

3. Bandi B. *Metody optimizatsii. Vvodnyy kurs* [Optimization Methods. Introductory course]. Moscow, Radio i svyaz', 1988, 128 p.

4. Holland J. H. *Adaptation in Natural and Artificial Systems*. Ann Arbor, The University of Michigan Press, 1975, 96 p.

5. Goldberg D. E. *Genetic algorithms in search, optimization, and machine learning*, Reading, MA Addison-Wesley, 1989.

6. Rutkovskaya D., Pilin'skiy M., Rutkovskiy L. *Neyronnyye seti, geneticheskie algoritmy i nechetkie sistemy* (Neural networks, genetic algorithms and fuzzy systems). Moscow, Goryachaya liniya – Telekom, 2006, 452 p.

7. Zvonkov V. B. *Magisterskaya dissertatsiya "Samoorganizuyushchiesya evolyutsionnye algoritmy, iskusstvennyye neyronnyye seti i klassicheskie metody dlya intellektual'nykh sistem analiza dannykh"* (Master's thesis in the direction of "System analysis and control" "Self-organizing evolutionary algorithms, artificial neural networks and classic methods for intelligent data analysis systems"). Sib. State. Aerospace. Univ. Krasnoyarsk, 2013, 179 p.

© Звонков В. Б., Попов А. М., 2013

УДК 004.3

### СИСТЕМА ДИСПЕТЧЕРИЗАЦИИ ОПЫТНОГО И МЕЛКОСЕРИЙНОГО ПРОИЗВОДСТВА РАДИОЭЛЕКТРОННОЙ АППАРАТУРЫ\*

М. А. Казанцев

ОАО «Научно производственное предприятие «Радиосвязь»  
Российская Федерация, 660021, Красноярск, ул. Декабристов, 19. E-mail: mkaz@mail.ru

*Рассмотрено применение исполнительной системы производства на примере реализации системы диспетчеризации производства ОАО «НПП «Радиосвязь». Проанализировано применение существующих систем, решающих задачи управления производством предприятия. Выявлены требования, предъявляемые к системе диспетчеризации опытного и мелкосерийного производства современного предприятия радиоэлектронной аппаратуры. Описан опыт создания системы диспетчеризации опытного и мелкосерийного производства трехуровневой архитектуры на базе веб-технологий. Подведены итоги внедрения системы диспетчеризации в работу ОАО «НПП «Радиосвязь», перечислен ряд преимуществ, которых удалось добиться после внедрения в работу такой системы.*

*Ключевые слова: исполнительная система, диспетчеризация, MES.*

### THE SYSTEM OF THE PILOT AND SMALL-SCALE PRODUCTION SCHEDULING OF THE RADIO-ELECTRONIC EQUIPMENT

M. A. Kazantsev

JSC "Scientifically Radiosvyaz manufacturing enterprise"  
19, Dekabristov str., Krasnoyarsk, 660021, Russian Federation. E-mail: mkaz@mail.ru

*In the present paper we give the description of the production executive system on the example of realization of the production dispatcher system of JSC NPP Radiosvyaz. The usage of the existing systems which can solve problems of the production management of the enterprise is analysed. The demands made to the system of the pilot and small-scale production scheduling of the modern enterprise of the radio-electronic equipment are revealed. The experience of the creation of the system of the pilot and small-scale production scheduling of three-level architecture on the basis of web technologies is described. The introductions of the scheduling system in JSC NPP Radiosvyaz work are summed up, a number of advantages which managed to achieve after introduction in work of such systems is listed.*

*Keywords: executive system, scheduling, MES.*

Для современных машиностроительных предприятий основными являются задачи оперативного реагирования и принятия оптимального решения, что

возможно только при наличии адекватной системы управления предприятием [1].

\* Работа выполнена при поддержке федеральной целевой программы «Развитие электронной компонентной базы и радиоэлектроники» на 2008–2015 годы по государственному контракту № 11411.1006800.11.319 от 05.12.2011 г.

