

Представим себе мир, в котором нет электромагнитного излучения, но есть какое-то другое излучение. Мы в этом мире будем слепыми, ибо наши глаза и наши приборы ориентированы на электромагнитное излучение. В этом мире все будет другое, в том числе и излучение звезд.

Вполне возможно, что причина того, что темная материя в земных экспериментах не обнаружена, заключается в том, что мы не готовы понять ее проявление в экспериментах. Это вполне возможно, ибо сегодня предполагается, что темная материя распределяется по всей Галактике и Метагалактике. Например, при изучении природы материи методами спектроскопии вполне вероятно, что она может проявляться на уровне каких-то эффектов, которые не правильно ин-

терпретировали. Мы не смогли обнаружить темную массу в экспериментах потому, что исходили из неверных посылок о природе темной материи. Это, во-первых. Во-вторых, представляется маловероятным, что природа сотворила два взаимно независимых вида материи, т.е. связь между ними есть, только мы ее пока не обнаружили.

Таким образом, вполне возможно, что для того чтобы приступить к изучению природы темной материи, не обязательно строить мощные телескопы и исследовать глубины Метагалактики. Хотя это расширяет горизонты наших познаний мира, в котором мы живем. Вполне возможно, что исследования можно проводить в обычных лабораторных условиях.

### Химические науки

#### ТЕОРЕТИКО-ГРАФОВЫЙ ПОДХОД В ИЗУЧЕНИИ ВЗАИМОСВЯЗИ МЕЖДУ СТРОЕНИЕМ И СВОЙСТВАМИ АЛКИЛСИЛАНОВ

<sup>1</sup>Виноградова М.Г., <sup>2</sup>Салтыкова М.Н.,

<sup>1</sup>Артемьев А.А.

<sup>1</sup>Тверской филиал МЭСИ,

<sup>2</sup>Тверской государственный университет

Тверь, Россия

В настоящее время проблема взаимосвязи “структура - свойство” весьма актуальна. Число полученных веществ непрерывно возрастает. Экспериментальное определение физико-химических свойств нередко сопряжено со значительными техническими трудностями и требует больших затрат материальных средств, квалифицированного труда, времени, да и не всегда возможно. Наличие надежных расчетных методов исследования позволяет предсказывать характеристики вещества (прежде, чем оно синтезирова-

но, а свойство измерено) и тем самым выбирать из многих (еще не изученных и даже не полученных) соединений те, которые (согласно прогнозу) удовлетворяют поставленным требованиям. Это закладывает научные основы создания новых веществ и материалов с заранее заданными свойствами.

За последние десятилетия в теоретической химии широкое распространение получили представления топологии и теории графов. Они полезны при поиске количественных соотношений “структура – свойство” и “структура-активность”, а также в решении теоретико-графовых и комбинаторно-алгебраических задач, возникающих в ходе сбора, хранения и обработки информации по структуре и свойствам веществ.

Изучение корреляций “структура–свойство” обычно ведется через топологические индексы (ТИ).

Известно много ТИ (см. [1-4]). Мы рассматривали такие индексы как

- Число Винера  $W = \sum_{i=1}^n d_{ii} + \left(\frac{1}{2}\right) \sum_{i,j=1}^n d_{ij}$

( $d_{ii}$ ,  $d_{ij}$ - элементы матрицы расстояний).

- Число  $W' = \sum_{i=1}^n (d_{ii})^2 + \left(\frac{1}{2}\right) \sum_{i,j=1}^n (d_{ij})^2$

- Индекс Харари  $H = \sum_{i=1}^n (d_{ii})^{-2} + \left(\frac{1}{2}\right) \sum_{i,j=1}^n (d_{ij})^{-2}$

- Индекс полной смежности Бартона  $A' = \sum_{i=1}^n (a_{ii})^2 + \left(\frac{1}{2}\right) \sum_{i,j=1}^n (a_{ij})^2$

( $a_{ii}$ ,  $a_{ij}$ - элементы матрицы смежности).

