

Научно-теоретический журнал
 Издаётся с августа 1946 года

СОДЕРЖАНИЕ

Физика

- Вознесенский М. А., Воронцов-Вельяминов П. Н., Любарцев А. П.* Расчёты равновесных свойств квантовых систем с кулоновским взаимодействием методом Монте-Карло в расширенном ансамбле 3
- Пастон С. А.* Анализ топологических эффектов в КЭД-2 в рамках формализма функционального интеграла 17
- Елагин И. А., Стишков Ю. К.* Особенности ЭГД-течений при униполярной инжекции в системе электродов провод–плоскость 31
- Зароченцев А. К.* Анализ разброса погрешностей магнитотеллурических данных в зависимости от времени суток на Балтийском щите по результатам статистической обработки данных VEAR 42
- Лебедев С. В., Павлов В. А.* Компьютерное моделирование воздействия землетрясений и мощных взрывов на атмосферу 53
- Королёва Т. Ю., Яновская Т. Б., Патрушева С. С.* Строение верхней мантии Восточно-Европейской платформы по данным сейсмического шума 63

Химия

- Макаров А. Л., Пукинский И. Б., Смирнова Н. А.* Влияние добавок бензоата натрия на вязкость водных растворов бромида цетилтриметиламмония и концентрационные границы мицеллярной области 73
- Белослудов В. Р., Субботин О. С., Готлиб И. Ю., Пиотровская Е. М.*,
Белослудов Р. В., Кавадзю Й. Оптимальная локализация органической молекулы вблизи неорганической поверхности и расчёт параметров модельного потенциала 80
- Богачёв Д. А., Тихомолов Д. В., Тихомолова К. П.* Зависимость толщины тонких водных плёнок в капиллярах, заполненных раствором CuSO_4 и октаном, от напряжения электрического поля 93
- Головин А. В., Пономарёв Д. А., Тахистов В. В.* Термохимия органических, гетероорганических и неорганических молекул и их фрагментов.
 Сообщение XXV. Сравнение квантово-химических и эмпирических методологий 104



<i>Ушкова Т. С., Зорин И. М., Билибин А. Ю.</i> Вязкость растворов ионных комплексов поли(2-акриламидо-2-метил-1-пропансульфоукислоты) с различными противоионами	120
<i>Морозкина С. Н., Егоров М. С., Елисеев И. И., Селиванов С. И., Ещенко Н. Д., Путилина Ф. Е., Вилкова В. А., Захарова Л. И., Шава А. Г.</i> Синтез и исследование остеопротекторного действия некоторых 8 α -аналогов стероидных эстрогенов ...	126
Краткие научные сообщения	
<i>Прохоров Л. В., Ушаков А. С.</i> Вариационный принцип в гамильтоновой механике.....	135
<i>Головчин А. В., Лагодинский В. М.</i> Задача об S-состояниях пионного атома в релятивистской квантовой механике без учёта сильного взаимодействия.....	143
<i>Торшлов С. Ю.</i> Структура альфа-кластерных вращательных полос ядра ⁴⁰ Ca.....	156
<i>Жеребчевский В. И., фон Оертцен В., Гриднев К. А.</i> Бинарный и тройной кластерный распад ядер ⁵⁶ Ni.....	162
<i>Кирьяк В. А., Ларина А. Г., Степаков А. В.</i> Взаимодействие 6,6-диметилфульвена с ароматическими имидами в присутствии кислот Льюиса	169
<i>Пакальнис В. В., Зерова И. В., Якимович С. И.</i> Реакции 2-(N,N-диметиламинометилен)-5,5-диметилциклогексан-1,3-диона с производными гидразина	174
Рефераты	180
Summaries	185
Contents	189
Сведения об авторах	190

Редакционный совет «Вестника Санкт-Петербургского университета»

Председатель **Н. М. Кропачев**, д-р юрид. наук, проф.
заместитель председателя **И. А. Горлинский**, канд. биол. наук
заместитель председателя **Н. Г. Скворцов**, д-р социол. наук, профессор
Ответственный секретарь **У. Л. Романова**, канд. ист. наук

РЕФЕРАТЫ

УДК 51-72, 519.245, 539.182

Вознесенский М. А., Воронцов-Вельяминов П. Н., Любарцев А. П. **Расчёты равновесных свойств квантовых систем с кулоновским взаимодействием методом Монте-Карло в расширенном ансамбле** // Вестн. С.-Петербург. ун-та. Сер. 4. 2009. Вып. 2. С. 3–16.

Метод Монте-Карло в расширенном ансамбле с настройкой балансирующих параметров по алгоритму Ванга–Ландау использован для расчёта отношений квантовых статсумм для различных классов перестановок в проблеме нескольких взаимодействующих тождественных частиц (фермионов) с кулоновским взаимодействием в гармоническом и кулоновском внешних полях с последующим вычислением полной статсуммы и энергии системы при конечных температурах вплоть до наиболее низких. Библиогр. 12 назв. Ил. 5.

Ключевые слова: квантовая статистика, интегралы по траекториям, матрица плотности, кулоновские системы.

УДК 530.145

Пастон С. А. **Анализ топологических эффектов в КЭД-2 в рамках формализма функционального интеграла** // Вестн. С.-Петербург. ун-та. Сер. 4. 2009. Вып. 2. С. 17–30.

Исследуется евклидова форма двумерной квантовой электродинамики, в которой допускаются конфигурации калибровочного поля с произвольным целым топологическим числом. Вакуумный параметр θ вводится в теорию путём добавления к плотности лагранжиана топологического члена, представляющего собой полную дивергенцию. С помощью преобразований над функциональным интегралом, определяющим производящий функционал для функций Грина, удаётся представить теорию в форме, в которой допускаются только достаточно быстро убывающие конфигурации калибровочного поля (т. е. имеющие нулевое топологическое число). При этом в действии возникает новый, не сводящийся к полной дивергенции, член, зависящий от параметра θ . Наличие этого члена можно интерпретировать как присутствие внешнего электрического поля с напряжённостью $\theta e/2\pi$, что совпадает с известной интерпретацией С. Коулменом параметра θ . В предлагаемой формулировке теории вакуумный параметр θ оказывается обычным параметром действия, что упрощает учёт его влияния на теорию. Сравняются два разных способа проведения преобразований над функциональным интегралом – в координатном и импульсном пространствах. Библиогр. 8 назв.

