SUMMARY

Interactive graphic system "ELLA" is described which is an integrated program packet for reverse problem solution in ellipsometry. The solutions stable to experimental errors are by two algorithms: a simplex method under constrains and a regularizing iteration method. Developed graphic procedure kit includes displaying of graphic surface layers their optical parameters and all main results of intermediate calculations. Specialized graphic input functions allow us to change the parameters of chosen solution method, the basic data, to enter a new additional information, etc. On the examples of model and real structures of GaAs - oxide MAI capabilities in ellipsometry for determination of multilayer structure optical parameters are studied.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1.Гласко В.Б., Гущин Г.В., Старостенко В.И. О применении метода регуляризации по Тихонову к решению нелинейных систем уравнений// ЖВМ и МФ,-1976.- Т.16, N2.- С.283-292.

2.Ржанов А.В., Свиташев К.К., Семененко А.И. и др. Основы эллипсометрии. -Новосибирск, Наука, 1978.- 424с.

3.Старостенко В.И. Устойчивые численные методы в задачах гравиметрии.-Киев,1978.- 228с.

4.Тихонов А.Н., Гончарский А.В., Степанов В.В., Ягола А.Г. Численные методы решения некорректных задач.-М,1990.-232с.

5..Zabashta L.A., Zabashta O.I. Solution of the inverse problem in the reconstruction of the optical characteristics using ellipsometry//Proceedings 3-rd Russian-Ukrainian-German Analytical Symposium,Sumy. -1994.

6.Zabashta L.A.,Zabashta O.I.A solution of the inverse problem in the ellipsometry //Abstracts of International Conference OPTDIM'95,Kiev.-1995.-p.40.

7.Bu-Abbud G.H.,Bashara N.M. and Woollam John A. Variable wavelength, variable angle ellipsometry including a sensitivities correlation test// Thin Solid Films,-1986, N138, p.27-41.

Поступила в редколлегию 2 июня 1995 г.

УДК 517.977.57

МОНОТОННОСТЬ ПО ПАРАМЕТРУ РЕШЕНИЯ НЕЛИНЕЙНОЙ ЗАДАЧИ О ДОПОЛНИТЕЛЬНОСТИ

Чумак Л.Ф., асп.

Рассмотрим параметрическую нелинейную задачу о дополнительности: для произвольного набора $u=(u_1,u_2,\dots,u_m)\in R^m$ найти точку $x\in R^n$ такую, чтобы были выполнены следующие соотношения:

$$x\geq 0,\ Ax+Bu+\varphi(x,u)\geq 0,\qquad x^T(Ax+Bu+\varphi(x,u))=0. \tag{1}$$

Здесь A - вещественная $n\times n$ матрица, B - вещественная $n\times m$ матрица, φ: $R^n\times R^m\to R^n$ - нелинейная функция. Под сравнением векторов подразумевается покомпонентное сравнение: $a\geq b$, если $a_i\geq b_i$, $i=1,\dots,n$.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 1. Матрица K называется Z - *матрицей*, если все ее внедиагональные элементы неположительны.

Матрица D называется P - *матрицей*, если все ее главные миноры положительны.

Матрица Q называется M - *матрицей*, если она является и Z - матрицей, и P - матрицей.

Матрица, обратная к M-матрице, состоит из неотрицательных элементов [2].

Функция $f(x)$ называется *антитонной*, если для $x_1 \geq x_2$ выполнено соотношение $f(x_1) \leq f(x_2)$, и *монотонной*, если $f(x_1) \geq f(x_2)$.

В работах [1,3] доказывается существование и единственность решения задачи о дополнительности для любого u. Интерес вызывает вопрос о монотонной зависимости этих решений по параметру.

