

Ранее на основе развивающейся нами феноменологической концепции попарных и более сложных взаимодействий атомов (атом-атомное представление) [1, 2] нами была выработана общая методология расчета энталпий 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^\dagger 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 базисах 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., Папурова Д.Р. // Фундаментальные исследования. - 2009. - 5. С. 25-26.
3. Виноградова М.Г., Папурова Д.Р., Артемьев А.А. //Фундаментальные исследования. - 2008. - 4. С. 105-106.
4. Виноградова М.Г., Папурова Д.Р., Артемьев А.А. // Современные научноемкие 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-

менного состояния проблемы, на основании которого критически отобраны термины и понятия, связанные с эколого-географической оценкой природной составляющей окружающей среды. Разработанная оригинальная концепция, предусматривает выделение детерминирующей роли природной составляющей исследуемого региона, обеспечивая территориальную полноту и целостность исследования и, как следствие, повышение объективности территориального анализа распределения параметров и характеристик природных систем. Причем под комфортностью климата территории понимается интегральная характеристика степени благоприятности ее климатических и биоклиматических условий, состоящая из ряда наиболее информативных биоклиматических показателей и выраженная посредством введенного интегрального показателя биоклиматической комфортности (ИПбк). Комфортность климатических условий («комфорт») это оптимальное психофизиологическое состояние человека, обеспечивающее его нормальную жизнедеятельность в местах постоянного или краткосрочного проживания. Понятие субкомфорта климатических условий («субкомфорт») соответствует слабораздражющим условиям природной среды, в которых механизмы адаптации человеческого организма обеспечивают близкое к оптимальному психофизиологическое состояние человека, создавая ему условия для нормальной жизнедеятельности. Дискомфортность («дискомфорт») климатических условий наблюдается при сильно раздражающих условиях окружающей природной среды, когда физиологические механизмы адаптации человеческого организма не обеспечивают его оптимального психофизиологического состояния и требуются дополнительные меры защиты, обеспечивающие нормальную жизнедеятельность.

Концепция эколого-географического исследования закономерностей пространственно-временного распределения климатической комфортности основывается на принципах геоцентризма, антропоцентризма и хорологической направленности. Ее оригинальность заключается в том, что для объективной эколого-географической оценки необходим подробный анализ природной составляющей среды обитания человека и влияния биоклиматической составляющей климата конкретной территории на его организм. Применение данной концепции позволяет получить не только максимально объективные результаты, характеризующие благоприятность исследуемого региона для жизнедеятельности человека, но и даст возможность более качественного нормирования антропогенной нагрузки. Концепция раскрывает идею и описывает все составляю-

щие стратегии исследования, отражая следующие аспекты:

- Цель исследования;
- Анализ современного состояния;
- Существующие проблемы;
- Основные и производные понятия;
- Принципы решения;
- Решаемые задачи;
- Структура критериев и показателей;
- Структура методики исследования.

В подавляющем большинстве случаев окружающая среда подвергается одновременному воздействию сразу многочисленных факторов и их воздействие невозможно оценивать простым суммированием. При этом следует помнить и о законе лимитирующих факторов (закон минимума Либиха и правило Шелфорда), утверждающих, что даже если единственный фактор выходит за пределы своего оптимального значения то это приводит к стрессу организма, а значительное его превышение может привести к гибели. Антропогенное влияние происходит на фоне естественных природных условий. Более того, как хорошо известно, различные загрязняющие среду компоненты могут, в разной степени, обезвреживаться ей в процессе самоочищения а, взаимодействуя между собой и с естественными факторами способны создавать новые, вторичные, зачастую еще более вредные воздействия, усиливая их негативное действие, в том числе и на живые объекты (синергетный эффект).

Применение предлагаемого антропоцентрического подхода (концепции и методики) позволит получить максимально объективные результаты, характеризующие благоприятность исследуемого региона для жизнедеятельности человека, а так же даст возможность более качественного нормирования антропогенной нагрузки.

СРАВНИТЕЛЬНАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ЛИЦ С ДЛИННЫМ ИНТЕРВАЛОМ QT У КОРЕННЫХ ЖИТЕЛЕЙ ЮГА РЕСПУБЛИКИ АЛТАЙ И ЮГА КУЗБАССА

Шумейко Н.И.
НИИ КПГ ПЗ СО РАМН,
Новокузнецк, Россия

Большие перспективы социально-экономического развития Российской Федерации и Республики Алтай на начало XXI века связываются с интенсивным освоением территории Сибири. Наиболее четко специфику болезней отражают коренные популяции. Изучение их здоровья и патологии позволит прогнозировать болезни пришлого населения. В качестве таких популяций избраны основные этно-территориальные группы корен-