Ключевые слова: калибровочная теория, топологические эффекты, тэта-вакуум, функциональный интеграл.

УДК 532.5+537.571

Елагин И. А., Стишков Ю. К. **Особенности ЭГД-течений при униполярной инжекции в системе электродов провод–плоскость** // Вестн. С.-Петербург. ун-та. Сер. 4. 2009. Вып. 2. С. 31–41.

В статье описаны результаты численного моделирования системы электрогидродинамических уравнений для системы электродов провод–плоскость. Рассмотрены процессы формирования заряда у цилиндрического электрода и распространение его в межэлектродный промежуток за счёт конвективной составляющей тока в уравнении Нернста–Планка. При этом были подтверждены предположения, которые применялись ранее при упрощённых методах расчёта: заряд вморожен в жидкость, в направлении от цилиндрического электрода к плоскому образуется узкая заряженная струя. При этом наблюдаются характерные особенности структуры гидродинамических течений, которые получались в экспериментах. Библиогр. 4 назв. Ил. 6.

Ключевые слова: электрогидродинамическое течение, жидкие диэлектрики, уравнение Нернста–Планка, униполярная инжекция, заряженный приэлектродный слой, электроды провод–плоскость, ток инжекции, узкая заряженная струя, компьютерное моделирование, конвективный член, миграционный член, диффузионный член.

УДК 53.088-550.370

Зароченцев А. К. **Анализ разброса погрешностей магнитотеллурических данных в зависимости от времени суток на Балтийском щите по результатам**

статистической обработки данных BEAR // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2009. Вып. 2. С. 42–52.

Целью работы является выделение суточного интервала, где погрешности определения импеданса минимальны. В качестве магнитотеллурических данных были использованы результаты международного эксперимента BEAR, проводимого в 1998 г. на территории Балтийского щита. Проведено вычисление элементов тензора импеданса для различного времени суток с помощью программы, не использующей робастные методы отбора данных. Для оценки разброса величины импеданса предложено использовать оценки дисперсии натурального логарифма выборочного распределения. В результате применения предложенного метода удалось выделить благоприятные для наблюдений часы суток с 10 до 18 местного времени в интервале периодов 600–1000 секунд для проведения зондирований на Балтийском щите. Библиогр. 10 назв. Ил. 7.

Ключевые слова: анализ данных, электромагнитная индукция, логнормальное распределение, магнитотеллурика.

УДК 550.34.01+550.348.098

Лебедев С. В., Павлов В. А. Компьютерное моделирование воздействия землетрясений и мощных взрывов на атмосферу // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2009. Вып. 2. С. 53–62.

В работе представлено численное моделирование на базе пакета ANSYS 10.0 процесса распространения акустического импульса в слое неоднородной атмосферы высотой вплоть до 200 км. Исследованы основные этапы эволюции акустической волны по мере её распространения над эпицентром возмущения. Получены закономерности в эволюции фронта акустической волны, связанные с различием в выделяемой мощности, а также высоты образования ударного фронта от площади положительной части импульса, задаваемого на высоте источника. Произведён учёт одновременного влияния нелинейности и диссипации при учёте теплопроводности и удельной теплоёмкости. Численное моделирование позволяет учесть влияние вязкости на стадиях эволюции, когда ещё преобладает нелинейность по сравнению с диссипацией. Исследована область высот конкурирующего влияния нелинейности и потерь. Решение даётся не только для области над эпицентром землетрясения, но и для областей, удалённых от неё. Библиогр. 5 назв. Ил. 3.

Ключевые слова: численное моделирование, воздействие землетрясений, воздействие мощных взрывов, атмосфера, эволюция акустической волны, неоднородная атмосфера, нелинейность атмосферы, диссипация в слое атмосферы, ударная волна, фронт ударной волны.

УДК 53.088-550.370

Королёва Т. Ю., Яновская Т. Б., Патрушева С. С. Строение верхней мантии Восточно-Европейской платформы по данным сейсмического шума // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2009. Вып. 2. С. 63–72.

Разработана методика и написана компьютерная программа расчёта кросс-корреляционной функции сейсмического шума на паре станций, по которой определяется дисперсионная кривая поверхностной волны. Полученные на множестве пар станций дисперсионные кривые используются для определения вариаций строения среды (коры или верхней мантии) методом поверхностно-волновой томографии. Разработанная методика применена к записям шума на станциях, расположенных на Восточно-Европейской платформе с целью исследования структуры верхней мантии в регионе. Получены новые данные о вариациях строения на глубинах 50–300 км. Выявлены аномалии распределения скорости поперечной волны, положение которых соответствует основным тектоническим структурам. Библиогр. 22 назв. Ил. 5.

Ключевые слова: сейсмический шум, томография, поверхностные волны, Восточно-Европейская платформа.

УДК 544.77.051.62

Макаров А. Л., Пукинский И. Б., Смирнова Н. А. Влияние добавок бензоата натрия на вязкость водных растворов бромида цетилтриметиламмония и концентрационные границы мицеллярной области // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2009. Вып. 2. С. 73–79.

Изучено влияние бензоата натрия на агрегативное поведение мицеллярных растворов бромида цетилтриметиламмония. При различных содержаниях добавки определены критическая концентрация

мицеллообразования и концентрация перехода от мицеллярного раствора к жидкокристаллической фазе. Построена поверхность вязкости при 35 °С и найдена траектория хребтовой линии на ней. Обнаруженная область экстремально высоких значений вязкости указывает на вероятное образование в растворах длинных переплетённых мицелл. Полученные данные выявляют специфику действия добавки органической соли в сравнении с неорганической. Библиогр. 11 назв. Ил. 4. Табл. 1.

Ключевые слова: бромид цетилтриметиламмония, бензоат натрия, критическая концентрация мицеллообразования, вязкость, жидкокристаллическая граница.

