



Министерство науки и высшего образования РФ

ФИЦ «Красноярский научный центр СО РАН»

Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН

Институт биофизики СО РАН

Институт химии и химической технологии СО РАН

Институт вычислительного моделирования СО РАН

Институт леса им. В. Н. Сукачёва СО РАН

Научно-исследовательский институт медицинских проблем Севера

Институт космических технологий СО РАН

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

Междисциплинарной конференции
молодых учёных ФИЦ КНЦ СО РАН

(КМУ-XXVIII)

КРАСНОЯРСК | 17 АПРЕЛЯ 2025 ГОДА



Министерство науки и высшего образования РФ
ФИЦ «Красноярский научный центр СО РАН»
Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН
Институт биофизики СО РАН
Институт химии и химической технологии СО РАН
Институт вычислительного моделирования СО РАН
Институт леса им. В. Н. Сукачёва СО РАН
Научно-исследовательский институт медицинских проблем Севера
Институт космических технологий СО РАН

Тезисы докладов

*Междисциплинарной конференции
молодых учёных ФИЦ КНЦ СО РАН
(КМУ-XXVIII)*

17 апреля 2025 года, г. Красноярск

Красноярск
2025

УДК 50(082)
ББК Б.я431
М43

М43

Междисциплинарная конференция молодых учёных ФИЦ КНЦ
СО РАН (КМУ-XXVIII): тезисы докладов (Красноярск,
17 апреля 2025 г.) – Красноярск: ИФ СО РАН, 2025. – 144 с.

ISBN 978-5-6050879-7-7

© Авторы, содержание тезисов, 2025
© ФИЦ КНЦ СО РАН, оформление, 2025

ISBN 978-5-6050879-7-7

**Сборник трудов междисциплинарной конференции
молодых учёных ФИЦ КНЦ СО РАН,
17 апреля 2025 г., г. Красноярск**

В настоящий сборник включены материалы, представленные на междисциплинарную конференцию ФИЦ «Красноярский научный центр СО РАН». Конференция проводится Министерством науки и высшего образования РФ, Федеральным исследовательским центром РАН, Сибирским федеральным университетом, школами РАН. Материалы воспроизведены с авторских оригиналов, в связи с чем Оргкомитет конференции не несёт ответственности за допущенные опечатки и стилистические погрешности.

Оргкомитет

Василий Филиппович Шабанов – академик РАН, науч. руководитель ФИЦ КНЦ СО РАН;
Александр Артурович Шпедт – член-корр. РАН, директор ФИЦ КНЦ СО РАН;
Сергей Николаевич Варнаков – д.ф.-м.н., зам. директора ФИЦ КНЦ СО РАН;
Светлана Николаевна Софронова – к.ф.-м.н., зам. директора ФИЦ КНЦ СО РАН;
Владимир Викторович Шайдуров – член-корр. РАН, директор ИВМ СО РАН;
Оксана Павловна Таран – проф. РАН, д.х.н., директор ИХХТ СО РАН;
Эдуард Вильямович Каспаров – д.м.н., директор НИИ МПС;
Александр Владимирович Пименов – д.б.н., зам. директора ИЛ СО РАН;
Денис Юрьевич Рогозин – д.б.н., зам. директора ИБФ СО РАН;
Алексей Эдуардович Соколов – к.ф.-м.н., зам. директора ИФ СО РАН;
Алексей Геннадьевич Липшин – к.с.-х.н., директор КрасНИИСХ;
Анатолий Иосифович Рубайло – д.х.н., зав. отделом «КРЦКП» ФИЦ КНЦ СО РАН;
Сергей Викторович Столяр – д.ф.-м.н., зав. отделом «МНЦИЭСО» ФИЦ КНЦ СО РАН;
Анна Сергеевна Кичкайло – д.б.н., зав. отделом «ЦУЛТ» ФИЦ КНЦ СО РАН;
Иван Викторович Петерсон – к.х.н., председатель СНМ ФИЦ КНЦ СО РАН.

Программный комитет

И.В. Петерсон, к.х.н., ИХХТ СО РАН (Председатель комитета);
Ю.В. Князев, к.ф.-м.н., ИФ СО РАН (Зам. председателя комитета);
Д.С. Цикалов, к.ф.-м.н., ИФ СО РАН (Учёный секретарь комитета);
Ю.Н. Маляр, к.х.н., ИХХТ СО РАН;
М.Д. Ларионова, к.б.н., ИБФ СО РАН;
О.В. Перетягтько, к.м.н., НИИ МПС;
С.В. Жила, к.б.н., ИЛ СО РАН;
Е.П. Магденко, к.ф.-м.н., ИВМ СО РАН.

Содержание

Секция «Физика».....	11
<i>Абдуллаев А.С.</i> Управление азимутом и углом эллиптичности света с использованием фоточувствительного холестерического слоя с коническим поверхностным сцеплением	12
<i>Андрющенко Т.А.</i> Электронная спектроскопия в исследованиях тонких плёнок МАХ-фаз.....	13
<i>Буханов Е.Р.</i> Влияние частичного разупорядочения геликоидальной структуры на параметры ее области селективного отражения.....	14
<i>Гамов А.</i> Особенности поведения намагниченности топологического антиферромагнитного изолятора MnBi_2Te_4 в магнитном поле, обусловленные квантовыми эффектами.....	15
<i>Зуев А.С.</i> Геометрическая фаза света, проявляющаяся при закручивании жидкого кристалла поперечным магнитным полем в микрорезонаторе на основе металлических зеркал.....	16
<i>Иванов Д.А.</i> Влияние спин-орбитального взаимодействия на ферми-поверхность в десятиорбитальной модели ферропниктидов	17
<i>Ким П.</i> Мозаичный фотонный топологический изолятор с электроуправляемым холестерическим дефектом.....	18
<i>Ковалева Е.А.</i> Атомная и электронная структура и оптических свойства бактериохлорофилла а.....	19
<i>Ларионов Е.А.</i> Сверхпроводимость в многозонной модели сверхпроводящих соединений железа для реалистичной поверхности Ферми.....	20
<i>Мартынов А.С.</i> Фазовая диаграмма квантового $\text{SU}(3)$ ферримагнетик с одноионной анизотропией в магнитном поле	21
<i>Сапожников С.В.</i> Исследование фазовых переходов и электромеханического отклика в сегнетоэлектрических твердых растворах $(1-x)\text{Na}_{1/2}\text{Bi}_{1/2}\text{TiO}_3-x\text{BaTiO}_3$	22
<i>Смородина Е.Д.</i> Влияние размерных эффектов на магнитные свойства системы наночастиц $\epsilon\text{-Fe}_2\text{O}_3$, внедренных в матрицу SiO_2	23
<i>Тарасова А.С.</i> Кристаллическая структура и магнитные свойства оксибората $\text{NiCr}(\text{BO}_3)\text{O}$	24
<i>Хороший И.Н.</i> Прямой магнитоэлектрический эффект в монокристалле EuV_4O_7	25
<i>Царенко А.В.</i> Планарные системы на основе ансамблей наночастиц золота на $\text{Au/Si}(100)$	26

<i>Шабанов Д.А.</i> Исследование оптических резонаторов и полосно-пропускающих фильтров на структурах из чередующихся слоев кварца и серебра.....	27
<i>Шаров Д.Р.</i> Динамика квантового нелинейного осциллятора в присутствии процессов релаксации	28
<i>Шевченко В.А.</i> Выращивание монокристаллов $\text{HoFe}_{1-x}\text{Al}_x\text{O}_3$ методом оптической зонной плавки	29
Секция «Химия и химические технологии»	31
<i>Агеев Я.И.</i> Синтез и исследование биоуглей из древесины осины, полученных методом гидротермальной карбонизации	32
<i>Бережная Я.Д.</i> Сульфатирование гуммиарабика сульфаминовой кислотой в присутствии мочевины	33
<i>Голубков В.А.</i> Азосочетание с лигнином и его мономерами: перспективные полимеры и соединения из возобновляемого сырья.....	34
<i>Емельянова В.С.</i> Выделение гемицеллюлоз из соломы пшеницы, их физико-химическая характеристика и антиоксидантная активность	35
<i>Зосько Н.А.</i> Модификация TiO_2 нанотрубок $p\text{-Cu}_2\text{O}$ для повышения его фотоэлектрокаталитической активности	36
<i>Иваненко Т.Ю.</i> Исследование ассоциативных взаимодействий в растворах ионных жидкостей $[\text{BMIM}]\text{R}$ ($\text{R} = \text{BF}_4, \text{TFSI}$) комплексом методов на основе ЯМР.....	37
<i>Капаева С.Н.</i> Непрямое электрокаталитическое окисление крахмала	38
<i>Коваленко А.Ю.</i> Влияние фракционного состава порошка древесины на эффективность её окисления в ванилин.....	39
<i>Кормес Е.С.</i> Квантово-химическое моделирование аква- и аквагидроксо-комплексов церия(III), европия(III) и иттербия(III)	40
<i>Кузин Н.Д.</i> Электрохимические превращения левоулиновой кислоты в среде ацетонитрила в присутствии солей свинца.....	41
<i>Лугошкін М.А.</i> Особенности взаимодействия f- и d-металлов с гетероциклическими β -дикетонами.....	42
<i>Остапенко И.А.</i> Пинцерные ($^{\text{Ph}}\text{POCOP}^{\text{Ph}}$) комплексы Ni(II) в электрокаталитических реакциях гидрирования левоулиновой кислоты.....	43
<i>Павлов М.В.</i> Изменение химического состава шихт на основе некондиционных марганцевых руд с целью получения стандартных металлических и силикатных расплавов	44
<i>Селезнева О.С.</i> Гидрирование древесины березы на Pd , Ir , Pd-Ir катализаторах, полученных гидротермальным методом.....	45
<i>Семке Е.Н.</i> Изучение процесса деполимеризации ксилана с применением твердых кислотных катализаторов	46
<i>Середа М.В.</i> Получение и физико-химическое исследование поликатионных производных арабиногалактана	47

