Для численного описания структуры конкретного химического соединения в моделях предложено использовать так называемые дескрипторы химической структуры [5]. В принципе дескриптором может является как число, рассчитываемое из структурной формулы – молекулярная масса, количество определенных атомов, частичные заряды на атомах и т.д., так и фрагмент структуры. К настоящему времени описана теория построения и использования множества дескрипторов. При этом дальнейшее углубление представлений о молекулярной структуре дает возможность создавать новые дескрипторы и модели, отражающие эти представления.

Как подготовительная процедура для моделирования и предметного использования зависимости «структура - свойство» - это в данном случае расчетный класс опасности, осуществлялось формирование описания химических соединений с помощью дескрипторов разного уровня информативности, иерархический комплекс которых представлен в табл. 1.

Таблица 1. Иерархия дескрипторов, используемые для описания химической структуры

Класс дескрипторов	Типы дескрипторов
Дескрипторы элементного уровня	1.Число атомов одного сорта 2.Атомные веса фрагментов структуры
Дескрипторы структурной формулы	1.Топологические индексы 2.Структурные фрагменты
Дескрипторы электронного уровня	1.Частичные заряды на атомах 2.Молекулярные рефракция 3.Энергиивысшей занятой и низшей незанятой орбиталей
Дескрипторы межмолекулярной взаимодействий	1.Константы Гамета 2.Индукции постоянная 3.Стерические константы

В качестве дескрипторов структурной формулы использовались следующие топологические индексы: индекс Балабана, индекс Винера, молекулярно – топологический индекс Шульца, топологический диаметр, коэффициент нормы и др.

Таким образом, нами подготовлены теоретические предпосылки для создания конкретной компьютеризированной методики прогнозирования класса опасности органических веществ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Экспертные системы в химической технологии. Основы теории, опыт разработки и применения / Мешалкин В.П. – М.: Химия, 1995.- 368 с.

2. Определение расчетного индекса экологической опасности веществ методами нечеткой математики/Гермашев И.В., Дербишер Е.В., Веденина Н.В., Дербишер В.Е.//Химическая промышленность сегодня.-2003.-№11.-С. 27-34.

3. Априорное ранжирование факторов при расчете индекса экологической опасности веществ с использованием нечетких множеств / Е.В. Дербишер, П.И. Погорелов, И.В. Гермашев, В.Е. Дербишер //Химическая промышленность сегодня.-2006.-№8.- С.48-56.

4. Новый справочник химика и технолога. //Радиоактивные вещества. Вредные вещества. Гигиенические нормативы. НПО «Профессионал» С.-П. - 2004с. - 1024 с.

5. Оценка и использование дескрипторов ВСИТ в исследованиях QSAR и QSPR // Химия: РЖ.-1999. - №20.-№ 20Б1117. – Реф.: Estimation and use of descriptors VSIT in researches QSAR and QSPR / Stanton David T. // Chem. Inf. And Comput. Sci. –1999.-39, №1.-с.11-20.

УПРУГИЕ СВОЙСТВА МЕТАЛЛОВ ХИРУРГИЧЕСКИХ ИНСТРУМЕНТОВ

Муслов С.А.
Московский государственный медико-стоматологический университет
Москва, Россия

В работе выполнен анализ упругих характеристик (уровня, ориентационной зависимости и степени анизотропии) монокристаллов металлов Ti, TiNi-TiFe, Fe, применяемых для изготовления специального хирургического инструментария.

Упругие характеристики материалов медицинского назначения играют большую роль для функциональных свойств материалов и конструкций из них. Механическая совместимость абиотических материалов и инструментов предъявляет особые требования к их пассивному деформационному поведению, а динамика продвижения новых материалов для медицины имеет ряд особенностей, связанных с прохождением ими дополнительных тестов и сертификаций на предмет их дальнейшего использования. В силу этого обстоятельства лишь немногие из перспективных материалов “кандидатов” могут считаться практически ценными и рекомендованными к последующему медико-биологическому применению. Создатели современных материалов стремятся добиться деликатного и благоприятного

взаимодействия между материалом и биологической средой, в которой он находится, и которая бы не оказывала обратного отрицательного влияния на сам материал.

