

метры выполнения проектов по ТП. В частности, используя классические формулы, можно рассчитать вероятность выполнения любого проекта за время t и тем самым математически оценить риски невыполнения проекта за указанные сроки.

Список литературы

1. Денисов А. Р. Синтез и анализ модели «как есть» бизнес-процесса «Технологическое присоединение к электрическим сетям» / А. Р. Денисов, М. Г. Левин, А. В. Рыбинский, Т. Н. Некрасова // Вестник КГУ им. Н.А. Некрасова. – 2012. – Т. 18, № 1. – С. 37–40.
2. Постановление Правительства РФ «Об утверждении Правил недискриминационного доступа к услугам по оперативно-диспетчерскому управлению в электроэнергетике и оказания этих услуг, Правил недискриминационного доступа к услугам администратора торговой системы оптового рынка и оказания этих услуг и Правил технологического присоединения энергопринимающих устройств (энергетических установок) юридических и физических лиц к электрическим сетям» от 27.12.2004 г. № 861.
3. Федеральный закон «Об электроэнергетике» от 26.03.2003 г. № 35.

References

1. Denisov A. R., Levin M. G., Rybinskiy A. V., Nekrasova T. N. Sintez i analiz modeli «kak est» biznes-protsessa «Tekhnologicheskoe prisoedinenie k elektricheskim setyam» [Synthesis and analysis of “as is” model of business-process “Technological connection to electrical networks”]. *Vestnik KGU im. N.A. Nekrasova* [Bulletin of Nekrasov Kostroma State University], 2012, vol. 18, no. 1, pp. 37–40.
2. Postanovlenie Pravitelstva RF «Ob utverzhenii Pravil nediskriminatsionnogo dostupa k uslugam po operativno-dispetcherskomu upravleniyu v elektroenergetike i okazaniya etikh uslug, Pravil nediskriminatsionnogo dostupa k uslugam administratora torgovoy sistemy optovogo rynka i okazaniya etikh uslug i Pravil tekhnologicheskogo prisoedineniya energoprimayushchikh ustroystv (energeticheskikh ustanovok) yuridicheskikh i fizicheskikh lits k elektricheskim setyam» [The Resolution of the Government of the Russian Federation “On the Approval of the Rules of Nondiscriminatory Access to Services for Operative Dispatching Control in Power Industry and Rendering of These Services, the Rules of Nondiscriminatory Access to the Services of Wholesale Market Trading System Administrator and Rendering of These Services and the Rules of Technological Connection of Legal Entities and Individuals’ Power-Accepting Devices (Power Installations) to Electric Networks”] of 27.12.2004, no. 861.
3. Federalnyy zakon «Ob elektroenergetike» [The Federal Law «On Power Industry»] of 26.03.2003, no. 35.

УДК 004.942; 544.18; 641.183:543.54

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ВОЗДЕЙСТВИЯ МОЛЕКУЛ ЗАРИНА, ЗОМАНА И ТАБУНА НА СТРУКТУРНЫЕ КОМПОНЕНТЫ КЛЕТОЧНОЙ МЕМБРАНЫ

Сиротин Андрей Николаевич, магистрант, Астраханский государственный университет, 414000, Российская Федерация, г. Астрахань, пл. Шаумяна, 1, e-mail: asirotin@mail.ru, lesy_g@mail.ru

Жарких Леся Ивановна, кандидат технических наук, доцент, Астраханский государственный университет, 414000, Российская Федерация, г. Астрахань, пл. Шаумяна, 1, e-mail: asirotin@mail.ru, lesy_g@mail.ru

Алыкков Нариман Мирзаевич, доктор химических наук, профессор, Астраханский государственный университет, 414000, Российская Федерация, г. Астрахань, пл. Шаумяна, 1, e-mail: asirotin@mail.ru, lesy_g@mail.ru

