топической специфичности в литоральной зоне мелководного озера. Установлено, что молодь рыб селективно потребляет хорошо заметных, медленно передвигающихся планкто-бентических кладоцер семейства *Chydoridae*. Также показано, что имеются различия в процентном соотношении потребленных групп животных молодью в разных типах биотопов. Так, в литорали без зарослей макрофитов в большей степени выедаются планктонные *Cladocera* и представители *Chironomidae*, в то время как в зарослях камыша молодь рыб отдает предпочтение планкто-бентическим видам *Cladocera*. На основании анализа содержимого желудков сделан вывод о перекрывании спектров питания в пределах каждого из изученных участков литорали у молоди некоторых видов рыб. Выдвинуто предположение, что наблюдаемая низкая численность и редкая встречаемость планкто-бентических кладоцер семейства *Chydoridae* может быть обусловлена сильным «пищевым» прессом на эту группу планктонных животных со стороны молоди рыб.

Табл. 3. Ил. 1. Библиогр. – 17 назв.

Виноградов В. В., Степура И. И., Лабор С. А., Виноградов С. В., Туманов А. В. **Механизмы некоферментного действия компонентов нейровазотропина при оксидативном стрессе и разработка антистрессорных тиаминсодержащих препаратов** // Докл. НАН Беларуси. 2015. Т. 59, № 3. С. 77–81.

Замена цианкобаламина в составе успешно апробированного в клинической сепсисологии иммуностропного антистрессина В ($B_1+B_6+B_{12}$) на липоевую кислоту привела к созданию нейровазотропина – противо-диабетического лекарственного средства с усиленным антиоксидантным потенциалом. При инкубации мио-глобина в присутствии гидропероксида компоненты нейровазотропина (тиамин, липоевая кислота и в меньшей степени пиридоксальфосфат) ингибируют образование димеров парацетамола и тирозина – маркеров оксидативного стресса, свидетельствующих об уровне образования свободных радикалов в системе *in vitro*. Дальнейшая модификация нейровазотропина за счет включения в его состав тирозина (или замены пири-доксинового ингредиента на тирозин) приведет к созданию нового лекарственного средства «гомеостазин» с возможно еще более выраженными антиоксидантными свойствами, что необходимо для коррекции различной патологии, сопряженной с окислительным стрессом (инфаркт миокарда, инсульт головного мозга и др.).

Табл. 1. Ил. 1. Библиогр. – 11 назв.

Мартинovich Г. Г., Мартинovich И. В., Меньщикова Е. Б., Зенков Н. К., Черенкевич С. Н. **Редокс-свойства опухолевых клеток и их пролиферативная активность при действии фенольных антиоксидантов** // Докл. НАН Беларуси. 2015. Т. 59, № 3. С. 82–87.

Установлено, что отклик опухолевых клеток на действие редокс-активных соединений регулируется внутри-клеточным редокс-состоянием, количественно характеризуемым эффективным редокс-потенциалом и редокс-буферной емкостью. Обнаружено, что фенольный антиоксидант 3,5-диметил-4-гидроксibenзилтиозаноат калия увеличивает буферную емкость и стимулирует пролиферацию опухолевых клеток в культуре. При действии 3-(3'-трет-бутил-4'-гидроксибензил)-пропилтиосульфат натрия (ТС-13) наблюдается снижение роста опухолевых клеток в культуре, уменьшение редокс-буферной емкости и повышение эффективного редокс-потенциала. При увеличении редокс-буферной емкости клеток токсическое действие ТС-13 снижается.

Ил. 4. Библиогр. – 14 назв.

Миронова Г. П., Ханило Л. С., Пашкевич С. Г. **Влияние снижения напряжения кислорода на когнитивные функции крыс** // Докл. НАН Беларуси. 2015. Т. 59, № 3. С. 88–92.

В экспериментах на 22 половозрелых крысах-самцах установлено, что кратковременная гипобарическая гипоксия сопровождается перестройкой интегративной деятельности мозга и механизмов обучения и памя-

ти, которые уязвимы в условиях снижения напряжения кислорода в тканях мозга. Снижение напряжения кислорода в течение 5 мин способствует увеличению периода сохранности условного рефлекса избегания в два раза. Прекондиционирующий эффект 5-минутной гипоксии выявляется через 7 суток при повторной более длительной 10-минутной гипоксии. При этом снижение суммарной двигательной активности (в среднем на 60 %, $p < 0,05$) в тесте горячая пластина сопровождается увеличением латентного периода ноцицептивных рефлексов (в среднем на 51 %, $p < 0,05$). Подобный характер пассивно-оборонительного рефлекса свидетельствует о переходе организма в режим экономии эндогенных ресурсов, который позволяет сохранить энергетические ресурсы, в том числе для клеток мозга и выжить в условиях снижения напряжения кислорода.

