

features. Primary processing of lipid biomass consisting of saturated and unsaturated fatty acids has been viewed, and one's advantages and disadvantages being noted. Selective catalytic oxidative cleavage of the olefin bond of monounsaturated fatty acids has been offered as a step of the complex processing microalgae. High content of monounsaturated fatty acids in microalgae is favourable to the catalytic selective oxidative cleavage of olefin bond to proceed with environment friendly oxidants in mild conditions. The experimental data presented promote further study on heterogeneous catalytic selective lipid oxidation.

ТЕХНОЛОГИЯ ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫХ АГЕНТОВ В ПРЕДСКАЗАНИИ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ОРГАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ

Туманов В.Е., Прохоров А.И., Соловьева М.Е.

Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка, Россия,
(142432, Черноголовка, проспект академика Семенова, 1), e-mail: aipro@icp.ac.ru

В статье представлена облачная и многоагентная программно-технологическая архитектура предметно-ориентированной системы научной осведомленности по физической химии радикальных реакций, дано описание его функционала. Электронные коллекции физико-химических свойств органических соединений, объединенные в системе, позволяют ставить и решать задачи извлечения новых знаний о свойствах этих соединений. Приведено описание назначения используемых интеллектуальных агентов в решении задач предсказания физико-химических свойств органических молекул по экспериментальным данным и их место в архитектуре системы. Дан пример разработки интеллектуального программного агента для предсказания реакционной способности молекул нечеткой базой знаний. Впервые на примере реакций фенил радикалов с углеводородами была выполнена попытка идентифицировать зависимость классического потенциального барьера радикальной реакции нечеткой базой знаний, построенной на основе количественных и качественных параметров.

TECHNOLOGY OF INTELLIGENT AGENTS IN THE PREDICTION OF PHYSICAL AND CHEMICAL PROPERTIES OF ORGANIC MOLECULES

Tumanov V.E., Prokhorov A.I., Soloveva M.E.

Institute of problems of chemical physics RAS, Chernogolovka, Russia
(142432, Chernogolovka, ac. Semenov av., 1), e-mail: aipro@icp.ac.ru

The architecture of cloud computing and multi-agent software technologies for the scientific subject-oriented knowledge system in physical chemistry of radical reactions is presented in article; the description of its functionality is given. Electronic collections of physical and chemical properties of organic compounds which combined in the system allow to set and to achieve objectives of extraction of new knowledge about the properties of these compounds. The destination of intelligent agents to solve the prediction of physical and chemical properties of organic molecules on base of experimental data and their place in the architecture of the system is described. The example of the development of intelligent software agents to predict the reactivity of molecules by means of a fuzzy knowledge base is adduced. First attempt was made to identify the dependence of the classical potential barrier for phenyl radical reactions with hydrocarbons by means of the fuzzy knowledge base which was constructed on the basis of quantitative and qualitative parameters of the radical reactions.

ИЗУЧЕНИЕ ЗАВИСИМОСТИ АНАЛИТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ИММУНОХРОМАТОГРАФИЧЕСКИХ ТЕСТ-СИСТЕМ ОТ РЕЖИМА ИММОБИЛИЗАЦИИ ИММУНОРЕАГЕНТОВ НА МЕМБРАНЫ

Урусов А.Е., Жердев А.В.

Институт биохимии им. А.Н. Баха РАН, Москва, Россия
(119071, Москва, Ленинский проспект, 33, корп. 2), e-mail: urusov.alexandr@gmail.com

В статье представлены результаты исследования влияния условий нанесения иммунореактивов на мембранные носители на аналитические характеристики иммунохроматографического анализа, а также сформулирован ряд рекомендаций по достижению оптимальных параметров иммунохроматографических тестов. Проведенная работа по оптимизации параметров нанесения реагентов на нитроцеллюлозные рабочие мембраны включала подбор скорости и объема нанесения реагентов, pH буферных растворов, из которых проводится иммобилизация белков, концентрации солей и детергентов, вносимых в рабочий буфер для нанесения, концентрации наносимых белковых реагентов. Получение экспериментальных зависимостей проводилось на примере оптимизации иммунохроматографической тест-системы для определения бактериального антигена – липополисахарида (ЛПС) *Brucella abortus*. Приведенные рекомендации носят общий характер и могут быть использованы в оптимизации тест-систем для определения широкого круга антигенов.

STUDY OF DEPENDENCES OF ANALYTICAL PARAMETERS OF IMMUENCHROMATOGRAPHIC TEST SYSTEMS FROM THE REGIME OF IMMOBILIZATION OF IMMUNOREAGENTS ON MEMBRANES

Urusov A.E., Zherdev A.V.

A.N. Bach Institute of Biochemistry, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia
(119071, Moscow, Leninsky Prospekt, 33, Building, 2), e-mail: urusov.alexandr@gmail.com

The article presents the results of investigation of the influence of deposition conditions of immunoreagents on membrane carriers for analytical performance of immunochromatographic assays. Besides, recommendations

for reaching optimal parameters of immunoassays are formulated. The studies were carried out to optimize various parameters of reagents applying onto nitrocellulose membrane, including operating speed and leading of reagents, pH of buffers used for immobilization of proteins, concentrations of salts and detergents introduced into the working buffer for the application, the protein concentration of the applied reagents. Experimental curves were obtained on the example of immunochromatographic test system for the determination of bacterial antigen, lipopolysaccharide (LPS) of *Brucella abortus*. The given recommendations have common character and may be used for optimization of test-systems for the detection of wide row of antigens.