<i>Синьшинов П.А.</i> Исследование способов извлечения прекурсоров образования хлорорганических соединений из нефти.....	48
<i>Троцкий Ю.А.</i> Кислотный гидролиз арабиногалактана на твердых катализаторах Al-Zr-SBA-15	49
<i>Флерко М.Ю.</i> Некоторые особенности взаимодействия ампициллина и цефокситина с наночастицами серебра	50
<i>Целюк О.И.</i> Особенности техногенного преобразования лежалых хвостов намывных накопителей промышленных отходов золотоизвлекающих фабрик.....	51
<i>Шабанова О.В.</i> Электронно-микроскопическое исследование структуры инверсных опалов из диоксида титана.....	52
<i>Эпов Э.А.</i> Исследование образования водорода при прямом вскрытии слаборадиоактивных редкометальных руд Томторского месторождения.....	53
Секция «Био- и медицинские технологии»	55
<i>Андрущенко С.В.</i> Биохимическая ценность зообентоса озер Верхнеобского и Енисейского бассейновых округов	56
<i>Баранчикова Е.Е.</i> Сравнительный анализ эффективности методов обучения нейронных сетей по алгоритмам Forward-Forward и Backpropagation на задаче классификации изображений.....	57
<i>Березовская А.В.</i> Биотехнологический синтез сополимерных полигидроксиалканоатов, содержащих мономеры 3-гидроксивалерата и 4-гидроксивалерата, бактериями <i>Cupriavidus necator</i> B-10646 и их свойства.....	58
<i>Вяткина М.О.</i> Генетическая основа биолюминесценции копепод <i>Metridia longa</i>	59
<i>Горбенко А.С.</i> Разработка метода определения экспрессии гена CREB3L1 и оценка его диагностического значения у пациентов с хроническими миелопролиферативными заболеваниями.....	60
<i>Дружинин А.Г.</i> Влияние штаммов дрожжей на качественные характеристики пива.....	61
<i>Ерошенко П.А.</i> Сравнение динамических характеристик бактериальных люцифераз методами триптофановой люминесценции.....	62
<i>Зазнобина Т.В., Ефимова Л.В.</i> Влияние сезона рождения на рост и развитие тёлочек красно-пёстрой породы.....	63
<i>Зеньков А.В.</i> Биотестирование и биотрансформация оксоанионов селена светящимися бактериями	64
<i>Иванов Е.А., Терещенко В.А., Любимова Ю.Г.</i> Природные подкормки в рационе крупного рогатого скота	65
<i>Карпов В.А.</i> Сравнение состава и содержания жирных кислот в мышечной ткани карпа и сазана (<i>Cyprinus carpio</i>), выращенных в условиях аквакультуры и обитающих в естественных водоёмах	66
<i>Козулина Н.С., Бобровский А.В., Василенко А.В., Герасимова Н.С., Степаненко Н.И.</i> Сравнительная характеристика технологического качества зерна пшеницы сортов сибирской и зарубежной селекции	67

<i>Коновалова Д.А.</i> Сезонные тренды популяции ручейников <i>Apatania cymophila</i> , ассоциированных с водным мхом, на модельном участке р. Енисей	68
<i>Коновалова О.В.</i> Влияние длины пептидной цепи на биолюминесцентные свойства химерных фотопротеинов гидромедуз	69
<i>Кукушкина К.В.</i> Влияние питательной среды на спорообразование Сибирских штаммов грибов р. <i>Fusarium</i>	70
<i>Лагутинская Д.В.</i> Дисбаланс системы «перекисного окисления липидов-антиоксидантной защиты» в зависимости от носительства вариантов гена HFE (rs1800562, rs1800730 и rs1799945) у пациентов с неалкогольной жировой болезнью печени	71
<i>Литовченко А.Н.</i> Фитопатогенная активность штаммов грибов рода <i>Fusarium</i> , ассоциированных с пшеницей	72
<i>Максимова А.А., Тарханова О.А.</i> Влияние микроволнового метода обработки семян на распространение корневых гнилей Пшеницы Новосибирская 15	73
<i>Минаков И.Д.</i> Морфология пыльцы сибирских шелковников (<i>Ranunculus sect. Batrachium</i> , <i>Ranunculaceae</i>) в световом и сканирующем электронном микроскопах	74
<i>Митрофанова С.К.</i> Использование <i>Lemna minor</i> и <i>Dunaliella salina</i> для обработки урины человека в биорегенеративной системе жизнеобеспечения	75
<i>Пиппаринен С.А.</i> Оценка диагностического потенциала экзосомальных маркеров FOLR1, CD151, EpCAM, HER2 и TROP2 при раке мочевого пузыря	76
<i>Помыткин Н.С., Луговцова С.Ю.</i> Влияние БАП на ростовые показатели сорта Садон в культуре <i>in vitro</i>	77
<i>Помыткин Н.С., Пак М.Э.</i> Роль фитогормонов в соматическом эмбриогенезе лиственницы сибирской	78
<i>Посохина Е.Д.</i> Накопление гиспидина в разных питательных средах при погруженном культивировании базидиомицета <i>Inonotus obliquus</i>	79
<i>Райков А.В.</i> Влияние поверхностно-активных веществ на биолюминесценцию фотопротеина обелина и фотолюминесценцию его продукта	80
<i>Садовский И.С.</i> Иммунологические маркеры постковидного синдрома	81
<i>Садыков Р.Т.</i> Крупномасштабное картографирование олиготрофных болот на основе данных аэрофотосъёмки с использованием беспилотных летательных аппаратов (БПЛА)	82
<i>Самсонов М.К.</i> Сравнительный анализ эффективности импульсной и классической нейронных сетей в решении задач классификации изображений	83
<i>Степаненко Н.И.</i> Использование овсяной муки в производстве бисквитного полуфабриката	84
<i>Степаниденко С.О.</i> Изменчивость анатомической структуры хвои <i>Pinus Sylvestris</i> L. в окрестностях Красноярска	85

<i>Сурина Е.А., Бутковская Л.К.</i> Влияние погодных условий на фактическую и биологическую урожайность сортов яровой пшеницы в условиях Красноярской лесостепи	86
<i>Сыроежко М.Ю.</i> Дистанционные данные в оценке состояния ландшафтов криолитозоны Сибири.....	87
<i>Тарханова О.А., Максимова А.А.</i> Влияние СВЧ обработки на распространение листостебельных болезней Пшеницы Красноярская 12	88
<i>Терещенко В.А., Иванов Е.А., Любимова Ю.Г.</i> Влияние способов скормливания хвойно-минеральной добавки на биохимический статус крови и мочи телят	89
<i>Третьяков П.Д.</i> Температурные тренды и их связь с вариацией спектрального индекса NDVI в арктической зоне Сибири по данным дистанционного зондирования .	90
<i>Федосенко Д.Ф.</i> Создание среднераннего селекционного материала в условиях Красноярской лесостепи	91
<i>Шахматов И.В.</i> Связь между реактивацией бактериальных люцифераз после каталитического акта и интенсивностью их флуоресценции.....	92
<i>Шемберг А.М.</i> Особенности прохождения микроспорогенеза <i>Larix sibirica</i> Ledeb. и <i>Larix gmelinii</i> Rupr. в Сибири	93
<i>Шмурова А.А.</i> Антропогенное воздействие на залив Варча (Красноярское водохранилище) на основе анализа углистых частиц в донных отложениях	94
Секция «Математическое моделирование»	95
<i>Баженов Е. А.</i> Моделирование решёточных газов на основе клеточных автоматов.....	96
<i>Бактыбеков Б. Б.</i> Построение регулярного политопа по С-струнным группам	97
<i>Брылякова Е. В.</i> Доказательство финитарного типа унификации в суперинтуиционистских логиках методом n-характеристической модели	98
<i>Голубев Р. А.</i> Применение метода CUSUM для поиска разладок в измерениях систем мониторинга воздуха города Красноярска.....	99
<i>Ефимов Е. А.</i> Распространение волн в структурно-неоднородных упругих средах блочного строения	100
<i>Камышев Н. Л.</i> Разработка прототипа системы оповещения по данным IoT устройств	101
<i>Кулясов Н. В.</i> Анализ и сравнение данных различных климатических моделей для обработки временных рядов метеорологических факторов.....	102
<i>Лев Н. А.</i> Нейросетевые модели временных рядов для прогнозирования уровня загрязнения атмосферы в г. Красноярске.....	103
<i>Макимова А. А.</i> Сравнительный анализ моделей концентрационной поляризации при фильтрации водных растворов в ячейке с радиальным потоком	104
<i>Мирза М. А.</i> Исследование влияния выбора начального шума на генерацию изображений с помощью диффузионной вероятностной модели	105
<i>Морозов Н. В.</i> Численное интегрирование гравитационной задачи N тел с сохранением инвариантов движения	106