В данной работе исследовано воздействие зарина, зомана и табуна на компоненты клеточной мембраны. Для этого произведено разделение клеточной мембраны на отдельные элементы – белки, липиды, углеводы – с целью поиска наиболее устойчивых адсорбционных комплексов зарина, зомана и табуна с данными компонентами. Произведены квантово-химические расчеты с помощью программного комплекса GAMESS полуэмпирическим методом PM3. Построены адсорбционные комплексы взаимодействия исследуемых молекул с компонентами клеточной мембраны, среди которых выбраны наиболее устойчивые, рассчитаны основные зарядовые, энергетические и геометрические характеристики в адсорбционных комплексах (АК). Из всех возможных вариантов выбрано несколько основных, которые характеризовались наибольшей глубиной минимума энергии адсорбции, так как чем меньше энергии тратится на образование связи сорбат – сорбент, тем прочнее идет образование АК. Представлены схемы взаимодействия для рассматриваемых групп АК. Выделены активные центры воздействия зарина, зомана и табуна на клеточную мембрану (КМ). Установлено, что распределение воздействия данных БОВ на КМ складывается следующим образом: наиболее устойчивые комплексы с белковыми компонентами образует зоман, с углеводными – зарин, с жирами – табун.

Ключевые слова: математическое моделирование, молекулярное взаимодействие, квантово-химические расчеты, молекулярное моделирование, модели взаимодействия, схема взаимодействия, зарин, зоман, табун, компоненты мембраны, активные центры воздействия

THE INFLUENCE OF SARIN, SOMAN AND TABUN ON THE STRUCTURAL COMPONENTS OF THE CELLULAR MEMBRANE

Sirotin Andrey N., undergraduate student, Astrakhan State University, 1 Shaumyan Sq., Astrakhan, 414000, Russian Federation, e-mail: asirotin@mail.ru, lesy_g@mail.ru

Zharkikh Lesya I., Ph.D, Associate Professor, Astrakhan State University, 1 Shaumyan Sq., Astrakhan, 414000, Russian Federation, e-mail: asirotin@mail.ru, lesy_g@mail.ru

Alykov Nariman M., D.Sc. (Chemistry), Professor, Astrakhan State University, 1 Shaumyan Sq., Astrakhan, 414000, Russian Federation, e-mail: asirotin@mail.ru, lesy_g@mail.ru

The article investigates the problems related to the influence of the sarin, soman and tabun (SS&T) nerve agents on cellular membranes. As a pre-step, the paper has divided the cellular membranes (CM) into separate components – proteins, fats and carbohydrates – in order to research the steadiest adsorptive complexes (ACs) into the components by SS&T. Moreover, quantum-chemical calculations were conducted based on the GAMESS program complex (offering the semiempirical PM3 method). The document then states that SS&T adsorptive complexes were constructed – indicating their influence on the CM components – with the aim of selecting the steadiest complexes. The constructions calculated the basic charging, energy and geometrical characteristics in adsorptive complexes. Subsequently, they selected some basic variants, having the greatest minimum depth of adsorption energy from all the possible alternatives. The reason, the critique relates, is that less energy is expended in forming the sorbate-sorbent bond, enabling AC formation to be more durable. The commentary has presented several interaction schemes for AC groups, finding that active SS&T agents focus their influence on the CM components. In conclusion, the study found the selective impact of SS&T on CMs: sarin interacts most actively and forms the steadiest AC with carbohydrates, soman interacts with proteins, and tabun interacts with fats.

Keywords: mathematical modeling, molecular interaction, quantum-chemical calculations, molecular modeling, interaction models, interaction scheme, sarin, soman, tabun, membrane components, active centers of influence

Постановка задачи

Цель моделирования – исследовать процессы воздействия зарина, зомана и табуна (рис. 1) на компоненты клеточной мембраны с использованием квантово-химических программ для выявления активных центров этого воздействия.

