

и нативных мембран с помощью общих биофизических подходов к проблеме и направленного синтеза эффективных и малотоксичных препаратов. Поиск защиты от АВЭ, от которых нет надежной защиты, затруднен в связи с тем, что биообъекты обладают неэффективными репарационными системами и эволюционно не приспособлены к воздействию этого фактора в земных условиях, в связи с вариабельностью результатов. Нами был получен достаточно высокий антимуtagenный радиозащитный эффект от  $\gamma$ -излучения и АВЭ в дозе 0,2-10 Гр при выращивании бактерий *E.coli* и бактериофага T4Br<sup>+</sup> в пептонном бульоне. Действие антиоксидантов оказалось также более эффективным при защите от  $\gamma$ -излучения, чем от АВЭ. При  $\gamma$ -облучении белых беспородных мышей в летальной дозе 7,5 Гр дибунол в концентрации  $10^{-4}$ – $10^{-5}$  М на 60-70% увеличивал выживаемость животных, а убихиноны Q-6, Q-9, Q-10 в ДМСО в концентрации  $10^{-2}$  М при введении за час до облучения – на 80-90%. Был показан высокий профилактический и терапевтический эффект также для других природных нетоксических антиоксидантов при действии сублетальных и летальных доз  $\gamma$ -облучения 5-8 Гр – эхинохрома, бетта-каротина, ликопина, флавонолов, антоцианов и дигидрокверцетина, взятых в концентрации  $10^{-6}$  –  $10^{-3}$  М. Для антиоксидантов первичные механизмы действия на молекулярно-клеточном уровне реализуются в их способности связывать свободные радикалы. Экзогенные и эндогенные природные вещества (гликозиды, сапонины в составе женьшеня, элеутерококка, флавоноиды и др.), являющиеся адаптогенами и актопротекторами, могут осуществлять субстратную, энергетическую и регуляторную функцию, они регулируют транспорт ионов Ca<sup>2+</sup>, K<sup>+</sup>, Na<sup>+</sup>, Cl<sup>-</sup>, изменяют структуру липидной части мембран, активируют ферменты и пролиферацию клеток. Первичное действие исследованных нами разобшителей проявлялось в увеличении протонной

проводимости, ингибировании окислительного фосфорилирования и синтеза АТФ в мембранах митохондрий и хлоропластов, что подтверждало хемиосмотическую гипотезу Нобелевского лауреата П.Митчела. Низкие нетоксические концентрации ( $10^{-9}$ - $10^{-5}$  М) высокоэффективных синтетических разобшителей (замещенные салициланилиды, одно- и двухосновные кислоты, бензимидазолы, нитрофураны) и различные концентрации ( $10^{-4}$ - $10^{-3}$  М) низкоэффективных разобшителей (эпигаллокатехины, полифенолы) *in vitro* стимулировали дыхание митохондрий, незначительно ингибировали синтез АТФ, вызывая в организме незначительный «окислительный стресс», активируя защитные силы и межсистемные пути запасаения энергии. При высоких концентрациях эффективных разобшителей ( $10^{-3}$ – $10^{-1}$  М), снижающих дыхательную активность митохондрий, синтез АТФ ингибируется значительно и необратимо, эти концентрации являются токсическими для метаболизма живого организма. Среди синтетических и природных веществ с низкой токсичностью обнаружены анестетики, радиозащитные, адаптогенные, противоопухолевые и бактерицидные препараты, обладающие пролонгированностью действия и высоким протекторным индексом. Воздействуя на молекулы воды и рецепторы, препараты, обладающие донорно-акцепторными свойствами, способны направленно изменять ряд биофизических параметров биомембран - протонную проводимость, электропроводность, микровязкость. Эффективность соединений зависела от концентрации, химической структуры, наличия и коэффициента подвижности диссоциированных форм в мембране, коэффициента их распределения липид/вода (Кожокару А.Ф.1976; 1992; 2002; 2008). Нами показано также радиозащитное и противоопухолевое действие низкоинтенсивных (ППМ 5 мкВт/см<sup>2</sup>), модулированных низкими частотами ЭМИ см и мм диапазона от различных генераторов, сконструированных по нашему заказу.

### Химические науки

#### РАСЧЕТНЫЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ТЕРМОХИМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК РАДИКАЛЬНЫХ РЕАКЦИЙ РАСПАДА И ЗАМЕЩЕНИЯ

Виноградова М.Г., Папулова Д.Р.  
Тверской государственный университет,  
Тверь, Россия

Разработка количественных методов расчета и предсказания свойств веществ, исходя из строения молекул, составляет одну из основных проблем современной теоретической химии. Химические основы учения о строении молекул составляет феноменологическая теория химиче-

ского строения. Квантовая механика не отменяет объективной значимости ее основных положений, но как фундаментальная теория более общего уровня структурной организации материи, раскрывает их содержание, дает объяснение и обоснование.

