

**ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ
ТЕХНОЛОГИИ В РЕШЕНИИ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ
И ПРИКЛАДНЫХ НАУЧНЫХ ЗАДАЧ**

Сессия ИВТН-2006



COMPUTER APPLICATIONS IN SCIENTIFIC RESEARCHES

IVTN-2006 Session

Сборник материалов
The Proceedings



Москва – 2006
Moscow - 2006

ИВТН.ru – электронные конференции

Информационно-Вычислительные Технологии в Науке

Главный организатор - NC Group/НБК "ВИСТ"

При поддержке Zenon N.S.P.

IVTN.ru – web conferences

Computer Applications in Science

Provided by NC Group/NVK "VIST"

Supported by Zenon N.S.P.

Руководитель проекта ИВТН.ru *Габусу Полина*
Исполнительный секретарь ИВТН.ru *Пшеничникова Наталья*

IVTN.ru Project Leader *Gabusu Paulina*
IVTN.ru Executive Secretary *Pshenichnikova Natalia*

Организационный комитет выражает благодарность всем участникам сессии ИВТН-2006

The Organizing committee thanks all of the participants of the IVTN-2006 session

В сборнике материалов сессии ИВТН-2006 представлены аннотации докладов конференций "Информационно-вычислительные технологии в решении фундаментальных научных проблем и прикладных задач химии, биологии, фармацевтики, медицины" и "Информационно-вычислительные технологии в фундаментальных и прикладных физико-математических исследованиях". В докладах обсуждаются научные исследования и разработки в указанных областях, а также информационные и компьютерные технологии, являющиеся важным инструментом для достижения научных результатов.

These proceedings of the IVTN-2006 session include the annotations of the reports participated in the conferences "Computer Applications in Chemistry, Biology, Pharmaceutics and Medicine" and "Computer Applications in fundamental and applied Physics and Mathematics". Different scientific researches, achievements and computer applications examples are discussed in these reports.

© NC Group / НБК «Вист»

© NC Group / NVK «VIST»

Организаторы ИВТН-2006 IVTN-2006 Providers

Конференции ИВТН-2006 организованы по инициативе NC Group/НВК "ВИСТ", при поддержке научных центров и институтов Российской Академии Наук и Российской Академии Медицинских Наук.

The IVTN-2006 Conferences were initially organized by NC Group/NVK "VIST" and supported by Scientific Centers and Institutes of Russian Academy of Sciences and Russian Academy of Medical Sciences.

Информационно-вычислительные технологии в решении фундаментальных научных проблем и прикладных задач химии, биологии, фармацевтики, медицины

Computer Applications in fundamental and applied Chemistry, Biology, Pharmaceutics and Medicine

Базовые организации

ГУ НИИ биомедицинской химии им. В.Н.Ореховича
РАМН
Институт геохимии и аналитической химии им.
В.И.Вернадского РАН
Институт органической химии им. Н.Д.Зелинского РАН

Химический факультет Московского государственного
университета им. М.В.Ломоносова
Пушкинский научный центр РАН
Институт кристаллографии им. А.В.Шубникова РАН

Центр химии лекарственных средств

Hosting

V.N. Orekhovich Institute of Biomedical Chemistry of
Russian Academy of Medical Sciences
V.I.Vernadskiy Institute of Geochemistry and Analytical
Chemistry of Russian Academy of Science
N.D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry of Russian
Academy of Sciences
Department of Chemistry of M.V. Lomonosov Moscow State
University
Pushchino Scientific Center of Russian Academy of Sciences
A.V.Shubnikov Institute of Crystallography of Russian
Academy of Sciences
Center for Drug Chemistry, Chemical-Pharmaceutical
Research Institute

Программный комитет

Арчаков А.И., академик РАМН - председатель
Грибов Л.А., доктор физико-математических наук,
профессор, член-корр. РАН
Иванов А.С., доктор биологических наук, профессор
Кузьминский М.Б., кандидат химических наук
Михеев О.В., кандидат технических наук
Польшаков В.И., доктор химических наук
Поройков В.В., доктор биологических наук, профессор

Тартаковский В.А., академик РАН
Зефирова Н.С., академик РАН

Program Committee

Archakov A.I., Full member of Russian Academy of Medical
Sciences - **Chairman**
Gribov L.A., Doctor of Physical and Mathematical Sciences,
Professor, Member -correspondent of Russian Academy of
Sciences
Ivanov A.S., Doctor of Biology, Professor
Kuzminskii M.B., Ph.D. in Chemistry
Mikheyev O.V., Ph.D. in Engineering
Polshakov V.I., Doctor of Chemistry
Poroikov V.V., Doctor of Biology, Professor

Tartokovskii V.A., Full member of Russian Academy of
Sciences
Zefirov N.S., Full member of Russian Academy of Sciences,

Экспертный совет конференции

Иванов А.С., доктор биологических наук, профессор
Корнилов В.В., кандидат физико-математических наук
Кузьминский М.Б., кандидат химических наук
Михеев О.В., кандидат технических наук
Палюлин В.А., кандидат химических наук
Польшаков В.И., доктор химических наук
Поройков В.В., доктор биологических наук, профессор –
председатель
Скворцов В.С., кандидат биологических наук

Expert Committee

Ivanov A.S., Doctor of Biology, Professor
Kornilov V.V., Ph.D. in Physical and Mathematical Sciences
Kuzminskii M.B., Ph.D. in Chemistry
Mikheyev O.V., Ph.D. in Engineering
Palulin V.A., Ph.D. in Chemistry
Polshakov V.I., Doctor of Chemistry
Poroikov V.V., Doctor of Biology,
Professor – **Chairman**
Skvortsov V.S., Ph.D. in Biology

Информационно-вычислительные технологии в фундаментальных и прикладных физико-математических исследованиях

Computer Applications in Fundamental and Applied Physics and Mathematics

Базовые организации

Институт проблем управления РАН
Институт космических исследований РАН
Институт вычислительной математики РАН
Институт математического моделирования РАН
Институт системного программирования РАН
Научно-исследовательский вычислительный центр МГУ
Московский государственный институт радиотехники, электроники и автоматики (Технический университет)
Институт радиотехники и электроники РАН

Hosting

Institute of Problems of Management of the Russian Academy of Science
Institute of Space Research of the Russian Academy of Sciences
Institute of Numerical Mathematics of the Russian Academy of Sciences
Institute for Mathematical Modelling of the Russian Academy of Sciences
Institute for System Programming of the Russian Academy of Sciences
Research Computing Center of the Moscow State University
Moscow State Institute of Radio Engineering, Electronics, and Automatics (Technical University)
Institute of a Radio Engineering and Electronics of the Russian Academy of Sciences

Программный комитет

Воеводин В.В., академик РАН – председатель
Иванников А.Д., доктор технических наук, профессор
Калиткин Н.Н., доктор физико-математических наук, профессор, член-корр. РАН
Кузнецов С.Д., доктор технических наук, профессор
Михеев О.В., кандидат технических наук
Самохин А.Б., доктор физико-математических наук, профессор
Тихонравов А.В., доктор физико-математических наук, профессор
Трахтенгерц Э.А., доктор технических наук, профессор
Четверушкин Б.Н., доктор физико-математических наук, профессор, член-корр. РАН

Program committee

Voevodin V.V., Full member of Russian Academy of Sciences- **Chairman**
Ivannikov A.D., Doctor of Engineering Sciences, Professor
Kalitkin N.N., Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Member -correspondent of Russian Academy of Sciences
Kuznetsov S.D., Doctor of Engineering Sciences, Professor
Mikheyev O.V., Ph.D. in Engineering
Samokhin A.B., Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor
Tikhonravov A.V., Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor
Trahtengerts E.A., Doctor of Engineering Sciences, Professor
Chetverushkin N.N., Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Member -correspondent of Russian Academy of Sciences

Экспертный совет конференции

Антонов А.С., кандидат физико-математических наук, доцент
Воеводин В.В., доктор физико-математических наук, профессор, член-корр. РАН
Куликов С.П., кандидат физико-математических наук, доцент
Лифанов И.К., доктор физико-математических наук, профессор
Михеев О.В., кандидат технических наук
Самохин А.Б., доктор физико-математических наук, профессор - **председатель**
Фальк В.Н., доктор технических наук, профессор
Фетисов Ю.К., доктор физико-математических наук, профессор
Чердынцев В.В., кандидат физико-математических наук, доцент
Якобовский М.В., кандидат физико-математических наук, доцент

Expert committee

Antonov A.S., Ph.D. in Physical and Mathematical Sciences, Assistant Professor
Voevodin V.V., Doctor of Engineering Sciences, Professor, Member -correspondent of Russian Academy of Sciences
Kulikov S.P., Ph.D. in Physical and Mathematical Sciences, Assistant Professor
Lifanov I.K., Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor
Mikheyev O.V., Ph.D. in Engineering
Samokhin A.B., Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor - **Chairman**
Falk V.N., Doctor of Engineering Sciences, Professor
Fetisov Yu.K., Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor
Cherdyntsev V.V., Ph.D. in Physical and Mathematical Sciences, Assistant Professor
Yakubovskiy M.V., Ph.D. in Physical and Mathematical Sciences, Assistant Professor

Дорогие друзья!

В этом году проект ИВТН.ru - электронные конференции «Информационно-Вычислительные Технологии в Науке» отмечает свой юбилей. Вот уже 5 лет ИВТН.ru посвящает свою работу людям науки, создавая возможность для встречи ведущих ученых и разработчиков, активно использующих IT-технологии в научных исследованиях.

Сегодня ИВТН.ru объединяет свыше 1500 специалистов российских и зарубежных компаний-производителей оборудования и программного обеспечения, а также представителей организаций, обеспечивающих финансовую, техническую, информационную и иную поддержку исследовательской деятельности.

Мы уверены в том, что последующие сессии ИВТН.ru будут такими же яркими и незабываемыми.

Оргкомитет благодарит всех участников ИВТН-2006!

Поздравляем Вас с нашим общим Юбилеем!

С уважением,
Оргкомитет ИВТН.ru

Dear Friends!

This year, the IVTN.ru project (Computer Applications in Scientific Research) celebrates its 5th anniversary. The IVTN.ru project has been serving the scientific community all these years, providing a means of communication to the leading scientists and developers who use IT technologies in their research.

Today, IVTN.ru unite more than 1500 specialists in Russian and foreign hardware and software vendor companies, as well as in the organizations which give the scientific research their financial, technical, informational and other kinds of support.

The following IVTN.ru sessions will certainly become the unforgettable events.

The Organizing Committee thanks all the participants of IVTN-2006!

Our congratulations on 5-th Anniversary of the IVTN.ru!

Best Regards,
IVTN.ru Organizing Committee

**ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ
ТЕХНОЛОГИИ В РЕШЕНИИ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ
НАУЧНЫХ ПРОБЛЕМ И ПРИКЛАДНЫХ ЗАДАЧ
ХИМИИ, БИОЛОГИИ, ФАРМАЦЕВТИКИ,
МЕДИЦИНЫ**



**COMPUTER APPLICATIONS IN FUNDAMENTAL
AND APPLIED CHEMISTRY, BIOLOGY,
PHARMACEUTICS AND MEDICINE**

СЕКЦИЯ 1**ОБЩИЕ ПРОБЛЕМЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ИНФОРМАЦИОННЫХ И КОМПЬЮТЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ В НАУКЕ****SECTION 1****GENERAL PROBLEMS AND PROSPECTS OF COMPUTER APPLICATIONS IN SCIENCE****ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ И ОРГАНИЗАЦИОННЫЕ АСПЕКТЫ КОМПЬЮТЕРНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ХИМИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ****Мендкович А.С.**

Институт органической химии им.Н.Д.Зелинского РАН

Рассмотрены современные подходы к компьютерному обеспечению химических исследований в терминах многоуровневой модели. Реализация модели иллюстрируется на примере Центра компьютерного обеспечения химических исследований в Институте органической химии РАН

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=504>**COMPUTER ASSISTANCE TO CHEMICAL RESEARCH TECHNOLOGICAL AND ORGANIZATIONAL ASPECTS****Mendkovich A.S.**

N.D.Zelinsky Institute of Organic Chemistry of Russian Academy of Sciences

Modern approaches to computer assistance to chemical research are analyzed in terms of multilevel model. The realization of the model is illustrated by the case of Computer Assistance to Chemical Research Center at Institute of Organic Chemistry of RAS

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=504**ОБРАЗОВАТЕЛЬНАЯ ПРОГРАММА "ПРИМЕНЕНИЕ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ (ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ) ВЫЧИСЛЕНИЙ В СОВРЕМЕННОЙ КВАНТОВОЙ ХИМИИ"****Зеленцов С.В., Гергель В.П., Гришагин В.А.**

Нижегородский государственный университет им.Н.И.Лобачевского

Образовательная программа, создаваемая в ННГУ, ставит своей целью ознакомление обучаемых методам использования высокопроизводительных (параллельных) вычислений в современной квантовой химии. Она включает чтение специальных курсов, проведение лабораторных работ и практикумов, организацию научно-исследовательской работы и создание образовательного сайта. Для ее реализации использована программа NWChem (созданная в PNNL, USA), инсталлированная на вычислительном кластере ННГУ

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=424>**EDUCATIONAL PROGRAM "HIGH PERFORMANCE (PARALLEL) CALCULATIONS APPLICATION IN THE MODERN QUANTUM CHEMISTRY"****Zelentsov S.V., Gergel V.P., Grishagin V.A.**

N.I.Lobachevskiy State University of Nizhniy Novgorod

Educational program "High performance (parallel) calculations application in the modern quantum chemistry" has to teach students to use high performance calculations. The program consists of the special course lecturing, laboratory and research works performing, scientific projects and the educational site creation. It uses NWChem program (created by PNNL, USA) installed on the computer cluster of the Nizhny Novgorod University

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=424

**КОМПЬЮТЕРНЫЕ СИСТЕМЫ И ПРОГРАММНОЕ
ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДЛЯ
ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ В
ХИМИИ****Кузьминский М.Б., Мендкович А.С.**
Институт органической химии им.Н.Д.Зелинского РАН

Дан обзор аппаратных средств компьютерных систем, ориентированных на высокопроизводительные расчеты, в первую очередь на задачи вычислительной химии. Проведен анализ современного состояния и перспектив архитектур процессоров, в т.ч. универсальных микропроцессоров (МП). Исследовано влияние проблемы пропускной способности памяти в двухъядерных МП Opteron на распараллеливание задач квантовой химии. Изучено влияние межузлового трафика в кластерах при распараллеливании квантовохимических программ

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=457>

**COMPUTER SYSTEMS AND SOFTWARE FOR HIGH
PERFORMANCE COMPUTATIONS IN CHEMISTRY****Kuzminsky M.B., Mendkovich A.S.**
N.D.Zelinsky Institute of Organic Chemistry of Russian
Academy of Sciences

The review of computer systems (oriented on high-performance calculations, first of all for computational chemistry tasks) is given. The analysis of modern state and perspective of processor architectures, in particular universal microprocessors (MP), is performed. The influence of memory throughput problem in dual-core Opteron MP is investigated for parallelization of quantum chemistry tasks. The influence of internodes traffic in clusters is studied for parallelization of quantum-chemical programs

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=457

**ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ
ТЕХНОЛОГИИ В ПРЕВЕНТИВНОЙ МЕДИЦИНЕ:
КОРРЕКЦИЯ НЕБЛАГОПРИЯТНЫХ
ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ ОРГАНИЗМА НА
ОСНОВЕ ОБРАТНОЙ СВЯЗИ ОТ СОБСТВЕННЫХ
ЭНДОГЕННЫХ РИТМОВ ПАЦИЕНТА****Федотчев А.И., Бондарь А.Т., Матрусов С.Г.,
Семенов В.С., Соин А.Г.**
Институт биофизики клетки РАН

Проанализирован наиболее эффективный подход к нелекарственной коррекции функциональных расстройств у человека, основанный на использовании обратной связи от эндогенных ритмических процессов пациента – ритмов ЭЭГ, ритма дыхания и ритма сердечных сокращений. Дано научное обоснование подхода, рассмотрены две основные его разновидности – адаптивное биоуправление с обратной связью (БОС) и модуляция параметров стимуляции эндогенными ритмами. Представлены собственные разработки с использованием данного подхода, намечены перспективные пути его дальнейшего развития

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=397>

**COMPUTER TECHNOLOGIES IN PREVENTIVE
MEDICINE: NON-DRUG CORRECTION OF HUMAN
FUNCTIONAL DISTURBANCES VIA UTILIZATION OF
PATIENT'S ENDOGENOUS RHYTHMS****Fedotchev A.I., Bondar A.T., Matrusov S.G.,
Semenov V.S., Soin A.G.**
Institute of Cell Biophysics of Russian Academy of
Sciences

The most advanced approach to non-drug correction of human functional disturbances via utilization of patient's endogenous rhythms, i.e., EEG rhythms, respiratory and heart rates, is analyzed. Scientific basis of the approach is provided, two main kinds of relevant procedures – biofeedback training and modulation of stimulation parameters by endogenous rhythms – are reviewed. The author's own contributions to the field are presented and the most promising ways of further approach development are delineated

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=397

**КОМПЬЮТЕРНОЕ ПРОГНОЗИРОВАНИЕ
БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ****Поройков В.В., Филимонов Д.А., Лагунин А.А.,
Глориезова Т.А.**
ГУ НИИ Биомедицинской химии им.В.Н.Ореховича
РАМН

Среди различных свойств химических соединений (ХС) биологическая активность занимает особое место, поскольку ее наличие может стать основанием для применения веществ в медицине. С другой стороны, проявление соединением побочных и токсических эффектов является препятствием для использования ХС в практике. Таким образом, крайне важно оценить на ранних стадиях исследования возможное наличие у ХС как полезных фармакологических свойств, так и токсических эффектов

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=507>

**COMPUTER FORECASTING OF BIOLOGICAL
ACTIVITY****Poroikov V.V., Filimonov D.A., Lagunin A.A.,
Gloriozova T.A.**
V.N.Orekhovich Institute of Biomedical Chemistry of
Russian Academy of Medical Sciences

Biological activity takes a special place among various properties of chemical compounds as it can become the basis for the medical application of a substance. On the other hand, side effects and toxicity of a compound prevent its practical application. Thus, early-stage estimation of both useful pharmacological properties and toxicity of compounds is extremely important

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=507

**БИОЛОГИЧЕСКИЕ ОРГАНИЗМЫ,
ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ ФРАКТАЛЫ И КЛЕТОЧНЫЕ
АВТОМАТЫ: ГЕНЕТИЧЕСКИЕ АНАЛОГИИ****Калмыков В.Л., Корнилов В.В., Радзион А.А.,
Колпаков И.М., Сенин А.А., Косарский А.Л.,
Веретин А.С., Горячева Н.Ю.**

Институт биофизики клетки РАН

**BIOLOGICAL ORGANISMS, GEOMETRICAL
FRACTALS AND CELLULAR AUTOMATS: GENETIC
ANALOGIES****Kalmikov V.L., Kornilov V.V., Radzion A.A.,
Kolpakov I.M., Senin A.A., Kosarskiy A.L.,
Veretin A.S., Goryacheva N.Y.**Institute of Cell Biophysics of Russian Academy of
Sciences

В данной работе предпринята попытка посмотреть на живые организмы с точки терминологии «искусственной жизни». Живые организмы рассматриваются авторами как анимированные векторные изображения, «нарисованные» молекулами по правилам математических алгоритмов, записанных в геноме. В тоже время, математические алгоритмы генерации («порождения») L-систем, алгебраических фракталов и клеточных автоматов интерпретируются авторами как «геномы» этих структур

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=519>

In the article an attempt to look at living organisms from a point of terminology of "an artificial life" is undertaken. Alive organisms are considered as the animated vector images "pictured" by molecules with using rules of mathematical algorithms, written down in genome. On the other hand, mathematical algorithms of generating of L-systems, algebraic fractals and cellular automats are interpreted by authors as genomes of these structures

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=519**МЕТАЭВОЛЮЦИЯ ЖИВОГО С ПОЗИЦИЙ
КИБЕРНЕТИКИ И ИНФОРМАТИКИ****Гринченко С.Н.**

Институт проблем информатики РАН

**META-EVOLUTION OF LIFE CYBERNETICS AND
INFORMATICS POSITIONS****Grinchenko S.N.**The Institute of Informatics Problems of the Russian
Academy of Sciences

Предлагается системное рассмотрение живой природы с информатико-кибернетических позиций: концепция иерархической адаптивной поисковой оптимизации живого. На её базе выявляются характерные времена и размеры биосистем, сравниваются различные теории биологической эволюции, рассматривается метаэволюция (возникновение новых ярусов в иерархии) живого, оценивается длительность соответствующих метафаз, обсуждается связь существующих пространственных биообразований с метафазами их возникновения

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=389>

The system consideration of life nature from informatics-cybernetic positions is offered: the concept of hierarchical adaptive search optimization of life. On its base the characteristic times and sizes of bio-systems are explored, the various theories of bio-evolution are compared, meta-evolution (occurrence of new tiers of hierarchy) of life and duration of appropriate meta-phases is estimated, communication of existing spatial bio-formations with meta-phases of their occurrence is discussed

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=389

СЕКЦИЯ 2**КОМПЬЮТЕРНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ, ИХ ОРГАНИЗАЦИЯ (СЕТИ И ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ
ВЫЧИСЛЕНИЯ)****SECTION 2****COMPUTING AND COMPUTING MANAGEMENT (NETWORKS AND PARALLEL
COMPUTATION)****КЛАСТЕРНЫЕ РАСЧЁТЫ N-КРАТНЫХ
ИНТЕГРАЛОВ ПЕРЕКРЫВАНИЯ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ
ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ НА МНОГОМЕРНОЙ СЕТКЕ****Михайлов И.В., Сухинин И.А.**Институт геохимии и аналитической химии
им.В.И.Вернадского РАН

Создание кластеров из нескольких персональных компьютеров, объединённых локальной сетью, является в настоящее время задачей, не требующей больших временных и материальных затрат. Доступность таких кластеров делает их своеобразным средним звеном между ПК и большими суперкомпьютерами. Кластер, собранный из пяти ПК, был использован при расчёте кратных интегралов перекрытия функций N-мерных гармонических осцилляторов

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=514>**CLUSTER CALCULATIONS OF THE N- MULTIPLE
INTEGRALS OF THE OVERLAPPING OF
OSCILLATING WAVE FUNCTIONS ON THE
MULTIDIMENSIONAL GRID****Mihaylov I.V., Suhinin I.A.**V.I.Vernadsky Institute of Geochemistry and Analytical
Chemistry of Russian Academy of Sciences

Creation of clusters from several personal computers, united under local network, it is at present task, not requiring high temporal and material expenditures. Such clusters are unique middle link between PC and large supers-computer. Five-PC cluster was used for the calculation of multiple integrals of the overlapping of the functions of multidimensional harmonic oscillators

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=514**ПРОГРАММНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ БЫСТРЫХ
КВАНТОВОХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ ДОКИНГ-
КОМПЛЕКСОВ****Мендкович А.С., Аникин Н.А., Андреев А.М.,
Бобриков В.В., Кузьминский М.Б., Мускатин А.Ю**
Институт органической химии им.Н.Д.Зелинского РАН

Разработан базовый комплекс программных средств для массовых квантовохимических расчетов докинг-комплексов. Программы ориентированы на расчеты в гетерогенной распределенной вычислительной среде. Метод апробирован на комплексах лигандов (28-144 атома) и протеинах (до 1852 атомов) из Protein Data Bank и PDBBIND. Метод обеспечивает ускорение: относительно стандартной диагонализации - в 300-1000 раз, а относительно специализированных методов CG-DMS и DivCon - в 5-120 раз; выигрыш растет при увеличении протеина

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=458>**HIGH-PERFORMANCE SOFTWARE FOR DOCKING
COMPLEX CALCULATIONS****Mendkovich A.S., Anikin N.A., Andreev A.M.,
Bobrikov V.V., Kuzminskiy M.B., Muskatina A.Yu.**
N.D.Zelinsky Institute of Organic Chemistry of Russian
Academy of Sciences

Basic high-performance software for massive docking complex quantum chemical calculations has been developed. The programs are dedicated for heterogeneous distributed computing. The method has been tested by the calculations of complexes of ligands (28-144 atoms) and proteins (up to 1852 atoms) listed in Protein Data Bank and PDBBIND. The method provide acceleration in 300-1000 times in compare with standard diagonalization procedure and in 5-120 times in compare with dedicated methods CG-DMS and DivCon; the advantages grows with increasing of protein size

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=458

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ РАСТВОРИТЕЛЕЙ
НА ПРОТЕКАНИЕ ФОТОХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ****Морозов В.А.**

Институт органической химии им.Н.Д.Зелинского РАН

Составлены программы решения дифференциальных уравнений, описывающих молекулярную бифуркационную динамику при фотохимических реакциях с учетом флуктуаций ширины и высоты потенциального барьера реакции и значения энергии возбужденного резонансного электронного состояния реакционного центра. В результате анализа полученных решений этих уравнений охарактеризовано влияние растворителей на протекание фотохимических реакций для моделей реакционных центров с барьерами различной формы

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=402>

**MODELING OF INFLUENCE OF SOLVENTS ON
COURSE OF PHOTOCHEMICAL REACTIONS****Morozov V.A.**

N.D.Zelinsky Institute of Organic Chemistry of Russian Academy of Sciences

Programs of the solution of the differential equations describing molecular bifurcation dynamics at photochemical reactions in view of fluctuations of width and height of a potential barrier of reaction and value of energy of the excited resonant electronic state of the reactionary center are made. By analysis of the received solutions of the equations influence of solvents on course of photochemical reactions for reactionary centers models with barriers of the various forms is characterized

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=402

НЕКОТОРЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ СЕРВИС-ОРИЕНТИРОВАННОЙ ГРИД-СЕТИ ДЛЯ ЗАДАЧ КОМПЬЮТЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ ХИМИКО-ФИЗИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ**Жучков А.В., Твердохлебов Н.В.**