Чтобы обеспечить конкурентоспособность, научно-производственные предприятия должны оперативно реагировать на потребности рынка, обеспечивать изготовление продукции в сроки, установленные в контрактах, проводить модернизацию изготавливаемой продукции, разрабатывать новые изделия и максимально быстро запускать их в серийное производство. Для обеспечения данных требований автоматизированная система управления предприятием должна способствовать выпуску продукции в соответствии с производственным планом, гибко реагировать на запуск в производство опытных образцов продукции, а также обеспечивать равномерную загрузку оборудования для своевременного выпуска деталей и сборочных единиц (ДСЕ) [2]. Задачи такого плана усложняются на предприятиях радиоэлектронной промышленности при малой серии, позаказном и опытном производстве. Это связано с тем, что сложные комплексы радиоэлектронных систем имеют длительные сроки изготовления, высокий уровень вхождений ДСЕ и зачастую, на этапе запуска в производство, имеют только маршрутную технологию. Все это приводит к тому, что на этапе производства добавляется большое количество изменений конструкторской и технологической документации и, как следствие, появляется большое количество производственных приказов, которые должны быть максимально быстро доведены до исполнителей для успешного выполнения производственных заказов и исключения затрат на изготовление деталей и блоков, снятых с производства. Для успешного выполнения заказов необходима возможность проведения анализа в различных разрезах и на разных этапах производства.

Одним из ведущих российских предприятий по разработке и серийному изготовлению наземных станций спутниковой и тропосферной связи, а также навигационных систем и комплексов является открытое акционерное общество «Научно-производственное предприятие «Радиосвязь». Предприятие обеспечивает разработку и серийное изготовление базовых станций спутниковой связи для систем Министерства обороны ЕССС-2 с учетом возможности широкого использования гражданских и коммерческих каналов связи [3; 4].

Все перечисленные факторы накладывают определенные требования к оперативному планированию производства такого предприятия, которые подчас недостаточно проработаны и реализованы в существующих системах.

Применение существующих систем, решающих задачи управления производством, таких как типовые версии «Гольфстрим» и «1С: Управление производственным предприятием», в условиях малой серии, позаказном и опытном производстве не обеспечивает всех необходимых функций.

Так, для системы «Гольфстрим», построенной на базе концепции MRP II (Manufacturing Resource Planning – планирование производственных ресурсов) с элементами APS (Advanced Planning & Scheduling – усовершенствованное планирование), на сегодняшний

день только планируется дополнение модулем MES (Manufacturing Execution System – производственная исполнительная система) [5]. Система «1С: Управление производственным предприятием» относится к классу ERP и обеспечивает только укрупненное планирование без функции диспетчеризации производства.

Как следствие, для данных систем потребуется большой объем доработок и есть сложность обновления до следующих релизов данных программных комплексов, что соизмеримо с разработкой собственной системы диспетчеризации производства. Кроме того, на предприятии ранее были разработаны и успешно применяются, начиная с 2003 г., следующие системы:

- учет движения товароматериальных ценностей;
- управление закупками;
- учет деталей и сборочных единиц;
- планирование производства.

Интеграция данных модулей со сторонними системами планирования производства также накладывает дополнительные трудности. Поэтому было принято решение разработать собственную систему диспетчеризации производства.

Для разработки системы диспетчеризации производства была выбрана трехуровневая архитектура на базе веб-технологий, что обеспечивает кроссплатформенность и низкие требования к производительности оборудования на уровне клиентских устройств, относительную легкость обновления и сопровождения программного обеспечения.

При проведении обследования предприятия радиоэлектронной промышленности (на примере ОАО «НПП «Радиосвязь») и анализа схем существующих бизнес-процессов управления производством (рис. 1) были выявлены основные требования к функциям разрабатываемой системы [6]:

- диспетчеризация производства – управление потоком изготавливаемых деталей по операциям, заказам, партиям, сериям, посредством рабочих нарядов;
- управление документами – контроль содержания и прохождения документов, сопровождающих изготовление продукции, ведение плановой и отчетной цеховой документации;
- отслеживание истории продукции – визуализация информации о месте и времени выполнения работ по каждому изделию. Информация должна включать отчеты: об исполнителях, технологических маршрутах, комплектующих, материалах, партийных и серийных номерах, произведенных переделках, текущих условиях производства и т. п.;
- сбор и хранение данных – взаимодействие информационных подсистем в целях получения, накопления и передачи технологических и управляющих данных, циркулирующих в производственной среде предприятия.
- анализ производительности – предоставление подробных отчетов о реальных результатах производственных операций. Сравнение плановых и фактических показателей.