Целью настоящей работы является изучение количественных соотношений, связывающих тепловые эффекты ( $q$ ), энергии активаций ( $e^\ddagger$ ) и логарифмы констант скоростей ( $lg k$ ) реакций радикального распада и замещения соединений вида  $\text{ЭН}_{4-l}\text{X}_l$ ,  $\text{ЭН}_{4-l-m}\text{X}_l\text{Y}_m$ , ... ;  $\text{ЭН}_{3-l}\text{X}_l$ , ... ;  $\text{ЭН}_{2-l}\text{X}_l$ , ... ( $\text{Э} = \text{C}, \text{Si}, \text{Ge}, +$ ;  $\text{X}, \text{Y}, + = \text{D}, \text{T}, \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}, \text{CH}_3, \text{NO}_2, \dots$ ) со строением реагирующих частиц.

Ранее на основе развиваемой нами феноменологической концепции попарных и более сложных взаимодействий атомов (атом-атомное представление) [1, 2] нами была выработана общая методология расчета энтальпий образования (атомизации) молекул и свободных радикалов, средних энергий связей и энергий разрыва связей, тепловых эффектов, энергий активации, а также логарифмов констант скоростей реакций радикального распада и замещения.

По выведенным формулам выполнены численные расчеты величин  $q$ ,  $e^\ddagger$  и  $lg k$  новых серий реакций; уточнены ранее проведенные вычисления [2-4].

Важное место в феноменологических расчетах занимает выбор исходных опорных (реперных) данных, которые могут быть получены и при помощи квантово-механических методов (*ab initio*), особенно если эти данные невозможно (или весьма трудно) извлечь из эксперимента.

В этом плане анализируются возможности метода Хартри-Фока (HF) в различных базах с учетом электронной корреляции в рамках теории возмущений Меллера-Плессета (MP) 2-го и более высоких порядков: HF/3-21G, HF/6-31G\*, MP2/3-21G, MP2/6-31G\*, MP3/6-31G\*, MP4/6-31G\* и др. [5, 6].

Продолжена экспертная оценка экспериментальных и расчетных данных, отбор наиболее надежных значений, их сопоставление и упорядочение по рядам сходных реакций (в плане организации на выбранных объектах баз и банков данных).

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 07-03-96403-р Центр-а)*

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Папулов Ю.Г., Виноградова М.Г. Расчетные методы в атом-атомном представлении. Тверь: ТвГУ, 2002. - 232 с.
2. Виноградова М.Г., Папулова Д.Р. // Фундаментальные исследования. - 2009. - 5. С. 25-26.
3. Виноградова М.Г., Папулова Д.Р., Артемьев А.А. // Фундаментальные исследования. - 2008. - 4. С. 105-106.
4. Виноградова М.Г., Папулова Д.Р., Артемьев А.А. // Современные наукоемкие технологии. 2008. - 4. С. 137-138.
5. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. Ростов н/Д: Феникс, 1997. - 560 с.
6. Кобзев Г.И. Применение неэмпирических и полуэмпирических методов в квантово-химических расчетах. Оренбург: ОГУ, 2004. - 150 с.

### *Географические науки*

#### **АНТРОПОЦЕНТРИЧЕСКИЙ ПОДХОД ПРИ ГЕОЭКОЛОГИЧЕСКОЙ ОЦЕНКЕ КЛИМАТИЧЕСКОЙ КОМФОРТНОСТИ ТЕРРИТОРИИ НА ПРИМЕРЕ ЮЖНОГО ФЕДЕРАЛЬНОГО ОКРУГА**

Андреев С.С.

*Российский государственный гидрометеорологический университет, филиал в г. Ростове-на-Дону, Ростов-на-Дону, Россия*

Комфортность климатических условий является важным средообразующим фактором, формирующим эколого-климатический и природно-ресурсный потенциал территории, обеспечивающий жизнедеятельность населения, подлежащий обязательному учету. Исследования глобальных изменений географической оболочки Земли на основании подробного изучения антропогенного воздействия без анализа природных процессов и конкретных региональных условий, особенно при долгосрочном прогнозировании таких изменений, оказываются односторонними, следовательно, и их выводы не являются объективными.

В настоящее время большинство географических исследований посвящено анализу и синтезу антропогенного воздействия на природную среду

без учета динамики её естественных процессов. В связи с этим установлено противоречие в существующих концепциях эколого-географических исследований, то есть, противоречие между содержанием данных предметной области в целом и получаемой в результате объективностью информации.

Необходимость применения экологического подхода в географических исследованиях обусловлена значительной изменчивостью самой природной среды, независимо от воздействия человека. Природные и антропогенные геосистемы должны рассматриваться как природно-антропогенные, в которых механизмы саморегуляции сочетаются с элементами человеческого влияния. Изучение характера развития природной среды и эколого-географическая оценка конкретной территории, требуют знания законов развития географической сферы Земли, как планеты и ее геопространства, связанного с солнечной активностью, влиянием солнечных и магнитных бурь на Землю, а также основных законов географической зональности, связанных с солнечной радиацией, влагой, температурами, испарением, горными породами, тектоникой.

Проведенные автором ретроспективный анализ и обобщение научных исследований совре-