Институт химической физики РАН им. Н.Н.Семёнова

Описан опыт применения грид-сегмента для решения ряда химико-физических задач большой размерности. Базовые средства грид дополнены сервисами для интерактивного управления заданиями на основе контрольных точек и метаописаний состояния заданий. Созданные сервисы не только позволяют повысить эффективность использования ресурсов грид-сегмента, но и увеличивают его привлекательность для пользователей

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=412>

SOME POSSIBILITIES OF SERVICE-ORIENTED GRID-SEGMENT USAGE FOR COMPUTERIZED INVESTIGATION OF CHEMICAL-PHYSICS MODELS**Juchkov A.V., Tverдохлебов N.V.**

N.N.Semenov Institute of Chemical Physics of Russian Academy of Sciences

An experience is described of the Grid-segment usage in solving some large scale chemical-physics problems. To control jobs interactively basic Grid tools are extended by services of checkpoints and meta-descriptions of job statuses. Implemented services not only increase efficiency of usage of Grid-resources but also improve attractiveness of Grid from users' point of view

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=412

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДЫРОЧНО-ТРАНСПОРТНЫХ СВОЙСТВ РЯДА АРОМАТИЧЕСКИХ АМИНОВ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ОРГАНИЧЕСКИХ СВЕТОДИОДАХ**Фрейдзон А.Я., Багатурьянц А.А., Алфимов М.В.**

Центр фотохимии РАН

Методом DFT с функционалом PBE рассчитаны геометрические и электронные структуры, потенциалы ионизации, сродство к электрону и энергия реорганизации ряда ароматических аминов, используемых в органических светодиодах. Проанализированы изменения, происходящие в указанных соединениях при ионизации. Для карбазольных соединений также рассчитаны энергии синглет-триплетных переходов и проанализированы изменения, происходящие при их переходе в триплетное состояние

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=404>

HOLE-TRANSPORTING PROPERTIES OF SOME AROMATIC AMINES USED IN ORGANIC LIGHT-EMITTING DIODES: A THEORETICAL STUDY**Freydzon A.Y., Bagaturyanc A.A., Alfimov M.V.**

Photochemistry Center of the Russian Academy of Sciences

Geometric and electronic structures, ionization potentials, electron affinities, and reorganization energies of some aromatic amines used in organic light-emitting diodes are studied using density functional theory (DFT) with a PBE functional. The changes taking place in these compounds in ionization are analyzed. For carbazole derivatives, singlet-triplet transition energies are also calculated and the changes taking place in triplet state are analyzed

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=404

СЕКЦИЯ 3**МОДЕЛИРОВАНИЕ, ЧИСЛЕННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ****SECTION 3****COMPUTER SIMULATION****ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СТРУКТУРЫ ГИАЛУРОНИДАЗЫ БЫКА И ЕЕ КОМПЛЕКСОВ С ГИАЛУРОНОВОЙ КИСЛОТОЙ, ХОНДРОИТИНСУЛЬФАТОМ, ГЕПАРИНОМ И САХАРАМИ**

Лихацкая Г.Н., Бородина А.С., Трифионов Е.В., Нурминский Е.А., Максименко А.В.
Тихоокеанский институт биоорганической химии
ДВО РАН

Низкомолекулярные лиганды взаимодействуют с активным центром фермента в области каталитической пары. В полученной модели комплекса ингибитора с ферментом гепарин образует водородную связь с GLU 149 активного центра. Области связывания моно- и дисахаров с ферментом совпадают. Показано, что в присутствии сахаров взаимодействие молекулы субстрата с ферментом затруднено. Сахара конкурируют за образование водородной связи с GLU 149 с ингибиторами. В модели комплекса олигомера хондроитинсульфата с гиалуронидазой лиганд расположен на расстоянии 5-7Å от активного центра фермента. Полученные данные создают основу для выяснения на молекулярном уровне возможных механизмов стабилизации фермента и регуляции его активности

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=423>

THEORETICAL MODELS OF THE SPATIAL STRUCTURE OF BOVINE HYALURONIDASE AND ITS COMPLEXES WITH HYALURONIC ACID, CHONDROITIN SULFATE, HEPARIN AND SUGARS

Likhatskaya G.N., Borodina A.S., Trifonov E.V., Nurminckiy E.A., Maksimenko A.V.
Pacific Institute of Bioorganic Chemistry

Low molecular weight ligands interact with an active site of an enzyme in the catalytic pair area. In the suggested model of the inhibitor-enzyme complex, heparin forms a hydrogen bond with GLU 149 of the active site. Binding sites for mono- and disaccharides are the same. It is shown that the interaction of a substrate molecule with the enzyme is hindered in the presence of sugars. Sugars compete with inhibitors for the hydrogen bonding with GLU 149. In the model of the complex of oligomeric chondroitin sulfate with hyaluronidase, the ligand is located at 5-7Å distance from the active site of the enzyme. The data obtained provide the basis for the understanding of possible mechanisms of enzyme stabilization and regulation of its activity on the molecular level

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=423

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПРОТИВОВИРУСНЫХ ПРЕПАРАТОВ С НЕЙРАМИНИДАЗОЙ ГРИППА А

Гришина М.А., Потемкин В.А., Переяславская Е.С., Барташевич Е.В., Русинов В.Л.
Челябинский государственный университет

Проведен анализ ингибиторов нейраминидазы вируса гриппа А. Молекулы ориентированы в полости нейраминидазы с использованием алгоритма BiS. Анализ комплексов позволил выявить активные центры лекарственных средств. Обнаружено, что таковым является атом кислорода, который ориентируется около GLU119, ILE149, ASP151 аминокислотных остатков нейраминидазы. В рамках алгоритма CoCon найдены количественные закономерности активности от параметров строения комплексов «рецептор-лиганд»

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=494>

MODELING OF INTERACTIONS OF ANTIVIRAL COMPOUNDS WITH INFLUENZA VIRUS NEURAMINIDASE

Grishina M.A., Potemkin V.A., Pereyaslavskaya E.S., Bartashevich E.V., Rusinov V.L.
Chelyabinsk State University

Analysis of antiviral compounds (inhibitors of influenza virus neuraminidase) has been carried out. The compounds have been oriented in the neuraminidase cavity within algorithm BiS. Consideration of the complexes allowed to obtain active centers of the compounds. It has been found that the reaction center of high active drugs is the oxygen atom that is oriented near GLU119, ILE149, ASP151 aminoacid residues. The quantitative relationships of activity and characteristics of "neuraminidase-ligand" complexes have been created within algorithm CoCon

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=494

**К МОДЕЛИРОВАНИЮ РАБОТЫ
БИОЛОГИЧЕСКОГО НАСОСА****Хахимов А.Г., Салман С.А.**

Институт механики уфимского научного центра РАН

Рассматриваются статическая и динамическая модель биологического насоса с целью нахождения определяющих зависимостей, характеризующих его работу. В простой динамической модели биологического насоса также не учитываются силы инерции жидкости и движение жидкости определяется перепадами давлений в полостях. В полной динамической модели биологического насоса учитываются силы инерции жидкости и элементов оболочки. Для интегрирования уравнений движения оболочки и жидкости применяется метод конечных разностей типа Уилкинса. Модель состоит из двух сферических мягких оболочек, соединенных последовательно с помощью обратного клапана, нагнетательной линии, состоящей из нескольких мягких цилиндрических оболочек, которые соединены с тонкими капиллярными цилиндрическими оболочками, которые далее объединяются в крупные цилиндрические оболочки, соединенные со сферической оболочкой. Значение давления определяется количеством жидкости в упругой оболочечной системе

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=512>**TOWARDS MODELING OF THE BIOLOGICAL PUMP
FUNCTION****Khakimov A.G., Salman S.A.**

Institute of Mechanics of the Ufa Branch of Russian Academy of Sciences

Static and dynamic models of the biological pump are considered to determine the major rules describing its function. A simple dynamic model of the biological pump does not take into account the forces of liquid inertia, and the flow of liquid is defined by pressure differences in cavities. In the full dynamic model of the biological pump the inertial force of a liquid and membrane elements are taken into account. The method of final differences such as Wilkins method is applied for integration of equations of membrane and liquid motion. The model comprises two soft spherical membranes connected by back pressure valve, injection line consisting of several soft cylindrical membranes connected to thin capillary cylindrical membranes, which are combined further into larger cylindrical membranes connected to a spherical membrane. Pressure value is defined by the amount of liquid in the system of elastic membranes

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=512**КОМПЬЮТЕРНЫЙ ПОИСК НОВЫХ ИНГИБИТОРОВ
ИНТЕГРАЗЫ ВИЧ-1****Дружиловский Д.С., Филимонов Д.А.,****Лагунин А.А., Глориезова Т.А., Поройков В.В.**ГУ НИИ Биомедицинской химии им.В.Н.Ореховича
РАМН

Целью настоящей работы является создание модели прогнозирования биологической активности ингибиторов интегразы ВИЧ-1 и ее апробация на примере поиска новых ингибиторов интегразы ВИЧ-1. В рамки данной работы входит попытка оценить структурные особенности и физико-химические параметры известных ингибиторов интегразы ВИЧ-1 и применить их для поиска новых перспективных соединений для анти-ВИЧ терапии

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=508>**COMPUTER SEARCH OF NEW HIV-1 INTEGRASE
INHIBITORS****Druzhilovskiy D.S., Filimonov D.A., Lagunin A.A.,****Gloriozova T.A., Poroykov V.V.**V.N.Orekhovich Institute of Biomedical Chemistry of
Russian Academy of Medical Sciences

The purpose of the present work was to develop a model forecasting the biological activity of HIV-1 integrase inhibitors and its testing by searching for new inhibitors of HIV-1 integrase. This work includes an attempt to estimate structural features and physical and chemical parameters of known HIV-1 integrase inhibitors and to apply them for searching of new promising compounds for the anti-HIV therapy

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=508

**ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ КОМПЬЮТЕРНОГО
МОДЕЛИРОВАНИЯ К КИНЕТИЧЕСКОМУ АНАЛИЗУ
АНТИОКСИДАНТНОЙ АКТИВНОСТИ
ДВУХАТОМНЫХ ФЕНОЛОВ ПРИ ОКИСЛЕНИИ
СТИРОЛА**

Плисс Е.М., Тихонов И.В., Лошадкин Д.В.
Ярославский государственный университет
им. П.Г. Демидова

В сложных случаях важным и часто единственным способом кинетического анализа является моделирование с использованием численного решения систем дифференциальных уравнений. В настоящей работе этот подход применен для анализа экспериментальных данных по окислению стирола в присутствии двухатомных фенолов (гидрохинонов и пирокатехинов). Данная цепная реакция служит удобной моделью для изучения антиоксидантной активности природных полифенолов в процессе жизнедеятельности биологических систем

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=506>

**APPLICATION OF COMPUTER MODELING METHODS
TO KINETIC ANALYSIS OF ANTIOXIDANT ACTIVITY
OF DIPHENOLS IN STYRENE OXIDATION**

Pliss E.M., Tihonov I.V., Loshadkin D.V.
P.D. Demidov Yaroslavl State University

Modeling using numerical solution of differential equation systems is an important and often the only possible way of kinetic analysis in complex cases. This approach is applied in the present work for analysis of experimental data on styrene oxidation in the presence of diphenols (hydroquinones and pyrocatechols). This chain reaction represents a convenient model for studies of antioxidant activity of natural polyphenols involved in the life cycle of biological systems

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=506

**РАВНОВЕСНЫЕ И НЕРАВНОВЕСНЫЕ ЭФФЕКТЫ
СОЛЬВАТАЦИИ**

Базилевский М.В.
Центр фотохимии РАН

Если сольватация растворенного молекулярного субстрата равновесна, то сольватная оболочка подстроена под его структуру и его зарядовое распределение. В этом случае ее роль сводится к созданию потенциала, который влияет на внутренние процессы в субстрате. При неравновесной сольватации перестройка сольватной оболочки становится кинетически активной стадией химического процесса. Это принципиальное различие между равновесными и неравновесными эффектами будет обсуждено на двух примерах: реакции переноса электрона и спектрах абсорбции и эмиссии в полярных средах

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=505>

**EQUILIBRIUM AND NON-EQUILIBRIUM SOLVATION
EFFECTS**

Bazilevsky M.V.
Photochemistry Center of the Russian Academy of
Sciences

In equilibrium solvation of a dissolved molecular substrate its solvate shell is arranged according to its structure and its charge distribution. In this case its role is limited to creation of a potential affecting internal processes in substrate. In nonequilibrium solvation reorganization of a solvate shell becomes a kinetically active step of the chemical process. This important difference between equilibrium and nonequilibrium effects will be discussed using two examples: electron transfer reaction and absorption and emission spectra in polar media

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=505

**ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ
ЭЛЕКТРОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК
ДИГИДРОПИРИМИДИНОВ, ОБЛАДАЮЩИХ
ПРОТИВОТУБЕРКУЛЕЗНОЙ АКТИВНОСТЬЮ**

**Барташевич Е.В., Переяславская Е.С.,
Потемкин В.А., Гришина М.А., Федорова О.В.,
Русинов Г.Л.**
Челябинский государственный университет

Выполнено комплексное исследование туберкулостатической активности дигидропиримидинов с помощью 3D-QSAR алгоритма BiS/MC. Исследованы электронные и энергетические характеристики структур (ab initio, DFT B3LYP/6-311G(d,p)), установлена количественная взаимосвязь рMIC с плотностью потенциальной энергии в критической точке связи N1-C2 дигидропиримидинового цикла и зарядами атомных бассейнов C4, C5. При анализе комплексов соединений с дигидрофолатредуктазой выявлено, что биологическая активность зависит от ориентации дигидропиримидинов по отношению к PHE31

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=503>

**THEORETICAL RESEARCH OF ELECTRONIC
PROPERTIES OF ANTI-TUBERCULAR ACTIVE
DIHYDROPIRIMIDINES**

**Bartashevich E.V., Pereyaslavskaya E.S.,
Potemkin E.A., Grishina M.A., Fedorova O.V.,
Pusinov G.L.**
Chelyabinsk State University

The structure . activity relationships of dihydrofolatreductase (DHFR) inhibitors, containing dihydropyrimidine cycles and podand chains were studied using 3D-QSAR algorithm BiS/MC. The electronic and energy characteristics (DFT B3LYP/6-311G(d,p)) of compounds were analyzed. The quantitative relationship between pMIC and electronic characteristics such as potential energy density of N1-C2 bond critical point and C4, C5 atomic basins charges, is created. Activity of the dihydropyrimidine derivatives is dependent on their orientation respectively to PHE31 of DHFR

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=503

МОДЕЛИРОВАНИЕ КОЛЕБАТЕЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ ВИБРОННЫХ СПЕКТРОВ ДИНАФТИЛЭТИЛЕНА ПАРАМЕТРИЧЕСКИМ МЕТОДОМ

Баранов В.И., Соловьев А.Н.

Институт геохимии и аналитической химии
им.В.И.Вернадского РАН

Во втором приближении параметрического метода теории вибронных спектров проведен расчет колебательной структуры спектра флуоресценции и структуры молекулы динафтилэтилена в возбужденном состоянии. Получено хорошее согласие вычисленных спектров с экспериментальными. Показана переносимость параметров второго приближения для сложных молекул, содержащих участки линейной и циклической структуры. Определена роль угловых параметров метода при количественном прогнозировании колебательной структуры спектра и изменений геометрии молекулы при возбуждении

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=485>

MODELING OF THE VIBRATIONAL STRUCTURE OF VIBRONIC SPECTRA OF DINAPHTHYLETHYLENE BY THE PARAMETRICAL METHOD

Baranov V.I., Solovyev A.N.

V.I.Vernadsky Institute of Geochemistry and Analytical
Chemistry of Russian Academy of Sciences

Calculations of the vibrational structure of the fluorescence spectrum and the dinaphthyl ethylene molecular structure in excited state were performed in the second approximation of the parametrical method of the vibronic spectra theory. Calculated spectra are in good agreement with experimental data. Transferability of the second approximation parameters for complex molecules containing linear or ring fragments has been demonstrated. The role of angular parameters of the method in the quantitative forecasting of the vibrational structure of a spectrum and changes in the geometry of the molecule upon excitation is determined

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=485

СРАВНИТЕЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ IN SILICO МЕЙОТИЧЕСКОГО КОГЕЗИНА REC8 И ЕГО МИТОТИЧЕСКОГО ГОМОЛОГА RAD21

Гришаева Т.М., Богданов Ю.Ф., Дадашев С.Я.

Институт общей генетики им.Н.И.Вавилова РАН

Методами биоинформатики проведено сравнительное изучение когезинов группы Rec8/Rad21 у 6 видов, представляющих разные эукариотические таксоны. Различия между мейотическими (Rec8) и митотическими (Rad21) когезинами выявлены как внутри "консервативного" функционального домена, так и за его пределами. Различается также вторичная структура этих групп белков. Полученные данные могут отражать различие функций, выполняемых митотическими и мейотическими когезинами

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=487>

IN SILICO COMPARISON STUDIES OF MEIOTIC REC8 COHESIN AND ITS MITOTIC RAD21 HOMOLOG

Grishaeva T.M., Dadashev S.Ya., Bogdanov Yu.F.

V.I. Vavilov Institute of General Genetics of Russian
Academy of Sciences

Comparison studies of Rec8/Rad21 cohesin group were carried out in silico in 6 species representing different eukaryotic taxa. Differences between meiotic (Rec8) and mitotic (Rad21) cohesins were found in the "conserved" functional domain as well as outside it. The secondary structure of these protein groups also differs. The data obtained may reflect the difference of functions performed by mitotic and meiotic cohesins

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=487

МОДЕЛИРОВАНИЕ КОМПЛЕКСА N-ДОМЕНА АНГИОТЕНЗИН-ПРЕВРАЩАЮЩЕГО ФЕРМЕНТА С ПЕПТИДОМ АЛЬЦГЕЙМЕРА

Жаркова М.С., Веселовский А.В.

ГУ НИИ Биомедицинской химии им.В.Н.Ореховича
РАМН

Недавно было показано, что ангиотензин-превращающий фермент (АПФ) способен расщеплять пептид Альцгеймера в нескольких положениях, причем основную роль принадлежит N-домену этого фермента. В работе построена модель N-домена АПФ по гомологии с его С-доменом. Формирование структуры активного центра фермента близкого к кристаллической структуре этого домена происходило только в результате длительной молекулярной динамики при повышенной температуре. Была построена модель комплекса N-домена АПФ с шестнадцатичленным доменом пептида Альцгеймера. Полученная модель комплекса позволяет объяснить различия в местах расщепления полноразмерного и шестнадцатичленного амилоидного пептида

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=515>

MODEL OF COMPLEX OF N-DOMAIN OF ANGIOTENSIN-CONVERTING ENZYME WITH ALZHEIMER'S PEPTIDE

Zharkova M.S., Veselovskiy A.V.

V.N.Orekhovich Institute of Biomedical Chemistry of
Russian Academy of Medical Sciences

Recently it was shown that angiotensin-converting enzyme (ACE) able to proteolytic cleavage of Alzheimer's peptide in several positions and the N-domain of this enzyme is crucial for this cleavage. The three-dimensional model of N-domain of ACE was design based on structure of the C-domain of this enzyme. The realistic structure of N-domain (similar to crystal structure of this domain) was obtained only after prolonged molecular dynamics at high temperature. The model of complex of N-domain of ACE with 16-members domain of Alzheimer's peptide was designed. This model allows to justify the observed difference in cleavage positions of the full and 16-members domain of Alzheimer's peptide by N-domain of ACE

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=515

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ МЕЖДУ ЗАРЯЖЕННЫМИ ГРУППАМИ АМИНОКИСЛОТ И БЕЛКОВ**Клюев С.А.**

Белгородский государственный университет

Исследовано взаимодействие между заряженными группами аминокислот и белковых фрагментов Lys-Asp / Lys-Glu методом РМЗ. Компьютерные модели сравнивались с данными ЯМР и дифракции x-лучей для белков (файлы из The RCSB Protein Data Bank.). Рассмотрена концепция образования H-связей применительно к заряженным группам

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=398>

INTERACTION BETWEEN CHARGED GROUPS OF AMINOACIDS AND PROTEINS**Klyuev S.A.**

Belgorog State University

Investigation of interaction between charged groups of aminoacids and Lys-Asp / Lys-Glu protein fragments was carried out using PM3 method. The computer models were compared with NMR and x-ray diffraction data for proteins (files from The RCSB Protein Data Bank.). Conception of H-bond formation for charged groups was considered

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=398

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ АНИОН-РАДИКАЛА 1,3-ДИНИТРОБЕНЗОЛА МНОГОКОНФИГУРАЦИОННЫМИ МЕТОДАМИ**Михайлов М.Н., Кузьминский М.Б.,****Мендкович А.С., Капранов В.А., Русаков А.И.**

Институт органической химии им.Н.Д.Зелинского РАН

Методами квантовой химии исследованы особенности строения анион-радикала 1,3-динитробензола в основном и низшем возбужденном дублетном состоянии. Показано, что для адекватного описания электронного строения таких структур необходимо использования многоконfigurационного метода (CASSCF). Расчеты свидетельствуют о наличии двух асимметричных и одной симметричной структур анион-радикала. На основании анализа особенностей поверхности потенциальной энергии получены оценки энергий этих структур

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=395>

CASSCF STUDY OF 1,3-DINITROBENZENE ANION RADICAL**Mihailov M.N., Kuzminsky M.B., Mendkovitch A.S., Kapranov V.A., Rusakov A.I.**

N.D.Zelinsky Institute of Organic Chemistry of Russian Academy of Sciences

Structure of anion radical of 1,3-dinitrobenzene in the ground state and in the lowest excited doublet state were studied using methods of quantum chemistry. It has been shown that an adequate description of the electronic structure of such species requires the multiconfiguration method (CASSCF). Calculations suggest the presence of two non-symmetrical and one symmetrical structures of the anion radical. Estimations of energies of these structures were obtained from the analysis of features of the potential energy surface

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=395

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕАКЦИЙ ИЗОМЕРИЗАЦИИ ТРИПЛЕТНЫХ НИТРОСОЕДИНЕНИЙ И НИТРОЗООКСИДОВ**Зеленцова Н.В., Зеленцов С.В.**

Нижегородский государственный университет им.Н.И.Лобачевского

Методами квантовой химии (ROHF/6-31G, ROB3LYP/6-31G, CASSCF(8,8)/6-31G) изучены структуры и энергии стационарных состояний на поверхностях RNO₂, где R = фенил, пара-аминобензол, пара-хлорбензол. Сделан вывод о легкости изомеризации нитросоединений и нитрозооксидов в триплетном состоянии друг в друга. Легкость этих переходов мало зависит от природы заместителя R

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=469>

QUANTUM CHEMICAL STUDY OF THE TRIPLET NITROCOMPOUND. TRIPLET NITROSO OXIDE**Zelentsova N.V., Zelentsov S.V.**

N.I.Lobachevskiy State University of Nizhniy Novgorod

Quantum chemical methods (ROHF/6-31G, ROB3LYP/6-31G, CASSCF(8,8)/6-31G) were used to study geometric and energies of stationary states on the RNO₂ (where R = Ph, p-NH₂C₆H₄, p-ClC₆H₄) potential energy surfaces. It was shown that the isomerization of nitroso oxide to nitro compounds and vice versa proceeded with easiness, being little depended upon nature of substituent R

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=469

АНАЛИЗ ВТОРИЧНЫХ СТРУКТУР БЕЛКОВ Т-КОМПЛЕКСА С ПОМОЩЬЮ РАЗЛИЧНЫХ ПРОГРАММ**Чумаков М.И.**

Институт биохимии и физиологии растений и микроорганизмов РАН

С помощью программы TMpred для белка VirE2 не найдено α -спиралей (при заданной длине 14-41 п.о.). Для белка VirD2 α -спираль (в двух возможных ориентациях) на одном и том же отрезке цепи (при параметрах минимальной и максимальной длины спирали 17 и 33) соответственно. На участке 81-100 для белка VirD2 возможно существование α -спирали длиной 17 п.н. с ориентацией изнутри наружу. С помощью программы PROFsec не найдено трансмембранных α -спиралей в VirD2 и VirE2, однако найдены участки, не имеющие регулярной вторичной структуры: для VirD2 – 362-432, для VirE2 – 1-91. Таким образом, VirE2 не имеет в своей структуре трансмембранных спиралей подобных спиралам из базы данных TMbase. Можно предположить, что VirE2 или не встраивается в мембрану или встраивается, но способом, отличающимся от встраивания мембранных α -спиральных белков с известной на сегодняшний день структурой

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=413>**COMPUTATION ANALYSIS OF SECOND STRUCTURES IN T-DNA- ASSOCIATED PROTEINS****Chumakov M.I.**

Institute of Biochemistry and Physiology of Plants and Microorganisms of the Russian Academy of Sciences

No α -helices were found for VirE2 protein using TMpred program (at the set length of 14-41 base pairs). For VirD2 protein α -helix (in two possible orientations) on the same subchain (with parameters of minimum and maximal length of helix being 17 and 33) respectively. α -Helix of 17 nucleotide pairs length may exist on the 81-100 section of VirD2 protein with inside out orientation. No transmembrane α -helices were found in VirD2 and VirE2 using PROFsec program. However, areas without regular secondary structures were found: 362-432 for VirD2 and 1-91 for VirE2. Thus, the structure of VirE2 lacks transmembrane helices similar to helices from the TMbase database. Presumably, VirE2 is either not incorporated in a membrane or is incorporated in a different way compared to currently known α -helix membrane proteins

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=413**ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ РЕАКЦИЙ С-АРИЛИРОВАНИЯ С УЧАСТИЕМ НЕСИММЕТРИЧНЫХ ДИХЛОРИДОВ ТРИАРИЛВИСМУТА****Марьясин Б.А., Фёдоров А.Ю., Зеленцов С.В.**

Нижегородский государственный университет им.Н.И.Лобачевского

В рамках теории функционала электронной плотности исследованы пути реакций С-арилирования с участием несимметричных дихлоридов триарилвисмута, с целью описания экспериментально установленной зависимости региоселективности реакций от используемого субстрата. Определены геометрические и энергетические параметры образующихся интермедиатов. Показано, что образование продуктов арилирования или фенилирования может быть объяснено различием указанных выше параметров интермедиатов

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=472>**THEORETICAL STUDY OF C-ARYLATION WITH PARTICIPATION OF NON-SYMMETRICAL TRIARYLBISMUTH DICHLORIDES****Maryasin B.A., Fedorov A.Y., Zelentsov S.V., Comb S., Finet J-P.**

N.I.Lobachevskiy State University of Nizhniy Novgorod

The reaction pathways of C-arylation with participation of non-symmetrical triaryl bismuth dichlorides were studied using the density functional theory method in order to describe the experimentally observed reaction's regioselectivity as a function of used substrates. The geometrical and energetic parameters intermediates formed were determined. It was shown, that the formation of arylation (phenylation) product can be explained by distinction of parameters of intermediates

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=472

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ПОВЕРХНОСТИ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ
КОМПЛЕКСОВ ЦИКЛИЧЕСКИХ БОРНЫХ ЭФИРОВ
С ОСНОВАНИЯМИ ЛЬЮИСА**

Кузнецов В.В., Валиахметова О.Ю., Бочкор С.А.
Уфимский государственный нефтяной технический
университет

Компьютерное моделирование поверхности потенциальной энергии (ППЭ) комплексов 2-метил-1,3,2-диоксаборинана – типичной кислоты Льюиса – с основаниями Льюиса – водой и аммиаком (1:1) методом RHF//AM1 показало, что возможны лишь несколько стабильных ассоциатов между одной молекулой основания и циклическим борным эфиром: два в случае воды и три в случае аммиака. Для всех типов комплексов на ППЭ выявлены основные и локальные минимумы и отдельные максимумы

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=406>

**COMPUTER FORMATION OF POTENTIAL ENERGY
SURFACE OF COMPLEXES OF CYCLIC BORONIC
ACIDS WITH LEWIS BASES**

Kuznetsov V.V., Valiahmetova O.U., Bochkor S.A.
Ufa State Technical Oil University

Computer formation of potential energy surface (PES) of complexes of 2-methyl-1,3,2-dioxaborinane – the typical Lewis acid – with Lewis bases: water and ammonia (1:1) by the RHF//AM1 method led to the conclusion that only two types of complexes with one molecule of water and three – with one molecule of ammonia are possible. The main and local minima as well as several maxima for all types of complexes on the PES were established

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=406

**ВИНИЛ-КРЕМНИЕВЫЕ КАТИОНЫ: ВЛИЯНИЕ
ЗАМЕСТИТЕЛЕЙ НА ВИД ПОВЕРХНОСТИ
ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ**

Марьясин Б.А.

