

ВЕСТНИК ИВАНОВСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА

Серия «Естественные, общественные науки»

Вып. 1, 2015

Биология. Химия. Физика. Математика

Научный журнал

Издается с 2000 года

Журнал зарегистрирован в Федеральной службе по надзору в сфере связи,
информационных технологий и массовых коммуникаций (Роскомнадзор)
Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-60994 от 5 марта 2015 г.

Учредитель ФГБОУ ВПО «Ивановский государственный университет»

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ:

- В. Н. Егоров**, д-р экон. наук
(*председатель*)
- С. А. Сырбу**, д-р хим. наук
(*зам. председателя*)
- В. И. Назаров**, д-р психол. наук
(*зам. председателя*)
- К. Я. Авербух**, д-р филол. наук (Москва)
- Ю. М. Воронов**, д-р полит. наук
- Н. В. Усольцева**, д-р хим. наук
- Ю. М. Резник**, д-р филос. наук (Москва)
- О. А. Хасбулатова**, д-р ист. наук
- Л. В. Михеева**
(*ответственный секретарь*)

РЕДКОЛЛЕГИЯ СЕРИИ «ЕСТЕСТВЕННЫЕ, ОБЩЕСТВЕННЫЕ НАУКИ»:

- Б. Я. Солон**, д-р физ.-мат. наук
(*главный редактор серии*)
- В. И. Назаров**, д-р психол. наук
- Т. А. Воронова**, канд. пед. наук
- М. В. Клюев**, д-р хим. наук
- В. А. Исаев**, д-р биол. наук
- Д. И. Молдаванский**, д-р физ.-мат. наук
- Е. В. Соколов**, канд. физ.-мат. наук
- В. А. Годлевский**, д-р техн. наук
- Л. И. Минеев**, канд. техн. наук
- О. В. Кузьмина**, канд. юрид. наук
- Т. М. Явчуновская**, канд. юрид. наук
- Д. В. Кареев**, канд. ист. наук

Адрес редакции (издательства):

153025 Иваново, ул. Ермака, 39, к. 362
тел./факс: (4932) 32-66-00
e-mail: dipol53@mail.ru

Подписной индекс в каталоге
«Пресса России» 41512

Электронная копия журнала размещена
на сайтах www.elibrary.ru,
www.ivanovo.ac.ru

IVANOVO STATE UNIVERSITY BULLETIN

Series «Natural, Social Sciences»

Issue 1, 2015

Biology. Chemistry. Physics. Mathematics

Scientific journal

Issued since 2000

The journal is registered in the Federal Agency for the Oversight in the Sphere of Communication, Information Technology and Mass Communications (Roskomnadzor)
Registration certificate III № ФС77-60993 of March 5, 2015

Founded by Ivanovo State University

EDITORIAL COUNCIL:

V. N. Egorov, Doctor of Economics
(Chairman)

S. A. Syrbu, Doctor of Chemistry
(Vice-Chairman)

V. I. Nazarov, Doctor of Psychology
(Vice-Chairman)

K. Ya. Averbuch, Doctor of Philology
(Moscow)

Yu. M. Voronov, Doctor of Politics

N. V. Usoltseva, Doctor of Chemistry

Yu. M. Reznik, Doctor of Philosophy
(Moscow)

O. A. Khasbulatova, Doctor of History

L. V. Mikheeva (Secretary-in-Chief)

EDITORIAL BOARD OF THE SERIES

«NATURAL, SOCIAL SCIENCES»:

B. Ya. Solon, Doctor of Physics
and Mathematics
(Chief Editor of the Series)

V. I. Nazarov, Doctor of Psychology

T. A. Voronova, Candidate of Science

M. V. Klyuev, Doctor of Chemistry

V. A. Isaev, Doctor of Biology

D. I. Moldavansky, Doctor of Physics
and Mathematics

E. V. Sokolov, Candidate of Science,
Physics and Mathematics

V. A. Godlevsky, Doctor of Technical Science

L. I. Mineev, Candidate of Technical Science

O. V. Kuzmina, Candidate of Science, Law

T. M. Yavchunovskaya, Candidate
of Science, Law

D. V. Kareev, Candidate of Science, History

Address of the editorial office:

153025, Ivanovo, Ermak str., 39, office 362
tel./fax: (4932) 32-66-00
e-mail: dipol53@mail.ru

Index of subscription
in the catalogue «Russian Press» 41512
Electronic copy of the journal can be found
on the web-sites www.elibrary.ru,
www.ivanovo.ac.ru

СОДЕРЖАНИЕ

Биология

Борисова Е. А. Флора парка «Харинка» города Иванова	5
Зарипов В. Н., Баринаева М. О. Изменения функционального состояния головного мозга студенток под влиянием умственных нагрузок различной интенсивности	9
Исаев В. А. Мокрецы рода <i>Culicoides</i> — потенциальные векторы блютанга и блютангоподобных заболеваний в Ивановской области	14
Кормилицына Н. К., Гавришева Н. В. Показатели variability сердечного ритма и гемодинамики мозга, значимые для профессионального отбора специалистов экстремального профиля	19
Минеева Л. Ю., Скворцова О. Е. Новые находки ржавчинных грибов на деревьях и кустарниках ботанического сада и дендрария ИвГУ	22

Химия

Волкова Т. Г., Таланова И. О. ИК-спектроскопическое исследование строения глюкозы в продуктах конденсации с пентиловым эфиром п-аминобензойной кислоты	27
Крылов Е. Н. Диссоциация ароматических сульфокислот в газовой и водной фазах: квантово-химический расчет r_{Ka}	32
Крылов Е. Н. Нуклеофильное замещение в фенэтилбромидах как функция локальной электрофильности	40

Математика

Ваганов С. Е. Алгоритм сжатия изображений без потерь с предсказанием	51
Ерёмина Е. В. Виды образовательных технологий в реализации курса «Линейная алгебра»	55
Кусковский Л. Н. Об одном методе исследования обобщенной системы Коши — Римана	61
Савельичева Н. С., Соколов Е. В. Одно необходимое условие нильпотентной аппроксимируемости HNN-расширения нильпотентной групп	64
Солон Б. Я. Функциональные операторы и сводимости множеств	69
Хашин С. И. Натуральные числа с большим параметром Фробениуса	75

<i>Сведения об авторах</i>	79
----------------------------------	----

<i>Информация для авторов</i> <i>«Вестника Ивановского государственного университета»</i>	81
--	----

CONTENTS

Biology

Borisova E. A. Flora of Ivanovo city park «Kharinka»	5
Zaripov V. N., Barinova M. O. Changes of functional state of students encephalon under various intensity mental load conditions	9
Isaev V. A. Biting midges of genus <i>Culicoides</i> as potential vectors of the diseases (bluetongue virus and similar to bluetongue Schmallenberg virus) in Ivanovo region	14
Kormilitsyna N. K., Gavrisheva N. V. Indices of heart rate variability and brain hemodynamic important for professional selection of extreme profile specialists ...	19
Mineeva L. Y., Skvortsova O. E. New finds of rust fungi on the trees and shrubs in the Botanical garden and arboretum of Ivanovo state University	22

Chemistry

Volkova T. G., Talanova I. O. IR-spectroscopic study of the structure of glucose in the condensation products with pentyl ester of p-aminobenzoic acid	27
Krylov E. N. Dissociation of aromatic sulphonic acids in gas and water phase: quantum-chemical calculation of pKa t	32
Krylov E. N. Nucleophilic substitution in fenethyl bromides as a function of local electrophilicity	40

Mathematics

Vaganov S. E. The lossless image compression algorithm with prediction	51
Eremina E. V. Types of educational technology used in the implementation of the «Linear Algebra» course	55
Kuskovsky L. N. On a method of studying the generalized Cauchy-Riemann system ...	61
Savelicheva N. S., Sokolov E. V. One necessary condition for the residual nilpotent approximation of a nilpotent group hnn-extension	64
Solon B. Y. Functional operators and reducible sets	69
Khashin S. I. Natural nubers with large Frobenius parameter	75
<i>Information about the authors</i>	79
<i>Information for the authors of «Ivanovo State University Bulletin»</i>	81

УДК 581.9 (470.315)

Е. А. Борисова

ФЛОРА ПАРКА «ХАРИНКА» ГОРОДА ИВАНОВА

Приводятся данные о составе и структуре флоры Ивановского городского парка «Харинка». К 2015 г. отмечено 206 видов сосудистых растений, относящихся к 4 отделам, 5 классам, 53 семействам, 143 родам. Кратко охарактеризованы особенности флоры, редкие, нуждающиеся в охране виды. Приводятся примеры заносных и инвазионных растений.

Ключевые слова: состав и структура флоры, городской парк, редкие виды растений, заносные и инвазионные растения.

Data about composition and structure of Ivanovo city park «Kharinka» flora are presented. The modern park flora comprises 206 vascular plant species of 5 classes, 53 families and 143 genera. Main features of park flora are briefly characterized. Information about some rare native and alien plant species is discussed. Examples of invasion plants are given.

Key words: flora, city (urban) park, rare native, alien and invasion plant species.

Парк культуры и отдыха «Харинка» расположен на юго-восточной окраине г. Иванова. С северо-востока и востока парк ограничен железной дорогой, с юго-восточной — рекой Харинка, с юго-запада — территорией АО «Чесальные машины», с запада — жилыми зданиями района Сластиха. В северной части, за железной дорогой, парк почти смыкается с лесными массивами, подходящими к городской территории.

Парк был образован в 1966 г. после строительства плотины на р. Харинке. Плотина была сооружена в 1960 г., в результате образовалось широкое водохранилище, сделавшее местные ландшафты более живописными. На основе естественных лесов правого берега р. Харинки был организован парк. Вдоль дорожек парка посадили декоративные виды деревьев и кустарников.

Это крупный парк г. Иванова, его площадь составляет 131 га. На территории парка действуют различные аттракционы, имеются кафе, закусочные, на правом берегу реки расположен благоустроенный пляж, лодочная станция.

Изучение флоры и растительности парка проводилось в течение 2002—2009 гг., в 2010—2012 гг. в исследованиях активное участие принимала студентка биологического отделения ИвГУ К. А. Кулик. Были обследованы различные типы лесов, опушки, участки луговых сообществ, водная и прибрежно-водная растительность. При изучении лесных ценозов закладывались площадки размером 20 × 20 м, описывался состав древостоя, подлеска, травяно-кустарничкового яруса. Определялись сомкнутость крон, проективное покрытие травяно-кустарничкового яруса. Особое внимание обращалось на состояние древесных пород, их возобновление, а также участие редких видов растений, наличие инвазионных растений. Во время обследований собирался справочный гербарий, производилось фотографирование фитоценозов, отдельных растений. Гербарные материалы хранятся в гербарии

© Борисова Е. А., 2015

Ивановского госуниверситета (IVGU). Помощь в определении некоторых сложных в систематическом отношении видов оказали старший научный сотрудник БИН РАН И. О. Бузунова и ведущий научный сотрудник МГУ К. В. Киселёва, за что автор выражает им искреннюю благодарность.

В результате исследований во флоре парка к 2015 г. отмечено 206 видов сосудистых растений, относящихся к 4 отделам, 5 классам, 53 семействам, 144 родам. Основные параметры флоры представлены в табл. 1.

По числу видов первые 5 мест занимают следующие семейства: *Asteraceae* — 28 видов (13,6 %); *Rosaceae* — 25 видов (12,1 %); *Poaceae* — 21 вид (9,8 %); *Fabaceae* — 13 видов (6,3 %). Вместе они составляют 87 видов (41,8 % от общего числа). Многие семейства малочисленны, 19 семейств (*Araceae*, *Celastraceae*, *Solanaceae*, *Typhaceae*, *Urticaceae*, *Valerionaceae* и др.) представлены всего 1 видом, 12 семейств (*Aceraceae*, *Boraginaceae*, *Ericaceae*, *Hypericaceae*, *Lemnaceae* и др.) — 2 видами. К крупным родам флоры парка относятся следующие: *Salix*, *Carex*, *Trifolium* и *Poa*.

Таблица 1

Основные параметры систематической структуры флоры парка «Харинка»

Название отдела	Число видов	% от общего числа видов	Число родов	% от общего числа родов	Число семейств	% от общего числа семейств
<i>Polypodiophyta</i>	4	1,9	3	2,1	2	3,8
<i>Equisetophyta</i>	2	0,9	1	1,4	1	1,9
<i>Pinophyta</i>	3	1,5	3	2,1	1	1,9
<i>Magnoliophyta</i> В том числе:	197	95,7	136	94,4	49	92,4
<i>Liliopsida</i>	52	25,2	31	21,7	13	24,5
<i>Magnoliopsida</i>	145	70,5	105	72,7	40	67,9

Биоморфологическая структура флоры парка представлена в таблице 2. Как следует из таблицы 2, в структуре флоры преобладают многолетние травянистые растения, представленные 121 видом, что составляет более половины всего видового состава (52,6 %). Малолетние травянистые растения немногочисленны, их насчитывается 12 видов. Древесные растения представлены богато, в целом в составе дендрофлоры присутствуют 42 вида (20,4 %), среди них более многочисленны деревья (24 вида), кустарники представлены 16 видами.

Таблица 2

Биоморфологическая структура флоры парка «Харинка»

Название жизненной формы	Число видов	% от общего числа видов
Однолетние	11	5,4
Двулетние	6	2,9
Одно- и двулетние растения	5	2,3
Многолетние травянистые растения	137	66,5
Деревья	27	12,7
Кустарники	18	8,7

Кустарнички	2	0,9
-------------	---	-----

Географическая структура флоры парка характеризуется явным преобладанием аборигенных видов (167 видов, 81,1 %). Большинство из них относятся к евразийским. Среди видов местной флоры наибольший интерес представляют редкие растения. Например, некоторые представители семейства орхидные (*Orchidaceae*) — *Dactylorhiza fuchsii*, *Platanthera bifolia* и *Epipactis heleborine*. Эти виды встречаются одиночными экземплярами в лесах разного состава, на лесных опушках, вдоль лесных сырых дорожек. В сосновых и сосново-еловых лесах отмечены группы ландыша майского, медуницы неясной, одиночные экземпляры колокольчика персиколистного, мицелиса стенного. Все эти растения включены в дополнительный список Красной книги Ивановской области [9]. Они нуждаются в постоянном контроле состояния популяций.

В лесных ценозах парка сохранились разнообразные типичные лесные виды, например папоротники (щитовники мужской и шартский, кочедыжник женский), хвощи лесной и луговой, кислица обыкновенная, ортилия однобокая, осока пальчатая, сердечник недотрога, золотарник обыкновенный, будра плющевидная, живучка ползучая, земляника лесная, фиалка удивительная, черника, брусника и другие. На лугах по берегам р. Харинки распространены типичные луговые злаки (ежа сборная, мятлик луговой, овсяница красная, тимофеевка луговая, пырей ползучий и др.), бобовые (клевер луговой, клевер ползучий, люцерна рогатый и др.) и разнотравье (колокольчик раскидистый, лютик едкий, нивяник обыкновенный, тысячелистник обыкновенный, одуванчик лекарственный, зверобой пятнистый, лапчатка прямостоячая и др.).

По берегам р. Харинки встречаются заросли ивовых кустарников и участки черноольшаников. Среди прибрежно-водных растений распространены группы таволги вязолистной, манника высокого, канареечника тростниковидного, осок острой, ложносытевидной, пузырчатой, камыша укореняющегося и лесного, щавеля водного, частухи подорожниковой, вербейника обыкновенного и других. В воде отмечены группы ряски малой, рдеста плавающего, водокраса лягушачего, элодеи канадской.

Среди адвентивных видов наибольший интерес представляют редкие растения, которые только начинают распространяться по территории региона. К таковым относится черемуха Максимовича — *Cerasus maximowiczii* (Rupr.) Com. [*Padus maximowiczii* (Rupr.) Sokolov]. Это вид горных лесов Приморского края, Китая, Японии, введенный в культуру с 1890 г., редко выращивается как декоративное растение [8]. Впервые несколько небольших сеянцев этого вида было найдено в парке в 2006 г. в подлеске сосново-березового леса [6]. Крупное дерево с развесистой кроной, посаженное в 1960-х гг., растет в центральной части парка у аттракционов. Ежегодно наблюдается обильно цветение, но плоды формируются и вызревают в небольшом количестве. В лесах различных участков парка отмечены сеянцы разного возраста этого вида. На левом берегу р. Харинки в районе Горино также отмечены группы молодых деревьев этого вида. Вероятно, он распространяется птицами.

Другим адвентивным видом, изредка встречающимся в подлеске сосновых, сосново-березовых лесов, является боярышник черный — *Crataegus nigra* Waldst. et Kit. Это декоративный вид западноевропейского происхождения, часто используется в озеленении городов, в лесозащитных посадках

вдоль дорог. Он изредка встречается в пригородных лесах Иванова [3, 4, 5]. Этот кустарник отмечен как дичающий вид в Ярославской области [7].

Шиповник кустарниковый (*Rosa dumalis* Beshst. s.l.) найден в 2012 г. на опушке сосново-елового леса с участием березы в центральной части парка. Это западноевропейский вид, который активно распространяется по территории областей Верхневолжского региона. Впервые в Ивановской области он отмечен вдоль железнодорожных путей и на пустырях в 1990-х гг. [1, 5]. В последние годы отмечается во Владимирской [11], Тверской [10] областях, в том числе и в пригородных сообществах.

Вдоль центральной аллеи парка 4 июля 2011 г. найден один куст шиповника собачьего (*Rosa canina* L.), который ранее не приводился для флоры Ивановской области.

Среди древесных инвазионных видов в парке встречаются клен американский, ясень пенсильванский, ирга колосистая, которые стали активно внедряться в состав природных сообществ Ивановской области в конце 1990-х гг. [2, 5]. Часто в подлеске разреженных сосновых лесов встречается бузина раскидистая, вишня обыкновенная, реже крыжовник обыкновенный, боярышник однопестичный. Небольшими группами по берегам р. Харинки, на сбитых лугах, вдоль дорожек, на лесных опушках распространены североамериканские травянистые виды — кипрей железистостебельный, кипрей ложнокраснеющий, тонколучник северный и ситник тонкий. За распространением этих заносных и активно внедряющихся в состав природных сообществ необходимо организовать мониторинг.

На сырых лугах по берегу р. Харинки сохраняются группировки декоративных злаков — гребенника обыкновенного (*Cynosurus cristatus*) и плевела многолетнего (*Lolium perenne*). На пустырях, вдоль дорожек часто встречается галофильный злак бескильница расставленная (*Puccinellia distans*).

Особую тревогу вызывает формирование густых зарослей клена американского и ирги колосистой в разреженных сосновых лесах по склонам правого берега р. Харинки. Например, в сосновом лесу вейниково-разнотравном, который прилегает к автотрассе, густой подлесок состоит из ирги колосистой, клена американского и редко стоящих молодых деревьев рябины обыкновенной, аборигенные лесные кустарники в нем отсутствуют.

Проникновению чужеродных видов в состав природных сообществ парка способствует нарушение его природных экосистем. Значительный антропогенный пресс, развитая дорожно-тропиночная сеть, наличие мест для пикников со старыми кострищами привели к деградации растительного покрова парка.

Парк культуры и отдыха «Харинка» является памятником природы регионального значения (Решение Ивановского облисполкома № 164 от 22.02.1965 г.). Вместе с тем это один из любимых, массово посещаемых и живописных парков Иванова, рекреационные нагрузки в котором не контролируются, не проведено и зонирование территории парка.

Для поддержания стабильности экосистем городского парка «Харинка» необходимо проводить комплекс мероприятий по благоустройству территории, охране редких видов растений, осуществлять контроль за распространением инвазионных растений. Рекомендуются активнее использовать и научно-просветительский потенциал парка, проводить на его базе лекции, беседы, экскурсии, занятия по биологии и экологии с учащейся молодежью, установить информационные щиты и аншлаги. Перспективным направлением

ем является разработка проектов, создание и функционирование нескольких экологических троп.

Библиографический список

1. *Борисова Е. А.* Новые данные к адвентивной флоре Ивановской области // Бюллетень МОИП. Отдел биологический. 1999. Т. 104, вып. 2. С. 51—53.
2. *Борисова Е. А.* Формирование и динамика адвентивной флоры Ивановской области // Вестник Ивановского государственного университета. Сер.: Биология. Химия. Физика. Математика. 2001. Вып. 3. С. 34—39.
3. *Борисова Е. А.* Род боярышник (*Crataegus L., Rosaceae*) в г. Иванове // Вестник Ивановского государственного университета. Сер.: Биология. Химия. Физика. Математика. 2004. Вып. 3. С. 18—24.
4. *Борисова Е. А.* Флористическое загрязнение пригородных лесов г. Иваново // Экология. 2006. № 3. С. 1—5.
5. *Борисова Е. А.* Адвентивная флора Ивановской области. Иваново : Иван. гос. ун-т, 2007. 188 с.
6. *Борисова Е. А., Сеньюшкина И. В.* Новые адвентивные виды в областях Верхневолжского региона // Бюллетень МОИП. Отдел биологический. 2008. Т. 113, вып. 6. С. 54—55.
7. *Борисова Е. А., Трemasова Н. А., Силаева Т. Б., Панасенко Н. Н.* Интересные флористические находки в г. Мышкин Ярославской области // Бюллетень МОИП. Отдел биологический. 2012. Т. 117, вып. 6. С. 73.
8. Деревья и кустарники СССР. Т. 3. Семейства троходендровые, розоцветные / под ред. С. Я. Соколова. Л. : Изд-во АН СССР. 1954. 871 с.
9. Красная книга Ивановской области. Т. 2. Растения и грибы. Иваново : ПресСто, 2010. 192 с.
10. *Нотов А. А., Волкова О. М., Нотов В. А.* Находки новых для Тверской области адвентивных растений // Бюллетень МОИП. Отдел биологический. 2006. Т. 111, вып. 3. С. 51—53.
11. *Серегин А. П.* Некоторые новые и редкие виды флоры Владимирской области. Сообщение 3 // Бюллетень МОИП. Отдел биологический. 2007. Т. 112, вып. 3. С. 62—64.

УДК 612.821

В. Н. Зарипов, М. О. Барина

ИЗМЕНЕНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНОГО СОСТОЯНИЯ ГОЛОВНОГО МОЗГА СТУДЕНТОК ПОД ВЛИЯНИЕМ УМСТВЕННЫХ НАГРУЗОК РАЗЛИЧНОЙ ИНТЕНСИВНОСТИ

Приводятся данные об изменениях церебрального кровотока и электрической активности головного мозга студенток под влиянием умственных нагрузок различной интенсивности.

Ключевые слова: умственные нагрузки, церебральный кровоток, электрическая активность головного мозга, реоэнцефалография, электроэнцефалография.

© Зарипов В. Н., Барина М. О., 2015

2015. Вып. 1. Биология. Химия. Физика. Математика •

The article provides the data on changes of cerebral blood flow and electric activity of the encephalon under influence of intellectual load of various intensity.

Key words: intellectual load, cerebral blood flow, electric activity of the encephalon, rheoencephalography, electroencephalography.

Студенчество относится к группе населения с повышенным уровнем риска заболеваний в связи с большой психоэмоциональной и умственной нагрузкой, имеющей место в процессе обучения.

Разработка проблемы укрепления здоровья студентов имеет исключительное значение для высшей школы не только в теоретическом, но и в практическом плане: установление гармонической связи между обучением и здоровьем обеспечивает качественные и количественные сдвиги в становлении студента.

Особое значение имеет правильное распределение усилий, времени, отводимого на теоретические курсы, практические занятия, самостоятельную подготовку и отдых студентов. Чем крепче здоровье студента, тем продуктивнее обучение [1].

Умственная работоспособность студентов в значительной степени зависит от нормального функционирования сердечно-сосудистой и нервной систем организма.

В связи с этим актуальным представляется изучение особенностей реагирования студентов на умственную нагрузку разной степени.

Целью данного исследования является оценка изменений функционального состояния головного мозга студенток под влиянием умственных нагрузок различной интенсивности.

Материал и методы исследования

В исследовании приняли участие 32 студентки биолого-химического факультета Ивановского государственного университета.

Обследования студенток выполняли по трем группам: первая — в дни обычных учебных занятий во время семестра (норма), вторая — при использовании слабой умственной нагрузки и третья — сильной умственной нагрузки. В качестве нагрузок использовали компьютерные версии общепринятых в психологии тестов на IQ: слабая умственная нагрузка — тест для детей; сильная умственная нагрузка — тест для взрослых.

Функциональное состояние головного мозга студенток оценивали методами реоэнцефалографии и электроэнцефалографии.

С помощью метода реоэнцефалографии у студенток всех трех обследуемых групп исследовали особенности мозгового кровотока в бассейнах внутренней сонной и позвоночной артерий левого и правого полушарий головного мозга. Оценивали следующие показатели реоэнцефалограмм: время распространения пульсовой волны от сердца до исследуемого участка (Q_x , с), время подъема анакроты (Альфа, с), время быстрого кровенаполнения (Альфа 1, с), время медленного кровенаполнения (Альфа 2, с), реографический индекс (РИ, усл. ед.), коэффициент асимметрии реографического индекса ($Ka_{\text{Ри}}$, %), максимальную скорость быстрого наполнения сосудов ($V_{\text{макс}}$, Ом/с), среднюю скорость медленного наполнения сосудов ($V_{\text{ср}}$, Ом/с), диастолический индекс (ДИА, %), дикротический индекс (ДИК, %), показатель венозного оттока (ПВО, %), периферическое сосудистое сопротивление ($A_{\text{вен}}/A_{\text{арт}}$, Ом).

Для изучения электрической активности коры головного мозга у студенток всех трех обследуемых групп регистрировали электроэнцефалограмму с последующим анализом амплитуды (А, мкВ), частоты (F, Гц) и индекса (И, усл. ед.) основных ритмов (альфа, бета, дельта, тета) в лобных, теменных, затылочных и височных областях. Данный анализ выполняли отдельно для левого и правого полушария.

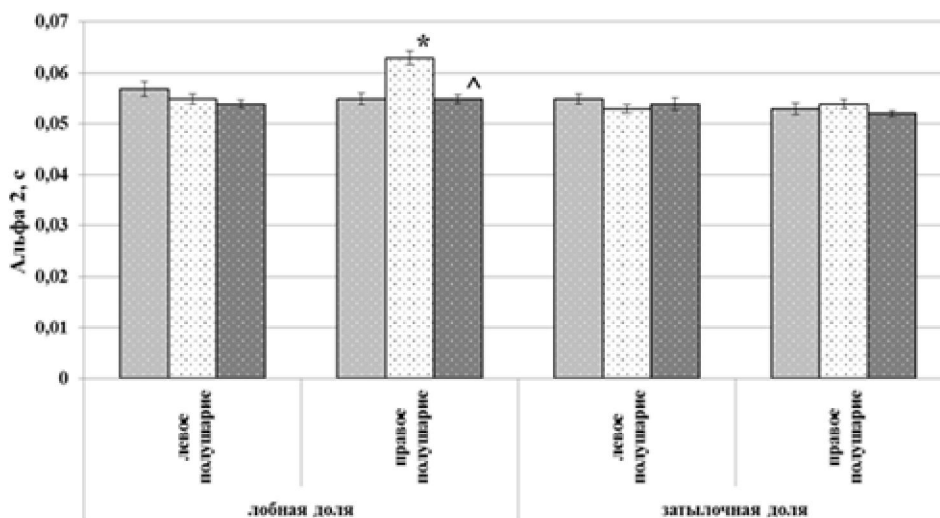
При проведении работы использовали программно-аппаратные комплексы «Нейрон-Спектр» и «Рео-Спектр 3» фирмы «Нейрософт» (Россия). Достоверность изменений оценивали по *t*-критерию Стьюдента.

Результаты исследования и их обсуждение

Достижениями нейрофизиологии показано, что самые незначительные изменения психической активности находят обязательное отражение в интенсивности обменных процессов и вторичных сдвигов мозгового кровообращения. При этом многими авторами отмечается независимость мозгового кровотока от изменений общего артериального давления благодаря саморегуляции сопротивления в мозговых сосудах [7].

Анализ реэнцефалографических показателей позволил выявить закономерности гемодинамических изменений у студенток под влиянием умственных нагрузок различной интенсивности.

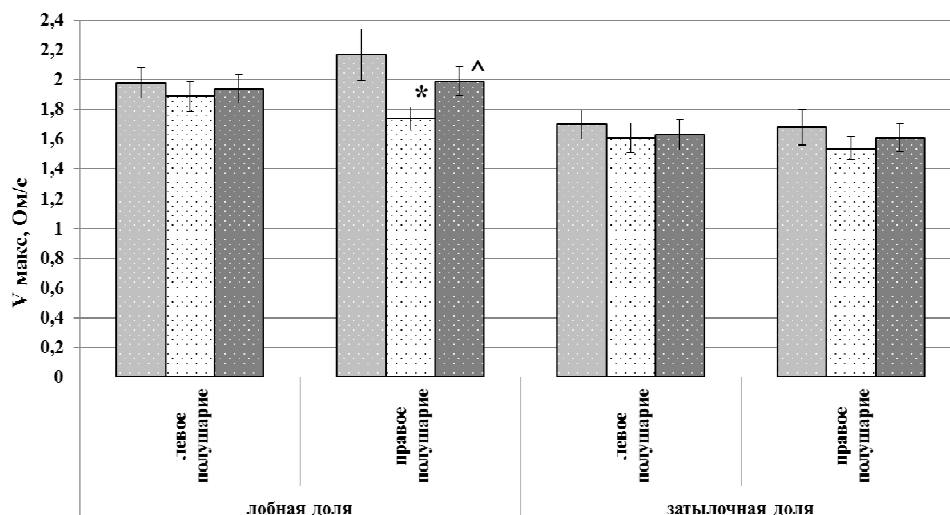
У студенток при слабой умственной нагрузке в правой лобной доле выявлено, что время медленного кровенаполнения достоверно больше (рис. 1), а максимальная скорость быстрого наполнения сосудов достоверно меньше (рис. 2) по сравнению с нормой и сильной умственной нагрузкой. Полученные данные свидетельствует о более высоком тоне средних и мелких арте-



рий на фоне сниженной наполненности кровью крупных артерий.

Рис. 1. Изменение времени медленного кровенаполнения у студенток под влиянием умственных нагрузок различной интенсивности

■ — норма; □ — слабая нагрузка; ▨ — сильная нагрузка



Достоверность отличий:
 норма — сильная нагрузка: * — $p < 0,05$
 слабая нагрузка — сильная нагрузка: ^ — $p < 0,05$

Рис. 2. Изменение максимальной скорости быстрого наполнения сосудов у студенток под влиянием умственных нагрузок различной интенсивности

■ — норма; □ — слабая нагрузка; ■ — сильная нагрузка

Достоверность отличий:
 норма — сильная нагрузка: * — $p < 0,05$
 слабая нагрузка — сильная нагрузка: ^ — $p < 0,05$

При учебной нагрузке, беспокойстве, интенсивной психической работе, чувстве страха, напряжении внимания электрофизиологические показатели электроэнцефалограммы могут изменяться [6].