УДК 544.183+539.612

Белослудов В. Р., Субботин О. С., Готлиб И. Ю., Пиотровская Е. М.,
Белослудов Р. В., Кавадзоэ Й. **Оптимальная локализация органической молекулы вблизи неорганической поверхности и расчёт параметров модельного потенциала** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2009. Вып. 2. С. 80–92.

Методом теории функционала плотности выполнены расчёты электронной структуры молекул *n*-ксилола и олигомера полиэтиленоксида вблизи поверхности диоксида титана. Рассчитаны атомные заряды по Малликену и энергия взаимодействия. Оценены параметры приближённого потенциала (9–4) для взаимодействий *n*-ксилол – TiO₂ в рамках модели «объединённых атомов» для органической молекулы. Библиогр. 22 назв. Ил. 5. Табл. 4.

Ключевые слова: теория функционала плотности, диоксид титана, органические молекулы, модельные потенциалы межмолекулярных взаимодействий.

УДК 54.148+537.228

Богачёв Д. А., Тихомолов Д. В., Тихомолова К. П. **Зависимость толщины тонких водных плёнок в капиллярах, заполненных раствором CuSO₄ и октаном, от напряжения электрического поля** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2009. Вып. 2. С. 93–103.

Исследовано явление увеличения под действием постоянного электрического поля толщины тонкой (единицы–сотни нм) водной плёнки, находящейся у внутренней поверхности стеклянного капилляра, заполненного раствором CuSO₄ и одной каплей октана в форме столбика. Особенность зависимости отражается в неизменности толщины плёнки до некоторого напряжения (U^*), зависящего от радиуса капилляров и протяжённости столбика, и активном росте при напряжении больше U^* . Делаются заключения об отражении в экспериментах особого состояния воды в плёнках при $U < U^*$ и факта активного разрушения её структуры при $U > U^*$. В обсуждение привлекается также опубликованная гипотеза о причине поведения плёнок в капилляре под током. Библиогр. 22 назв. Ил. 4.

Ключевые слова: капиллярность, раствор сульфата меди, октановая колонка, водная плёнка, прямое электрическое поле, толщина плёнки.

УДК 547.53+547.31+539.192

Головин А. В., Пономарёв Д. А., Тахистов В. В. **Термохимия органических, гетероорганических и неорганических молекул и их фрагментов. Сообщение XXV. Сравнение квантово-химических и эмпирических методологий** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2009. Вып. 2. С. 104–119.

Проведено сравнение квантово-химических методов Попла и экспериментальных методологий Бенсона. Последние имеют все преимущества для получения достоверных термохимических величин. Рассмотрены проблемы определение энтальпий сублимации, энергий разрыва связи из данных по кинетике бимолекулярных реакций и энтальпий образования ионов по данным фотоионизационной масс-спектрометрии. Библиогр. 71 назв. Табл. 3.

Ключевые слова: термохимия, энтальпии образования, масс-спектрометрия, квантовая химия, катионы.

УДК 541.64:542.63

Ушкова Т. С., Зорин И. М., Билибин А. Ю. **Вязкость растворов ионных комплексов поли(2-акриламидо-2-метил-1-пропансульфокислоты) с различными противоионами** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2009. Вып. 2. С. 120–125.

Получены ионные комплексы поли(2-акриламидо-2-метил-1-пропансульфокислоты) и *N,N*-диметиламинопропиламида 3,5-бис(3,5-динитробензоиламино)бензойной кислоты. Изучены зависимости приведенной вязкости ионных комплексов от концентрации в растворах ДМСО для различных соотношений сульфокислотных групп полиэлектролита и органических и неорганических низкомолекулярных противоионов. Показано, что при образовании ионных комплексов с органическими противоионами происходит значительная компактизация макромолекул полиэлектролитов. Библиогр. 13 назв. Ил. 3.

Ключевые слова: дендритные ионные комплексы, нековалентное связывание, полиэлектролиты.

УДК 547.92+542.91

Морозкина С. Н., Егоров М. С., Елисеев И. И., Селиванов С. И., Ещенко Н. Д., Путилина Ф. Е., Вилкова В. А., Захарова Л. И., Шавва А. Г. **Синтез и исследование остеопротекторного действия некоторых 8 α -аналогов стероидных эстрогенов** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2009. Вып. 2. С. 126–134.

Синтезированы 8 α -аналоги стероидных эстрогенов, их строение доказано методами спектроскопии ЯМР ¹³C. Исследование биологических свойств полученных соединений на овариэктомированных крысах показало, что в условиях эксперимента лучшими остеопротекторными свойствами обладают 17 β -ацетокси-18-метил-3-метокси-8 α -эстра-1,3,5(10)-триен и 3-метокси-17 β -этокси-8 α -эстра-1,3,5(10)-триен. Библиогр. 25 назв. Табл. 5.

Ключевые слова: 8 α -аналоги стероидных эстрогенов, спектроскопия ЯМР, остеопротекторная активность.

УДК 517.43+531.31

Прохоров Л. В., Ушаков А. С. **Вариационный принцип в гамильтоновой механике** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2009. Вып. 2. С. 135–142.

Анализируются особенности вариационного принципа в гамильтоновой механике (проблемы ковариантного формулирования и граничных условий). Подчеркивается разница между вариационными принципами в лагранжевом и гамильтоновом формализмах. Сформулированы четыре варианта ковариантного вариационного принципа. Библиогр. 9 назв.

Ключевые слова: гамильтонова механика, вариационные принципы.

УДК 539.182

Головин А. В., Лагодинский В. М. **Задача об *s*-состояниях пионного атома в релятивистской квантовой механике без учёта сильного взаимодействия** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2009. Вып. 2. С. 143–155.