Нижегородский государственный университет
им.Н.И.Лобачевского

Исследовано влияние эффекта замещения на вид поверхности потенциальной энергии систем винил-кремниевых катионов. Стационарные точки рассчитаны в рамках теории функционала электронной плотности. Обнаружено, что заместители определяют геометрию минимумов, катионы сильно стабилизируются в случае π-донорных заместителей

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=471>

**VINYL SILICENIUM CATION: SUBSTITUENT EFFECTS
ON THE POTENTIAL ENERGY SURFACE**

Maryasin B.A., Karni M., Apeloig Y.

N.I.Lobachevskiy State University of Nizhniy Novgorod

We have investigated substituent effects on the potential energy surface (PES) of vinyl silicium cations systems. The stationary points were initially located using the density functional theory method. It was shown, that substituents have an influence on the minima geometries; the cations are strongly stabilized by substitution with π-donors

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=471

**РАСЧЕТ МЕТОДОМ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ
DFT/B3LYP/6-31+G* РЕАКЦИИ ОКИСЛЕНИЯ
МОЛЕКУЛАМИ NNO ИОНОВ Ga(+) В КАТИОННЫХ
ПОЗИЦИЯХ БОЛЬШОГО КАНАЛА ЦЕОЛИТА ZSM-5**

Солкан В.Н.

Институт органической химии им.Н.Д.Зелинского РАН

Проведены расчеты методом функционала плотности DFT/B3LYP/6-31+G* реакции окисления молекулами NNO ионов Ga(+) в катионных позициях большого канала цеолита ZSM-5 с использованием кластерной модели. Вычислены термодинамические и активационные параметры образования оксокатионов Ga(III)=O(+) из Ga(I)(+) при использовании кластера 3T

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=399>

**DFT/B3LYP/6-31+G* DENSITY FUNCTIONAL
CALCULATIONS OF GA (+) IONS OXIDATION BY NNO
MOLECULES IN CATIONIC POSITIONS OF THE
LARGE CHANNEL OF ZSM-5 ZEOLITE**

Solkan V.N.

N.D.Zelinsky Institute of Organic Chemistry of Russian Academy of Sciences

DFT/B3LYP/6-31+G* density functional calculations of Ga (+) ions oxidation of by NNO molecules in cationic positions of the large channel of ZSM-5 zeolite were performed using cluster model. Thermodynamic and activation parameters of oxocations formation Ga (III) =O (+) from Ga (I) (+) were calculated using 3T cluster

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=399

**РАСЧЕТ МЕТОДОМ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ
DFT/B3LYP РЕАКЦИИ ДЕГИДРИРОВАНИЯ
ПРОПАНА НА АКТИВНЫХ ЦЕНТРАХ ZN(2+) В
КАТИОННЫХ ПОЗИЦИЯХ БОЛЬШОГО КАНАЛА
ЦЕОЛИТА ZSM-5**

Солкан В.Н.

Институт органической химии им.Н.Д.Зелинского РАН

Проведены расчеты методом функционала плотности DFT/B3LYP/6-31G** реакции дегидрирования пропана на активных центрах Zn(2+) в катионных позициях большого канала цеолита ZSM-5 с использованием кластерной модели 10T при удаленном расположении атомов алюминия. Рассмотрен механизм бифункционального катализа для одностадийной синхронной реакции дегидрирования пропана. Показана возможность дегидрирования пропана по многостадийному механизму. Вычислены ИК-спектры всех интермедиагов

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=400>

**DFT/B3LYP DENSITY FUNCTIONAL CALCULATIONS
OF PROPANE DEHYDROGENATION ON ZN(2+)
ACTIVE CENTERS IN CATIONIC POSITIONS OF THE
LARGE CHANNEL OF ZSM-5 ZEOLITE**

Solkan V.N.

N.D.Zelinsky Institute of Organic Chemistry of Russian Academy of Sciences

DFT/B3LYP density functional calculations of propane dehydrogenation on Zn(2+) active centers in cationic positions of the large channel of ZSM-5 zeolite were performed using 10T cluster model with remote arrangement of aluminium atoms. The mechanism of bifunctional catalysis for the single-stage synchronous dehydrogenation of propane is analyzed. Possible multi-step mechanism of propane dehydrogenation is discussed. IR-spectrums of all intermediates were calculated

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=400

**РАСЧЕТ НЕЭМПИРИЧЕСКИМ МЕТОДОМ С УЧЕТОМ
ЭЛЕКТРОННОЙ КОРРЕЛЯЦИИ MP2 ЭНЕРГИИ
СОЛЬВАТАЦИИ ПРОТОНА В ВОДЕ**

Солкан В.Н.

Институт органической химии им.Н.Д.Зелинского РАН

Проведены расчеты методом MP2/6-311++G** и функционала плотности DFT/B3LYP/6-311++G** ряда протонированных кластеров, состоящих из молекул воды (до 8 молекул) с учетом влияния водной среды в рамках континуальной модели РСМ. Проведенные расчеты показали, что гибридная модель сольватации (микросольватация + модель РСМ) позволяет вычислить энергию сольватации протона в воде с точностью 5 ккал/моль

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=405>

**AB INITIO ELECTRON CORRELATION MP2
CALCULATIONS OF THE SOLVATION ENERGY OF A
PROTON IN WATER**

Solkan V.N.

N.D.Zelinsky Institute of Organic Chemistry of Russian Academy of Sciences

MP2/6-311 ++ G ** calculations and DFT/B3LYP/6-311 ++ G ** density functional calculations of a number of protonated clusters consisting of water molecules (up to 8 molecules) were performed taking into consideration the effect of the aqueous medium within the PCM continuity model. The calculations have shown that the hybrid model of solvation (microsolvation + PCM model) allows to calculate the solvation energy of a proton in water with 5 kcal/mole accuracy

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=405

**ИССЛЕДОВАНИЕ ГЕТЕРОФАЗНОЙ
ПРИВИВОЧНОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ ВИНИЛОВЫХ
МОНОМЕРОВ К ПОЛИМЕРНЫМ МАТРИЦАМ
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ**

Биккулова А.Р., Дружинина Т.В., Абронин И.А.

Московский государственный текстильный университет им. А.Н.Косыгина

Полуэмпирическими и неэмпирическими методами квантовой химии рассчитаны энергетические характеристики реакций прививочной полимеризации метилметакрилата и метакриловой кислоты к ориентированным полимерам: поликапроамиду, гидратцеллюлозе, поливинилового спирту

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=408>

**STUDYING GETEROPHASE GRAFT
POLYMERIZATION VINYLIC MONOMERS INTO
POLYMERIC MATRIXES BY QUANTUM-CHEMICAL
METHODS**

Bikkulova A.R., Druzhinina T.V., Abronin I.A.

Moscow State Textile University 'A.N. Kosygin'

Power characteristics of reactions graft polymerization methylmethacrylate and methacrylic acid into the focused polymers: polycaproamide, cellulose and polyvinyl spirit have been calculated by semiempirical and nonempirical methods of quantum chemistry

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=408

ИЗУЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ L-, D-ИЗОМЕРОВ АСПАРАГИНОВОЙ КИСЛОТЫ И ПРОЛИНА С ПОМОЩЬЮ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ МЕТОДОВ РАСЧЕТА
Демухаммедова С.Д., Алиева И.Н.

Бакинский государственный университет

Полуэмпирическими методами квантовой химии рассчитана электронная структура остатков пролина и L-, D-изомеров аспарагиновой кислоты. Изучено влияние абсолютной конфигурации замещающих групп при ассиметрическом атоме углерода на распределение электронной плотности и поверхность потенциальной энергии исследуемых молекул

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=414>

QUANTUM-CHEMICAL CALCULATIONS OF THE PROLINE AND L-, D- ASPARAGINE AMINO ACIDS ELECTRONIC STRUCTURES

Demukhammedova S.D., Alieva I.N.

Baku State University

Electronic structures of the proline and L-, D-asparagine amino acids were investigated by the semi-empirical methods of quantum chemistry. The effect of the absolute configuration of the substituted groups at the asymmetrical carbon atom on the electronic density and potential energy surface of the investigated molecules was carried out

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=414

АКТИВНОСТЬ ЭКДИСТЕРОИДОВ В БИОТЕСТАХ, ИСКУССТВЕННЫХ (КОМПЬЮТЕРНЫХ) МОДЕЛЯХ И ЖИВЫХ СИСТЕМАХ

Тимофеев Н.П.

Научно-производственное предприятие КХ БИО

Проанализирована биологическая активность экдистероидов, исходя из базы данных структурного разнообразия и ключевых моментов взаимодействия с рецепторами. Показаны современные достижения в области прогнозирования активности программными средствами CoMFA и 4D-QSAR, приведены сравнительные результаты оптимизированных алгоритмов компьютерного моделирования. Рассмотрены направления исследований по молекулярному конструированию усовершенствованных конструкций рецепторов экдистероидов

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=467>

ACTIVITY ECDYSTEROIDS IN BIOTESTS, ARTIFICIAL (COMPUTER) MODELS AND ALIVE SYSTEMS

Timofeev N.P.

CF "BIO", с. Koryazhma

A noncontinual model of van der Waals interactions is suggested for quantitative description of physical and chemical properties (enthalpy of evaporation, boiling point, interfacial tension, viscosity, etc.) of individual molecular liquids. The model based on molecular (molar) characteristics of liquids such as molecular refraction, electrical dipole moment and molar volume. Invariant character of the relationship between correlation ratio coefficients is established at electrostatic and dispersion contributions for all analyzed properties

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=467

МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕАКЦИИ $O^1(D)+H_2O - 2OH(X^2П)$ МЕТОДАМИ НЕЭМПИРИЧЕСКОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Рябинкин И.Г., Новаковская Ю.В., Степанов Н.Ф.

Московский государственный университет им.М.В.Ломоносова

Методами неэмпирической молекулярной динамики в подходе Борна-Оппенгеймера рассмотрена реакция $O^1(D)+H_2O - 2OH(X^2П)$. Проанализировано относительное положение стационарных точек на поверхности потенциальной энергии (ППЭ) системы. Обсужден выбор метода решения электронной задачи. На основе анализа реакционной траектории даны оценки времен жизни интермедиатов. Проанализировано распределение энергии по степеням свободы продуктов и отмечена его асимметрия

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=474>

NONEMPIRICAL DYNAMICS SIMULATIONS OF THE $O^1(D)+H_2O - 2OH(X^2П)$ REACTION

Ryabinkin I.G., Novakovskaya Yu.V., Stepanov N.F.

M.V.Lomonosov Moscow State University

The simulations of the $O^1(D)+H_2O - 2OH(X^2П)$. reaction using Born-Oppenheimer nonempirical molecular dynamics approach have been carried out. Relative energetic stability of different stationary points on the potential energy surface (PES) has been considered. Appropriate electronic structure method is found. Reaction trajectory analysis has been made and the lifetimes of the intermediates were estimated. It was found that products have an asymmetry in the excess energy distribution over rotational-vibrational degrees of freedom

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=474

ПЕРЕГРУППИРОВКА КЛЯЙЗЕНА АЛЬФА-, ГАММА-ДИМЕТИЛАЛЛИЛОВЫХ ЭФИРОВ МЕТОКСИФЕНОЛОВ

Ключарева Е.В., Ершова Е.В., Левашова В.И., Кантор Е.А.

Уфимский государственный нефтяной технический университет

Направление термической перегруппировки альфа-, гамма-диметилаллиловых эфиров метоксифенолов зависит от положения заместителя в ядре. Проведено квантово-химическое исследование реакций методом ВЗРW91/6-31G*. Выполнена оптимизация геометрии исходных эфиров, интермедиатов и продуктов реакции, рассчитаны энергетические профили. Найдены переходные состояния для внутримолекулярной перегруппировки. Для межмолекулярной перегруппировки альфа-, гамма-диметилаллилового эфира метоксифенола рассчитан π -комплекс

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=418>

CLAISEN REARRANGEMENT OF ALFA-, GAMMA-DIMETHYL ALLYL ETHERS OF METHOXYPHENOLS

Kluchareva E.V., Ershova E.V., Levashova V.I., Kantor E.A.

Ufa State Technical Oil University

The direction of thermal rearrangement of alfa-, gamma-dimethyl allyl ethers of methoxyphenols depends on the position of the assistant in the aromatic ring. Quantum-chemical research of reactions is carried out by method ВЗРW91/6-31G*. Optimization of geometry of ethers, intermediates and products of reaction is executed, energy profiles are calculated. Transition states for intramolecular rearrangements are found. π -complex is obtained for intermolecular rearrangement of alfa-, gamma-dimethyl allyl ether of meta-methoxyphenol

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=418

СТРУКТУРНЫЕ И ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ ГИДРАТНЫХ КОМПЛЕКСОВ АТОМА И ИОНА НАТРИЯ: КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ РАССМОТРЕНИЕ

Воронцов А.В., Новаковская Ю.В., Степанов Н.Ф.

Московский государственный университет им.М.В.Ломоносова

С использованием методов MP2 и DFT рассчитаны кластеры $\text{Na}(\text{H}_2\text{O})_n$ с $n=1-30$. Обнаружено, что максимальное координационное число натрия равно 6 лишь в отсутствие последующих сольватных оболочек. Показано, что во всех случаях доминируют взаимодействия вода-вода, а центральная частица лишь создает дополнительный потенциал. Структура сетки водородных связей вокруг полости, сформированной вокруг сольватированной частицы, практически нечувствительна к ее электронному состоянию. Увеличение количества молекул воды приводит к резкому снижению потенциала ионизации натрия

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=429>

STRUCTURAL AND DYNAMIC PECULIARITIES OF THE NEUTRAL AND IONIC SODIUM AQUACOMPLEXES: QUANTUM CHEMICAL INVESTIGATION

Vorontsov A.V., Novakovskaya Yu.V., Stepanov N.F.

M.V.Lomonosov Moscow State University

$\text{Na}(\text{H}_2\text{O})_n$ clusters with $n=1-30$ were investigated with the use of MP2 and DFT methods. The maximum coordination number of sodium is found to be 6 only in the absence of the subsequent layers of water molecules. In all cases, the water-water interactions are shown to dominate, while the central particles only creates an additional potential. The hydrogen-bond network around the cavity formed around the solvated particle is practically insensitive to the electronic structure of the latter. An increase in the number of water molecules results in a sharp decrease in the ionization potential of sodium

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=429

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАЗРУШЕНИЯ МОЛЕКУЛ ГЕКСЕНА И МЕТИЛГЕКСЕНА

Шумилов И.В., Соловьев М.Е.

Ярославский государственный технический университет

Полуэмпирическим квантово-химическим методом PM3 исследовано изменение электронной структуры и влияние силы на деформацию молекул цис- и транс-гекса-3-ена и цис- и транс-3-метил-гекса-3-ена при растяжении их посредством применения гармонического потенциала к концевым атомам углерода. Оценено максимальное усилие, при котором происходит разрыв молекулы, показано, что оно мало зависит от конфигурации двойной связи. В результате молекулярного динамического моделирования было выяснено, что в процессе разрушения локальная температура молекулы может повыситься до 1000 K

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=470>

QUANTUM CHEMICAL MODELING OF THE HEXENE AND METHYLHEXENE MOLECULES DESTRUCTION

Shumilov I.V., Soloviev M.E.

Yaroslavl State Technical University

By the semi-empirical quantum-chemical method PM3 the change of electronic structure and dependence of force on deformation of molecules (Z)-hex-3-ene and (E)-hex-3-ene and (Z)-3-methyl-hex-3-ene and (E)-3-methyl-hex-3-ene at a stretching them by means of applying the harmonic potential to the terminate carbon atoms has been investigated. The estimation of maximal force, at which there comes destruction of molecules, shows that stereo structure of double bond make negligible influence on it. As a result of molecular dynamic simulation has been obtained that during destruction local temperature of a molecule can rise up to 1000 K

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=470

**СРАВНЕНИЕ НАДЕЖНОСТИ МЕТОДОВ
КВАНТОВОЙ ХИМИИ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ
ОТНОСИТЕЛЬНОЙ СТАБИЛЬНОСТИ
ФТОРПРОИЗВОДНЫХ ПРОТЯЖЕННЫХ
СОПРЯЖЕННЫХ СИСТЕМ**

**Головачева А.Ю., Щербинин А.В., Пупышев В.И.,
Степанов Н.Ф.**

Московский государственный университет
им.М.В.Ломоносова

Проведен сравнительный анализ использования различных методов квантовой химии для предсказания относительной стабильности изомеров фторпроизводных молекулы $C_{24}H_{12}$. Изучены относительные энергии фторпроизводных коронена, их геометрическое строение и распределение заряда. Исследовано влияние выбора базиса АО на результаты расчетов. Показано, что свойства фторпроизводных коронена, оцениваемые на уровне PM3, находятся в хорошем согласии с рассчитанными методом B3LYP/6-31G

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=428>

**COMPARISON OF RELIABILITY OF QUANTUM
CHEMISTRY METHODS IN THE STUDY OF RELATIVE
STABILITY OF FLUORINATED LARGE-SCALE
CONJUGATE SYSTEMS**

**Golovacheva A.Y., Sherbinin A.V., Papishev V.I.,
Stepanov N.F.**

M.V.Lomonosov Moscow State University

Comparative analysis of use of different quantum chemistry methods for prediction of relative stability of fluorinated $C_{24}H_{12}$ isomers is performed. Relative energies, geometric structure and charge distribution of fluorinated coronene derivatives are studied. Influence of the AO basis set choice on the results of calculation is investigated. It is shown that properties of fluorinated coronene derivatives estimated at PM3 level, are in good agreement with those calculated by B3LYP/6-31G* method

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=428

**МИГРАЦИЯ ЛИТИЯ В УГЛЕВОДОРОДЕ (C4H2)8
ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ ТОПОЛОГИИ,
МОДЕЛИРУЮЩЕМ НАНОТРУБКУ**

Балашов А.М., Ермилов А.Ю.

Московский государственный университет
им.М.В.Ломоносова

В рамках теории функционала плотности оценён барьер миграции лития в цилиндрическом углеводороде $(C_4H_2)_8$, позволяющий охарактеризовать подвижность металла в нанотрубках. Углеводород представляет собой систему восьми конденсированных бензольных колец замкнутых в цилиндр в соответствии с топологией углеродной нанотрубки типа armchair

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=465>

**LITHIUM MIGRATION IN CYLINDER LIKE
HYDROCARBON (C4H2)8 AS THE NANOTUBE
MODEL**

Balashov A.M., Ermilov A.Yu.

M.V.Lomonosov Moscow State University

On the base of density functional theory the migration barrier of lithium in the cylinder-like hydrocarbon $(C_4H_2)_8$ characterized metal agility in nanotubes was estimated. Hydrocarbon consist of eight benzene rings closed to vicious cylinder to be of "armchair"-type nanotube topology

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=465

**СРАВНЕНИЕ КОНСТРУКЦИЙ КЛИНОВЫХ РЕМНЕЙ
С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПРОГРАММНОГО
КОМПЛЕКСА ANSYS**

Соловьев И.В., Соловьев М.Е.

Ярославский государственный технический
университет

Проведено сравнение двух конструкций клинового ремня путем совместного анализа их напряженно-деформированного состояния с применением метода конечных элементов

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=464>

**COMPARISON OF V-BELTS DESIGN WITH ANSYS
SOFTWARE APPLICATION**

Soloviev I.V., Soloviev M.E.

Yaroslavl State Technical University

Comparison of two different V-belts constructions by combined analysis of deflected mode with finite elements method application conducted

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=464

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТНЫХ ФРАГМЕНТОВ ЧАСТИЦ КРЕМНЕЗЕМОВ**Барышева Н.А., Соловьев М.Е.**

Ярославский государственный технический университет

Произведен расчет параметров структурных фрагментов кремнеземов. Найдены оптимальные конформации элементарных предполагаемых частиц поверхности производных кремнекислот. Проанализировано динамическое поведение комбинированных систем при различных температурах

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=463>

MODELING OF SILICEOUS PARTICLES SURFACE FRAGMENTS**Barysheva N.A., Soloviev M.E.**

Yaroslavl State Technical University

Parameters calculation of siliceous structure fragments conducted. Optimal conformations of elementary expected particles of silica acid derivatives surface found. Dynamic behavior of combined systems under different temperatures analyzed

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=463

КОМПЬЮТЕРНЫЙ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ СПОСОБНОСТИ БЕЛКА VIRE2 К ОБРАЗОВАНИЮ ПОР В ЛИПИДНЫХ МЕМБРАНАХ**Чумаков М.И., Богданов В.И., Бурматов А.В., Ермошина О.В., Широков А.А., Великов В.А., Волохина И.В.**

Институт биохимии и физиологии растений и микроорганизмов РАН

Методом «протягивания» белков, гомологичных белку VirE2 в базе данных SWISS-PROT не обнаружено. Для анализа вторичной структуры белка, нами были разработаны программы адаптирующие данные с сервера PSIPRED. Для VirE2 число предсказанных β -структур равнялось 15. Из всех исследованных белков, нуклеопорины показали наибольшую схожесть с белком VirE2, однако для него не было предсказано трансмембранных сегментов. При изучении электропроводности плоских мембран после внесения препаратов белка VirE2 зарегистрировано скачкообразное увеличение проводимости мембран, которое может свидетельствовать о формировании одиночных долгоживущих (1,5 -7 сек) пор.

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=63>

COMPUTER SIMULATION AND EXPERIMENTAL EVALUATION THE CHANELFORMING ABILITY OF VIRE2 PROTEIN**Chumakov M.I., Bogdanov V.I., Burmatov A.V., Ermoshina O.V., Shirokov A.A., Velikov V.A., Volohina I.V.**

Institute of Biochemistry and Physiology of Plants and Microorganisms of the Russian Academy of Sciences

Using «protein drawing» method, the VirE2 homological to protein was not found in the database. For protein second structure analysis we developed programs adapting data from PSIPRED server. For VirE2 the number of predicted β -structures was equal to 15. From all investigated proteins nucleoporins were the most similar to proteins VirE2, however transmembrane segments were not predicted for them. While investigating the conductance of flat membranes after adding VirE2 protein was registered the step increase of membrane conductance, which can say about the formation of single long-living (1,5-7 SEC.) pores.