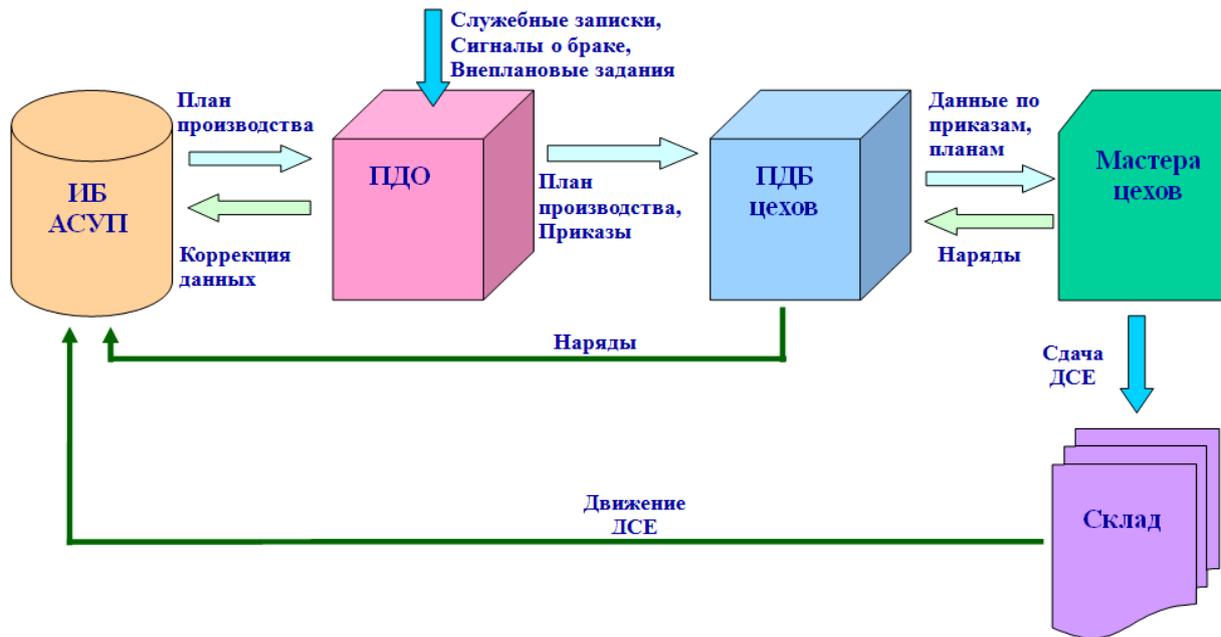


Рис. 1. Схема прохождения информации об изготавливаемых ДСЕ

Для увеличения достоверности информации, облегчения работы производственного отдела, начальников цехов и мастеров участков была разработана система диспетчеризации производства, которую, в свою очередь, можно разделить на 3 основных компонента:

- обработка и доведение планов, допланировок и приказов до участков производственных цехов;
- написание приказов;
- участковые планы.

Кроме того, данная система имеет глубокую интеграцию с системой складского учета предприятия. Например, для серийно изготавливаемых узловых станций спутниковой связи среднее количество наименований ДСЕ 7000 шт., общим количеством 100–110 тыс. шт., 2 000–3 000 наименований покупных комплектующих изделий и 2 000–3 000 наименований материалов с уровнем вхождения ДСЕ 15 и периодом изготовления 9 месяцев. Для данных изделий отработана технология изготовления и присутствует вся необходимая информация для планирования.

В качестве основы для работы системы диспетчеризации производства выступает номенклатурный план производства, полученный из системы АСУП предприятия. Содержимое плана включает перечень всех деталей и сборок планируемого изделия, цеховой маршрут изготовления каждой ДСЕ и ее трудоемкость. План формируется на заданный период времени (как правило, это квартал) с разбивкой по срокам изготовления, их может быть до четырех. Сроки выпуска каждой ДСЕ определяются в зависимости от трудоемкости ее изготовления и уровня ее вхождения в изделие.

План для последующей обработки спускается в производственно-диспетчерские бюро (ПДБ) цехов, в которых определяются участки изготовления ДСЕ и производится перенос информации о состоянии ДСЕ, находящихся в работе в данный момент, в новый уча-

стковый план. Для изделий рассмотренного типа работникам ПДО нужно только провести план, что займет не более 5 минут рабочего времени.

