

выборку подбирать так, чтобы у них в течение жизни не происходила замена одного типа ослабления иммунитета другим.

Литература

- 1 Осипенко, К. А. О возможности использования паспортных данных в статистическом анализе причин смертности населения / К. А. Осипенко, Н. Б. Осипенко // Творчество молодых 2013: сборник научных работ студентов и аспирантов УО «ГГУ им. Ф. Скорины»: в 3 ч. / Гомельский гос. ун-т им. Ф. Скорины; отв. ред. О. М. Демиденко. – Гомель, 2013. – Ч. 1. – С. 163–167.
- 2 Осипенко, К. А. Метод регрессионного моделирования продолжительности жизни по дате рождения / К. А. Осипенко, Н. Б. Осипенко // Творчество молодых 2012: сборник научных работ студентов и аспирантов УО «ГГУ им. Ф. Скорины»: в 2 ч. / Гомельский гос. ун-т им. Ф. Скорины; отв. ред. О. М. Демиденко. – Гомель, 2012. – Ч. 1. – С. 194–197.
- 3 Хигир, Б. Ю. Число имени / Б. Ю. Хигир. – СПб.: Астрель, 2008. – 42 с.
- 4 Лободин, В. Т. Формула здоровья / В. Т. Лободин. – СПб.: ИД Невский проспект, 1999. – 187 с.

УДК 539.2

А. И. Остапенко

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУР, ОБРАЗОВАННЫХ ФУЛЛЕРЕНАМИ

Данная работа посвящена изучению углеродных наноструктур, образованных молекулами эндофуллеренов, моделированию таких наноструктур в программе NureChem, расчету оптимальных геометрий выбранных конформаций, энергии образования и оценке возможности существования таких структур.

Одними из самых известных исследуемых объектов нанофизики являются фуллерены. Они представляют собой систему связанных атомов углерода, образующих сферический каркас. Самым распространенным, изученным и стабильным является фуллерен C_{60} , форма которого состоит из 20 шестиугольников и 12 пятиугольников. Существуют и другие фуллерены с большим и меньшим количеством атомов. Конформации с числом атомов от 20 до 60 называются низшими фуллеренами, остальные (до 540) – высшими (рисунок 1). Для оценки масштаба изображения на рисунке приведена горизонтальная линия, длина которой соответствует расстоянию 65 \AA .

Наряду с другими, для изучения таких нанообъектов используют методы компьютерного моделирования, разработанные с учетом экспериментальной информации и различных методов численного решения многочастичного уравнения Шредингера. Одной из самых известных программ, реализующих различные методы моделирования и расчета структуры нанообъектов, является NureChem. Для каждого метода в программе имеется набор различных параметризаций, позволяющих варьировать выбор варианта постановки задачи и набора базисных функций в зависимости от цели исследования и возможностей используемой вычислительной техники [1].

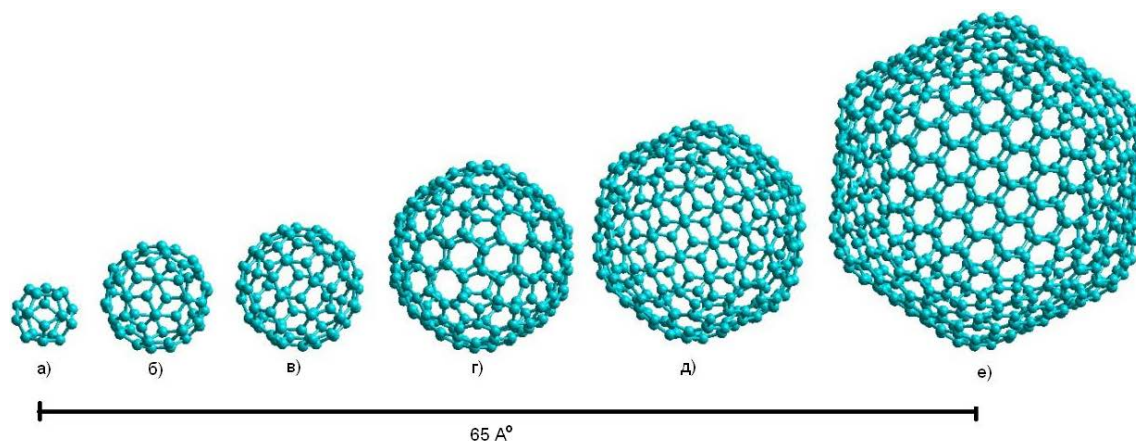


Рисунок 1 – Модели фуллеренов C_{20} (а), C_{60} (б), C_{80} (в), C_{120} (г), C_{240} (д), C_{540} (е).