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=63

AB INITIO - ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СОЛЬВАТАЦИИ НА РЕАКЦИОННУЮ СПОСОБНОСТЬ МЕТИЛЭТИЛКЕТОНА В РЕАКЦИИ ПРОДОЛЖЕНИЯ ЦЕПИ**Дмитрук А.Ф., Заречная О.М., Опейда И.А.**

Донецкий государственный университет экономики и торговли им. М.Туган-Барановского

Проведено ab initio исследование влияния специфической и неспецифической сольватации на активационные параметры реакции $RH + ROO \cdot = R \cdot + ROOH$, где RH - метилэтилкетон. Показано, что понижение реакционной способности пероксильного радикала метилэтилкетона в водной среде связано с тем, что специфическая сольватация пероксильного радикала метилэтилкетона приводит к увеличению энтропии активации реакции и увеличению предэкспоненциального множителя в уравнении Аррениуса, т.е. к компенсационному эффекту. Вместе с тем, оба вида сольватации - и специфическая, и неспецифическая, - увеличивают энергию активации реакции, что и приводит к понижению реакционной способности пероксильного радикала

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=445>

AB INITIO-STUDY OF THE INFLUENCE OF SOLVATION ON THE REACTIVITY OF METHYL ETHYL KETONE IN THE CHAIN GROWTH REACTION**Dmitruk A.F., Zarechnaya O.M., Opeyda I.A.**

M.Tugan-Baranovsky Donetsk State University of Economics and Trade

Ab initio study of the influence of the specific and nonspecific solvation on activation parameters of $RH + ROO \cdot = R \cdot + ROOH$ reaction, where RH is methyl ethyl ketone, was performed. Lower reactivity of the peroxy radical of methyl ethyl ketone in the aqueous medium was explained by the fact that specific solvation of peroxy radical of methyl ethyl ketone results in the compensation effect: activation entropy of the reaction increases as well as the preexponential factor in the Arrhenius equation. At the same time, both specific and nonspecific solvation increase the activation energy of the reaction, and as a consequence, the reactivity of peroxy radical decreases

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=445

**ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАКЦИИ
ЭЛИМИНИРОВАНИЯ АТОМА ГАЛОГЕНА В АНИОН-
РАДИКАЛАХ АРОМАТИЧЕСКИХ
ГАЛОГЕНПРОИЗВОДНЫХ****Журко Г.А., Мендкович А. С., Русаков А. И.**Ивановский Государственный Химико-
Технологический Университет

Методом B3LYP/6-31G(D,P) исследованы поверхности потенциальной энергии (ППЭ) анион-радикалов (АР) ароматических хлорпроизводных. Установлено наличие на ППЭ АР двух локальных минимумов, соответствующих π^* - и σ^* -состояниям. Показано, что значения логарифма экспериментальных величин констант скорости расщепления связи C-Cl в АР коррелируют с разностью энергий этих состояний.

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=460>

**THEORETICAL INVESTIGATION OF CHLORINE
ELIMINATION FROM ANION-RADICALS OF
AROMATIC CHLORINE DERIVATIVES.****Jurko G.A., Mendkovich A.S., Rusakov A.I.**

Ivanovo State University of Chemistry and Technology

Potential energy surfaces of several aromatic chlorine derivatives anion-radicals were investigated by B3LYP/6-31G(D,P) method. The existence of two minima on the PES of molecules corresponding to π^* - and σ^* -states has been revealed. Logarithms of experimental C-Cl bond cleavage rate constants correlate with differences in the energy of the states.

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=460

**КОМПЬЮТЕРНАЯ МЕТОДИКА ОПРЕДЕЛЕНИЯ
ОБЪЁМА РЕЗЕРВНОГО ФОНДА ПРИБОРОВ И
АППАРАТОВ С УЧЁТОМ ОСОБЕННОСТЕЙ ИХ
МЕТРОЛОГИЧЕСКОГО ОБСЛУЖИВАНИЯ****Фещенко К.Б.**

Харьковский университет воздушных сил

Предложена математическая модель динамики средних численностей приборов и аппаратов, учитывающая возможные методы метрологического обслуживания средств измерительной техники в условиях разомкнутых метрологических цепей

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=451>

**COMPUTERIZED TECHNOLOGY FOR MANAGING
THE RESERVES OF THE DEVICES AND
INSTRUMENTS WHICH TAKES IN CONSIDERATION
THE SPECIAL FEATURES OF THEIR METROLOGICAL
SERVICING****Feshenko K.B.**Air Force University, Kharkov Named After Ivan
Kozgedub

A mathematical model is presented for the dynamics of average amount of devices and instruments in stock, which takes in consideration different methods of metrological servicing of measuring devices in open metrological circuits

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=451

**ИССЛЕДОВАНИЕ ИК-СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ
АНИЗОЛА И ЕГО ПРОИЗВОДНЫХ****Демухаммедова С.Д., Гаджиев Захид Исмаил оглы**

Бакинский государственный университет

Методом теоретической колебательной спектроскопии исследован ряд молекул, содержащих NO₂-группы - анизол, орто-, пара-, мета-нитроанисолы, 2,4- и 2,6-динитроанисолы. Найдены наборы силовых и электрооптических параметров, описывающих этот ряд соединений. Построены теоретические кривые спектрального распределения коэффициента поглощения для всех молекул

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=447>

**STUDY OF IR-SPECTRA OF ANISOLE AND ITS
DERIVATIVES****Demukhammedova S.D., Gadzhiev Z.I.**

Baku State University

A number of molecules containing NO₂-groups (anisole, ortho-, para-, metha-nitroanisoles, 2,4-and 2,6-dinitroanisoles) were studied using the theoretical vibrational spectroscopy method. Sets of force and electrooptical parameters describing this series of compounds were found. Theoretical curves for the spectral distribution of the absorption coefficient were built for all molecules

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=447

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ ВЫХОДОВ ПРОДУКТОВ КАТАЛИТИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ С УЧАСТИЕМ УГЛЕВОДОРОДОВ**Лapidus A.Л., Смоленский E.A., Рыжов A.H., Чуваева И.В., Зефирова Н.С.**

Институт органической химии им.Н.Д.Зелинского РАН

Рассчитаны вероятности атак атомов С и связей С-С для всех конформеров n-алканов C_nH_{2n+2} с $n \leq 18$ как усреднение их доступностей по всем конформерам. С использованием их, а также справочных данных по энергетическим характеристикам веществ, построена модель каталитического крекинга, позволяющая объяснить температурные зависимости выходов продуктов каталитических процессов, что продемонстрировано на примере крекинга бутана на катализаторе Pt-Ga/MFI

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=444>**MODELING OF DEPENDENCES BETWEEN PRODUCTS YIELDS OF CATALYTIC REACTIONS OF HYDROCARBONS****Lapidus A.L., Smolenskiy E.A., Rijov A.N., Chuvaeva I.V., Zefirov N.S.**

N.D.Zelinsky Institute of Organic Chemistry of Russian Academy of Sciences

Probabilities of C atoms and C-C bonds attacks for all conformers of C_nH_{2n+2} n-alkanes with $n \leq 18$ were calculated by the averaging of their availabilities by all conformers. The catalytic cracking model was suggested using these probabilities and the reference data on energy characteristics of substances. This model allows explanation of temperature dependences of yields of catalytic process products, as shown by the example of butane cracking on Pt-Ga/MFI catalyst

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=444**КОНФОРМАЦИОННЫЕ ОСОБЕННОСТИ 1-БРОМИДОВ C15 И C16 ИЗОПРЕНОИДОВ****Тюмкина Т.В., Халилов Л.М., Маллябаева М.И.**

Институт нефтехимии и катализа РАН

В ЯМР 1H и ^{13}C спектрах (3R,7R)-1-бром-3,7,11-триметилдодекана 2 в отличие от (4R,8R)-1-бром-4,8,12-триметилтридекан 1, являющихся важными синтонами для получения оптически активных α -токоферола и нафтокоферола, обнаружены два конформера. С помощью кватрохимических расчётов удалось определить их структуру и сделать отнесения сигналов

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=437>**CONFORMATIONAL PROPERTIES OF 1-BROMID C15 AND C16 ISOPRENOIDS****Tumkina T.V., Halilov L.M., Mallabaeva M.I.**

Institute of Petrochemistry and Catalysis of Russian Academy of Sciences

Unlike (4R, 8R)-1-bromo-4,8,12-trimethyltridecane 1, 1H and ^{13}C NMR spectra of (3R,7R)-1-bromo-3,7,11-trimethyldodecane 2 show the presence of two conformers. Both compounds are important synthons in the synthesis of optically active α -tocopherol and naphthotocopherol. The structures of two conformers were determined and signals were assigned with the aid of quantum-chemical calculations

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=437**КОНФОРМАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА НЕНАСЫЩЕННЫХ ОЛИГОМЕРНЫХ ЦЕПЕЙ: ИЗУЧЕНИЕ УПОРЯДОЧЕНИЯ СВЯЗЕЙ МЕТОДАМИ МОНТЕ-КАРЛО И МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ****Рабинович А.Л.**

Институт биологии Карельского научного центра РАН

Рассмотрена основная идея, лежащая в основе изучения свойств упорядочения связей в олигомерных цепях: идея внутримолекулярного упорядочения. Для изучения свойств совокупности углеводородных олигомеров использовано компьютерное моделирование методами Монте-Карло и молекулярной динамики

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=435>**CONFORMATIONAL PROPERTIES OF UNSATURATED CHAINS OF OLIGOMERS: CHAIN ORDERING STUDY BY MONTE CARLO AND MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS****Rabinovich A.L.**

Karelian Research Centre of Russian Academy of Sciences

The principle of intramolecular bond ordering of oligomeric chains is considered. To study the properties of some hydrocarbon oligomers Monte Carlo and molecular dynamics computer simulations are used

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=435

**ИЗМЕНЕНИЕ ЭНЕРГИИ АТОМА ВОДОРОДА В
ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ ПОЛОСТИ ПРИ СМЕЩЕНИЯХ
ЯДРА ВДОЛЬ ОСИ****Юренев П.В., Щербинин А.В., Пупышев В.И.**
Московский государственный университет
им.М.В.Ломоносова

Рассмотрено влияние продольных смещений ядра на состояния атома водорода в цилиндрической полости. Оценки сдвигов энергии, полученные в первом порядке теории возмущений, сравниваются с данными конечно-разностных расчетов. Исследована локальная кривизна ППЭ в направлении смещения ядра для состояний разного типа симметрии. Сформулировано и подтверждено численными данными условие устойчивости положения ядра в центре

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=434>

**ENERGY CHANGE OF HYDROGEN ATOM IN A
CYLINDRICAL CAVITY UNDER DISPLACEMENTS OF
THE NUCLEUS ALONGSIDE THE AXIS****Yurenev P.V., Scherbinin A.V., Pupyshv V.I.**
M.V.Lomonosov Moscow State University

The influence of the longitudinal shifts of the nucleus on the states of a hydrogen atom in a cylindrical cavity is studied. Estimates of the energy shifts obtained by the first order perturbation theory, are compared with the data from finite-difference calculations. Local curvature of the PES in the direction of the nucleus shift for states of various symmetry type is investigated. A condition of the stability of the nucleus at the center is formulated and confirmed by the numerical data

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=434

**МОДЕЛЬ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДВУХ СТРУКТУРНО
ОРГАНИЗОВАННЫХ СРЕД В ЕДИНОЙ СИСТЕМЕ
ПЕРЕМЕННОГО СОСТАВА****Николаев В.Ф., Николаев И.В., Катаев В.Е.**
Институт органической и физической химии им.
А.Е.Арбузова Казанского научного центра РАН

Для описания свойств бинарной системы меняющегося состава, образованной двумя структурно организованными средами, предложена модель конкурирующих взаимодействий. На ее основе рассмотрен способ оценки вкладов эффектов синергизма и взаимного деструктурирования компонентов в экспериментально наблюдаемое интегральное свойство бинарной системы. Отсутствие в модели заданной стехиометрии, характерной для квазихимических моделей, позволяет использовать ее в самых различных областях химии (анализ избыточных термодинамических функций и физико-химических свойств вещества, растворенного в бинарном растворителе, анализ свойств собственно бинарных растворителей и процессов, протекающих в них), в биологии и экологии (анализ совместного сосуществования популяций, растений, штаммов), в социологии и психологии (анализ взаимовлияния компактно проживающих этносов и др)

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=432>

**MODEL OF INTERACTION OF TWO STRUCTURALLY
ORGANIZED MEDIUMS IN UNIFORM SYSTEM OF
VARIABLE COMPOSITION****Nikolaev V.F., Nikolaev I.V., Kataev V.E.**
The Institute of Organic and Physical Chemistry Kazan
Scientific Center Russian Academy of Sciences

For the description of properties of binary system of the varying composition formed by two structurally organized environments the novel model of competitive interactions was elaborated. The method of the estimation of contributions of synergism effect and the effect of mutual decomposition of a components in experimentally observable integrated property of binary system was considered on the basis of this model. Absence in model prescribed stoichiometry characteristic for quasichemical models, allows to use it in various areas of chemistry (analysis of excess thermodynamic functions, physical and chemical properties of substances dissolved in binary solvent; analysis of properties of binary solvents itself and a processes proceeding in them), in biology and ecology (analysis of joint coexistence of populations, plants, biological cultures), in sociology and psychology (analysis of interference of compactly living ethnoses, etc.)

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=432

**ИЗУЧЕНИЕ СТРОЕНИЯ
ФЕНИЛЦИАНОМЕТИЛЕНЦИКЛОГЕКСО-2,5-ДИЕН-1-
ОН МОНООКСИМА****Базлов Д.А., Орлов В.Ю., Котов А.Д., Ганжа В.В.,
Коновалова Н.В.**
Ярославский государственный университет
им.П.Г.Демидова

С помощью квантово-химического метода PM3 были смоделированы конформации фенилцианометиленициклогексо-2,5-диен-1-он монооксима и их реакционная способность

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=427>

**STUDYING OF
PHENYLCYANOMETYLENCYCLOHEXA-2,5-DIEN-1-
ON MONOOXIME STRUCTURE****Bazlov D.A., Orlov V.Yu., Kotov A.D., Ganzha V.V.,
Konovalova N.V.**
P.D.Demidov Yaroslavl State University

Conformations of mono oxime of phenylcyanomethylenecyclohexa-2,5-diene-1-on and their reactivity were calculated by the quantum-chemical PM3 method

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=427

ФОРМИРОВАНИЕ АЗОТНОЙ КИСЛОТЫ ПРИ ИОНИЗАЦИИ ДИОКСИДА АЗОТА В ПРИСУТСТВИИ АССОЦИАТОВ МОЛЕКУЛ ВОДЫ**Безруков Д.С., Новаковская Ю.В., Степанов Н.Ф.**
Московский государственный университет им.М.В.Ломоносова

Методами неэмпирической квантовой химии, учитывающими энергию электронной корреляции, изучены системы состава $\{\text{NO}_2(\text{H}_2\text{O})_n\}^+$. Описано ближайшее окружение сольватированного катиона диоксида азота, рассчитана энергия его сольватации. На основании термодинамических оценок продемонстрирована возможность образования азотной кислоты в исследуемой системе уже при молекулярном соотношении вода:диоксид азота = 5:1. Полученные результаты позволили оценить энергию излучения, инициирующего образование азотной кислоты из нейтральных комплексов $\text{NO}_2(\text{H}_2\text{O})_n$

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=430>

NITRIC ACID FORMATION UPON IONIZATION OF NITROGEN DIOXIDE IN THE PRESENCE OF WATER CLUSTERS**Bezrukov D.S., Novakovskaya Yu.V., Stepanov N.F.**
M.V.Lomonosov Moscow State University

$\{\text{NO}_2(\text{H}_2\text{O})_n\}^+$ systems are studied by the quantum chemical methods taking into account the electron correlation. The close neighborhood of the hydrated nitrogen dioxide cation is described, and the hydration energy is calculated. Based on the thermodynamic estimates, the nitric acid formation is shown to be possible in the systems of interest already at the molecular water-to-nitrogen dioxide ratio of 5:1. The results obtained enabled us to evaluate the energy of the external radiation that may initiate the formation of nitric acid in place of $\text{NO}_2(\text{H}_2\text{O})_n$ neutral coordination complexes

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=430

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДОМ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АНИОННОГО КОМПЛЕКСА ТРИЭТИЛАЛЮМИНИЙ ХЛОРИДА С КАТИОННЫМ КОМПЛЕКСОМ ЦИРКОНИЯ**Юлдашбаев А.Т., Русаков С.В., Халилов Л.М.**
Институт нефтехимии и катализа РАН

Неэмпирический метод функционала плотности использован для исследования реакций молекул триэтилалюминия с комплексом бис-(циклопентадиенил)-алкилциркония хлорида. Проводимыми исследованиями установлено, что частица, катализирующая циклоалюминирование олефинов представляет собой ионную пару состоящую из катиона и слабонуклеофильного аниона

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=448>

A STUDY ON TRANSFORMATION OF TRIETHYLALUMINUM CHLORIDE ANIONIC COMPLEX AND CATIONIC COMPLEX OF THE ZIRCONIUM BY DFT METHOD**Yuldashbaev A.T., Rusakov S.V., Khalilov L.M.**
Institute of Petrochemistry and Catalysis of Russian Academy of Sciences

Non empirical density functional theory (DFT) was used for investigation of reaction triethylaluminum with ethylzirconocene chloride in reaction cycloaluminum of olefins. In this work we established that catalytically active particular consists of ionic pair formed by cation and weak nucleophilic anion

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=448

СЕКЦИЯ 4**ВИЗУАЛИЗАЦИЯ В НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЯХ****SECTION 4****VISUALIZATION IN SCIENTIFIC RESEARCHES****ОБЩАЯ МЕТОДИКА КОНСТРУИРОВАНИЯ
УНИВЕРСАЛЬНЫХ ХИМИЧЕСКИХ
СУПЕРИНДЕКСОВ****Трофимов М.И., Смоленский Е.А.**

Институт органической химии им.Н.Д.Зелинского РАН

Приводится обобщенная методика конструирования универсальных химических супериндексов и примеры их применения для решения общих (распознавание и фильтрация структур органических молекул для СУБД с помощью быстрого алгоритма тестирования на изоморфизм) и специальных задач компьютерной химии (бесповторная генерация молекулярных графов, поиск зависимостей типа «структура-свойство» и т.д.). Даются рекомендации по выбору индексов в зависимости от поставленной задачи

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=440>

**THE COMMON METHOD FOR CONSTRUCTING THE
UNIVERSAL CHEMICAL SUPER-INDICES****Trofimov M.I., Smolenskiy E.A.**

N.D.Zelinsky Institute of Organic Chemistry of Russian Academy of Sciences

The article deals with the common method for constructing the universal chemical super-indices and samples of its application to solve general tasks of computer chemistry (recognition and filtration of the organic molecular structures for DBMS under fast algorithm of isomorphism testing) and special tasks (non-duplication generation of the molecular graphs, search of "structure-property" dependences etc.). Recommendations to select an index for given task are listed

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=440

**ИНСТРУМЕНТАЛЬНАЯ ПРОГРАММА
РЕДАКТИРОВАНИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ГРАФОВ
MT2 GRAPH EDIT 2004 ВЕРСИЯ 1.8.1****Трофимов М.И.**

Институт органической химии им.Н.Д.Зелинского РАН

Приводится краткое описание инструментальной программы для редактирования молекулярных графов, ориентированной на работу с индексами

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=441>

**TOOL PROGRAM TO EDIT THE MOLECULAR
GRAPHS – MT2 GRAPH EDIT 2004, VERSION 1.8.1****Trofimov M.I.**

N.D.Zelinsky Institute of Organic Chemistry of Russian Academy of Sciences

The article deals with the tool program to edit molecular graphs, which program is oriented to provide manipulation with indices

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=441

СЕКЦИЯ 5**ОБРАБОТКА ДАННЫХ, БАЗЫ ДАННЫХ, АНАЛИЗ ДАННЫХ****SECTION 5****DATA PROCESSING, DATABASES AND DATA ANALYSIS****РАЗВИТИЕ ТЕОРИИ ИЕРАРХИЧЕСКИХ УРОВНЕЙ В
БИОЛОГИИ И РАЗРАБОТКА МОДЕЛИ
ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МЕЖДУ КЛЕТКАМИ И
МАТРИКСОМ****Федотов А.В.**Московский государственный университет
прикладной биотехнологии

Сообщаются сведения о развитии теории взаимодействия иерархических структур в комплексных динамических системах. В качестве развивающейся модели приводятся данные теории взаимодействия Кл с микросредой на основе биоспецифической адгезии, получившей свое дальнейшее развитие в теории тензограции. Обоснована необходимость изменения теоретического понятия биологической адгезии в ее новом значении(качестве) - взаимодействии с механической адгезией. Приведены соответствующие этой теории математические уравнения и теоретические кривые сил интегрирующих и распределяющих энергию и информацию в соответствующих уровнях и блоках на модели вязкоупругого взаимодействия катящегося лимфоцита

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=410>**THE DEVELOPMENT TO THEORIES HIERARCHICAL
LEVEL IN BIOLOGY AND DEVELOPMENT TO
MODELS OF THE INTERACTION BETWEEN CELLS
AND MATRICES****Fedotov A.V.**

Moscow State University of Applied Biotechnology

Communicate the information about development of the theories of the interaction of the hierarchical structures in complex dynamic system. As developing model happen to the theory data of the interaction cells with microenvironment on base biospecefity adhesion, got its the most further development in theories tensoegrity. Motivated need of the change the theoretical notion biological адгезии in her(its) new importance(the quality) - an interaction with mechanical адгезией. They Are Brought corresponding to this theories mathematical equations and theoretical curves of power integrating and distributing energy and information in corresponding to level and block on models viscosity-rigidity interactions rolling lymphocytes

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=410**МОНИТОРИНГ СТРУКТУРНО-ХИМИЧЕСКИХ БАЗ
ДАННЫХ****Круковская Н.В., Зибарева И.В.**

Институт органической химии им.Н.Д.Зелинского РАН

Целью данного доклада является сопоставление содержания и поисковых возможностей структурно-химических баз данных Registry, Beilstein, Gmelin, CASREACT и других. Особое внимание уделено фактографическому поиску. Представленные данные помогут сориентироваться ученому исследователю каким образом следует комбинировать поисковые возможности указанных информационных ресурсов

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=421>**MONITORING OF STRUCTURAL DATABASES BY
CHEMISTRY****Krukovskaya N.V., Zibareva I.V.**N.D.Zelinsky Institute of Organic Chemistry of Russian
Academy of Sciences

This report compares the content of structural chemical databases — Registry, CASREACT, Gmelin, Beilstein, Spresi, Cambridge Structural Database and other. The points of the issue are the differences in the content and the search possibilities provided by these databases. The special attention is paid to the search of the factual data that is very important for analyzing properties of organic molecules. The presented data will help researchers in the proper selection of the relevant databases

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=421

**РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭРИТРОЦИТОВ СИНЦ В
РАЗНЫХ ЭКОУСЛОВИЯХ**

Стариков В.Н., Скрылева К.А.

Мичуринский государственный педагогический
институт

**DISTRIBUTION OF RED CORPUSCLES OF GREAT -
TIT IN VARIOUS ENVIRONMENTS**

Starikov V.N., Skrileva K.A.