ТЕОРЕМА 1. Если в задаче (1) матрица A является положительно определенной M-матрицей, матрица B состоит из неположительных элементов, функция $\varphi(x,u)$ монотонна по x и антитонна по u, а также φ'_x является положительно определенной M-матрицей, то решение $x(u)$ является монотонным по параметру.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Рассмотрим два параметра, для которых выполнено соотношение $u \geq v$ и два решения задачи (1) - $x(u)$, $x(v)$, которые определены единственным образом. Покажем, что

$$x_i(u) \geq x_i(v) \text{ для } \forall i=1,\ldots,n.$$

Разобьем множество индексов на следующие подмножества:

$$I=I(v)=\{i: x_i(v)>0\} \text{ и } J=J(v)=\{1,\ldots,n\}/I$$

1) Пусть $i \in \{1,2,\ldots,n\} \setminus I(v)$, то есть $x_i(u) \geq 0$, $x_i(v)=0$, следовательно, $x_i(u) \geq x_i(v)$.
2) Рассмотрим подмножество $I=I(v)$, то есть $x_i(v)>0$, $i \in I$.
Покажем, что $x_i(u) \geq x_i(v)$.
Если $i \in I(v)$, то

$$A_{II}x_I(u)+B_{II}(u)+\varphi_I(x(u),u) \geq 0 \tag{2}$$

$$A_{II}x_I(v)+B_{II}(v)+\varphi_I(x(v),v)=0 \tag{3}$$

где A_{II}, B_{II} - квадратные подматрицы матриц A и B с элементами a_{ij}, b_{ij}, i, $j \in I(v)$ соответственно; x_I - и ϕ_I подвекторы векторов x и φ соответственно.
Вычтем из неравенства (2) равенство (3) и получим

$$A_{II}x_I(u)+B_{II}(u)+\varphi_I(x(u),u)-A_{II}x_I(v)+B_{II}(v)+\varphi_I(x(v),v) \geq 0$$

или

$$A_{II}[x_I(u)-x_I(v)]+B_{II}[u-v]+[\varphi_I(x(u),u)-\varphi_I(x(v),v)] \geq 0. \tag{4}$$

Рассмотрим отдельно последнюю разность из левой части неравенства (4):

$$\varphi_I(x(u),u)-\phi_I(x(v),v)]=\int_0^1 \varphi'_I[x(v)+t(x(u)-x(v)),v+t(u-v)]\cdot$$

$$\cdot[x(t)-x(v),u-v]dt=\int_0^1 \varphi'_I[x(v)+t(x(u)-x(v)),v+t(u-v)]dt\cdot$$

$$\cdot[x(t)-x(v),u-v]=\int_0^1 \varphi'_{I,x}[x(v)+t(x(u)-x(v)),v+t(u-v)]dt\cdot$$

$$\cdot[x(t)-x(v)]+\int_0^1 \varphi'_{I,u}[x(v)+t(x(u)-x(v)),v+t(u-v)]dt\cdot(u-v).$$

Для удобства введем следующие обозначения:

$$\int_0^1 \phi'_{I,x}=\int_0^1 \varphi'_{I,x}[x(v)+t(x(u)-x(v)),v+t(u-v)]dt \text{ и}$$

$$\int_0^1 \phi'_{I,u}=\int_0^1 \varphi'_{I,u}[x(v)+t(x(u)-x(v)),v+t(u-v)]dt.$$

Обозначим подматрицу матрицы $\phi'_{I,x}$, которая состоит из элементов с одинаковыми индексами, через G: $G=\phi'_{I,xi}$ и через H подматрицу, которая состоит из остальных элементов матрицы $\phi'_{I,x}$: $H=\phi'_{J,xj}$, где $I=I(v), J=J(v)$. Тогда

$$
\begin{aligned}
&\varphi_I(x(u),u-\varphi_I(x(v),v)=\phi'_{I,x}[x(u)-x(v)),+\phi'_{I,u}[x(v)=\\
&=G\cdot[x_I(u)-x_I(v)]+H\cdot[x_J(u)-x_J(v)]+\phi'_{I,u}\cdot(u-v)=\\
&=G\cdot[x_I(u)-x_I(v)]+H\cdot x_J(u)+\phi'_{I,u}\cdot(u-v)
\end{aligned}
\qquad (5)
$$