Мастера цехов работают с участковым планом (рис. 2), в котором присутствует вся необходимая информация для принятия решения об изготовлении конкретной ДСЕ. К такой информации относится: наличие материала, заготовки или входящих деталей на складе, срок, к которому должна быть изготовлена данная ДСЕ, количество по срокам и общая трудоемкость изготовления ДСЕ, цех-потребитель данной ДСЕ. Для срочных позиций предусмотрен специальный признак, который может быть автоматически выставлен на основании срочных приказов или в ручном режиме начальником цеха или мастером участка. Данная информация представлена в виде электронной таблицы с возможностью быстрого доступа к требуемым данным и для получения сопутствующих печатных форм, что значительно упрощает работу мастеров.

После принятия решения об изготовлении конкретной ДСЕ мастер цеха дает задание рабочему цеха. Если это первый цех по маршруту, то кроме производственного задания на основании технологической документации и плановой информации формируется сопроводительная карта (рис. 3, 4) на ДСЕ, которая сопровождает их по всему циклу изготовления. При выдаче рабочему необходимых материалов, заготовок или деталей в цеховой комплектации кладовщик на основании данного задания и штрих-кода рабочего (содержится в пропуске) производит списание со склада, и автоматически данным ДСЕ в участковом плане проставляется признак «в работе». Для сложного оборудования, такого как установка лазерного кроя, обрабатывающие центры и станки с ЧПУ, предусмотрены дополнительные статусы, позволяющие определить, на каком этапе изготовления находится ДСЕ.

ОАО «НПП «Радиосвязь»  
Автоматизируемые Системы  
Управление Производством

Здравствуйте, Бехер ЭА

Реестр планов | Рабочий План | Участки | Приказы | Штрих-наряд | Выход

1001; 1005; 1013; 1023; 1024; 1025; 996; 996А; 1025;

Сохранить | Сопр. карты | Наряды | Кол. дел=ост. | Статус | ФИО | Убрать отметки | Показать отмеченны | Отчет | Реестр | Материал

Страница 1 из 86 (4278) | Перейти к странице | Размер страницы 50

Заказ	Т	Инд	Обозначение	Цех	Уч	Кол	О1	О2	О3	О4	Ост.	Ср	ФИО	С	По	Статус	Кол. дел.	Кому	Сд.	Дата	Приказы кол./номер	ТМ уч.	
233001	Н		16*70*1500	3	02	0	2				2											2 ;539;	02
233001	Н		16*70*700	3	02	0	1				1											1 ;539;	02
233001	Н		16*700*1500	3	02	0	1				1											1 ;539;	02
203401	Б		Э4310-7482	3	02	0					0					Приостан						0 ;;258;; 683;	15
203401	Д		Э4310-7507	3	02	0	1				1		Косогоров			В раб.	1					1 ;;258;;	14-02
203401	Д		Э4310-7509	3	02	0	1				1		Косогоров			Не оконча	1			22.04.13		1 ;;258;;	14-02
203401	Д		Э4310-7510	3	02	0	2				2		Косогоров			В раб.	2					2 ;;258;;	14-02
203401	Д		Э4310-7563	3	02	0					0									2	15.04.13	2 ;;402;;	45
203401	Д		Э4310-7564	3	02	0	1				1											1 ;;402;;	14-02
203401	Д		Э4310-7568	3	02	0					0									2	16.03.13	2 ;;402;;	14-02-45
203401	Д		Э4310-7569	3	02	0					0									1	15.04.13	1 ;;402;;	02-45
203401	Д		Э4310-7570	3	02	0					0									1	15.04.13	1 ;;402;;	02-45
203401	Д		Э4310-7571	3	02	0					0					Сдано				1	15.03.13	1 ;;402;;	14-02
203401	Д		Э4310-7576	3	02	0					0					Сдано				3	22.03.13	3 ;;454;;	14-02
203401	Д		Э4310-7580	3	02	0					0					Сдано				1	20.03.13	1 ;;454;;	14-02
203401	Д		Э4310-7581	3	02	0					0					Сдано				1	20.03.13	1 ;;454;;	14-02
203401	Д		Э4310-7582	3	02	0					0					Сдано				1	20.03.13	1 ;;454;;	14-02
203401	Б		Э4310-7583	3	02	0					0					Сдано				1	20.03.13	1 ;;454;;	02
203401	Б		Э4310-7606	3	02	0					0					Сдано				1	30.03.13	1 ;;529;;	02
203401	Д		Э4310-7607	3	02	0					0					Сдано				1	03.04.13	1 ;;529;;	14-02
203401	Д		Э4310-7608	3	02	0					0					Сдано				1	03.04.13	1 ;;529;;	14-02