Michurinsk State Pedagogical Institute

Распределение эритроцитов большой синицы (*Parus major*, Linnaeus) в зависимости от их большого и малого диаметров в разных экоусловиях на Тамбовщине моделируется нормальным распределением. Эти примеры могут быть использованы статистиками, биометрами, экологами, зоологами и др. Теоретическое нормальное распределение (НР) описывает большую часть опытных распределений эритроцитов большой синицы (ЭБС) по величине большого диаметра (ВБД) и величине малого диаметра (ВМД). Случаи же, когда гипотеза их нормальности отвергается, видимо, следует объяснить нерепрезентативностью соответствующих выборок или наличием классов с $np_i < 1$. Действительно, каждое опытное распределение представлено обычно в 3-4 повторностях, и только одна из них иногда имеет ненормальное распределение. О ненормальности можно было говорить, если бы все повторности были ненормальны. Большие объемы выборок могли бы окончательно рассеять все сомнения, но мы работали с малыми! объемами выборок почти на пределе возможной критерия хи-квадрат ($n_i \geq 5$). Во всех случаях ненормальности есть классовые интервалы с $np_i < 1$, объединение которых с соседними интервалами так, чтобы $np_i \geq 5$, устраняет ненормальность. Причины того, что получается именно НР ЭБС по ВБД и ВМД, могут быть следующие: 1) само опытное распределение собственно признаков (РСП) ВБД и ВМД может иметь НР, 2) распределение ошибок измерения этих признаков независимо от первого и тоже есть НР. Известно, что сложение двух случайных величин, имеющих НР, даст в итоге тоже НР (свойство устойчивости для НР). Поэтому получим НР. НР ошибок измерения следует из гауссовой теории ошибок. То, что РСП ВБД и ВМД имеют НР, может быть объяснено тем, что непрерывное распределение ЭБС по ВБД и ВМД при разложении его в ряды Грама-Шарлье или Эджворта хорошо описывается 1-ым членом ряда, который и есть НР. Кроме того, при формировании собственно признаков ВБД и ВМД, как случайных величин, могут быть применимы теорема Ляпунова или локальная и интегральная теоремы Мура-Лапласа, которые дают именно НР. Видимо, ВБД и ВМД имеют совместное двумерное НР. Что касается корреляций между массой селезенки и компонентами лейкоцитарной формулы, содержанием кортизола и компонентами лейкоцитарной формулы, то, видимо, несмотря на отдельные существенно ненулевые корреляции, говорить о каких-то устойчивых линейных зависимостях преждевременно. Здесь надо продолжить исследования

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=511>

Distribution of red corpuscles of great-tit (*Parus major*, Linnaeus) as a function of large and small diameters in various environments of Tambov region are modeling by normal distribution. This examples can be useful for statisticians biometricians, ecologists, zoologists etc. Theoretic normal distribution (TNR) approximate more part of observed distributions (OD) of red corpuscles of great tit (RCOGT) as a function of large diameter (LD) and small diameter (SD). When it is not verified a true the normality hypothesis it seems to explain of corresponding nonrepresentative samplings or of present of class intervals with $np_i < 1$. Indeed any OD have 3-4 repetitions and only one from them is not followed TNR sometimes. If all sampling repetitions would not followed TNR then we could talk about abnormal distribution. Large samples could dispel someone's doubts completely but we use small samples almost within bounds of possible use of chi-square test of goodness-of-fit ($n_i \geq 5$). Class intervals with $np_i < 1$ are presented in all abnormal cases and their unification in more large intervals with $np_i \geq 5$ liquidate abnormality. Possible reasons that observed distributions of RCOLT as a function of LD and SD follow TND are explained this manner: 1) itself OD of features of LD and SD could follow TNR, 2) distribution of measurements-errors follow TND independently on first. It is known that sum two random variables following TND is of total TNR (property of statistical regularity for TND). Therefore we shall have TND. The TND of errors follow from Gaussian theory of errors. Fact that itself OD of features of LD and SD could follow TND could be explain that continued OD of RCOLT as a function of LD and SD is expanded in form of Gram-Charlier's series Edgeworth's series and well-approximated with first series term which is of TND. Furthermore Liapunov's theorem, local and integral de Moivre-Laplace's theorem can be applied for forming of features of LD and SD as random variables. This theorems derivate exactly TND. OD of RCOGT as function of LD and SD seems to be joint two-dimensional TND

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=511

БАЗА ЗНАНИЙ ПО ЦИТОХРОМАМ P450**Пономаренко Е.А., Лисица А.В., Карузина И.И.,
Гусев С.А.**ГУ НИИ Биомедицинской химии им.В.Н.Ореховича
РАМН

База знаний по цитохромам P450 включает в себя публично доступную информацию о структурах и функциях цитохромов P450. Разработанная система объединяет несколько источников данных: для каждой формы белка указаны ссылки на соответствующие записи в глобальных информационных ресурсах, таких, как GenEMBL/SwissProt, Protein Databank, PubMed и ChemId+. Вся введенная информация подвергается обработке группой экспертов. Кроме того, имеется автоматизированный механизм внесения в базу знаний новых фактов. Разработанная система позволяет проводить три типа исследований: изучение особенностей структурной организации ферментов, изучение особенностей функциональной активности, и изучение взаимосвязи между структурой и функцией

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=489>**CYTOCHROME P450 KNOWLEDGEBASE****Ponomarenko E.A., Lisica A.V., Karuzina I.I.,
Gusev S.A.**V.N.Orekhovich Institute of Biomedical Chemistry of
Russian Academy of Medical Sciences

Knowledgebase organizes the publicly available information on structure and function of cytochromes P450. The information management system extracts related data from different sources, including GenEMBL/SwissProt, Protein Databank, PubMed and ChemId+. The data is verified in the course of the human subsequent experience. Adopted information is provided for browsing, and, also for in-depth investigation by conventional and original bioinformatic methods

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=489**БАЗА ДАННЫХ ЛИТЕРАТУРНЫХ ИСТОЧНИКОВ ПО
КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЮ ИОНОВ D-
ЭЛЕМЕНТОВ****Бузько В.Ю., Ковалева И.А., Полушин А.А.,
Сухно И.В.**

Кубанский государственный университет

Создана база данных литературных источников по комплексообразованию ионов d-элементов с органическими и неорганическими лигандами в водных и водно-органических средах, морских водах, искусственных, натуральных и технологических флюидах по данным различных физико-химических методов (спектроскопических, электрохимических и др.) и математического моделирования

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=482>**LITERATURE DATABASE ON COMPLEXATION OF D-
ELEMENTS IONS****Buzko V.Y., Sukhno I.V., Polushin A.A., Kovaleva I.A.**

Kuban State University

A database of literature references on complexation of d-elements with organic and inorganic ligands in aqueous and aqueous-organic media, marine water, synthetic, natural and technological fluids studied by various physical and chemical methods (spectroscopic, electrochemical, etc.) and mathematical modeling has been developed

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=482**БАЗА ДАННЫХ ЛИТЕРАТУРНЫХ ИСТОЧНИКОВ ПО
КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЮ ИОНОВ S-
ЭЛЕМЕНТОВ****Полушин А.А., Ковалева И.А., Бузько В.Ю.,
Сухно И.В.**

Кубанский государственный университет

Создана база данных литературных источников по комплексообразованию ионов s-элементов с органическими и неорганическими лигандами в водных и водно-органических средах, морских водах, искусственных, натуральных и технологических флюидах по данным различных физико-химических методов (спектроскопических, электрохимических и др.) и математического моделирования

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=483>**LITERATURE DATABASE ON COMPLEXATION OF S-
ELEMENTS IONS****Polushin A.A., Buzko V.Yu., Sukhno I.V., Kovaleva I.A.**

Kuban State University

A database of literature references on complexation of s-elements with organic and inorganic ligands in aqueous and aqueous-organic media, marine water, synthetic, natural and technological fluids studied by various physical and chemical methods (spectroscopic, electrochemical, etc.) and mathematical modeling has been developed

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=483

АВТОМАТИЗИРОВАННЫЕ МЕТОДЫ ОБРАБОТКИ И АНАЛИЗА ДАННЫХ ПО СВОЙСТВАХ ВЕЩЕСТВ В БАЗЕ ДАННЫХ "ОРГАНИКА"**Богомольный А.М., Круковская Н.В.**

Институт органической химии им.Н.Д.Зелинского РАН

Для создания конкурентоспособных, безопасных, экологически чистых химических производств необходимы данные о физико-химических, пожаровзрывоопасных и токсикологических свойствах соединений, участвующих в производстве как исходные, промежуточные, конечные продукты, теплоносители и т.д. Фактографическая база данных ОРГАНИКА содержит экспериментальные и расчетные свойства для 2000 соединений. Математические, термодинамические и химические методы анализа данных позволяют оценивать их достоверность

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=422>**COMPUTER METHODS FOR PROCESSING AND ANALYSIS OF SUBSTANCES PROPERTIES IN THE "ORGANIKA" DATABASE****Bogomolny A.M., Krukovskaya N.V.**

N.D.Zelinsky Institute of Organic Chemistry of Russian Academy of Sciences

Design of competitive, safe, environment-friendly chemical production facilities requires information on physical and chemical properties, fire and explosion hazards and toxicology of compounds involved as raw materials, intermediates, end products, heat carriers, etc. The factual database ORGANIKA contains experimental and calculated properties of 2000 compounds. Mathematical, thermodynamic and chemical methods of data analysis allow estimation of their reliability

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=422**КОМПЬЮТЕРНАЯ МЕТОДИКА ОЦЕНИВАНИЯ ВЛИЯНИЯ АВИАЦИОННОГО ШУМА НА УМСТВЕННУЮ РАБОТОСПОСОБНОСТЬ ОПЕРАТОРОВ****Кукушкин Ю.А., Солдатов С.К., Богомолов А.В., Шишкин О.Ю., Кирий С.В., Сизова В.В.**

Центр авиационно-космической медицины

В результате обработки данных экспериментальных исследований с использованием методов математической статистики осуществлена структурная и параметрическая идентификация математической модели, описывающей зависимость ПНД от уровня шума, воздействующего на операторов в течение времени, не превышающего 30 минут. Результаты анализа различий между данными, предсказанными моделью и экспериментальными данными позволяют сделать заключение о статистической значимости модели и целесообразности ее использования для оценки потенциальной ненадежности действий операторов при воздействии на них шумового фактора

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=450>**COMPUTER-ASSISTED TECHNIQUE FOR THE EVALUATION OF THE AIRCRAFT NOISE INFLUENCE ON THE INTELLECTUAL WORK CAPACITY OF OPERATORS****Kukushkin Y.A., Soldatov S.K., Bogomolov A.V., Shishkin O.Yu., Kiriy S.V., Sizova V.V.**

Center of Aerospace Medicine

Structural and parametric identification of the mathematical model describing dependence of the work interruption frequency and the level of noise experienced by operators during the time intervals shorter than 30 minutes was performed based on the processing of experimental data using methods of mathematical statistics. Based on the analysis of differences between predicted and experimental data, conclusion on the statistical importance of the model and its application potential for the estimation of the expected unreliability of operator actions under influence of noise was done

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=450**БАЗА ДАННЫХ ЛИТЕРАТУРНЫХ ИСТОЧНИКОВ ПО ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИМ СВОЙСТВАМ РАСТВОРОВ ЭЛЕКТРОЛИТОВ****Сухно И.В., Бузько В.Ю., Полушин А.А., Ковалева И.А.**

Кубанский государственный университет

Создана база данных литературных источников по термодинамическим свойствам растворов электролитов в водных и водно-органических средах, морских водах, искусственных, натуральных и технологических флюидах по данным различных физико-химических методов (спектроскопических, электрохимических и др.) и математического моделирования

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=481>**LITERATURE DATABASE ON THERMODYNAMIC PROPERTIES OF ELECTROLYTE SOLUTIONS****Sukhno I.V., Buzko V.Yu., Polushin A.A., Kovaleva I.A.**

Kuban State University

A database of literature references on thermodynamic properties of electrolyte solutions in aqueous and aqueous-organic media, marine water, synthetic, natural and technological fluids studied by various physical and chemical methods (spectroscopic, electrochemical, etc.) and mathematical modeling has been developed

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=481

**БАЗА ДАННЫХ ЛИТЕРАТУРНЫХ ИСТОЧНИКОВ ПО
КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЮ ИОНОВ МЕТАЛЛОВ
В ВОДНО-ОРГАНИЧЕСКИХ И НЕВОДНЫХ СРЕДАХ****Ковалева И.А., Бузько В.Ю., Полушин А.А.,
Сухно И.В.**

Кубанский государственный университет

**LITERATURE DATABASE ON COMPLEXATION OF
METAL IONS IN AQUEOUS-ORGANIC AND NON-
AQUEOUS MEDIA****Kovaleva I.A., Buzko V.Yu., Polushin A.A., Sukhno I.V.**

Kuban State University

Создана база данных литературных источников по
комплексобразованию ионов металлов в водно-
органических и неводных средах по данным
различных физико-химических методов
(спектроскопических, электрохимических и др.) и
математического моделирования

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=484>

A database of literature references on complexation metal
ions in aqueous and aqueous-organic media, studied by
various physical and chemical methods (spectroscopic,
electrochemical, etc.) and mathematical modeling has
been developed

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=484

СЕКЦИЯ 6**ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫЕ СИСТЕМЫ И ТЕХНОЛОГИИ (ПРИНЯТИЕ РЕШЕНИЙ,
ЭКСПЕРТНЫЕ СИСТЕМЫ И Т.Д.)****SECTION 6****INTELLIGENCE SYSTEMS AND TECHNOLOGIES (DECISION-MAKING, EXPERT
SYSTEM ETC.)****МЕТОДИЧЕСКИЕ ПОДХОДЫ К ПОСТРОЕНИЮ
СИСТЕМЫ АВТОМАТИЗИРОВАННОГО
РАСПОЗНАВАНИЯ НАРУШЕНИЙ СОСТОЯНИЯ
СПЕЦИАЛИСТА ОПАСНОЙ ПРОФЕССИИ****Богомолов А., Кукушкин Ю.А., Сизова В.В.,
Кувакин И.В.**Государственный научно-исследовательский
испытательный институт МО РФ**METHODOLOGICAL APPROACHES TO
DEVELOPMENT OF THE AUTOMATED SYSTEM FOR
THE RECOGNITION OF CONDITION CHANGES IN
EMPLOYEES OF HAZARDOUS PROFESSIONS****Bogomolov A.V., Kukushkin Yu.A., Sizova V.V.,
Kuvakin I.V.**The State Science and Research Experimental Institute of
Ministry of Defence of the Russian Federation

Описан состав и функциональные возможности проектируемой и отмакетированной по отдельным компонентам автоматизированной системы распознавания опасных состояний специалиста опасной профессии

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=449>

Composition and functions of the projected and modeled by separate components automated system for the recognition of condition changes in employees of hazardous professions are described

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=449**ИМИТАЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ
РАДИОНУКЛИДОВ В ЛЕСНЫХ ЭКОСИСТЕМАХ****Мамихин С.В.**Московский государственный университет
им.М.В.Ломоносова**IMITATING MODELING OF RADIONUCLIDE
BEHAVIOUR IN FOREST ECOSYSTEMS****Mamihin S.V.**

M.V.Lomonosov Moscow State University

Для изучения поведения радиоцезия и радиостронция в почвенно-растительном покрове лесных экосистем создан ряд имитационных моделей разного уровня. В ходе численных экспериментов были уточнены некоторые закономерности перераспределения радионуклидов в экосистемах. Модели были также использованы для прогнозирования развития ситуации, возникшей после аварии на Чернобыльской АЭС и реконструкции экологических последствий Кыштымской радиационной аварии 1957 года. Часть моделей интегрирована в информационно-прогностическую радиоэкологическую систему ЭКОРАД

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=446>

For study of radiocaesium and radiostrontium behaviour in a soil-vegetative cover of forest ecosystems a number of imitating models of a different level is created. During numerical experiments some regularities of radionuclide redistribution in ecosystems were specified. The models also were used for forecasting development of the situation which has arisen after failure on a Chernobyl NPP and reconstruction of ecological consequences of Kyshtym radiation failure of 1957. The part of models is integrated in informational and prognostication radioecological system ECORAD

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=446

**ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ГЕОИНФОРМАЦИОННЫЙ
КОМПЛЕКС АНАЛИЗА РАСПРЕДЕЛЕНИЯ НЕФТЕЙ
ПО ИХ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИМ СВОЙСТВАМ**

Яценко И.Г., Козин Е.С.

Институт химии нефти СО РАН

Необходимость изыскания новых путей поиска, разведки и разработки месторождений углеводородов в связи с ростом нефтепотребления и увеличения запасов трудноизвлекаемых нефтей определяет актуальность изучения физико-химических свойств и состава нефтей, рассеянного органического вещества пород, природных твердых битумов, горючих сланцев и других каустобиолитов. Для выполнения указанных исследований разработан и развивается исследовательский геоинформационный комплекс (ИГИК) по химии нефти в составе базы данных по химии нефти и газа (БД ХНГ) и системы цифровых карт, с использованием которого в течение ряда лет проводится статистический анализ свойств нефтей в зависимости от их географического положения, глубины залегания, возраста пород

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=409>

**RESEARCH GEOINFORMATION COMPLEX FOR
ANALYSIS OF OILS DISTRIBUTION BY THEIR
PHYSICAL AND CHEMICAL PROPERTIES**

Yaschenko I.G., Kozin E.S.

Institute of Petroleum Chemistry, Siberian Division of Russian Academy of Sciences

New approaches for search, exploration and development of oil fields are related to the growth of oil consumption and increasing numbers of difficult-to-extract oil fields and require thorough studies of physical and chemical properties and composition of oils, dispersed organic matter in minerals, natural bitumens, combustible slates and other caustobioliths. Geoinformation research complex (IGIK) involving a database on petroleum and gas chemistry (PGC DB) and systems of digital maps was developed. It has been used since few years for the statistical analysis of oil properties depending on their geographical location, depth, rock age

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=409

**РАСЧЕТ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ СКОРОСТЕЙ
ВНУТРЕННЕГО МЕТАБОЛИЗМА КЛЕТКИ ПО
ДАНЫМ О ВХОДНЫХ И ВЫХОДНЫХ
МАТЕРИАЛЬНЫХ ПОТОКАХ С ПОМОЩЬЮ
МЕТОДА БАЛАНСА СТАЦИОНАРНЫХ
СТЕХИОМЕТРИЧЕСКИХ ПОТОКОВ (БССП)**

Дроздов-Тихомиров Л.Н., Скурида Г.И.,

Серганова В.В., Александров А.А., Давыдов А.В.

Институт молекулярной генетики РАН

Разработан метод баланса стационарных стехиометрических потоков (БССП) и создана программа, позволяющая производить расчет распределения скоростей внутреннего метаболизма прокариотической клетки по экспериментальным данным о скоростях входных и выходных материальных потоков через мембрану клетки и данным о биохимическом составе клетки. Метод применен для создания математической модели метаболизма митохондрии

дрожжевой клетки *Saccharomyces cerevisiae*

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=420>

**CALCULATION OF INNER CELL METABOLIC RATES
DISTRIBUTION ON INPUT AND OUTPUT MATERIAL
FLUX EXPERIMENTAL DATA USING THE METHOD
OF STADY-STATE STOICHIOMETRIC FLUX BALANCE
(SSFB)**

**Drozдов-Tihomirov L.N., Skurida G.I., Serganova V.V.,
Aleksandrov A.A., Davidov A.V.**

Institute of molecular genetics of Russian Academy of Sciences

The method of stationary stoichiometric flows balance is developed. The program to calculate endobiotic metabolism rates for prokaryotic cell from experimental data on rates of incoming and outgoing mass flows through a cell membrane and data on the biochemical composition of the cell is developed. The method was used to develop the mathematical model of mitochondria metabolism in the *Saccharomyces cerevisiae* yeast cell

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=420

**СОЗДАНИЕ ХИМИЧЕСКОЙ ИНФОРМАЦИОННОЙ
СИСТЕМЫ В GRID-СРЕДЕ**

**Аникин Н.А., Кузьминский М.Б., Мендкович А.С.,
Мускатин А.Ю.**

Институт органической химии им.Н.Д.Зелинского РАН

Создается химическая информационно-вычислительная система (ИВС), интегрированная в гетерогенную GRID-среду с применением Globus Toolkit. ИВС ориентирована на автоматизацию работы химика-исследователя с программами и БД в области молекулярного моделирования. Рассмотрена архитектура и реализованные функции ИВС

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=459>

**DEVELOPMENT OF CHEMICAL INFORMATIONAL
SYSTEM IN GRID ENVIRONMENT**

**Anikin N.A., Kuzminskiy M.B., Mendkovich A.S.,
Muskatin A.Yu.**

N.D.Zelinsky Institute of Organic Chemistry of Russian Academy of Sciences

Chemical informational and computational system (ICS) is developing being integrated in heterogeneous GRID-environment using Globus Toolkit. ICS is oriented to automation of chemist-researcher work with programs and DBs in molecular modelling area. Architecture and realized ICS functions are considered

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=459

ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В МЕДИКО-БИОЛОГИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЯХ**Михеев О.В., Габусу П.А., Чикова С.С.**
NC Group/НВК "ВИСТ"

Рассмотрен класс интеллектуальных систем, основанных на знаниях - экспертных систем (ЭС), основное назначение которых состоит в решении неформализованных задач выбора, являющихся трудными для традиционных методов математического анализа и традиционных методов программирования. При реализации систем ориентированных на решение неформализованных задач выбора наиболее приемлемым подходом является определение формальных спецификаций для описания и построения ЭС. При этом, в основе построения ЭС лежит схема специфицирования фактов и правил, основанных на математических формализмах

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=509>

INTELLECTUAL TECHNOLOGIES IN MEDICAL AND BIOLOGIC RESEARCHES**Mikheyev O.V., Gabusu P.A., Chikova S.S.**
NC Group/NVK "VIST"

The class of the intellectual systems based on knowledge - expert systems (ES) is considered. The basic purpose of these systems consists in solution of not unformalized problems of selection, which are difficult for traditional mathematical analysis methods and traditional programming methods. The most acceptable approach at implementation of systems oriented on solution unformalized problems of selection is definition of formal specifications for description and development of ES. Thus, the scheme of specification of facts and rules based on mathematical formal descriptions forms the basis of ES development

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=509

ИНФОРМАЦИОННАЯ СИСТЕМА УПРАВЛЕНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТОМ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ НА ОБЕЗЬЯНАХ ФИЗИОЛОГИЧЕСКИХ МЕХАНИЗМОВ ПОЗНАВАТЕЛЬНЫХ ПРОЦЕССОВ**Миронов С.В., Дудкин К.Н., Чуева И.В., Скрыминский Ю.В.**

Институт физиологии им. И.П.Павлова РАН

Разработана информационная система для управления поведенческим экспериментом на обезьянах, направленным на изучение физиологических механизмов познавательных процессов. Программа позволяет формировать сигналы управления устройствами, входящими в приматологическую установку, регистрировать поведенческие реакции: правильные и неправильные решения, отказы от принятия решений, вычислять их вероятности, и измерять время реакции. Разработана база данных для хранения полученных результатов и их последующего многопараметрического статистического анализа

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=488>

INFORMATION SYSTEM OF EXPERIMENT CONTROL FOR STUDIES OF PHYSIOLOGICAL MECHANISMS OF COGNITIVE PROCESSES IN MONKEYS**Mironov S.V., Dudkin K.N., Chueva I.V., Skriminskiy Yu.V.**

I.P.Pavlov Institute of Physiology of Russian Academy of Science

Information system of behavioral experiment control for studies of physiological mechanisms of cognitive processes in monkeys has been developed. The program allows to form control signals for devices comprising the primatological setup, to register behavioural reactions such as correct and incorrect decisions and refusals to make a decision, to calculate their probabilities, and to measure the time of reaction. A database for the storage of obtained results and their subsequent multi-parameter statistical analysis has been developed

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=488

КОМПЛЕКСНАЯ СИСТЕМА ПОДГОТОВКИ, ПУБЛИКАЦИИ И РАСПРОСТРАНЕНИЯ НАУЧНЫХ ИЗДАНИЙ**Свитанько И.В., Чебуков Д.Е., Кравченко И.А., Магдануров Г.И., Мендкович А.С.**

Институт органической химии им.Н.Д.Зелинского РАН

Создана и успешно введена в практику российских периодических научных изданий система поддержки электронного документооборота - от обработки авторской рукописи до предоставления готового материала подписчикам. Недостающее звено системы - обеспечение максимально полного представления научной области (агрегация и расширенные возможности поиска) успешно реализуется в настоящий момент

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=425>

ELECTRONIC PUBLISHER AND AGGREGATOR FOR SCIENTIFIC JOURNALS**Svitanko I.V., Chebukov D.E., Kravchenko I.A., Magdanurov G.I., Mendkovich A.S.**

N.D.Zelinsky Institute of Organic Chemistry of Russian Academy of Sciences

The electronic document control system has been developed and successfully implemented in Russian scientific periodicals from the processing of original manuscripts to the distribution of end products to subscribers. Currently, the missing part of the system involving a maximum representation of the scientific area (aggregation and advanced search functions) is being successfully implemented

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=425

СЕКЦИЯ 7

ОПТИМАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ, ПЛАНИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА

SECTION 7

OPTIMUM PROCEDURES AND DESIGN OF EXPERIMENTS

ОПИСАНИЕ АМБРОВЫХ ОДОРАНТОВ НА ОСНОВЕ ТРЕХМЕРНЫХ ДЕСКРИПТОРОВ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ПОВЕРХНОСТЕЙ В ЗАДАЧЕ «СТРУКТУРА-СВОЙСТВО»

Свитанько И.В., Захаров А.М., Кумсков М.И., Пономарева Л.А., Григорьева С.С., Чичуа В.Т.
Институт органической химии им.Н.Д.Зелинского РАН

Поставлена задача идентификации пространственной структуры «молекулярного ключа», соответствующего неизвестному «белковому замку», запускающему процесс проявления биологической активности на примере веществ, проявляющих амбровый запах. Описана методика поиска адекватных описаний структур молекулярных графов для задачи "структура-свойство" (QSAR - "Quantitative Structure-Activity Relationship"). Выбор описания молекул в виде вектора признаков заранее не задан. Правильное определение признаков под заданное биологическое свойство является ключевым моментом QSAR-моделирования. Адекватный выбор признаков позволяет содержательно проводить оценку и интерпретацию QSAR-моделей, в том числе формированием геометрической модели активного центра

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=426>

QSAR ON AMBER FRAGRANCES MOLECULAR SURFACE

Svitanko I.V., Zaharov A.M., Kumskov M.I., Ponomareva L.A., Grigorieva S.S., ChiChua V.T.
N.D.Zelinsky Institute of Organic Chemistry of Russian Academy of Sciences

A problem of identification of the spatial structure of a "molecular key" corresponding to an unknown "protein lock" initiating the process of biological activity display is studied for the case of amber smell substances. The procedure for searching adequate descriptions of molecular graph structures is described for QSAR - Quantitative Structure-Activity Relationship. The choice of molecule description as a vector of attributes is not set a priori. Correct definition of attributes corresponding to the given biological property is the key factor for the QSAR modeling. An adequate selection of attributes allows estimation and interpretation of QSAR models by, among others, formation of a geometrical model of the active center

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=426

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКАЯ КОНЦЕПЦИЯ БИОЛОГИЧЕСКОГО ДЕЙСТВИЯ РАЗЛИЧНЫХ ПОВРЕЖДАЮЩИХ ФАКТОРОВ НА ЕДИНИЧНУЮ КЛЕТКУ

Смирнова С.А., Смирнов С.Ю.
Московский инженерно физический институт

Предложена оригинальная концепция повреждающего действия различных факторов на единичную клетку. Цель работы - отбор признаков, отличающих раковую клетку от нормальной, и прогноз ее злокачественной трансформации. Для этого разработаны биологическая и математическая модели. Биологическая модель раковой клетки - это клетка с дефектной ДНК, но способная к делению. Математическая модель представлена сетью биохимических реакций. Результаты моделирования выявили принципиально новые способы профилактики онкологических заболеваний и их лечения

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=486>

THE PHYSICAL AND CHEMICAL CONCEPT OF BIOLOGICAL ACTION OF VARIOUS DAMAGING FACTORS ON A SINGLE CELL

Smirnova S.A., Smirnov S.Yu.
Moscow Engineering Physics Institute (State University)

An original concept of biological action of various damaging factors on a single cell is suggested. The objective of the study was to select attributes distinguishing a cancer cell from a normal one, and to forecast its malignant transformation. For this purpose biological and mathematical models were developed. The biological model of a cancer cell is a cell with a defective DNA, but capable to division. The mathematical model is presented by a network of biochemical reactions. Simulation data have shown distinctly new ways for prevention and treatment of oncologic diseases

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=486

СПЕКТРАЛЬНАЯ ОБРАБОТКА ДВУМЕРНЫХ СИГНАЛОВ И ТИПОВЫЕ ОПЕРАЦИИ В ПРОСТРАНСТВЕ КОЭФФИЦИЕНТОВ РАЗЛОЖЕНИЯ

Куликова Л.И., Махортых С.А.

Институт математических проблем биологии РАН

В данной работе разработаны и протестированы на данных магнитной энцефалографии общие процедуры описания и анализа функций двух переменных, заданных на сфере. Руководствуясь общей идеей обобщенного спектрально-аналитического метода, выведены аналитические соотношения между коэффициентами разложения для типовых математических операций. Приведены результаты для производной функции через коэффициенты разложения самой функции. Предлагаемый подход реализуется в задачах спектральной диагностики и классификации биомедицинских систем

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=466>

SPECTRAL PROCESSING OF 2-DIMENSIONAL SIGNALS AND TYPICAL OPERATIONS IN SPACE OF EXPANSION COEFFICIENTS

Kulikova L.I., Makhortykh S.A.