Подставив выражение (5) в неравенство (4), получаем

$$A_{II}[x_I(u)-x_I(v)]+B_{II}[u-v]+\phi'_{I,x}\cdot[x_I(u)-x_I(v)]+H\cdot x_J(u)+H\cdot x_J(u)+\phi'_{I,u}\cdot(u-v)\geq 0$$

или

$$(A_{II}+G)\cdot[x_I(u)-x_I(v)]\geq -B_{II}[u-v]-H\cdot x_J(u)-\phi'_{I,u}\cdot[u-v]. \qquad (6)$$

Рассмотрим отдельно каждое слагаемое правой части неравенства (6). Так как $u\geq v$, то $-B_{II}[u-v]\geq 0$. Далее, в силу того, что функция φ антитонна по параметру, следует, что $-\phi'_{I,u}\cdot[u-v]\geq 0$. Наконец, из того, что φ'_x является положительно определенной М-матрицей и $\phi'_{J,u}$ - внедиагональные элементы, получаем, что $-H\cdot x_J(u)\geq 0$. Таким образом, в правой части неравенства (6) получается величина неотрицательная, то есть

$$(A_{II}+\phi'_{I,x})\cdot[x_I(u)-x_I(v)]\geq 0 \qquad (7)$$

Зная, что сумма положительно определенных М-матриц будет М-матрицей [2] и используя свойство М-матрицы, умножим слева обе части неравенства (7) на матрицу $(A_{II}+\phi'_{I,x})^{-1}$, состоящую из неотрицательных элементов, и получаем следующее неравенство: $x_{I(v)}(u)-x_{I(v)}(v)\geq 0$ и, следовательно $[x_{I(v)}(u)-x_{I(v)}(v)]\geq 0$, то есть $x_I(u)-x_I(v)\geq 0$. Теорема полностью доказана.

Из этой теоремы вытекает ряд следствий. Сначала дадим определение неопределенной по параметру задачи о дополнительности.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 2. Для произвольного набора $u=(u_1,u_2,\dots,u_m)\in R^m$ найти точку $x\in R^n$ такую, чтобы были выполнены следующие соотношения:

$$x\geq 0,\ Ax+\varphi(u)\geq 0,\ x^T(Ax+\varphi(u))=0, \qquad (8)$$

где A вещественная $n\times n$ матрица, ϕ-нелинейное отображение.

ТЕОРЕМА 2. Если матрица A является М-матрицей, а функция: $\varphi:R^m\to R^n$ антитонна, то решение $x(u)$ задачи (8) является монотоным по параметру.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Рассмотрим два параметра, для которых выполнено соотношение $u\geq v$ и два решения задачи (8)- $x(u),x(v)$, которые определены единственным образом.

Покажем, что $x_i(u)\geq x_i(v)$ для любого $i=1,\dots,n$. Разобьем множество индексов на следующие подможмтва:

$I=I(u)=\{i:x_i>0\}$ и $J=J(u)=\{i:1,..,n\}\setminus I$.

1) Если $s\in S=I(u)\cap I(v)$, то есть $x_s(u)>0$ и $x_s(v)>0$, то $A_{SS}x_S+\phi_S(u)=0$, где A_{SS} - квадратная подматрица матрицы A с элементами a_{ij}, $i,j\in S$.