Ил. 3. Библиогр. – 15 назв.

УДК 616-13-008.21

Гайшун Е. И., Гайшун И. В., Пристром А. М. Изменение растяжимости артерий в зависимости от суточной частоты сердечных сокращений // Докл. НАН Беларуси. 2015. Т. 59, № 3. С. 93–96.

Установлены количественные зависимости между статической (абсолютной) растяжимостью артериальной стенки и оценками растяжимости ее, полученными с учетом суточных значений частоты сердечных сокращений. Такие зависимости могут быть полезными как для сопоставимости результатов контрольного обследования пациентов, так и для анализа динамики изменений сосудистой стенки, в частности, для анализа эффективности методов коррекции ее упруго-эластических свойств.

Библиогр. – 18 назв.

УДК 665.7.032.54

Лиштван И. И., Дударчик В. М., Крайко В. М. Твердые горючие ископаемые Беларуси и особенности их глубокой переработки // Докл. НАН Беларуси. 2015. Т. 59, № 3. С. 97–101.

В работе представлены запасы, приведены качественные показатели твердых горючих ископаемых Беларуси – неогеновых бурых углей Бриневского, Тонезского и Житковичского месторождений, бурых углей класса БЗ Лельчицкого месторождения, а также горючих сланцев. На основе анализа мировых технологий и собственных исследований по комплексной переработке указанных топлив определены наиболее приемлемые и экономически обоснованные направления их использования в топливной и нетопливной областях народного хозяйства.

Табл. 1. Библиогр. – 6 назв.

УДК 621.372.413

Кравченко В. Ф., Кривенко Е. В., Левченко С. А., Луценко В. И., Плюта С. В. Смарт-грид технологии – основа модернизации системы водоснабжения // Докл. НАН Беларуси. 2015. Т. 59, № 3. С. 102–108.

Смарт-грид технологии управления водными ресурсами в перспективе позволят оптимизировать обеспечение потребителей водой с заданным качеством при минимизации расходов на ее подготовку и утилизацию. Ключевыми звеньями создания таких технологий являются разработка общих принципов построения смарт-грид систем водоснабжения, а также сенсоров контроля качества воды, обеспечивающих ее контроль непрерывно в реальном времени и обладающих достаточно низкой стоимостью. Предлагаемая концепция водоснабжения вписывается в активно реализуемую сейчас концепцию «умного дома». Рассмотрены экономические аспекты, перспективы применения смарт-грид технологий подготовки воды, математическая модель системы, использующая уравнения диффузии и теплопереноса, а также описание процессов, происходящих при транспорте воды при помощи финитных атомарных функций Кравченко. Предлагаемый путь решения проблемы водоснабжения открывает новые перспективы для устойчивого будущего развития общества.

Ил. 2. Библиогр. – 15 назв.

УДК 621.382.019.3

Боровиков С. М., Шнейдеров Е. Н., Бурак И. А. Модели на основе распределения Вейбулла–Гнеденко для описания деградации функциональных параметров изделий электронной техники // Докл. НАН Беларуси. 2015. Т. 59, № 3. С. 109–115.

Математическую модель деградации функционального параметра в виде условной плотности его распределения для заданной наработки предлагается получать на основе трёхпараметрического распределения

Вейбулла–Гнеденко, что обеспечивает меньшие ошибки прогнозирования параметрической надёжности выборок ИЭТ, нежели модель деградации, построенная с учётом гипотезы о нормальном законе распределения функционального параметра.

Табл. 4. Ил. 2. Библиогр. – 10 назв.

УДК 636.4.082.12

Шейко И. П., Шейко Р. И. Оценка общей, специфической и ассоциативной комбинационной способности материнских и отцовских форм различных пород свиней // Докл. НАН Беларуси. 2015. Т. 59, № 3. С. 116–122.

Наиболее высокими значениями ассоциативной комбинационной способности по репродуктивным качествам характеризовались материнские формы свиней белорусской крупной белой (12,3) и белорусской мясной (9,8) пород. По откормочным и мясным качествам наиболее высокими значениями ассоциативной комбинационной способности и результирующего параметра характеризовались отцовские формы породы дюрок (2,78).

Табл. 7. Библиогр. – 18 назв.