Для решения квантово-релятивистской задачи об *s*-состояниях пионного атома с произвольным атомным номером использован новый метод локальных дифференциальных операторов бесконечного порядка. При решении этой задачи сильное взаимодействие не учитывалось. Подробно рассмотрена локальность используемых операторов и инвариантность полученного уравнения относительно преобразования Лоренца. Полученное уравнение решено только для *s*-состояний. Анализ полученных решений для пионного атома показал, что спектр оказывается вещественным, ограниченным снизу, а волновые функции – регулярными в нуле. При малых *Z* значения энергии и волновые функции близки соответствующим решениям нерелятивистского уравнения Шрёдингера. Библиогр. 14 назв.

Ключевые слова: релятивистская квантовая механика, пионные атомы, волновые функции.

УДК 539.144.3

Ториков С. Ю. **Структура альфа-кластерных вращательных полос ядра ^{40}Ca** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2009. Вып. 2. С. 156–161.

Показано, что локальный потенциал альфа-кластерной модели может описать основные свойства низколежащей вращательной полосы с положительной чётностью и высоколежащей полосы с отрицательной чётностью в ядре ^{40}Ca . Свойства низколежащей вращательной полосы отрицательной чётностью могут быть интерпретированы в рамках одномерной модели октупольных вибраций с осевой симметрией. Эта простая модель позволяет описать зависимость расщепления ирраст-полосы в ^{40}Ca от спина состояния. Полученные результаты находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными. Библиогр. 22 назв. Ил. 2. Табл. 1.

Ключевые слова: структура ядра, вращательные полосы, альфа-кластеры.

УДК 539.17

Жеребчевский В. И., Оертцен фон В., Гриднев К. А. **Бинарный и тройной кластерный распад ядер ^{56}Ni** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2009. Вып. 2. С. 162–168.

Используя детекторную систему для регистрации тяжелых ионов (спектрометр бинарных реакций), были измерены в совпадениях фрагменты деления составных ядер ^{56}Ni , образованные в реакции ^{32}S (пучок) + ^{24}Mg (мишень), при энергии пучка $E_{\text{lab}}(^{32}\text{S}) = 163$ МэВ. Были обнаружены узкие и широкие корреляции в угловом распределении, которое характеризует разлёт частиц вне плоскости реакции, как для двух фрагментов, соответствующих бинарным событиям, так и для тройных распадов с «потерянным» зарядом от 4 до 8. После отделения широких компонент узкие корреляции интерпретировались как процессы тройного деления из гипердеформированных состояний при больших переданных угловых моментах. Для двух зарегистрированных в совпадениях фрагментов были получены сечения их распада в определенные каналы. Относительные выходы этих бинарных событий были объяснены с помощью статистической модели с использованием расширенного формализма Хаузера–Фешбаха для распадов составного ядра. Библиогр. 8 назв. Ил. 2. Табл. 1.

Ключевые слова: составные ядерные системы, бинарный и тройной кластерный распады, спектрометр бинарных реакций, гипердеформации, статистическая модель, расширенный формализм Хаузера–Фешбаха.

УДК 547.831.3

Кирьяк В. А., Ларина А. Г., Степаков А. В. **Взаимодействие 6,6-диметилфульвена с ароматическими имидами в присутствии кислот Льюиса** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2009. Вып. 2. С. 169–173.

Катализируемое $\text{BF}_3 \cdot \text{Et}_2\text{O}$ или $\text{Yb}(\text{OTf})_3$ взаимодействие 6,6-диметилфульвена с ароматическими имидами приводит к производным тетрагидрохинолина с низкими выходами (8–15 %). Библиогр. 18 назв.

Ключевые слова: имины, 6,6-диметилфульвен, кислоты Льюиса, катализ.

УДК 547.371

Пакальнис В. В., Зерова И. В., Якимович С. И. **Реакции 2-(*N,N*-диметиламинометилен)-5,5-диметилциклогексан-1,3-диона с производными гидразина** // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 4. 2009. Вып. 2. С. 174–179.

Взаимодействие 2-(*N,N*-диметиламинометилен)-5,5-диметилциклогексан-1,3-диона с производными гидразина в зависимости от условий проведения реакции может приводить к образованию соединений, обладающих энгидразинным или енологидразонным строением, диметиламмонийной соли енолят аниона, пиразолов и пиразолинов. Библиогр. 5 назв.

Ключевые слова: энгидразин, конденсация, таутомерия, пиразол.

SUMMARIES

Voznesenskiy M. A., Vorontsov-Velyaminov P. N., Lyubartsev A. P. Calculations of equilibrium properties of quantum Coulomb systems using expanded ensemble Monte Carlo technique.

The expanded ensemble Monte Carlo method with Wang–Landau algorithm was used for calculating the ratio of partition functions for each class of permutations in the problem of several interacting particles (fermions) in an external field. The complete partition function and average energy for the system of identical particles was obtained at finite temperatures down to their low values.

Key words: quantum statistics, path integrals, density matrix, coulomb systems.

Paston S. A. Analysis of topological effects in QED-2 in the framework of functional integral formalism.

The Euclidian form of two-dimensional quantum electrodynamics is investigated in which the configurations of the gauge field with an arbitrary integer topological number are permitted. The vacuum parameter θ is introduced into the theory by adding the topological term, being a total divergence, to the Lagrangian density. With the help of transformations of the functional integral generating the Green functions, we reformulate the theory to the form in which only enough fast decreasing configurations of the gauge field (i. e. having a zero topological number) are permitted. But in the action a new term arises which is not equal to the total divergence and depends on the parameter θ . One can interpret this term as a presence of the external electric field with the strength $\theta e/2\pi$. This coincides with the known interpretation of the θ parameter by S. Coleman. In the proposed formulation of the theory the vacuum parameter θ enters the action as a usual parameter. This simplifies the study of its influence on the theory. Two different methods of transformations of the functional integral, in coordinate and in momentum spaces, are compared.

Key words: gauge theory, topological effects, theta-vacuum, functional integral.

Elagin I. A., Stishkov Yu. K. Peculiarities of ehd-flows in the case of unipolar injection in the system of electrodes of the wire-plane type.