<i>Окунева Д. А.</i> О полуполевых проективных плоскостях, допускающих A_4	107
<i>Поляков А. А.</i> Кортёжная семантика в линейной модальной логике.....	108
<i>Порошин А. О.</i> Генерация случайных величин с помощью правила 30 элементарного клеточного автомата.....	109
<i>Резанцева А. В.</i> Критерий 3-струнности и его следствия	110
<i>Сиротинин А. А.</i> Применение генетического алгоритма для построения оптимальной беспроводной сенсорной сети на трехмерной модели здания.....	111
<i>Скок Д. С.</i> О малых 2-подгруппах автотопизмов конечных полуполевого проективных плоскостей	112
<i>Смелых К. А.</i> Разрешимость $CTLK^{REL}$	113
<i>Соколова А. А.</i> Оценка адекватности функции распределения среднемесячных температур воздуха в городе Термез	114
<i>Соколова А. А.</i> Оценка параметров функции распределения среднемесячных температур воздуха в городе Термез	115
<i>Трусов М. А.</i> Оценка адекватности теоретической и эмпирической функций распределений методами статистических испытаний	116
<i>Трусов М. А.</i> Оценка параметров теоретических функций распределений по эмпирическим данным	117
<i>Шадрина Г. В.</i> Оптическая хроматография сверхмалых частиц в наклонном оптическом потенциале	118
<i>Шебелев А. В.</i> Численное исследование выноса частиц с помощью буровых растворов, модифицированных углеродными нанотрубками.....	119
<i>Шехова А. А.</i> Подходы к анализу результатов alignment-free метода сравнения символьных последовательностей.....	120
<i>Юргенсон К. С.</i> Автомодельное решение для дальней области турбулентного слоя смешения	121
<i>Юров А. Р.</i> Обзор инструментальных средств визуализации и анализа данных объектов инфраструктуры в концепции «умного города»	122
Секция «Школы РАН»	123
<i>Акбулатова Д.Т., Михайлова К.В.</i> Оценка автотранспортной нагрузки на атмосферный воздух города Красноярск	124
<i>Анушенков П.М., Крюкова О.В.</i> Определение металл-содержащих молекул методом электронного парамагнитного резонанса в асцитной карциноме Эрлиха после криоконсервации	125
<i>Попова А.И., Кузнецова П.В., Горева Т.В., Сподобаева Т.В., Миронов К.В., Милейко А.Г., Афоничева К. В., Смольникова М.В.</i> Параметры сна и полиморфизм гена рецептора окситоцина (OXTR)	126
<i>Грицфельд П.С., Мирзакаримов Я.О.</i> Синтез наночастиц золота.....	127

<i>Деймунд Д.А., Полуян Р.Д., Дик Д.И., Ташикина А.С., Ключанцев А.О., Клейн М.А., Миронов К.В., Афоничева К.В., Смольникова М.В.</i> Полиморфизм генов углеводного и жирового обмена веществ: связь с индексом массы тела у подростков	128
<i>Аминова Д. Э., Гаспарян К. К., Данилова Д. Д., Кислова С. С., Козырева А. В., Коростелева П. С., Устюгова В. Е., Штатолкина В. А., Пятин С.А.</i> Цито- и генотоксичность меди в корневом апексе проростков пшеницы	129
<i>Звейник Е.М., Харитонов Т.А., Темерова О.А., Садыков Р.Т.</i> Воздействие нефтепродуктов на развитие растений биоиндикаторов	130
<i>Алпатова М., Андропова Е., Карпова П., Кастерин М., Михалева А., Мысин А., Чаплыгина Л., Шубин И., Сапожникова К.Ю.</i> Выделение нового штамма-продуцента бактериальных экзополисахаридов.....	131
<i>Гнездилова В.С., Кузнецова Т.В., Гребенюк М.И.</i> Получение полисахаридов из древесины тополя	132
<i>Дружинина В.В.</i> Модификация гидролизного лигнина через реакции азосочетания и восстановления азогрупп для введения ароматических аминогрупп.....	133
<i>Заболоцкая А.В., Авдей Я.В., Литвяк З.Д., Черепанова В.Е.</i> Изучение состава окисленного крахмала	134
<i>Лапушова А., Попков М., Мартынова Е., Волкова С.</i> Селективная конверсия фруктозы до фурфурола на твердом кислотном катализаторе	135
<i>Лосев З., Иванова К.</i> Влияние напряжения анодирования на морфологию и фотоэлектрокаталитическую активность нанотрубок диоксида титана	136
<i>Мащенко А.</i> Синтез наночастиц лигнина и его азопроизводного и изучение их размеров.....	137
<i>Пахомова К.А.</i> Функциональные биопленки на основе галактоглобулина ели (<i>Picea Abies</i>).....	138
<i>Рыдченко В., Задолжная А., Авулова Д., Штейнгарт М.</i> Изучение солнцезащитных кремов на соответствие заявленному SPF методом электронной спектроскопии.....	139
<i>Смирехин Л.В., Ситничук С.Р.</i> Изучение и идентификация химического состава напитка Кока-кола	140
<i>Шеяпова К., Захарова В., Коноплева Ю., Суханова Е.</i> Разработка методики получения фотонно-кристаллических структур для получения зеленого водорода	141
<i>Шульга Я., Черепанова С., Мацкова М., Бондаренко А.</i> Щелочное каталитическое окисление лигнина для получения лигнокислот – антиоксиданты из возобновляемого сырья	142
<i>Ярмоленко Н., Анциферов Г., Веселова К., Коц Е.</i> Валоризация твердого остатка восстановительного каталитического фракционирования костры льна	143

Секция «Физика»

Управление азимутом и углом эллиптичности света с использованием фоточувствительного холестерического слоя с коническим поверхностным сцеплением

Абдуллаев Абылгазы Сабыралиевич

Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН

Холестерические жидкие кристаллы (ХЖК) являются хиральными средами, которые нашли широкое применение в оптике и фотонике. Параметры устройств на основе ХЖК определяются ориентационной структурой, формирующейся в ограничивающей жидкий кристалл полости, и ее откликом на внешние стимулы. Ориентационная структура ХЖК и ее трансформация главным образом зависят от граничных условий, а также от отношения размера занимаемой полости и шага спирали d/p . В последнее десятилетие активно разрабатываются и исследуются фоточувствительные ХЖК, у которых под действием света происходит изменение шага спирали p [1]. При этом на сегодня практически не изучены фоточувствительные ХЖК при конических граничных условиях.

В представленной работе исследован оптический отклик ХЖК ячейки с планарно-коническими граничными условиями на воздействие электрического поля и фотоиндуцированное изменение шага спирали. Для формирования планарного сцепления использовалась пленка нейлон-6, нанесенная на одну подложку, на другой подложке задавались конические граничные условия с помощью политретбутилметакрилат (ПтБМА) и полиизобутилметакрилата (ПиБМА), изменение относительной доли которых позволяло варьировать полярный угол директора от 0° до 50° . В качестве ХЖК использовалась смесь нематика ЛН-396, допированного хиральной добавкой S5011 (0,45 % по весу) и фоточувствительной хиральной добавкой cChD (1,20 % по весу). В ХЖК слое с нулевым полярным углом формируется однородная и бездефектная ориентационная структура, у которой при фотоиндуцированном изменении шага спирали плавно меняется закрутка директора. При планарно-конических граничных условиях с полярным углом $42,3^\circ$ и значениях $d/p < 1$ в образце сохраняется бездефектная структура при фотоуправлении шагом спирали p . Нами показано, что в этом случае азимут поляризации света можно варьировать с помощью двух светодиодов в диапазоне от 0 до $+180^\circ$, а при приложении напряжения от 0 до 0,90 В угол эллиптичности перестраивать от -45° до $+45^\circ$ для всех длин волн в видимом диапазоне (рис.1) [2, 3].

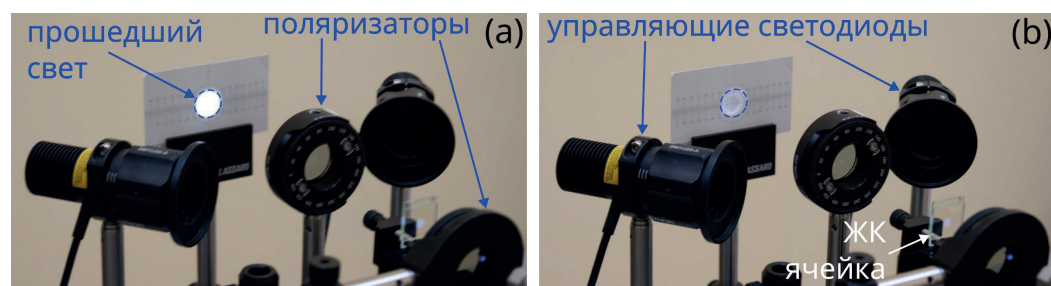


Рис.1. Фотография ХЖК устройства для управления азимутом и углом эллиптичности проходящего света, угол закрутки структуры 0° (a) и 90° (b).

Автор выражает благодарность соавторам работы: Крахалеву Михаилу Николаевичу и Зырянову Виктору Яковлевичу.

Литература:

- [1] Bisoyi H. K., Li Q., Chemical Reviews, V. 116, No. 24, P. 15089-15166 (2016).
- [2] Abdullaev A. S. et al., Optical Materials, V. 146, P. 114521 (2023).
- [3] Абдуллаев А. С., Костиков Д. А., Крахалев М. Н., Зырянов В. Я. Патент РФ № 2826877. Опубликовано 17.09.2024. Бюл. № 26.

Электронная спектроскопия в исследованиях тонких плёнок МАХ-фаз

Андрющенко Татьяна Александровна

Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, ФИЦ КНЦ СО РАН

МАХ-фазы представляют собой нанослоистые карбиды или нитриды (Х-элемент) переходных металлов (М-элемент), чередующиеся с атомными слоями А-элемента, которым преимущественно выступает элемент из XIII-XV групп периодической системы. Благодаря комбинации химических связей в слоях М-Х-М и М-А-М данные вещества сочетают свойства металлов (высокие значения тепло- и электропроводности) и керамики (окислительная и коррозионная стойкость). Для МАХ-фаз с хромом и марганцем в качестве М-элемента обнаружен дальний магнитный порядок [1], что обуславливает возможность применения таких материалов для получения управляемых магнитных гетероструктур и покрытий, в задачах спинтроники.