Анализ показателей основных ритмов электроэнцефалограммы (амплитуда, частота, индекс) позволил выявить закономерности изменения электрической активности головного мозга студенток под влиянием умственных нагрузок различной интенсивности.

Установлено, что слабая умственная нагрузка не вызывает достоверных изменений электроэнцефалографических показателей у студенток.

При сильной умственной нагрузке у студенток обнаружено, что амплитуда бета-ритма в лобной области правого полушария достоверно больше по сравнению с нормой и слабой умственной нагрузкой (рис. 3).

Согласно литературным данным [8], под влиянием умственной деятельности развивается реакция десинхронизации, главным компонентом которой служит усиление бета-активности. Повышенная бета-активность является одним из признаков повышенной эмоциональности, возбудимости и активности [2]. Умственная деятельность у взрослых сопровождается повышением мощности бета-ритма, причем значимое усиление высокочастотной активности наблюдается при умственной деятельности, включающей элементы новизны, в то время как стереотипные, повторяющиеся умственные операции сопровождаются ее снижением [3].

Таким образом, увеличение амплитуды бета-ритма у студенток под влиянием сильной умственной нагрузки свидетельствует об активизации мыслительной деятельности и усилении умственного напряжения.

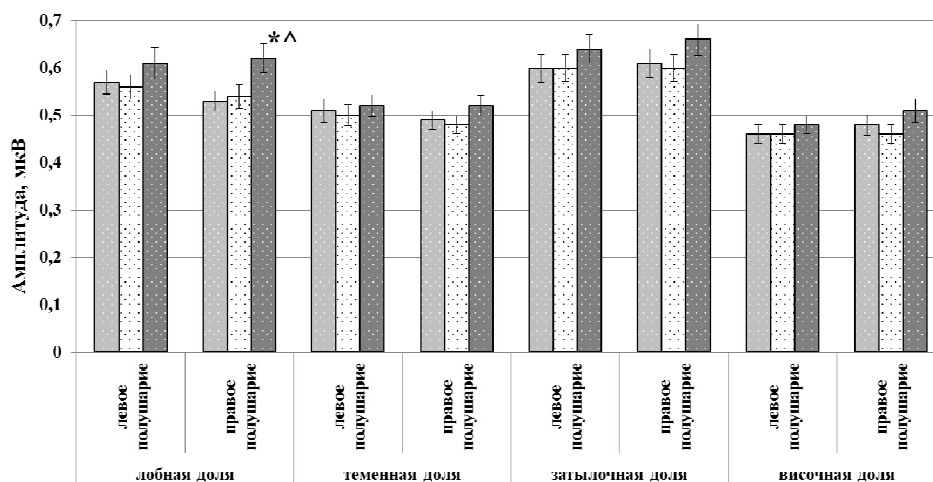


Рис. 3. Изменение амплитуды бета-ритма у студенток под влиянием умственных нагрузок различной интенсивности
 ■ — норма; ▨ — слабая нагрузка; ■ — сильная нагрузка

Достоверность отличий:

норма — сильная нагрузка: * — $p < 0,05$

слабая нагрузка — сильная нагрузка: ^ — $p < 0,05$

Полученные данные подтверждают выдвинутое В. Н. Зариповым и М. О. Бариновой [4, 5] предположение о том, что судить о степени устойчивости субъектов к действию стрессогенных факторов целесообразнее всего по оценке напряжения систем организма в ответ на слабые стрессорные воздействия.

Необходимо отметить, что у студенток изменения гемодинамики и электрической активности головного мозга обнаружены в лобной области, которая отвечает за выполнение мыслительных операций.

Кроме того, данные изменения происходят в правом полушарии головного мозга, которое определяет эмоциональное состояние организма. Вероятно, это связано с характером решаемых заданий тестов на IQ или с половой принадлежностью респондентов.

Выводы

1. Мозговой кровоток у студенток изменяется только под влиянием слабой умственной нагрузки и характеризуется повышением тонуса средних и мелких артерий на фоне снижения кровенаполнения крупных артерий.

2. У студенток изменение активности коры больших полушарий происходит только при сильной умственной нагрузке и сопровождается активизацией мыслительной деятельности и усилением умственного напряжения.

3. Изменения функционального состояния головного мозга у студенток под влиянием умственных нагрузок происходят на фоне гемодинамических перестроек и сдвигов электрической активности в лобной доле правого полушария.

Библиографический список

1. Андреева Л. М., Рахимжанова Ж. А., Колотченко Н. Д., Холоша С. М., Курмышева Т. Б. Социально-гигиенические аспекты здоровья студентов // Актуальные проблемы экологии : материалы II Междунар. конф. Караганда, 2003. С. 13—15.
2. Березин М. А., Нечаева М. А. Электрическая активность коры головного мозга // Высшая нервная деятельность. 2005. Т. 53, вып. 1. С. 46.
3. Гнездицкий В. В. Обратная задача ЭЭГ и клиническая электроэнцефалография (картирование и локализация источников электрической активности мозга). М. : МЕДпресс-информ, 2004. 624 с.
4. Зарипов В. Н., Барина М. О. Изменения показателей кардиоинтервалографии и variability ритма сердца у студентов с разным уровнем психоэмоционального напряжения и типом темперамента на зачетной неделе // Физиология человека. 2008. Т. 34, № 4. С. 73—79.
5. Зарипов В. Н., Барина М. О. Изменения показателей сердечного ритма у студентов с разным уровнем психоэмоционального напряжения во время сдачи экзаменов // Современные проблемы науки и образования. 2013. № 3. URL: <http://www.science-education.ru> (дата обращения: 30.03.2015).
6. Иванова Л. В., Коробейникова И. И., Джебраилова Т. Д., Умрюхин Е. А. Электроэнцефалографические корреляты индивидуальных различий эффективности целенаправленной деятельности студентов в экзаменационной ситуации // Журнал высшей нервной деятельности им. И. П. Павлова. 2005. С. 189—196.
7. Козачук И. В., Кириллова И. А., Золотухина А. Ю., Максиев Д. В. Особенности мозговой гемодинамики при умственной нагрузке // Державинские чтения : сборник трудов института естествознания. Тамбов, 2007. С. 32—33.
8. Умрюхин Е. А. Значение ЭЭГ и ее составляющих. М. : Наука, 2003. 159 с.

УДК 576.895.771

В. А. Исаев

МОКРЕЦЫ РОДА *CULICOIDES* — ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ ВЕКТОРЫ БЛЮТАНГА И БЛЮТАНГОПОДОБНЫХ ЗАБОЛЕВАНИЙ В ИВАНОВСКОЙ ОБЛАСТИ

В настоящем обзоре представлены данные по адаптациям к урбаноценозам, изменениям вольтиности и диапаузы в популяциях *Culicoides* — потенциальных переносчиков блютанга и болезни Шмалленберга в центре Нечерноземной зоны РФ.

Ключевые слова: *Culicoides*, кровососущие мокрецы, переносчики (векторы), блютанг, болезнь Шмалленберга, Ивановская область.

The review presents the tools in antropogenic biocenoses, changes of the life cycle and diapause in populations of *Culicoides* as potential vectors of bluetongue and Schmallenberg virus in the center of the Non-chernozem zone of the Russian Federation.

Key words: *Culicoides*, biting midges, vectors, bluetongue, Schmallenberg virus, Ivanovo region.

Блютанг и новое блютангоподобное заболевание — болезнь Шмалленберга, зарегистрированная у жвачных животных в 2011 г. в Европе и быстро распространившаяся в последние годы в ряде европейских стран, передаются

мокрецами рода *Culicoides* [15—17]. Происходящий в последние годы ввоз инфицированных этими заболеваниями животных в Россию и распространение указанных заболеваний на соседних с нашей территорией регионах определяют необходимость проведения энтомологических исследований местных векторов *Culicoides*, которые в России, в том числе в центре Нечерноземной зоны РФ остаются недостаточно изученными [11—14].

Цель исследования — провести изучение фауны и экологии мокрецов рода *Culicoides* в центре Нечерноземной зоны РФ, в Ивановской области.

Задачи исследования

1. Определить массовые виды рода *Culicoides* в Ивановской области и их связи с населенными пунктами.
2. Сравнить такие характеристики, как диапауза и вольтичность этих групп кровососов в разные годы в районе исследований.

Материал и методы исследования

Численность и видовой состав мокрецов определяли общепринятыми методами по сборам на животных-прокормителях, затем вычисляли индексы обилия (ИО) и индексы доминирования (ИД).

Диапауза *Culicoides* исследована нами полевыми и экспериментальными методами. Для этого собирали преимагинальные стадии в природных биотопах и проводили с ними эксперименты. Кроме того, собирали самок в природе, содержали их при определенных температурах и фотопериодах в лаборатории, получали от них кладки и подвергали в дальнейшем яйца из кладок воздействиям разных фотопериодов и температур [2—8].

Число поколений отдельных видов определялось по подъемам численности самок, встречаемости самцов, а также по вскрытиям самок и изучению состояния их яичников в природе и в лаборатории (после получения кладок) [1, 9, 10].

Результаты исследований

В результате многолетних исследований в Ивановской области установлено, что период активности имаго *Culicoides* продолжается в области с мая по октябрь. Среди 26 встречающихся в регионе видов этого рода 6 являются массовыми по отловам имаго. Супердоминантом в фауне является *C. punctatus*, доминантами в сборах оказываются *C. fascipennis* и *C. grisescens*. В число субдоминантов входят *C. obsoletus*, *C. pallidicornis* и *C. nubeculosus*.

Связи с биоценозами вне и внутри населенных пунктов некоторых массовых видов *Culicoides* Ивановской области, которые рассматриваются в Европе как потенциальные векторы блютанга и болезни Шмалленберга (группа I) и остальных массовых видов, которые в европейских странах попадают в категорию «прочие» переносчики (группа II), даны в табл. 1.

В группе I на первом месте по ИО и ИД и наиболее вероятным потенциальным вектором для проникновения в агро- и урбаноценозы в условиях региона представляется *C. punctatus*. При анализе второй группы наиболее значимым вектором для потенциального укоренения среди диких животных и распространения рассматриваемых заболеваний может оказаться *C. fascipennis*, связанный с лесными ландшафтами. Оба эти вида активно

нападают на крупный рогатый скот и широко распространены в разных районах области, в то время как, например, *C. grisescens* обилен лишь в некоторых районах и более характерен для подзоны тайги, площадь которой в области невелика.

Таблица 1

Распределение массовых видов *Culicoides* групп I и II по сборам в разных биоценозах

Группа I

Биоценоз\Вид	<i>C. punctatus</i>		<i>C. obsoletus</i>		<i>C. nubeculosus</i>	
	ИО	ИД	ИО	ИД	ИО	ИД
Вне населенных пунктов	35,0	0,305	5,8	0,051	5,1	0,045
В населенных пунктах	47,6	0,629	2,6	0,034	1,5	0,020

Группа II

Биоценоз\Вид	<i>C. fascipennis</i>		<i>C. grisescens</i>		<i>C. pallidicornis</i>	
	ИО	ИД	ИО	ИД	ИО	ИД
Вне населенных пунктов	38,6	0,336	26,4	0,230	1,5	0,013
В населенных пунктах	10,7	0,142	7,8	0,104	3,4	0,045

C. obsoletus и *C. pallidicornis*, попадающие в разные по значимости группы (табл. 1), могут быть объединены тем, что нападают на овец, заболевания которых имеют важное значение для организации начала противоэпизоотических мероприятий. При этом *C. obsoletus* обнаруживает в естественных условиях большую связь с биоценозами вне поселков, а *C. pallidicornis* чаще отмечается в поселковых стациях.

Исследования состава и структуры массовых видов в конкретной природно-климатической зоне часто недостаточны для определения и прогнозирования складывающейся эпизоотической ситуации, так как популяционные характеристики в условиях ландшафтной неоднородности и разнообразия действующих антропогенных факторов могут быть весьма пластичны. Конкретные сроки активности отдельных видов и число поколений регулируются в природных условиях типом и прочностью яйцевой и личиночной диапаузы [2—8, 10]. Наиболее длительный период встречаемости отмечается в регионе у 3 видов: со второй декады мая до третьей декады октября у *C. punctatus*, с первой декады июня по начало октября у *C. fascipennis* и со второй декады июня до первой декады октября у *C. grisescens*. Установлено, что число поколений этих видов мокрецов в центре Нечерноземной зоны РФ на протяжении периода исследований с 60-х гг. прошлого века до настоящего времени в разные годы не превышает 1—3 [1, 10—14].

Таблица 2

Число поколений и период встречаемости массовых видов *Culicoides* групп I и II по сборам в разных биоценозах

Группа I

Вид	<i>C. punctatus</i>		<i>C. obsoletus</i>		<i>C. nubeculosus</i>	
	min	max	min	max	min	max
Пределы						
Число поколений	2	3	2	3	2	3
Период встречаемости в декадах	14	17	11	14	13	15

Группа II

Вид	<i>C. fascipennis</i>		<i>C. griseascens</i>		<i>C. pallidicornis</i>	
	min	max	min	max	min	max
Пределы						
Число поколений	1	2	1	1	1	1
Период встречаемости в декадах	10—11	12—13	8	12—13	7	9

Так, *C. punctatus* может давать 2—3 поколения за сезон и развивается в основном с факультативной эмбриональной диапаузой (в яйце зимует сформированная личинка). Эспериментальное изучение влияния разных температур и фотопериодов на самок и яйцекладки этого вида указывает на возможность изменения сроков наступления и изжития диапаузы у яиц *Culicoides* в условиях повышенных температур (что по сути является моделью климатических потеплений), а также усиления этого эффекта при материнском влиянии, т. е. воздействии повышенных температур более длительный срок — в период формирования яиц на самок после кровососания и их кладки — в период формирования личинок в яйцах. *C. fascipennis* в условиях региона является переходным от моно- к дивольтинному, а *C. griseascens* — строго моновольтинным видом. У *C. fascipennis* отрождение личинок из яиц в кладках первого поколения колеблется от 0 до 30,7 %, что и определяет численность второго поколения в течение года, а диапауза происходит на яйцевой стадии (личинка формируется). У *C. griseascens* в единственном поколении охват яиц облигатной диапаузой близок к 100 %, при этом в диапаузирующих яйцах личинка не формируется.

Раньше всех среди субдоминантов в регионе вылетают *C. nubeculosus* (максимально он может встречаться в течение 15 декад), а вслед за ним появляется *C. obsoletus* (продолжительность лета до 14 декад). Эти виды обычно имеют 2 поколения за сезон, а потенциально (в жаркие годы) у них может развиваться и немногочисленное третье поколение. Часть яиц этих видов, а также в основном личинки зимуют. На зимовку в полевых условиях могут уходить личинки II—IV возрастов, соотношение которых в разные годы может существенно различаться, как, например, и у *C. odibilis* [5—7], но диапаузируют только личинки IV возраста. Один из субдоминантов — *C. pallidicornis* — встречается в течение более короткого периода — максимально до 9 декад. Диапаузирует этот вид в основном на яйцевой стадии.

Заключение

Возможности трансмиссии таких патогенов, как вирусы блютанга и Шмалленбергвирус, определяются не только природно-климатическими особенностями изученного региона, но и адаптивными популяционными характеристиками потенциальных переносчиков — мокрецов *Culicoides* (численностью в разных типах стадий, типом и прочностью диапаузы, сроками вылета самок и самцов и др.).

Библиографический список

1. Исаев В. А. Численность и возрастной состав самок кровососущих мокрецов рода *Culicoides* (Diptera, Ceratopogonidae) // Медицинская паразитология и паразитарные болезни. 1972. Т. 41, № 5. С. 614—617.

2. *Исаев В. А.* Фотопериодическая индукция диапаузы на фазе яйца у кровососущего мокреца *Culicoides pulicaris punctatus* Mg. (Diptera, Ceratopogonidae) // Паразитология. 1975. Т. 9, № 6. С. 501—506.
3. *Исаев В. А.* К изучению диапаузы у массовых видов кровососущих мокрецов (Diptera, Ceratopogonidae) // Научные доклады высшей школы. Биологические науки. МГУ. 1976 а, № 3. С. 55—58.
4. *Исаев В. А.* Влияние температуры на развитие эмбриональной диапаузы и реактивацию яиц у кровососущего мокреца *Culicoides pulicaris punctatus* Mg. (Diptera, Ceratopogonidae) // Зоологический журнал. 1976 б. Т. 55, № 8. С. 1172—1177.
5. *Исаев В. А.* Сезонные миграции личинок кровососущего мокреца *Culicoides odibilis* Austen // Медицинская паразитология и паразитарные болезни. 1977 а. Т. 46, № 1. С. 41—45.
6. *Исаев В. А.* Влияние внешних факторов на формирование и изжитие диапаузы у личинок *Culicoides odibilis* Austen // Медицинская паразитология и паразитарные болезни. 1977 б. Т. 46, № 2. С. 209—214.
7. *Исаев В. А.* Изменчивость личиночной диапаузы у кровососущего мокреца *Culicoides odibilis* Austen // Зоологический журнал. 1978. Т. 57, № 10. С. 1529—1533.
8. *Исаев В. А.* Биология яйцевой стадии мокрецов рода *Culicoides* (Diptera, Ceratopogonidae) // Зоологический журнал. 1980. Т. 59, № 2. С. 229—233.
9. *Исаев В. А.* Автогенность у кровососущих мокрецов рода *Culicoides* // Паразитология. 1993. № 4. С. 273—279.
10. *Исаев В. А.* Эколого-физиологические адаптации мокрецов / ИвГУ. Иваново, 1997. 70 с.
11. *Исаев В. А.* *Culicoides* Нечерноземной зоны РФ и их потенциальное значение в распространении вируса блутана // Вестник Ивановского государственного университета. Естественные, общественные науки. 2011. № 2. С. 5—9.
12. *Исаев В. А.* Кровососущие мокрецы рода *Culicoides* Нечерноземной зоны России как потенциальные переносчики вируса Шмалленберга // Вестник Ивановского государственного университета. Естественные, общественные науки. 2013. № 2. С. 14—21.
13. *Исаев В. А.* Биология и экология мокрецов рода *Culicoides* и их потенциальное значение в передаче вируса Шмалленберга в Восточном Верхневолжье // Вестник Костромского государственного университета им. Н. А. Некрасова. 2014. № 6. С. 38—40, 335.
14. *Исаев В. А.* Экологический и хромосомный анализ мокрецов (Diptera, Ceratopogonidae) // Вестник Ивановского государственного университета. Естественные, общественные науки. 2014. № 2. С. 15—22.
15. *Макаров В. В., Василевич Ф. И., Сухарев О. И.* Мокрецы рода *Culicoides* — эмерджентные векторы блютанга в Европе // Российский ветеринарный журнал. Сельскохозяйственные животные. 2014. № 2. С. 29—35.
16. *Макаров В. В., Мищенко В. А., Сухарев О. И.* Трансмиссивные экзотические инфекции животных на неэндемичных территориях. Ч. 2. Блутанг и блютангоподобные болезни // Ветеринария сегодня. 2012. № 3. С. 10—15.
17. *Rasmussen L. D., Kirkeby C., Bodker R. et al.* Rapid Spread of Schmallenberg Virus-infected Biting Midges (*Culicoides* spp.) across Denmark in 2012 // Transboundary and Emerging Diseases. 2014. Vol. 61, № 1. P. 12—16.

УДК 611.1

*Н. К. Кормилицына, Н. В. Гавришева***ПОКАЗАТЕЛИ ВАРИАБЕЛЬНОСТИ СЕРДЕЧНОГО РИТМА И ГЕМОДИНАМИКИ МОЗГА, ЗНАЧИМЫЕ ДЛЯ ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОТБОРА СПЕЦИАЛИСТОВ ЭКСТРЕМАЛЬНОГО ПРОФИЛЯ**

Приводятся сведения о показателях вариабельности сердечного ритма и гемодинамики мозга, значимых для профессионального отбора специалистов экстремального профиля.

Ключевые слова: вариабельность ритма сердца, реоэнцефалография, специалисты экстремального профиля.

The data about indices of heart rate variability and brain hemodynamic important for professional selection of extreme profile specialists are given.

Key words: heart rate variability, rheoencephalography, extreme profile specialists.

В последнее время возросла необходимость совершенствования программ профессионального отбора для обучения в вузах противопожарного профиля, в связи с проблемой регулярного отчисления курсантов по психологическим причинам и в результате развития сердечно-сосудистых заболеваний [2]. Ранее с помощью корреляционного анализа было показано, что на состояние гемодинамики оказывает влияние симпато-вагальный баланс [1].

Цель настоящего исследования — выявить особенности вегетативного обеспечения вариабельности сердечного ритма и гемоциркуляции головного мозга, значимые для профессионального отбора специалистов экстремального профиля.

В работе приняли участие курсанты 1—3 года обучения Ивановского института государственной противопожарной службы МЧС России. Первую группу составили 23 курсанта с нормотоническим, вторую — 24 курсанта с гипотоническим типами реоэнцефалограмм. Исследование проведено с соблюдением этических и правовых норм в стандартных условиях научно-исследовательской лаборатории Ивановского института ГПС МЧС России «Медицина катастроф».

Использовались оборудование и аппаратно-программное обеспечение ООО «Нейрософт»: «ВНС-Микро» для исследования вариабельности сердечного ритма, «Рео-Спектр» для изучения состояния церебральной гемодинамики.

С помощью метода реоэнцефалографии был обследован мозговой кровоток в бассейнах внутренней сонной и позвоночной артерий обоих полушарий головного мозга (использованы фронто-мастоидальное (FM) и окципито-мастоидальное (OM) отведения). Для оценки состояния вегетативного обеспечения ритма сердца проводилась активная ортостатическая проба. Полученные данные статистически обработаны.

Результаты исследования и их обсуждение

Все курсанты показали хороший уровень состояния вегетативного обеспечения ритма сердца (табл.). Соотношение низкочастотных и высокочастотных

© Кормилицына Н. К., Гавришева Н. В., 2015

колебаний спектра (показатель LF/HF) у большинства курсантов в группе с гипотоническим типом реоэнцефалограммы оставалось в зоне умеренной парасимпатикотонии. Показатель LF/HF оказался в данной группе достоверно ($p < 0,05$) ниже, а HF% достоверно ($p < 0,05$) выше по сравнению с данными показателями курсантов с нормотоническим типом реоэнцефалограммы.

В ответ на функциональную ортостатическую пробу у всех курсантов имелась тенденция к понижению общей мощности спектра (TP), достоверно снижалась ($p < 0,05$) мощность спектра в диапазоне высоких частот (HF), свидетельствующая об адекватном ослаблении парасимпатического влияния на деятельность сердца при одновременном существенном ($p < 0,05$) увеличении показателя LF/HF.

Характеристика variability сердечного ритма курсантов с нормотоническим и гипотоническим типами реоэнцефалограмм

Условия	Показатели variability ритма сердца			
	TP, мс ² /Гц	LF/HF, усл. ед.	HF, %	30/15, усл. ед.
Нормотонический тип реоэнцефалограммы				
Фоновая запись в покое	4597,0±267,2	0,67±0,05	48,2±2,2	–
Активная ортостатическая проба	3988,1±399,6	4,33±0,21**	13,5±2,8**	1,32±0,12
Гипотонический тип реоэнцефалограммы				
Фоновая запись в покое	4448,3±542,5	0,54±0,07*	63,0±3,1*	–
Активная ортостатическая проба	4000,6±234,6	3,36±0,13**	19,0±2,7**	1,17±0,31

Примечания:

* — достоверность отличий показателей у курсантов с нормотоническим и гипотоническим типами реоэнцефалограмм при $p < 0,05$;

** — достоверность отличий при активной ортостатической пробе от фоновых показателей при $p < 0,05$.

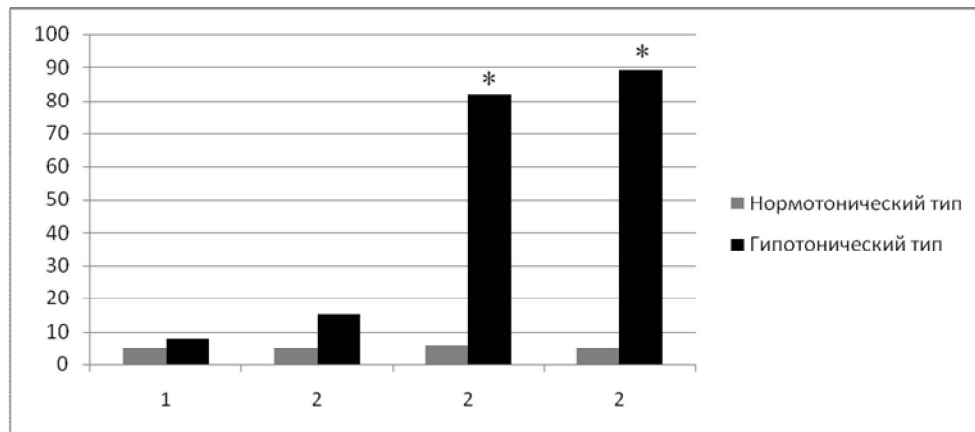
Результаты свидетельствуют о том, что у большинства обследованных курсантов с гипотоническим типом реоэнцефалограммы в покое преобладает активность парасимпатического отдела вегетативной нервной системы. Данный вариант регуляции ритма сердца отражает хорошее физическое состояние и высокие адаптационные возможности организма и подтверждает функциональную устойчивость курсантов [3].

Относительное преобладание высокочастотных волн согласуется с положением об адаптационно-трофическом защитном действии блуждающих нервов на сердце. Умеренное преобладание парасимпатических влияний является одним из факторов индивидуальной устойчивости здорового организма к возникновению поражений сердечно-сосудистой системы в условиях психоэмоционального переживания, что подтверждалось в клинической практике [5].

В ходе обследования с помощью методики реоэнцефалографии было установлено, что показатели интенсивности кровотока и кровенаполнения мозговых сосудов (реографический индекс, амплитудно-частотный показатель, характеризующий величину объемного кровотока, дикротический

индекс и др.) у курсантов обеих групп в целом были в пределах нормы как при фоновой пробе, так и при функциональных пробах.

В группе с гипотоническим типом реоэнцефалограммы было выявлено существенное ($p < 0,001$) повышение венозного застоя (показатель ПВО) в отделах, кровоснабжаемых системой позвоночных артерий обоих полушарий мозга (ОМ отведение), (рис.).



Сравнение показателя венозного оттока (ПВО, %) у курсантов с разными типами реоэнцефалограмм:

- 1 — фронто-мастоидальное отведение, левое полушарие головного мозга;
- 2 — фронто-мастоидальное отведение, правое полушарие головного мозга;
- 3 — окципито-мастоидальное отведение, левое полушарие головного мозга;
- 4 — окципито-мастоидальное отведение, правое полушарие головного мозга;
- * — достоверность отличий показателей у курсантов с нормотоническим и гипотоническим типами реоэнцефалограмм при $p < 0,001$.

Выявленные нарушения в бассейне позвоночных артерий усугубляются высокими физическими нагрузками курсантов, например при беге в полной боевой экипировке с использованием средств индивидуальной защиты органов дыхания [4]. В такой ситуации формируется выраженное напряжение мышц спины и шеи, что ведет к снижению кровоснабжения затылочной доли головного мозга, повышению риска развития расстройств мозговой гемодинамики, может способствовать ухудшению зрения у специалистов экстремального профиля.

Реоэнцефалограмма гипотонического типа является косвенным признаком значительного «резерва» адаптации и уровня здоровья обследуемого, однако повышенная активность парасимпатического отдела вегетативной нервной системы имеет негативные проявления в виде затруднения венозного оттока. Эти изменения вегетативного обеспечения и показателей церебральной гемодинамики на донологическом уровне — одна из составляющих прогнозирования возможных церебро-вазкулярных заболеваний.

Выводы

1. У курсантов с гипотоническим типом реоэнцефалограммы достоверно чаще наблюдается парасимпатикотония, выражающаяся в более высокой величине показателя HF% и более низком значении LF/HF и отражающая широкие возможности адаптационного резерва организма специалистов экстремального профиля.

2. Показатели наиболее «профессионально ориентированного типа» вариабельности сердечного ритма сопровождаются неудовлетворительными показателями церебральной гемодинамики (показатель венозного оттока), характерными для гипотонического типа реоэнцефалограммы, что актуализирует разработку комплекса мер по компенсации гипотонических явлений во избежание профессиональной дезадаптации.

3. Исследования мозговой гемодинамики и вариабельности сердечного ритма являются практически значимыми как дополнительные обследования в системе профотбора курсантов Ивановского института ГПС МЧС России и позволяют прогнозировать вероятность развития стресс-индуцированных церебро-вазкулярных заболеваний специалистов экстремального профиля.

Библиографический список

1. Гавришева Н. В., Кормилицына Н. К. Взаимосвязь показателей церебральной гемодинамики и вариабельности сердечного ритма у курсантов // Инновационная наука в глобализующемся мире : материалы Междунар. науч.-практ. конф. Уфа : РИО ИЦИПТ, 2014. С. 3—6.
2. Копейкин К. В., Королёва С. В. К проблеме ранней диагностики дезадаптивных расстройств сердечно-сосудистой системы у представителей опасных профессий // Совершенствование боевой и физической подготовки курсантов и слушателей образовательных учреждений силовых ведомств : материалы Междунар. науч.-практ. конф. Иркутск : Восточно-Сибирский ин-т МВД России, 2012. Т. 1. С. 119—124.
3. Попова Е. А., Кормилицына Н. К. Выявление ранних признаков дезадаптивных расстройств у специалистов экстремального профиля различных групп профпригодности // Наука и технологии в современном обществе : материалы Междунар. науч.-практ. конф. Уфа : РИО ИЦИПТ, 2014. С. 7—11.
4. Попова Е. А., Кормилицына Н. К., Королёва С. В. Использование метода реоэнцефалографии в оценке профпригодности специалистов экстремального профиля // Медицинские науки : прошлое, настоящее, будущее : материалы Междунар. науч.-практ. конф. Уфа : Аэтерна, 2014. С. 20—24.
5. Судаков К. В. Индивидуальная устойчивость к эмоциогенному стрессу. М. : Горизонт, 1998. 267 с.