В связи с этим являются актуальными знания и сравнительный анализ упругих свойств металлов и сплавов, используемых в сегодняшней медицине и медицинском приборостроении для изготовления инструментария. Тем не менее, сведения о величине и анизотропии упругих свойств медицинских металлических материалов в литературе разрознены и часто содержатся в труднодоступных источниках. В настоящей работе предпринята попытка в некоторой степени восполнить этот пробел на примере соединений на основе титана, никелида титана (нитинола) и железа.

Применение металлических материалов в медицине известно с давних времен. Высокой конкурентной способностью в этой сфере, не в последнюю очередь в связи со своей себестоимостью, до сих пор владели многочисленные легированные стали, например, наиболее широко известные материалы для внутрисосудистых окклюдеров и стентов – нержавеющие стали 300, 304 и 316L на основе железа Fe. Последние являются 8-и 9-и компонентными сплавами, соответственно. Помимо железа и минимального содержания углерода (< 0,3 %) в их состав входит большое количество никеля (10-15 %), хрома (8-21 %), а остальные компоненты, например, молибден (2-4 %), процентное содержание которых невелико, помогают стабилизировать кристаллографическую структуру и определяют физические характеристики сплава. Нержавеющие стали дешевле других материалов легко и поддаются обработке, однако их антикоррозионные свойства невысоки и от трения легко возникает коррозия.

Титан Ti получил более широкое распространение, например, в имплантационной хирургии в связи с тем, что имеет малый удельный вес и высокие механические свойства. Чистый титан характеризуется высокой коррозионной стойкостью вследствие того, что на его поверхности образуется тонкая окисная плёнка, которая защищает его от большинства агрессивных сред.

В 70-х годах произошло открытие, и затем широкое внедрение в клиническую практику новых биоадаптированных материалов с мартенситными превращениями и программируемым формоизменением - сверхэластичных сплавов с эффектом памятью формы. Среди определённого круга таких трансформируемых по свойствам металлических систем с памятью все жёсткие требования практического применения в медицине хорошо выдержали биоинертные сплавы на основе никелида титана TiNi.

Расчёт упругих постоянных и построение сечений поверхностей осуществлено на основании собственных и известных экспериментальных данных.

Наглядное представление об уровне и анизотропии модулей дают указательные поверхности (рис. 1,2). Длина радиуса-вектора, проведенного в любую точку указательной поверхности, равна значению модуля в соответствующем направлении.

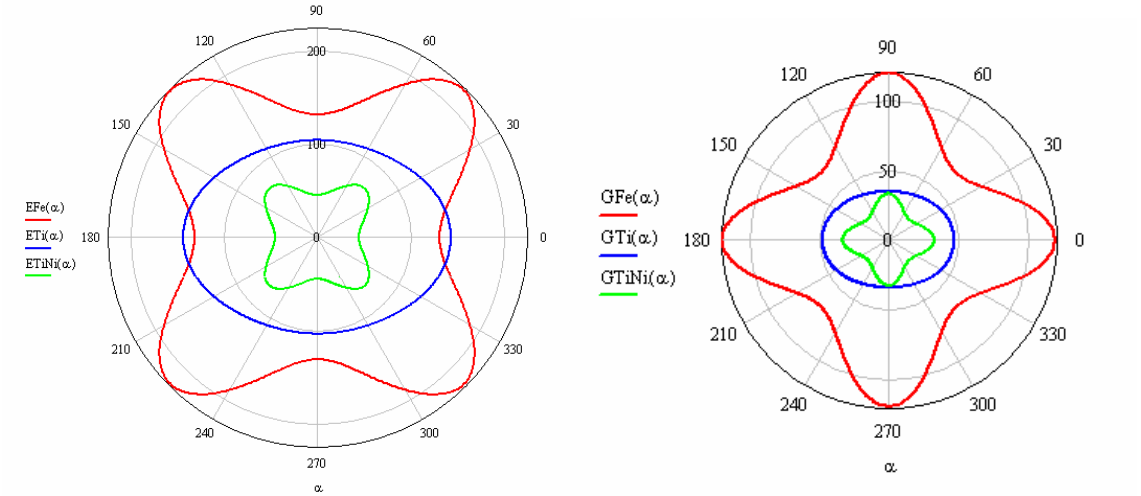

Рис. 1. Ориентационная зависимость модулей Юнга в плоскостях $(10\bar{1}0, 100, 100)$ и сдвига в плоскостях $(10\bar{1}0, 0\bar{1}0, 0\bar{1}0)$ кристаллов Ti, TiNi, Fe.