The results of numerical modeling of an electrohydrodynamical equation system for the wire-plane type of electrodes are described. Processes of charge formation near a cylindrical electrode and its propagation into the interelectrode gap at the action of a convective component of the current in the Nernst–Planck equation are considered. The assumptions applied earlier for simplified computation methods are confirmed: the charge is frozen in liquid, thin charged stream arises in the direction from the cylindrical electrode towards the plane electrode. As the result of the modeling one can also see typical peculiarities of the electrohydrodynamical flow structure which are observed in the experiments.

Key words: electrohydrodynamic flow, liquid dielectrics, Nernst–Planck equation, unipolar injection, charged near-electrode layer, wire-plane electrodes, injection current, thin charged stream, computer modeling, convection term, migration term, diffusion term.

Zarochensev A. K. Analysis of magnitotelluric data errors deviation in dependence of time of day on Baltic Shield on results of BEAR data statistical processing.

The objective of this work is to define the time interval of the day when the minimal errors of measurement of impedance could be expected. The results of the BEAR international experiment data were used for the analysis. The experiment BEAR was realized in 1998 on the Baltic Shield. Calculations of the impedance tensor components for different time intervals of the day were performed using a special code, where the robust methods of data selection are not implemented. The dispersion of a selective distribution logarithm is used for estimation of impedance deviation. At a result of the given method application the most favorable day hours for sounding on the Baltic Shield are defined from 10 a. m. to 6 p. m. local time. This time is defined for interval periods 600–1000 second.

Key words: data processing, electromagnetic induction, lognormal distribution, magnetotelluric.

Lebedev S. V., Pavlov V. A. Computational modeling of atmosphere perturbation forced by macroseisms.

The numerical model operation on the basis of package ANSYS 10.0 the process of acoustic impulse distribution in a stratum of the nonuniform atmosphere up to height of 200 km is presented. The basic stages of evolution of an acoustic wave are analyzed in accordance with its distribution above an epicenter of perturbation. Regularities in the evolution of an acoustic wave front connected with the difference

in separating power are obtained as well as the heights of formation of a blast front from the area of a positive impulse part given at the height of the source. The account of simultaneous influence of nonlinearity and dissipation is produced allowing thermal conduction and specific heat capacity. The numerical model operation allows to take into account the influence of viscosity at evolution stages when nonlinearity still prevails in comparison with dissipation. The area of heights of competing influence of nonlinearity and losses is analyzed. The solution is given not only for the area above an epicenter of macroseisms, but also for areas removed from it.

Key words: computational modeling, the effect of macroseisms, the effect of perturbation, atmosphere, acoustic wave evolution, non-uniform atmosphere, ANSYS 10.0, atmosphere nonlinearity, atmosphere layer dissipation, blast, blast front.

Koroleva T. Yu., Yanovskaya T. B., Patrusheva S. S. Upper mantle structure of the East-European Platform from the ambient noise data.

The method and a computer code for calculating cross-correlation function of the ambient seismic noise at two stations are developed. The function is used for determining a dispersion curve of a surface wave. The dispersion curves obtained at a great number of pairs of stations are used for estimation of variation of the crust and/or mantle structure by a surface-wave tomography technique. The method was applied to ambient noise records at the stations located at the East-European Platform for studying the upper mantle structure in the region. New data on variation of the structure in the depth range of 50–300 km are obtained. The discovered shear wave velocity anomalies correspond to the main tectonic structures.

Key words: seismic noise, tomography, surface waves, East-European Platform.

Makarov A. L., Pukinsky I. B., Smirnova N. A. The influence of sodium benzoate on viscosity and micellar region boundaries for aqueous solutions of cetyltrimethylammonium bromide.

The influence of sodium benzoate on the aggregation behavior of micellar solutions of cetyltrimethylammonium bromide is studied. The critical micelles concentrations and concentrations relating to the isotropic solutions–liquid crystal boundary are determined at 35 °C for various contents of the additive. A sharp ridge on the viscosity surface for ternary solutions is revealed. Very high viscosity values indicate probable formation of a network of entangled wormlike micelles. The effects produced by sodium benzoate and inorganic salts are compared.

Key words: CTAB, sodium benzoate, micellization, viscosity, CMC, liquid crystal boundary.

Belosludov V. R., Subbotin O. S., Gotlib I. Yu., Piotrovskaya E. M., Belosludov R. V., Kawazoe Y. Optimal localization of an organic molecule near inorganic surface and calculation of model potential parameters.

Calculation of electron structures of *p*-xylene and poly(ethylene oxide) oligomer molecules near titanium dioxide surface was made using the density functional theory. Mulliken atomic charges and interaction energies were calculated. Parameters of an approximate (9–4) potential for TiO₂–*p*-xylene interactions were estimated using the “united atom” model of the organic molecule.

Key words: density functional theory, titanium dioxide, organic molecules, model potentials of molecular interactions.

Bogachov D. A., Tikhomolov D. V., Tikhomolova K. P. Features of dependence of thin water films thickness of capillaries filled with solution CuSO₄ and octane on electric field tension.

The increase phenomenon of thickness of thin water film which is located at internal surface of a glass capillary filled with solution CuSO₄ and one octane drop in the form of a “column” under direct electric field influence is investigated. The feature of dependence is reflected in constancy of film thickness up to some tension (U^*), dependent on a capillary radius and column length, and active growth at tension more U^* . The conclusions concerning the influence of a special state of water in films at $U < U^*$ and the fact of active destruction of its structure at $U > U^*$ in experiments are made. The hypothesis published on the reasons of film behavior in the capillary energized is also involved in the discussion.

Key words: capillary, copper sulfate solution, octane column, water film, direct electric field, film thickness.

Golovin A. V., Ponomarev D. A., Takhistov V. V. Thermochemistry of organic, heteroorganic and inorganic molecules and their fragments. Part XXV. Comparison of quantum chemical and empirical methodology.

The preference of empirical methodology evaluation of thermochemical data of organic, heteroorganic and inorganic molecules and intermediate species against quantum chemical approach is shown. The problems of enthalpy sublimation definition and bond dissociation energy from kinetical data of bimolecular reactions and ion formation enthalpy by photoionization mass-spectroscopy data are considered.

Key words: thermochemistry, enthalpy formation, mass-spectroscopy, quantum chemistry, cations.