УДК 28.591

Л. Ю. Минеева, О. Е. Скворцова

НОВЫЕ НАХОДКИ РЖАВЧИННЫХ ГРИБОВ НА ДЕРЕВЬЯХ И КУСТАРНИКАХ БОТАНИЧЕСКОГО САДА И ДЕНДРАРИЯ ИВГУ

Продолжены наблюдения за фитопатологическим состоянием растений ботанического сада и дендрария ИвГУ. За вегетационные сезоны 2013—2014 гг. обнаружены 3 новых вида ржавчинных грибов, ранее не отмеченные в публикациях.

Ключевые слова: ржавчинные грибы, древесно-кустарниковая флора, эциоспоры, телиоспоры, цикл развития, фунгициды, растение-хозяин.

© Минеева Л. Ю., Скворцова О. Е., 2015

• Серия «Естественные, общественные науки»

Monitoring of the plant's health status was continued in the Botanical garden and arboretum of Ivanovo state University. 3 new species of rust fungi were discovered during the growing seasons 2013—2014. They were not mentioned in earlier publications.

Key words: rust fungi, tree and shrub flora, aecidiospores, teliospores, development cycle, fungicides and host plant.

Ботанический сад и дендрарий Ивановского государственного университета можно назвать уникальными объектом в городе Иванове и в области в целом. На территории в 4,32 гектара собрана коллекция древесно-кустарниковой флоры, насчитывающая, по результатам инвентаризации на 01.11.2011 г., 171 вид. Одна из основных задач в деятельности ботанического сада и дендрария — это сохранение и преумножение видового разнообразия растений. Дендрарий был заложен в качестве декоративного парка при даче иваново-вознесенского фабриканта Х. Куваева в 1885—1890 гг., ботанический сад ИвГУ основан 21 февраля 1977 г. На протяжении всего периода существования дендрария проводились наблюдения за состоянием растений, развитием интродуцентов в условиях климата Ивановской области, а также оценивалось фитопатологическое состояние коллекции древесных растений [1, 4].

Мониторинг болезней растений позволяет выявить неустойчивые виды и разработать наиболее эффективные методы борьбы и профилактики. В частности, многие растения страдают от паразитических грибов. Развитию патогенной микобиоты часто содействуют сложные климатические условия: перепады температур, затяжные осадки, повышенная влажность воздуха. Свои наблюдения мы проводим за обширной группой облигатных паразитов — ржавчинными грибами, возбудителями болезни «ржавчина». Ржавчинники относятся к высшим грибам, к классу *Basidiomycetes*, подклассу *Teliobasidiomycetidae*, порядку *Uredinales*. Все они строгие паразиты на семенных растениях и папоротниках. Сложность борьбы с ржавчинными грибами заключается в том, что зачастую они являются узкоспециализированными двуххозяинными видами и имеют довольно сложный цикл развития, разбитый посезонно, т. е. половая и бесполовая части жизненного цикла происходят в разное время года и чаще на двух разных растениях. К тому же ржавчинным грибам свойственен полиморфизм — наличие до пяти стадий спороношений, различающихся по морфологии и функциям. Поэтому, исследуя данную группу паразитов, необходимо досконально изучать не только внешние признаки заболевания, но и иметь четкое представление о цикле развития для эффективной борьбы с патогеном.

В 2012 г., когда подводились итоги комплексного исследования микобиоты ботанического сада ИвГУ, признаки поражения ржавчинными грибами были описаны на 15 видах древесно-кустарниковой флоры ботанического сада и дендрария ИвГУ:

Melampsora salicina Lev. на *Salix caprea* L.

Melampsora salicina Lev. на *Salix aurita* L.

Melampsora tremulae Tul. на *Populus tremula* L.

Gymnosporangium juniperi Link. на *Sorbus aucuparia* L.

Tranzschelia pruni-spinosae Pers. на *Prunus spinosa* L.

Melampsorium betulinum Kleb. на *Betula pendula* L.

Cronartium ribicola I.C. Fisch. на *Pinus strobes* L.

Cronartium ribicola I.C. Fisch. на *Pinus sylvestris* L.

Phragmidium rosae rugosae Kasai. на *Rosa rugosa* Thunb.

Phragmidium tuberculatum J.Mull. на *Rosa majalis* L.

Cronartium ribicola I.C. Fisch на *Ribes nigrum* L.

Cronartium ribicola I.C. Fisch на *Ribes aureum* Pursh.

Puccinia graminis Pers. на *Berberis vulgaris* L.

Cumminsiella sanguine Peck. на *Mahonia aquifolium* Nutt.

Gymnosporangium juniper Link. на *Juniperus communis* L. [4].

В весенне-летние сезоны 2013—2014 гг. продолжено наблюдение и исследование на предмет поражения растений ботанического сада и дендрария ржавчинными грибами. Из года в год пополняются сведения о новых находках паразитов на культурных и дикорастущих растениях. Исключение не составили и новые сезоны. Список пораженных деревьев и кустарников пополнился на 3 вида, ранее не представленных в публикациях. Для каждого из этих видов растений-хозяев определен вид патогена:

Puccinia coronata Corda на *Frangula alnus* Mill.

Phragmidium rubi-idaei (DC.) Karst на *Rubus idaeus* L.

Gymnosporangium fuscum DC. на *Pyrus communis* L.

Приведем описание выявленных видов ржавчинных грибов.

Puccinia coronata Corda (семейство *Pucciniaceae* Dietel) обнаружена на *Frangula alnus* Mill.

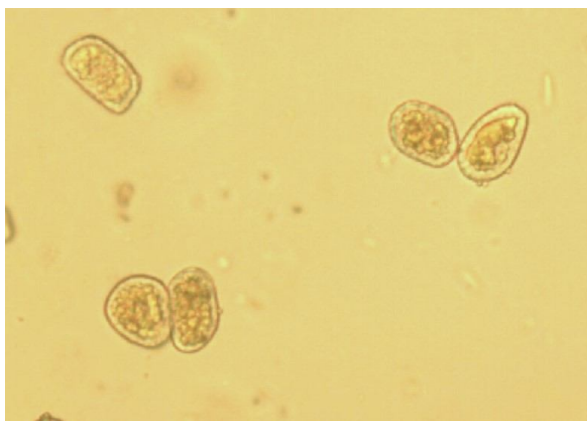


Рис. 1. Фото эциоспор *Puccinia coronata* (x 600)

Ржавчиной массово поражаются листья, молодые побеги и цветки крушины ломкой. Гриб обнаружен на стадии эциев, которые располагаются на нижней части листа, вызывая гипертрофию органов растения. Эциоспоры шаровидные или овальные, их оболочка густо-мелкобугорчатая [5]. *Puccinia coronata* имеет полный цикл развития по типу *Eu-Puccinia*. Данный вид гриба является двуххозяйным видом. Уредостадия и телиостадия развиваются на многочисленных представителях семейства злаковые.

Phragmidium rubi-idaei (DC.) Karst (семейство *Pucciniaceae* Dietel) паразитирует на *Rubus idaeus* L.

На малине обыкновенной массово поражаются листья. Ржавчина обнаружена на стадии эциев, которые располагаются на верхней стороне листа. Эциоспоры имеют шаровидную, эллипсовидную или яйцевидную форму [2]. *Phragmidium rubi-idaei* на малине имеет полный цикл развития по типу *Eu-Phragmidium*, т. е. грибок образует все стадии спороношения: спермогонии, эциостадию, уредостадию, телиостадию, базидиоспоры. Паразитический грибок

является однохозяйным видом, так как весь цикл развития происходит на малине обыкновенной без промежуточного хозяина.

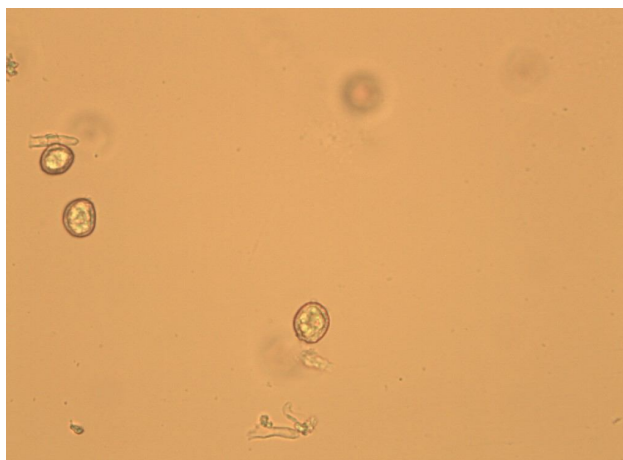


Рис. 2. Фото эциоспор *Phragmidium rubi-idaei* (DC.) Karst (x 600)

Gymnosporangium fuscum DC. (семейство *Pucciniaceae* Dietel) паразитирует на *Pyrus communis* L.

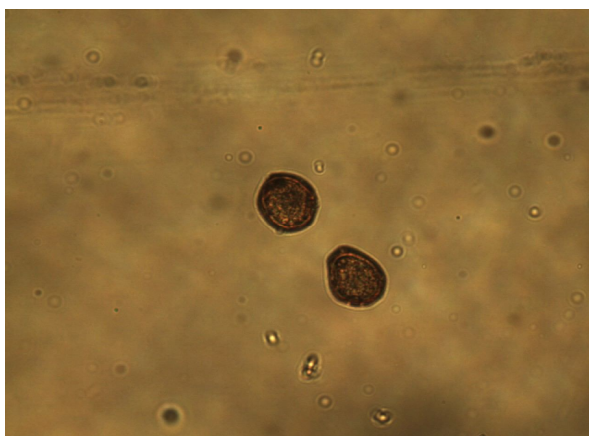


Рис. 3. Фото эциоспор *Gymnosporangium fuscum* DC. (x 600)

У груши обыкновенной обильно поражаются листья. Ржавчина обнаружена на нижней стороне листьев на стадии эциев. Эциоспоры шаровидные, тупо-многогранные, эллипсовидные, оболочка густо-мелкобородавчатая. *Gymnosporangium fuscum* вызывает некротические образования на листьях, которые имеют крайне неприглядный внешний вид, что влияет как на декоративную, так и на хозяйственную ценности растения. *Gymnosporangium fuscum* имеет цикл развития по типу *Opsi-Gymnosporangium*, выпадает уредостадия. Паразитический гриб имеет принадлежность к двум растениям-хозяевам, промежуточным являются виды рода *Juniperus*, на которых развивается телиостадия [2].

Все обнаруженные ржавчинные грибы принадлежат к семейству *Pucciniaceae* Dietel, которое является наиболее распространенным в сравнении с семейством *Melampsoraceae*. Преобладание данного семейства

объясняется тем, что принадлежащие к нему грибы паразитируют на растениях всех жизненных форм (на деревьях, кустарниках, травах) и имеют большую устойчивость к неблагоприятным факторам окружающей среды [3, 5].

Проводился поиск и сбор новых пораженных ржавчиной видов растений, а также осуществлялось наблюдение за состоянием и наличием паразитических грибов на ранее исследованных деревьях и кустарниках. Можно отметить, что все растения продолжают страдать от ржавчинников, изменяются лишь степень и интенсивность поражения. Это можно объяснить тем, что ежесезонно проводится обработка растений фунгицидами. Для двуххозяйных видов ограничивающим фактором можно считать недостаточное количество растений — промежуточных хозяев, ассортимент высаживаемых в ботаническом саду растений постоянно изменяется. Благоприятные или неблагоприятные погодные условия также влияют на степень поражения растений ржавчинными грибами.

В дальнейшем планируется продолжить мониторинг фитопатологического состояния растений ботанического сада и дендрария ИвГУ.

Библиографический список

1. *Алявдина К. П.* Материалы по грибной флоре леса Ивановской области. Иваново, 1949. С. 128—139.
2. *Купревич В. Ф., Ульянищев В. И.* Определитель ржавчинных грибов СССР. Ч. 1. Мн., 1975. 426 с.
3. *Минеева Л. Ю., Скворцова О. Е.* Итоги изучения ржавчинных грибов Савинского района Ивановской области // Вестник Ивановского государственного университета. Сер.: Естественные, общественные науки. 2011. Вып. 2. С. 10—13.
4. *Минеева Л. Ю., Скворцова О. Е.* Сведения о ржавчинных грибах ботанического сада Ивановского государственного университета // Вестник Ивановского государственного университета. Сер.: Естественные, общественные науки. Иваново, 2013. Вып. 2. С. 33—34.
5. *Минкявичус А. И.* Определитель ржавчинных грибов Литовской ССР. Вильнюс, 1984. 437 с.

УДК 547.455.623

Т. Г. Волкова, И. О. Таланова

ИК-СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРОЕНИЯ ГЛЮКОЗЫ В ПРОДУКТАХ КОНДЕНСАЦИИ С ПЕНТИЛОВЫМ ЭФИРОМ *p*-АМИНОБЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТЫ

Проведен сравнительный анализ экспериментального и модельных ИК-спектров продуктов взаимодействия глюкозы и пентилового эфира *p*-аминобензойной кислоты для диапазона 1170—1120 см⁻¹. Показано, что в ходе реакции наиболее вероятно образование пентилового эфира *p*-(*N*- α -D-глюкопиранозид)аминобензойной кислоты.

Ключевые слова: ИК-спектры, глюкоза, потенциальные мезогены, моделирование.

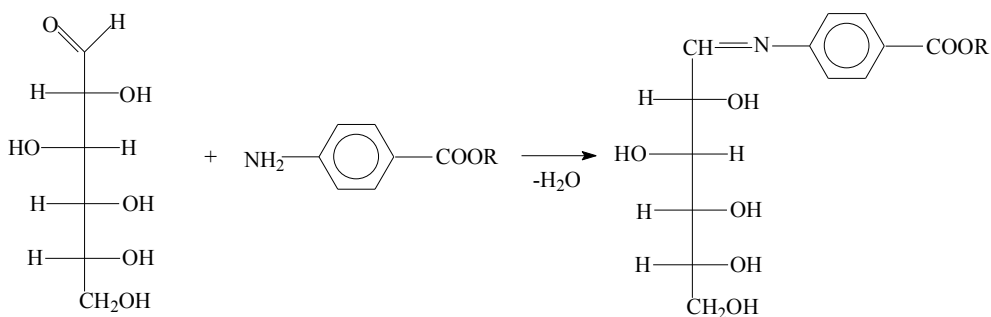
A comparative analysis of the experimental and simulated IR-spectra of the products of the interaction of glucose and pentyl ester of *p*-aminobenzoic acid in the range 1170—1120 cm⁻¹ has been carried out. It is shown that during reaction the formation of *n*-pentyl ester (*N*- α -D-glucopyranoside)aminobenzoic acid is most likely.

Key words: IR-spectra, glucose, potential mesogens, modeling.

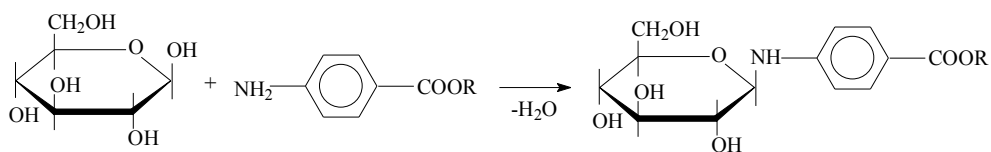
Теоретические и экспериментальные исследования производных аминов, содержащих в своей структуре фрагменты, способные образовывать водородные связи, создают базис для развития представлений о молекулярном строении вещества и его надмолекулярном устройстве, создании и функционировании материалов с заранее заданными свойствами. В частности, модификация аминов углеводами позволяет получать потенциально мезогенные соединения, способные к самосборке супрамолекулярных жидких кристаллов (ЖК) за счет специфических межмолекулярных взаимодействий активных заместителей в молекулах мезогенов. Поэтому, несмотря на солидный возраст исследований ЖК с углеводным компонентом [7], интерес к ним растет в связи с открывающимися возможностями использования новых структур и фаз не только в оптике, но и в современных областях нано- и биотехнологий [4—6, 9—12].

В зависимости от того, какая форма глюкозы (алициклическая или циклическая) является в растворе преобладающей, при ее взаимодействии со сложными эфирами *p*-аминобензойной кислоты возможно образование различных продуктов (рис. 1).

© Волкова Т. Г., Таланова И. О., 2015



a



б

Рис. 1. Взаимодействие глюкозы и сложных эфиров *p*-аминобензойной кислоты с образованием:

a — сложных эфиров *n*-(*N*-глюкозилиден)аминобензойной кислоты;
б — сложных эфиров *n*-(*N*- α -D-глюкопиранозид)аминобензойной кислоты

Ранее [13] было проведено квантово-химическое моделирование таутомерного равновесия глюкозы в этаноле и установлено, что в данном растворителе преобладает ее циклическая форма.

Интерпретация отличительных спектральных признаков производных моносахаридов имеет важное значение, так как непосредственно связана с идентификацией соединений. Для углеводов данная задача осложняется характером спектров, которые имеют нечеткую структуру вследствие перекрытия большого числа близкорасположенных полос поглощения [1, 2].

В настоящей работе построены модели возможных продуктов взаимодействия глюкозы с пентиловым эфиром *n*-аминобензойной кислоты (рис. 1). Минимизирована энергия, рассчитана структура, частоты нормальных колебаний в гармоническом приближении и интенсивности в ИК-спектре молекулы.

Экспериментальная часть

ИК-спектр продукта взаимодействия глюкозы с пентиловым эфиром *n*-аминобензойной кислоты регистрировался на спектрометре Avatar 360 FT-IR ESP в диапазоне 4000–400 см⁻¹.

Квантово-химические расчеты модельных соединений проводились в рамках теории самосогласованного реакционного поля в программе PC GAMESS методом DFT/B3LYP/6-31G (*d*, *p*) [8] с полной оптимизацией геометрии без ограничений по симметрии. Для всех стационарных точек вычислялась матрица вторых производных. Исследуемые структуры имели положительные частоты.

Теоретические спектры продуктов взаимодействия глюкозы с пентиловым эфиром *n*-аминобензойной кислоты были получены на основе результа-

тов расчета силового поля в гармоническом приближении, собственных частот колебаний и интенсивностей в ИК-спектре. Визуализация результатов расчета проводилась в программе ChemCraft [14]. Полуширина для всех полос полагалась равной 20 см^{-1} [1].

Результаты и их обсуждение

Сравнительный анализ экспериментального и теоретических спектров показал, что все рассматриваемые спектры содержат три диапазона частот, в которых проявляются различные по форме колебания.

Присутствие полосы в диапазоне $1120\text{—}1170 \text{ см}^{-1}$ является характерной [1—3], свойственной циклическому строению моносахаридов. В интересующем нас диапазоне в экспериментальном спектре (рис. 2) наблюдаются две полосы с частотами 1173 см^{-1} и 1120 см^{-1} .

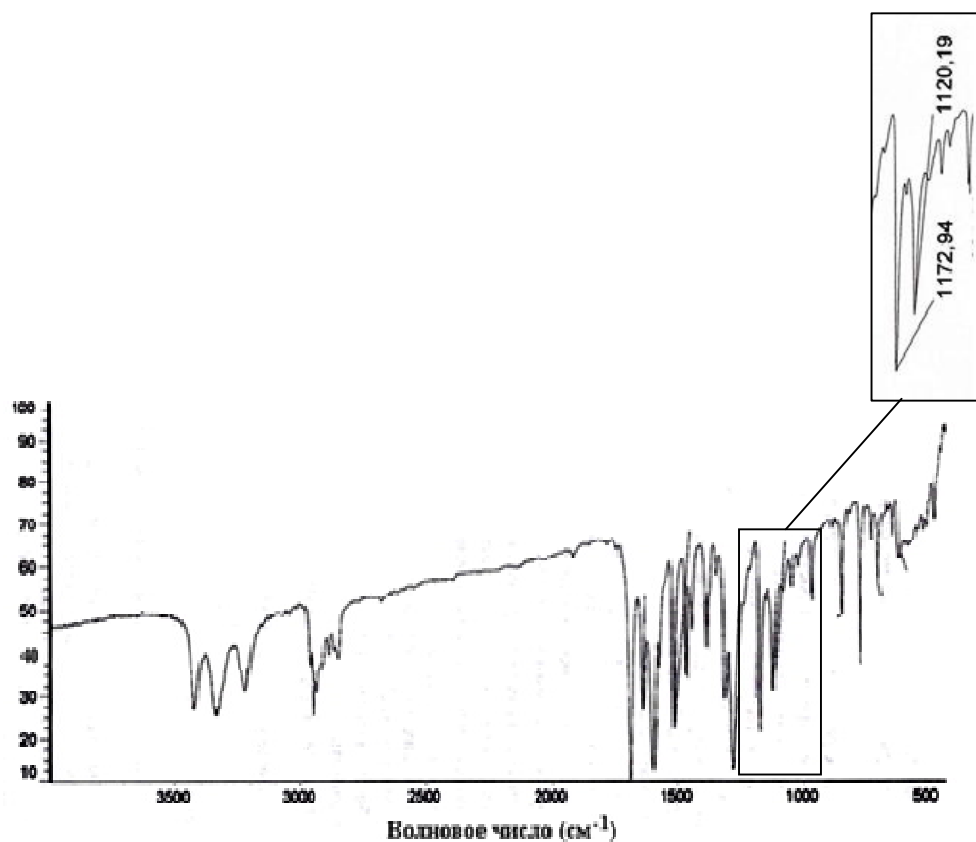


Рис. 2. Экспериментальный ИК-спектр продукта реакции конденсации глюкозы с пентиловым эфиром *p*-аминобензойной кислоты

В нижеприведенной таблице представлены частоты колебаний, интенсивности и отнесение форм колебаний в молекулах возможных продуктов конденсации глюкозы с пентиловым эфиром *p*-аминобензойной кислоты.

Сравнивая теоретические спектры (рис. 3) возможных продуктов исследуемой реакции (рис. 1), можно отметить хорошее соответствие частот, характеризующих колебания бензольного кольца (табл., строки 1, 7), интенсивность которого в пентиловом эфире *p*-(*N*-глюкозилиден)-аминобензойной кислоты больше почти в 2 раза.

Смешанные валентно-деформационные колебания, охватывающие большой фрагмент молекулы (алкильную цепочку, сложноэфирную группу и бензольное кольцо — см. табл.), также имеют близкие значения частот в обеих молекулах, но интенсивность колебаний заметно отличается. В пентиловом эфире п-(N- α -D-глюкопиранозид)аминобензойной кислоты высокую активность проявляет сложноэфирная группа в сочетании и с бензольным кольцом, и с алкильной цепочкой (табл., строки 2, 4). Во втором соединении она никак не проявляет себя, что отражается в близких значениях интенсивностей колебаний бензольного кольца и алкильной цепочки. Отсутствие этих линий в экспериментальном спектре, как уже отмечалось выше, может являться следствием перекрывания близкорасположенных полос поглощения [1, 2].

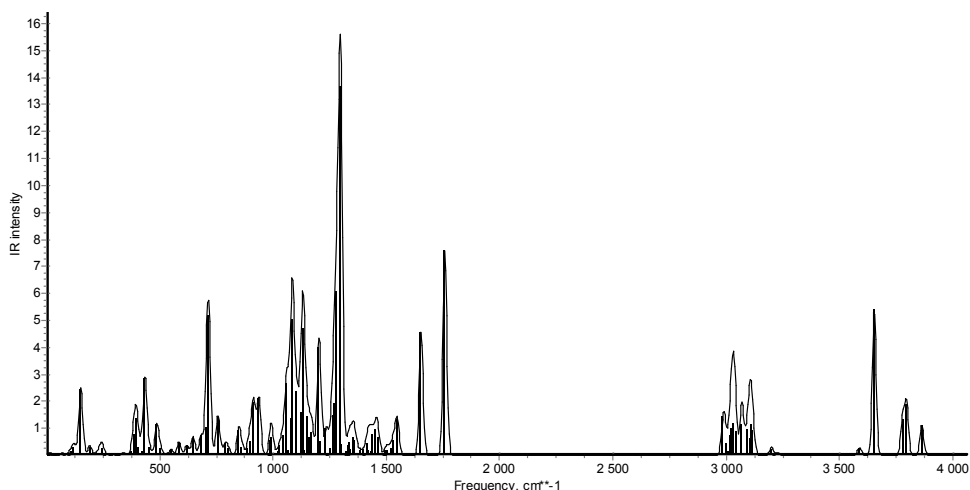
Частота, интенсивность и отнесение форм колебаний в молекулах пентилового эфира п-(N- α -D-глюкопиранозид)аминобензойной кислоты и пентилового эфира п-(N-глюкозилден)аминобензойной кислоты в диапазоне 1120—1170 см⁻¹

№ п/п	Частота колебаний, см ⁻¹	I _{отн}	Отнесение*
Пентиловый эфир п-(N-α-D-глюкопиранозид)аминобензойной кислоты			
1	1125	1.59	бензольное кольцо
2	1132	4.69	бензольное кольцо и сложноэфирная группы
3	1140	0.17	бензольное кольцо и алкильная цепочка
4	1149	1.49	алкильная цепочка и сложноэфирная группы
5	1163	0.66	глюкопиранозное кольцо
6	1171	0.84	
Пентиловый эфир п-(N-глюкозилден)аминобензойной кислоты			
7	1129	2.94	бензольное кольцо
8	1137	1.47	бензольное кольцо и алкильная цепочка
9	1142	0.33	линейная глюкоза
10	1151	1.86	бензольное кольцо и алкильная цепочка

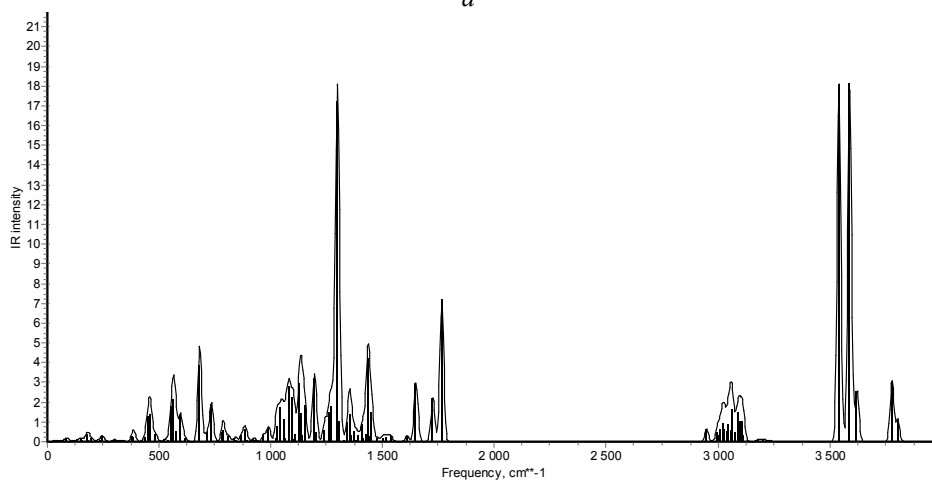
* Все колебания были определены как смешанные валентно-деформационные.

Колебания глюкозного фрагмента как в одной, так и во второй молекуле исследуемых соединений характеризуются невысокой интенсивностью. Вероятно, это связано с большей жесткостью глюкозного фрагмента из-за наличия в нем водородных связей.

В целом, можно отметить большую близость теоретического спектра пентилового эфира п-(N- α -D-глюкопиранозид)аминобензойной кислоты к экспериментальному. Этот факт, а также отсутствие в экспериментальном спектре колебания, соответствующего линейному глюкозному фрагменту, позволяют сделать вывод о том, что с пентиловым эфиром п-аминобензойной кислоты взаимодействует глюкоза, находящаяся в циклической форме.



а



б

Рис. 3. Теоретические ИК-спектры

а — пентилового эфира п-(N- α -D-глюкопиранозид)аминобензойной кислоты

б — пентилового эфира п-(N-глюкозилиден)аминобензойной кислоты

Библиографический список

1. Бабков Л. М., Ивлиева И. В., Королевич М. В. // Известия Саратовского университета. Новая серия. 2012. Сер. Физика. Т. 12, № 2. С. 76—85.
2. Королевич М. В., Жбанкова М. Р., Пиоттух-Пелецкий В. Н., Жбанков Р. Г. // Журн. структур. химии. 2007. Т. 48, № 5. С. 880—889.
3. Прима А. М., Жбанов Р. Г., Марупов Р. // Журн. структур. химии. 1964. Т. 5, № 6. С. 845—850.
4. Champagne B., Guthmuller J., Perreault F., Soldera A. // J. Phys. Chem. C. 2012. Vol. 116, № 13. P. 7552—7560.
5. Deebika B., Balamurugan S., Kannan P. // Journal of Polymer Research. 2012. Vol. 19, № 7. P. 9920—9926.
6. Demus D. // Molecular crystals and liquid crystals. 2011. Vol. 542, № 1. Special Issue: SI. P. 3—15.
7. Fischer E., Helaerich B. // Justus Liebigs Ann. Chem. 1911. Vol. 383, № 1. P. 68—91.

8. *Granovsky A. A.* // PCGAMESS v. 7.1. URL: <http://classic.chem.msu.su/gran/gamess/index.html> (дата обращения: 17.02.2015).
9. *Hussein M. A., Abdel-Rahman M. A., Asiri A. M., Alamry Kh. A., Aly K. I.* // *Designed Monomers and Polymers*. 2012. Vol. 15, № 5. P. 431—463.
10. *Jan P. F., Lagerwall, Giusy Scalia* // *Current Applied Physics*. 2012. V. 12, № 6. P. 1387—1412.
11. *Schiller P., Schlacken H.* // *Liquid Crystals*. 1998. Vol. 24, № 4. P. 619—626.
12. *Uchida Y., Suzuki K., Tamura R.* // *J. Phys. Chem. B*. 2012. Vol. 116, № 32. P. 9791—9795.
13. *Volkova T. G., Sterlikova I. O., Soboleva Yu. V.* // *Russian Journal of General Chemistry*. 2014. Vol. 84, № 6. P. 1212—1214.
14. *Zhurko G. A., Zhurko D. A.* // *Chemcraft v. 1.4 beta*. URL: <http://www.chemcraftprog.com> (дата обращения: 14.03.2015).

УДК 547.269.31:541.145.1:544.362.4:544.183.25

Е. Н. Крылов

ДИССОЦИАЦИЯ АРОМАТИЧЕСКИХ СУЛЬФОКИСЛОТ В ГАЗОВОЙ И ВОДНОЙ ФАЗАХ: КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ рКа

Квантово-химический метод на уровне теории DFT/M06/6-311+G*/PCM и количественной теории ЖМКО в рамках подхода QSAR-QSPR позволяет определять величины рКа сульфокислот с точностью, достаточной для оценки их каталитической активности. На примере процессов диссоциации сульфокислот в водных растворах показана применимость DFT-теории химической реактивности к равновесным органическим реакциям.

Ключевые слова: сульфокислоты, диссоциация, теория Пирсона, электрофильность, электростатический потенциал.