При исследовании комплексов прежде всего необходимо определить их геометрию, в частности, способ координации атомов металла около углеродной основы. Проведение экспериментальных исследований таких комплексов затруднено в связи со сложностью их получения в достаточных количествах и трудностью разделения изомеров. Важную роль играет такой параметр как энергия образования.

$$E_{form} = E_{total} - (\sum E_{total,i}), \quad (1)$$

где, $\sum E_{total,i}$ – сумма полных энергий составных частей структуры, E_{total} – полная энергия исследуемой системы [3].

Эта величина характеризует термодинамическую стабильность комплекса в реальной ситуации: чем меньше эта энергия, тем вероятнее образование такого комплекса среди большого числа изомеров.

В статье [4] приводится расчет полуэмпирическим методом AM1 существования структуры типа алмаз $(Zn@C_{28})_5$ (рисунок 2) на основании вычисления энергии образования.

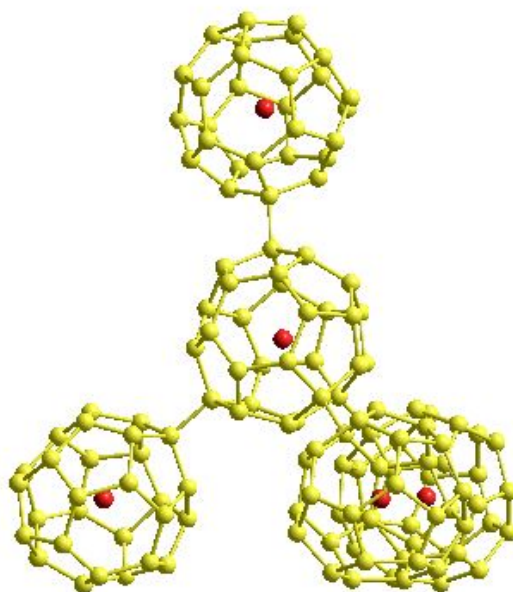


Рисунок 2 – Ячейка элементарной структуры $(Zn@C_{28})_5$ типа гипер-алмаз с ковалентными связями

В данной работе также была произведена оптимизация геометрии методом ab-initio в базисе 3-21G, и вычислена энергия образования комплекса. Результаты представлены в таблице 1:

Таблица 1 – Сравнение энергии образования комплексов вычисленная

	Данные работы [4] метод AM1, ккал/моль	Данные рассчитанные методом ab initio 3–21G, ккал/моль
$(C_{28})_5$	–43,6505	–45,9212
$(Zn@C_{28})_5$	–34,2218	–36,9328

Метод ab initio дает более точные результаты по сравнению с методом AM1, так как в нем уравнение Шредингера решается в более точном приближении. Далее расчеты будут производиться именно методом ab initio.

Методом ab initio, для фуллеренов C_{20} была рассчитана возможная конформация и других возможных структур. С кубической (а), объемноцентрированной (б) ячейкой и ячейкой типа гипер-алмаз (в), модели таких конформаций с оптимизированной геометрией представлены на рисунке 3:

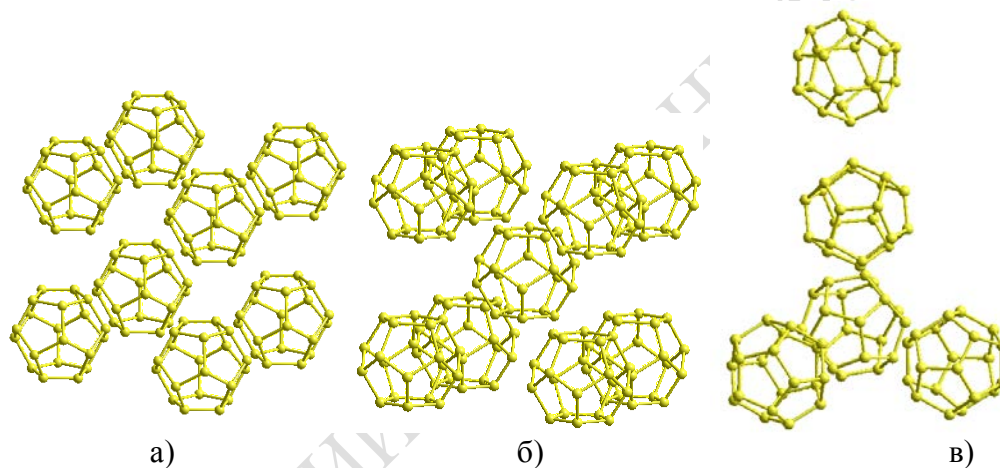


Рисунок 3

Для них была рассчитана энергия образования, на основании неё была оценена возможность существования данных структур, результаты представлены в таблице 2:

Таблица 2 – Энергия образования комплексов из молекул C_{20} , различных конформаций.

Конформация	Энергия образования, ккал/моль
C_{20} (куб)	–19,3286
C_{20} (объемноцентрированный)	–26,9276
C_{20} (алмаз)	–91,2091

Таким образом можно сделать вывод, что для конформаций, состоящих из фуллеренов C_{20} , предпочтительной является структура с расположением молекул по типу решетки алмаза, однако при определенных условиях могут существовать и структуры с кубической и объемноцентрированной решеткой.

Все расчеты в данной работе были выполнены с использованием процессора Intel® Core™ i7-4770K Processor Turbo Core 4x3,9 GHz и оперативной памяти 16Gb.

Литература

- 1 Дегтяренко, Н. Н. Описание программных пакетов для квантовых расчетов наносистем / Н. Н. Дегтяренко / М.: МИФИ, 2008. – 180 с.
- 2 Gurin, V. Endofullerenes M@C₆₀ with defferent monovalent metals / V. Gurin / *NANO*. – 2008. – 03. – p. 483
- 3 Варганов, С. А. Неэмпирические расчеты эндо- и экзоэдральных комплексов фуллерена C₆₀ с ионом Li⁺ и эндоэдрального камплека C₆₀ с димером Li₂/ С. А. Варганов, П. В. Аврамов, С. Г. Овчиников/ ФТТ. – 2000. – Т. 42 вып. 2. – С 378–382
- 4 Еняшин, А. Н. Моделирование структуры электронного строения конденсированных фаз фуллеренов C₂₈ и Zn@C₂₈/ А. Н. Еняшин, В. В. Ивановская, Ю. Н. Макурин, А. Л. Ивановский /ФТТ. – 2012. Т.46, № 8 – С. 1522–1525
- 5 Назаров, А. В. Многокомпонентное 3D-проектирование наносистем / А. В. Назаров – М. : Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана. – 2011. – 392 с.
- 6 Елецкий, А. В. Фуллерены и структура углерода / А. В. Елецкий , Б. М. Смирнов / УФН. – 1995. – Т.165, № 9. – С. 977–1009
- 7 Ибрагимов, И. М. Основы компьютерного моделирования наносистем / И. М. Ибрагимов, А. Н. Ковшов, Ю. Ф. Назаров / Спб.: Издательство «Лань», 2010. – 384 с.

УДК 004.7

А. С. Пацков, Н. Б. Осипенко

ТЕСТИРОВАНИЕ ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТИ И РАЗРАБОТКА WEB-ПРИЛОЖЕНИЙ НА ПЛАТФОРМЕ NODE.JS

В статье описываются проведённые тестирования производительности платформы Node.js с другими серверными технологиями и их результат. По результатам тестирований можно сделать вывод о преимуществах Node.js. Также описана архитектура разработанного Web-приложения с помощью платформы и перечислены компоненты, используемые в разработке. На основе полученных результатов сделан вывод о целесообразности использования Node.js.

Node.js является серверной технологией, которая основана на разработанном компанией Google JavaScript-движке V8. Это прекрасно масштабируемая система, поддерживающая не программные потоки или отдельные процессы, а асинхронный ввод/вывод, управляемый событиями. Она идеально подходит для Web-приложений, которые не выполняют сложных вычислений, но к которым происходят частые обращения [1].

Для того чтобы наглядно продемонстрировать производительность работы Node.js по сравнению с другими технологиями разработки Web-приложений, проведём несколько различных тестов.

Для тестирования производительности Node.js с Apache сервером проведём два тестирования. Apache HTTP-сервер является кроссплатформенным ПО, поддерживает операционные системы Linux, BSD, Mac OS, Microsoft Windows, Novell NetWare, BeOS. Основными достоинствами Apache считаются надёжность и гибкость конфигурации. Он