Ushkova T. S., Zorin I. M., Bilibin A. Yu. Viscometric study of poly(2-acrylamido-2-methyl-1-propanesulfonic acid) ionic complexes with different counterions.

Ionic complexes of poly(2-acrylamido-2-methyl-1-propanesulfonic acid) and *N,N*-(dimethylamino)propyl-3,5-bis[(3,5-dinitrobenzoyl)amino] benzamide were obtained. Concentration dependence of reduced viscosity of ionic complexes in DMSO solution was studied for various molar ratios of organic and non-organic low molecular weight counterions–polyelectrolyte sulfonic acid groups. Considerable compactization of macromolecules of polyelectrolytes occurs on ionic complex formation with organic counterions.

Key words: dendritic ionic complexes, non-covalent binding, polyelectrolytes.

Morozkina S. N., Egorov M. S., Eliseev I. I., Selivanov S. I., Eschenko N. D., Putilina F. E., Vilkova V. A., Zakharova L. I., Shavva A. G. Synthesis and investigation of osteoprotective action of some 8α -analogues of steroid estrogens.

8α -Analogues of steroid estrogens have been synthesized and their structures were confirmed by NMR methods. The investigation of biological properties of compounds obtained on ovariectomized rats have shown that 17β -acetoxy-3-methoxy-18-methyl- 8α -estra-1,3,5(10)-triene and 17β -ethoxy-3-methoxy- 8α -estra-1,3,5(10)-triene possess best osteoprotective properties under experimental conditions.

Key words: 8α -analogues of steroid estrogens, NMR spectroscopy, osteoprotective activity.

Prokhorov L. V., Ushakov A. S. On variational principle in Hamiltonian mechanics.

Peculiarities of variational principle in Hamiltonian mechanics (problems of covariant formulation and boundary conditions) are analyzed. The difference between variational principles in Lagrangian and Hamiltonian formalisms is emphasized. Four variants of covariant variational principle are formulated.

Key words: Hamiltonian mechanics, variational principles.

Golovin A. V., Lagodinski V. M. *S*-states problem in pion atom without strong nuclear forces in relativistic quantum mechanics.

A new method of local differential operators of an infinity order is used to solve the quantum-relativistic problem of pion atom *S*-states. In resulting equation the strong forces are not taken into account. The locality of constructed operators and the invariance of constructed equation are treated in detail. The equation is solved only for *S*-states. The analysis of solutions showed that the spectrum is real, bounded below and wave functions are regular in zero. For small *Z* values the energy levels and wave functions are nearly equal to related energy levels and wave functions of nonrelativistic Schrödinger equation.

Key words: relativistic quantum mechanics, pion atoms, wave functions.

Torilov S. Yu. The alpha-particle structure of rotational bands in ^{40}Ca .

It is demonstrated that the local-potential alpha-cluster model accounts for the basic properties of the low-lying rotational band with positive parity and a high-lying band with negative parity in ^{40}Ca . The properties of the low-lying band with negative parity is interpreted in the framework of an one-dimensional model of octupole vibrations with axial symmetry. This simple model allows us to describe the spin dependence of parity splitting of the yrast band in ^{40}Ca . It is shown that there is a good agreement with experimental data.

Key words: nuclear structure, rotational bands, alpha-clusters.

Zherebchevsky V. I., Oertzen von W., Gridnev K. A. Binary and ternary cluster decay of ^{56}Ni nuclei.

Using a unique detector system for heavy ions registration (the BRS, binary reaction spectrometer), the coincident fission events have been measured from the decay of ^{56}Ni compound nuclei formed in the reaction with ^{32}S beam on a ^{24}Mg target at $E_{\text{lab}}(^{32}\text{S}) = 163$ MeV. Narrow and broad out-of-plane correlations have been observed for two fragments emitted in binary events, and in the data for ternary decay with missing charges from 4 up to 8. After subtraction of broad components the narrow correlations are interpreted as a ternary fission process from the hyper-deformed states at a high angular momentum. From the binary coincidences in the two detectors the cross sections for decay channels were obtained. The relative yields of these binary events are explained using the statistical model based on the Extended Hauser-Feshbach formalism for compound nucleus decay.

Key words: compound nuclear systems, binary and ternary cluster decays, binary reactions spectrometer, hyper-deformations, statistical model, extended Hauser-Feshbach formalism.

Kiryak V. A., Larina A. G., Stepakov A. V. The reaction of 6,6-dimethylfulvene with aromatic imines in presence of Lewis acids.

The formal aza-Diels-Alder reaction of electron rich olefins with *N*-arylimines (the Povarov reaction) is a powerful and efficient means for the construction of substituted tetrahydroquinolines. The $\text{BF}_3 \cdot \text{Et}_2\text{O}$ and $\text{Yb}(\text{OTf})_3$ -catalyzed formal aza-Diels-Alder reaction of 6,6-dimethylfulvene with *N*-arylimines is described. It was established that the reaction of 6,6-dimethylfulvene with *N*-arylimines in the presence of 10 mol. % $\text{BF}_3 \cdot \text{Et}_2\text{O}$ or $\text{Yb}(\text{OTf})_3$ in 1,2-dichloroethane resulted in the formation of tetrahydroquinolines (3) in poor yields (up to 15 %). The reactions were accompanied by substantial polymerization of the reaction mixture. The mechanism for this process is undoubtedly stepwise proceeding via ionic intermediate (5) with the final step being an intramolecular electrophilic substitution of a carbenium ion. The composition and structures of compounds (3) were confirmed by elemental and spectral analysis.

Key words: imines, 6,6-dimethylfulvene, Lewis acids, catalysis.

Pakalnis V. V., Zerova I. V., Yakimovitch S. I. Reactions of 2-(*N,N*-dimethylaminomethylene)-5,5-dimethylcyclohexane-1,3-dione with hydrazine derivatives

Interaction of 2-(*N,N*-dimethylaminomethylene)-5,5-dimethylcyclohexane-1,3-dione with hydrazine derivatives depending on the reaction conditions can give rise to compounds with enhydrazine or enolhydrazone structure, dimethylammonium salt of enolate anion, pyrazoles and pyrazolines.