The use of quantitative theory HSAB within the framework of approach QSAR-QSPR at a rate of quantum-chemical dynamic indexes allows thereby to determine рКа values of sulphonic acids. On example of the dissociation processes of sulphonic acids in water solutions applicability of DFT-theory of chemical reactivity to organic reaction in equilibria is shown.

Key words: sulphonic acids, dissociation, Pearson's HSAB-theory, electrophilicity, electrostatic potential.

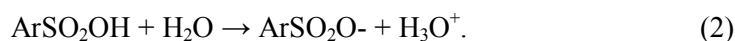
Введение

Ароматические сульфокислоты (ArSO_3H) представляют собой класс соединений, кислые свойства которых используются промышленно и лабораторно для катализа химических реакций [7]. Каталитическая активность сульфокислот в соответствии с известным соотношением Бренстеда $\lg k(\text{HA}) = a + b \cdot \text{pKa}$ [2] (k — константа реакции, катализируемой кислотой HA, a и b — некоторые постоянные) пропорциональна рКа, знание величин которых, следовательно, практически полезно. Поскольку они представляют собой производные H_2SO_4 , их рКа находятся в отрицательной области значений, определение которых достаточно затруднительно [18]. В этой связи

представляет интерес разработка теоретических способов расчета рКа такого порядка величин, поскольку в зависимости от используемых методов (УФ-спектроскопия, ЯМР ^{13}C , кондуктометрия, потенциометрия и т. д.) определяемые значения рКа бензолсульфокислоты изменяются от 3.0 до -7.5 [4]. Предложенный авторами [4] способ определения рКа сульфокислот по данным растворимости их гидратов позволил установить, что действительное его значение составляет -5.74 [5]. В последней работе определены рКа для ряда ароматических сульфокислот.

В связи с развитием методов квантовой химии, в частности теории DFT, и теоретических концепций на ее основе появилась возможность использовать для этой цели как классический термодинамический подход, так и количественную теорию ЖМКО в современном развитии. Определение рКа при этом возможно по термодинамическому соотношению (1) (где ΔG — свободная энергия Гиббса равновесной реакции депротонирования (2)), а также на основе метода QSAR-QSPR [17] в приложении к протолитическим равновесиям кислот и оснований.

$$\ln K_a = -\Delta G/RT \quad (1)$$



При этом используются зависимости между кислотностью (основностью) органических соединений и квантово-химическими дескрипторами молекулярных структур, соответствующих количественной теории ЖМКО Пирсона, в свою очередь опирающейся на достижения теории DFT [10].

Это позволяет определить рКа методом квантово-химических дескрипторов (в частности, электрофильности), что было сделано для некоторых ароматических ОН-кислот [12]. После квантово-химического расчета структур молекул кислот на уровне теории B3LYP/6-31G(d)(PCM) с полной оптимизацией геометрии авторами [12] были определены величины ΔG депротонирования из термодинамического выражения (3) с использованием свободных энергий Гиббса (G) для частиц, участвующих в равновесии, аналогичном (2), в водной среде (aq). Электрофильность (ω) определена из выражения (4), где электронный химический потенциал (вспомогательная величина) $\mu = 0.5*[E(\text{LUMO}) + E(\text{HOMO})]$ и жесткость $\eta = 0.5*[E(\text{LUMO}) - E(\text{HOMO})]$ рассчитаны в соответствии с теоретическим базисом концептуальной DFT [10]:

$$\Delta G_D = G[\text{ArSO}_2\text{O}^-(\text{aq})] + G[\text{H}_3\text{O}^+(\text{aq})] - G[\text{ArSO}_2\text{OH}(\text{aq})] - G[\text{H}_2\text{O}(\text{aq})] \quad (3)$$

$$\omega = \mu^2/(2*\eta) \quad (4)$$

Для ряда нейтральных кислот Бренстеда термодинамический метод распространен на кислотность в неводных средах (MeCN, дихлорэтан) [15]. Метод QSAR на основе молекулярного электростатического потенциала использован для определения рКа замещенных бензойных кислот [13]. Данные для рКа сульфокислот весьма ограничены.

Результаты и их обсуждение

По методике, аналогичной [12], в данной работе рассчитаны рКа тех сульфокислот, значения концентрационных рКа которых не определены в работе [5]. В качестве базисной серии значений рКа приняты литературные данные, приведенные в табл. 1. В связи с неопределенностью значения рКа для гидроксоний-катиона (см. примечание к табл. 1) даны два значения рКа

для каждой сульфокислоты (методы 1 и 2). Третий метод отличается от двух предыдущих теоретическим базисом и опирается на значение функции кислотности Гаммета, наблюдаемое при минимальной растворимости моногидрата сульфокислоты $\text{ArSO}_2\text{OH}\dots\text{H}_3\text{O}^+$.

Расчет структур молекул сульфокислот и их анионов, а также молекул воды и гидроксоний-катиона проведен программным комплексом NWChem ver. 6.0 [21] на уровне теории DFT/M06/6-311+G* в рамках метода IEF-PCM. В табл. 2 приведены значения свободных энергий Гиббса для указанных структур, а также аналогичные величины для процесса (1).

Таблица 1

Величины pKa ароматических сульфокислот XPhSO₃H (базисная серия, 1, 2, 3 — методы расчета pKa)

X	pKa(1)	pKa(2)	pKa(3) *)
4-Me	-4.9	-5.6	-5.8
4-Cl	-5.8	-6.5	-6.2
4-Br	-6.0	-6.7	-6.3
4-MeO	-5.2	-5.9	-5.9
3-NO ₂	-7.1	-7.8	-6.9
3-COOH	-6.8	-7.5	-6.7

Примечание. (1) pKa (H_3O^+) = -6.6, (2) pKa (H_3O^+) = -5.9, (3) pKa(ArSO_2OH) = 0.5*pKa $\text{ArSO}_2\text{OH}\dots\text{H}_3\text{O}^+$, *) определение pKa по функции кислотности Гаммета сернокислотного раствора при минимальной растворимости сульфокислоты в виде моногидрата.

Между pKa и ΔG_D имеет место линейная корреляция, обусловленная термодинамическим соотношением (1). В табл. 3 приведены параметры корреляционных соотношений между pKa и свободными энергиями Гиббса процесса (2).

Таблица 2

Свободные энергии Гиббса (G) для сульфокислот XPhSO₂OH и их анионов в водной среде и энергии депротонирования ΔG_D

№	X	G		- ΔG_D
		сульфокислота	Анион	
1	4-Me	-561665.914	-561404.4678	25.26
2	4-Cl	-825431.9545	-825172.3501	23.42
3	4-Br	-2151877.523	-2151618.876	22.46
4	4-OMe	-608851.6364	-608591.4277	24,02
5	3-NO ₂	-665332.044	-665075.7001	20.16
6	3-COOH	-655333.285	-655076.0871	21.01

Примечание. Здесь и далее: 1 — 4-MePhSO₂OH, 2 — 4-ClPhSO₂OH, 3 — 4-BrPhSO₂OH, 4 — 4-MeOPhSO₂OH, 5 — 3-NO₂PhSO₂OH, 6 — 3-НООСPhSO₂OH, 7 — PhSO₂OH, 8 — CH₃SO₂OH, 9 — 2,4,5-Мe₃PhSO₂OH, 10 — цикло-С₆Н₅NHСO₂OH, 11 — 2-нафталинсульфокислота, 12 — 2,4,6-(NO₂)₃PhSO₂OH, 13 — 2,4,6-Мe₃PhSO₂OH, 14 — CF₃SO₂OH. G и ΔG_D — ккал/моль.

Таблица 3

**Параметры корреляций рКа базисной серии сульфокислот
на свободные энергии Гиббса депротонирования в водной фазе**

рКа	A ± sA	B ± sB	R	SD	P
рКа1	-16.16 ± 0.76	0.449 ± 0.031	0.990	0.134	1.39*10 ⁻⁴
рКа2	-16.86 ± 0.72	0.449 ± 0.031	0.990	0.134	1.39*10 ⁻⁴
рКа3	-11.40 ± 0.41	0.224 ± 0.018	0.987	0.775	2.47*10 ⁻⁴

Примечание. Здесь и далее в параметрах корреляций: *R* — эмпирический коэффициент корреляции, *SD* — стандартное отклонение, усредненное по выборке, *P* — вероятность случайного появления линейной корреляции [1].

Таблица 4

Определение рКа для ароматических сульфокислот ArSO₂OH

N Ar- SO ₂ H	G		-ΔG _D	рКа1	рКа2	рКа3
	сульфокислота	анион				
7	-537023.99	-536764.40	23.40	-6.36	-6.36	-6.15
8	-416808.72	-416548.60	24.02	-5.38	-6.08	-6.01
9	-610946.73	-610685.83	24.71	-5.07	-5.77	-5.85
10	-573968.83	-573707.31	25.34	-4.79	-5.49	-5.71
11	-633354.90	-633095.31	23.41	-5.66	-6.36	-6.15
12	-921923.45	-921675.46	11.80	-11.2	-11.9	-8.90
13	-610940.10	-610678.91	25.01	-4.94	-5.64	-5.78
14	-603643.20	-603395.86	11.15	-11.2	-11.9	-8.89

Примечание. *) Значение рКа CF₃SO₂OH с учетом результата табл. 5 согласуется с данными [15] (-12).

Указанные соотношения позволяют на основе расчета ΔG_D определить значения рКа для тех сульфокислот (табл. 4), для которых они неизвестны.

С учетом значений рКа для сульфокислот N 7—14 (табл. 4) параметры корреляционных соотношений принимают значения, указанные в табл. 5. Функционал M06 в сочетании с базисом 6-311+G* при определении свободных энергий Гиббса депротонирования сульфокислот в газовой фазе обеспечивает результат, сопоставимый с результатом на уровне теории MP2/6-311++G** [6], как это следует из сравнения литературных данных [6] и полученных в данной работе (табл. 6).

Таблица 5

**Параметры корреляций рКа сульфокислот
на свободные энергии Гиббса депротонирования в водной фазе**

рКа	A ±sA	B ± sB	R	SD	P
рКа1	-16.35 ± 0.19	0.454 ± 0.008	0.998	0.209	< 10 ⁻⁴
рКа2	-17.36 ± 0.11	0.471 ± 0.004	0.999	0.118	< 10 ⁻⁴
рКа3	-11.48 ± 0.05	0.228 ± 0.002	0.999	0.055	< 10 ⁻⁴

Между газофазными и жидкофазными свободными энергиями депротонирования имеет место линейная зависимость (5), соответствующая соблюдению принципа линейности свободных энергий и указывающая на эквивалентность функционала M06 методу MP2 при учете энергии электронной корреляции.

$$\begin{aligned} \Delta G_D(298\text{K, газ, MP2/6-311++G**}[6]) = & -(14.61 \pm 23.61) + \\ & + (1.046 \pm 0.079) * \Delta G_D(298\text{K, аq, M06/6-311+G*}), \\ R = 0.989, SD = 1.42, N = 6, P = 1.84 * 10^{-4}. \end{aligned} \quad (5)$$

Таблица 6

**Свободные энергии Гиббса депротонирования сульфокислот
XPhSO₂OH в газовой фазе (сопоставление MP2 и M06)**

X или RSO ₂ OH	ΔG_D , ккал/моль [6, 15], MP2/6-311++G**	ΔG_D , ккал/моль, M06/6-311+G*
H (***)	311.92	311.04
2-NO ₂	305.37 *)	306.79 *)
3-NO ₂	300.26	298.61
4-NO ₂	299.88	297.47
2,4-(NO ₂) ₂	295.92 *)	295.61 *)
2,4,6-(NO ₂) ₃	288.25 *)	286.95
4-Cl		314.31
CH ₃ SO ₂ OH		313.10
CF₃SO₂OH	298.75 [23] **)	294.37
3-FPhSO ₂ OH		306.91
4-FPhSO ₂ OH		307.90
3-ClPhSO ₂ OH		314.31

Примечание. *) Для наиболее устойчивого конформера с внутримолекулярной водородной связью. **) Экспериментально в установке потока с селекцией ионов (selected-ion flow tube) [23]. ***) Экспериментально [24] 310.23 ± 6.69 ккал/моль

Как следует из литературных данных [6, 14], CF₃SO₃H наряду с ди- и тринитробензолсульфокислотами [15] представляет собой сверхсильную кислоту (табл. 6) по определению Коппеля [14].

Для использования количественной теории ЖМКО рассчитаны энергии граничных орбиталей в нейтральных молекулах сульфокислот и заряды на атоме кислорода, несущем протон как в нейтральных молекулах [Q(O)⁰], так и в их анионах [Q(O)⁻] для определения функций Фукуи, представляющих собой разность этих величин $FF(O) = Q(O)^0 - Q(O)^-$. Заряды на реакционных центрах определены в схеме Хиршфельда [16] программным комплексом ADF 2013 [8] (табл. 7).

Таблица 7

**Определение энергий граничных орбиталей и функций Фукуи
для сульфокислот. Номера соответствуют сульфокислотам в табл. 2 и 4.
E — хартри, η , ω — eV, Q, FF — e**

N	E(HOMO)	E(LUMO)	η	ω	Q(O) ⁰	Q(O) ⁻	FF(O)	ω (лок) *)
1	-0.28727	-0.05149	3,21	3.31	-0.221	-0.455	-0.233	0.773
2	-0.28954	-0.06141	3,10	3.67	-0.217	-0.449	-0.232	0.851
3	-0.28462	-0.06249	3,02	3.69	-0.217	-0.449	-0.232	0.855
4	-0.26821	-0.04561	3,03	3.01	-0,223	-0.456	-0.232	0.699
5	-0.31493	-0.11385	2,74	6.22	-0.210	-0.442	-0.232	1.441
6	-0.30408	-0.07603	3,10	4.31	-0.215	-0.447	-0.233	1.003
7	-0.29419	-0.05466	3,26	3.46	-0.219	-0.453	-0.233	0.806
8	-0.33659	-0.03112	4,16	3.01	-0.215	-0.470	-0.255	0.767
9	-0.26815	-0.0482	2,99	3.09	-0.216	-0.447	-0.231	0.716
10	-0.3034	-0.03222	3,69	2.83	-0.215	-0.452	-0.238	0.672
11	-0.25507	-0.06911	2,53	3.85	-0.218	-0.451	-0.233	0.897
12	-0.33507	-0.14511	2,58	8.26	-0.189	-0.412	-0.222	1.833
13	-0.27232	-0.0497	3,029	3.17	-0.221	-0.439	-0.218	0.692

$$*) \omega(\text{лок}) = \omega * \text{FF}(\text{O}) [10]$$

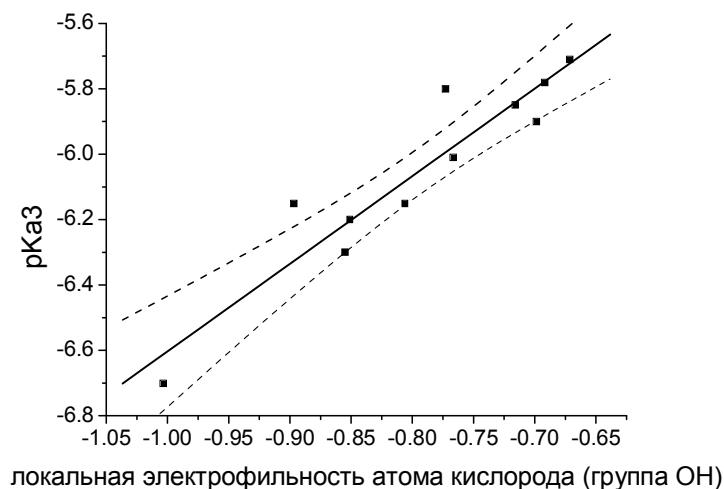


Рис. 1. Соотношение между кислотностью сульфокислот и электрофильностью атома кислорода, отдающего протон при их диссоциации

Корреляции (6—8, 8 — на рис. 1) имеют достаточно хорошее качество с точки зрения статистики, поскольку коэффициенты корреляции проходят проверку на значимость по критерию Стьюдента [1], а вероятность случайного появления их менее $10^{-3} - 10^{-4}$.

$$\text{pKa1} = (-1.166 \pm 0.874) + (5.507 \pm 1.094) * \omega(\text{лок})(\text{O}), R = 0.859, SD = 0.352, N = 11, \\ P = 7.034 * 10^{-4}. \quad (6)$$

$$\text{pKa2} = (-1.870 \pm 0.587) + (5.422 \pm 0.734) * \omega(\text{лок}) \text{ молек.}, R = 0.927, SD = 0.236, N = 11, \\ P < 0.0001. \quad (7)$$

$$\text{pKa3} = (-3.92 \pm 0.26) + (2.68 \pm 0.33) * \omega(\text{лок}), R = 0.939, SD = 0.106, N = 11, \\ P < 0.0001 \quad (8)$$

Указанная корреляция показывает, что кислотность сульфокислот пропорциональна локальной электрофильности атома кислорода, отдающего протон. Это соответствует физическому смыслу электрофильности, которая представляет собой электроноёмкость реакционного центра в процессе депротонирования и приобретения отрицательного заряда и пропорциональна энергии стабилизации системы при увеличении этого заряда. Как известно, кислотность по Бенстеду — Лоури увеличивается при стабилизации аниона [3].

Другим современным дескриптором, основанным на концептуальной теории DFT [13], используемым для расчета кислотности по Бренстеду — Лоури, является электростатический потенциал [9] атома ($V_{\text{эсп}}$), отдающего протон в процессе кислотной диссоциации — в данном случае атома кислорода гидроксильной группы сульфогруппы. Как показывают соотношения (9—11) и рис. 2, этот параметр также адекватно отражает структурно-электронные особенности сульфокислот и позволяет определить величины pKa, до сих пор не известные.

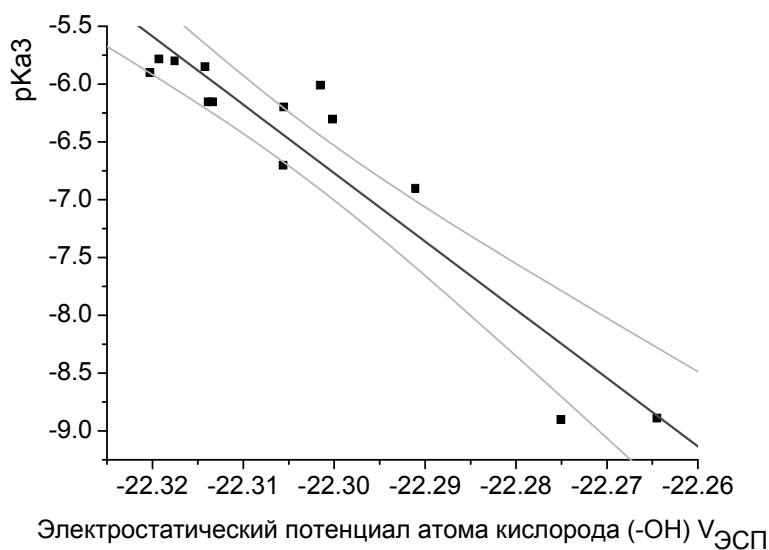


Рис. 2. Соотношение между электростатическим потенциалом атома кислорода в группе ОН сульфокислот и кислотностью (pK_{a2})

$$pK_{a1} = (-2674.79 \pm 357.64) - (119.64 \pm 16.04) \cdot V_{\text{ЭСП}},$$

$$R = 0.928, SD = 0.90, P < 10^{-4}. \quad (9)$$

$$pK_{a2} = (-2738.18 \pm 331.00) - (122.45 \pm 14.84) \cdot V_{\text{ЭСП}},$$

$$R = 0.940, SD = 0.83, P < 10^{-4}. \quad (10)$$

$$pK_{a3} = (-1325.11 \pm 141.88) - (59.12 \pm 6.36) \cdot V_{\text{ЭСП}},$$

$$R = 0.942, SD = 0.38, P < 10^{-4}. \quad (11)$$

Наблюдаемое явление согласуется с представлением о влиянии заместителей на кислотные свойства кислот Бренстеда — Лоури, поскольку известно, что электростатический потенциал коррелирован [11] на σ -константы Ван Беккума [22] и Тафта σ_0 [20]. При этом электронодонорные заместители смещают величину электростатического потенциала в более отрицательную область значений, акцепторы, соответственно, производят противоположный эффект.

Заключение

Таким образом, квантово-химический метод даже при сравнительно среднем уровне теории расчета (DFT/M06/6-311+G*/PCM) позволяет определять величины pK_a сульфокислот с точностью, достаточной для оценки их каталитической активности и сопоставления с аналогичными величинами для тех сульфокислот, pK_a которых определены экспериментально.

Применение количественной теории ЖМКО в рамках подхода QSAR-QSPR на уровне ряда квантово-химических динамических индексов позволяет таким образом оценить величины pK_a сульфокислот, одновременно демонстрируя применимость теории химической реактивности, основанной на DFT [19], к органическим равновесным реакциям на примере процессов диссоциации сульфокислот в водных растворах.

Библиографический список

1. Ахназарова С. А., Кафаров В. В. Методы оптимизации эксперимента в химии и химической технологии. М. : Высшая школа, 1985. 327 с.
2. Гамет Л. Основы физической органической химии. М. : Мир, 1972. 536 с.
3. Днепровский А. С., Темникова Т. И. Теоретические основы органической химии. Л. : Химия, 1979. 520 с.
4. Козлов В. А., Березин Б. Д., Попкова И. А. // ЖФХ. 1981. Т. 55, № 6. С. 1481—1486.
5. Козлов В. А., Попкова И. А., Березин Б. Д. // ЖФХ. 1981. Т. 55, № 6. С. 1475—1480.
6. Нуркевич Т. В., Гиричева Н. И., Иванов С. Н. Энергии депротонирования сульфогруппы нитрозамещенных бензолсульфоново́й кислоты // Теоретическая и экспериментальная химия жидкофазных систем : тезисы докладов VII Всероссийской школы-конференции молодых ученых (Крестовские чтения). Иваново, 2012. С. 71.
7. Смит В. А., Дильман А. Д. Основы современного органического синтеза. М. : БИНОМ, 2009. 750 с.
8. ADF 2013, SCM, Theoretical Chemistry, Vrije Universiteit, Amsterdam, The Netherlands. URL: <http://www.scm.com> (дата обращения: 16.03.2015).
9. Burger S. K., Liu S. B., Ayers P. W. // J. Phys. Chem. A 2011. Vol. 115. P. 1293—1304.
10. Chemical reactivity theory. A density functional view / Chattaraj P. K., ed. Boca Raton : CRC Press, 2009. 576 p.
11. Galabov B., Pieva S., Schaefer H. F. III. // J. Org. Chem. 2006. Vol. 71, № 17. P. 6382—6387.
12. Gupta K., Giri S., Chattaraj P. K. // New J. Chem. 2008. Vol. 32. P. 1945—1952.
13. Huang Y., Liu L. H., Liu W. H., Liu S. G., Liu S. B. // J. Phys. Chem. A 2011. Vol. 115. P. 14697—14707.
14. Koppel I. A., Taft R. W. // J. Am. Chem. Soc. 1994. Vol. 116. P. 3047—3050.
15. Raamat E., Kaupmees K., et al. // J. Phys. Org. Chem. 2013. Vol. 26, № 2. P. 162—170.
16. Saha S., Roy R. K., Ayers P. W. // Int. J. Quant. Chem. 2008. Vol. 109. Iss. 9. P. 1790—1806.
17. Seybold P. G. Quantum chemical-QSAR estimation of the acidities and basicities of organic compound // Advances in quantum chemistry. 2012. Vol. 64. P. 84—99.
18. Superacid chemistry / G. A. Olah, S. Prakash, A. Molnar, J. Sommer. 2nd ed. Hoboken : Wiley, 2009. 850 p.
19. Theoretical aspects of chemical reactivity / Toro-Labbe A., ed. Oxford : Elsevier, 2007. 321 p.
20. Taft R. W. // J. Phys. Chem. 1960. Vol. 64. P. 1805—1815.
21. Valiev M. et al. // Comput. Phys. Commun. 2010. Vol. 181. P. 1477—1489.
22. Van Bekkum H., Verkade P. E., Wepster B. M. // Recl. Trav. Chim. 1959. Vol. 78. P. 815—850.
23. Viggiano A. A., Henschman M. J., Dale F., Deakyne C. A., Paulson J. F. // J. Am. Chem. Soc. 1992. Vol. 114, № 11. P. 4299—4306.
24. Wang X. B., Ferris K., Wang L. S. // J. Phys. Chem. A 2000. Vol. 104. P. 25—33.

Е. Н. Крылов

НУКЛЕОФИЛЬНОЕ ЗАМЕЩЕНИЕ В ФЕНЭТИЛБРОМИДАХ КАК ФУНКЦИЯ ЛОКАЛЬНОЙ ЭЛЕКТРОФИЛЬНОСТИ

На основе количественной теории ЖМКО Пирсона в приближении локальной электрофильности проведена диагностика механизма реакции пиридинолиза замещенных фенэтилбромидов в среде MeCN. Показано, что независимо от типа механизма — S_N1 или S_N2 — скорость реакции определяется скоростью отрыва нуклеофуга (бромид-аниона), а переходное состояние реакции сдвинуто по перпендикулярной координате на диаграмме О'Феррала — Дженкса в сторону S_N1 механизма.

Ключевые слова: реакционная способность, фенэтилбромиды, теория ЖМКО, квантово-химические ИРС, электрофильность, функция Фукуи.

The investigation of the piridinolysis reaction mechanism of phenethyl bromides in ambience MeCN is carried out on base of the quantitative Pearson's HSAB theory in approach of local electrophilicity. It is shown that reactions velocity is defined by velocity of the nucleophuge take-off regardless of variety of the mechanism — S_N1 or S_N2 . Transition state of these reactions is shifted across the basic coordinate on O'Ferrall — Jenks diagram aside S_N1 .

Key words: reactionary ability, phenethyl bromides, HSAB theory, electrophilicity. Fukiu funktion.

Введение

Для реакции нуклеофильного замещения на атоме углерода и других гетероатомах предложены два механизма, один из которых относится к группе ассоциативно-диссоциативных (по классификации А. С. Днепровского [3]) и условно обозначается S_N1 , другой относят к группе согласованных механизмов с условным обозначением S_N2 . Первый из них включает в себя стадию обратимой диссоциации субстрата, которая определяет скорость всего процесса. Последующая стадия взаимодействия образовавшегося катиона с нуклеофилом является относительно быстрой. Второй механизм проходит в одну стадию и реализуется путем вытеснения уходящей группы (нуклеофуга) нуклеофилом в согласованном (хотя и не всегда синхронном) акте.

Реакции нуклеофильного замещения в фенэтилбромиде представляют интерес с теоретической стороны в связи с возможностью реализации в них спектра механизмов S_N1 — S_N2 — S_{AN} [8, 17]. Такие реакции наиболее детально исследованы для ряда процессов на sp^3 -атоме углерода [4]. Для них установлен ряд закономерностей и теоретических представлений, распространенных впоследствии на аналогичные процессы, протекающие на атомах серы, кремния и фосфора. Продолжением развития представлений о спектре механизмов S_N1 — S_N2 [16] и связанной с ними диаграмме О'Феррала — Дженкса [21] является представление о спектре механизмов S_N2 — S_N3 , обуславливающим тримолекулярность реакции [7]. При этом вторая молекула нуклеофильного реагента-растворителя, осуществляющего сольволиз, реализует общий или нуклеофильный катализ сольволиза.

Результаты и их обсуждение

В качестве модельного процесса нуклеофильного замещения на sp^3 -атоме углерода выбрана реакция пиридинолиза (пиридин на схеме обозначен как Nu) ядернозамещенных фенэтилбромидов (ФЭБ) в среде MeCN, для которых имеются надежные экспериментальные данные по константам скоростей как первого (K1 для механизма S_N1), так и второго порядка (K2 для механизма S_N2) (табл. 2 и 3 [18]). Растворитель (MeCN) не проявляет сольволитических свойств [1] и ведет себя только как непрерывная среда с диэлектрической проницаемостью $\epsilon = 36.1$ [5] при 308.15 К (температура эксперимента), что облегчает его учет при квантово-химическом расчете.

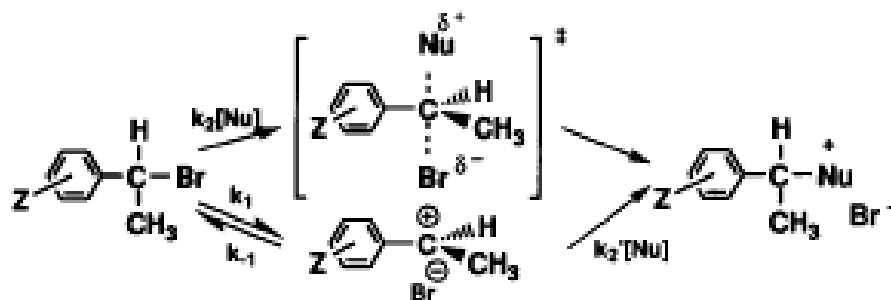


Схема. Пиридинолиз замещенных ФЭБ в MeCN при 35 °C (308.15K)

Реакционная способность органических соединений в настоящее время достаточно успешно описывается [24] на основе концепции жестких и мягких кислот и оснований (ЖМКО), введенной в химический обиход Пирсоном [25] и переведенной на количественную основу Парром [22] путем введения количественного представления о химической жесткости как параметре, сопутствующем электроотрицательности. Это позволило придать физический смысл таким эмпирическим химическим концепциям, как электроотрицательность, электронный химический потенциал, молекулярная химическая жесткость и мягкость [34]. Развитие теории функционала плотности в квантовой химии [23], в свою очередь, позволило получить теоретическое обоснование химической реакционной способности [28] в рамках так называемой концептуальной теории DFT [13].

Одним из направлений, развиваемых в рамках этой теории, является теоретическое обоснование и проверка возможности практического применения молекулярных параметров — дескрипторов, иначе — индексов реакционной способности (ИРС) — для описания реакционной способности механизмов реакций и структур интермедиатов и переходных состояний [30]. ИРС получены путем приложения теории DFT [33] к теории ЖМКО и распространены на теорию реакционной способности органических соединений [24].

Эти ИРС — химический электронный потенциал (μ), глобальная жесткость (η) и электрофильность (ω) представляют собой глобальные (отнесенные ко всей молекуле или другой химической частице) параметры, используемые для предсказания и описания химической реакционной способности и субстратной селективности. Для характеристики активности отдельных реакционных центров (позиционной селективности) введены локальные интерпретации этих параметров [12, 32], опирающиеся на локальный ИРС — функцию Фукуи (FF) и представляющие собой произведения глобальных параметров

на FF. В частности, локальная электрофильность — $\omega(\text{лок})$ есть характеристика реакционного центра, равная $\omega(\text{лок}) = FF * \omega$.