Структуры основных компонентов мембраны были составлены, не нарушая целостность ранних работ [1, 2], в которых были проведены все этапы их моделирования.

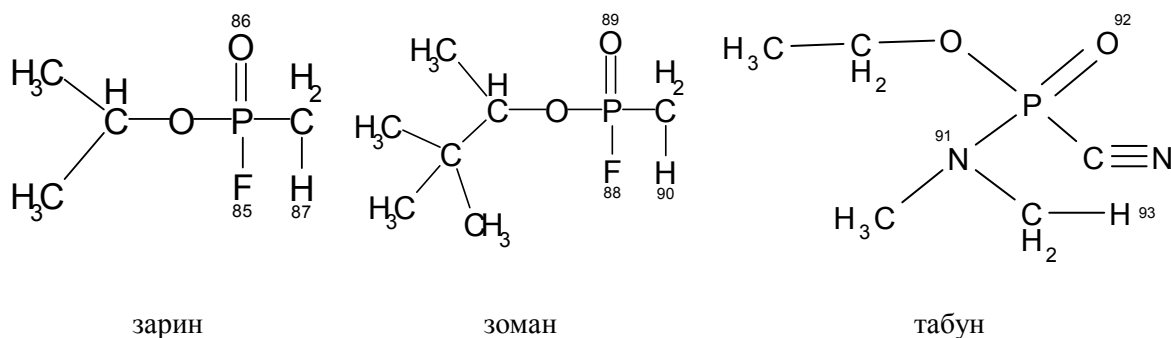


Рис. 1. Структурные формулы молекул БОВ

Вещество представляет собой набор молекул, молекула – набор атомов, атомы обладают волновыми свойствами, а следовательно, описываются волновыми функциями. Для изучения волновых свойств веществ используется уравнение Шредингера для стационарных состояний:

$$H\psi(\xi) = E\psi(\xi), \quad (1)$$

где $\psi(X)$ – волновая функция, удовлетворяющая вероятностному уравнению

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^2 dx dy dz = 1, \quad (2)$$

означающему, что частица обязательно будет находиться в элементе заданного объема.

В результате решения уравнения (1) находятся собственные (возможные) значения параметра E и соответствующие ему решения – собственные функции.

Для любого уравнения Шредингера, соответствующего конкретной системе, существует бесконечное множество значений параметра E . Эти значения могут быть как непрерывными (для свободно движущейся частицы), так и дискретными, если частицы локализованы в малой области пространства. Дискретные значения E называются *уровнями энергии*. Для каждого собственного значения E_n существует своя собственная функция ψ .

Для решения задачи моделирования структурных комплексов выбран полуэмпирический метод РМ. Все расчеты осуществлялись с использованием программных комплексов Gamess [3], для составления и редактирования структур применялся пакет Морас. Визуализация и обработка результатов проводилась с помощью программы ChemCraft.

Полная оптимизация геометрии молекулы представляет собой поиск минимума полной энергии по всем независимым геометрическим параметрам. Энергия формирования адсорбционных комплексов рассчитывалась на основе полных энергий конечных и начальных структур. Величины переноса заряда с молекулы сорбата на кластер белка рассчитывались как сумма зарядов атомов сорбата.

Условные обозначения, используемые при описании структур:

- R, A – расстояние между атомами;
- $\Delta E_{\text{адс}}$, кДж/моль – энергия адсорбции;
- $\Delta q, \bar{e}$ – разность зарядов атомов;
- \longrightarrow воздействие зарина;
- \longrightarrow воздействие зомана;

•  воздействие табуна.

Результаты

Было составлено и исследовано множество различных структур, среди которых выявились основные, участвующие во взаимодействии участки (табл.). Структуры, полученные в результате квантово-химических расчетов, изображены на рис. 2–5. Цифры на рисунках обозначают номера соответствующих адсорбционных комплексов, расположенных в порядке возрастания значения по модулю энергии адсорбции.