- число путей длины один  $p_1 = x_{cc0} = m = n - 1$ ;

- число путей длины два  $p_2 = x_{cc1} = \left(\frac{1}{2}\right) \sum_{i=1}^4 i(i-1)k_i = k_2 + 3k_3 + 6k_4$

• число троек смежных ребер  $R = x_{ccc1} = \left(\frac{1}{6}\right) \sum_{i=1}^4 i(i-1)(i-2)k_i = k_3 + 4k_4$

• число путей длины три  $p_3 = x_{cc2} = \left(\frac{1}{2}\right) \sum_{i,j=i \leq j}^4 i(i-1)(j-1)n_{ij} = n_{22} + 2n_{23} + 3n_{24} + 4n_{33} + 6n_{34} + 9n_{44}$

( $p_3$  известно как число полярности  $p$ );

и др.

Не все ТИ имеют ясный физический смысл и равноценны по своей корреляционной способности со свойствами. Обычно они используются в корреляционных зависимостях вида  $P=f(\text{ТИ})$ , например,

$$\begin{aligned} P &= a(\text{ТИ}) + b, \\ P &= a(\text{ТИ})^2 + b(\text{ТИ}) + c, \\ P &= b(\text{ТИ})^a, \\ P &= a \ln(\text{ТИ}) + b, \\ P &= a(\text{ТИ})_1 + b(\text{ТИ})_2 + \dots + n(\text{ТИ})_n + c \end{aligned}$$

и т.п. Здесь  $a, b, c$  – некоторые параметры (не следует путать их с параметрами аддитивных схем.), подлежащих определению.

Топологические индексы могут также применяться как числа параметров в построении

аддитивных схем. Лучшие результаты получают при использовании не отдельных ТИ, а их определенных совокупностей.

Например, для алкилсиланов имеем,

$$P_{C_nH_{2n+1}Si} = a_0 + p_1 b_{cc} + p'_1 b_{csi} + p_2 \Gamma_{cc} + p'_2 \Gamma'_{cc} + p''_2 \Gamma''_{csi} + R \Delta_{ccc} + R' \Delta_{ccsi},$$

В табл. 1 представлены, найденные методом наименьших квадратов (МНК) значения энтальпийных параметров и результаты расчета энтальпий образования ряда алкилсиланов по указанным выше схемам.

Из таблицы видно, что в зависимости от полноты учета влияния несвязанных атомов согласие между рассчитанными и эксперименталь-

ными значениями  $\Delta_f H^0$  (г, 298 К), как и следовало ожидать, улучшается. Существенное улучшение согласия расчёта с экспериментом начинается с учёта невалентных 1,2-взаимодействий.

Рассчитанные величины, в общем, согласуются с экспериментальными и позволяют предсказать (в пределах ошибок опыта) недостающие значения свойств членов исследуемого ряда.

**Таблица 1.** Параметры схем и результаты расчета энтальпий образования алкилсиланов (кДж/моль) в разных приближениях

Параметр	Значения параметров оценки $\Delta_f H^0$ (г, 298 К)				
	3	6	8	10	12
$a_0$	-4,615	13,025	14,145	16,885	18,058
$b_{cc}$	-3,029	-19,619	-27,443	-27,750	-29,863
$b_{csi}$	-39,600	-89,936	-96,659	-75,689	-76,789
$\varphi_{cc}$		-17,039	-8,903	-111,787	-79,552
$\varphi'_{cc}$		15,917	24,910	-17,330	-11,355
$\varphi''_{csi}$		9,662	16,448	-9,620	-11,827
$\Delta_{ccc}$			-9,006	4,674	10,155
$\Delta_{ccsi}$			-1,770	119,192	90,831
$\tau_{cc}$				10,242	14,782
$\tau_{csi}$				139,507	84,179
$\omega_{cc}$					6,650
$\omega'_{cc}$					-7,650
$ \bar{\varepsilon} $	26,2	19,4	19,5	6,0	3,7
$\varepsilon_{\max}$	53,6	-60,2	-59,4	18,3	-14,4

По значениям 12 параметров табл. 1 выполнен расчёт энтальпий образования алкилсиланов от  $C_1$  до  $C_6$  [5]. Нами также для алкилсиланов

были построены диаграммы «Свойство Р-ТИ», «Свойство Р – номер изомера» и ТИ – номер изо-

мера», позволяющие просто и наглядно оценить корреляционную способность [6].