Здесь $\mu = 0.5 * [E(\text{HOMO}) + E(\text{LUMO})]$, $\eta = 0.5[E(\text{LUMO}) - E(\text{HOMO})]$, $\omega = 0.5 * \mu^2 / \eta$. $E(\text{HOMO})$ — энергия высшей занятой, $E(\text{LUMO})$ — энергия низшей вакантной молекулярных орбиталей.

Достоинством таких ИРС является их динамический характер, поскольку они характеризуют реакционную способность в динамике перемещения электронной плотности (заряда) [13] и выравнивания электроотрицательности в химическом процессе [14]. Как известно, электронный химический потенциал представляет собой первую производную энергии по числу электронов ($\mu = \delta E / \delta N$), а жесткость — вторую ($\eta = \delta^2 E / \delta N^2$).

Для анализа реакционной способности ФЭБ количественная теория ЖМКО ранее не использовалась.

Расчет структур молекул замещенных ФЭБ (XPhCHBrMe) и их анионов (в качестве модели предельной структуры, в которую превращается ФЭБ при нуклеофильной атаке) проведен программным комплексом ADF 2014.04 [6] на уровне теории DFT M06/6-311+G* в рамках метода PCM [10, 20, 31] (табл. 1).

Таблица 1

Расчет квантово-химических параметров XPhCHBrMe и их анионов

X	Q(C)(мол)	Q(C)(ан)	FF(C)	E (HOMO)	E (LUMO)
4-OMe	0.0477	-0.0381	0.0859	-0.24440	-0.03979
4-SMe	0.0474	-0.0325	0.0799	-0.23002	-0.04439
4-OPh	0.0473	-0.0300	0.0774	-0.24564	-0.04249
3-Cl,4-OMe	0.0475	-0.0215	0.0689	-0.2653	-0.04774
3,4,5-Me ₃	0.0477	-0.0345	0.0825	-0.25101	-0.04036
3,4-Me ₂	0.0478	-0.0337	0.0815	-0.25395	-0.04142
4-Me	0.0472	-0.0291	0.0763	-0.25875	-0.04169
4-t-Bu	0.0473	-0.0297	0.0769	-0.25983	-0.04148
3-Me	0.0471	-0.0258	0.0729	-0.26189	-0.04219
H	0.0470	-0.0268	0.0738	-0.26866	-0.43550
4-Cl	0.0473	0.0466	0.0008	-0.26492	-0.04871
3-Cl	0.0472	-0.0148	0.0620	-0.27028	-0.04921
3-CF ₃	0.0472	-0.0116	0.0588	-0.28035	-0.05098
3-NO ₂	0.0476	0.0479	-0.0003	-0.28545	-0.10625
4-NO ₂	0.0472	0.0485	-0.0013	-0.28916	-0.10764
3,5-(CF ₃) ₂	0.0479	0.0452	0.0479	-0.29038	-0.06413

Примечание. Здесь и далее: E — эв, Q, FF — единицы заряда электрона (e), остальные в eV.

Электронный химический потенциал (μ), жесткость (η), электрофильность (ω) рассчитаны в соответствии с представлениями количественной теории ЖМКО, основанной на концептуальной теории DFT. Локальная электрофильность реакционных центров — α -атомов углерода (C) этильного заместителя, несущего атом брома (уходящую группу) — определена из соотношения $\omega(\text{лок}) = \omega * FF(C)$.

Соотношение между локальной электрофильностью и $\lg K_1$ (рис. 1) показывает, что общая выборка распадается на две, различие между которыми выходит за рамки 5%-ных погрешностей, поэтому далее они рассмотрены отдельно (рис. 2 и 3).

Таблица 2

Квантово-химические параметры молекул ФЭБ и их реакционная способность в реакции пиридинолиза для реакции первого порядка (K1) и механизма S_N1

X	μ	η	ω	$\omega(\text{ЛОК})$	K1	$\log K_1$
4-OMe	-3.8666	2.7838	2.6852	0.2306	$1.66 \cdot 10^{-2}$	-1.7798
4-SMe	-3.7337	2.5256	2.7596	0.2206	$1.03 \cdot 10^{-3}$	-2.9872
4-OPh	-3.9204	2.7640	2.7801	0.2150	$4.15 \cdot 10^{-4}$	-3.3819
3-Cl,4-OMe	-4.2592	2.9600	3.0642	0.2112	$2.12 \cdot 10^{-4}$	-3.6736
3,4,5-Me ₃	-3.9643	2.8660	2.7417	0.2261	$8.56 \cdot 10^{-5}$	-4.0675
3,4-Me ₂	-4.0188	2.8916	2.7926	0.2276	$3.67 \cdot 10^{-5}$	-4.4353
4-Me	-4.0877	2.9532	2.8289	0.2158	$1.46 \cdot 10^{-5}$	-4.8356
4-t-Bu	-4.0996	2.9708	2.8286	0.2178	$8.10 \cdot 10^{-6}$	-5.0915
3-Me	-4.1373	2.9892	2.8631	0.2087	$5.50 \cdot 10^{-7}$	-6.2596
H	-4.5807	2.2699	-2.2179	0.2020	$3.20 \cdot 10^{-7}$	-6.4948

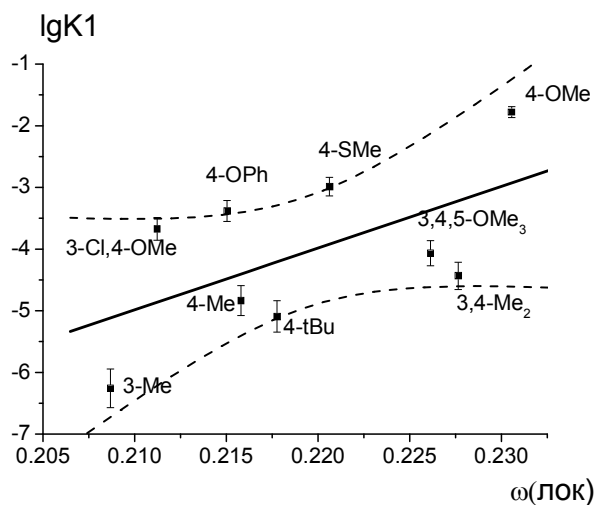


Рис. 1. Соотношение между локальной электрофильностью и $\lg K_1$
Здесь и далее указан 95%-ный доверительный интервал

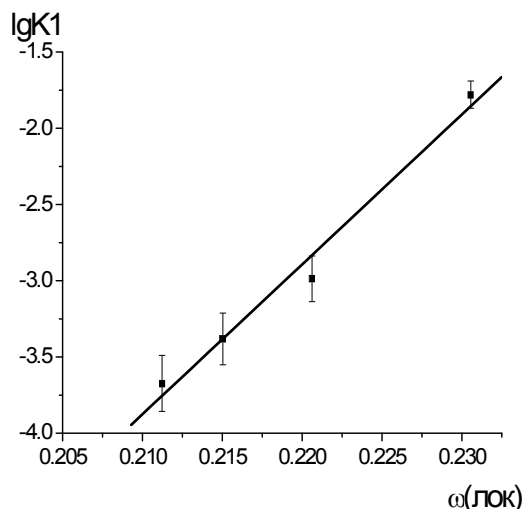


Рис. 2. Корреляция между константой скорости первого порядка (механизм S_N1) и локальной электрофильностью реакционного центра (выборка 1)

$$\lg K_1 = -4.51 \pm 2.04 + (98.26 \pm 9.29) \cdot \omega(\text{ЛОК}), R = 0.99, SD = 0.135, N = 4, \\ P = 0.009, SD(\text{норм}) = 7.13 \%. \text{ Здесь и далее} \\ \text{нормированное стандартное отклонение } SD(\text{норм}) = SD/\Delta \lg K.$$

Можно наблюдать, что в первой выборке находятся субстраты с заместителями, способными к сильному взаимодействию с ароматической π -системой по механизму прямого полярного сопряжения [3] (заместители с большим донорным эффектом сопряжения – 4-OMe, 4-OPh, 4-SMe, 3-Cl,4-OMe). Во второй выборке находятся субстраты с заместителями, неспособными к сильному полярному сопряжению с реакционным центром, а также с акцепторными заместителями. Корреляции практически параллельны (имеют весьма близкие угловые коэффициенты), со сдвигом по ординате на две логарифмические единицы, что указывает на одинаковую чувствительность реакции к изменению локальной электрофильности вследствие сохранения механизма.

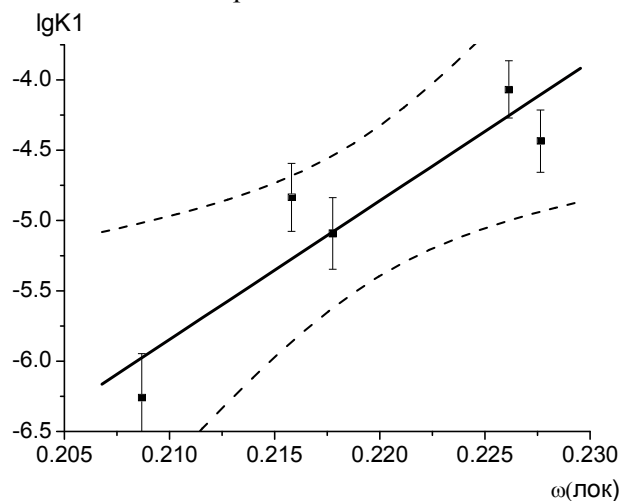


Рис. 3. Корреляция между константой скорости первого порядка (механизм S_N1) и локальной электрофильностью реакционного центра (выборка 2)

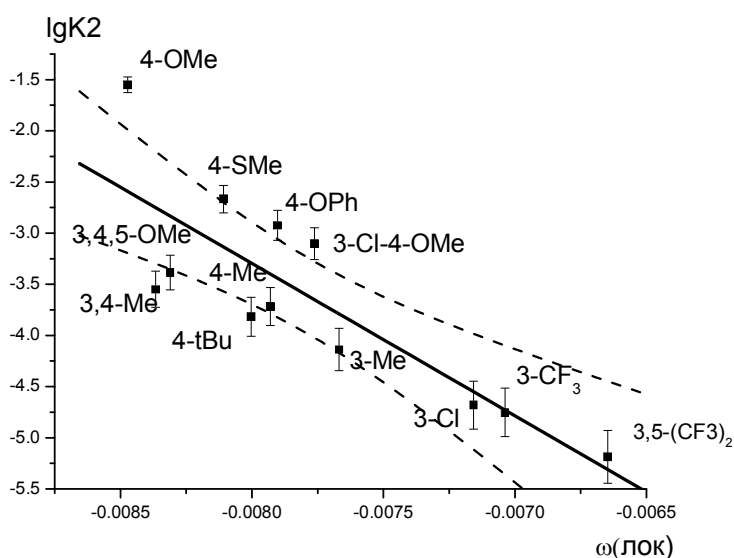
$$\lg K_1 = (-26.57 \pm 5.23) + (98.70 \pm 23.86) \cdot \omega(\text{ЛОК}), R = 0.922, SD = 0.373, N = 5, \\ P = 0.026, SD(\text{норм}) = 17 \%$$

Зависимости между $\lg K1$ для механизма S_N1 и локальной электрофильностью реакционного центра (α -атома углерода в ФЭБ) симбатны. Это не согласуется с физическим смыслом данного ИРС, поскольку увеличение электроноёмкости реакционного центра (локальной ω) не способствует стабилизации интермедиата – карбокатиона, а также затрудняет анионидный отрыв (уход с электронной парой) уходящей группы – Br^- . Очевидно, для механизма S_N1 требуется другая модель интермедиата (см. далее).

Таблица 3

Квантово-химические параметры молекул ФЭБ и их реакционная способность в реакции пиридинолиза для реакции второго порядка (K2) и механизма S_N2

X	μ	η	ω	$\omega(\text{лок})$	K2	$\log K2$
4-OMe	-3.8666	2.7838	2.6852	0.2306	$2.82 \cdot 10^{-2}$	-1.550
4-SMe	-3.7337	2.5256	2.7595	0.2206	$2.15 \cdot 10^{-3}$	-2.667
4-OPh	-3.9204	2.7640	2.7800	0.2150	$1.19 \cdot 10^{-3}$	-2.924
3-Cl-4-Me	-4.2591	2.9600	3.0641	0.2113	$7.90 \cdot 10^{-4}$	-3.102
3,4,5-Me ₃	-3.9643	2.8660	2.7417	0.2261	$4.11 \cdot 10^{-4}$	-3.386
3,4-Me ₂	-4.0187	2.8916	2.7925	0.2276	$2.83 \cdot 10^{-4}$	-3.548
4-Me	-4.0877	2.9532	2.8289	0.2157	$1.92 \cdot 10^{-4}$	-3.716
4-t-Bu	-4.0995	2.9708	2.8285	0.2177	$1.52 \cdot 10^{-4}$	-3.819
3-Me	-4.1372	2.9891	2.8631	0.2086	$7.29 \cdot 10^{-5}$	-4.138
H	-4.5806	2.2699	2.2179	0.2020	$5.54 \cdot 10^{-5}$	-4.257
4-Cl	-4.2671	2.9417	3.0949	0.0024	$4.37 \cdot 10^{-5}$	-4.359
3-Cl	-4.3469	3.0078	3.1411	0.1948	$2.09 \cdot 10^{-5}$	-4.681
3-CF ₃	-4.5080	3.1207	3.2559	0.1915	$1.77 \cdot 10^{-5}$	-4.752
3-NO ₃	-5.3293	2.4381	5.8245	0.0015	$1.21 \cdot 10^{-5}$	-4.917
4-NO ₂	-5.3987	2.4697	5.9008	0.0079	$1.19 \cdot 10^{-5}$	-4.925
3,5-(CF ₃) ₂	-4.8233	3.0783	3.7788	0.0099	$6.51 \cdot 10^{-6}$	-5.186

Рис. 4. Соотношение между локальной электрофильностью и $\lg K2$

Аналогичная картина наблюдается при анализе зависимости реакционной способности ФЭБ от локальной электрофильности при реализации механизма S_N2 . Эта зависимость аналогично первой разделяется на две реакционные серии, причем в первой также находятся субстраты с заместителями, имеющими сильный донорный эффект сопряжения [3]. Этот эффект способствует увеличению реакционной способности ФЭБ (линия, соответствующая выборке 1 находится на графиках рис. 1 и 4 выше линии выборки 2, поскольку донорный эффект заместителя ускоряет анионоидный отрыв уходящей группы).

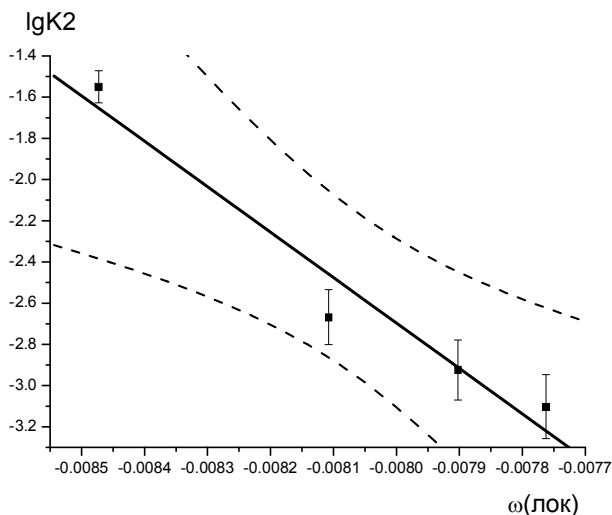


Рис. 5. Корреляция между локальной электрофильностью реакционного центра и реакционной способностью ФЭБ в механизме S_N2 (выборка 1)

$$\lg K_2 = (-20.34 \pm 2.79) + (-2205.47 \pm 347.09)\omega, R = -0.976, SD = 0.185, N = 4, \\ P = 0.024, SD(\text{норм}) = 11.9\% \quad (4)$$

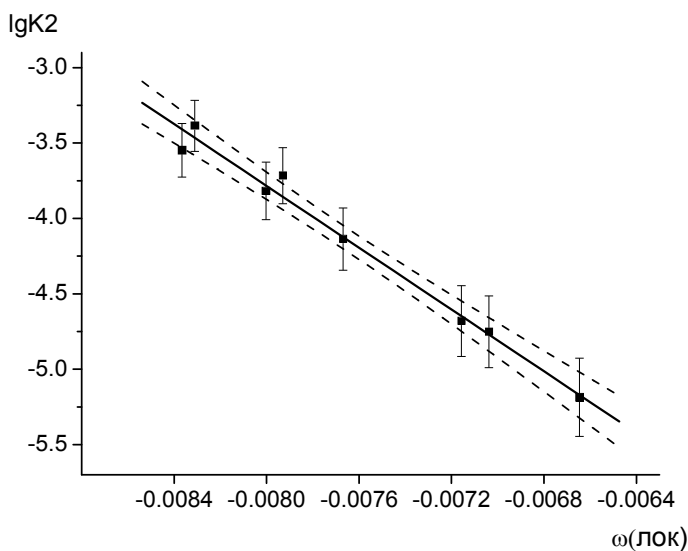


Рис. 6. Корреляция между локальной электрофильностью реакционного центра и реакционной способностью ФЭБ в механизме S_N2 (выборка 2)

$$\lg K_2 = -(11.98 \pm 0.41) - (1024.72 \pm 53.77)\omega, R = 0.992, SD = 0.090, N = 8, \\ P = 0.01\%, SD(\text{норм}) = 5\%$$

При таком большом нуклеофиле, каким является пиридин, реализация механизма S_N1 вполне закономерна, поскольку у реакционного центра при реализации механизма S_N2 должны наблюдаться стерические затруднения. Тем не менее механизм S_N2 , по утверждению авторов [18], также реализован.

Для этого механизма аналогичные зависимости антибатны (рис. 4), поскольку увеличение электроноёмкости (локальной электрофильности) в этом случае уменьшает реакционную способность, поскольку затрудняет отрыв уходящей группы. Реакционный центр, имея высокую электрофильность, удерживает ту часть электронной плотности, которую могла бы унести с собой уходящая группа — в соответствии с физическим смыслом параметра ω .

Доноры ускоряют реакцию пиридинолиза, потому что способствуют реализации механизма S_N2 , ускоряя анионидный отрыв Br^- . Кроме того, в переходном состоянии на реакционном центре развивается значительный положительный заряд (который донорные заместители погашают), так как разрыв связи $C-Br$ опережает образование связи $C-N$ (с атомом азота в нуклеофиле — пиридине). Это указывает на анионидный отрыв уходящей группы как на главную причину, определяющую реакционную способность этих субстратов.

Вследствие этого нуклеофильная атака становится лимитирующей, что и обнаруживается антибатными зависимостями между $\lg k_2$ (соответствующими реализации механизма S_N2) и локальной электрофильностью реакционного центра.

При этом в соответствии с диаграммой О'Феррала — Дженкса [21] переходное состояние механизма S_N2 сдвинуто по перпендикулярной координате в сторону S_N1 механизма, т. е. становится все более рыхлым при увеличении донорных свойств заместителя, а это указывает на нестабильный механизм реакции.

Различие в трендах зависимостей по механизмам S_N1 и S_N2 заключается в различии моделей конечного состояния. Для механизма S_N1 очевидно требуется модель, близкая или соответствующая карбкатиону, который образуется из ФЭБ на первой стадии, лимитирующей скорость. Расчет этих интермедиатов проведен на том же уровне теории, что и расчет анионов для механизма S_N2 . FF^+ — функция Фукуи для процесса превращения ФЭБ в карбкатион.

Таблица 4

Квантово-химические параметры нейтральных молекул ФЭБ и их карбкатионов по α -атому С. $Q(C\alpha)$ — заряд на α -атоме С в карбкатионе ФЭБ, e

X	$Q(C\alpha)$	$Q(C\alpha\text{-кат})$	FF^+	E(HOMO)	E(LUMO)
4-OMe	0.0477	0.1197	0.0720	-0.24440	-0.03979
4-SMe	0.0474	0.1135	0.0661	-0.23002	-0.04439
4-OPh	0.0473	0.1246	0.0773	-0.24564	-0.04249
3-Cl-4-OMe	0.0475	0.1254	0.0779	-0.26530	-0.04774
3,4,5-Me ₃	0.0477	0.1381	0.0904	-0.25101	-0.04036
3,4-Me ₂	0.0478	0.1418	0.0940	-0.25395	-0.04142
4-Me	0.0472	0.1435	0.0963	-0.25875	-0.04169
4-t-Bu	0.0473	0.1459	0.0986	-0.25983	-0.04148
3-Me	0.0471	0.1565	0.1094	-0.26189	-0.04219
H	0.0470	0.1598	0.1128	-0.26866	-0.43550
4-Cl	0.0473	0.1532	0.1059	-0.26492	-0.04871
3-Cl	0.0472	0.1697	0.1225	-0.27028	-0.04921
3-CF ₃	0.0472	0.1748	0.1276	-0.28035	-0.05098
3-NO ₂	0.0476	0.1822	0.1346	-0.28545	-0.10625
4-NO ₂	0.0472	0.1895	0.1423	-0.28916	-0.10764
3,5-(CF ₃) ₂	0.0479	0.1893	0.1414	-0.29038	-0.06413

Таблица 5

Квантово-химические ИРС ФЭБ для механизма S_N1

X	M	η	ω	ω(лок)	K1	logK1
4-OMe	-3.8666	2.7838	2.6852	0.1933	1.66*10 ⁻²	-1.779
4-SMe	-3.7337	2.5256	2.7595	0.1824	1.03*10 ⁻³	-2.987
4-OPh	-3.9204	2.7640	2.7800	0.2149	4.15*10 ⁻⁴	-3.382
3-Cl,4-MeO	-4.2591	2.9600	3.0641	0.2387	2.12*10 ⁻⁴	-3.674
3,4,5-Me ₃	-3.9643	2.8660	2.7417	0.2479	8.56*10 ⁻⁵	-4.068
3,4-Me ₂	-4.0187	2.8916	2.7925	0.2625	3.67*10 ⁻⁵	-4.435
4-Me	-4.0877	2.9532	2.8289	0.2724	1.46*10 ⁻⁵	-4.836
4-t-Bu	-4.0995	2.9708	2.8285	0.2789	8.10*10 ⁻⁶	-5.092
3-Me	-4.1372	2.9891	2.8631	0.3132	5.50*10 ⁻⁷	-6.259
H	-9.5806	2.2699	2.2179	0.2502	3.20*10 ⁻⁷	-6.495

Антибатный характер зависимости на рис. 7 согласуется с физическим смыслом функции Фукуи, поскольку ее уменьшение соответствует уменьшению способности реакционного центра к отдаче электронной плотности, в свою очередь уменьшающее возможность отщепления уходящей группы (бромид-аниона в механизме S_N1) как стадии, лимитирующей скорость.

Аналогично зависимости между реакционной способностью в механизме S_N1 и функцией Фукуи антибатна также зависимость между lgK1 и локальной электрофильностью реакционного центра (рис. 8) — в полном соответствии с физическим смыслом электрофильности как электроемкости.

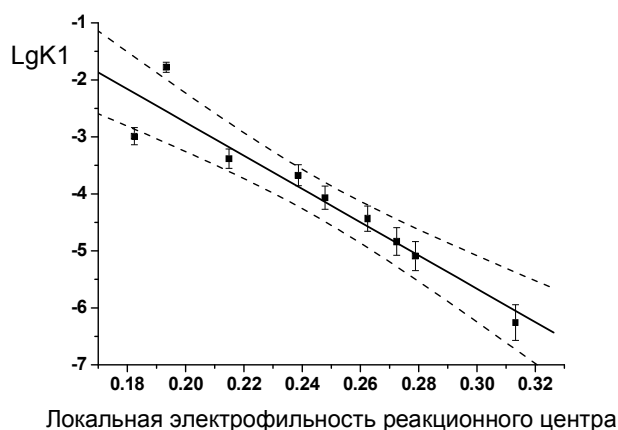


Рис. 7. Соответствие между реакционной способностью ФЭБ в реакции пиридинолиза (механизм S_N1) и функцией Фукуи реакционного центра (α-атома С)

$$\log K1 = (3.52 \pm 0.94) - (87.4 \pm 10.4) * FF^+, R = -0.948, SD = 0.49, N = 10, \\ P < 10^{-4}, SD(\text{норм}) = 10.2 \%$$

Таким образом, противоречие между закономерностями рис. 3 и 6 лишь кажущееся, поскольку в предварительном расчете не был учтен мономолекулярный характер S_N1 механизма. Следовательно, количественная теория ЖМКО не только адекватно описывает процесс пиридинолиза замещенных ФЭБ, но и позволяет провести диагностику механизма по типу корреляций между lgK и локальным ИРС, соответственным образом рассчитанным — по карбкатионам для S_N1 и по анионам для механизма S_N2.

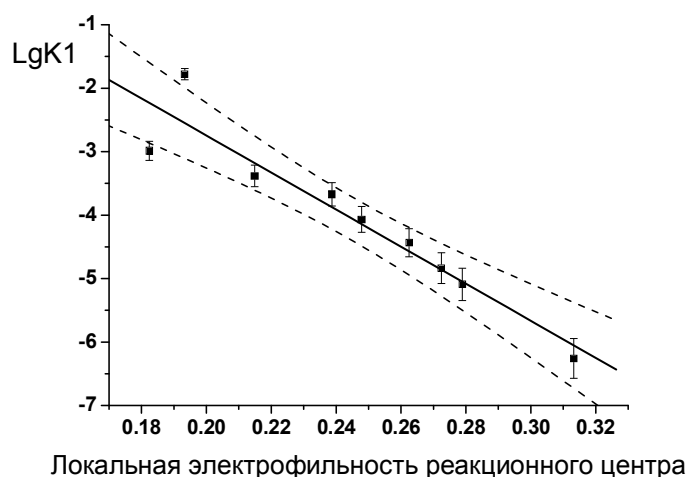


Рис. 8. Соотношение между локальной электрофильностью реакционного центра и реакционной способностью ФЭБ

$$\lg K_1 = (3.10 \pm 0.90) - (29.2 \pm 3.6) \cdot \omega(\text{лок}), R = -0.951, SD = 0.43, \\ N = 9, P < 10^{-4}, SD(\text{норм}) = 8.6\%$$

Кроме того, эта теория позволяет установить, что независимо от вида реализуемого механизма фактором, определяющим скорость, является нуклеофугность уходящей группы, в данном случае бромид-аниона. Это согласуется с данными по механизму S_N2 , поскольку антибатность на зависимости рис. 6 — увеличение локальной электрофильности уменьшает реакционную способность — согласуется с представлением о стадии отрыва нуклеофуга как стадии, определяющей скорость и сдвиге переходного состояния S_N2 в сторону S_N1 по перпендикулярной координате на диаграмме О`Феррала — Дженкса.

Библиографический список

1. Белл Р. Протон в химии. М.: Мир, 1977. 382 с.
2. Бутин К. П. // Журнал Российского химического общества им. Д. И. Менделеева. 2001. Т. 42, № 2. С. 11—34.
3. Днепровский А. С., Темникова Т. А. Теоретические основы органической химии. Л.: Химия, 1991. 560 с.
4. Ингольд К. К. Механизм реакции и строение органических соединений. М.: ИИЛ, 1959. С. 38.
5. Крестов Г. А., Афанасьев В. Н., Ефремова Л. С. Физико-химические свойства бинарных растворителей. Л.: Химия, 1988. 688 с.
6. Vaerends E. J., et al. ADF2014. SCM. Theoretical Chemistry. Vrije Universiteit. Amsterdam. The Netherlands. 2014. URL: <http://www.scm.com>. (дата обращения: 12.01.2015).
7. Bentley T. W., Jones R. O., Kang D. H., Koo I. S. // J. Phys. Org. Chem. 2009. Vol. 22. P. 799—806.
8. Bentley T. W., Schleyer P. v. R. // J. Am. Chem. Soc. 1976. Vol. 98, № 24. P. 7658—7666.
9. Broeckaert L., Moens J., Roos G., De Proft F., Geerlings P. // J. Phys. Chem. A. 2008. Vol. 112, № 47. P. 12164—12171.

10. Continuum Solvation Models in Chemical Physics : From Theory to Applications / Mennucci B., Cammi R., Eds. New York : Wiley, 2007. 636 p.
11. *Eberson L., Radner F.* // *Account Chem. Res.* 1987. Vol. 20, № 2. P. 53—59.
12. *Fuentealba P., David J., Guerra D.* // *J. Mol. Struct. THEOCHEM.* 2010. Vol. 943. P. 127—137.
13. *Geerlings P., De Proft F.* // *Int. J. Mol. Sci.* 2002. Vol. 3. P. 276—309.
14. *Islam N., Chosh D. C.* // *Int. J. Model.* 2012. Vol. 13, № 2. P. 2160—2175.
15. *Jaramillo P., Domingo L. R., Perez P.* // *Chem. Phys. Lett.* 2006. Vol. 420. P. 95—99.
16. *Kevill D. N., D'Souza M. J., Ren H.* // *Can. J. Chem.* 1998. Vol. 76, № 6. P. 751—757.
17. *Lee I., Kim H.-Y., Kang H.-K., Lee H.-W.* // *J. Org. Chem.* 1988. Vol. 53, № 12. P. 2678—5683.
18. *Lim Ch., Kim S.-H., Yoh S.-D., Fujio M., Tsuno Y.* // *Tetrahedron Letters.* 1997. Vol. 38, № 18. P. 3243—3246.
19. *Matić M., Jurić S., Denegri B., Kronja O.* // *Int. J. Mol. Sci.* 2012. Vol. 13. P. 2012—2024.
20. *Mennucci B. et al.* // *J. Phys. Chem. A* 2002. Vol. 106. P. 6102—6113.
21. *O'Ferral M.* // *J. Chem. Soc. B.* 1970. № 2. P. 274—277.
22. *Parr R. G., Pearson R. G.* // *J. Am. Chem. Soc.* 1983. Vol. 105, № 26. P. 7512—7516.
23. *Parr R. G., Yang W.* // *Ann. Rev. Phys. Chem.* 1995. Vol. 46. P. 701—728.
24. *Pearson R. G.* *Chemical hardness. Applications from molecules to solids.* 1997. Weinheim : Wiley-VCH Verlag GMBH. 200 p.
25. *Pearson R.G.* // *J. Am. Chem. Soc.* 1963. Vol. 84, № 22. P. 3533—3539.
26. *Putz M.* // *Int. J. Quantum Chem.* 2009. Vol. 109, № 4. P. 733—738.
27. *Putz M.* // *Int. J. Quant. Chem.* 2006. Vol. 106, № 2. P. 361—389.
28. *Rong Ch., Lu T., Liu S. B.* // *Acta Phys. — Chim. Sin.* 2014. Vol. 30, № 11. P. 2055—2062.
29. *Smith M. B., March J.* *March's Advanced Organic Chemistry: Reactions. Mechanisms and Structure.* 6th ed. New York : Wiley-Interscience, 2007. 2357 p.
30. *Theoretical aspects of chemical reactivity / Toro-Labbe A., Ed.* Oxford : Elsevier. 2007. 322 p.
31. *Tomasi J., Mennucci B., Cammi R.* // *Chem. Rev.* 2005. Vol. 105, № 8. P. 2999—3094
32. *Yang W., Parr R. G.* // *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* 1985. Vol. 82. P. 6723—6726.
33. *Yung D. C.* *Computational chemistry.* New York : Wiley J. & Sons Inc. 2001. 380 p.
34. *Zielinski F., Tognetti V., Joubert L.* // *Chem. Phys. Lett.* 2012. Vol. 527. P. 67—72.