Institute of Mathematical Problems of Biology Russian Academy of Sciences

In the paper general procedures for description and analysis of two variables functions on sphere are proposed. Algorithms were tested on magnetic encephalography data. On the fundament of generalized spectral-analytical method appropriate formula for decomposition coefficients of typical mathematics operations were derived.

Examples for function partial derivatives relations of expansion coefficients of initial function are brought. Proposed approach is realized in the problems of biomedical systems diagnostics and classifying

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=466

РАЗРАБОТКА ПРОГРАММЫ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ НА ОСНОВЕ МЕТОДА ПОТЕНЦИАЛОВ ЭФФЕКТИВНЫХ ФРАГМЕНТОВ

Московский А.А., Акимов А.В., Григоренко Б.Л., Епифановский Е.М., Немухин А.В.

Московский государственный университет им.М.В.Ломоносова

Описана реализация метода молекулярной динамики использующей для расчета поверхности потенциальной энергии метод гибридный метод квантовой молекулярно-механики (КМ/ММ), на основе потенциалов эффективных фрагментов. Поскольку в используемом методе КМ/ММ молекулярно-механическая часть представлена в виде набора фрагментов, в которых взаимное расположение атомов жестко фиксировано, осуществлена реализации метода молекулярной динамики с жесткими фрагментами

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=498>

DEVELOPMENT OF MOLECULAR DYNAMICS PROGRAM ON TOP OF EFFECTIVE FRAGMENTS METHOD

Moskovskiy A.A., Akimov A.V., Grigorenko B.L., Epifanovskiy E.M., Nemukhin A.V.

M.V.Lomonosov Moscow State University

We describe an implementation of molecular dynamics program that utilizes the hybrid quantum-mechanics molecular mechanics method (QM/MM) for calculation of potential energy surface (PES) of the . Our QM/MM approach is based on effective fragments method, so, it was necessary to implement rigid body molecular dynamics

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=498

СООТНОШЕНИЕ СИЛ КОМПЬЮТЕР – ИНТЕЛЛЕКТ В МОЛЕКУЛЯРНОМ МОДЕЛИРОВАНИИ: СЕГОДНЯ И ЗАВТРА

Дементьев В.А.

Институт геохимии и аналитической химии им.В.И.Вернадского РАН

Проанализированы перспективы взаимного влияния вычислительной мощи современных компьютеров и теоретических представлений в области молекулярного моделирования. Показано, что нынешнее развитие данной области знаний во многом стимулируется высокими темпами развития вычислительных технологий и доступностью суперкомпьютеров. Замечено, что эффективность использования мощной вычислительной техники начинает сдерживаться чисто теоретическими трудностями моделирования. Намечены пути преодоления этих трудностей

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=417>

COMPUTER VERSUS INTELLECT IN MOLECULAR MODELING: NOW AND ON

Dementiev V.A.

V.I.Vernadsky Institute of Geochemistry and Analytical Chemistry of Russian Academy of Sciences

Prospects of mutual influence of computing power of modern computers and theoretical representations in the field of molecular modeling are analyzed. It is shown, that present development of the given field of knowledge is stimulated in many respects with high rates of development of computing technologies and availability of supercomputers. It is noticed, that efficiency of use of powerful computer facilities starts to restrain by theoretical difficulties of modeling. Ways of overcoming of these difficulties are planned

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=417

**ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ТЕПЛОТ ОБРАЗОВАНИЯ
УГЛЕВОДОРОДОВ ПО ИК СПЕКТРАМ****Важев В.В., Алдабергенов М.К., Медведева Е.В.**
Костанайский государственный педагогический
институт

Исследована возможность применения ИК спектров для прогнозирования теплоты образования углеводородов. Использован набор из 160 углеводородов, тренировочная выборка состояла из 120, контрольная - из 40 веществ. Полученные результаты свидетельствуют о возможности применения ИК спектров в качестве дескрипторов молекулярной структуры для прогнозирования целевого свойства с коэффициентом корреляции до 0.997 и стандартным отклонением 6.87 кДж/моль

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=419>

**PREDICTION OF FORMATION HEATS OF
HYDROCARBONS THROUGH IR SPECTRUMS****Vazhev V.V., Aldabergenov M.K., Medvedeva E.V.**
Kostanay State Pedagogical Institute

The possibility of application of the of IR spectrums for prediction of formation heat of hydrocarbons is researched. The set from 160 hydrocarbon utilised, the training set consist from 120, test - of 40 compounds. The obtained outcomes testify to a suitability of IR spectra as descriptors of molecular structures for prediction of target property with a coefficient of correlation up to 0.997 and standard deviation 6.87 kJ/mol

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=419

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА
ИНДИВИДУАЛЬНЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ
ЖИДКОСТЕЙ И НЕКОНТИНУАЛЬНАЯ МОДЕЛЬ
ВАНДЕРВААЛЬСОВЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ****Николаев В.Ф.**Институт органической и физической химии им.
А.Е.Арбузова Казанского научного центра РАН

Для количественного описания физико-химических свойств (энтальпия испарения, температура кипения, поверхностное натяжение, вязкость и др.) индивидуальных молекулярных жидкостей предложена неконтинуальная модель вандерваальсовых взаимодействий, основанная на использовании таких молекулярных (мольных) характеристик жидкостей как молекулярная рефракция, дипольный момент и молярный объем. Установлен инвариантный характер отношения коэффициентов корреляционных соотношений при электростатическом и дисперсионном вкладах для всех проанализированных свойств

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=476>

**PHYSICAL AND CHEMICAL PROPERTIES OF
INDIVIDUAL MOLECULAR LIQUIDS AND THE
NONCONTINUAL MODEL OF VAN DER WAALS
INTERACTIONS****Nikolaev V.F.**The Institute of Organic and Physical Chemistry Kazan
Scientific Center Russian Academy of Sciences

A noncontinual model of van der Waals interactions is suggested for quantitative description of physical and chemical properties (enthalpy of evaporation, boiling point, interfacial tension, viscosity, etc.) of individual molecular liquids. The model based on molecular (molar) characteristics of liquids such as molecular refraction, electrical dipole moment and molar volume. Invariant character of the relationship between correlation ratio coefficients is established at electrostatic and dispersion contributions for all analyzed properties

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=476

**ВЛИЯНИЕ РАСТВОРИТЕЛЯ НА ГЕОМЕТРИЧЕСКИЕ
И ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ СИГМА-
КОМПЛЕКСА****Стариков А.А., Котов А.Д., Орлов В.Ю.**Ярославский государственный университет
им.П.Г.Демидова

Квантово-химическое моделирование является одним из эффективных методов исследования короткоживущих промежуточных частиц в химических реакциях. Ключевыми интермедиатами в реакциях ароматического нуклеофильного замещения являются сигма-комплексы. На примере модельного сигма-комплекса (см. рис.) изучено с использованием полуэмпирического метода PM3 влияние количества молекул растворителя (диметилформамид) на его геометрические и энергетические параметры

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=436>

**INFLUENCE OF A SOLVENT ON GEOMETRICAL AND
ENERGETIC PARAMETERS OF A SIGMA-COMPLEX****Starikov A.A., Kotov A.D., Orlov V.Yu.**

P.D.Demidov Yaroslavl State University

Quantum-chemical modeling is an efficient method to study short-lived intermediate species in chemical reactions. Sigma-complexes are key intermediates in reactions of the aromatic nucleophilic substitution. For a model sigma-complex (see fig.), the influence of a number of solvent (dimethylformamide) molecules on its geometrical and energetic parameters was studied by the semi-empirical PM3 method

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=436

**МОДЕЛИ МОЛЕКУЛЯРНОГО
ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА****Дзябченко А.**Научно-исследовательский физико-химический
институт им. Л.Я.Карпова

На примере ряда соединений (HF, H₂O, NH₃, углеводороды, формальдегид, метиловый спирт и формамид) изучены способы аппроксимации молекулярного электростатического потенциала (МЭП) модельными точечными зарядами. МЭП вычисляли методом Хартри-Фока с базисом орбиталей 6-31G (d,p) по программе Gaussian 98. Рассмотрены следующие модели зарядов: а) традиционная атомная, б) связей диполей, в которых диполи направлены вдоль химических связей, в) свободных диполей, где оптимальное расположение зарядов в пространстве не ограничивалось, и г) свободных диполей, дополненная диполями на осях симметрии молекулы. Оптимизацию моделей осуществляли с помощью новой программы FitESP, разработанной в ходе исследования. Найдено, что применение модели последнего типа уменьшает ошибку аппроксимации радикальным образом (падение относительного среднеквадратичного отклонения R на порядок и более по сравнению с атомной моделью). Так, в исследованном ряду молекул значения R для наилучших моделей находятся в интервале 0,1-0,6%, тогда как с уточненными атомными зарядами величины R в наиболее благоприятном случае составляют несколько процентов

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=411>**MODELS OF MOLECULAR ELECTROSTATIC
POTENTIAL****Dzyabchenko A.**

L.Ya.Karpov Institute of Physical Chemistry

Approximation of molecular electrostatic potential (MEP) by model point charges has been investigated on a number of compounds: HF, H₂O, NH₃, hydrocarbons, formaldehyde, methanol, formamide. The MEP were calculated by the Hartree-Fock method with 6-31G (d,p) basis functions using the Gaussian 98 program package. Following charge models were considered: (a) traditional atomic, (b) bond-dipole, in which the dipoles were aligned with the bonds, (c) free-dipole, where spatial charge arrangement was not constrained and, (d) free dipoles with a few extra ones at the symmetry axes of the molecule. The models were optimized with FitESP, a novel program designed in this investigation. It was found that the charge model of the last type reduces R radically as compared to the atomic charge model. Thus, with the present molecules the R values of the best dipole models were in the range 0.1 - 0.6 %, whereas with the atomic charges R was smaller than a few percents in the most favorite case

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=411**НАХОЖДЕНИЕ ОПТИМАЛЬНЫХ
ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ИНДЕКСОВ ДЛЯ
МОДЕЛИРОВАНИЯ ОКТАНОВЫХ ЧИСЕЛ
УГЛЕВОДОРОДОВ****Рыжов А.Н., Смоленский Е.А., Лapidус А.Л.,
Бавыкин В.М., Платунов Д.Ю.**

Институт органической химии им.Н.Д.Зелинского РАН

На основе зависимости октановых чисел (ОЧ) n-алканов от числа атомов углерода (n) вычислены оптимальные топологические индексы (ТИ) для ОЧ, линейно зависящие от n. Они разложены по базису из векторов, составляющих матрицу химических структур. На основе этих разложений построена модель, позволяющая оптимальным образом рассчитывать ОЧ для алканов с измеренными значениями ОЧ и предсказывать ОЧ как для алканов с ещё не измеренными ОЧ, так и для ещё не открытых алканов

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=443>**FINDING OF OPTIMAL TOPOLOGICAL INDEXES FOR
MODELING OF HYDROCARBON OCTANE NUMBERS****Rijov A.N., Smolenskiy E.A., Lapidus A.L.,
Bavikin V.M., Platonov D.Yu.**N.D.Zelinsky Institute of Organic Chemistry of Russian
Academy of Sciences

Optimal topological indices (TI) for octane numbers (ON), linearly dependent from the number of carbon atoms (n), were calculated based on dependence of (ON) of n-alkanes on n. They are expanded in vector basis comprising a matrix of chemical structures. On the basis of these decompositions, a model was constructed. This model allows optimal calculation of ON for alkanes with known octane numbers as well as prediction ON both for alkanes with unknown ON and for alkanes not yet discovered

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=443

**РАЗРАБОТКА НОВОГО МЕТОДА ПОСТРОЕНИЯ
МНОГОЭЛЕКТРОННЫХ ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ**

Чувылкин Н.Д., Смоленский Е.А., Черных А.В.
Институт органической химии им.Н.Д.Зелинского РАН

Предлагается новый квантово-химический подход, который основан на углубленном анализе симметрии и узлов многоэлектронных волновых функций, подчиняющихся принципу Паули

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=403>

**DEVELOPMENT OF A NEW METHOD FOR THE
CONSTRUCTION OF MULTIELECTRON WAVE
FUNCTIONS**

Chuvilkin N.D., Smolensky E.A., Chernykh A.V.
N.D.Zelinsky Institute of Organic Chemistry of Russian
Academy of Sciences

Novel quantum-chemical approach based on the profound analysis of symmetry and knots of multielectron wave functions following the Pauli exclusion principle is suggested

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=403

**ПРИМЕНЕНИЕ МАТЛАБ ДЛЯ РАСЧЕТА
ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ
ЦИТОХРОМ С ОКСИДАЗЫ**

Горбикова Е.А.
Университет Хельсинки, Финляндия

Цитохром с оксидаза – терминальный фермент дыхательной цепи митохондрий и аэробных бактерий, который имеет весьма сложный каталитический цикл. Расчет термодинамических параметров функционирования данного фермента существенен для создания молекулярной модели электронного и протонного транспорта. Электрохимическое титрование цитохром с оксидазы методом Фурье-ИК спектроскопии позволило извлечь кривые редокс титрования всех четырех редокс центров. Из кривых титрования в среде Matlab были рассчитаны термодинамические параметры функционирования фермента, такие как равновесные средноточечные потенциалы, степень антикооперативности между гемами и равновесная константа электронного транспорта между гемами. Для расчетов простейшие модели взаимодействия редокс центров были применены

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=497>

**CALCULATION OF THERMODYNAMIC PARAMETERS
OF CYTOCHROME C OXIDASE IN MATLAB**

Gorbikova E.A.
Helsinki University

Cytochrome c oxidase (CcO) is a terminal enzyme of respiratory chain of mitochondria and aerobic bacteria. The catalytic cycle of CcO is incredibly complicated. Thermodynamic parameters of CcO functioning is necessary for the building of molecular model of electron and proton transfer of the enzyme. Electrochemical titration of cytochrome c oxidase by FTIR gave great advantage to extract pure redox titration curves of each of four redox centers. Thermodynamic parameters (such as equilibrium midpoint potentials, extent of anticooperativity between hemes and equilibrium constant of electron flow between hemes) were calculated with help of Matlab. The basic models of redox centers interactions were applied

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=497

**МЕЖФАЗНАЯ ТЕНЗИОМЕТРИЯ КАК МЕТОД
ОПРЕДЕЛЕНИЯ СО-ДЕРЖАНИЯ АЛКИЛБЕНЗОЛОВ
И ПОЛЯРНЫХ ВЕЩЕСТВ (ОКСИГЕ-НАТОВ) В
МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ТЕХНОГЕННЫХ
УГЛЕВОДО-РОДНЫХ СИСТЕМАХ**

Николаев И.В.
Институт органической и физической химии им.
А.Е.Арбузова Казанского научного центра РАН

На основе межфазной тензиометрии и фракционной разгонки многокомпонентных углеводородных систем (бензинов) предложен метод определения в них основных октанообразующих компонентов алкилзамещенных бензолов и оксигенатов (МТБЭ). При обработке данных градуировки использовано предположение о псевдодвухкомпонентности исследуемых систем и модель конкурирующих ван-дер-ваальсовых взаимодействий

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=433>

**INTERPHASE TENSOMETRY AS A METHOD FOR
DETERMINATION OF CONTENTS OF ALKYL
BENZENES AND POLAR SUBSTANCES
(OXYGENATES) IN MULTICOMPONENT
TECHNOGENIC HYDROCARBON SYSTEMS**

Nikolaev I.V.
The Institute of Organic and Physical Chemistry Kazan
Scientific Center Russian Academy of Sciences

The method of determination of the major octane-generating components - alkyl-substituted benzenes and oxygenates (MTBE) in multi-component hydrocarbon systems (fuels) based on the interphase tensiometry and fractional distillation of these systems was developed. The assumption about pseudo-two-component nature of studied systems and a model of competitive van der Waals interactions were used during the processing of calibration data

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=433

СЕКЦИЯ 8**ДОКЛАДЫ, НЕ ВОШЕДШИЕ В ОСНОВНЫЕ СЕКЦИИ****SECTION 8****THE REPORTS, WHICH ARE NOT INCLUDED IN THE BASIC SECTIONS****ПРОБЛЕМЫ САНИТАРНОГО КОНТРОЛЯ
ВИБРАЦИИ ВБЛИЗИ ТРАНСПОРТНЫХ
МАГИСТРАЛЕЙ****Матвеев А.С., Махортых С.А.**

Институт математических проблем биологии РАН

Решается задача прогноза и контроля экологической обстановки вблизи интенсивных источников виброакустического воздействия в городе. Приводится модель распространения упругих волн в грунте. Найдены условия применимости модели для реальных задач прогноза уровней вибрации вблизи транспортных магистралей

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=439>**PROBLEMS OF THE SANITARY CONTROL OF
VIBRATION NEAR TO TRAFFIC ROUTES****Matveev A.S., Mahortih S.A.**

Institute of Mathematical Problems of Biology Russian Academy of Sciences

The problem of forecast and control of ecological conditions near intensive sources of vibro-acoustic impact in cities is being solved. The model of elastic wave propagation in the ground is suggested. Conditions of model validity for real-world forecast of vibration levels near to traffic routes were found

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=439**РИТМ ДЫХАНИЯ ПАЦИЕНТА КАК МОДУЛЯТОР
ПАРАМЕТРОВ ЭЛЕКТРОСТИМУЛЯЦИИ В
ПРОЦЕДУРАХ ОБЕЗБОЛИВАНИЯ****Матрусов С.Г., Федотчев А.И.**

Пушчинский медицинский центр РАН

Представлен и обоснован перспективный подход к увеличению эффективности процедур обезболивания с помощью чрескожной электростимуляции. Подход заключается в модуляции электрических раздражений собственным ритмом дыхания пациента. Рассмотрены особенности микропроцессорного прибора, предназначенного для реализации данного подхода. Представлены результаты его экспериментального тестирования, намечены пути исследования механизмов выявленных эффектов

<http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper.php?p=396>**PATIENT'S BREATHING RATE AS THE MODULATOR
OF ELECTRIC STIMULATION PARAMETERS FOR
PAIN REDUCTION PROCEDURES****Matrusov S.G., Fedotchev A.I.**

Pushchino Medicales Center of the Russian Academy of Sciences

Promising approach to enhance the efficiency of transcutaneous electric stimulation for pain reduction is presented and substantiated. It is based on electric current modulation by own patient's endogenous rhythm, i.e., breath rate. The device for this approach realization and the results of its experimental testing are described

http://www.ivtn.ru/2006/biomedchem/enter/paper_e.php?p=396

**ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ
ТЕХНОЛОГИИ В ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ И
ПРИКЛАДНЫХ ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ
ИССЛЕДОВАНИЯХ**



**COMPUTER APPLICATIONS IN FUNDAMENTAL
AND APPLIED PHYSICS**

СЕКЦИЯ 2**КОМПЬЮТЕРНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ, ИХ ОРГАНИЗАЦИЯ (СЕТИ И ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ
ВЫЧИСЛЕНИЯ)****SECTION 2****COMPUTING AND COMPUTING MANAGEMENT (NETWORKS AND PARALLEL
COMPUTATION)****СИСТЕМАТИЗАЦИЯ ТРЕБОВАНИЙ К РЕАЛИЗАЦИИ
МНОГОПРОЦЕССОРНОЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ
ТЕХНОЛОГИИ ОБРАБОТКИ РАДИОЛОКАЦИОННОЙ
ИНФОРМАЦИИ****Мурзин А.П.**

ФГУП «НИИ систем связи и управления» РАН

**RANGING OF REQUIREMENTS TO IMPLEMENTATION
OF MULTIPROCESSOR COMPUTING TECHNOLOGY
FOR PROCESSING OF RADAR INFORMATION****Murzin A.P.**FSUE Scientific Research Institute of systems of
communication and management

Изложена методика распараллеливания и планирования вычислительного процесса, применение которой позволяет синтезировать структуру многопроцессорной вычислительной системы конвейерной структуры, позволяющей определять дальности до целей в темпе реального времени

<http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper.php?p=453>

The technique for multisequencing and planning of computing process is presented. It allows the synthesize of the structure of the multiprocessor computing system of pipeline organization, allowing to determine the distance to the target in real time

http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper_e.php?p=453

СЕКЦИЯ 3

МОДЕЛИРОВАНИЕ, ЧИСЛЕННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

SECTION 3

COMPUTER SIMULATION

МНОГОЧАСТИЧНАЯ ТЕОРИЯ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ
Позднеев С.А.

Физический институт им.П.Н.Лебедева РАН

MULTIPLE SPECIES THEORY OF CHEMICAL REACTIONS
Pozdneev S.A.

P.N.Lebedev Physical Institute of Russian Academy of Sciences

Предложена новая концепция химических реакций, основанная на специфическом многочастичном взаимодействии между компонентами системы

<http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper.php?p=393>

We propose one of the possible mechanisms of occurrence of a chemical reaction? based on a specific multiparticle interaction under condition of a low coupling energi between clusters of the system

http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper_e.php?p=393

СРАВНЕНИЕ ДАННЫХ МИКРОВОЛНОВОГО СПЕКТРА И КВАНТОВО ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ 2-МЕТИЛ-1,3-ДИОКСАНА**Шорников Д.В., Никитина А.П., Кантор Е.А.**

Уфимский государственный нефтяной технический университет

COMPARISON OF THE DATE OF A MICROWAVE SPECTROSCOPY AND QUANTUM-CHEMICAL CALCULATIONS OF 2-METHIL-1.3-DIOXANE**Shornikov D.V., Nikitina A.P., Kantor E.A.**

Ufa State Technical Oil University

Различными методами квантовой химии получены геометрические параметры 2-метил-1,3-диоксана. Экспериментальные данные получены микроволновым спектром молекулы. Проведен анализ сходимости расчетных и экспериментальных данных длин С—С связей и расстояний

<http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper.php?p=479>

Various methods of quantum chemistry receive geometrical parameters. Experimental data are received by a microwave spectrum of molecule. The analysis of convergence calculations and experimental data of lengths C-C bond and distances

http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper_e.php?p=479

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АТОМНОГО МАСШТАБА СОЕДИНЕНИЙ **$Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{6.5}$** **Вовк Р.В., Chroneos A., Гулатис И.Л., Панченко С.В.**

Харьковский национальный университет им В.Н.Каразина

COMPUTER SIMULATION OF THE ATOMIC SCALE OF $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{6.5}$ COMPOUNDS**Vovk R.V., Chroneos A., Goulatis I.L., Panchenko S.V.**

V.N.Karazin Kharkov National University

Методика моделирования атомного масштаба на основе минимизации энергии применена для изучения структуры и химических дефектов ряда орторомбических соединений $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{6.5}$ ($x=0, 0.25, 0.5, 0.75$ и 1). Эффективность модели подтверждается сравнением полученных результатов с предыдущим экспериментальными и теоретическими исследованиями. Показано, что подрешетки Cu^{2+} (или Ba^{2+}) и Y^{3+} (или Pr^{3+}) могут включать целый ряд двух и трехвалентных дефектов. Расчетное значение энергии связи показывает систематическую зависимость как функция содержания празеодима

<http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper.php?p=517>

Atomic scale simulation techniques based on energy minimization have been applied to study the structure and defect chemistry of a range of orthorhombic $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{6.5}$ ($x=0, 0.25, 0.5, 0.75$ and 1) compounds. The technological significance of the $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{6.5}$ and related high temperature superconductors has been reviewed. The efficacy of the model has been demonstrated through comparison of the predictions to previous experimental and theoretical results. A number of divalent and trivalent defects have been dissolved into the Cu^{2+} (or Ba^{2+}) and Y^{3+} (or Pr^{3+}) sublattices respectively. The calculated solution and binding energies demonstrate a systematic variation as a function of the praseodymium content

http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper_e.php?p=517

**САМОСОГЛАСОВАННЫЙ РАСЧЕТ
РАВНОВЕШНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЧАСТИЦ В
ТРЕХ АГРЕГАТНЫХ СОСТОЯНИЯХ**

Товбин Ю.К.

Научно-исследовательский физико-химический
институт им. Л.Я.Карпова

Рассмотрена возможность унифицированного самосогласованного расчета равновесных распределений молекул в трех агрегатных состояниях на основе модели решеточного газа. Данный подход обобщается на произвольные давления с учетом сжимаемости решеточной структуры. Получены замкнутые выражения для расчета термодинамических функций, включая выражение для химического потенциала компонентов смеси, в континуальном квазихимическом приближении. Это обеспечивает равноточный расчет межфазного равновесия в системе газ - жидкость - твердое, а также определение тройной и критической точек. Обсуждаются пути упрощения системы интегральных уравнений при переходе к эффективному парному потенциалу взаимодействия

<http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper.php?p=438>

**SELF-CONSISTENT CALCULATION OF EQUILIBRIUM
DISTRIBUTION OF PARTICLES IN THREE AGREGATE
STATES**

Tovbin Y.K.