ФЛУОРОГЕННЫЕ И ХРОМОГЕННЫЕ ХЕМОСЕНСОРНЫЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ ПОЛИ(4-ВИНИЛПИРИДИНА)

**Федянина А.Ю.¹, Тихомирова К.С.¹, Николаева О.Г.¹, Толпыгин И.Е.¹,
Нефедов В.С.², Дергачева Е.В.², Дубоносов А.Д.³, Брень В.А.¹**

1 Научно-исследовательский институт физической и органической химии ФГАОУ ВПО
«Южный федеральный университет», Ростов-на-Дону, Россия

(344090, Ростов-на-Дону, пр. Стачки, 194/2), e-mail: tolpygin@ipoc.sfedu.ru

2 Физический факультет ФГАОУ ВПО «Южный федеральный университет»,
Ростов-на-Дону, Россия (344090, Ростов-на-Дону, ул. Зорге, 5), e-mail: dubon@ipoc.sfedu.ru

3 ФГБУН Южный научный центр Российской академии наук, Ростов-на-Дону, Россия
(344010, Ростов-на-Дону, ул. Чехова, 41), e-mail: aled@ipoc.sfedu.ru

Разработаны методы синтеза и получен ряд новых полимерных хемосенсорных систем на основе поли(4-винилпиридина) и его сополимера с поли(бутилметакрилатом). Модификация исходных полимеров проводилась путем введения в его структуру фрагментов, содержащих рецепторные и сигнальные центры. Проведенные спектральные исследования полученных полимерных сенсоров позволили установить их структуру, определить основные характеристики и оценить проявляемые ими ионактивные свойства. Синтезированные соединения обладают слабой флуоресценцией в растворах и проявляют высокую хемосенсорную активность по отношению к анионам. Взаимодействие с анионами F⁻ и AcO⁻ приводит к резкому увеличению интенсивности флуоресценции. Наиболее эффективными и селективными флуорогенными системами для определения фторид-анионов оказываются хемосенсоры, полученные за счет модификации сополимера поли(4-винилпиридина) с поли(бутилметакрилатом). Одновременно с этим соединения на основе данного сополимера являются эффективными хромогенными хемосенсорами для детектирования ионов F⁻ и CN⁻.

FLUOROGENIC AND CHROMOGENIC CHEMOSENSOR MATERIALS BASED ON POLY(4-VINYLPYRIDINE)

**Fedyanina A.Y.¹, Tikhomirova K.S.¹, Nikolaeva O.G.¹, Tolpygin I.E.¹,
Nefedov V.S.², Dergacheva E.V.², Dubonosov A.D.³, Bren V.A.¹**

1 Research Institute of Physical and Organic Chemistry, Southern Federal University,
Rostov-on-Don, Russia (344090, Rostov-on-Don, Stachka Av. 194/2), e-mail: tolpygin@ipoc.sfedu.ru

2 Department of Physics, Southern Federal University, Rostov-on-Don, Russia
(344090, Rostov-on-Don, Zorge ct., 5), e-mail: dubon@ipoc.sfedu.ru

3 Southern Scientific Center of Russian Academy of Sciences, Rostov-on-Don, Russia
(344010, Rostov-on-Don, Chekhova st., 41), e-mail: aled@ipoc.sfedu.ru

Series of novel polymeric chemosensor systems based on poly(4-vinyl)pyridine and its copolymer with poly(buthylmethacrilate) were synthesized. Initial polymers were modified by introduction in their framework of fragments containing receptor and signaling centers. Structure, main characteristics and ionochromic properties were investigated by spectral methods. Synthesized compounds reveal weak fluorescence and intense chemosensor activity towards anions. Interaction with F⁻ and AcO⁻ leads to strong increase of fluorescence intensity. Chemosensors synthesized by modification of poly(4-vinyl)pyridine - poly(buthylmethacrilate) copolymer are the most effective and selective fluorogenic systems for fluoride anions detection. These compounds at the same time display effective chromogenic activity for F⁻ and CN⁻ recognition.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ КОЛЕБАТЕЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ И ИОНИЗАЦИИ ХЕЛАТНОГО КОМПЛЕКСА ЛАНТАНА (III)

Харченко В.И.¹, Алексейко Л.Н.², Чередниченко А.И.¹, Курбатов И.А.²

1 ФГБУН «Институт химии ДВО РАН», Владивосток, Россия
(690022, г. Владивосток, проспект Столетия Владивостока, 159), e-mail: vikharchenko@ich.dvo.ru

2 ФГАОУ ВПО «Дальневосточный федеральный университет», Владивосток, Россия
(690950, г. Владивосток, ул. Суханова, 8), e-mail: alexeiko.ln@mail.ru

С целью описания колебательной структуры и характеристик ионизации хелатного комплекса лантана (III) La(NO₃)₃(ГМФА)₃ (ГМФА – гексаметилфосфотриамид) квантово-химическим методом в рамках теории функционала плотности изучены его геометрическая структура и электронное строение в основном и ионизированном состояниях. В вакуумном приближении методом DFT с гибридным обменно-корреляционным функционалом