Решение задачи (8) в данном случае можно выписать в явном виде:

$$x_S=-A^{-1}_{SS}\varphi_S(u),\ \text{где } A^{-1}_{SS}=(\alpha_{ij})_{i\in S,j\in S}\geq 0$$

Рассмотрим $x_i(u)$ и $x_i(v)$.

$$x_i(u)=-\sum_{j\in I(u)}\alpha_{ij}\varphi_j(u),\ x_i(v)=-\sum_{j\in I(v)}\alpha_{ij}\varphi_j(v)$$

Оценим их разность:

$$x_i(u)-x_i(v)= -\sum_{j\in S}[\alpha_{ij}\varphi_j(u)-\varphi_j(v)].$$

Из антитонности функции ϕ следует, что $\phi_j(u)-\phi_j(v)\leq$, где $j\in S$. По свойству матрицы, обратной к М-матрице, замечаем, что α_{ij} неотрицательны. Таким образом, приходим к выводу, что разность $x_i(u)-x_i(v)\geq 0$, то есть $x_i(u)\geq x_i(v)$.
2) Пусть $i\in I(u)\setminus I(v)$, то есть $x_i(u)>0$, а $x_i(v)=0$. Следовательно, $x_i(u)>x_i(u)$.
3) Пусть $i\in J(u)$, т.е. $x_i(u)=0$. Покажем тогда, что $x_i(v)=0$, то есть $J(u)\subseteq J(v)$.

Рассмотрим множество $L=\{J(u)\cap I(v)\}$. Предположим, что $L\neq\varnothing$, тогда

$$A_{LL}x_L(v)+\varphi_L(v)=0, \tag{9}$$

$$A_{LL}x_L(u)+\varphi_L(u)\geq 0. \tag{10}$$

Перепишем равенство (9) в следующем виде:

$$\sum_{k\in L}\alpha_{lk}x_k(v)+\varphi_l(v)=0,\ l\in L, \tag{11}$$

а неравенство (10) в виде:

$$\sum_{k\in L}\alpha_{lk}x_k(u)+\varphi_l(u)\geq 0,\ l\in L \tag{12}$$

Так как $u\geq v$ и функция ϕ антитонна, то $\phi_l(u)\leq\phi_l(v)$. Вычтем из неравенства (12) равенство (11) и получим следующее соотношение:

$$\sum_{k\in L}\alpha_{lk}[x_k(u)-x_k(v)]+[\varphi_l(u)-\varphi_l(v)]\geq 0,\ l\in L \tag{13}$$

Напомним, что $x_k(u)=0$, $k\in L$, следовательно, это слагаемое можно не учитывать. Далее, в силу антитонности отображения ϕ, величина $[\phi_l(u)-\phi_l(v)]$ неположительная. Тогда

$$\sum_{k\in L}\alpha_{lk}x_k(v)\leq[\varphi_l(u)-\varphi_l(v)]\leq 0,\ l\in L \tag{14}$$

Перепишем (14) в следующем виде:

$$A_{LL}x_L(v)\leq 0 \tag{15}$$

Учитывая, что главная подматрица М-матрицы является М-матрицей, домножим слева обе части неравенства (15) на матрицу A_{LL}^{-1} с неотрицателлными элементами и получим следующее соотношение (с сохранением знака неравенства): $A_{LL}^{-1}A_{LL}x_L(v)=x_L(v)\leq 0$. Это неравенство противоречит предположению о том, что $x_L(v)>0$. Следовательно, если $x_i(u)=0$, то $x_i(v)=0$.

Таким образом, для $u\geq v$ выполнено $x(u)\geq x(v)$, и теорема полностью доказана.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 3. Параметрической линейной задачей о дополнительности называется следующая задача:

для произвольного набора $u=(u_1,u_2,\ldots,u_m)\in R^m$ найти точку $x\in R^n$ такую, чтобы были выполнгены следующие соотношения:

$$x\geq 0,\ Ax+Bu\geq 0,\ x^T(Ax+Bu)=0. \tag{16}$$

ТЕОРЕМА 3. Если матрица А является М-матрицей, а В-матрица с неположительными элементами, то решение задачи (16) будет монотонным по параметру.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Теорема 3 доказывается аналогично теореме 2.

Для доказательства еще одного результата необходимы следующие леммы.