L.Ya.Karpov Institute of Physical Chemistry

A possibility of equilibrium distributions of molecules within the unified self-agreed calculation in three aggregate states on the basis of the lattice-gas model was considered. The given approach is generalized on any pressure with taking into account a compression of the lattice structure. Closed expressions for thermodynamic functions, including expression for chemical potential of components of a mix, in continual quasichemical approximation are received. It provides the same accuracy calculation of interphase balances in the system of gas - liquid - solid, as well as at determination threefold and critical points. Ways of simplification of a system of integral equations at a transition to effective pair potential of interaction are discussed

http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper_e.php?p=438

**АНИЗОТРОПИЯ ПРОДОЛЬНОГО И ПОПЕРЕЧНОГО
ТРАНСПОРТА В МОНОКРИСТАЛЛАХ $\text{HoBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$**

**Вовк Р.В., Оболенский М.А., Завгородний А.А.,
Бондаренко А.В.**

Харьковский национальный университет им
В.Н.Каразина

Измерены температурные зависимости продольной и поперечной проводимости монокристаллов $\text{HoBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ с различным содержанием кислорода. Обнаружено, что, в отличие от монокристаллов $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ анизотропия нормального электросопротивления $\rho_c/\rho_{ab}(T)$ хорошо описывается посредством универсального «закона 0.5» для термоактивационной прыжковой проводимости

<http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper.php?p=516>

**ANISOTROPY OF SERIES AND SHUNT TRANSPORT
IN $\text{HoBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$**

**Vovk R.V., Obolenskii M.A., Zavgorodniy A.A.,
Bondarenko A.V.**

V.N.Karazin Kharkov National University

Temperature dependences of series and shunt admittance of $\text{HoBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ single crystals are measured. It is shown, that, unlike $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$, single crystals anisotropy of normal electrical resistivity $\rho_c/\rho_{ab}(T)$ is well described by universal «law 0.5» for thermoactivation hopping

http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper_e.php?p=516

**ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПОГРЕШНОСТЕЙ
ИЗМЕРЕНИЯ РАДИОГОЛОГРАММЫ НА КАЧЕСТВО
ВОССТАНОВЛЕННОГО ИЗОБРАЖЕНИЯ**

**Гвоздарёв А.С., Артёмова Т.К., Боков М.А.,
Кузнецов Е.А.**

Ярославский государственный университет
им.П.Г.Демидова

Для модели комплексной радиоголограммы и модели погрешностей измерений (нормальное распределение ошибки измерения амплитуды, равномерное . фазовой ошибки) получено решение задачи определения плотности вероятности ошибки амплитуды и фазы сигнала-изображения, дисперсии ошибки амплитуды. Для этого была использована статистическая интерпретация преобразования Меллина. Численный эксперимент показал, что дисперсия значений ошибки сигнала-изображения может являться критерием для формулировки требований к отношению сигнал-шум при измерениях отсчетов радиоголограммы

<http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper.php?p=496>

**THE RESEARCH OF MICROWAVE HOLOGRAPHIC
MEASUREMENT ERRORS INFLUENCE ON THE
RECONSTRUCTED IMAGE QUALITY**

**Gvozdev A.S., Artyomova T.K., Bokov M.A.,
Kuznetsov E.A.**

P.D.Demidov Yaroslavl State University

Derivations for amplitude and phase error probability density distribution and standard deviation were obtained for the complex microwave hologram model. During the analyses the amplitude noises were assumed to be distributed normally with the zero mean value and phase noises were considered to be distributed uniformly in the range of $\pi/8$ with the zero mean. An approach, based on statistic features of the Mellin's transform, was applied. Numerical studies allows to use the signal-image error deviation as a criteria of the SNR choice, in the microwave holography sampling

http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper_e.php?p=496

КРЕМНИЙ-УГЛЕРОДНЫЕ НАНОТРУБКИ**Свечников А.Б.**

Российский научный центр "Курчатовский Институт"

На основании квантово-химических расчетов полной энергии крупных кластеров предложены структуры нанотрубок (НТ) нового вида, которые образованы атомами кремния и углерода с соотношением 1:1. Всего рассмотрено 7 различных структур одностеночных НТ с параметрами в диапазоне от (2,3) до (6,6). Проведен сравнительный анализ энергий связи между атомами в НТ, образованных только углеродом и атомными парами кремний-углерод. Показано, что связи Si-C в рассмотренных НТ характеризуются высокой прочностью, лишь на 5% уступаая связям C-C в углеродных НТ

<http://www.ivtn.ru/2006/phymath/enter/paper.php?p=462>

SILICON-CARBON NANOTUBES**Svechnikov A.B.**

The Russian Research Centre Kurchatov Institute

A new kind of nanotubes (NT) formed by carbon and silicon atoms with a ratio 1:1 has been proposed on the base of quantum chemical calculations of total energy for the large size atomic clusters. Seven different structures of single-wall nanotubes with the chirality in a range from (2,3) to (6,6) were investigated. The comparative analysis of binding energies between atoms had been made for the pure carbon and silicon-carbon NTs. It was shown that atomic bonds Si-C in the NTs were strong enough, only 5% weaker to compare with the atomic bonds C-C in pure carbon NTs

http://www.ivtn.ru/2006/phymath/enter/paper_e.php?p=462

АЛГОРИТМИЗАЦИЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ ОЦЕНОК МНОГОМЕРНЫХ ИНТЕГРАЛОВ С ПОМОЩЬЮ ПЛП-ПОИСКА**Статников И.Н., Фирсов Г.И.**

Институт машиноведения им. А.А.Благонравова РАН

Идея использования ПЛП-поиска основывается на предположении о том, что при вычислении многомерного интеграла наступает такой момент в вычислительном процессе, когда величина интеграла перестает существенно меняться. Этот момент наступает несколько раньше, чем в обычном методе Монте-Карло, за счет использования двойного усреднения: сначала усредняем выборки случайных значений интегрируемой функции по сечениям варьируемых параметров, а затем усредняем полученную выборку из этих значений. В докладе на примерах расчетов многомерных интегралов с использованием ПЛП-поиска показано, что относительные погрешности предварительных оценок вычисляемых интегралов, когда функции являются непрерывными или кусочно-непрерывными, лежат в интервале $0,001 \div 0,05$ практически для любых размерностей

<http://www.ivtn.ru/2006/phymath/enter/paper.php?p=493>

ALGORITHMIZATION OF THE CALCULATION OF THE ESTIMATIONS OF MULTIDIMENSIONAL INTEGRALS WITH THE AID OF THE PLP-SEARCH**Statnikov I.N., Firsov G.I.**

A.A. Blagonravov Mechanical Engineering Research Institute of Russian Academy of Sciences

The idea of the use of a PLP- search is based on assumptions of the fact that during the calculation of multidimensional integral comes this moment in the computational process, when integral value ceases substantially to change. This moment comes somewhat earlier than in the usual Monte Carlo method, due to the use of the dual averaging: we first average the samples of the random values of the integrated function over the sections of the varied parameters, and then average the obtained sample from these values. In the report based on the examples of the calculations of multidimensional integrals with the use of a PLP- search it is shown that relative errors in the preliminary estimations of the computable integrals, when functions are continuous or piecewise-continuous, lie at interval of $0.001 \div 0.05$ practically for any dimensionality

http://www.ivtn.ru/2006/phymath/enter/paper_e.php?p=493

ПЕРЕХОДНЫЕ СОСТОЯНИЯ ПРИ ИНВЕРСИИ ЦИКЛА 2-МЕТИЛ-1,3-ДИОКСАНА**Шорников Д.В., Никитина А.П., Кантор Е.А.**

Уфимский государственный нефтяной технический университет

Переходные состояния при инверсии цикла молекулы 2-метил-1,3-диоксана были рассчитаны методом DFT B3PW91 в базисе 6-31G(d,p). Определены конформации – софа-4 (S-4) и твист-софа-4 (TS-4)

<http://www.ivtn.ru/2006/phymath/enter/paper.php?p=480>

TRANSITION STATES AT INVERSION OF A CYCLE OF 2-METHYL-1.3-DIOXANES**Shornikov D.V., Nikitina A.P., Kantor E.A.**

Ufa State Technical Oil University

Transition states at inversion of a cycle of 2-methyl-1.3-dioxanes were calculated by DFT method B3PW91 with basis set 6-31G(d,p). Are determined conformations – a sofa (S-4) and twist-sofa (TS-4)

http://www.ivtn.ru/2006/phymath/enter/paper_e.php?p=480

**АНГАРМОНИЗМ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ
МНОГОАТОМНЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ,
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ И ПРИКЛАДНЫЕ АСПЕКТЫ****Дементьев В.А.**Институт геохимии и аналитической химии
им.В.И.Вернадского РАН

Предложен новый подход к решению ангармонической колебательной задачи для многоатомных молекул. Предлагается задавать модельные потенциалы как свободную смесь гармонических и ангармонических функций естественных колебательных координат, переходить к нормальным координатам и в них численными методами находить ангармонические частоты и волновые функции колебательных состояний. Обсуждаются проблемы, в решении которых предложенный подход может оказаться удобным и достаточно точным

<http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper.php?p=415>**ANHARMONIC VIBRATIONAL STATES OF
POLYATOMIC MOLECULES: COMPUTING ASPECTS
AND APPLICATIONS****Dementiev V.A.**V.I.Vernadsky Institute of Geochemistry and Analytical
Chemistry of Russian Academy of Sciences

A new approach is offered for anharmonic vibrational problem of polyatomic molecules solution. In this approach a molecular model potential is a free mixture of harmonic and anharmonic functions of natural vibrational co-ordinates. Transferring this potential into normal co-ordinates gives us a opportunity to obtain a set of independent tasks for one-dimensional sections of multi-dimensional potential surface of polyatomic molecule and to solve factorized anharmonic vibrational problem with numeric methods. Accuracy and reliability of the methods are discussed

http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper_e.php?p=415**ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ МОДЕЛИ
АНИЗОТРОПНОГО АНТИФЕРРОМАГНЕТИКА ВО
ВНЕШНЕМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ****Магомедов М.А., Муртазаев А.К.**

Институт физики дагестанского научного центра РАН

Используя одно-кластерный алгоритм Вульфа метода Монте-Карло проведены высокоточные исследования модели реального антиферромагнетика MnF₂ во внешнем магнитном поле. При этом проведено обобщение алгоритма Вульфа для исследования моделей анизотропных магнетиков и учета внешнего магнитного поля. Определены критические поля фазовых переходов из антиферромагнитного состояния в спин-флоп фазу (опрокидывание намагниченностей подрешеток перпендикулярно магнитному полю) и перехода в парамагнитную фазу

<http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper.php?p=492>**INVESTIGATION OF THE BEHAVIOR OF THE
ANISOTROPIC ANTIFERROMAGNETIC MODEL IN
MAGNETIC FIELD****Magomedov M.A., Murtazaev A.K.**Institute of physics of the Dagestan centre of science of
Russian Academy of Science

Using single-cluster Wolf's algorithm of the Monte-Carlo method is carried out high accuracy investigation of model of the real antiferromagnetic MnF₂ in magnetic field. Herewith generalization of the Wolf's algorithm is organized for study of models of the anisotropic magnetic and account of the external magnetic field. The critical fields phase transition are determined from antiferromagnetic phase to spin-flop phase and paramagnetic phase

http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper_e.php?p=492**МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОВЫХ ПРОЦЕССОВ В
ОРТОТРОПНЫХ ПЛАТАХ РАДИОЭЛЕКТРОННЫХ
УСТРОЙСТВ****Абжалилов С.Х., Рахманов К.С.**Ташкентский университет информационных
технологий

В данной работе рассматриваются задачи теплопроводности для ортотропной среды. На основе рекуррентно-операторного метода получено аналитического решения начально-краевой задачи прямоугольной ортотропной пластинке

<http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper.php?p=499>**MODELING OF THE HEATING PROCESSES IN
ORTHOTROPIC CHARGE RADIOELECTRONIC
DEVICES****Abzhalilov S.H., Rahmanov K.S.**

Tashkent University of Information Technologies

In the given work are considered problems of the uniform equation for the orthotropic ambience. Of the base recurrence- operators method is received analytical decision initial-marginal problem square-wave on orthotropic plate

http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper_e.php?p=499

**МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ РАДИАЦИОННОГО
ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЯ В КРЕМНИИ,
ЛЕГИРОВАННОМ ЛИТИЕМ****Богатов Н.М., Коваленко М.С.**
Кубанский государственный университет

На основе решения системы уравнений квазихимических реакций рассчитана кинетика процесса образования вторичных радиационных дефектов в кремнии, содержащем примеси фосфора, бора, лития, кислорода и углерода. Определены основные закономерности изменения концентраций вторичных радиационных дефектов на этапе облучения потоком электронов либо протонов и на этапе последующего изотемпературного отжига

<http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper.php?p=502>

**SIMULATION ANALYSIS OF RADIATION DEFECTS
KINETICS IN LITHIUM-DOPED SILICON****Bogatov N.M., Kovalenko M.S.**
Kuban State University

The calculation of radiation defects kinetics in silicon with the dopants P, B, Li, O, C is based on the solution of equations of semi-chemical reactions. The basic laws of change of the secondary radiation defects concentration at a stage of an irradiation by a stream electrons or protons and at a stage of the subsequent isothermal annealing are determined

http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper_e.php?p=502

**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
РЕАКЦИЙ ИЗОМЕРИЗАЦИИ ТРИПЛЕТНЫХ
НИТРОСОЕДИНЕНИЙ И НИТРОЗООКСИДОВ****Зеленцова Н.В., Зеленцов С.В.**
Нижегородский государственный университет
им.Н.И.Лобачевского

Методами квантовой химии (ROHF/6-31G, ROB3LYP/6-31G, CASSCF(8,8)/6-31G) изучены структуры и энергии стационарных состояний на поверхностях RNO₂, где R = фенил, пара-аминобензол, пара-хлорбензол. Сделан вывод о легкости изомеризации нитросоединений и нитрозооксидов в триплетном состоянии друг в друга. Легкость этих переходов мало зависит от природы заместителя R

<http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper.php?p=469>

**QUANTUM CHEMICAL STUDY OF THE TRIPLET
NITROCOMPOUND. TRIPLET NITROSO OXIDE****Zelentsova N.V., Zelentsov S.V.**
N.I.Lobachevskiy State University of Nizhny Novgorod

Quantum chemical methods (ROHF/6-31G, ROB3LYP/6-31G, CASSCF(8,8)/6-31G) were used to study geometric and energies of stationary states on the RNO₂ (where R = Ph, p-NH₂C₆H₄, p-ClC₆H₄) potential energy surfaces. It was shown that the isomerization of nitroso oxide to nitro compounds and vice versa proceeded with easiness, being little depended upon nature of substituent R

http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper_e.php?p=469

**ЭНЕРГИИ СВЯЗИ МЕЖДУ АТОМНЫМИ
ПЛОСКОСТЯМИ В КРИСТАЛЛАХ СО СТРУКТУРОЙ
ГРАФИТА****Свечников А.Б.**
Российский научный центр "Курчатовский Институт"

Рассчитаны энергии взаимодействия между атомными плоскостями в кристаллах со слоистой структурой. Методом функционала плотности в приближении полного потенциала найдены равновесные геометрические параметры для восьми различных кристаллических решеток, включая графит, нитрид бора и карбид кремния. С помощью полуэмпирических квантово-химических расчетов кластеров больших размеров установлено, что энергия связи в графите составляет 0,025 эВ/атом, для остальных структур лежат в интервале от 0,034 до 0,108 эВ/атом

<http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper.php?p=495>

**BINDING ENERGIES BETWEEN ATOMIC PLANES IN
THE CRYSTALS WITH GRAPHITE-LIKE STRUCTURE****Svechnikov A.B.**
The Russian Research Centre Kurchatov Institute

The interaction energies between atomic planes have been calculated for the crystals with layered structures. The equilibrium geometrical parameters for eight different crystal lattices, including graphite, boron nitride and silicon carbide, were estimated with the use of density functional theory full-potential approximation. Then the semi-empirical quantum chemical calculations of large atomic clusters had been carried and the values of the inter-layer binding energy were 0,025 eV/atom in graphite and from 0,034 to 0,108 eV/atom for the other crystal structures

http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper_e.php?p=495

**МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ АБРАЗИВНОЙ
ОБРАБОТКИ****Смирнов В.В.**

Бийский технологический институт

Процесс абразивной обработки рассматривается с точки зрения интенсивности снятия припуска. Получена математическая модель в виде обыкновенного дифференциального уравнения с начальными условиями. Внутренним параметром модели является время обработки, внешними входными параметрами являются коэффициенты модели, зависящие от физических и геометрических характеристик процесса обработки. Адекватность модели подтверждена результатами вычислительных экспериментов

<http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper.php?p=431>

**MATHEMATICAL MODEL OF ABRASIVE
PROCESSING****Smirnov V.V.**

Biysk Tehnological Institute

Abrasive processing is considered from the point of view of removal intensity of an allowance. The mathematical model as the ordinary differential equation with entry conditions is received. Internal parameter of model is time of processing, external entrance parameters are the factors of model dependent on physical and geometrical characteristics of processing. Adequacy of model with results of computing experiments is confirmed

http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper_e.php?p=431

**БАРЬЕРЫ ИНВЕРСИИ ЦИКЛА 4,4-ДИМЕТИЛ-1,3-
ДИОКСАНА****Шорников Д.В., Горбунова Н.В., Кантор Е.А.**

Уфимский государственный нефтяной технический университет

Методом, основанным на теории функционала плотности, ВЗРW91/6-31G(d,p) рассчитаны барьеры инверсии цикла 4,4-диметил-1,3-диоксана. Определены энергии переходных состояний

<http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper.php?p=478>

**BARRIERS OF INVERSION OF A CYCLE OF 4,4-
DIMETHYL-1,3-DIOXANE****Shornikov D.V., Gorbunova N.V., Kantor E.A.**

Ufa State Technical Oil University

The method based on the Density Functional Theory, ВЗРW91/6-31G (d, p) designs barriers of inversion of a cycle of 4,4-Dimethyl-1,3-Dioxane. Are determined energy of transition states

http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper_e.php?p=478

**ПЕРЕХОДНОЕ СОСТОЯНИЕ ДЛЯ ТЕРМИЧЕСКОЙ
ПЕРЕГРУППИРОВКИ А,У-ДИМЕТИЛАЛЛИЛОВОГО
ЭФИРА ПАРА-МЕТОКСИФЕНОЛА****Ершова Е.В., Ключарева Е.В., Кантор Е.А.**

Уфимский государственный нефтяной технический университет

Рассчитано переходное состояние для термической внутримолекулярной перегруппировки эфира пара-метоксифенола. Согласно расчетным данным, в переходном состоянии реализуются две конформации: искаженной ванны и кресловидная. Для двух возможных конформеров определены геометрия, электронное и орбитальное строение, подобие которых предполагает протекание реакции равным образом через переходное состояние как в форме ванны, так и в форме кресла

<http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper.php?p=455>

**TRANSITION STATE FOR THERMAL
REARRANGEMENT OF THE A,G-DIMETHYL ALLYL
ETHER OF THE PARA-METHOXYPHENOL****Ershova E.V., Klyuchareva E.V., Kantor E.A.**

Ufa State Technical Oil University

The transition state is calculated for thermal intramolecular rearrangement of the a,g-dimethyl allyl ether of para-methoxyphenol. According to calculated data, two conformations are realized in the transition state: the distorted boat and distorted chair. For two possible conformations geometry, the electronic and orbital structure are calculated. Similarity of them assumes reaction path equally through the transition state both in the form of the boat, and in the form of the chair

http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper_e.php?p=455

**СОЗДАНИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУР С
ЗАРАНЕЕ ЗАДАНЫМИ СВОЙСТВАМИ****Позднеев С.А.**

Физический институт им.П.Н.Лебедева РАН

Представлены методы целенаправленного получения молекулярных структур с заранее запланированными свойствами

<http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper.php?p=510>

**CREATION OF THE NEW MOLECULAR STRUCTURES
WITH NEW PROPERTIES****Pozdneev S.A.**

P.N.Lebedev Physical Institute of Russian Academy of Sciences

Investigation of the methods and tools for creation of the new molecular structures with new properties on the base quantum theory of few-body scattering are presented

http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper_e.php?p=510

**ДВОЙНОЙ АЛ-МТ-ЛД КРОССОВЕР В
МОНОКРИСТАЛЛАХ $\text{ReBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ (RE=Y, HO)**

**Вовк Р.В., Оболенский М.А., Завгородний А.А.,
Бондаренко А.В., Гулатис И.Л., Chroneos A. I.**
Харьковский национальный университет им
В.Н.Каразина

В работе исследована флуктуационная проводимость оптимально допированных кислородом монокристаллов $\text{ReBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ (Re=Y, Ho). Показано, что вблизи критической температуры (T_c) температурная зависимость флуктуационной парапроводимости хорошо описывается теоретической моделью Асламазова-Ларкина (АЛ). При температурах выше 2D-3D кроссовера эта зависимость удовлетворительно описывается в рамках теории Лоуренса-Дониаха (ЛД). Уширение области линейной зависимости $\rho_{ab}(T)$ для кристалла с наименьшим значением критической температуры, вероятно, свидетельствует о повышенной дефектности структуры данного образца, что, в свою очередь, может препятствовать процессам формирования флуктуационных пар

<http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper.php?p=518>

**DOUBLE AL-MT-LD CROSSOVER IN $\text{ReBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$
(RE=Y, HO) SINGLE CRYSTALS**

**Vovk R.V., Obolenskiia M.A., Zavgorodniya A.A.,
Bondarenkoa A.V., Goulatisa I.L., Chroneos A. I.**
V.N.Karazin Kharkov National University

The effect of the fluctuation paraconductivity in optimal oxygen doped $\text{ReBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ (Re=Y, Ho) single crystals has been investigated. The results indicate that the theoretical model of Aslamazov–Larkin (AL) describe the temperature dependence of fluctuation paraconductivity (FP) near the critical temperature (T_c). At temperatures above the temperature of the 2D-3D crossover this dependence is appropriately described by the Lawrence–Doniach (LD) theory. The extended linear dependence of $\rho_{ab}(T)$, in the crystal with the minimum critical temperature indicates that we have a high defect concentration in this sample. This in turn causes negative processes into forming fluctuation pairs

http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper_e.php?p=518

**КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СОСТОЯНИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ
СИСТЕМ С ПРОИЗВОЛЬНЫМИ МЕЖАТОМНЫМИ
ВЗАИМОДЕЙСТВИЯМИ**

Дементьев В.А.

Институт геохимии и аналитической химии
им.В.И.Вернадского РАН

Выполнен численный анализ поведения колебательных энергий и волновых функций молекул в случаях, когда поверхности их потенциальной энергии радикально отличаются от многомерных квадратичных форм. Обсуждаются физические и химические эффекты, связанные с такими отличиями

<http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper.php?p=416>

**VIBRATIONAL STATES OF MOLECULAR SYSTEMS
WITH ARBITRARY ATOMIC INTERACTIONS**

Dementiev V.A.

V.I.Vernadsky Institute of Geochemistry and Analytical
Chemistry of Russian Academy of Sciences

A numeric analysis of molecular vibrational energies and wave functions is carried out in the case of complicated potential of atomic interactions. Corresponding physical and chemical effects are discussed

http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper_e.php?p=416

**ОБ ОДНОМ АЛГОРИТМЕ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ
КОЛЕБАНИЯ МАГНИТОУПРУГОЙ ТОНКОЙ
ПЛАСТИНЫ**

Нуралиев Ф.М., Айтмуратов Б.Ш.

Институт кибернетики АНРУз

В данной работе приводится алгоритм решения задачи колебания магнитоупругой тонкой пластины сложной конфигурации при совместном применении вариационного метода Бубнова –Галеркина и структурного метода R-функций В.Л.Рвачева

<http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper.php?p=490>

**ON ONE ALGORITHM FOR SOLUTION OF A TASK OF
A MAGNETOELASTIC THIN PLATE FLUCTUATION**

Nuraliev F.M., Ajtmuratov B.Sh.