В рамках данной работы тонкие МАХ-плёнки $(\text{Cr}_{1-x}\text{Mn}_x)_2\text{GeC}$ ($0 \leq x \leq 0.33$) были синтезированы на подложках $\text{MgO}(111)$ при температуре около 850°C методом магнетронного соосаждения в лаборатории Магнитных МАХ Материалов ИФ СО РАН. С помощью in-situ Оже-электронной спектроскопии в составе некоторых образцов идентифицируются вторичные фазы в виде германидов хрома [2], что особо актуально в случаях, когда рентгеноструктурный анализ может быть не информативен вследствие малой толщины плёнок. Обнаруживается, что однофазные МАХ-плёнки формируются при увеличении технологической концентрации углерода, поскольку, как предполагается, он частично участвует в процессе восстановления окисленного марганца. Также на поверхности марганецсодержащих МАХ-плёнок обнаруживается присутствие графитной формы углерода. Отдельное исследование карбосиликотермического восстановления марганца в тонких плёнках с помощью электронной и масс-спектроскопии показало, что осажденный методом магнетронного напыления углерод в образцах представлен в двух фазах – в виде аморфного углерода в общей смеси с кислородом и марганцем и отдельных, более крупных частиц углерода со структурой графита. Размер частиц зависит от мощности магнетронного источника (то есть, определяется концентрацией) и влияет на активность коалесценции углерода, которая конкурирует с процессом карботермического восстановления. Гранулированный углерод в результате термического отжига диффундирует к поверхности. Данные результаты могут объяснять присутствие графитного углерода на поверхности МАХ-плёнок.

Количественная оценка состава МАХ-плёнок методами электронной спектроскопии оказывается нетривиальной задачей. В отличие от объёмных МАХ-фаз в плёнках чередование атомных слоёв происходит вдоль одного направления (нормали к поверхности), и для поверхностно-чувствительных методов анализа существенно, МХ- или А-слой является завершающим. Моделирование электронных спектров МАХ-структуры Cr_2GeC и экспериментальные данные Оже-спектроскопии указывают на то, что в МАХ-плёнках данного состава верхним слоем выступает слой германия.

Благодарности:

Исследование выполнено в рамках научной тематики Госзадания ИФ СО РАН.

Автор выражает благодарность научному руководителю Варнакову С.Н. и соавторам работы: Лященко С.А., Лукьяненко А.В., Немцев И.В., Томашевич Е.В., Соловьев Л.А., Крюков Р.Н.

Литература:

[1] Thorsteinsson E.B., et al., APL Materials, V. 11(12), 121102 (2023).

[2] Andryushchenko T.A. et al., Physics of Metals and Metallography, V. 124, PP. 1776-1782 (2023).

Влияние частичного разупорядочения геликоидальной структуры на параметры ее области селективного отражения

Буханов Евгений Романович

Институт Физики СО РАН, ФИЦ КНЦ СО РАН

Исследована устойчивость области селективного отражения геликоидальной фотонной структуры к частичному разупорядочению. Геликоидальные структуры, обладающие винтовой симметрией, демонстрируют брэгговское отражение для света с круговой поляризацией на длинах волн, близких к шагу спирали [1]. Особое внимание уделено влиянию наклона оптической оси на границах области селективного отражения.

Показано, что коротковолновая граница области отражения устойчива к наклону оптической оси в сторону оси геликоида, в то время как длинноволновая граница более чувствительна к таким изменениям. Для конической геликоидальной структуры с углом раствора конуса 30 градусов длинноволновая граница изменяется сильнее, чем для структуры с нормальным раствором конуса (90 градусов). Однако длина волны для краевой моды на коротковолновой границе остается неизменной при любых искажениях угла наклона. Разница в положении длинноволнового края между ориентацией конуса обуславливается анизотропией объектов. Анизотропия зачастую является характерным свойством кристаллических тел, но также встречается и у природных объектов [2].

На рисунке 1а представлены расчеты 120 усредненных графиков с отклонением от 0 до 100 процентов. Для данных, приведенных на рисунке 1а, была проведена оценка наклона плеча области селективного отражения для коротковолнового и длинноволнового краев (рисунок 1б) в зависимости от степени разупорядочения.

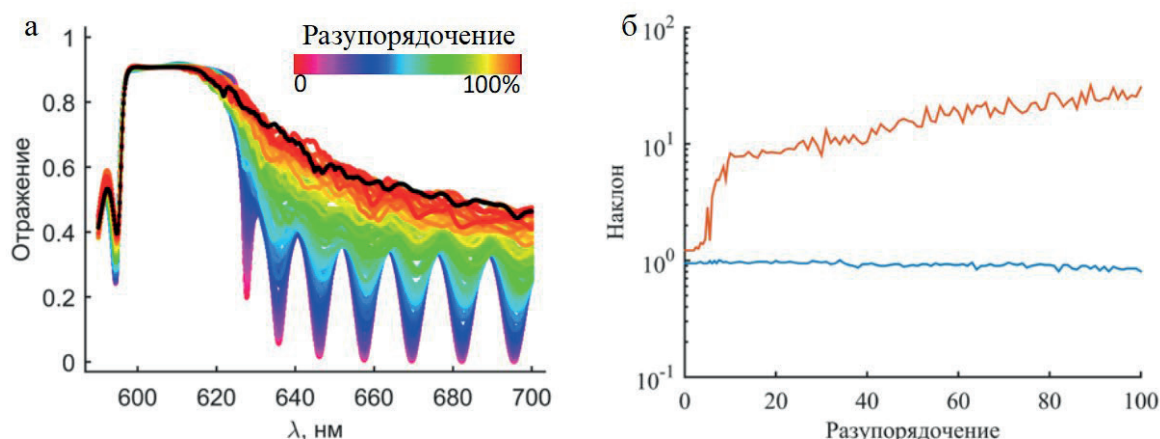


Рис. 1. (а) Усредненные спектры отражения геликоидальной структуры с варьируемым отклонением оптической оси от оси геликоида. (б) Зависимость влияния разупорядочения на наклон края зоны селективного отражения. Оранжевая линия – длинноволновый край, синяя линия – коротковолновый край.

Численное моделирование, проведенное с использованием анизотропной матрицы переноса и матрицы Берремана, подтвердило аналитические выводы, описанные в [3]. Результаты демонстрируют устойчивость коротковолновой границы области отражения при сильных искажениях геликоида, что объясняется сохранением обыкновенного показателя преломления. Это свойство важно для понимания оптических свойств частично разупорядоченных геликоидальных биофотонных структур.

Литература:

- [1] Беляков В.А., Сонин. А.С. Оптика холестерических жидких кристаллов. М.: Наука, 1982.
- [2] Буханов Е. Р., Шабанов А. В., Крахалев М. Н., Волочаев М. Н., Гуревич Ю. Л. Уч. зап. физ. ф-та Моск. ун-та. 2019. № 5.
- [3] Ветров С.Я., Тимофеев И.В., Шабанов В.Ф. УФН. 2020. Т. 190, № 1. С. 37–62.

Особенности поведения намагниченности топологического антиферромагнитного изолятора MnBi_2Te_4 в магнитном поле, обусловленные квантовыми эффектами

Гамов Александр

Институт физики им. Л.В. Киренского, ФИЦ КНЦ СО РАН

Из экспериментальных исследований топологического изолятора MnBi_2Te_4 в магнитном поле, ориентированном вдоль тригональной оси кристалла, при температурах, много меньших температуры Нееля, известно, что возрастание магнитного поля от нуля до поля спин-флоп перехода сопровождается монотонным увеличением намагниченности [1, 2] (см. рис. 1 б). Такое поведение противоречит феноменологической теории [2-4], предсказывающей нулевую намагниченность в отмеченных областях температуры и магнитного поля.

В этой связи, в работе в рамках эффективного гамильтониана, описывающего магнитную подсистему топологического изолятора MnBi_2Te_4 и учитывающего анизотропию, получен аналитический вид выражений, определяющих поле спин-флоп перехода и поле насыщения при учете ренормировки, обусловленной наличием тригональной компоненты одноионной анизотропии (ТКОА). С помощью данных выражений определены обменные параметры и параметры анизотропии, приводящие к экспериментально наблюдаемым величинам критических полей и температуры Нееля. Показано, что аномальное возрастание намагниченности материала до спин-флоп перехода, а также после него в фазе «схлопнутых» подрешеток (см. рис. 1 а) связано именно с вкладами от квантовых эффектов, обусловленных ТКОА. При этом с ростом магнитного поля в фазе «схлопнутых» подрешеток можно наблюдать подавление эффектов ТКОА.

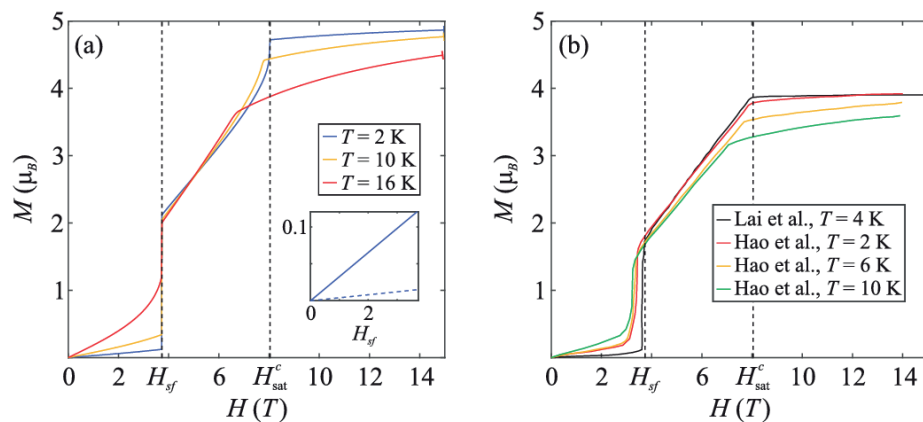


Рис. 1 (а) – Теоретическая полевая зависимость намагниченности при температурах $T = 2, 10, 16$ K и приложенном вдоль оси Oz поле H . На вставке сплошной линией показана зависимость для $T = 2$ K при учете ТКОА, штриховой линией – без учета ТКОА. (б) – Экспериментальные зависимости для MnBi_2Te_4 из работ [1,2] при температурах $T = 2, 4, 6, 10$ K.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта №23-22-10021 и Красноярского краевого фонда науки. Автор также благодарит за поддержку фонд развития теоретической физики и математики «БАЗИС» и выражает благодарность соавторам: научному руководителю Злотникову А. О. и руководителю проекта РНФ Валькову В. В.