ЛЕММА 1.Пусть $\{A(t)\}_{t\in[a,b]}$ - семейство непрерывных Z-матриц. Тогда $\int_a^b A(t)dt$ также будет Z-матрицей.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Действительно, $[\int_a^b A(t)dt]_{ii} \geq 0, [\int A(t)dt]_{ij} \leq 0, i\neq j$, так как для любого t выполнено

$$\alpha_{ii}(t)\geq 0,\ \alpha_{ij}(t)\leq 0 \text{ для } i\neq j.$$

Лемма доказана.

ЛЕММА 2. Если A симметричная M-матрица, а B является Z-матрицей и $\|B\|<\mu$, где μ - наименьшее собственное значение матрицы A, то (A+B) будет M-матрицей.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.Рассмотрим симметричную M-матрицу A и Z-матрицу B. Покажем, что (A+B) будет и P-матрицей, и Z-матрицей.

1) (A+B) является Z-матрицей. Действительно, $a_{ii}+b_{ii}\geq 0$, так как $a_{ii}\geq 0$ и $b_{ii}\geq 0$. Далее, $a_{ij}+b_{ij}\leq 0$, так как $a_{ij}\leq 0$ и $b_{ij}\leq 0$.

2) Рассмотрим некоторый отличный от нуля вектор u и покажем, что $u^T(A+B)u>0$. Запишем $u^T(A+B)u=u^TAu+u^TBu$. Учитывая, что $u^TAu\geq\mu\|u\|^2$, получаем: $u^T(A+B)u\geq\mu\|u\|^2+u^TBu$. Используя тот факт, что $|u^TBu|\leq\|B\|.\|u\|^2$, то есть - $\|B\|.\|u\|^2\leq uT$, $u\leq\|B\|.\|u\|^2$, тогда $u^T(A+B)u\geq\mu\|u\|^2-\|B\|.\|u\|^2=(\mu-\|B\|).\|u\|^2$. Используя условие теоремы, получаем $u^T(A+B)u>(\mu-\|B\|)\|u\|^2$. Таким образом, мы показали, что (A+B) - положительно определенная матрица, а следовательно, она является и P-матрицей. Лемма полностью доказана.

ЛЕММА 3. Если A и B симметричные M-матрицы, то и (A+B) является M-матрицей.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.Рассмотрим две симметричные M-матрицы: A и B. Покажем, что (A+B) будет и Z-матрицей, и P-матрицей, а следовательно, и M-матрицей.

1) Действительно, (A+B) является Z-матрицей, так как $(\alpha_{ii}+b_{ii})\geq 0$, в силу того что $\alpha_{ii}\geq 0$, $b_{ii}\leq 0$; а $(\alpha_{ij}+b_{ij})\leq 0$, в силу того, что $\alpha_{ij}\leq 0, b_{ij}\leq 0$.

2) Так как A и B являются симметричными P-матьрицами, то они являются положиттельно определенными [4], следовательно (A+B)- тоже положительно определенная матрица.

Таким образом, (A+B) - тоже M-матрица.

ТЕОРЕМА 4. Если в задаче (1) матрица A является симметричной M-матрицей, матрица B состоит из неположительных элементов, функция $\varphi(x,u)$ монотонна по x и антитоннаа по u, а также φ'_x является Z-матрицей и выполнено ограничение $\|\varphi'_x\|<\mu$, где μ -наименьшее собственное значение матрицы A, то решение x(u) монотонно по параметру.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Повторяя доказательство теоремы 1, получаем неравенство (6). При анализе неравенства (6) замечаем, что φ'_x является Z-матрицей и, учитывая лемму 1, получаем, что $-\phi'_{J,x}\cdot x_{J(v)}(u)\geq 0$. То есть получаем неравенство (7). И, далее, так как по условию теоремы ϕ'_x является Z-матрицей и $\|\varphi'_x\|<\mu$, то $(A_{II}+\phi'_{I,x})$ является M-матрицей (лемма 2) и, следовательно, умножив слева обе части неравенства (7) на $(A_{II}+\phi'_{I,x})^{-1}\geq 0$, получаем $x_{I(v)}(u)-x_{I(v)}(v)\geq 0$.