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Виноградова М.Г., Папулов Ю.Г., Смоляков В.М. Количественные корреляции «структура свойство» алканов. Аддитивные схемы расчета. Тверь, 1999. 96 с.
2. Химические приложения топологии и теории графов/Под ред. Р.Кинга. М.: Мир, 1987. 560 с.
3. Применение теории графов в химии/Под ред. Н.С. Зефирова и С.И. Кучанова. Новосибирск: Наука, 1988. 306 с.
4. Станкевич М.И., Станкевич И.В., Зефиров Н.С. Топологические индексы в органической химии//Успехи химии. 1988. Т.57, №3, С.337-366.
5. Виноградова М.Г., Салтыкова М.Н. Топологический подход в построении расчетных схем алкилсиланов//Вестник ТвГУ. 2007, №2(30), С.70-75.
6. Виноградова М.Г., Салтыкова М.Н. Диаграммы в корреляциях «Структура-свойство» алкилсиланов//Вестник ТвГУ. 2007, №15(43), С.31-38.

#### **БИОХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ КАРОТИНОИДОВ КУМЖИ (*SALMO TRUTTA*)**

Овчинникова С.И., Игумнов Р.О.  
*ФГОУ ВПО "Мурманский государственный  
технический университет", Биологический  
факультет, кафедра биохимии  
Мурманск, Россия*

Каротиноиды, как одно из важнейших звеньев антиоксидантной системы, обнаружены в репродуктивных органах многих морских беспозвоночных. Известно, что в биологических системах они выполняют защитные функции от вредного воздействия экзогенных и эндогенных факторов. Обладая антиокислительной активностью, они дезактивируют высокорекреационные

свободные радикалы кислорода, пероксидов и ксенобиотиков. Каротиноиды также выполняют следующие функции: используются в светочувствительных реакциях, участвуют в размножении, являются предшественниками витамина А, биохимическими маркерами, характеризующие состояние гидробионтов под воздействием антропогенного воздействия. Нами был проведен биохимический анализ уровня каротиноидов в тканях такой распространённой рыбы Кольского севера, как кумжа (*Salmo trutta*) семейства Лососевые – *Salmohidae*. Научная новизна работы состоит в том, что каротиноидный состав мышечной ткани кумжи мало исследованы. Получены оригинальные данные по зависимости содержания каротиноидов от периода жизненного цикла, от температуры, времени температурной обработки. Анализ динамики содержания каротиноидов в мышечной ткани кумжи в зависимости от стадии жизненного цикла показывает, что количество каротиноидов зависит от этапа годового цикла. Для посленерестового периода наблюдается наименьшее содержание каротиноидов (0,06 мг/100 гр. ткани), в период нагула возрастает количество каротиноидов (0,12 мг/100 гр. ткани), что объясняется интенсивным питанием рыбы. Для преднерестового периода характерно максимальное содержание каротиноидов (0,15 мг/100 гр. ткани). Изучение динамики содержания каротиноидов в мышечной ткани кумжи в процессе хранения при низких температурах в течение 6 месяцев показывает, что наблюдается снижение количества каротиноидов. Расчет процента распада каротиноидов показывает, что к последнему сроку хранения количество каротиноидов уменьшилось на 70,42 % по сравнению с исходным содержанием.

Практическая значимость работы заключается в том, что полученные результаты могут лечь в основу рекомендаций для специалистов, занимающихся вопросами сохранения биоразнообразия пресноводных гидробионтов в озерах и реках Мурманской области, а также для технологов рыбной промышленности.

#### *Технические науки*

#### **ОБРАЗОВАНИЕ КАК ОСНОВА РАЗВИТИЯ МЕХАНИЗАЦИИ СЕЛЬСКОХОЗЯЙСТВЕННОГО ПРОИЗВОДСТВА**

Артемьев В.Г., Исаев Ю.М.  
*Ульяновская государственная  
сельскохозяйственная академия.  
Ульяновск, Россия*

Технические средства механизации и автоматизации - инженерно-техническая основа технологий производства конечной продукции сельского хозяйства. Из-за низкого уровня механизации и автоматизации процессов и несовер-

шенства применяемых в настоящее время технологий невозможно обеспечить производство высококачественной, экологически чистой и конкурентоспособной сельскохозяйственной продукции.

Современное человечество сталкивается с глобальными проблемами по своей силе и природе. По оценкам исследователей Римского клуба цивилизация уже перешла пределы своего существования по многим параметрам. Сформировался императив выживаемости человечества, который связан с обеспечением резкого скачка в управляемости социально-экономическим и экологическим развитием. Для выживаемости от