

Применение ССД позволяет оперативно контролировать режимы сварки в соответствии с технологией и нормировать сварочные работы, а также в результате объективно определять причины появления брака в процессе производства сварных конструкций на ранней стадии. Таким образом, ССД можно позиционировать прежде всего как эффективный способ профилактики брака. Кроме того, это объективный и достаточно экономичный «помощник» для специалистов сварочного производства – мастеров, инженеров-технологов и нормировщиков. Мониторинг процесса сварки, оперативная обработка данных позволяет в реальном масштабе времени произвести оценку текущей работы оборудования, соблюдение технологии, диагностику параметров режима сварки и многое другое, что в конечном итоге определяет качество сварочных работ и своевременный контроль его соблюдения.

Обучение навыкам работы на новейшем оборудовании с применением передовых технологий позволяет внести вклад в подготовку специалистов, востребованных на современном рынке труда, способных осуществлять инновационную деятельность в условиях жесткой конкуренции.

Киселева М.С., Седунова И.Н., Огородников И.Н.
ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ
КИНЕТИКИ ТУННЕЛЬНОГО ПЕРЕНОСА ЭЛЕКТРОНА В
ОРГАНИЧЕСКИХ И НЕОРГАНИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ

kisemka@e1.ru

*ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого
Президента России Б.Н. Ельцина»
г. Екатеринбург*

В настоящей работе разработан учебный программный комплекс для моделирования кинетики туннельного переноса электрона в органических и неорганических системах. В данной работе развит математический формализм и выполнено численное моделирование кинетики туннельного переноса электрона в условиях диффузионно-контролируемой подвижности дефектов. Разработанный комплекс будет внедрен в образовательный процесс для проведения практикума по курсу «Моделирование биологических процессов и систем» для студентов, изучающих биомедицинскую инженерию.

Kiseleva M.S., Sedunova I.N., Ogorodnikov I.N.
PROGRAM COMPLEX FOR SIMULATION OF KINETICS
OF TUNNELING ELECTRON TRANSFER IN ORGANIC AND
INORGANIC SYSTEMS

The present work is devoted to development of laboratory program complex for simulation of tunneling electron transfer in organic and inorganic systems. In the

present paper the mathematical formalism was developed and computational modeling of tunneling electron transfer in conditions of diffused-controlled mobility of defects was carried out. The program complex will be implemented for laboratory session of discipline «Modeling of biological processes and systems» for students studying biomedical engineering.

Современная мировая биомедицинская инженерия представляет собой перспективное и востребованное во всем мире направление в области техники, медицины, биологии, биотехнологии и является наиболее ресурсоемкой и высокотехнологичной отраслью экономики. Одним из наиболее важных аспектов биомедицинской инженерии является моделирование биологических процессов и систем. Настоящая работа посвящена разработке учебного программного комплекса по изучению и моделированию физико-химических и биологических процессов на молекулярном уровне. Данный комплекс предназначен для проведения лабораторного практикума для студентов, обучающихся по направлению подготовки 200300 «Биомедицинская инженерия».

Разработанный программный комплекс позволяет проводить моделирование кинетики туннельного переноса электрона в органических и неорганических системах. Исследование кинетики реакций, сопровождающихся туннельным переносом электрона, является важным этапом для понимания многих физико-химических и биологических процессов. В частности, в биологии туннельный перенос электрона сопровождает такие реакции, как фотосинтез, окислительное фосфорилирование и многие другие, жизненно важные процессы.

Явление туннельного переноса электрона из одного связанного состояния в другое наблюдали и исследовали в различных органических и неорганических системах. Так, в 1967 г. в работе Чанса и Де Во был описан туннельный процесс в фотосинтезирующем реакционном центре бактерии *Chromatium*, а в работе Дж. Хопфилда в 1974 г. была развита теория туннельного переноса электрона в биологических молекулах с учетом термической активации [1].

Усилиями многих научных коллективов были разработаны различные кинетические модели как чисто туннельных, так и диффузионно-контролируемых туннельных реакций (см. например, работы [2, 3] и ссылки в них). В этих работах было показано, что кинетика процессов переноса существенно зависит от температуры: при низких температурах ($T > 10$ K) преобладают механизмы туннельной рекомбинации; в интервале средних температур ($30 < T < 80$ K) имеют место как туннельная рекомбинация, так и диффузионно-контролируемый процесс; для случая высоких температур характерен диффузионно-контролируемый процесс. Кинетика нестационарной диффузионно-контролируемой реакции при сильной туннельной перезарядке не поддается аналитическому исследованию и требует применения численных методов. Именно это определило цель настоящей работы, а именно – разработку математического форма-

лизма и проведение численного моделирования кинетики туннельного переноса электрона в органических и неорганических системах в условиях диффузионно-контролируемой подвижности реагентов. Действительно, современные высокочувствительные методы оптической спектроскопии, которые ранее применялись преимущественно для изучения конденсированного состояния вещества, все шире используются для исследования разнообразных биологических объектов и систем. Однако успех применения таких методов к исследованию сложных органических и неорганических систем и их информационные возможности в значительной мере определяются физическими моделями, положенными в основу математической обработки экспериментальных данных [4, 5].

В настоящей работе разработан лабораторный программный комплекс для моделирования кинетики туннельного переноса электрона в органических и неорганических системах. В данной работе развит математический формализм и выполнено численное моделирование кинетики туннельного переноса электрона в условиях диффузионно-контролируемой подвижности дефектов. Результаты работы создают основу для физической интерпретации экспериментальных данных, полученных авторами с помощью метода импульсного радиолиза и методов люминесцентно-оптической спектроскопии с временным разрешением. Разработанный комплекс будет внедрен в образовательный процесс для проведения практикума по курсу «Моделирование биологических процессов и систем» для студентов, изучающих биомедицинскую инженерию.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Hopfield J.J. Electron transfer between biological molecules by thermally activated tunneling. / Hopfield J.J. – PNAS, 1974.
2. Пармон В.Н. Формальная кинетика реакций переноса электрона в твердых телах. / В.Н. Пармон, Н.Ф. Хайрутдинов, К.И. Замараев. – ФТТ, 1974.
3. Закис Ю.Р. Модели процессов в широкощелевых твердых телах с дефектами. / Ю.Р. Закис [и др.]. – Рига : Зинатне, 1991.
4. Семибратова В.А. УФ Абсорбционная спектроскопия спинномозговой жидкости человека и ее аналогов. / В.А. Семибратова – Иркутск, 2010.
5. Киселева М.С. Моделирование кинетики туннельного переноса электрона в органических и неорганических системах / М.С. Киселева, И.Н. Огородников // Тезисы докладов Межд. научно-практ. конф. «Высокие технологии, фундаментальные и прикладные исследования в физиологии и медицине» (С.-Петербург, Россия, 23–26 ноября 2010). СПб., 2010.