ТЕОРЕМА 5. Если в задаче (1) матрицы A,B являются симметричными M-матрицами, а функция $\varphi(x,u)$ монотонна по x и антитонна по u и φ'_x является Z-матрицей, то решение x(u) является монотонным по параметру.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. С использованием леммы 3 теорема 5 доказывается аналогично теореме 4.

SUMMARY

Complementarity problems of varions types are considered. Theorems concerning monotonicity of solutions to the different kinds of complementarity problems are proven. Properties of M-matrices are used in the proofs.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Isac G. Complementarity problems.- Lecture Notes.- Berlin-Heidelberg.-1992.
2. Berman A., Plemmons. Nonnegative Matrices in the mathematical sciences.- New York a.o.: Academic Press, -1979.
3. Калашников В.В. Теорема существования решения нелинейной задачи дополнительности // Оптитмизация. Новосибирск, 1989.- № 45(62).
4. Ланкастер П. Теория матриц.- М.: Наука,1982.

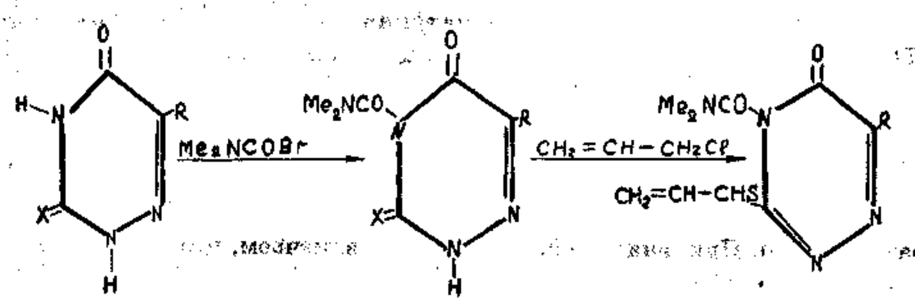
Поступила в редколлегию 4 января 1996 г.

УДК 547.873:615.291

ОТНОШЕНИЕ К НСТ-ТЕСТУ КАРБАМОИЛПРОИЗВОДНЫХ 1,2,4-ТРИАЗИНА

Миронович Л.М., доц., Цебржинский О.И., доц., Шейко А.В., асс.**
*(*Украинская медицинская стоматологическая академия, г.Полтава)*

Производные 1,2,4-триазинов находят практическое применение в качестве пестицидов и фармацевтических препаратов. Среди них найдены соединения, проявляющие противомикробную,противовирусную, антикокцидозную и другие виды активностей [1]. Для расширения спектра действия производных 1,2,4-триазина нами были синтезированы карбамоилзамещенные 1,2,4-триазинов и их 3-аллилмеркаптопроизводные и проведено изучение биологической активности по НСТ-тесту.



I-IV V-VIII IX-X

R: I,V - C_6H_5; II,III,V,VIII п-C_6H_4CL -; IV,IX - $C(CH_3)_3$; X: I,II,IV-VI, VIII -S; III,VII - O

В качестве объектов исследования были выбраны 6-фенил-1,2,4-триазин-

3(2H)-тион, 5(4H)-он (I), 6-п-хлорфенил-1,2,4-триазин-3(2H)-тион, 5(4H)-он (II), 6-п-хлорфенил-1,2,4-триазин-3(2H), 5(4H)-дион (III) и 6-трет-бутил-1,2,4-триазин-3(2H)-тион, 5(4H)-он (IV). Характеристики и свойства соединений I-IV соответствовали описанным [2].

При взаимодействии соединений I-IV с N,N-диметилкарбамоилбромидом в диметилформамиде при 25-40° С были выделены 4,5-дигидро-4-(N,N-диметилкарбамоил)-3-тиоксо(оксо)-6-R-1,2,4-триазины (V-VIII). Алкилированием соединений VI,VIII хлористым аллилом в 1 н водно-метанольном растворе NaOH при 25-30° С были выделены 4,5-дигидро-4-(N,N-диметилкарбамоил)-3-аллилмеркапто-5-оксо-6-R-1,2,4-триазины (IX,X).