Литература:

- [1] Y.-J. Hao et al., Phys. Rev. X, 9, 041038 (2019).
- [2] Y. Lai et al., Phys. Rev. B, 103, 184429 (2021).
- [3] B. Li et al., Phys. Rev. Lett., 124, 167204 (2020).
- [4] Y. Li et al., Phys. Rev. B, 100, 134438 (2019).

Геометрическая фаза света, проявляющаяся при закручивании жидкого кристалла поперечным магнитным полем в микрорезонаторе на основе металлических зеркал

Зуев Антон Сергеевич

Институт физики им. Л.В. Киренского, ФИЦ КНЦ СО РАН

Микрорезонаторы Фабри-Перо с включением закрученного тем или иным способом нематического жидкого кристалла (ЖК) в качестве управляемого дефектного слоя, благодаря своим оптическим свойствам являются уникальными структурами как для создания функциональных элементов в устройствах нанопотоники и оптоэлектроники, так и для наблюдения новых физических эффектов и явлений [1]. Torsion-эффект под действием магнитного поля в резонаторе с распределёнными брэгговскими зеркалами был исследован в работе [2]. В данной работе используются металлические зеркала, что позволяет увеличить рассматриваемый диапазон длин волн 420-520 нм, в котором отражают брэгговские зеркала, до диапазона 400-900 нм, в котором отражают металлические зеркала, а также стабильно работают источник и спектрометр.

Резонатор собран из двух металлических Ag-зеркал с зазором толщиной $d = 4.64$ мкм между ними. Хиральной средой служил планарно ориентированный слой нематического ЖК 5СВ. Образец помещался между полюсами магнита ФЭЛ-18 ($0 < H < 20$ кЭ) таким образом, чтобы реализовать кручение нематика (рис. 1).

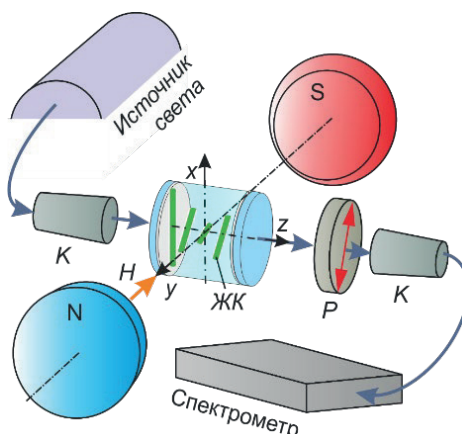


Рис. 1. Схема экспериментальной установки для исследования поляризационных и спектральных свойств резонатора типа Фабри-Перо с нематическим ЖК, хиральность которого индуцирована магнитным полем (Torsion-эффект).

Выбран диапазон длин волн, который соответствует минимуму Герберта-Шадта [3], для минимизации смещения, вызванного связью мод различной поляризации. Представлены одновременные измерения смещений резонансных длин волн в противоположные стороны для серий о- и е-мод (ordinary, extraordinary). Спектральные сдвиги вызваны проявлением геометрической фазы для поляризованного излучения [1].

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта № 24-12-00236. Автор выражает благодарность соавторам работы: Гунякову В.А., Сутормин В.С., Паршину А.М., Зырянову В.Я. и научному руководителю Тимофееву И.В. (ИФ СО РАН).

Литература:

- [1] Ветров С. Я., Тимофеев И. В., Шабанов, В. Ф., УФН, Т, 190, С. 37–62 (2020).
- [2] Gunyakov V. A., Parshin A. M., Timofeev I. V., Zyryanov V. Ya., Phys. Rev. E, V, 102, P. 042701 (2020).
- [3] Gerber P. R., Schadt M., Z. Naturforsch, V, 35a, No 10, P. 1036 (1980).

Влияние спин-орбитального взаимодействия на ферми-поверхность в десятиорбитальной модели ферропниктидов

Иванов Данил Алексеевич

Сибирский федеральный университет

В данной работе рассматривается роль спин-орбитального взаимодействия в формировании топологии поверхности Ферми в десятиорбитальной модели ферропниктидов в зоне Бриллюэна, соответствующей двум атомам железа на элементарную ячейку [Ошибка! Источник ссылки не найден.].

На рисунке 1 показана поверхность Ферми с учетом влияния вклада одноузельного (внутриионного) спин-орбитального взаимодействия с константой λ . Химпотенциал μ рассчитывался самосогласованно.

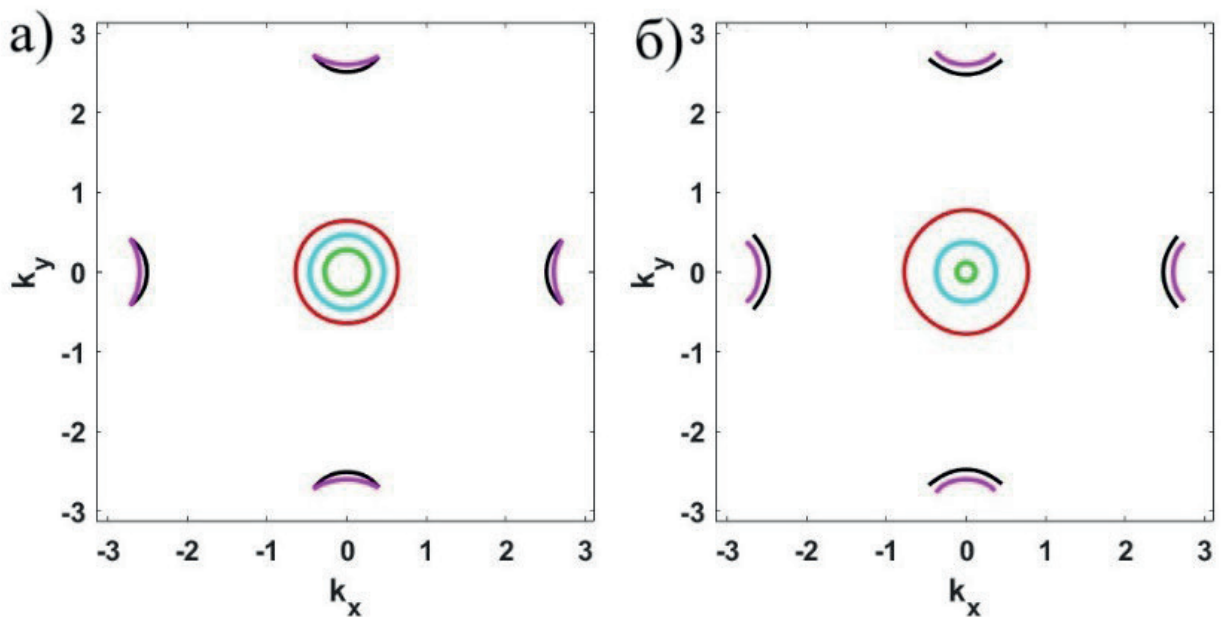


Рис. 1. Поверхность Ферми в десятиорбитальной модели в зоне Бриллюэна, соответствующей двум атомам железа на элементарную ячейку, при наличии спин-орбитального взаимодействия: а) $\lambda = 0$, $\mu = -0.0126$ эВ; б) $\lambda = 100$ мэВ, $\mu = 0.0057$ эВ.

Похожие результаты были получены в трех- и пятиорбитальной моделях ферропниктидов [2, 3]. Однако видно, что изменение топологии поверхности Ферми вблизи точки М появляется даже при наличии только внутриионного спин-орбитального взаимодействия. Это является существенным отличием от результатов для трех- и пятиорбитальной моделей, где аналогичный эффект возникает только при наличии эффективного «межионного» спин-орбитального взаимодействия.

Автор выражает благодарность соавторам работы: Коршунов М.М.

Литература:

- [1] H. Eschrig, K. Koepernik, Phys. Rev. B 80, 104503 (2009).
- [2] D.A. Ivanov, Yu.N. Togushova, M.M. Korshunov, J. Sib. Fed. Univ. Math. Phys. 16, 795 (2023).
- [3] Иванов Д.А., Коршунов М.М. Сверхпроводимость: фундаментальные и прикладные исследования, №4, С. 12-18 (2024).

Мозаичный фотонный топологический изолятор с электроуправляемым холестерическим дефектом

Ким Пётр Николаевич

Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, ФИЦ КНЦ СО РАН

Фотонный топологический изолятор – это структура, которая является проводником для излучения, распространяющегося по поверхности, но не в объёме [1]. В работе представлено исследование мозаичного фотонного топологического изолятора на основе периодического массива, составленного из идентичных стеклянных призм, соединенных друг с другом посредством иммерсионной жидкости. Благодаря полному внутреннему отражению лазерный луч распространяется вдоль границы изолятора. Траектория луча в таком изоляторе схематически показана на рис. 1а сплошной синей линией. Если траектория прерывается дефектом, то луч отклоняется на другую траекторию, изображенную в виде штриховой линии, и, обходя дефект, возвращается на прежнюю траекторию. Устойчивость траектории луча в этом случае имеет топологическую природу [2]. Устойчивость экспериментально продемонстрирована в механически изменяемом изоляторе [3]. Удобнее создавать и убирать дефект электрическим напряжением. С этой целью в массив добавляется дефект в виде ячейки, заполненной холестерическим жидким кристаллом. Вследствие изменения ориентационной структуры холестерика при воздействии электрического поля, появляется возможность управления пропусканием луча.