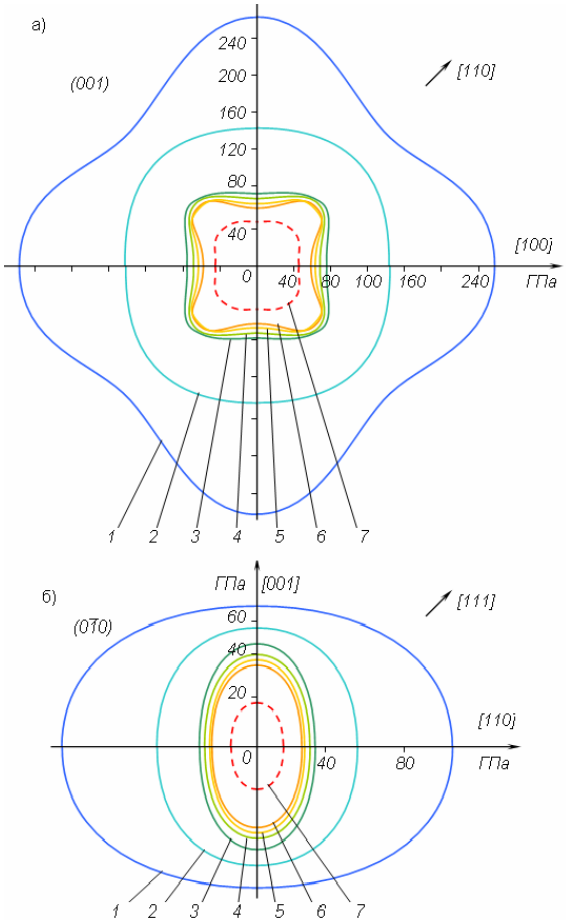

Рис. 2. Эволюция ориентационной зависимости модуля Юнга и сдвига для сплавов системы TiFe-TiNi: 1 – $Ti_{50}Fe_{50}$, 2 – $Ti_{50}Ni_{25}Fe_{25}$, 3 – $Ti_{50}Ni_{35}Fe_{15}$, 4 – $Ti_{50}Ni_{40}Fe_{10}$, 5 – $Ti_{50}Ni_{45}Fe_{5}$, 6 – $Ti_{50}Ni_{48}Fe_{2}$, 7 – TiNi (непосредственно перед мартенситным превращением).

МЕТАЛЛЫ МЕДИЦИНСКОГО НАЗНАЧЕНИЯ И ИХ УПРУГИЕ СВОЙСТВА

Муслов С.А.
Московский государственный медико-стоматологический университет
Москва, Россия

В работе выполнен сравнительный анализ упругих характеристик (уровня, ориентационной зависимости и степени анизотропии) монокристаллов металлов Ti, TiNi-TiFe и Fe, применяемых при изготовлении специального хирургического инструментария.

Динамика продвижения новых материалов для медицины имеет ряд особенностей, связанных с прохождением ими дополнительных тестов и сертификаций на предмет их дальнейшего использования. В силу этого обстоятельства лишь немногие из перспективных материалов “кандидатов” могут считаться практически ценными и рекомендованными к последующему медико-биологическому применению. Создатели современных материалов стремятся добиться деликатного и благоприятного взаимодействия между материалом и биологической средой, в которой он находится, и которая бы не оказывала обратного отрицательного влияния на сам материал.

Упругие характеристики материалов играют большую роль для функциональных свойств материалов и конструкций из них. Необходимость механической совместимости абиотических материалов и инструментов предъявляет особые требования к их пассивному деформационному поведению. В связи с этим являются актуальными знания и сравнительный анализ упругих свойств металлов и сплавов, используемых в сегодняшней медицине и медицинском приборостроении для изготовления инструментария. Тем не менее, сведения о величине и анизотропии упругих свойств медицинских металлических материалов в литературе разрозрнены и часто содержатся в труднодоступных источниках. В настоящей работе предпринята попытка в некоторой степени восполнить этот пробел на примере соединений на основе титана, никелида титана (нитинола) и железа.