Соединения V-X представляют собой кристаллические вещества с высокими температурами плавления. Нерастворимы в воде, растворимы в кислородсодержащих органических растворителях. Характеристики и свойства соединений V-VIII соответствуют описанным [3]. Строение соединений VI-X установлено по совокупности данных элементного анализа, ИК- и ПМР-спектроскопии.

В ИК-спектрах всех синтезированных соединений наблюдается интенсивная широкая полоса поглощения в интервале 2800-2880 см$^{-1}$ ($\nu_{с-н}$) и при 1710-1750 см$^{-1}$ ($\nu_{с=о}$) N,N-диметилкарбамоильного остатка, отсутствующая в соединениях I-IV. В спектрах соединений IX,X появляются полосы поглощения при 3080, 1000, 900 см$^{-1}$ (валентные и деформационные колебания связи С-Н в аллильной группе) и исчезает полоса поглощения при 1165-1185 см$^{-1}$, имеющаяся в спектрах соединений VI-VIII и относимая к валентным колебаниям связи C=S. В спектрах соединений V-VIII имеются полосы поглощения при 1610-1690 см$^{-1}$, которые для соединений IX,X сдвинуты в ближнюю область (1630-1695 см$^{-1}$), характерные для валентных колебаний карбонильных групп триазинового кольца.

В спектрах ПМР соединений V-X химические сдвиги протонов заместителей в положении 6 кольца имеют обычные значения: для фенильной группы мультиплет при 7,44-7,91 м.д.; п-хлорфенильной-мультиплет при 7,52-8,0 м.д.; трет-бутильной группы синглет при 1,28 м.д. Синглет при 2,87-2,97 м.д. относят к протонам групы $(CH_3)_2N$-карбамоильного остатка, а мультиплет при 5,8-6,2; 5,1-5,5 и 3,8-3,9 м.д. к протонам аллильной группы.

Проведено изучение биологической активности синтезированных соединений в опытах in vitro по НСТ-тесту. НСТ-тест - это цитохимический метод выявления продукции супероксиданионрадикала в процессе дыхательного взрыва [4]. Нейтрофилы имеют большое количество различных рецепторов, часть из которых через кальциевую мессенджерную систему запускает дыхательный взрыв, а часть - через аденилатциклазную мессенджерную систему ингибирует его [5].

В опытах in vitro на донорской крови использовалась концентрация препаратов в крови =10-5 М, что пропорционально дозам лекарственных веществ.

Сравнивали спонтанную активность нейтрофилов и стимулированную фторидом натрия в концентрации в 4 раза меньшей, чем концентрация (в молях) кальция в пробе [6]. Сначала пробы проинкубировали с фторидом, а затем инкубировали с препаратом. Проценты формазанположительных клеток (из 100 нейтрофилов) сравнивали согласно критерию Стьюдента (каждая серия - 6 наблюдений).

Таблица

Влияние 1,2,4-триазинов на НСТ-тест

Соединение	НСТ-тест, % клеток формазанположительных	
	без стимуляции, n=6	с NaF, n=6
V	48,0 ± 3,2 p1< 0,01	22,0 ± 2,3 p2 < 0,10
VII	54,0 ± 1,6 p1< 0,05	40,0 ± 12,0 p2 > 0,5
IX	8,0 ± 1,6 p1> 0,5	45,0 ± 2,6 p2 < 0,01
X	49,0 ± 2,6 p1< 0,01	35,0 ± 2,9 p2< 0,01
Контроль	15,0 ± 9,9	62,0 ± 3,2 P2< 0,01

p1 - *сравнение с контролем без добавки,*
p2 - *сравнение с контролем на NaF.*

Установлено (табл.), что соединения V,IX,X стимулировали развитие дыхательного взрыва нейтрофилов. Но на фоне стимулирования фторидом натрия препараты тормозили развитие стимулированного дыхательного взрыва.