Key words: enhydrazine, condensation, tautomerism, pyrazol.

CONTENTS

Physics

<i>Voznesenskiy M. A., Vorontsov-Velyaminov P. N., Lyubartsev A. P.</i> Calculations of equilibrium properties of quantum Coulomb systems using expanded ensemble Monte Carlo technique.....	3
<i>Paston S. A.</i> Analysis of topological effects in QED-2 in the framework of functional integral formalism.....	17
<i>Elagin I. A., Stishkov Yu. K.</i> Peculiarities of EHD-flows in the case of unipolar injection in the system of electrodes of the wire-plane type.....	31
<i>Zarochensev A. K.</i> Analysis of magnetotelluric data errors deviation in dependence of time of day on Baltic Shield on results of BEAR data statistical processing.....	42
<i>Lebedev S. V., Pavlov V. A.</i> Computational modeling of atmosphere perturbation forced by macroseisms.....	53
<i>Koroleva T. Yu., Yanovskaya T. B., Patrusheva S. S.</i> Upper mantle structure of the East-European Platform from the ambient noise data.....	63

Chemistry

<i>Makarov A. L., Pukinsky I. B., Smirnova N. A.</i> The influence of sodium benzoate on viscosity and micellar region boundaries for aqueous solutions of cetyltrimethylammonium bromide.....	73
<i>Belosludov V. R., Subbotin O. S., Gottlib I. Yu., Piotrovskaya E. M., Belosludov R. V., Kawazoe Y.</i> Optimal localization of an organic molecule near inorganic surface and calculation of model potential parameters.....	80
<i>Bogachov D. A., Tikhomolov D. V., Tikhomolova K. P.</i> Features of dependence of thin water films thickness of capillaries filled with solution CuSO_4 and octane on electric field tension.....	93
<i>Golovin A. V., Ponomarev D. A., Takhistov V. V.</i> Thermochemistry of organic, heteroorganic and inorganic molecules and their fragments. Part XXV. Comparison of quantum chemical and empirical methodology.....	104
<i>Ushkova T. S., Zorin I. M., Bilibin A. Yu.</i> Viscometric study of poly(2-acrylamido-2-methyl-1-propanesulfonic acid) ionic complexes with different counterions.....	120
<i>Morozkina S. N., Egorov M. S., Eliseev I. I., Selivanov S. I., Eschenko N. D., Putilina F. E., Vil'kova V. A., Zakharova L. I., Shavva A. G.</i> Synthesis and investigation of osteoprotective action of some 8α -analogues of steroid estrogens.....	126

Brief scientific notes

<i>Prokhorov L. V., Ushakov A. S.</i> On variational principle in Hamiltonian mechanics.....	135
<i>Golovin A. V., Lagodinski V. M.</i> S -states problem in pion atom without strong nuclear forces in relativistic quantum mechanics.....	143
<i>Torilov S. Yu.</i> The alpha-particle structure of rotational bands in ^{40}Ca	156
<i>Zherebchevsky V. I., von Oertzen W., Gridnev K. A.</i> Binary and ternary cluster decay of ^{56}Ni nuclei.....	162
<i>Kiryak V. A., Larina A. G., Stepakov A. V.</i> The reaction of 6,6-dimethylfulvene with aromatic imines in presence of Lewis acids.....	169
<i>Pakalnis V. V., Zerova I. V., Yakimovitch S. I.</i> Reactions of 2-(N,N -dimethylaminomethylene)-5,5-dimethylcyclohexane-1,3-dione with hydrazine derivatives.....	174

Papers	180
---------------------	-----

Summaries	185
------------------------	-----

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

- Белослудов Владимир Романович*: доктор физико-математических наук, институт неорганической химии им. А. В. Николаева СО РАН, профессор, заведующий лабораторией, bel@che.nsk.su
- Белослудов Родион Владимирович*: кандидат физико-математических наук, институт исследования материалов университета Тохоку (Сендай, Япония), научный сотрудник, rodion@imr.edu
- Билибин Александр Юрьевич*: доктор химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, профессор, декан химического факультета, alex_bilibin@mail.ru
- Богачёв Дмитрий Александрович*: Санкт-Петербургский государственный университет, аспирант, dimabogachov@gambler.ru
- Вилкова Вера Александровна*: кандидат биологических наук, НИИ физиологии им. А. А. Ухтомского, старший научный сотрудник, nde39@mail.ru
- Вознесенский Михаил Андреевич*: магистр физики, Санкт-Петербургский государственный университет, аспирант, mvoznnessenski@gmail.com
- Воронцов-Вельяминов Павел Николаевич*: доктор физико-математических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, профессор, voron.wgroup@gmail.com
- Головин Александр Викторович*: кандидат физико-математических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, старший научный сотрудник, golovin@photonics.phys.spbu.ru
- Готлиб Игорь Юльевич*: кандидат химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, программист, gotlib@nonel.ru.ru
- Гриднев Константин Александрович*: доктор физико-математических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, профессор, заведующий кафедрой, kgridnev@yahoo.com
- Егоров Максим Сергеевич*: кандидат химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, научный сотрудник, agshavva@yandex.ru
- Елагин Илья Александрович*: магистр физики, Санкт-Петербургский государственный университет, аспирант, elagin-spbgu@yandex.ru
- Елисеев Иван Иванович*: кандидат химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, старший научный сотрудник, agshavva@yandex.ru
- Ещенко Наталья Дмитриевна*: доктор биологических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, профессор, nde39@mail.ru
- Жеребчевский Владимир Иосифович*: кандидат физико-математических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, ассистент, vozhereb@mail.ru
- Зароченцев Андрей Константинович*: магистр физики, Санкт-Петербургский государственный университет, аспирант, andrey.zar@gmail.com
- Захарова Людмила Ивановна*: доктор биологических наук, НИИ физиологии им. А. А. Ухтомского, старший научный сотрудник, nde39@mail.ru
- Зерова Ирина Владимировна*: кандидат химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, научный сотрудник, viktoriapakalnis@mail.ru
- Зорин Иван Михайлович*: кандидат химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, доцент, ivan_zorin@mail.ru