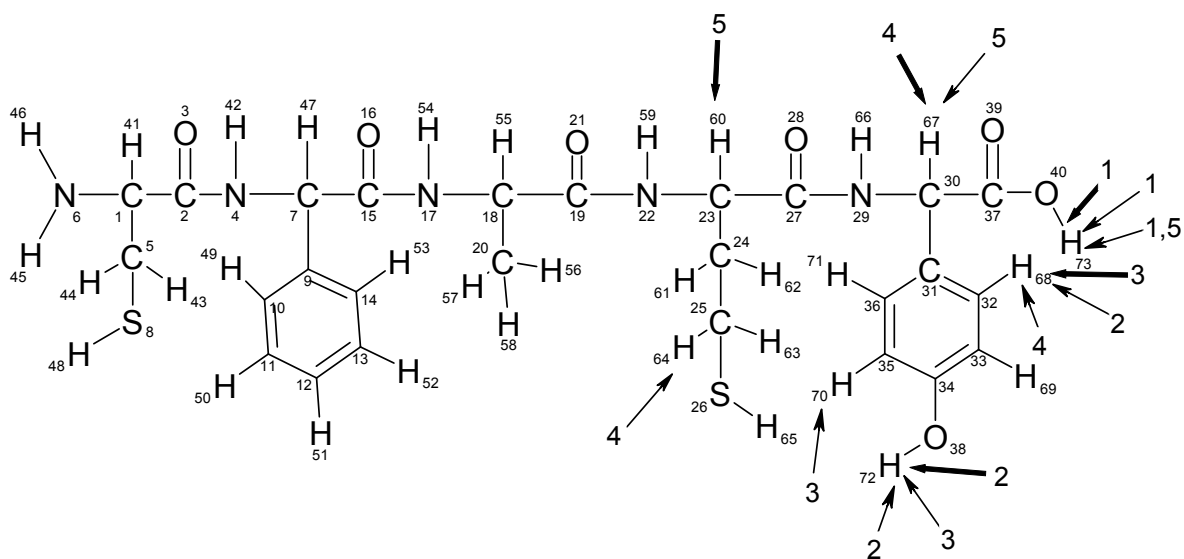


Рис. 2. Схема взаимодействия зарина, зомана и табуна с белком

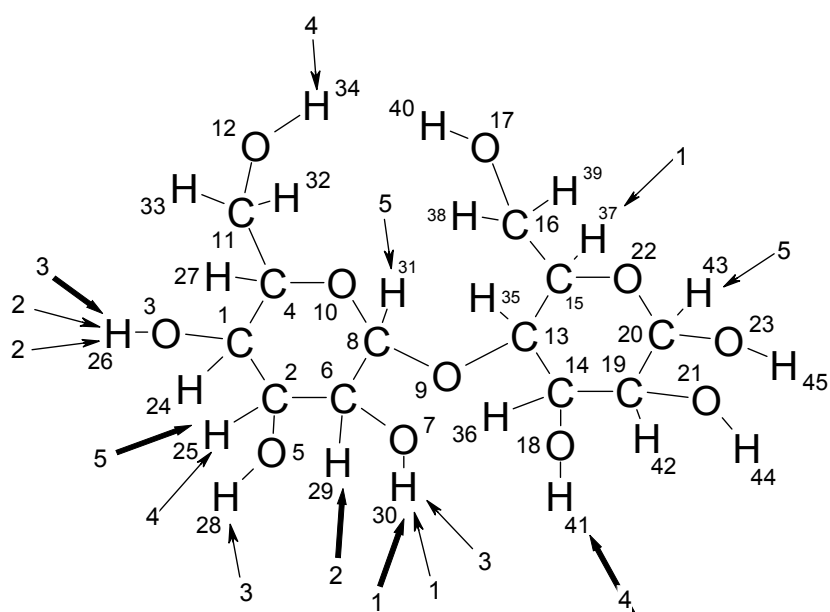


Рис. 3. Схема взаимодействия зарина, зомана и табуна с мальтозой

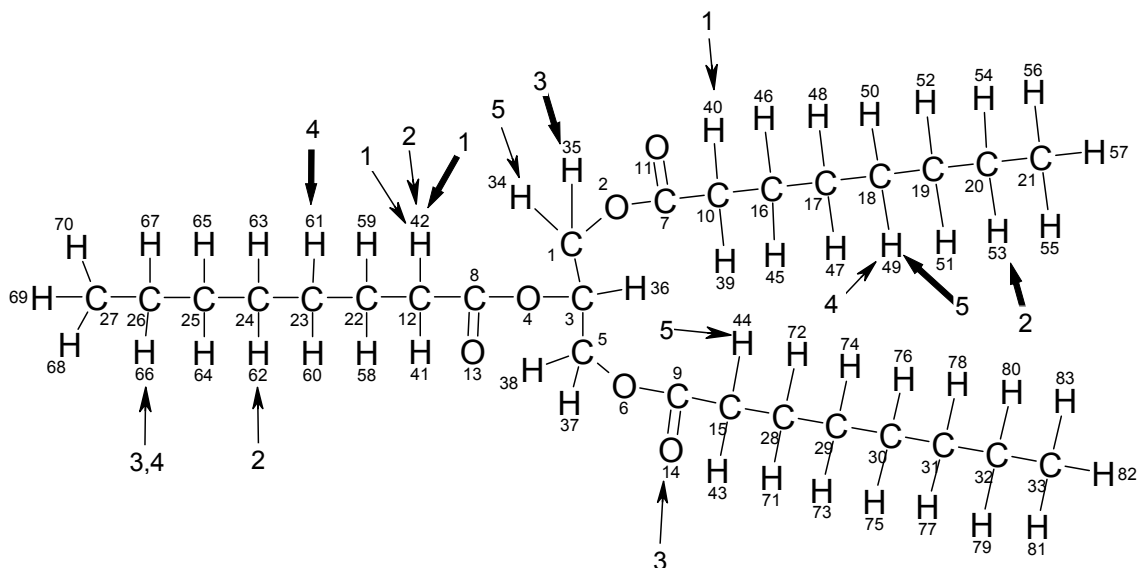


Рис. 4. Схема взаимодействия зарина, зомана и табуна с триглицеридом