Исходя из проведенных испытаний, видно, что введение в положение 6 триазинового кольца трет-бутильной группы приводит к торможению развития дыхательного взрыва без NaF и развитию его на фоне стимуляции фторидом натрия. Следует продолжить поиск в данном направлении с учетом влияния структуры 1,2,4-триазина на биологическую активность.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

ИК спектры сняты на приборе UR-10 в таблетках KBr. Спектры ПМР на спектрометре BS-467 (60 мГц) в $(СД_3)_2СО$, внутренний стандарт - ГМДС. Чистоту продуктов контролировали методом ТСХ на пластинках "Silufol UV-254" в системе хлороформ-ацетон (3:1). Характеристики и свойства соединений V,VIII описаны в [3].

4,5-Дигидро-4-(N,N-диметилкарбамоил)-3-тиоксо(оксо)-5-оксо-6-п-хлорфенил-1,2,4-триазин (V,VIII) [3].

V - выход 64%. Т.пл. 256-260° С (разл.). Найдено,%; С 46,4 Н3,59 N 18,1. $C_{12}H_{11}ClN_4O_2S$. Вычислено, %: С 46,38 Н 3,57 N 18,03.

VII - выход 72%. Т.пл. 207-208° С. Вычислено,%: С 48,91 Н 3,76 N 19,01 $C_{12}H_{11}ClN_4O_3$. Найдено,%: С 48,86 Н 3,72 N 19,11.

4,5-Дигидро-4(N,N-диметилкарбамоил)-3-аллилмеркапто-5-оксо-6-R-1,2,4-триазин (IX,X). Растворяют 0,02 моль соответствующего соединения VI, VII в 30 мл водно-метанольного (1:1) 1 н раствора NaOH. К раствору при Т 25-30° С и интенсивном перемешивании добавляют по каплям 0,02 моль хлористого аллила. Перемешивают 3-3,5 часа и оставляют на ночь. Осадок отфильтровывают, сушат на воздухе. Очистку производят перекристаллизацией из бензола.

IX выход 94%. Т.пл. 202-207° С (разл.). Найдено, %: С 53,0 Н 6,52 N 19,1. $C_{13}H_{20}N_4O_2S$. Вычислено,%: С 52,86 Н 6,48 N 18,96.

X выход 92%. Т.пл. 205-206° С. Найдено,%: С 51,4 Н 4,33 N 16,1.

$C_{15}H_{15}ClN_4O_2S$. Вычислено,%: C 51,35 H 4,31 N 15,97.

SUMMARY

Due to the action of N,N-dimethylcarbamoyl bromide on6-R-1,2,4-triasine-3(2H)-thion(on)-5(4H)-jos4,5-dihydro-4(N,N-dimethylcarbamoyl)-3-Thioxo(oxo)-5-oxo-6-R-1,2,4-triasines are synthesised. In experiments in vitro the investigated chemicals produce to HCT-Test.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Миронович Л.М., Промоненков В.К. 1,2,4-триазины / Итоги науки и техн. Сер.Органическая химия, 1990. Т.22.-С.3-267.
2. Gut.I., Prystas M., Ionas I.//Collect. Cech.Chem.Commun.1961,26, N 3, p.986-997.
3. Миронович Л.М., Промоненков В.К.// Химия гетероцикл.соед.,1989, N 7.-С.969-971.
4. Лабораторные методы исследования в клинике. Справочник//Под ред.В.В.Меньшикова.- М.: Медицина, 1987,368 с.
5. Маянский А.Н., Маянский Д.Н. Очерки о нейтрофиле и макрофаге. Новосибирск: Наука,1989, 344 с.
6. Цебржинський О.І.// Фтор.Проблеми екології, біології, медицини, гігієни. -Полтава, 1993.- С.99-101.

Поступила в редколлегию 26 октября 1995 г.