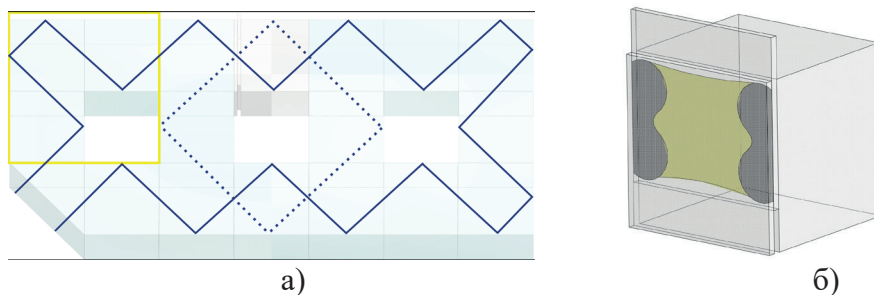


Рис. 1. (а) Модель мозаичного фотонного топологического изолятора. При помощи холестерика создается электроуправляемый отражающий/пропускающий дефект на границе изолятора. Синим обозначена траектория луча вдоль граничного ряда призм для пропускания (сплошная линия) и отражения (пунктирная линия). Желтым обозначена элементарная ячейка периодической структуры. (б) Увеличенное изображение дефекта. Холестерик обозначен желтым цветом, спейсеры ячейки обозначены темно-серым цветом.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №24-12-00236, <https://rscf.ru/project/24-12-00236/>. Автор выражает благодарность соавторам работы: М.Н. Крахалеву, Д.П. Федченко и научному руководителю И.В. Тимофееву.

Литература:

- [1] Hasan M. Z., Kane C. L. Colloquium: topological insulators //Reviews of modern physics. – 2010. – Т. 82. – №. 4. – С. 3045.
- [2] Fedchenko D. P., Kim P. N., Timofeev I. V. Photonic topological insulator based on frustrated total internal reflection in array of coupled prism resonators //Symmetry. – 2022. – Т. 14. – №. 12. – С. 2673.
- [3] Kim P.N., Fedchenko D.P., Rudakova N.V., Timofeev I.V. Tiling Photonic Topological Insulator for Laser Applications // Appl.Sci. 2023. Vol. 13, № 6. P. 4040.

Атомная и электронная структура и оптических свойства бактериохлорофилла а

Ковалева Евгения Андреевна

Отдел молекулярной электроники ФИЦ КНЦ СО РАН

В работе проводилось детальное исследование влияния учета Хартри-Фоковского обменного взаимодействия, дисперсионной коррекции и структурных параметров на энергию электронных переходов в молекуле бактериохлорофилла а (*BChl a*), являющейся важнейшим структурным элементом периферического светособирающего комплекса (*LH2*) пурпурных бактерий *Rhodoblastus acidophilus*.

Установлено [1,2], что сдвиг пика поглощения молекулярной структуры, представляющей собой кольцо из девяти молекул *BChl a*, поглощающего свет при 800 нм (*B800*) обусловлен структурными искажениями из-за взаимодействия с пептидными цепочками светособирающего комплекса, что подтверждается также нестационарными (*TD*) расчетами [3]. Тем не менее, важной задачей является детальное описание процессов поглощения света для фрагмента *B850* с характеристическим пиком поглощения на 850 нм.

Ранее было показано, что учет обменного взаимодействия крайне важен для корректного описания оптических свойств молекулы *BChl a* [1]. В рамках настоящей работы при помощи ряда гибридных обменно-корреляционных функционалов были рассчитаны энергии электронных переходов, соответствующих характеристическим пикам оптического поглощения в *Q*-области (Таблица 1), смоделированы спектры флуоресценции *BChl a* в зависимости от структурных особенностей молекулы, обусловленных взаимодействием с пептидным окружением в фрагменте *B850 LH2* комплекса *Rhodoblastus acidophilus*. Установлено, что самые близкие к экспериментальным значениям результаты дает метод *CAM-B3LYP*, что делает его перспективным для дальнейшего изучения комплекса *B850*.

Таблица 1. Положение максимума Q_y спектра поглощения молекулы бактериохлорофилла а, рассчитанное с использованием различных обменно-корреляционных функционалов, нм.

<i>B3LYP</i>	<i>BHLYP</i>	<i>LC-PBE</i>	<i>LC-BLYP</i>	<i>CAM-B3LYP</i>	ω B97	ω B97X	ω B97X-D3BJ	ω B97X-D3	ω B97X-D4rev
658	665	476	584	684	497	557	554	609	553

Благодарности:

Исследование выполнено в рамках научной тематики Госзадания ФИЦ КНЦ СО РАН.

Автор выражает благодарность руководителю проекта Коршунову М.М.

Литература:

- [1] Begunovich L.V., Kovaleva E.A., Korshunov M.M., Shabanov V.F., Journal of Photochemistry & Photobiology, A: Chemistry, V.450, PP. 115454-1-7 (2024).
- [2] Ковалева Е.А., Бегунович Л.В., Коршунов М.М., Шабанов В.Ф. Енисейская Фотоника – 2024. Всероссийская научная конференция с международным участием. Тезисы докладов, 16–20 сентября 2024, Красноярск, Т.2, С. 107-108 (2024).
- [3] Kovaleva E.A., Begunovich L.V., Korshunov M.M. arXiv:2503.03246 [physics.chem-ph].

Сверхпроводимость в многозонной модели сверхпроводящих соединений железа для реалистичной поверхности Ферми

Ларионов Егор Александрович

ФИЦ КНЦ СО РАН

Интерес к высокотемпературной сверхпроводимости в соединениях железа определяется как практическим применением исследуемых соединений, так и наличием нерешенных проблем, связанных с описанием таких систем. Одной из таких проблем является отсутствие в расчетах в рамках теории функционала плотности дополнительных контуров Ферми в дырочно-допированных соединениях железа, но присутствие их в эксперименте, см. Рис. 1. В работе представлен анализ влияния дополнительных элементов ферми-поверхности на симметрию сверхпроводящего состояния. Расчет был сделан в реалистичной десятиорбитальной модели из работы [1]. Параметры модели подбирались для получения поверхности Ферми, повторяющей экспериментально наблюдаемую из работы [2]. Восприимчивость $\chi(q, \omega)$ вычислялась как спиновый коррелятор в приближении случайных фаз (*RPA*) с учётом многоорбитального одноузельного кулоновского взаимодействия, параметры которого включали внутриорбитальное и межорбитальное хаббардовское отталкивание U и U' , хундовский обмен J и межорбитальный перескок J' [3]. Рассчитана куперовская вершина и решено уравнение на сверхпроводящую щель. Обсуждается роль дополнительных ферми-контуров в формировании восприимчивости и сверхпроводящего состояния.

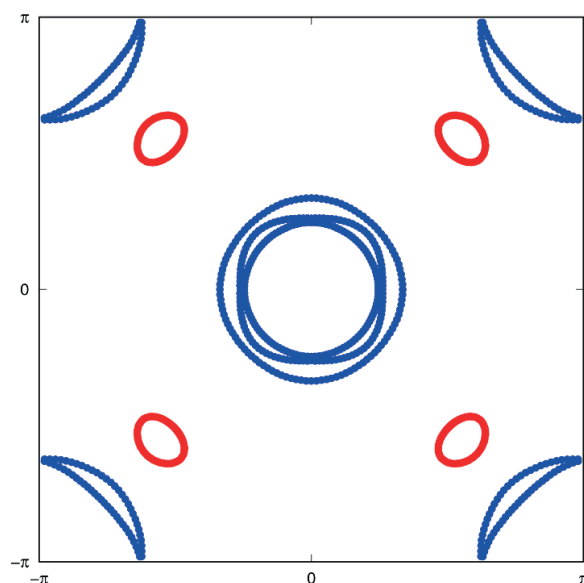


Рис. 1. Ферми-поверхность дырочно-допированного соединения железа. Красным отмечены дополнительные ферми-контур.

Автор выражает благодарность соавтору работы и научному руководителю Максиму Михайловичу Коршунову.

Литература:

- [1] Eschrig H., Koepernik K. *Physical Review B*, V. 80, PP. 6-7 (2009).
- [2] Kordyuk A. A., Zabolotnyy V. B., Evtushinsky D. V., Yaresko A. N., Büchner B., Borisenko S. V. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, V. 26, PP. 2837-2841 (2013).
- [3] М.М Коршунов *Успехи Физических Наук*, Т. 184, № 4, С. 882–888 (2014).

Фазовая диаграмма квантового $SU(3)$ ферримагнетик с одноионной анизотропией в магнитном поле

Мартынов Александр Сергеевич

Институт физики СО РАН

Квантовые эффекты и их совокупное влияние на физические свойства магнетиков с антиферромагнитным типом обменного взаимодействия представляют одно из наиболее актуальных направлений исследования в физике конденсированного состояния. Наличие в магнитных системах нескольких механизмов квантовых флуктуаций может приводить к формированию новых состояний, а также возникновению сложных зависимостей параметров порядка.

В работе изучены структура основного состояния и спектральные свойства трёхподрешёточного $SU(3)$ ферримагнетика на треугольной решётке со спинами $S=1/2, 1/2, 1$ с одноионной анизотропией типа лёгкая плоскость в магнитном поле при нулевой температуре. Для корректного учёта квадрупольных степеней свободы был произведён переход от $SU(2)$ алгебры спиновых операторов к $SU(3)$ алгебре операторов Хаббарда с дальнейшей их бозонизацией [2,3]. Для подрешёток со спином $S=1/2$ использовалось преобразование Гольштейна-Примакова.

Рассчитаны зависимости параметров порядка системы от величины одноионной анизотропии D и магнитного поля h для разных соотношений между обменными интегралами I/J , где I – обменный интеграл характеризующий интенсивность обменных антиферромагнитных взаимодействий между магнитоактивными ионами на ближайших узлах с разными значениями спинов $S=1$ и $S=1/2$, а J – обменный интеграл характеризующий интенсивность обменных антиферромагнитных взаимодействий между магнитоактивными ионами на ближайших узлах с одинаковыми значениями спинов $1/2$.