АЛГОРИТМ СЖАТИЯ ИЗОБРАЖЕНИЙ БЕЗ ПОТЕРЬ С ПРЕДСКАЗАНИЕМ

Предложен симметричный алгоритм сжатия фотореалистичных изображений без потерь на базе модели кодирования с предсказанием, включающей динамическое построение k -точечных аппроксимирующих функций. Для рассматриваемого алгоритма приведено сравнение эффективности сжатия с наиболее известными на сегодняшний день алгоритмами кодирования изображений без потерь.

Ключевые слова: модель кодирования с предсказанием, экстраполяция, коэффициент сжатия, среднеквадратичное отклонение, арифметическое кодирование.

Lossless photorealistic image symmetric compression algorithm is proposed. It is based on the predictive encoding model, including dynamic construction of k -point approximating functions. For the algorithm compares the compression efficiency using today's most popular lossless image encoding algorithms.

Key words: predictive encoding model, extrapolation, compression ratio, mean square error, arithmetic coding.

1. Введение

В общем случае кодирование с предсказанием [1, 2] заключается в выполнении следующих двух шагов:

1) **моделирование** — представление изображения в виде матрицы отклонений точных значений от предсказанных;

2) **кодирование** — построение для матрицы отклонений некоторого неравномерного кода (например, код Хаффмана).

Пусть $f(x,y)$ — таблично-заданная функция яркости для серого изображения и $g(x,y)$ — некоторое приближение $f(x,y)$. Тогда кодируемым значением в случае кодирования с предсказанием является

$$e(x,y) = f(x,y) - g(x,y),$$

где $e(x,y)$ — ошибка предсказания. Для восстановления исходного значения используем соотношение

$$f(x,y) = e(x,y) + g(x,y).$$

Кодирование и декодирование выполняется при обходе матрицы сверху вниз и слева направо. Для вычисления текущего значения используются значения в предыдущих точках.

Имеем следующие конфигурации выбора узлов для экстраполяции:

–	p_7	p_5	p_8	–
p_6	p_2	p_1	p_3	p_9
p_4	p_0	$g(x,y)$	–	–

Аппроксимация в случае n смежных точек определяется как

$$g(x, y) = \alpha_0 p_0 + \dots + \alpha_{n-1} p_{n-1}.$$

где $\{p_i\}_{i=0}^n$ — известные значения, а $\{\alpha_i\}_{i=0}^n$ — система весов, удовлетворяющая условию

$$\alpha_0 + \dots + \alpha_{n-1} = 1.$$

Степень сжатия напрямую зависит от точности аппроксимации.

В статье представлено описание разработанного адаптивного LPC алгоритма кодирования изображений без потерь, а также проведено сравнение его эффективности с некоторыми алгоритмами сжатия растровой графики.

2. Качество экстраполяции некоторых методов

Множество прогнозирующих функций можно разделить на два класса:

- 1) статические (вид функции не меняется во время кодирования);
- 2) динамические (функция адаптируется к исходным данным).

Предсказатель может являться как линейной, так и нелинейной функцией. Одними из наиболее известных нелинейных статических предсказателей являются функции Paeth [6] и MED [5], определяющиеся следующим образом:

$$Paeth = \begin{cases} W, & \text{if } |N - NW| \leq |W - NW| \wedge |N - NW| \leq |N + W - 2NW| \\ N, & \text{if } |W - NW| \leq |N + W - 2NW| \\ NW, & \text{otherwise} \end{cases}.$$

$$MED = \begin{cases} \min(N, W), & \text{if } NW \geq \max(N, NW) \\ \max(N, W), & \text{if } NW \leq \min(N, W) \\ N + W - NW, & \text{otherwise} \end{cases}.$$

Здесь параметры N , W , NW принимаются равными $p_{i-1,j}$, $p_{i,j-1}$, $p_{i-1,j-1}$ соответственно. В качестве линейного статического предсказателя может выступить любая линейная фиксированная функция, например:

$$Mean3(x, y) = \frac{N+W+NW}{3}.$$

Адаптивный предсказатель — функция, модифицирующаяся на каждой итерации моделирования, представление которой определяется по некоторому набору точек, соседних к прогнозируемой.

В полуадаптивном случае моделирование осуществляется в два этапа:

- 1) вычисление предсказателя по всем точкам изображения;
- 2) кодирование последовательности входных символов с использованием найденной на шаге 1 предсказывающей функции.

Полуадаптивные методы кодирования (в таблицах) будем обозначать как Npa , где N — количество точек в конфигурации.

В качестве меры для оценки качества предсказателя используем среднеквадратичное отклонение

$$MSE(f, g) = \sqrt{\frac{1}{mn} \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n (f_{ij} - g_{ij})^2}.$$

В дальнейшем для сравнения оценки качества предсказателей и эффективности сжатия будем использовать набор из нескольких наиболее известных фотореалистичных изображений [3].

Усредненные среднеквадратичные отклонения принимают значения, показанные в табл. 1.

Таблица 1

Среднеквадратичные отклонения некоторых методов

Mean3	2pa	Paeth	MED	3pa	4pa	6pa	10pa
12,447	10,211	9,517	8,938	8,774	8,614	8,537	8,403

3. Динамическое построение адаптивных предсказателей

Задача построения предсказывающей функции сводится к определению системы ее весов $\{\alpha_i\}$. Для вычисления их значения необходимо определить, какие узлы p_i будут использоваться для последующего прогнозирования.

Рассмотрим задачу вычисления коэффициентов прогнозирующей функции в случае конфигурации, состоящей из четырех узлов:

$I_{x-2, y-2}$	$I_{x-1, y-2}$	$I_{x, y-2}$	$I_{x+1, y-2}$	$I_{x+2, y-2}$
$I_{x-2, y-1}$	$I_{x-1, y-1}$	$I_{x, y-1}$	$I_{x+1, y-1}$	$I_{x+2, y-1}$
$I_{x-2, y}$	$I_{x-1, y}$	$g_{x, y}$	—	—

В простейшем случае веса $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ определяются как решения СЛАУ вида

$$\begin{cases} I_{x-2, y} \alpha_0 + I_{x-2, y-1} \alpha_1 + I_{x-1, y-1} \alpha_2 + I_{x, y-1} \alpha_3 = I_{x-1, y}, \\ I_{x-2, y-1} \alpha_0 + I_{x-1, y-1} \alpha_1 + I_{x-1, y-2} \alpha_2 + I_{x, y-2} \alpha_3 = I_{x-1, y-1}, \\ I_{x-1, y-1} \alpha_0 + I_{x-1, y-2} \alpha_1 + I_{x, y-2} \alpha_2 + I_{x+1, y-2} \alpha_3 = I_{x, y-1}, \\ I_{x, y-1} \alpha_0 + I_{x, y-2} \alpha_1 + I_{x+1, y-2} \alpha_2 + I_{x+2, y-2} \alpha_3 = I_{x+1, y-1}. \end{cases}$$

Кроме того, должно быть выполнено соотношение

$$\alpha_3 = 1 - \sum_{i=0}^2 \alpha_i.$$

Практика показывает, что данный метод неустойчив. Для его устойчивости необходимо использовать большее число узлов при построении СЛАУ.

4. Качество аппроксимации

Пусть ε — размер локального окна, а n — количество узлов в конфигурации. Тогда усредненные среднеквадратичные отклонения при различных параметрах ε и n будут выглядеть как показано в таблице 2.

Размер локального окна играет значимую роль в построении предсказателя. При $\varepsilon=1$ — метод неустойчив. Если размер локального окна слишком велик, то в область попадают точки, несущие меньшую информацию для прогнозируемой, что негативно сказывается на качестве экстраполяции.

Сопоставив оценки из табл. 1 и табл. 2 заметим, что предсказатель, построенный по предложенному алгоритму, дает существенно лучшее приближение, чем статические и полуадаптивные предсказатели.

Таблица 2

**Среднеквадратичные отклонения адаптивного метода
при различных параметрах ϵ и n**

ϵ	$n=2$	$n=3$	$n=4$	$n=6$	$n=10$
1	9,648	12,446	17,941	42,526	65,463
2	8,659	8,625	8,563	9,971	16,706
3	8,569	8,200	7,857	8,150	9,363
4	8,587	8,079	7,667	7,692	8,160
5	8,631	8,042	7,606	7,522	7,724
6	8,679	8,035	7,593	7,450	7,525
7	8,724	8,040	7,598	7,420	7,426
8	8,765	8,050	7,612	7,413	7,374
9	8,807	8,065	7,630	7,417	7,347
10	8,845	8,081	7,650	7,428	7,338

5. Результаты

Полученный алгоритм кодирования с предсказанием, динамически находит предсказатель для каждой вычисляемой точки. Построение неравномерного кода последовательности осуществляется посредством арифметического кодирования [2, 8].

Для оценки эффективности алгоритма используем коэффициент сжатия, определяемый соотношением

$$Q = \frac{\text{size}(enc)}{\text{size}(src)},$$

где $\text{size}(enc)$ — количество байт в закодированной последовательности, а $\text{size}(src)$ — размер исходного изображения.

Описанный выше метод использовался с параметрами $n/\epsilon=4/5$ и $10/9$. Полученные результаты приведены в табл. 3

Таблица 3

Усредненные коэффициенты сжатия для различных методов

Png	3pa	10pa	Jpeg2000	4/5	10/9	Jpeg-LS
0,587	0,584	0,582	0,557	0,551	0,548	0,538

Предложенный метод по степени компрессии занимает позицию между Jpeg2000 [4] и Jpeg-LS [7]. Эксперименты показали, что результат в среднем остается практически неизменным.

Рассмотренный подход кодирования изображений может послужить алгоритмической основой для дальнейших исследований. При том что некоторые вопросы пока остались незатронутыми (динамический выбор конфигурации, адаптация по размеру локального окна), данный метод показал достаточно неплохой результат.

Библиографический список

1. Ватолин Д., Ратушняк А., Смирнов М., Юдин В. Методы сжатия данных. Устройство архиваторов, сжатие изображений и видео. М. : Диалог — МИФИ, 2002. 384 с.
2. Гонсалес Р., Вудс Р. Цифровая обработка изображений. М. : Техносфера, 2012. Гл. 8. С. 611—713.
3. Набор тестовых изображений. URL: http://math.ivanovo.ac.ru/dalgebra/Khashin/bmp_ex/index.html (дата обращения: 02.02.2015).
4. Jpeg2000, официальная страница. URL: <http://www.jpeg.org/jpeg2000/index.html> (дата обращения: 20.01.2015).
5. Memon N., Wu X. Recent developments in context-based predictive techniques for lossless image compression // The Computer Journal. 1997. Vol. 40, № 2/3. P. 127—136.
6. PNG (Portable Network Graphics) Specification, Version 1.0, W3C Recommendation 01-October-1996. URL: <http://www.w3.org/TR/REC-png-961001> (дата обращения: 17.12.2014).
7. Weinberger M. J., Seroussi G., Sapiro G. The LOCO-I lossless image compression algorithm: principles and standardization into JPEG-LS // IEEE transactions on image processing. 2000. Vol. 9, № 8. P. 1309—1327.
8. Witten I. H., Neal R. M., Cleary J. G. Arithmetic coding for data compression // Communications of the ACM. 1987. P. 520—540.

УДК 372.851

Е. В. Ерёмкина

**ВИДЫ ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ
В РЕАЛИЗАЦИИ КУРСА «ЛИНЕЙНАЯ АЛГЕБРА»**

Рассматриваются некоторые виды образовательных технологий, применение которых на занятиях по математике, в частности в курсе «Линейной алгебры», позволит развивать профессиональные и другие виды компетенций студентов. Приводятся примеры использования видов образовательных технологий.

Ключевые слова: образовательные технологии, компетенции, модульные технологии, опорный конспект, уровневая дифференциация, тестовые технологии.

In this article we consider some of the types of educational technologies, the use of which at the lessons of mathematics, in particular in the course of «Linear Algebra», will help to develop professional and other kinds of students' competences. We give examples of use of certain types of educational technologies.

Key words: educational technologies, competences, modular technologies, supporting abstract, tier differentiation, test technologies.

Актуализированный федеральный государственный образовательный стандарт высшего образования (ФГОС 3+) — это совокупность требований, обязательных при реализации основных образовательных программ высшего

© Ерёмкина Е. В., 2015

профессионального образования образовательными учреждениями, имеющими государственную аккредитацию.

Главными целевыми установками в реализации ФГОС 3+ третьего поколения являются компетенции, полученные учащимся в ходе обучения, при этом под термином «компетенция» понимается способность применять знания, умения и личностные качества для успешной деятельности в определенной области.

Компетентностный подход предусматривает иную роль студента в учебном процессе, нежели это понималось ранее. В его основе — работа с информацией, моделирование, рефлексия. Студент должен уметь не просто воспроизводить информацию, а самостоятельно мыслить и быть готовым к реальным жизненным ситуациям.

В связи с этим появляется необходимость корректировки учебных программ, приведения их в соответствие с требованиями нового ФГОС: программы должны быть ориентированы на повышение качества подготовки специалистов на основе создания механизмов эффективного освоения студентами компетенций, необходимых в профессиональной деятельности.

При этом если раньше учебная программа дисциплины определяла цели, содержание, объем и порядок ее изучения, то теперь в нее входит перечень результатов образования, формируемых дисциплиной, с указанием соответствующих компетенций, перечень основных образовательных технологий (форм, методов обучения, типовых задач), используемых для формирования компетенций, перечень типовых заданий для контроля и самооценки уровня заявленных в дисциплине результатов образования (компетенций).

Остановимся подробнее на некоторых формах образовательных технологий, которыми можно воспользоваться при реализации дисциплины «Линейная алгебра» на физическом факультете. Поскольку временные рамки курса достаточно сжаты, имеет смысл остановить выбор на формах, оптимизирующих временные затраты, но при этом достигающих всех вышеперечисленных целей подготовки качественного специалиста.

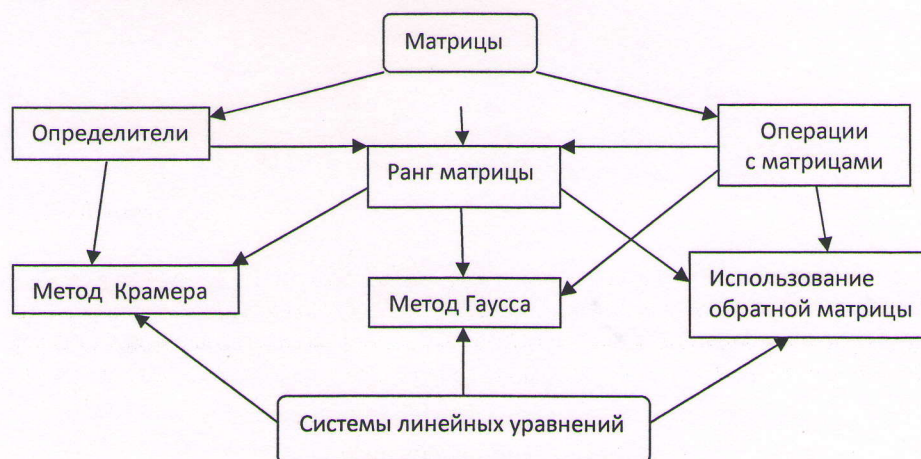
К примеру, при *модульной технологии* обучения содержание темы представлено в виде самостоятельных законченных блоков информации, при этом студент работает максимум времени самостоятельно, развивая способности к самоорганизации и самоконтролю [1, 2, 4, 6].

Основополагающим этапом проектирования технологии модульного обучения математике является разработка модулей. Проектирование модулей, нацеленных на систематизацию математических знаний, базируется на следующих дидактических принципах модульного обучения [3]:

- 1) блочная структура,
- 2) интегративность,
- 3) актуализация развивающего компонента содержания,
- 4) незамкнутость,
- 5) осознанная перспектива,
- 6) сотрудничество.

Приведем пример блочной структуры модулей «Матрицы» и «Системы линейных уравнений» (см. рисунок). Обратим внимание, что каждый модуль содержит в себе несколько блоков, представляющих собой полную систему знаний по определенной теме (принцип интегративности). В то же время можно видеть реализацию принципа незамкнутости, т.к. сведения, получен-

ные при изучении блока одного модуля, используются при освоении блока в другом модуле. Например, решение систем линейных уравнений с помощью формул Крамера возможно лишь при качественном и всестороннем изучении блока «Вычисление определителей n-го порядка».



В каждом блоке предлагаются задачи, решение которых развивает у обучающихся способность использовать имеющиеся знания в новых ситуациях и закреплять их умениями (принцип актуализации развивающего компонента содержания).

В качестве примера приведем одну из таких задач: исследовать и решить (если это возможно) систему линейных уравнений

$$\begin{cases} 2x - 3y + z = 2, \\ x + 5y - 4z = -5, \\ 4x + y - 3z = -4 \end{cases}$$

- с помощью формул Крамера,
- с помощью метода Гаусса,
- с использованием обратной матрицы.

Затем имеет смысл провести обсуждение способов решения с точки зрения рациональности. В качестве критерия рациональности можно использовать число выполненных операций сложения и умножения. Метод тем рациональнее, чем меньше требуется операций для его реализации. Также стоит учитывать универсальность метода. Например, метод Крамера подходит только для систем линейных уравнений, в которых количество уравнений равно числу переменных.

После решения системы линейных уравнений тремя способами студенты имеют возможность оценить степень рациональности каждого метода для каждой конкретной системы и сравнить их.

Учащиеся должны четко знать, для чего они изучают каждый модуль и каждый блок, чтобы осознанно пополнять систему своих математических знаний. Для этого должна быть осуществлена большая работа по созданию мотивации, а также приложение в каждый модуль задач с прак-

тической направленностью (принцип осознанной перспективы). В физике некоторые задачи сводятся к решению систем линейных уравнений с помощью оператора Лапласа.

Роль преподавателя-консультанта при модульном обучении подталкивает к сотрудничеству студента, это проявляется в подготовке и к базовым занятиям, и к занятиям по углубленному изучению, а также при отчетности по пройденным темам модуля (принцип сотрудничества).

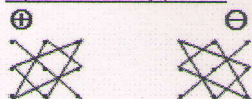
В начале изучения темы преподаватель должен ознакомить студентов со списком вопросов по модулю. Предлагаем примерный список вопросов для изучения модуля «Системы линейных уравнений».

1. Что понимают под системой двух линейных уравнений с двумя неизвестными?
2. Что называется решением системы уравнений?
3. Что значит «решить систему уравнений»?
4. Что представляет собой множество решений системы двух линейных уравнений с двумя неизвестными?
5. Какие системы уравнений называются эквивалентными?
6. Сформулируйте свойства эквивалентных систем уравнений.
7. Какие методы решения системы двух линейных уравнений с двумя неизвестными Вы знаете?
8. В чем сущность метода подстановки?
9. В чем сущность метода алгебраического сложения?
10. В чем сущность метода определителей?
11. Что такое определитель?
12. Сформулируйте правило вычисления определителя 2-го порядка.
13. Что понимают под системой трех уравнений с тремя неизвестными?
14. Что понимают под решением системы трех уравнений с тремя неизвестными?
15. В чем сущность метода Гаусса?

Другой вариант образовательной технологии — *использование опорного конспекта* при изложении содержания темы [5]. При такой технологии обеспечивается взаимодействие преподавателя и студента на основе предельного обобщения материала и его последующего развертывания — полноценного воспроизведения в сознании студента. Развивающий эффект этого метода обеспечивается за счет интенсивной интеллектуальной деятельности студента: полученные обобщенные знания необходимо аргументированно разъяснить. Этой формой работы можно пользоваться на практических занятиях с целью повторения материала, чтобы отработать его на практике. Опорный конспект может быть подготовлен преподавателем и предложен студентам для развернутого ответа по теме, либо подготовка опорного конспекта может быть предложена в качестве домашнего задания.

Например, к теме «Вычисление определителей 3-го порядка» может быть предложен следующий опорный конспект:

Правило Саррюса



A_{ik} – алгебраическое дополнение

элемента a_{ik} матрицы A .

M_{ik} – минор элемента a_{ik} матрицы A .

$$\Delta = a_{11}a_{22}a_{33} + a_{12}a_{23}a_{31} + a_{13}a_{21}a_{32} - a_{13}a_{22}a_{31} - a_{11}a_{23}a_{32} - a_{12}a_{21}a_{33}$$

Теорема Лапласа

ОПРЕДЕЛИТЕЛЬ 3-ГО ПОРЯДКА

$$\Delta = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix}, \quad b \in \mathbb{R}$$

$$\Delta = \begin{vmatrix} a'_{11} & a'_{12} & a'_{13} \\ 0 & a'_{22} & a'_{23} \\ 0 & 0 & a'_{33} \end{vmatrix} = a'_{11}a'_{22}a'_{33}$$

Свойства определителей

1. Если в Δ есть нулевой ряд, то $\Delta = 0$.
2. Если в Δ есть пропорциональные ряды, то $\Delta = 0$.
3. Если ряд Δ умножить на число, то Δ умножится на это число. (Постоянный множитель ряда можно вынести за знак определителя).
4. Если две строки Δ поменять местами, то Δ изменит знак.
5. Значение Δ не изменится, если к элементам одного ряда прибавить элементы другого ряда, умноженные на одно и то же число.

По представленному опорному конспекту преподаватель может устроить небольшой опрос либо предложить студентам самим сформулировать вопросы и задать их друг другу. Приведем примерный перечень вопросов.

1. Что называется определителем третьего порядка?
2. Для каких матриц можно вычислять определители?
3. Как определяются знаки и наборы множителей в произведениях с использованием правила Саррюса?
4. Как получить алгебраическое дополнение для элемента a_{ik} ?

Лекция или практическое занятие должны строиться таким образом, что для студента, не все усвоившего сразу, будут созданы условия для последующего понимания изложенных на занятиях мыслей. Совершенно очевидно, что ни математика, ни физика не в состоянии обеспечить студента знаниями на всю жизнь, но они обязаны вооружить его методами познания, сформировать познавательную самостоятельность.

Китайская мудрость гласит: «Я слышу – я забываю, я вижу – я запоминаю, я делаю – я усваиваю». Задача преподавателя организовать учебную деятельность таким образом, чтобы полученные знания были результатом не только усилий педагога, но и поиска студентов.

С целью активизации познавательной активности студентов можно предложить следующие виды образовательных технологий [5]:

— *технология уровневой дифференциации* (на практическом занятии предлагаются разноуровневые задания, чтобы обеспечить «ситуацию успеха» для слабых студентов и не давать скучать сильным);

— *проблемное обучение* (проблемные ситуации можно создавать как на лекциях, так и на любом этапе практического занятия);

— *исследовательские методы в обучении* (предложенный реферат на тему «Сравнительный анализ методов решения систем линейных уравнений» поможет глубоко проникнуть в изучаемую проблему);

— *тестовые технологии* (позволяют быстро проверить уровень освоенности темы, а также развивают внимание и логическое мышление);

— *групповые технологии* (позволяют организовать активную самостоятельную работу, например при повторении либо при проверке изученного материала);

— *информационно-коммуникационные технологии* (при наличии соответствующей аппаратуры обеспечивают принцип наглядности, а также стимулируют познавательную активность, если предложить студентам самим организовать презентации и разработать проекты по некоторым темам).

Кроме перечисленных образовательных технологий, можно также предложить различные разновидности лекций, как то: лекция-конференция, лекция-провокация (с заранее запланированными ошибками), проблемная лекция.

Конечно, применение разнообразных образовательных технологий требует от преподавателя гораздо больших временных затрат при подготовке к занятию, чем при подготовке занятия в стандартной форме: преподаватель рассказывает, студент (в лучшем случае) слушает и записывает. Однако результат, достигаемый при системной работе по использованию разнообразного набора образовательных технологий, стоит того, поскольку повышающийся интерес к предмету незамедлительно перейдет в качество усвоения материала, а также будет способствовать развитию у студентов познавательной активности вообще. Именно в этом и состоит цель образовательного процесса на сегодняшний день.

Библиографический список

1. *Акимова И. В., Губанова О. М., Титова Е. И.* Возможности реализации модульного подхода при обучении бакалавров педагогических специальностей на примере темы «Введение в алгебру логики» // *Современные проблемы науки и образования*. 2013. № 5. URL: <http://science—education.ru> (дата обращения: 29.04.2015).
2. *Буркина В. А., Титова Е. И.* О некоторых приоритетах модульного обучения в вузе // *Молодой ученый*. 2014. № 4. С. 925—927.
3. *Ермолаева Е. И.* Особенности реализации модульного обучения в системе высшего образования // *В мире научных открытий*. 2010. № 4—5. С. 109—110.
4. *Жидкова А. Е., Титова Е. И.* Рекомендации для преподавателей по использованию технологии модульного обучения // *Молодой ученый*. 2014. № 2 (61). С. 756—757.
5. *Колеченко А. К.* Энциклопедия педагогических технологий : пособие для преподавателей. СПб. : КАРО, 2004. 368 с.
6. *Титова Е. И.* Преподавание математики в рамках модульного обучения // *Вестник магистратуры*. 2014. № 4 (31), т. 2. С. 31—33.

ОБ ОДНОМ МЕТОДЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ОБОБЩЕННОЙ СИСТЕМЫ КОШИ – РИМАНА

В выпуклой области четырехмерного евклидова пространства для одной системы дифференциальных уравнений в частных производных, обобщающей известную систему Коши – Римана, находятся все решения.

Ключевые слова: система Коши – Римана, комплексное уравнение, невырожденное линейное преобразование.

All the solutions are found in a convex 4-Euclidean space for a specific system of partial differential equations generalizing a well-known Cauchy – Riemann system.

Key words: Cauchy – Riemann system, complex equation, nondegenerate linear transformation.

1. Введение

Системы дифференциальных уравнений, обобщающие известную систему Коши – Римана, в различных пространствах вещественных функций от двух вещественных переменных изучались многими математиками (см.: [2, с. 455—456]).

В настоящей работе мы рассмотрим систему

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial z} - \frac{\partial v}{\partial z_1} &= a(z, z_1)u - b(z, z_1)v + \varphi, \\ \frac{\partial u}{\partial z_1} + \frac{\partial v}{\partial z} &= b(z, z_1)u + a(z, z_1)v + \psi, \end{aligned} \quad (1)$$

где $z = x + iy$, $z_1 = x_1 + iy_1$, $u, v, a, b, \varphi, \psi$ – комплексные функции, определённые в выпуклой области D вещественного евклидова пространства E^4 переменных x, y, x_1, y_1 , $\partial/\partial z$ и $\partial/\partial z_1$ – известные дифференциальные операторы:

$$\partial/\partial z \equiv \partial_z = (1/2)(\partial/\partial x - i\partial/\partial y), \quad \partial/\partial z_1 \equiv \partial_{z_1} = (1/2)(\partial/\partial x_1 - i\partial/\partial y_1). \quad (2)$$

Если $z = x$, $z_1 = y$ и искомые $u(x, y)$, $v(x, y)$ и заданные функции $a(x, y)$, $b(x, y)$, $\varphi(x, y)$, $\psi(x, y)$ вещественные, система (1) полностью изучена И. Н. Векуа [1]. Комплексные решения $w(z) = u(x, y) + iv(x, y)$ такой системы названы им обобщёнными аналитическими функциями. Ф. Д. Гаховым [2, с. 434] такая система названа нормальной.

Аналогичная система с комплекснозначными искомыми и заданными функциями исследована в [3]. В ней найдены все решения системы, получены интегральные представления решений, ставится и решается краевая задача типа Римана – Гильберта. Для этой же системы в [4] рассматривается краевая задача типа Пуанкаре. Следуя Ф. Д. Гахову мы систему (1) будем также называть нормальной.

Л. Г. Михайловым [6] указан способ исследования обобщенной системы Коши – Римана

$$\partial_{\bar{z}} w = aw + b\bar{w} + f, \quad \partial_{\bar{z}_1} w = cw + d\bar{w} + g$$

с двумя независимыми z и z_1 комплексными переменными.

В данной статье мы укажем простой метод исследования системы (1). Именно, считая функции $a, b, \varphi, \psi, u, v \in C^1(D)$ ($C^1(D)$ — класс комплексных непрерывно дифференцируемых в D функций) рассмотрим [5] линейное преобразование

$$AX = Q, \quad (3)$$

где

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad X = \begin{pmatrix} x \\ y \\ x_1 \\ y_1 \end{pmatrix}, \quad Q = \begin{pmatrix} p \\ q \\ \lambda \\ \mu \end{pmatrix} \quad (4)$$

области D в область G переменных p, q, λ, μ , сводящее систему (1) к двум комплексным дифференциальным уравнениям.

Так как $\det A = 4$, то (3) — невырожденное преобразование $D \rightarrow G$, и, следовательно, существует единственное обратное преобразование $G \rightarrow D$: $X = A^{-1}Q$.

Далее, имея (в силу (3), (4))

$$z - iz_1 = (x + y_1) + i(y - x_1) = \lambda + i\mu = \eta,$$

согласно (2), получим

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial \zeta} + \frac{\partial}{\partial \eta}, \quad \frac{\partial}{\partial z_1} = i\left(\frac{\partial}{\partial \zeta} - \frac{\partial}{\partial \eta}\right).$$

Откуда

$$\frac{\partial}{\partial z} + i\frac{\partial}{\partial z_1} = 2\frac{\partial}{\partial \eta}, \quad \frac{\partial}{\partial z} - i\frac{\partial}{\partial z_1} = 2\frac{\partial}{\partial \zeta}. \quad (5)$$

2. О решениях системы

Умножив второе уравнение системы (1) на i и сложив с первым, получим,

$$\left(\frac{\partial}{\partial z} + i\frac{\partial}{\partial z_1}\right)h(z, z_1) = A(z, z_1)h(z, z_1) + \Psi(z, z_1), \quad (6)$$

где $h(z, z_1) = u + iv$, $A(z, z_1) = a + ib$, $\Psi(z, z_1) = \varphi + i\psi$.