Рис. 2. Участковый план

Сопроводительная карта № 6342

ЭКРАН



ТМ:01-15

ТМ по пр.:

Приказы:

<b>УЭ7070430</b>	Заказ	План	Ост.	Дата	Контролер	Мастер
	200114	256	24	20.05.2013		

ЭКРАН ДЕТАЛЕЙ ИЗ ЗАГОТОВКИ: 5 НОРМА\_РАСХОДА: 0.0029

БРОНЗА ЛЕНТА ДПРНТ 0.12X250 НД БР.Б2 ГОСТ1789-70

ТМ/Проф опер.	Наименование операции	ФИО рабочего	Количество/ дата	Контроль	Мастер/ Подпись
	Описание операции по техпроцессу				
03 / 588 0010	ОТРЕЗКА НА НОЖНИЦАХ				
03 / 653 0030	СЛЕСАРНАЯ				
44 / 768 0050	ВСПОМОГАТЕЛЬНАЯ				
01 / 755 0060	ТЕРМИЧЕСКАЯ				
03 / 653 0070	СЛЕСАРНАЯ				
44 / 768 0090	ВСПОМОГАТЕЛЬНАЯ				
01 / 755 0100	ТЕРМИЧЕСКАЯ				
44 / 058 0120	ГАЛЬВАНИЧЕСКАЯ				

3-44-1-3-44-1-44-47

Рис. 3. Сопроводительная карта для деталей

 * 6 8 7 5 1 2 9 * <b>Б УЭ6875129</b>		СОПРОВОДИТЕЛЬНАЯ КАРТА № <u>6341</u>			ТМ:02	
Цех <u>УЭ6875129</u>		Наименование <b>ЯЩИК УКЛАДОЧНЫЙ</b>			Кол-во <b>0</b>	
Клен, компаунды, применяемые в процессе сборки (наименование)		План	Осталось сделать	Дата изготовления	Фамилия исполнителя	Подпись исполнителя
<b>Сборка</b>		71	20	20.05.2013		
Фамилия мастера, подпись		Обозначение входящих материалов, полуфабрикатов, комплектующих изделий		Наименование входящих материалов, комплектующих изделий	Кол. ед.	Кол. № сопровод. документа
ТМ Проф	Наименование операции	ФИО рабочего	Количество	Дата	Контроль	Мастер/Подпись
Описание операции по техпроцессу						
03/176 КОМПЛЕКТОВОЧНАЯ 0010				ЛИСТ 30152700452		2 0
15/540 РЕЦЕПТУРНАЯ 0020				ЛИСТ 32117600202		1 0
03/653 СЛЕСАРНО-СБОРОЧНАЯ 0030				УЭ4406004		2 0
44/265 МАЛЯРНАЯ 0050				УЭ6103099		1 0
				УЭ6177112		1 0
				УЭ8123060		4 0
				УЭ8953019-02		20 0
				УЭ9250332		2 0
				УЭ9250444		1 0

Рис. 4. Сопроводительная карта для сборочных единиц

01-15		Задание № _____		Бригада 15		на 68		Тип Н. Н. шт.	
По серии _____		Исполнить до _____		Цех		Принято ОТК		Таб. № рабочего	
Выдано заготовок _____		68		5		68		99915	
Отметки ОТК		Оп. уч.		Пр		Обозначение чертежа		Выполн. операци. проф. (с) пр. (по)	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*		*		*	
*		*		*					

мы ПДО получило эффективные механизмы своевременного доведения информации об изменении состава изделий до исполнителей. Как следствие, был минимизирован риск изготовления ДСЕ, выведенных из конструкторской документации. Все это в совокупности помогает обеспечить выполнение производственных планов в установленные сроки.