Institute of Cybernetics of AS Ruz

This work presents the algorithm for solution of a task of an irregular shape magnetoelastic thin plate fluctuation. Variational Bubnov-Galerkin method and structural method of V.L.Rvachev R-functions were applied simultaneously

http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper_e.php?p=490

**ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ МОЛЕКУЛ БИОПОЛИМЕРОВ
Позднеев С.А.**

Физический институт им.П.Н.Лебедева РАН

Представлена теория химической связи в молекулах биополимеров

<http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper.php?p=392>

**CHEMICAL BOUND IN LARGE MOLECULES
Pozdneev S.A.**

P.N.Lebedev Physical Institute of Russian Academy of
Sciences

New tape chemical bound in large molecules are presented

http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper_e.php?p=392

**О ВОЗМОЖНОСТИ ВНУТРИМОЛЕКУЛЯРНОГО
ПРОТЕКАНИЯ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ
ПЕРЕГРУППИРОВКИ γ -ХЛОРАЛЛИЛОВОГО ЭФИРА
П-КРЕЗОЛА**

**Нигматуллина Р.Г., Гатауллин А.Р.,
Ключарева Е.В., Левашова В.И., Кантор Е.А.**
Уфимский государственный нефтяной технический
университет

Проведены квантовохимические расчеты (B3PW91/6-31G*) перегруппировки γ -хлораллилового эфира п-крезола в условиях катализа ($\text{BF}_3 \cdot \text{O}(\text{C}_2\text{H}_5)_2$). Найдено, что BF_3 образует с эфиром устойчивый комплекс. Далее реакция может развиваться по двум направлениям: образование ионов, что определяет возможность реализации ступенчатого межмолекулярного процесса, и изомеризация комплекса эфира с катализатором в новый π -комплекс, что подтверждает возможность осуществления внутримолекулярного процесса

<http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper.php?p=456>

**ABOUT AN OPPORTUNITY OF INTRAMOLECULAR
PASSING CATALYTIC REARRANGEMENT OF γ -
CHLORINE ALLYL ETHER OF THE P-CRESOL**

**Nigmatulina R.G., Gataullin A.P., Kluchareva E.V.,
Levashova V.I., Kantor E.A.**
Ufa State Technical Oil University

Quantum-chemical calculations (B3PW91/6-31G*) are carried out for Claisen rearrangements of γ -chlorine allyl ether of the p-cresol with catalysis ($\text{BF}_3 \cdot \text{O}(\text{C}_2\text{H}_5)_2$). It is found that BF_3 forms a stable complex with the ether. Further reaction can pass in two directions: the formation of ions that determine the realization of stepped intermolecular process, and the isomerization of the complex of the ether with the catalyst in a new-complex defining confirms the opportunity of intramolecular process

http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper_e.php?p=456

**ПЕРЕХОДНЫЕ СОСТОЯНИЯ ПРИ ИНВЕРСИИ
ЦИКЛА 4,4-ДИМЕТИЛ-1,3-ДИОКСАНА**

Шорников Д.В., Горбунова Н.В., Кантор Е.А.
Уфимский государственный нефтяной технический
университет

Методом, основанным на теории функционала плотности, B3PW91/6-31G(d,p) найдены стационарные точки на поверхности потенциальной энергии молекулы 4,4-диметил-1,3-диоксана. Определены конформации переходных состояний

<http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper.php?p=477>

**TRANSITION STATES AT INVERSION OF A CYCLE OF
4,4-DIMETHYL-1,3-DIOXANE**

Shornikov D.V., Gorbunova N.V., Kantor E.A.
Ufa State Technical Oil University

The method based on the on the Density Functional Theory, B3PW91/6-31G (d, p) finds stationary points on a surface of potential energy of a molecule 4,4-Dimethyl-1,3-Dioxane. Are determined conformation transition states

http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper_e.php?p=477

**ЭВОЛЮЦИЯ ПРОДОЛЬНОЙ ПРОВОДИМОСТИ В
МОНОКРИСТАЛЛАХ $\text{YBa}_2\text{Cu}_{3-y}\text{Al}_y\text{O}_{7-\delta}$ ПРИ
ВНЕСЕНИИ МАЛЫХ ДОБАВОК АЛЮМИНИЯ**

**Вовк Р.В., Оболенский М.А., Завгородний А.А.,
Бондаренко А.В., Гулатис И.Л., Самойлов А.В.**
Харьковский национальный университет им
В.Н.Каразина

В работе исследована проводимость в базисной плоскости монокристаллов $\text{YBa}_2\text{Cu}_{3-y}\text{Al}_y\text{O}_{7-\delta}$ с заданной топологией плоских дефектов. Показано, что внесение примеси Al приводит к возрастанию числа эффективных центров рассеяния нормальных носителей. Избыточная проводимости исследованных образцов в широком интервале температур подчиняется экспоненциальной температурной зависимости, а вблизи T_c удовлетворительно описывается теоретической моделью Асламазова-Ларкина. При этом частичная замена Cu на Al приводит к значительному расширению температурного интервала существования псевдощелевой аномалии в ab-плоскости

<http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper.php?p=520>

**EVOLUTION OF SERIES CONDUCTIVITY IN YBa_2Cu_3 -
 $\text{yAl}_y\text{O}_{7-\delta}$ SINGLE CRYSTALS SLIGHTLY DOPED BY
ALUMINIUM**

**Vovk R.V., Obolenskii M.A., Zavgorodniya A.A.,
Bondarenko A.V., Goulatis I.L., Samoilov A.V.**
V.N.Karazin Kharkov National University

In this work the conductivity in the basis plane of $\text{YBa}_2\text{Cu}_{3-y}\text{Al}_y\text{O}_{7-\delta}$ single crystals with a given topology of plane defects, was investigated. The results indicate that the doping by Al results to the increase of the number of the effective scattering centers of the normal carriers. The excess conductivity for the analyzed single crystals, within a wide temperature interval, is described by exponential temperature dependence. Near T_c it is well described by the Aslamazov-Larkin theoretical model. Partially replacement Cu by Al results to the significant expansion of the temperature interval of pseudogap anomaly existence in ab-plane

http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper_e.php?p=520

СЕКЦИЯ 4**ВИЗУАЛИЗАЦИЯ В НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЯХ****SECTION 4****VISUALIZATION IN SCIENTIFIC RESEARCHES****ОСОБЕННОСТИ АВТОМАТИЗИРОВАННОЙ
ДЕТАЛИЗАЦИИ ИЗОБРАЖЕНИЙ В
НАВИГАЦИОННОЙ СИСТЕМЕ КОСМИЧЕСКОГО
АППАРАТА****Булгаков Ю.М., Кузьяный Д.Г.**Государственный научно-исследовательский
испытательный институт МО РФ

Обоснован состав комплекса алгоритмов выделения контуров изображений, используемых в автономной навигационной системе космического аппарата, реализация которых обеспечивает определение координат космического аппарата с заданной точностью в течение продолжительного времени без получения данных от наземного комплекса управления

<http://www.ivtn.ru/2006/phymath/enter/paper.php?p=452>**FEATURES OF COMPUTER ZOOM IN THE
NAVIGATION SYSTEM OF A SPACE VEHICLE****Bulgakov Y.M., Kuznyanij D.G.**The State Science and Research Experimental Institute of
Ministry of Defence of the Russian Federation

Composition of the complex of algorithms for image edge detection to be used in a self-contained navigation system of a space vehicle is substantiated. Implementation of these algorithms allows to define coordinates of a space vehicle with a given accuracy over a long time range without data acquisition from a ground control

http://www.ivtn.ru/2006/phymath/enter/paper_e.php?p=452**АНАЛИЗ НЕКОТОРЫХ ВОЗМОЖНОСТЕЙ
ПОСТРОЕНИЯ РАДИОГОЛОГРАФИЧЕСКИХ
ИЗОБРАЖЕНИЙ С ПОМОЩЬЮ СКРЕЩЕННЫХ
РЕШЕТОК****Артемова Т.К., Артемова О.К.**Ярославский государственный университет
им.П.Г.Демидова

Рассматриваются особенности формирования изображений методом радиоголографии с помощью различных антенных систем: двумерная антенная решетка, скрещенные решетки "Т"-образной конфигурации, взаимно симметричные скрещенные решетки. На их основе проведено моделирование процесса восстановления радиоголографического изображения с учетом шумов в системе и определены некоторые параметры полученных изображений, исследовано влияние соотношения сигнал-шум на разрешающую способность изображения

<http://www.ivtn.ru/2006/phymath/enter/paper.php?p=500>**MICROWAVE HOLOGRAPHIC CROSSED ARRAYS
IMAGE RECONSTRUCTION****Artemova T.K., Artemova O.K.**

P.D.Demidov Yaroslavl State University

Microwave holographic image reconstruction process with the help of crossed arrays method modifications is examined. Processes of radiohologram recording and image reconstruction in presence of noises are simulated and the influence of signal-to-noise ratio on the resolution of the obtained image is researched

http://www.ivtn.ru/2006/phymath/enter/paper_e.php?p=500

**ОБРАБОТКА ИЗОБРАЖЕНИЙ, ПОЛУЧЕННЫХ
МЕТОДОМ РАДИОГОЛОГРАФИИ****Яковлев М.А., Боков М.А., Малозёмов И.М.**
Ярославский государственный университет
им.П.Г.Демидова**MICROWAVE HOLOGRAPHIC IMAGE DIGITAL
PROCESSING****Yakovlev M.A., Bokov M.A., Malozemov I.M.**
P.D.Demidov Yaroslavl State University

Разработаны методы обработки изображений, полученных методом радиоголографии, позволяющие осуществлять сбор информации об изображённом объекте. Эти данные используются для выбора известных и разработанных алгоритмов и их параметров в последующей адаптивной обработке изображений и для распознавания объектов. Предлагается нормировочная фильтрация по маске «абсолютно белого тела». Решена задача определения оптимальных параметров для обработки. Демонстрируется эффективность предложенной обработки

<http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper.php?p=501>

New microwave holographic image processing methods, which allow gathering information about the reconstructed object are represented. The obtained data is used for the choice among the known and the proposed algorithms to perform adaptive image processing and image recognition. A normalizing filtration with the .absolutely white body. mask is proposed. Also the problem of the digital processing optimal parameters choice is solved and the effectiveness of the proposed processing is demonstrated

http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper_e.php?p=501

СЕКЦИЯ 5

ОБРАБОТКА ДАННЫХ, БАЗЫ ДАННЫХ, АНАЛИЗ ДАННЫХ

SECTION 5

DATA PROCESSING, DATABASES AND DATA ANALYSIS

О ВЫЧИСЛЕНИИ ПРОИЗВОДНЫХ ПРИ РАВНОМЕРНОМ И СРЕДНЕКВАДРАТИЧНОМ ПРИБЛИЖЕНИИ СИГНАЛОВ

Панкратов А.Н., Куликова Л.И.

Институт математических проблем биологии РАН

ON THE DERIVATIVES CALCULATION UNDER UNIFORM AND MEAN SQUARE APPROXIMATION OF SIGNALS

Pankratov A.N., Kulikova L.I.

Institute of Mathematical Problems of Biology Russian
Academy of Sciences

В докладе рассмотрен пример вычисления производной в модельной ситуации . от ступенчатой функции . в рамках спектрально-аналитического подхода. В случае, когда при среднеквадратичном приближении возникает эффект Гиббса, возможно решение проблемы с помощью суммирования ортогонального ряда по теореме Фейера, позволяющей получить равномерное приближение из среднеквадратичного

<http://www.ivtn.ru/2006/phymath/enter/paper.php?p=491>

Example of derivative calculation in the model situation . from step function . is considered in the scope of the spectral-analytical approach. In case of arising of Gibbs effect under mean square approximation, solution of the problem is possible with the aid of summation of orthogonal series by Fejer.s theorem, which allows one to derive uniform approximation from mean square one

http://www.ivtn.ru/2006/phymath/enter/paper_e.php?p=491

ОБЗОР АЛГЕБРАИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ВОССТАНОВЛЕНИЯ ДАННЫХ С ВОИИС

Рыбальченко Н.А., Денисов И.В., Седов В.А.

Морской государственный университет им. адм.
Г.И.Невельского

THE REVIEW OF ALGEBRAIC METHODS OF DATA RECONSTRUCTION FROM FIBER-OPTICAL MEASURING SYSTEM

Rybalchenko N.A., Denisov I.V., Sedov V.A.

Admiral G.I.Nevelskoy Marine State University

В данной работе представлен краткий обзор алгебраических методов восстановления информации с ВОИИС. Показано, что для восстановления информации с ВОИИС неконструктивно применять прямые алгебраические методы. Показано, что из итерационных алгебраических методов восстановления информации с ВОИИС наиболее оптимальным методом является мультипликативный вариант метода ART

<http://www.ivtn.ru/2006/phymath/enter/paper.php?p=407>

In given article the review of algebraic methods of data reconstruction from fiber-optical measuring system (FOMS) is submitted. It is shown, that to reconstruct the information with FOMS the direct algebraic methods is not perspective applying. For iterative algebraic methods of reconstruction the information with FOMS the multiplycate variant of algebraic reconstruction technique is optimal

http://www.ivtn.ru/2006/phymath/enter/paper_e.php?p=407

СЕКЦИЯ 6**ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫЕ СИСТЕМЫ И ТЕХНОЛОГИИ (ПРИНЯТИЕ РЕШЕНИЙ, ЭКСПЕРТНЫЕ СИСТЕМЫ И Т.Д.)****SECTION 6****INTELLIGENCE SYSTEMS AND TECHNOLOGIES (DECISION-MAKING, EXPERT SYSTEM ETC.)****СИСТЕМА УПРАВЛЕНИЯ БИОНИЧЕСКИМ
МАНИПУЛЯЦИОННЫМ РОБОТОМ****Волохов В.В.**Кубанский государственный технологический
университет**CONTROL SYSTEM OF BIONIC MANIPULATING
ROBOT****Volohov V.V.**

Kuban State University of Technology

Нейронная система автоматического управления является рекурсивным цифровым фильтром. Поступающая на вход нейронной системы дискретная информация подвергается обработке рекурсивным цифровым фильтром и преобразовывается на выходе

<http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper.php?p=388>

An automatic control neuron system represents a recursive digital filter. Discrete information incoming to the neuron system input is subjected to recursive digital filter processing and transforms at the output

http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper_e.php?p=388**МЕТОДИЧЕСКИЕ ПОДХОДЫ К ПОСТРОЕНИЮ
СИСТЕМЫ АВТОМАТИЗИРОВАННОГО
РАСПОЗНАВАНИЯ НАРУШЕНИЙ СОСТОЯНИЯ
СПЕЦИАЛИСТА ОПАСНОЙ ПРОФЕССИИ****Богомолов А.В., Кукушкин Ю.А., Сизова В.В.,
Кувакин И.В.**Государственный научно-исследовательский
испытательный институт МО РФ**METHODOLOGICAL APPROACHES TO
DEVELOPMENT OF THE AUTOMATED SYSTEM FOR
THE RECOGNITION OF CONDITION CHANGES IN
EMPLOYEES OF HAZARDOUS PROFESSIONS****Bogomolov A.V., Kukushkin Yu.A., Sizova V.V.,
Kuvakin I.V.**The State Science and Research Experimental Institute of
Ministry of Defence of the Russian Federation

Описан состав и функциональные возможности проектируемой и отмакетированной по отдельным компонентам автоматизированной системы распознавания опасных состояний специалиста опасной профессии

<http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper.php?p=449>

Composition and functions of the projected and modeled by separate components automated system for the recognition of condition changes in employees of hazardous professions are described

http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper_e.php?p=449

СЕКЦИЯ 8

ДОКЛАДЫ, НЕ ВОШЕДШИЕ В ОСНОВНЫЕ СЕКЦИИ

SECTION 8

THE REPORTS, WHICH ARE NOT INCLUDED IN THE BASIC SECTIONS

ОБ ОДНОМ КЛАССЕ НЕВОЛЬТЕРОВСКИХ КВАДРАТИЧНЫХ СТОХАСТИЧЕСКИХ ОПЕРАТОРОВ

Шамсиддинов Н.Б.

Ташкентский институт ирригации и мелиорации
Республики Узбекистан

В статье, используя конструкции квадратичных операторов, построен 1 класс невольтеровских квадратичных стохастических операторов на несвязанных графах. С помощью вольтеровских операторов изучены траектории таких квадратичных стохастических операторов

<http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper.php?p=391>

ABOUT ONE CLASS OF NOT VOLTAIRIAN SQUARE- LAW STOCHASTIC OPERATORS

Shamsiddinov N.B.

Tashkent Institute of Irrigation and Melioration of the
Republic of Uzbekistan

In clause, using designs of square-law operators, 1 class of not voltairian square-law stochastic operators on untied graph is constructed. With the help of voltairian operators trajectories of such square-law stochastic operators are investigated

http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper_e.php?p=391

КОМПЬЮТЕРНАЯ МЕТОДИКА ОПРЕДЕЛЕНИЯ ОБЪЁМА РЕЗЕРВНОГО ФОНДА ПРИБОРОВ И АППАРАТОВ С УЧЁТОМ ОСОБЕННОСТЕЙ ИХ МЕТРОЛОГИЧЕСКОГО ОБСЛУЖИВАНИЯ

Фещенко К.Б.

Харьковский университет воздушных сил

Предложена математическая модель динамики средних численностей приборов и аппаратов, учитывающая возможные методы метрологического обслуживания средств измерительной техники в условиях разомкнутых метрологических цепей

<http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper.php?p=451>

COMPUTERIZED TECHNOLOGY FOR MANAGING THE RESERVES OF THE DEVICES AND INSTRUMENTS WHICH TAKES IN CONSIDERATION THE SPECIAL FEATURES OF THEIR METROLOGICAL SERVICING

Feshenko K.B.

Air Force University, Kharkov Named After Ivan
Kozgedub

A mathematical model is presented for the dynamics of average amount of devices and instruments in stock, which takes in consideration different methods of metrological servicing of measuring devices in open metrological circuits

http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper_e.php?p=451

ИЗМЕНЕНИЯ ФОРМ СОБСТВЕННОСТИ И ЭКОНОМИКА

Рябченко А.Д.

Украинский национальный технический университет

Рассматриваются некоторые аспекты приватизации в условиях перехода от государственной к рыночной экономике. При этом подчеркивается важная роль ИТ-методов, которые не только позволяют проанализировать экономическую ситуацию для каждого конкретного случая с учетом сколь угодно большого числа различных факторов и параметров, но и во много раз уменьшают время, необходимое для этого

<http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper.php?p=522>

CHANGES OF PATTERNS OWNERSHIP AND ECONOMY

Ryabchenko A.D.

Ukrainian National Technical University

Some aspects of privatization in the conditions of transition from state to the market economy are examined. In this case IT-methods have very important role. IT-methods allow analyzing an economic situation for every concrete case with an account very large number of different factors and parameters and minimize time necessary for it

http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper_e.php?p=522

ПРИВАТИЗАЦИЯ В ПРОМЫШЛЕННОСТИ И СОСТАВЛЯЮЩИЕ ЭКОНОМИЧЕСКОГО РАЗВИТИЯ

Вовк О.С.

Харьковский национальный университет им В.Н.Каразина

В статье раскрыто сущность экономических отношений с позиций современного состояния экономики и приватизации. Определяются основные индикаторы и риски устойчивого экономического развития, анализируется современное социально – экономическое развитие Украины

<http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper.php?p=521>

PRIVATIZATION IN THE INDUSTRY AND VECTOR OF THE ECONOMIC DEVELOPMENT

Vovk O.S.

V.N.Karazin Kharkov National University

The article covers the key aspects of the economic relation regulation based upon the current state of economy and privatization. The article determines the basic indicators and risks of the sustainable economic development, contemporary phase of socio – economic development of Ukraine

http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper_e.php?p=521

ФИЗИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДВИЖЕНИЯ СПУТНИКА ЮПИТЕРА КАРМЕ

Островский Н.В.

Вятский государственный университет

В Солнечной системе существует ряд явлений, которые не могут быть описаны с использованием уравнения всемирного тяготения Ньютона, которое строго соответствует лишь гравитационному взаимодействию двух тел. С его использованием нельзя, например, объяснить движение Луны вокруг Земли, поскольку Луна находится в сфере тяготения Солнца. Сходная ситуация имеется и в случае внешних спутников Юпитера – Пасифе, Синопе, Карме и Анаке. В данной работе использовано предложенное автором оригинальное обобщённое уравнение гравитационного взаимодействия для построения физической и на его основе математической модели орбитального движения спутника Юпитера Карме

<http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper.php?p=475>

PHYSICAL MODEL OF MOVEMENT OF JUPITER SATELLITE KARME

Ostrovskiy N.V.

Vyatka State University

In Solar system exists some phenomena's, which can be not described with use of the Newton equation of world-wide gravity Newton, which strictly corresponds to gravitational interaction of two body only. With its use it is impossible to explain, for example, moving the Moon around Land since Moon inheres in sphere of Sun gravity. Cognate situation there is in the event of external satellites of Jupiter - Pasiphe, Sinope, Karme and Ananke. In given work is used offered by author original generalised equation of gravitational interactions for building physical and on its base - mathematical model of the orbital moving of Jupiter satellite - Karme

http://www.ivtn.ru/2006/physmath/enter/paper_e.php?p=475

АТОМИСТИЧЕСКОЕ КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МИГРАЦИИ Li^+ В Y_2O_3 И СТРУКТУРЕ СВЯЗАННЫХ ОКСИДОВ

Вовк Р.В., Chroneos A.I., Busker G., Гулатис И.Л., Панченко С.В., Николенко А.Н., Петренко А.Г., Самойлов А.В.

Харьковский национальный университет им В.Н.Каразина

Атомистические методы имитационного компьютерного моделирования, основанные на минимизации энергии, использовались для предсказания равновесных объемов и параметров решетки серии редкоземельных оксидов и их полиморф. Полученные результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными и теоретическими расчетами, приведенными в литературе. Для демонстрации применимости вычислительной методологии рассмотрена миграция ионов Li^+ в Y_2O_3 .

<http://www.ivtn.ru/2006/physmathh/enter/paper.php?p=523>

ATOMISTIC COMPUTER SIMULATION OF Li^+ MIGRATION IN Y_2O_3 AND THE STRUCTURE OF RELATED OXIDES

Vovk R.V., Chroneos A.I., Busker G., Goulatis. I.L., Panchenko S.V., Nikolenko A.N., Petrenko A.G., Samoilov A.V.

V.N.Karazin Kharkov National University

Atomistic computer simulation techniques based on energy minimization have been employed to predict the equilibrium lattice parameters and volumes of a series of rare earth sesquioxides and their polymorphs. The results have been found in agreement with experimental data and ab initio studies given in the literature. To demonstrate the applicability of the computational methodology the migration of lithium ions (Li^+) in yttria (Y_2O_3) has been considered

http://www.ivtn.ru/2006/physmathh/enter/paper_e.php?p=523

СОДЕРЖАНИЕ**CONTENTS****ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В РЕШЕНИИ
ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ НАУЧНЫХ ПРОБЛЕМ И ПРИКЛАДНЫХ ЗАДАЧ ХИМИИ,
БИОЛОГИИ, ФАРМАЦЕВТИКИ, МЕДИЦИНЫ****COMPUTER APPLICATIONS IN FUNDAMENTAL
AND APPLIED CHEMISTRY, BIOLOGY,
PHARMACEUTICS AND MEDICINE****СЕКЦИЯ 1**

Общие проблемы и перспективы использования информационных и компьютерных технологий в науке

SECTION 1

General problems and prospects of computer applications in science **8**

СЕКЦИЯ 2

Компьютерные вычисления, их организация (сети и параллельные вычисления)

SECTION 2

Computing and computing management (networks and parallel computation) **11**

СЕКЦИЯ 3

Моделирование, численные эксперименты

SECTION 3

Computer simulation **13**

СЕКЦИЯ 4

Визуализация в научных исследованиях

SECTION 4

Visualization in scientific researches **29**

СЕКЦИЯ 5

Обработка данных, базы данных, анализ данных

SECTION 5

Data processing, databases and data analysis **30**

СЕКЦИЯ 6

Интеллектуальные системы и технологии (принятие решений, экспертные системы и т.д.)

SECTION 6

Intelligence systems and technologies (decision-making, expert system etc.) **35**

СЕКЦИЯ 7

Оптимальные методы, планирование эксперимента

SECTION 7

Optimum procedures and design of experiments **38**

СЕКЦИЯ 8

Доклады, не вошедшие в основные секции

SECTION 8

The reports, which are not included in the basic sections **43**

**ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В РЕШЕНИИ
ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ И ПРИКЛАДНЫХ ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ
ИССЛЕДОВАНИЯХ**

**COMPUTER APPLICATIONS IN FUNDAMENTAL
AND APPLIED PHYSICS**

СЕКЦИЯ 2

Компьютерные вычисления, их организация (сети и параллельные вычисления)

SECTION 2

Computing and computing management
(networks and parallel computation)

45

СЕКЦИЯ 3

Моделирование, численные эксперименты

SECTION 3

Computer simulation

46

СЕКЦИЯ 4

Визуализация в научных исследованиях

SECTION 4

Visualization in scientific researches

54

СЕКЦИЯ 5

Обработка данных, базы данных, анализ данных

SECTION 5

Data processing, databases and data analysis

56

СЕКЦИЯ 6

Интеллектуальные системы и технологии (принятие решений, экспертные системы и т.д.)

SECTION 6

Intelligence systems and technologies (decision-making, expert system etc.)

57

СЕКЦИЯ 8

Доклады, не вошедшие в основные секции

SECTION 8

The reports, which are not included in the basic sections

58

ЗАЯВКА НА УЧАСТИЕ В РАБОТЕ ИВТН-2007

Для принятия участия в работе конференции заполните и направьте, пожалуйста, в оргкомитет ИВТН.ru форму заявки. Тезисы и/или расширенный доклад перешлите по адресу: org@ivtn.ru

Вы можете заполнить эту форму на сайте по адресу: <http://www.ivtn.ru/application.html>

Электронная Конференция	
Фамилия:	
Имя-Отчество:	
Организация:	
Подразделение: (факультет, отдел, лаборатория)	
Должность:	
Ученая степень:	
Телефон:	
Факс:	
E-mail:	
URL:	
Страна:	
Индекс:	
Почтовый адрес:	
Название доклада на русском языке:	
** Название доклада на английском языке:	
Соавторы:	
Тезисы доклада (имя файла):	
* Расширенный доклад (имя файла):	
Краткая аннотация: на русском языке (не более 500 символов)	
** Краткая аннотация: на английском языке (не более 500 символов)	

* Призами и дипломами будут отмечены работы участников, приславших расширенные доклады.

** Если у Вас возникнут трудности с переводом, оставьте в данном поле сообщение "трудности с переводом". Наши переводчики решат эту проблему.

Координаты организационного комитета: Тел./Факс: +7 495 995-8017, E-mail: org@ivtn.ru

IVTN-2007 APPLICATION FORM

For participating in conference you have to send the filled application form
to IVTN.ru Organizing Committee.

Your theses and/or enlarged report please send by E-mail: org@ivtn.ru.

You can also fill the application form on web-site: http://www.ivtn.ru/application_e.html

Online Conference	
Surname:	
Name:	
Company/Organizati on:	
Department:	
Job position:	
Scientific degree:	
Phone:	
Fax:	
E-mail:	
URL:	
Country:	
Zip/Postal Code:	
Postal address:	
** Title of the report: (in Russian)	
Title of the report: (in English)	
Co-authors:	
Theses of the report: (file name)	
* Enlarged report: (file name)	
** Short abstract in Russian (no more than 500 symbols)	
Short abstract in English: (no more than 500 symbols)	

* The best reports will be awarded with prizes and diplomas, but it concerns only Enlarged Reports.

** If you will have some difficulties with translation, put in this field the message "difficulties with translation".
Our translators will decide this problem.

Organizing committee coordinates: Tel./Fax: +7 495 995-8017, E-mail: org@ivtn.ru

**ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В РЕШЕНИИ
ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ И ПРИКЛАДНЫХ НАУЧНЫХ ЗАДАЧ
Сессия ИВТН-2006**

**COMPUTER APPLICATIONS IN SCIENTIFIC RESEARCHES
IVTN-2006 Session**

Сборник материалов
The Proceedings

Ответственные за выпуск

Компьютерная верстка: *Пшеничникова Н., Воронина Н.*

Перевод: *Акулов А.*

Дизайн обложки: *Котельников Д.*

Редактор: *Габусу П.*

Editorial board

Make-up: *Pshenichnikova N., Voronina N.*

Translators: *Akulov A.*

Design: *Kotelnikov D.*

Editor: *Gabusu P.*