Рассмотрим уравнение

$$\left(\frac{\partial}{\partial z} + i\frac{\partial}{\partial z_1}\right)h(z, z_1) = f(z, z_1). \quad (7)$$

В обозначениях

$$h(z, z_1) = H(p, q, \lambda, \mu) = H(\zeta, \eta), \quad f(z, z_1) = F(\zeta, \eta), \quad \text{уравнение (7)}$$

(в силу (5)) в области G примет вид

$$\partial H(\zeta, \eta) / \partial \eta = (1/2) F(\zeta, \eta). \quad (8)$$

Далее, умножив первое уравнение системы (1) на i и сложив со вторым уравнением, получим

$$\left(\frac{\partial}{\partial z} - i\frac{\partial}{\partial z_1}\right)h_1(z, z_1) = A_1(z, z_1)h_1(z, z_1) + \Psi_1(z, z_1), \quad (9)$$

где $h_1(z, z_1) = u - iv$, $A_1(z, z_1) = a - ib$, $\Psi_1(z, z_1) = \varphi - i\psi$.

Поскольку все рассматриваемые функции комплекснозначные, то функции h и h_1 , A и A_1 , Ψ и Ψ_1 не являются комплексно сопряженными.

Теперь, рассмотрев уравнение

$$\left(\frac{\partial}{\partial z} - i\frac{\partial}{\partial z_1}\right)h_1(z, z_1) = f_1(z, z_1) \quad (10)$$

и полагая $h_1(z, z_1) = H_1(p, q, \lambda, \mu) = H_1(\zeta, \eta)$, $f_1(z, z_1) = F_1(\zeta, \eta)$, уравнение (10) в области G (согласно (5)) запишется в виде

$$\partial H_1(\zeta, \eta) / \partial \zeta = (\frac{1}{2}) F_1(\zeta, \eta). \quad (11)$$

В уравнении (8) ((11)) переменная ζ (η) играет роль параметра. Будем называть эти уравнения *основными*. Они подробно изучены И. Н. Векуа [1]. Откуда сразу следуют [1, с. 41 – 42], [2, с. 432 – 435]:

Теорема 1. Функция

$$H(\zeta, \bar{\eta}) = -\frac{1}{2\pi} \iint_{G(\zeta)} \frac{F(p, q, \lambda^0 \mu^0)}{\bar{\eta}^0 - \bar{\eta}} d\lambda^0 \wedge d\mu^0 + \tilde{H}(p, q, \lambda - i\mu),$$

где $\tilde{H}(p, q, \lambda - i\mu)$ – любая функция, голоморфная от $\lambda - i\mu = \bar{\eta}$, является общим решением уравнения (8).

Теорема 2. Общее решение уравнения (6) в G имеет вид

$$\tilde{H}(\zeta, \bar{\eta}) = \exp\langle \omega(\zeta, \bar{\eta}) \rangle [\Phi(\zeta, \bar{\eta}) + \omega^0(\zeta, \eta)],$$

где

$$\omega(\zeta, \bar{\eta}) = -\frac{1}{2\pi} \iint_{G(\zeta)} \frac{A(\zeta, \eta^0)}{\bar{\eta}^0 - \bar{\eta}} d\lambda^0 \wedge d\mu^0,$$

$\Phi(\zeta, \bar{\eta})$ – любая функция, голоморфная от $\bar{\eta}$, $\omega^0(\zeta, \eta)$ – частное решение уравнения $\frac{\partial \omega^0}{\partial \eta} = \exp\langle -\omega(\zeta, \bar{\eta}) \rangle \Psi(\zeta, \eta)$.

Теорема 3. Функция

$$H_1(\bar{\zeta}, \eta) = -\frac{1}{2\pi} \iint_{G(\eta)} \frac{F_1(p^0, q^0, \lambda, \mu)}{\bar{\zeta}^0 - \bar{\zeta}} dp^0 \wedge dq^0 + \tilde{H}_1(p - iq, \lambda, \mu),$$

где $\tilde{H}_1(p - iq, \lambda, \mu)$ – любая функция, голоморфная от $p - iq = \bar{\zeta}$, является общим решением уравнения (11).

Теорема 4. Общее решение уравнения (9) в G имеет вид

$$\tilde{H}_1(\bar{\zeta}, \eta) = \exp\langle \omega_1(\bar{\zeta}, \eta) \rangle [\Phi_1(\bar{\zeta}, \eta) + \omega_1^0(\bar{\zeta}, \eta)],$$

где $\Phi_1(\bar{\zeta}, \eta)$ – любая функция, голоморфная от $\bar{\zeta} = p - iq$,

$$\omega_1(\bar{\zeta}, \eta) = -\frac{1}{2\pi} \iint_{G(\eta)} \frac{A_1(\bar{\zeta}^0, \eta)}{\bar{\zeta}^0 - \bar{\zeta}} dp^0 \wedge dq^0,$$

$\omega_1^0(\bar{\zeta}, \eta)$ – частное решение уравнения $\frac{\partial \omega_1^0}{\partial \bar{\zeta}} = \exp\langle -\omega_1(\bar{\zeta}, \eta) \rangle \Psi_1(\bar{\zeta}, \eta)$.

Замечания: 1. Теперь, зная в области D функции $h(z, z_1)$ и $h_1(z, z_1)$, получим необходимый вид всех решений $(u(z, z_1), v(z, z_1))$ системы (1), именно

$$\begin{pmatrix} u(z, z_1) \\ v(z, z_1) \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -i & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h(z, z_1) \\ h_1(z, z_1) \end{pmatrix}.$$

2. Имея для каждого уравнения (8) и (11) эквивалентные интегральные уравнения, нетрудно получить интегральные представления всех решений $(u(z, z_1), v(z, z_1))$ системы (1) и по известной методике ставить и исследовать различные краевые задачи.

Библиографический список

1. Векуа И. Н. Обобщенные аналитические функции. М. : Физматгиз, 1959. 628 с.
2. Гахов Ф. Д. Краевые задачи. 2-е изд. М. : Физматгиз, 1963. 640 с.
3. Кусковский Л. Н. О краевой задаче типа Римана — Гильберта // Дифференциальные уравнения. 1975. Т. 11, № 3. С. 523—532.
4. Кусковский Л. Н. Об одной краевой задаче Пуанкаре // Вестник Ивановского государственного университета. Сер.: Естественные, общественные науки. 2014. Вып. 2. С. 99—104.
5. Кусковский Л. Н. Об одной обобщенной системе Коши — Римана с двумя независимыми комплексными переменными // Известия вузов. Математика. 1980. № 7 (218). С. 45—46.
6. Михайлов Л. Г. Об одном способе исследования обобщенной системы Коши — Римана с двумя независимыми комплексными переменными // Доклады Академии наук ТаджССР. 1974. Т. 17, № 9. С. 7—9.

УДК 512.543

Н. С. Савельичева, Е. В. Соколов

ОДНО НЕОБХОДИМОЕ УСЛОВИЕ НИЛЬПОТЕНТНОЙ АППРОКСИМИРУЕМОСТИ HNN-РАСШИРЕНИЯ НИЛЬПОТЕНТНОЙ ГРУППЫ

Пусть G — HNN-расширение нильпотентной группы A со связанными подгруппами H и K , причем $A \neq H \cup K$. Доказано, что если группа G аппроксимируется нильпотентными группами, то существует такое простое число p , что подгруппы H и K p' -изолированы в группе A .

Ключевые слова: нильпотентная аппроксимируемость, HNN-расширение.

Let G be an HNN extension of a nilpotent group A with associated subgroups H and K , $A \neq H \cup K$. We prove that if G is residually nilpotent then there exists a prime p such that H and K are p' -isolated in A .

Key words: residual nilpotence, HNN extension.

1. Введение. Формулировка результатов

Напомним, что группа X называется аппроксимируемой классом групп C , если для любого неединичного элемента $x \in X$ существует гомоморфизм группы X на группу из класса C , переводящий x в элемент, отличный от 1. Д. Н. Азаровым и Е. А. Ивановой в работе [1] было доказано следующее утверждение.

Теорема 1. Пусть P — свободное произведение некоторого семейства локально нильпотентных групп с одной объединенной подгруппой Q . И пусть подгруппа Q хотя бы в двух свободных множителях содержится собственным образом. Если группа P аппроксимируется нильпотентными группами, то су-

существует такое простое число p , что подгруппа Q p' -изолирована в каждом свободном множителе.

Напомним, что подгруппа Y группы X называется p' -изолированной в группе X , если для всякого элемента $x \in X$ и для всякого простого числа $q \neq p$ из условия $x^q \in Y$ следует, что $x \in Y$.

Пусть до конца изложения A — некоторая нильпотентная группа; H и K — изоморфные подгруппы группы A такие, что $A \neq H \cup K$; $\varphi: H \rightarrow K$ — изоморфизм; $G = \langle A, t; t^{-1}Ht = K, \varphi \rangle$ — HNN-расширение группы A с проходной буквой t и подгруппами H и K , связанными при помощи изоморфизма φ . Целью настоящей статьи является доказательство следующего утверждения.

Теорема 2. Если группа G аппроксимируется нильпотентными группами, то существует такое простое число p , что подгруппы H и K p' -изолированы в группе A .

2. Вспомогательные утверждения

Говорят, что конечная группа имеет примарный порядок, если ее порядок является степенью некоторого простого числа.

Предложение 1. Пусть группа X аппроксимируется нильпотентными группами, Y — конечно порожденная подгруппа группы X . Тогда для любого неединичного элемента $y \in Y$ существует гомоморфизм группы Y на конечную группу примарного порядка, при котором образ элемента y по-прежнему отличен от 1.

Доказательство. Так как группа X аппроксимируется нильпотентными группами, то существует гомоморфизм ρ этой группы на нильпотентную группу, переводящий y в неединичный элемент.

Так как гомоморфный образ конечно порожденной группы является конечно порожденной группой, следовательно, ограничение σ гомоморфизма ρ на подгруппу Y является гомоморфизмом этой подгруппы на конечно порожденную нильпотентную группу и $\sigma \neq 1$.

Если порядок элемента $y\sigma$ бесконечен, то он не принадлежит периодической части $\tau(Y\sigma)$ группы $Y\sigma$ и, значит, $(y\sigma)\tau(Y\sigma)$ — неединичный элемент фактор-группы $Y\sigma/\tau(Y\sigma)$. Группа $Y\sigma/\tau(Y\sigma)$ является конечно порожденной нильпотентной и не имеет кручения. Поэтому по теореме Грюнберга [4, теорема 2.1] она аппроксимируется конечными p -группами для любого простого числа p .

Если порядок элемента $y\sigma$ конечен, выберем простое число p , которое делит порядок $y\sigma$. Тогда $y \notin \tau_{p'}(Y\sigma)$, где $\tau_{p'}(Y\sigma)$ обозначает множество всех элементов группы $Y\sigma$, порядки которых конечны и взаимно просты с p . Множество $\tau_{p'}(Y\sigma)$ является характеристической подгруппой группы $Y\sigma$ (см., например, [3, с. 12]), поэтому определена фактор-группа $Y\sigma/\tau_{p'}(Y\sigma)$ и $(y\sigma)\tau_{p'}(Y\sigma)$ — ее неединичный элемент. Так как порядки всех элементов группы $Y\sigma/\tau_{p'}(Y\sigma)$ либо бесконечны, либо являются степенями числа p , то снова по теореме Грюнберга она аппроксимируется конечными p -группами.

Таким образом, в обоих случаях мы можем продолжить гомоморфизм σ до гомоморфизма группы Y на группу примарного порядка, переводящего u в отличный от 1 элемент.

Предложение 2. Пусть p и q — различные простые числа, X — конечная группа, порядок которой равен p^n для некоторого $n \geq 1$. Тогда для любого элемента $x \in X$ найдется целое число m такое, что $x = x^{qm}$.

Доказательство. Пусть $x \in X$. Тогда $x^{p^n} = 1$. Из неравенства $q \neq p$ следует, что $(q, p^n) = 1$ и, значит, существуют числа $m, k \in \mathbb{Z}$ такие, что $qm + p^nk = 1$. Тогда $x = x^{qm+p^nk} = (x^q)^m (x^{p^n})^k = x^{qm}$, что и требовалось.

Пусть $\varepsilon, \delta \in \{1, -1\}$, $a, b, c, d \in A$. Рассмотрим две последовательности простых коммутаторов:

$$u_1 = c, u_2 = [t^{-\varepsilon}at^\varepsilon, u_1], u_3 = [t^{-\varepsilon}at^\varepsilon, u_2], \dots$$

$$v_1 = d, v_2 = [t^{-\delta}bt^\delta, v_1], v_3 = [t^{-\delta}bt^\delta, v_2], \dots$$

и положим $w_n = [u_n, t^{-3}v_n t^3]$ для всех $n \geq 1$.

Предложение 3. Пусть m — степень нильпотентности группы A . Если выполняется одно из следующих двух условий:

$$1) \varepsilon = 1 \text{ и } a \in H,$$

$$2) \varepsilon = -1 \text{ и } a \in K$$

то для каждого $n > 1$ u_n — простой коммутатор веса n элементов группы A и при $n > m$ $u_n = 1$.

Если выполняется одно из следующих двух условий:

$$3) \delta = 1 \text{ и } b \in H,$$

$$4) \delta = -1 \text{ и } b \in K$$

то для каждого $n > 1$ v_n — простой коммутатор веса n элементов группы A и при $n > m$ $v_n = 1$.

Если выполняется хотя бы одно из условий 1–4, то при $n > m$ $w_n = 1$.

Доказательство. Покажем, что для каждого $n > 1$ u_n — простой коммутатор веса n элементов группы A . Будем рассуждать индукцией по n .

Если $\varepsilon = 1$ и $a \in H$, то $t^{-\varepsilon}at^\varepsilon \in K$. Если $\varepsilon = -1$ и $a \in K$, то $t^{-\varepsilon}at^\varepsilon \in H$. Поэтому база индукции очевидна.

Предположим, что u_n обладает указанным свойством. Тогда при выполнении любого из условий 1–2 элемент $u_{n+1} = [t^{-\varepsilon}at^\varepsilon, u_n]$ является коммутатором элементов из группы A и, следовательно, сам принадлежит этой группе.

Так как m — степень нильпотентности группы A , то при $n > m$ $u_n = 1$.

Свойства элементов v_n проверяются аналогично.

Пусть выполняется хотя бы одно из условий 1–4 и $n > m$. Тогда $u_n = 1$ или $v_n = 1$. Если $u_n = 1$, то $[u_n, t^{-3}v_n t^3] = 1$, если же $v_n = 1$, то $[u_n, t^{-3}v_n t^3] = [u_n, 1] = 1$. Предложение доказано.

Напомним, что любой элемент $g \in G$ может быть записан в приведенной форме:

$$g = g_0 t^{\varepsilon_0} \dots g_{n-1} t^{\varepsilon_{n-1}} g_n,$$

где $g_i \in A$, $\varepsilon_i = \pm 1$ и, если $\varepsilon_{i-1} = -1$, $\varepsilon_i = 1$, то $g_i \notin H$, если же $\varepsilon_{i-1} = 1$, $\varepsilon_i = -1$, то $g_i \notin K$. Лемма Бриттона (см., например, [2, с. 249]) утверждает,

что любой элемент, обладающий приведенной записью, в которой есть хотя бы одна буква t или t^{-1} , отличен от единицы в группе G . Отсюда следует, что хотя один и тот же элемент может иметь различные приведенные записи, однако число вхождений букв t и t^{-1} во всех них одинаково. Оно называется длиной элемента g .

Предложение 4. Пусть выполняются следующие условия:

- 1) $a \notin H$, если $\varepsilon = 1$, и $a \notin K$, если $\varepsilon = -1$;
- 2) $b \notin H$, если $\delta = 1$, и $b \notin K$, если $\delta = -1$;
- 3) $c, d \notin H \cup K$.

Тогда для любого $n > 1$:

- 1) элемент u_n имеет приведенную запись длины 2^n вида

$$u_n = (t^{-\varepsilon}at^\varepsilon)^{-1}c^{-1} \dots (t^{-\varepsilon}at^\varepsilon)c;$$

- 2) элемент v_n имеет приведенную запись длины 2^n вида

$$v_n = (t^{-\delta}bt^\delta)^{-1}d^{-1} \dots (t^{-\delta}bt^\delta)d;$$

- 3) элемент w_n отличен от 1.

Доказательство. Проверим, что имеет место утверждение 1, воспользовавшись для этого индукцией по n . База индукции очевидна, поэтому, предполагая справедливость равенства при n , покажем, что оно верно и при $n + 1$.

Пусть $u_n = (t^{-\varepsilon}at^\varepsilon)^{-1}c^{-1} \dots (t^{-\varepsilon}at^\varepsilon)c$. Тогда

$$\begin{aligned} u_{n+1} &= \\ &= (t^{-\varepsilon}at^\varepsilon)^{-1}u_n^{-1}(t^{-\varepsilon}at^\varepsilon)u_n = \\ &= (t^{-\varepsilon}at^\varepsilon)^{-1}(c^{-1}(t^{-\varepsilon}at^\varepsilon)^{-1} \dots c(t^{-\varepsilon}at^\varepsilon)) \times \\ &\quad \times (t^{-\varepsilon}at^\varepsilon)((t^{-\varepsilon}at^\varepsilon)^{-1}c^{-1} \dots (t^{-\varepsilon}at^\varepsilon)c) = \\ &= (t^{-\varepsilon}at^\varepsilon)^{-1}c^{-1}(t^{-\varepsilon}at^\varepsilon)^{-1} \dots c(t^{-\varepsilon}at^\varepsilon)c^{-1} \dots (t^{-\varepsilon}at^\varepsilon)c. \end{aligned}$$

Так как выражения

$$(t^{-\varepsilon}at^\varepsilon)u_n = c^{-1} \dots (t^{-\varepsilon}at^\varepsilon)c$$

и

$$u_n^{-1} = c^{-1}(t^{-\varepsilon}at^\varepsilon)^{-1} \dots c(t^{-\varepsilon}at^\varepsilon)$$

приведены по индуктивному предположению, следовательно, все выражение приведено. И поэтому приведенная запись элемента u_{n+1} имеет длину

$$2 + 2 + 2^n + 2^n - 4 = 2^{n+1}.$$

Утверждение 2 проверяется аналогично. Докажем утверждение 3.

$$\begin{aligned} w_n &= \\ &= u_n^{-1}t^{-3}v_n^{-1}t^3u_nt^{-3}v_nt^3 = \\ &= ((t^{-\varepsilon}at^\varepsilon)^{-1}c^{-1} \dots (t^{-\varepsilon}at^\varepsilon)c)^{-1}t^{-3}((t^{-\delta}bt^\delta)^{-1}d^{-1} \dots (t^{-\delta}bt^\delta)d)^{-1}t^3 \times \\ &\quad \times ((t^{-\varepsilon}at^\varepsilon)^{-1}c^{-1} \dots (t^{-\varepsilon}at^\varepsilon)c)t^{-3}((t^{-\delta}bt^\delta)^{-1}d^{-1} \dots (t^{-\delta}bt^\delta)d)t^3 = \\ &= (c^{-1}(t^{-\varepsilon}at^\varepsilon)^{-1} \dots c(t^{-\varepsilon}at^\varepsilon))t^{-3}(d^{-1}(t^{-\delta}bt^\delta)^{-1} \dots dt^{-\delta}bt^\delta)t^3 \times \\ &\quad \times ((t^{-\varepsilon}at^\varepsilon)^{-1}c^{-1} \dots (t^{-\varepsilon}at^\varepsilon)c)t^{-3}((t^{-\delta}bt^\delta)^{-1}d^{-1} \dots (t^{-\delta}bt^\delta)d)t^3 = \\ &= c^{-1}(t^{-\varepsilon}at^\varepsilon)^{-1} \dots ct^{-\varepsilon}at^{\varepsilon-3}d^{-1}(t^{-\delta}bt^\delta)^{-1} \dots dt^{-\delta}bt^{\delta+3-\varepsilon} \times \\ &\quad \times a^{-1}t^\varepsilon c^{-1} \dots (t^{-\varepsilon}at^\varepsilon)ct^{-3-\delta}b^{-1}t^\delta d^{-1} \dots (t^{-\delta}bt^\delta)dt^3. \end{aligned}$$

Так как $\varepsilon - 3 < 0$, то при $\varepsilon = 1$ выражение $t^{-\varepsilon}at^{3-\varepsilon}$ приведено. Если же $\varepsilon = -1$, то $a \notin K$ и произведение $t^{-\varepsilon}at^{3-\varepsilon}$ также приведено. Аналогично проверяется приведенность выражений $t^{\delta+3-\varepsilon}a^{-1}t^\varepsilon$, $t^{-\delta}bt^{\delta+3-\varepsilon}$ и $t^{-3-\delta}b^{-1}t^\delta$. Здесь всегда $\delta + 3 - \varepsilon > 0$ и $-3 - \delta < 0$.

Поскольку $c, d \notin H \cup K$, при любых значениях степеней t , которые их окружают, t -редукция невозможна. Таким образом, элемент w_n имеет приведенную запись ненулевой длины и, следовательно, отличен от 1.

3. Доказательство теоремы 2

Приводимое далее рассуждение следует идеям работы [1].

Если подгруппа H изолирована в группе A , то доказывать нечего. Поэтому далее будем считать, что H не является изолированной в A . Следовательно, существует элемент $a \in A \setminus H$ и простое число p такие, что $a^p \in H$. Покажем, что H — p' -изолированная подгруппа группы A .

Предположим противное. Тогда найдутся простое число $q \neq p$ и элемент $b \in A \setminus H$ такие, что $b^q \in H$. Возьмем $c, d \in A \setminus (H \cup K)$ и положим $\varepsilon = \delta = 1$. Тогда по предложению 4 элемент w_n отличен от 1 для всех $n > 1$.

Обозначим через B подгруппу группы G , порожденную элементами a, b, c, d, t .

Будем далее считать, что n — фиксированное число, большее степени нильпотентности группы A . По предложению 1 существует гомоморфизм σ группы B на конечную группу P порядка s^m , где s — некоторое простое число, $m \geq 1$, переводящий w_n в отличный от 1 элемент. Тогда хотя бы одно из чисел p или q не делит порядок группы P .

Отсюда и из предложения 2 следует, что $a\sigma = (a\sigma)^{pk}$ или $b\sigma = (b\sigma)^{ql}$ для подходящих целых чисел k и l . Положим $a' = a^{pk}$, если $a\sigma = (a\sigma)^{pk}$, и $a' = a$ в противном случае. Аналогично определим элемент b' : если $b\sigma = (b\sigma)^{ql}$, то $b' = b^{ql}$, иначе $b' = b$. Положим также $c' = c$, $d' = d$, $\varepsilon' = \varepsilon$, $\delta' = \delta$ и определим элементы u'_n , v'_n и w'_n согласно формулам, аналогичным приведенным перед предложением 3. Тогда $w'_n\sigma = w_n\sigma \neq 1$. Но $a^p, b^q \in H$ и по предложению 3 $w'_n = 1$, следовательно, $w'_n\sigma = 1$. Таким образом, получили противоречие, и подгруппа H p' -изолирована в группе A .

Покажем, что K — p' -изолированная подгруппа группы A . Допустим противное. Тогда найдутся простое число $r \neq p$ и элемент $b \in A \setminus K$ такие, что $b^r \in K$. Снова возьмем элементы $c, d \in A \setminus (H \cup K)$ и положим $\varepsilon = 1$, $\delta = -1$.

Рассуждая, как и выше (с точностью до замены q на r), мы получаем, что при n , большем степени нильпотентности группы A , элемент w_n отличен от 1, но переходит в 1 при каждом гомоморфизме подгруппы

$$B = \langle a, b, c, d, t \rangle$$

на группу примарного порядка, что противоречит предложению 1.

Таким образом, подгруппа K также является p' -изолированной в группе A . Теорема доказана.

Библиографический список

1. Азаров Д. Н., Иванова Е. А. К вопросу о нильпотентной аппроксимируемости свободного произведения с объединением локально нильпотентных групп // Научные труды Ивановского государственного университета. Математика. 1999. Вып. 2. С. 5—7.
2. Линдон Р., Шупп П. Комбинаторная теория групп. М.: Мир, 1980. 447 с.
3. Холл Ф. Нильпотентные группы // Математика: периодический сборник переводов иностранных статей. 1968. Т. 12, № 1. С. 3—36.
4. Gruenberg K. W. Residual properties of infinite soluble groups // Proc. Lond. Math. Soc. 1957. Vol. 7. P. 29—62.

УДК 517.11

Б. Я. Солон

ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ ОПЕРАТОРЫ И СВОДИМОСТИ МНОЖЕСТВ

В статье предлагается определить сводимости множеств с помощью различных классов функциональных частично вычислимых операторов в смысле Роджерса. Доказано, что при этом появляются как хорошо известные алгоритмические сводимости множеств, так и новые.

Ключевые слова: оператор перечисления, частично вычислимый оператор, сводимость по перечислимости, Тьюрингова сводимость.

The paper proposes to determine the reducibility of sets using different classes of functional partial computable operators in the sense of Rogers. It is proved that in this case appear as a well-known algorithmic reducibility of sets and new.

Key words: enumeration operator, partial computable operator, enumeration reducibility, Turing reducibility.

Введем обозначения: $\omega = \{0, 1, 2, \dots\}$ – множество натуральных чисел, $\langle x, y \rangle$ – канторовский номер пары (x, y) , если $z = \langle x, y \rangle$, то $\langle z \rangle_1 = x$ и $\langle z \rangle_2 = y$, $\langle A \rangle_1 = \{x: \exists y[\langle x, y \rangle \in A]\}$ и $\langle A \rangle_2 = \{y: \exists x[\langle x, y \rangle \in A]\}$. Пусть 2^ω – множество подмножеств ω , элементы 2^ω называются *множествами*. Множества будем обозначать большими латинскими буквами A, B, C, \dots, X .

Пусть PF – множество одноместных частичных арифметических функций $\alpha: \omega \rightarrow \omega$, $dom\alpha, ran\alpha, graph\alpha = \{\langle x, \alpha(x) \rangle: x \in dom\alpha\}$ – область определения, множество значений, график функции α , соответственно. Запись $\alpha(x) \downarrow$, что $x \in dom\alpha$, и $\alpha(x) \uparrow$, что $x \notin dom\alpha$. Функция α называется *тотальной*, если $dom\alpha = \omega$. Буквы f, g, p будем использовать только для обозначения *тотальных функций*. Множество тотальных функций обозначим через TF .

Будем придерживаться системы обозначений, принятых в монографии [2]. В частности, W_z – вычислимо перечислимое множество с гёделевым номером z , φ_z – частично вычислимая функция с гёделевым номером z . Множество A называется *однозначным*, если $A = graph\alpha$ для некоторой функции $\alpha \in PF$. Введем обозначения: SV – множество однозначных множеств, $\tau: PF \rightarrow SV: \tau(\alpha) = graph\alpha$, $\tau^{-1}: SV \rightarrow PF: \tau^{-1}(A) = \alpha$, где $A = graph\alpha$. С целью полноты изложения приведем ряд основных определений из монографии [2] с некоторыми терминологическими изменениями.

Определение 1. Любое всюду определенное однозначное отображение $\Phi: 2^\omega \rightarrow 2^\omega$ называется *оператором*. Любое всюду определенное однозначное отображение $\Psi: PF \rightarrow PF$ называется *функциональным оператором*.

Всякий функциональный оператор Ψ определяет отображение $\Gamma = \tau\Psi\tau^{-1}: SV \rightarrow SV$ и наоборот, каждое отображение $\Gamma: SV \rightarrow SV$ определяет функциональный оператор $\Psi = \tau^{-1}\Gamma\tau: PF \rightarrow PF$. Пусть Γ_Φ – ограничение оператора Φ на те однозначные множества A , для которых $\Phi(A)$ – также однозначное множество, тогда $\Gamma_\Phi: SV \rightarrow SV: \Gamma_\Phi(A) = \Phi(A)$ – *частичное ото-*

© Солон Б. Я., 2015

бражение и $\Psi = \tau^{-1}\Gamma_{\Phi}\tau: PF \rightarrow PF$ – *частичный функциональный оператор*. В этом случае говорят, что Ψ *определяется оператором* Φ .

Определение 2. Оператор $\Phi_z(X) = \{x: \exists u[(x, u) \in W_z \wedge D_u \subseteq X]\}$ называется *e-оператором с гёделевым номером* z .

Очевидно, что любой e-оператор Φ обладает свойствами:

- (i) *Монотонности:* $A \subseteq B \Rightarrow \Phi(A) \subseteq \Phi(B)$
- (ii) *Непрерывности:* $\forall x[x \in \Phi(A) \Rightarrow \exists D[|D| < \infty \ \& D \subseteq A \ \wedge x \in \Phi(D)]]$

Определение 3. Функциональный оператор Ψ называется *частично вычислимым* (ч.в.) [в терминологии Роджерса – *частично рекурсивным*], если он определяется некоторым e-оператором Φ_z . Обозначим через Ψ_z ч.в. оператор, определяемый e-оператором Φ_z .

Определение 4. Частично вычислимый оператор Ψ называется *вычислимым* (в.) [в терминологии Роджерса – *рекурсивным*], если он определяется таким e-оператором Φ_z , что функциональный оператор $\Psi: PF \rightarrow PF$ является всюду определенным. Другими словами, функциональный оператор $\Psi: PF \rightarrow PF$ вычислим, если существует $z \in \omega$, для которого $\Psi(\alpha) = \tau^{-1}\Gamma_{\Phi_z}\tau(\alpha) \in PF$ для всех $\alpha \in PF$.

Определение 5. Частично вычислимый оператор Ψ называется *общевычислимым* (о.в.) [в терминологии Роджерса – *общерекурсивным*], если $TF \subseteq \text{dom}\Psi$ и $\Psi(TF) \subseteq TF$. Другими словами, ч.в. оператор Ψ является о.в., если он определен на всех тотальных функциях и $\Psi(f) \in TF$ для всех $f \in TF$.

Введем обозначения: $E = \{\Phi_z: z \in \omega\}$ – множество всех e-операторов; $PC_e = \{\Psi_z: z \in \omega\}$ – множество всех ч.в. операторов; C_e – множество всех в. операторов; GC_e – множество всех о.в. операторов. Заметим, что все три множества функциональных операторов содержат тождественный оператор I и замкнуты относительно операции композиции $*$.