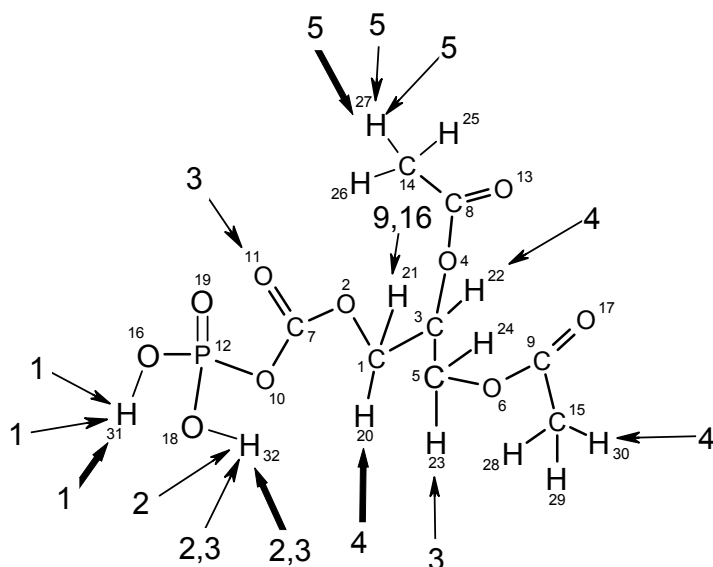


Рис. 5. Схема взаимодействия зарина, зомана и табуна с фосфолипидом

Таблица

**Основные зарядовые, энергетические и геометрические характеристики
в адсорбционных комплексах взаимодействия зарина, зомана и табуна с ККМ**