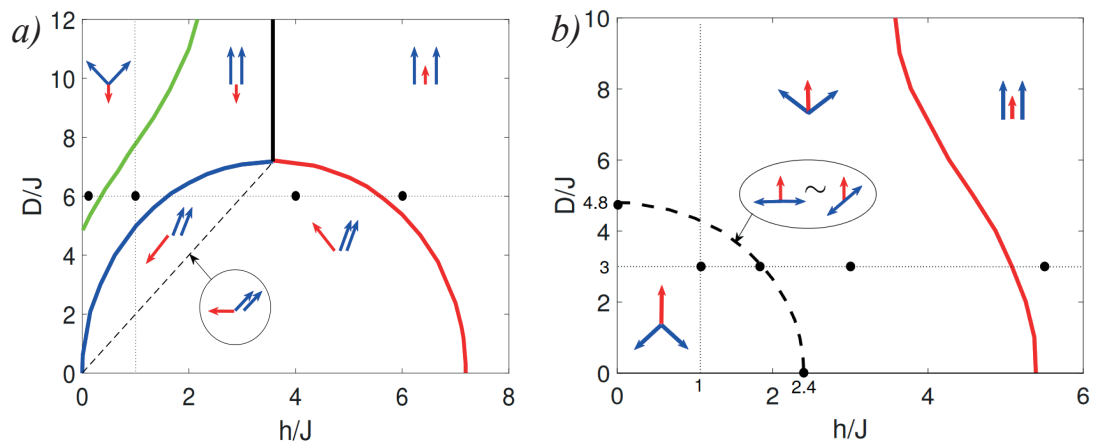


Рис. 1. Фазовая диаграмма $SU(3)$ ферримагнетика в координатах одноионной анизотропии и внешнего поля в случаях: а) при $I/J > 1$, б) при $I/J < 1$.

Построена фазовая диаграмма, в которой при $I > J$ реализуются четыре фазы: Y-фаза, uid-фаза, V-фаза и ферромагнитная фаза (см. рисунок 1а). При $I < J$ реализуются 3 фазы: перевёрнутая Y-фаза, W-фаза и ферромагнитная фаза (см. рисунок 1б). В спин-волновом приближении получен спектр коллективных спиновых возбуждений. Были определены четыре ветви спектра.

Литература:

- [1] Матвеев В. М., ЖЭТФ Т. 38, No. 4, PP. 813-818 (1973).
- [2] Онуфриева Ф. П., ЖЭТФ Т. 89, С. 2270-2281 (1985).
- [3] Вальков В.В., Письма в ЖЭТФ (1990).

Исследование фазовых переходов и электромеханического отклика в сегнетоэлектрических твердых растворах $(1-x)\text{Na}_{1/2}\text{Bi}_{1/2}\text{TiO}_3\text{-}x\text{BaTiO}_3$

Сапожников Сергей Викторович

Сибирский Федеральный Университет, Институт Инженерной Физики и Радиоэлектроники

Актуальной задачей современного физического материаловедения является поиск высокоэффективных бессвинцовых пиро-пъезо-электриков, конкурентоспособных по отношению к широко используемым в функциональных элементах микроэлектроники твердым растворам цирконата – титаната свинца. Ярким представителем таких материалов является система твердых растворов $(1-x)\text{Na}_{1/2}\text{Bi}_{1/2}\text{TiO}_3\text{-}x\text{BaTiO}_3$ (NBT-BT), которые могут оказаться достойной альтернативой нашедшим широкое применение свинецсодержащим материалам, но нуждаются в дальнейших исследованиях.

Использование в качестве инструментов химического давления, высокочувствительного индукционного dilatометра и термодинамической теории позволило выполнить детальные исследования $T-x$ фазовой диаграммы (Рис. 1) системы твердых растворов NBT-BT и определить среднеквадратичную поляризацию, в том числе в окрестностях тройных точек и морфотропной фазовой границы. Показана возможность целенаправленного варьирования температур фазовых переходов, знака и величины спонтанной деформации, величины и характера поведения поляризации.

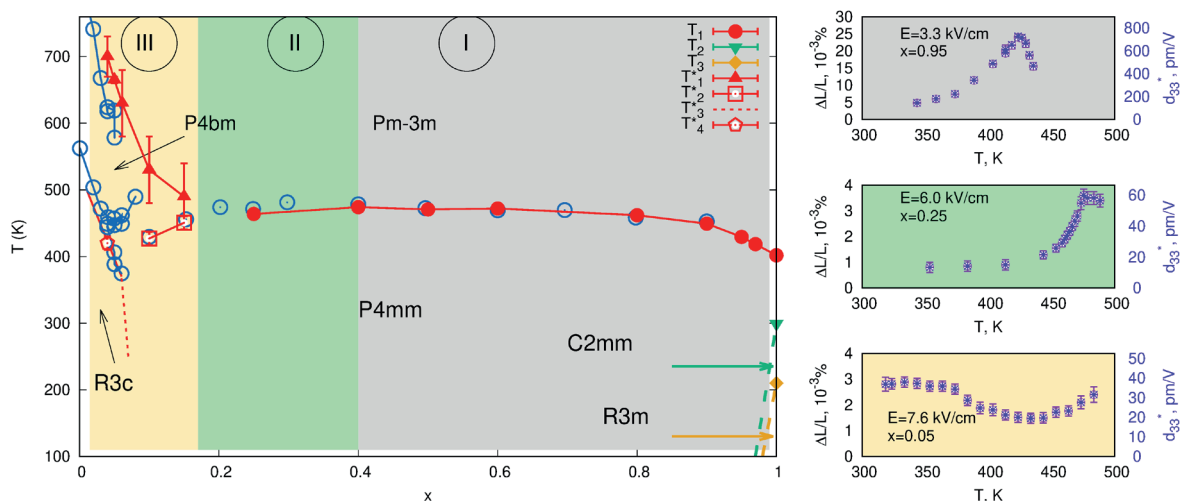


Рис. 1. Концентрационная T - x фазовая диаграмма и температурные зависимости деформации и пьезоэлектрического коэффициента d^*_{33} твердых растворов $(1-x)\text{NBT-xBT}$.

Установлено, что диапазон изменений d^*_{33} (Рис. 1) при варьировании температуры и концентраций компонентов сопоставим с величинами, характерными для других конкурентоспособных бессвинцовых пьезоэлектрических материалов. Выполненные исследования показывают возможность практического применения твердых растворов NBT-BT и необходимость продолжения их исследований, в частности, вблизи морфотропной границы ($x \sim 0.1$) между фазами $P4mm$ и $R3c$.

Благодарности:

Исследование выполнено в рамках Госзадания № FWES-2024-0002.

Автор выражает благодарность соавторам работы: Флёрову И.Н., Молокееву М.С., Михалевой Е.А. (Институт Физики им. Л.В. Киренского СО РАН) и научному руководителю Гореву М.В.

Влияние размерных эффектов на магнитные свойства системы наночастиц ϵ -Fe₂O₃, внедренных в матрицу SiO₂

Смородина Екатерина Дмитриевна
СФУ, ИИФУРЭ

Целью данного исследования было выяснение роли мелких (менее 6 нм) и крупных (более 6 нм) наночастиц ϵ -Fe₂O₃ в матрице SiO₂ в формировании статических и динамических магнитных свойств систем, а также выявление и детектирование размерных эффектов, влияющих на магнитные свойства систем. В данной работе были синтезированы и исследована серия образцов, состоящая из мелких наночастиц ϵ -Fe₂O₃, равномерно распределенных по матрице SiO₂ с содержанием оксида железа 5 – 33 мас. % [1]. С помощью рентгеновской дифрактометрии и электронной микроскопии высокого разрешения было показано, что с увеличением концентрации оксида железа средний размер частиц $\langle d \rangle$ увеличивается с 4 до 11 нм. По данным рентгеновской дифрактометрии и мёссбауэровской спектроскопии, образцы с оксидом железа с содержанием 5 – 20 мас. % является однофазным, в то время как при самой высокой концентрации Fe₂O₃ (33 мас. %) образуются фазы β -Fe₂O₃ и α -Fe₂O₃ [2,3]. С увеличением среднего размера частиц $\langle d \rangle$ наблюдается монотонное увеличение коэрцитивной силы H_c и остаточной намагниченности MR синтезированных систем при комнатной температуре, что свидетельствует об их магнитном гистерезисе. Магнитный переход, который, как известно [4], происходит в оксиде ϵ -Fe₂O₃, проявляется во всех исследованных образцах в виде резкого изменения значений H_c и MR при 150 – 75 K [5]. Было установлено, что размерные эффекты, возникающие в наночастицах ϵ -Fe₂O₃, оказывают серьезное влияние на макроскопические магнитные свойства высокодисперсных систем на их основе.

Благодарности:

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда и Красноярского краевого фонда поддержки науки, проект № 24-12-20011.

Литература:

- [1] S.S. Yakushkin, Ceramics International 44 №14, 17852 (2018).
- [2] J. Tucek, Chemistry of Materials 22 №24, 6483 (2010).
- [3] S.S. Yakushkin, Journal of Superconductivity and Novel Magnetism 31, 1209 (2018).
- [4] M.Gich, J. Magn. Magn Mater. 527, 167730 (2021).
- [5] D.A. Balaev, J. Appl. Phys. 117, 063908 (2015).

Кристаллическая структура и магнитные свойства оксибората $\text{NiCr}(\text{BO}_3)\text{O}$

Тарасова Анастасия Сергеевна

Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук - обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН, 660036, Красноярск, Россия

Методом спонтанной кристаллизации из раствора-расплава впервые выращены монокристаллы оксибората $\text{NiCr}(\text{BO}_3)\text{O}$, которые представляли собой прозрачные призмы зеленого цвета, сильно вытянутые вдоль одного из направлений (рис.1). Атомное отношение $\text{Ni}:\text{Cr} = 0.92:1.00$, полученное из измерений рентгено-флуоресцентного анализа (M4 TORNADO X-ray spectrometer, Bruker), подтверждает стехиометрию образца.