Основная теорема об операторах [2, Теорема 9-XXIII] показывает, что если функциональные операторы рассматривать как отображения из TF в PF , то всякий ч.в. оператор может быть продолжен до в. оператора. Более того, такое продолжение может быть осуществлено равномерно, следовательно, существует эффективный пересчет всех в. операторов, определенных на TF .

Приведем точную формулировку основной теоремы об операторах.

Теорема 1. Существует тотальная вычислимая функция σ , такая, что для любого $z \in \omega$, если e-оператор Φ_z определяет частично вычислимый оператор Ψ , то $\Phi_{\sigma(z)}$ определяет вычислимый оператор Ψ' , такой, что

$$\forall f[f \in \text{dom}\Psi' \cap TF \Rightarrow \Psi'(f) = \Psi(f)]$$

Пусть $B \subseteq PC_e$ – произвольное множество ч.в. операторов, содержащее I и замкнутое относительно операции композиции $*$. Следуя Розинасу [1], назовем любое такое множество B *функциональной базой*. С каждой функциональной базой можно связать *сводимость* на множестве PF и *сводимости* на множестве 2^ω , причем возникают сводимости как *по разрешимости* (т.е. сводимости, из которых следует \leq_T) и сводимости *по перечислимости* (т.е. сводимости, из которых следует \leq_e).

Приведем некоторые определения сводимостей на множестве PF с использованием функциональных баз. Для любых $\alpha, \beta \in PF$ будем считать по определению $\alpha \leq_b \beta \Leftrightarrow (\exists \Psi \in B)[\alpha = \Psi(\beta)]$. В частности, если $B = PC_e$, то возникает известная сводимость \leq_e [4], если $B = C_e$, то возникает своди-

мость \leq_{ce} [9], если $B = GC_e$, то возникает малоизученная сводимость \leq_{gce} . Другими словами, имеем следующие сводимости на PF :

$$\begin{aligned} \alpha \leq_e \beta &\Leftrightarrow (\exists \Psi \in PC_e)[\alpha = \Psi(\beta)]; \\ \alpha \leq_{ce} \beta &\Leftrightarrow (\exists \Psi \in C_e)[\alpha = \Psi(\beta)]; \\ \alpha \leq_{gce} \beta &\Leftrightarrow (\exists \Psi \in GC_e)[\alpha = \Psi(\beta)]. \end{aligned}$$

Дополнительно к классическим базам, полезно ввести функциональную базу M , которая не рассматривается в монографии Х. Роджерса [2], но имеет важное приложение в контексте данной статьи.

Следуя Л. Сассо [9], скажем, что частичная функция α получена из функции β с помощью частично вычислимого оператора Ψ из множества M , если α получена из β и начальных функций $s(x) = x + 1$; $I_n^k(x_1, \dots, x_n) = x_k$; $o(x) = 0$ с помощью конечного числа применений операций подстановки, примитивной рекурсии и минимизации. Функциональные операторы из множества M будем называть μ -операторами.

Определение 7. $\alpha \leq_\mu \beta \Leftrightarrow (\exists \Psi \in M)[\alpha = \Psi(\beta)]$

Теперь определим сводимости на 2^ω с помощью рассмотренных выше функциональных баз. Напомним, что

$$\begin{aligned} c_A(x) &= \begin{cases} 1, & \text{если } x \in A \\ 0, & \text{если } x \notin A \end{cases} \text{ — характеристическая функция множества } A \text{ и} \\ \chi_A(x) &= \begin{cases} 0, & \text{если } x \in A \\ \uparrow, & \text{если } x \notin A \end{cases} \text{ — частичная характеристическая функция } A. \end{aligned}$$

Определение 8. Для любых множеств A и B

$$\begin{aligned} A \leq_e B &\Leftrightarrow c_A \leq_e c_B \\ A \leq_{ce} B &\Leftrightarrow c_A \leq_{ce} c_B \\ A \leq_{gce} B &\Leftrightarrow c_A \leq_{gce} c_B \\ A \leq_\mu B &\Leftrightarrow c_A \leq_\mu c_B \end{aligned}$$

Определение 9. Для любых множеств A и B

$$\begin{aligned} A \leq_\xi B &\Leftrightarrow \chi_A \leq_e \chi_B \\ A \leq_{ce} B &\Leftrightarrow \chi_A \leq_{ce} \chi_B \\ A \leq_{gce} B &\Leftrightarrow \chi_A \leq_{gce} \chi_B \\ A \leq_\mu B &\Leftrightarrow \chi_A \leq_\mu \chi_B \end{aligned}$$

Теорема 2. Для любых множеств A и B

$$A \leq_e B \Leftrightarrow A \leq_{ce} B \Leftrightarrow A \leq_T B$$

Доказательство. В монографии Х. Роджерса доказано [2, Теорема 9-XXV], что $A \leq_T B \Leftrightarrow c_A \leq_{ce} c_B$, следовательно, $A \leq_{ce} B \Leftrightarrow A \leq_T B$. Для доказательства второй эквиваленции потребуется

Лемма 1. $(\forall \alpha \in PF)(\forall f \in TF)[\alpha \leq_e f \Leftrightarrow \alpha \leq_{ce} f]$

Завершим доказательство теоремы 2. Из леммы 1 следует, что $c_A \leq_e c_B \Leftrightarrow c_A \leq_{ce} c_B$, следовательно, $A \leq_e B \Leftrightarrow c_A \leq_e c_B \Leftrightarrow c_A \leq_{ce} c_B \Leftrightarrow A \leq_T B$ и теорема доказана.

Для формулировки следующей теоремы используется, так называемая, табличную сводимость множеств. Определение сводимости \leq_{tt} можно найти в [2, с.146].

Теорема 3. Для любых множеств A и B

$$A \leq_{gce} B \Leftrightarrow A \leq_{tt} B$$

Доказательство. В монографии [2] доказан результат Нероуда [8], утверждающий что $A \leq_{tt} B \Leftrightarrow c_A \leq_{gce} c_B$. Так как по определению $A \leq_{gce} B \Leftrightarrow c_A \leq_{gce} c_B$, то получаем требуемую эквиваленцию.

Теорема 4. Для любых множеств A и B

$$A \leq_{\bar{\mu}} B \Leftrightarrow A \leq_T B$$

Доказательство. Нам понадобится

Лемма 2. $(\forall \alpha \in PF)(\forall f \in TF)[\alpha \leq_{\mu} f \Leftrightarrow \alpha \leq_e f]$

Завершим доказательство теоремы. По определению, $A \leq_{\bar{\mu}} B \Leftrightarrow c_A \leq_{\mu} c_B$. В силу леммы 2 и тотальности функции $f = c_B$, $c_A \leq_{\mu} c_B \Leftrightarrow c_A \leq_e c_B$. Наконец, в силу теоремы 2, $c_A \leq_e c_B \Leftrightarrow A \leq_T B$. Итак, $A \leq_{\bar{\mu}} B \Leftrightarrow A \leq_T B$ и теорема доказана.

Из теорем 2 – 4 следует, что использование функциональных операторов для введения сводимостей множеств с помощью определения 8 не дает новых сводимостей. Тем не менее, как показывает следующая теорема, используемые для этого функциональные базы различны.

Теорема 5. (i) $GC_e \subset C_e \subset PC_e$;

(ii) $M \subset C_e$;

(iii) $GC_e \not\subseteq M \wedge M \not\subseteq GC_e$.

Доказательство. Пункт **(i)** доказан, по существу, в монографии [2]. Не-строгое второе включение очевидно. Докажем, что $PC_e \not\subseteq C_e$. Определим отображение

$$H: 2^{\omega} \rightarrow 2^{\omega}: \begin{cases} H(\{(0,0)\}) = \{(0,0)\} \\ H(\{(1,0)\}) = \{(0,1)\} \\ H(X) = X \text{ для остальных } X \subseteq \omega \end{cases}$$

Пусть $\Psi = \tau^{-1} \Gamma_H \tau$, где Γ_H – ограничение H на те однозначные множества A , для которых $H(A)$ – однозначное множество. Существует z_0 такое, что $H = \Phi_{z_0}$, поэтому Ψ – частично вычислимый оператор. Ψ не является вычислимым оператором, так как $\Psi(o)$ не определено, где $o(x) = 0$ для всех $x \in \omega$. Таким образом, $C_e \subset PC_e$.

То, что $GC_e \subseteq C_e$, доказано в [2, с.195]. Наконец, докажем, что $C_e \not\subseteq GC_e$. Из теоремы 2 следует, что $A \leq_T B \Leftrightarrow (\exists \Psi \in C_e)[\Psi(c_B) = c_A]$. Теорема Неруда утверждает, что $A \leq_{tt} B \Leftrightarrow (\exists \Psi \in GC_e)[\Psi(c_B) = c_A]$. Так как существуют множества A и B , такие, что $A \leq_T B$ и $A \not\leq_{tt} B$, то существует вычислимый, не общевычислимый оператор Ψ . Более того, из приведенных рассуждений следует, что существуют функции $f, g \in TF$, такие, что $f = \Psi(g)$ для некоторого $\Psi \in C_e$ и $f \neq \Psi'(g)$ для всех $\Psi' \in GC_e$.

(ii). Из определения Сассо следует, что любой функциональный оператор, принадлежащий множеству M , является вычислимым, т.е. $M \subseteq C_e$. Чтобы доказать $C_e \not\subseteq M$, потребуется следующая

Лемма 3 [5]. $\chi_A \leq_{\mu} \chi_B \Leftrightarrow A \leq_{pc} B$ для любых множеств A и B .

В формулировке леммы 3 используется, так называемая, *частично конъюнктивная сводимость* множеств, введенная Д. Г. Скордевым в [5]. Так как эта сводимость используется во второй части статьи, то приведем ее определение. Просто *конъюнктивная сводимость* \leq_c является частным случаем табличной сводимости, когда *tt*-условие имеет вид $\langle \langle a_1, \dots, a_n \rangle, \zeta(\alpha) \rangle$, где $\langle a_1, \dots, a_n \rangle$ – данная *n*-ка чисел, а булева функция α имеет вид $\alpha = x_1 \wedge \dots \wedge x_n$. Другими словами,

$$A \leq_c B \Leftrightarrow (\exists f - \text{вычислимая функция})(\forall x)[x \in A \Leftrightarrow D_{f(x)} \subseteq B].$$

Теперь можно определить *pc*-сводимость множеств:

$$A \leq_{pc} B \Leftrightarrow (\exists z)(\forall x)[x \in A \Leftrightarrow \varphi_z(x) \downarrow \wedge D_{\varphi_z(x)} \subseteq B].$$

Ясно, что $A \leq_{pc} B \Rightarrow A \leq_e B$ для любых множеств A и B , т.е. pc -сводимость множеств является сводимостью по перечислимости.

Как обычно, через $deg_{pc}(A) = \{X: A \leq_{pc} X \wedge X \leq_{pc} A\}$ обозначим pc -степень множества A и через D_{pc} – частично упорядоченное множество pc -степеней. Хорошо известно, что D_{pc} – верхняя полурешетка с наименьшим элементом $\mathbf{0} = \{W_z: z \in \omega\}$. Приведем один нетривиальный результат Л. Саско [10], который будем использован нами ниже. Доказано, что D_{pc} имеет минимальные степени, т.е. существует pc -степень $\mathbf{a} \neq \mathbf{0}$, такая, что для любой pc -степени x , если $x \leq \mathbf{a}$, то $\mathbf{a} \leq x$ или $x = \mathbf{0}$. Изучению pc -сводимости посвящена статья автора [6].

Завершим доказательство пункта (ii) нашей теоремы. Для этого достаточно привести пример вычислимого оператора $\Psi \in C_e$, не являющегося μ -оператором, т.е. такого, что $\Psi \notin M$. Другими словами, достаточно построить две частичные функции α и β , такие, что $\alpha \leq_{ce} \beta$ и $\alpha \not\leq_{\mu} \beta$.

Как было отмечено выше, D_{pc} имеет минимальные pc -степени. Пусть $\mathbf{b} = deg_{pc}(B)$ – какая-либо минимальная степень. Докажем, что в этом случае $\beta = \chi_B$ обладает свойством: $(\forall \alpha \in PC)[\alpha \leq_{\mu} \beta \Rightarrow \beta \leq_{\mu} \alpha \vee \alpha$ – ч.в. функция]. По существу, это свойство функции β означает, что частично упорядоченное множество L_{μ} μ -степеней обладает минимальными элементами. В частности, $deg_{\mu}(\chi_B)$ – одна из минимальных μ -степеней.

Предположим, что $\beta = \chi_B$ не обладает указанным свойством, т.е. существует функция γ , которая не является частично вычислимой и $\gamma <_{\mu} \beta$. Определим функцию

$$\alpha(\langle x, y \rangle) = \begin{cases} 1, & \text{если } \gamma(x) \downarrow \wedge y = \gamma(x) \\ 0, & \text{если } \gamma(x) \downarrow \wedge y \neq \gamma(x) \end{cases}$$

Технически нетрудно с помощью вычислительных устройств с оракулами для функций убедиться, что $\alpha \equiv_{\mu} \gamma$. Рассмотрим $deg_{ce}(\beta)$. Из одного результата Л. Гаттериджа [7] следует, что L_{ce} не имеет минимальных элементов. Следовательно, существует частичная не вычислимая функция α , такая, что $\alpha <_{ce} \beta$, т.е. для некоторого вычислимого оператора $\Psi \in C_e$ имеем $\alpha = \Psi(\beta)$. В то же время имеем $\alpha \not\leq_{\mu} \beta$, т.е. Ψ не является μ -оператором. Итак, доказано, что $C_e \not\subseteq M$.

(iii). Докажем сначала, что $M \not\subseteq GC_e$. Пусть Ψ – любой μ -оператор, такой, что если $\alpha = \Psi(\beta)$, то α получена из β и начальных функций с помощью конечного числа применений операций подстановки, примитивной рекурсии и обязательно минимизации. В этом случае существуют тотальные функции, результатом применения к которым операции минимизации являются частичные функции. Например, легко проверить, что $\alpha(x) = \mu y[s(y) = x] = \mu y[y + 1 = x]$ является частичной: $\alpha(0) \uparrow$. Итак, если в определении μ -оператора Ψ существенным образом используется операция минимизации, всегда найдется тотальная функция f , такая, что $\Psi(f)$ не является тотальной функцией. Следовательно, Ψ не является о.в. оператором, т.е. $M \not\subseteq GC_e$.

Осталось доказать, что $GC_e \not\subseteq M$. Это можно сделать с помощью критерия, при выполнении которого вычисляемый оператор является μ -оператором. Такой критерий приведен в статье Д. Г. Скордева [4]. Для этого достаточно указать общерекурсивный оператор Ψ , переводящий некоторую частичную функцию α в некоторую тотальную функцию g . Одновременно заметим, что

любой μ -оператор, в определении которого существенно используется функциональный символ α , частичную функцию α переводит в частичную функцию β . Это означает, что существует функциональный оператор $\Psi \in GC_e$, такой, что $\Psi \notin M$. Теорема полностью доказана.

Рассмотрим сводимости множеств, введенные через определение 9.

Теорема 6. Для любых множеств A и B

$$A \leq_{\bar{e}} B \Leftrightarrow A \leq_{\bar{c}\bar{e}} B \Leftrightarrow A \leq_e B$$

Доказательство. Легко проверить, что $A \equiv_e graph(\chi_A)$ для любого множества A , следовательно, $A \leq_{\bar{e}} B \Leftrightarrow A \leq_e B$. Оставшаяся часть теоремы непосредственно следует из леммы.

Лемма 4. $\chi_A \leq_{ce} \chi_B \Leftrightarrow \chi_A \leq_e \chi_B$ для любых множеств A и B .

Теорема 7. Для любых множеств A и B

$$A \leq_{\bar{\mu}} B \Leftrightarrow A \leq_{\bar{g}\bar{c}\bar{e}} B \Leftrightarrow A \leq_{pc} B$$

Доказательство. Из леммы 3 и определения $\leq_{\bar{\mu}}$ следует, что

$$A \leq_{\bar{\mu}} B \Leftrightarrow A \leq_{pc} B.$$

Лемма 5. $\chi_A \leq_{gce} \chi_B \Leftrightarrow A \leq_{pc} B$ для любых множеств A и B .

Лемма 5 является частным случаем теоремы Нероуда [8], когда табличная сводимость заменена на конъюнктивную сводимость.

Завершим доказательство теоремы. Из леммы 5 и определения $\leq_{\bar{g}\bar{c}\bar{e}}$ следует, что $A \leq_{\bar{g}\bar{c}\bar{e}} B \Leftrightarrow A \leq_{pc} B$.

Из теорем 6 и 7 следует, что использование функциональных операторов для введения сводимостей множеств с помощью определения 9 не дает новых сводимостей.

В заключение заметим, что сводимости \leq_e , \leq_{ce} , \leq_{gce} и $\leq_{\bar{\mu}}$ на PF , которые мы использовали в качестве базисных, различны. Их соотношения по силе отражены в теореме 5.

Библиографический список

1. Поляков Е. А., Розинас М. Г. Теория алгоритмов : учебное пособие / Ивановский государственный университет. Иваново, 1976. 88 с.
2. Роджерс Х. Теория рекурсивных функций и эффективная вычислимость. М. : Мир, 1972. 624 с.
3. Розинас М. Г. Частичные степени и τ -степени // Сибирский математический журнал. 1974. Т. 15, № 6. С. 1323—1331.
4. Скордев Д. Г. Изчислими и μ -рекурсивни оператори // Изв. мат. ин-та Българск. АН. 1963. Т. 7. С. 5—43.
5. Скордев Д. Г. О частичной конъюнктивной сводимости // II Всесоюзная конференция по математической логике : тезисы. М., 1972. С. 43—44.
6. Солон Б. Я. e -степени гипериммунных ретрассируемых множеств // Сибирский математический журнал. 1978. Т. 19, № 1. С. 172—179.
7. Gutterige L. Some Results on Enumeration Reducibility : PhD Dissertation. Simon Fraser University, 1971. 70 p.
8. Nerode A. General topology and partial recursive functionals // Summaries of Talks Presented at the Summer Institute for Symbolic Logic. Cornell University, 1957. P. 247—251.
9. Sasso L. P. Degrees of Unsolvability of Partial Functions : PhD Dissertation. Berkeley : University of California, 1971.
10. Sasso L. P. A survey of partial degrees // J. Symb. Logic. 1975. Vol. 40, № 2. P. 130—140.

УДК 513.64

С. И. Хашин

НАТУРАЛЬНЫЕ ЧИСЛА С БОЛЬШИМ ПАРАМЕТРОМ ФРОБЕНИУСА

Не существует чисел, меньших 2^{60} , псевдопростых по Фробениусу (FPP), с параметром Фробениуса, меньшим 128. В работе доказывается отсутствие FPP-чисел, меньших 2^{60} с любым параметром Фробениуса.

Ключевые слова: псевдопростые числа, кратные множители.

There are no Frobenius pseudoprime numbers (FPP) $< 2^{60}$ with the Frobenius parameter < 128 . In this paper, we prove the absence of FPP numbers less than 2^{60} with any Frobenius parameter.

Key words: pseudoprime numbers, multiple factors.

Наиболее мощный среди элементарных вероятностных методов проверки чисел на простоту – тест Фробениуса [1, 2, 3, 4].

Определение 1. Нечетное составное число n называется псевдопростым по Фробениусу (Frobenius pseudoprime, FPP), если оно не является полным квадратом и

$$(1 + \sqrt{c})^n \equiv 1 - \sqrt{c} \pmod{n},$$

где c — наименьшее нечетное простое число такое, что символ Якоби $J(c/n)$ равен -1 . Про такие числа будем говорить, что они принадлежат классу FPP(c).

На сегодняшний день неизвестно ни одного числа, псевдопростого по Фробениусу. Можно предположить, что таких чисел не существует вообще, т. е. тест Фробениуса дает точный критерий простоты числа.

В работах [1, 4] доказано, что не существует FPP-чисел, меньших 2^{60} , при $c < 128$. В связи с этим хотелось бы узнать, насколько большим может оказаться число c .

Определение 2. Для нечетного натурального числа n , не являющегося полным квадратом, назовем параметром Фробениуса и обозначим через $F_c(n)$ наименьшее нечетное число c такое, что символ Якоби $J(c/n)$ равен -1 .

Очевидно, число c является простым. Для всех нечетных простых, меньших c , имеем $J(c/n) = +1$ или 0 . В частности, n не имеет простых делителей $\leq c$.

Сформулируем вопрос несколько по-другому: при каком наименьшем числе n для данного простого нечетного числа c получим $F_c(n) = c$? Для небольших чисел ($\approx 10^9$) ответ можно найти простым перебором. Для больших значений придется искать другой алгоритм.

Таблица 1. $F_c(n)$

c	$F_c(n)$	c	$F_c(n)$	c	$F_c(n)$	c	$F_c(n)$	c	$F_c(n)$	c	$F_c(n)$	c	$F_c(n)$
5	3	43	3	83	5	123	3	163	3	203	5	243	3
7	3	45	3	85	5	125	3	165	3	205	5	245	3
9	–	47	5	87	3	127	3	167	5	207	3	247	3
11	7	49	–	89	3	129	3	169	–	209	3	249	3
13	5	51	3	91	3	131	17	171	3	211	3	251	11
15	3	53	3	93	3	133	5	173	3	213	3	253	5
17	3	55	3	95	5	135	3	175	3	215	5	255	3
19	3	57	3	97	5	137	3	177	3	217	5	257	3
21	3	59	11	99	3	139	3	179	7	219	3	259	3
23	5	61	7	101	3	141	3	181	7	221	3	261	3
25	–	63	3	103	3	143	5	183	3	223	3	263	5
27	3	65	3	105	3	145	5	185	3	225	–	265	5
29	3	67	3	107	5	147	3	187	3	227	5	267	3
31	3	69	3	109	11	149	3	189	3	229	7	269	3
33	3	71	7	111	3	151	3	191	7	231	3	271	3
35	5	73	5	113	3	153	3	193	5	233	3	273	3
37	5	75	3	115	3	155	5	195	3	235	3	275	5
39	3	77	3	117	3	157	5	197	3	237	3	277	5
41	3	79	3	119	7	159	3	199	3	239	7	279	3
–	–	81	–	121	–	161	3	201	3	241	7	281	3

Предложение 1. а) Пусть $c \equiv 1 \pmod 4$ и x, y – нечетные числа. Тогда

$$\left(\frac{c}{4x+y}\right) = \left(\frac{c}{x}\right).$$

б) Пусть $c \equiv 3 \pmod 4$ и x, y – нечетные числа. Тогда

$$\left(\frac{c}{4cx+y}\right) = \left(\frac{c}{y}\right).$$

Доказательство. а)

$$\left(\frac{c}{4x+y}\right) = \left(\frac{4x+y}{c}\right) = \left(\frac{4x}{c}\right) = \left(\frac{x}{c}\right) = \left(\frac{c}{x}\right).$$

б)

$$\left(\frac{c}{4cx+y}\right) = (-1)^{\frac{c-1}{2} \cdot \frac{4cx+y-1}{2}} \left(\frac{4cx+y}{c}\right) = (-1)^{\frac{c-1}{2} \cdot \frac{y-1}{2}} \left(\frac{y}{c}\right) = \left(\frac{c}{y}\right).$$

Пример 1. Пусть $N_1 = 5$, $N_2 = 3$. Обозначим через $X = (3, 7)$ все нечетные вычеты x_i по модулю $2N_1 = 10$ такие, что $J(N_1, N_2x_i) = 1$.

Обозначим через $Y = (5, 7)$ все нечетные вычеты y_j по модулю $4N_2 = 12$ такие, что $J(N_2, N_1y_j) = 1$.

Рассмотрим все возможные суммы $4N_2x_i + N_1y_j = (1, 11, 49, 59) \pmod{4N_1N_2}$. Они составляют все возможные вычеты n по модулю $4N_1N_2$ такие, что $J(3/n) = J(5/n) = 1$.

Пример 2. Пусть $N_1 = 5 \cdot 13 \cdot 17 \cdot 29 \cdot 37 \cdot 41 = 48\,612\,265$, $N_2 = 3 \cdot 7 \cdot 11 \cdot 19 \cdot 23 \cdot 31 \cdot 43 = 134\,562\,351$. Обозначим через X все нечетные вычеты x_i по модулю $2N_1$ такие, что

$$\left(\frac{5}{N_2x}\right) = \left(\frac{13}{N_2x}\right) = \left(\frac{17}{N_2x}\right) = \left(\frac{29}{N_2x}\right) = \left(\frac{37}{N_2x}\right) = \left(\frac{41}{N_2x}\right) = 1.$$

Обозначим через Y все нечетные вычеты y_j по модулю $4N_2$ такие, что

$$\left(\frac{3}{N_1x}\right) = \left(\frac{7}{N_1x}\right) = \left(\frac{11}{N_1x}\right) = \left(\frac{19}{N_1x}\right) = \left(\frac{23}{N_1x}\right) = \left(\frac{31}{N_1x}\right) = \left(\frac{43}{N_1x}\right) = 1.$$

Тогда всевозможные суммы $4N_2x_i + N_1y_j \pmod{4N_1N_2}$ составляют все возможные вычеты n по модулю $4N_1N_2$ такие, что $J(3/n) = J(5/n) = \dots = J(43/n) = 1$.

Более детально, $N_1 = 5 \cdot 13 \cdot 17 \cdot 29 \cdot 37 \cdot 41 = 48\,612\,265$, $N_2 = 3 \cdot 7 \cdot 11 \cdot 19 \cdot 23 \cdot 31 \cdot 43 = 134\,562\,351$ и $N_{12} = 4N_1N_2$. Тогда каждый нечётный вычет n по модулю N_{12} может быть единственным образом представлен в виде:

$$n = y_i \cdot N_1 + x_i \cdot (4N_2) + kN_{12}$$

где $x_j \in X$, $y_i \in Y$ и k – целое неотрицательное.

Так как $45 N_1N_2 > 2^{60}$, то для перебора чисел меньших 2^{60} будет достаточно брать $k \leq 45$, то есть всего 46 значений. При этом количество пар (x_j, y_i) будет около 450 млрд. Это, конечно, большое число, но вполне подъемное для современных, даже персональных компьютеров (несколько дней работы).

Найдем все такие $n < 2^{60}$, точнее говоря, $n < 45 N_1N_2 \approx 1.02 \cdot 2^{60}$. Для всех них оказалось, что $F_c(n)$ не превышает 257. Вот список чисел $n < R$, для которых $F_c(n) \geq 239$:

257 1116971853972029831=1721*869521*746416591
 257 682237826125094149=36047443*18926108743
 257 24976302418603981=24976302418603981
 251 1024042985038958771=57367*17850732739013
 251 453954035543431861=304373*1491439896257
 251 154149168067800611=421*366150042916391
 251 64138805744679371=262740781*244114391
 241 1026219868955993351=1243523*825252021037
 241 999495089664227939=7215601*138518619539
 241 794589470364458999=839*2437*19583*19844771
 241 695681268077667119=3413*203832777051763
 241 590562913970779429=21433*35759*770544707
 241 530036595989136011=20161*26290193739851
 241 341890388250402059=1999*171030709479941
 241 236544798837871499=236544798837871499
 241 189483189883094579=571*331844465644649
 241 59471645416610171=2699*22034696338129
 239 1157422019106907319=1157422019106907319
 239 1073453847303031619=773*1388685442824103
 239 1044220207258355111=170299*1283591*4776979
 239 1034939251005361321=673223*34763*44222029
 239 1012160911903194769=12737399*79463704631
 239 868116409360316399=868116409360316399
 239 781158046093912369=781158046093912369
 239 741164938828874171=741164938828874171
 239 724567276754267231=281*331*2609*10193*292933
 239 712624335095093521=28099*25361199156379
 239 636437033373755821=563107651*1130222671
 239 600640889133973091=22331531*26896538761
 239 595920634874656979=1511863*394163118533

239 526396733842454219=34367*15316924195957
 239 437372511730803659=974286749*448915591
 239 423414931359807911=241*1756908428878871
 239 322383916264150571=322383916264150571
 239 185948119075842899=7057*26349457145507
 239 37136361651508019=37136361651508019
 239 32378801299267331=329776151*98184181
 239 17199376594892579=269*357437*178879643.

Всего же чисел, меньших $45 N_1 N_2$, для которых параметр Фробениуса \min_c превышает 127, оказалось 119 027 246. Их можно все проверить напрямую, среди них нет ни одного числа, псевдопростого по Фробениусу. Таким образом, рассматривая числа до 2^{60} , можно ограничиться только теми, у которых $\min_c < 128$. Следовательно, мы имеем только 30 допустимых значений c :

3, 5, 7, 11, 13, 17, 19, 23, 29, 31, 37, 41, 43, 47, 53, 59, 61, 67,
 71, 73, 79, 83, 89, 97, 101, 103, 107, 109, 113, 127.

Учитывая, что в работе [4] доказано, что не существует чисел, меньших 2^{60} , псевдопростых по Фробениусу, для которых $\min_c < 128$, отсутствие FPP, меньших 2^{60} , доказано полностью.

Библиографический список

1. Хашин С. И. Кратные множители псевдопростых чисел // Вестник Ивановского государственного университета. Сер.: Естественные, общественные науки. 2013. Вып. 2. С. 102—107.
2. Хашин С. И., Хашина Ю. А. Свойства чисел, псевдопростых по Фробениусу // Вестник Ивановского государственного университета. Сер.: Естественные, общественные науки. 2014. Вып. 2. С. 104—108.
3. Crandall R. E., Pomerance C. Prime Numbers: a Computational Perspective. 2nd ed. New York, etc. : Springer, 2005. 597 p.
4. Khashin S. I. Counterexamples for Frobenius primality test. // arxiv.org/abs/1307.7920. 2013. URL: <http://arxiv.org> (дата обращения: 10.01.2015).
5. Ribenboim P. My Numbers, My Friends: Popular Lectures on Number Theory. 2nd ed. New York, etc. : Springer, 2000. 392 p.

**ВЕСТНИК
ИВАНОВСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА**

**Серия «Естественные, общественные науки»
2015. Вып. 1. Биология. Химия. Физика. Математика**

Директор издательства *Л. В. Михеева*
Редакторы *О. В. Боронина, В. А. Киселева*
Технический редактор *И. С. Сибирева*
Компьютерная верстка *Т. Б. Земсковой*

Подписано в печать 20.09.2015 г.
Формат $70 \times 108^{1/16}$. Бумага писчая. Печать плоская.
Усл. печ. л. 7,35. Уч.-изд. л. 5,0. Тираж 300 экз. Заказ № 215.

Издательство «Ивановский государственный университет»
✉ 153025 Иваново, ул. Ермака, 39
☎ (4932) 93-43-41. E-mail: publisher@ivanovo.ac.ru