БОВ	Компоненты мембраны	АК	R, Å	$\Delta q, e$	$\Delta E_{\text{адс}}, \text{кДж/моль}$
Зарин	Белок	1–58	от 1,76 до 1,88	от –0,16 до 0,03	от –0,16 до –33,57
Зарин	Триглицерид	1–49	от 1,80 до 1,87	от –0,15 до 0,02	от –0,02 до –27,58
Зарин	Фосфолипид	1–26	от 1,77 до 1,87	от –0,16 до 0,03	от –0,66 до –43,25
Зарин	Мальтоза	1–40	от 1,77 до 1,91	от –0,14 до 0,47	от –0,13 до –68,96
Зоман	Белок	1–69	от 1,76 до 1,89	от –0,15 до 0,03	от –1,56 до –44,39
Зоман	Триглицерид	1–86	от 1,80 до 1,87	от –0,005 до 0,02	от –0,03 до –38,95
Зоман	Фосфолипид	1–30	от 1,76 до 1,90	от –0,16 до 0,04	от –4,53 до –40,72
Зоман	Мальтоза	1–38	от 1,77 до 1,88	от –0,14 до 0,04	от –1,19 до –49,41
Табун	Белок	1–51	от 1,78 до 1,93	от –0,12 до 0,04	от –0,14 до –26,54
Табун	Триглицерид	1–42	от 1,83 до 1,90	от –0,12 до 0,03	от –0,10 до –57,68
Табун	Фосфолипид	1–22	от 1,79 до 1,90	от –0,13 до 0,05	от –0,10 до –32,58
Табун	Мальтоза	1–37	от 1,79 до 1,92	от –0,10 до 0,20	от –5,02 до –42,77

Анализ результатов позволяет сделать следующие выводы:

- 1) зарин и зоман предпочтительно воздействуют на углеводные компоненты;
- 2) табун наиболее активно воздействует на жировые компоненты;
- 3) зоман образует наибольшее количество возможных вариантов АК со всеми компонентами клеточной мембраны (КМ) по сравнению с заринем и табуном. Это позволяет говорить о том, что зоман является самым токсичным из рассматриваемых боевых отравляющих веществ, что подтверждается литературными источниками;
- 4) при образовании адсорбционных комплексов выделяется большое количество энергии, что свидетельствует о высокой устойчивости образованных связей. Распределение воздействия БОВ на КМ складывается следующим образом: наиболее устойчивые комплексы с белковыми компонентами образует зоман, с углеводными – зарин, с жирами – табун. Эти АК характеризуются наименьшей энергией адсорбции;
- 5) большую роль в образовании АК играет геометрическое расположение атомов в молекуле, так как образуется водородная связь между теми реакционно-способными атомами, которые являются пространственно доступными;
- 6) зарин, зоман и табун преимущественно воздействуют на одни и те же участки структуры клеточной мембраны, а именно на атомы водорода, связанные с наиболее электроотрицательными группами атомов в компонентах клеточной мембраны. Под влиянием электроотрицательных атомов электронная плотность смещается от атома водорода, и оставшийся протон своим полем взаимодействует с неподелёнными электронными парами атома фтора, азота или кислорода БОВ, в результате чего образуется водородная связь между ними. Перенос заряда приобретает отличное от нуля значение, что свидетельствует об образовании АК. Длина образующейся связи наиболее характерна для данного типа взаимодействия;
- 7) возможно образование АК между данным БОВ и ККМ благодаря формированию водородной связи между атомами водорода БОВ и реакционноспособными атомами ККМ. В структуре компонентов клеточной мембраны наиболее активно вступают в образование водородной связи с атомами водорода БОВ атомы кислорода, в меньшей степени – атомы серы. Однако образование связи между атомами водорода БОВ и реакционноспособными атомами ККМ в меньшей степени характерно для построения адсорбционных комплексов между ними. Образованные по данному типу АК в основном имеют большие значения энергии адсорбции по сравнению в вариантами образования АК между атомами водорода ККМ и

атомами фтора, азота или кислорода БОВ, что говорит о меньшей устойчивости таких АК, так как чем больше глубина минимума энергии адсорбции, тем меньше энергии тратится на образование связи сорбат – сорбент, тем прочнее идет образование АК.