#### Библиографические ссылки

1. Загидуллин Р. Р. Управление машиностроительным производством с помощью систем MES, APS, ERP : монография. Старый Оскол: ТНТ, 2011. 372 с.
2. Васин С. А., Пушкин А. Н., Иноземцев А. Н. Выбор оптимального решения при проектировании межцеховых технологических маршрутов // СТИН. 2002. № 10. С. 3–6.
3. Галеев Р. Г. Станции спутниковой и тропосферной связи ФГУП «НПП «Радиосвязь» // Связь в Вооруженных силах Российской Федерации. 2010. Вып. 5. С. 136–137.
4. Галеев Р. Г., Гребенников А. В., Казанцев М. Ю. Синхронизация шкал времени комплексов радиосвязи по сигналам ГЛОНАСС/GPS // Связь в Вооруженных силах Российской Федерации. 2012. Вып. 7. С. 150–152.

5. Бонакер С. Система автоматизированного управления ГОЛЬФСТРИМ в фокусе – производство // Стремление. 2012. № 3 (10). С. 28–33.

6. Фролов Е. Б., Загидулин Р. Р. MES-системы, как они есть или эволюция систем планирования производства // Генеральный директор. 2008. № 4. С. 84–91.

#### References

1. Zagidullin R. R. *Upravlenie mashinostroitel'nyim proizvodstvom s pomoshh'ju sistem MES, APS, ERP* (Management of machine-building production by means of MES, APS, ERP systems: monograph), Stary Oskol, TNT, 2011, 372 p.
2. Vasin S. A., Pushkin A. N., Inozemthev A. N. *STIN*, 2002, № 10, p. 3–6.
3. Galejev R. G. *Svjaz' v Vooruzhennyh silah Rossijskoj Federacii*, 2010, vol. 5, p. 136–137.
4. Galejev R. G., Grebennikov A., Century, Kazantsev M. Yu. *Svjaz' v Vooruzhennyh silah Rossijskoj Federacii*. 2012, vol. 7, p. 150–152.
5. Bonaker S. *Stremlenie*. 2012. № 3(10), p. 28–33.
6. Frolov E. B., Zagidulin R. R. *General'nyj direktor*. 2008. № 4, p. 84–91.

© Казанцев М. А., 2013

УДК 544.1, 544.18

### КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССА СВЯЗЫВАНИЯ МОЛЕКУЛЯРНОГО ВОДОРОДА АКТИВНЫМ ЦЕНТРОМ [NiFe]-ГИДРОГЕНАЗЫ\*

Д. С. Калякин<sup>1</sup>, С. А. Варганов<sup>1</sup>, А. О. Лыхин<sup>1,2</sup>, А. А. Кузубов<sup>1,2</sup>, П. О. Краснов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Сибирский государственный аэрокосмический университет имени академика М. Ф. Решетнева  
Российская Федерация, 660014, Красноярск, просп. им. газ. «Красноярский рабочий», 31

<sup>2</sup>Сибирский федеральный университет  
Российская Федерация, 660041, Красноярск, просп. Свободный, 79  
E-mail: dskalyakin@mail.ru, alexandr\_lykhin@mail.ru

Объектом данного исследования является активный центр [NiFe]-гидрогеназы. Гидрогеназы вызывают повышенный интерес исследователей ввиду возможности их использования для модификации поверхности электродов с целью каталитического окисления и восстановления водорода. Исследовано связывание H<sub>2</sub> с активным центром [NiFe]-гидрогеназы с помощью методов теории функционала плотности. Определены энергии связывания H<sub>2</sub> с атомами железа и никеля. Показано пересечение между кривыми потенциальной энергии синглетного и триплетного состояний системы, состоящей из активного центра [NiFe]-гидрогеназы и связанного с ним молекулярного водорода. Результаты работы указывают на то, что механизм связывания молекулярного водорода с активным центром [NiFe]-гидрогеназы может носить неадиабатический спин-запрещенный характер. В связи с этим, для создания эффективного катализатора основанного на структурных моделях гидрогеназы, необходимо создавать бионеорганические комплексы, способные к изменению своих спиновых состояний в процессе катализа.

Ключевые слова: гидрогеназа, спин-запрещенные реакции, адиабатический и неадиабатический процессы, теория функционала плотности (DFT).

\* Исследование выполнено при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации, соглашение 14.В37.21.0916.