Кавадзоэ Йосиюки: доктор философии (Ph. D.), институт исследования материалов университета Тохоку (Сендай, Япония), профессор, руководитель лаборатории, kawalab@img.edu

Кирьяк Виктор Андреевич: Санкт-Петербургский государственный университет, студент, s.lab@pobox.spbu.ru

Королёва Татьяна Юрьевна: магистр физики, Санкт-Петербургский государственный университет, аспирантка, tanchik18@yandex.ru

Лагодинский Владимир Меерович: кандидат физико-математических наук, Санкт-Петербургский государственный университет аэрокосмического приборостроения, доцент, lagvladimir@yandex.ru

Ларина Анна Геннадьевна: Санкт-Петербургский государственный университет, инженер, larina51@yandex.ru

Лебедев Сергей Витальевич: бакалавр радиофизики, Санкт-Петербургский государственный университет, магистрант, nitrogen_xxl@rambler.ru

Любарцев Александр Павлович: кандидат физико-математических наук, Стокгольмский университет (Швеция), профессор, sasha@phycs.su.se

Макаров Алексей Леонидович: Санкт-Петербургский государственный университет, младший научный сотрудник, mak124@yandex.ru

Морозкина Светлана Николаевна: кандидат химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, научный сотрудник, i_norik@mail.ru

Оертцен фон Вольфрам: доктор философии (Ph. D.), институт О. Гана и Л. Мейтнер, Берлин (Германия), профессор, oertzen@hmi.de

Павлов Валерий Андреевич: доктор физико-математических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, профессор, pavlov.valery@mail.ru

Пакальнис Виктория Валерьевна: Санкт-Петербургский государственный университет, аспирантка, viktoriarakalnis@mail.ru

Пастон Сергей Александрович: кандидат физико-математических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, доцент, paston@pobox.spbu.ru

Патрушева Светлана Сергеевна: бакалавр физики, Санкт-Петербургский государственный университет, магистрантка, sola@yandex.ru

Пиотровская Елена Михайловна (1947–2007): доктор химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, профессор

Пономарёв Дмитрий Андреевич: доктор химических наук, Санкт-Петербургская государственная лесотехническая академия, профессор, juniper@mailbox.alkor.ru

Прохоров Лев Васильевич: доктор физико-математических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, профессор, lev.prokhorov@pobox.spbu.ru

Пукинский Игорь Болеславович: Санкт-Петербургский государственный университет, электроник, pukinski@yandex.ru

Путилина Фаина Евгеньевна: доктор биологических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, ведущий научный сотрудник, nde39@mail.ru

Селиванов Станислав Иванович: кандидат химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, доцент, nmr@paloma.spbu.ru

Смирнова Наталья Александровна: доктор химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, профессор, smirnova@nonel.ru.ru

Степаков Александр Владимирович: кандидат химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, старший преподаватель, alstepakov@yandex.ru

Стишков Юрий Константинович: доктор физико-математических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, профессор, stishkov@paloma.spbu.ru

Субботин Олег Сергеевич: кандидат физико-математических наук, институт неорганической химии им. А. В. Николаева СО РАН, научный сотрудник, subbot@che.nsk.su

Тахистов Вячеслав Васильевич: доктор химических наук, Центр экологической безопасности НИРАН, главный научный сотрудник, доцент, vvtah@mail.ru

Тихомолов Дмитрий Всеволодович: кандидат химических наук, Всероссийский нефтяной научно-исследовательский геолого-разведочный институт (ВНИГРИ), старший научный сотрудник, tikhomol@gmail.com

Тихомолова Ксения Петровна: доктор химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, профессор, tikhomolova@gmail.com

Ториллов Сергей Юрьевич: кандидат физико-математических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, старший преподаватель, torilov@hotmail.com

Ушаков Александр Сергеевич: магистр физики, Санкт-Петербургский государственный университет, аспирант, asushakov@gmail.com

Ушкова Татьяна Сергеевна: Санкт-Петербургский Государственный Университет, инженер, tatjana-reznichenko@yandex.ru

Шавва Александр Григорьевич: доктор химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, профессор, заведующий кафедрой, agshavva@yandex.ru

Яновская Татьяна Борисовна: доктор физико-математических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, профессор, yanovs@yandex.ru

Якимович Станислав Иванович: доктор химических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, ведущий научный сотрудник, viktoriapakalnis@mail.ru

Редакционная коллегия серии:

Морачевский А. Г., д-р хим. наук, проф. (отв. редактор);
Новожилов В. Ю., д-р физ.-мат. наук, проф. (зам. отв. редактора);
Антонов Н. В., д-р физ.-мат. наук; *Белюстин А. А.*, д-р хим. наук, проф.;
Вывенко О. Ф., д-р физ.-мат. наук, проф.; *Кожина И. И.* (отв. секретарь);
Костиков Р. Р., д-р хим. наук, проф.; *Конаков В. Г.*, д-р хим. наук, проф.;
Новиков Б. В., д-р физ.-мат. наук, проф.; *Поваров В. Г.*, д-р хим. наук, проф.;
Толмачёв Ю. А., д-р физ.-мат. наук, проф.; *Юрова И. Ю.*, д-р физ.-мат. наук

Редактор *В. А. Парагуда*
Компьютерная вёрстка *А. А. Багаева*
Номер подготовлен в системе \LaTeX 2 ϵ

Подписано в печать 29.05.2009. Формат 70×100¹/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.
Усл. печ. л. 15,8. Уч.-изд. л. 17,6. Тираж 500 экз. Заказ №

Адрес редакции: 199004, С.-Петербург, В. О., 6-я линия, д. 11/21, комн. 319.
Телефоны: 325-26-04, 328-96-17 (доб. 1026); тел./факс 328-44-22; E-mail: spbvest@rambler.ru.
<http://vesty.unipress.ru>.

Типография Издательства СПбГУ.
199061, С.-Петербург, Средний пр., д. 41.