Следовательно, можно сделать вывод о том, что представленные варианты взаимодействия между молекулами зарина, зомана, табуна и компонентами клеточной мембраны будут наиболее характерными.

Таким образом, молекулы этих боевых отравляющих веществ препятствуют дальнейшему взаимодействию между компонентами клеточной мембраны с другими молекулами, что говорит о блокировке жизненных процессов в этих точках клеточной мембраны.

На основе результатов проведенных расчетов можно предсказать основные реакционные центры биологической мембраны при воздействии на неё зарин, зоманом и табуном. Эта информация является необходимым материалом для подбора противоядия к этим веществам и раскрывает основной механизм адсорбции исследуемых БОВ на клеточную мембрану.

Список литературы

1. Алыков Н. М. Математическое моделирование этапов поиска антидотов к сероводороду / Н. М. Алыков, Л. И. Жарких // Экологические системы и приборы. – 2008. – № 4. – С. 43–47.
2. Жарких Л. И. Квантово-химическое кластерное моделирование процесса адсорбции сероводорода на поверхности белковой мембраны / Л. И. Жарких // Вестник МГОУ. – 2006. – № 9. – С. 56–59. – (Серия химическая).
3. Schmidt M. W. The General Atomic and Molecular Electronic Structure System / M. W. Schmidt, K. K. Baldrige, J. A. Boatz et al. // J. Comput. Chem. – 1993. – Vol. 14. – P. 1347–1363.

References

1. Alykov N. M., Zharkikh L. I. Matematicheskoe modelirovanie etapov poiska antidotov k serovodorodu [Mathematical modeling of the phases of searching for antidotes to hydrogen sulphide]. *Ekologicheskie sistemy i pribory* [Ecological Systems and Equipment], 2008, no. 4, pp. 43–47.
2. Zharkikh L.I. Kvantovo-khimicheskoe klasternoe modelirovanie protsesssa adsorbtsii serovodoroda na poverkhnosti belkovoy membrany [Quantum-chemical cluster modeling of adsorption of hydrogen sulphide on the surface of protein membrane]. *Vestnik MGOU. Seriya khimicheskaya* [Bulletin of the Moscow State Regional University. Chemical Series], 2006, no. 9, pp. 56–59.
3. Schmidt M. W., Baldrige K. K., Boatz J. A. et al. The General Atomic and Molecular Electronic Structure System. *J. Comput. Chem.*, 1993, vol. 14, pp. 1347–1363.

УДК 681.511.4

АНАЛИЗ НЕЛИНЕЙНЫХ СИСТЕМ АВТОМАТИЧЕСКОГО УПРАВЛЕНИЯ МЕТОДОМ ГАРМОНИЧЕСКОГО БАЛАНСА В СРЕДЕ МАТЛАВ

Шапкарин Алексей Владимирович, кандидат технических наук, доцент, Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», 115409, Российская Федерация, г. Москва, Каширское шоссе, 31, e-mail: prosandeev@bk.ru, kivan.mail@gmail.com

Просандеев Антон Валерьевич, старший преподаватель, Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», 115409, Российская Федерация, г. Москва, Каширское шоссе, 31, e-mail: prosandeev@bk.ru, kivan.mail@gmail.com

Кулло Иван Геннадьевич, старший преподаватель, Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», 115409, Российская Федерация, г. Москва, Каширское шоссе, 31, e-mail: prosandeev@bk.ru, kivan.mail@gmail.com