Исследование кристаллической структуры выполнено при температурах 100 и 300 К с использованием монокристалльного дифрактометра BRUKER X8 (MoK_α -излучение, графитовый монохроматор, CCD-детектор ApexII). Соединение обладает ромбической симметрией, пространственная группа $Pnma$ (№62), параметры решетки при $T = 300$ К $a = 9.0908$ Å, $b = 3.0507(4)$ Å, $c = 9.3438(13)$ Å. При охлаждении фазовых переходов не обнаружено. Атомы Ni и Cr распределены по двум кристаллографически неэквивалентным октаэдрическим позициям M1 (4c) и M2 (4c). Проведены измерения намагниченности в поле $H = 1$ кЭ в интервале $T = 4.2 - 300$ К (PPMS, Quantum Design), типичные размеры монокристалла $1.0 \times 0.1 \times 0.1 \text{ мм}^3$. Дивергенция кривых намагниченности, измеренных в режимах FC и ZFC, может указывать на формирование состояния спинового стекла при низких температурах (рис. 1). FC и ZFC соответствуют режиму охлаждения во внешнем магнитном поле и в отсутствии поля, соответственно. Магнитокристаллическая анизотропия проявляется в увеличенном магнитном моменте вдоль c -оси. Впервые определены параметры магнитной подсистемы и установлена температура магнитного перехода ~ 46 К, которая является рекордно высокой среди известных изоструктурных магнетиков.

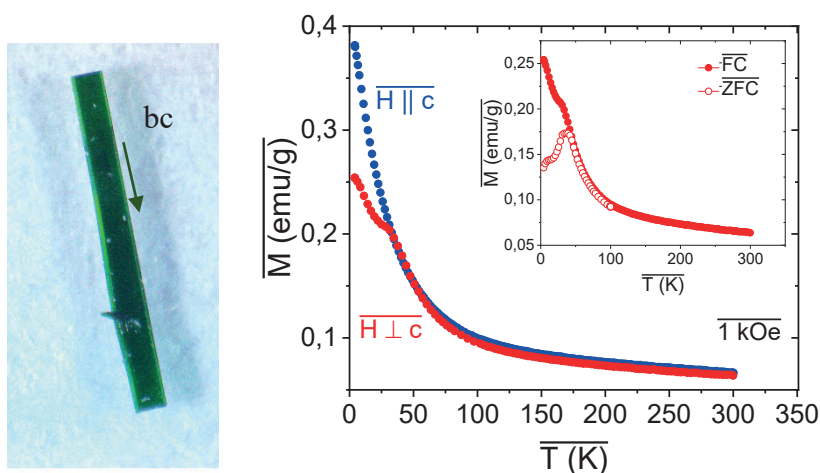


Рис. 1 – Фото монокристалла $\text{NiCr}(\text{BO}_3)\text{O}$ (слева) и температурные зависимости намагниченности $\text{NiCr}(\text{BO}_3)\text{O}$ (справа), измеренные в двух направлениях $H \perp c$, $H \parallel c$. Вставка: FC и ZFC намагниченности для $H \parallel c$, ($H = 1$ кЭ).

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда и Красноярского краевого фонда науки в рамках проекта 24-12-20012. Автор выражает благодарность соавторам работы: Ю.С. Гохфельд, С.А. Громилову, Д.А. Великанову, О.А. Кондратьеву, Е.В.Еремину, А.О. Беляевой и научному руководителю Н.В. Казак.

Прямой магнитоэлектрический эффект в монокристалле EuV_4O_7

Хороший Иван Николаевич

Институт физики СО РАН

Работа посвящена экспериментальному исследованию магнитных и магнитоэлектрических (МЭ) свойств соединения EuV_4O_7 . Проведены измерения намагниченности $M(H)$ для трех кристаллографических направлений. Экспериментальные кривые аппроксимированы функцией Бриллюэна, получены значения g -фактора и парамагнитной температуры Кюри для трех кристаллографических направлений.

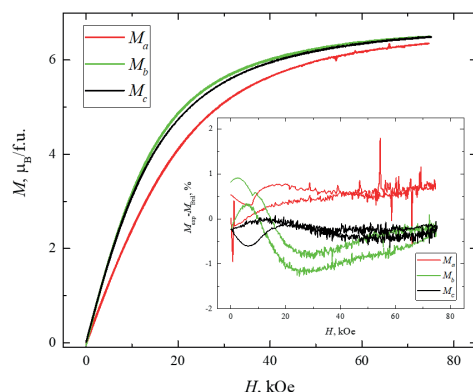


Рис. 1 – Полевые зависимости намагниченности M соединения EuV_4O_7 при $T = 4.2$ K.

Впервые проведены измерения прямого магнитоэлектрического эффекта. Анализ показал, что возможной причиной МЭ-эффекта в соединении EuV_4O_7 является магнитострикция, обусловленная диполь-дипольным взаимодействием. Сделана попытка объяснения разницы величин магнитоэлектрической поляризации в конфигурациях $\Delta P_c(H_b)$ и $\Delta P_c(H_c)$ на основании разницы в энергии диполь-дипольного взаимодействия при соответствующих направлениях магнитного поля. Посчитан дипольный момент и поляризация элементарной ячейки.

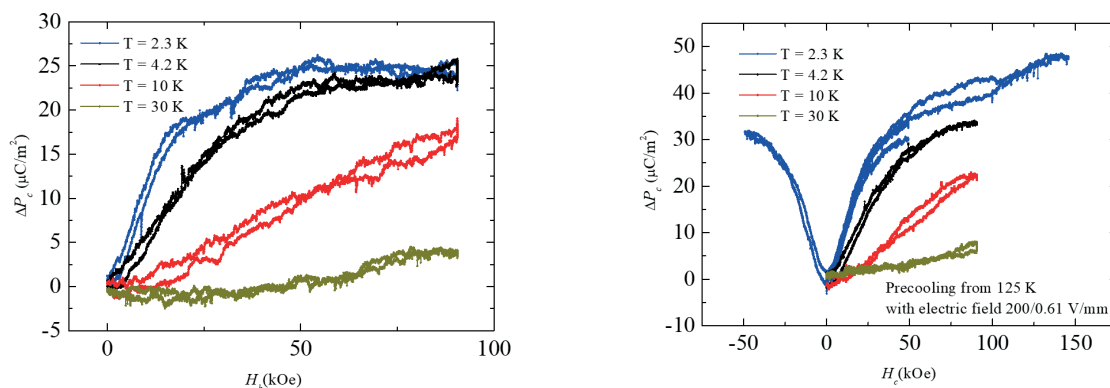


Рис. 2 – Зависимость изменения поляризации ΔP_c в зависимости от приложенного магнитного поля H_b (a) и H_c (b) при температурах $T = 2.3, 4.2, 10, 30$ K.

Автор выражает благодарность научному руководителю Фрейдману А.Л.

Литература:

[1] Шинкоренко А. С., Павловский М. С., Зиненко В. И. Расчет электронной структуры, динамики решетки, оптических и магнитных свойств тетрабората европия EuV_4O_7 // Физика твердого тела. – 2016. – Т. 58. – №. 11. – С. 2218-2223.

Планарные системы на основе ансамблей наночастиц золота на Au/Si (100)

Царенко Андрей Васильевич

СФУ, Институт инженерной физики и радиоэлектроники

В работе представлено получение планарных систем на основе самоорганизованных 2-D массивов наночастиц (НЧ) золота. В таких системах могут наблюдаться локализованные поверхностные плазмоны, которые широко используют в различных областях [1]. Наличие канала проводимости между металлическими наночастицами приводит к появлению плазмонов с переносом заряда (ППЗ), в последнее время ППЗ активно обсуждаются [1].

С помощью химического синтеза [2] были получены системы, состоящие из одиночных наночастиц в воде. По данным ПЭМ диаметр НЧ Au составляет 22 - 28 нм. Формирование двумерных ансамблей Au НЧ происходило на поверхности раздела двух сред (воздух/вода) [3]. Для образца #1 размер Au НЧ (рис. 1 а) составил $d = 21,4 \pm 0,2$ нм, а для #2 $d = 28,1 \pm 0,5$ нм (рис. 1 б). Методы получения подложек для образцов отличались (#1 – магнетронное распыление, #2 – термическое испарение). Образцы исследовались методами АСМ и СЭМ (рис. 1 а, б). Оптические спектры отражения для образцов #1 (сплошная линия) и #2 (пунктир) в диапазоне длин волн 450 - 1100 нм представлены на рис. 1 с.

Из данных АСМ было найдено влияние морфологии подложки на формирование монослоя НЧ Au. На рис. 1 с резкий минимум в ИК диапазоне соответствует наибольшему удельному количеству НЧ Au, далее с уменьшением количества НЧ Au данный минимум пропадает. Смещение минимума в образцах скорее всего связано с изменением расстояния между ансамблями НЧ Au. Оптический спектр (рис. 1 с) соответствует исходной золотой плёнке в случае, когда количество НЧ Au на поверхности меньше 5%. Таким образом, на спектре отражения (рис. 1 с) можно увидеть, как коррелирует положение минимума в ИК диапазоне с значением удельного количества и расстоянием между ансамблями НЧ Au.

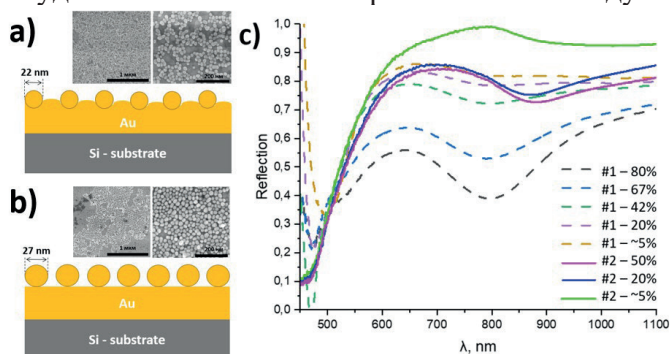


Рис. 1. Схема для образцов #1 и #2 и СЭМ изображения (масштаб 1 мкм и 200 нм) их поверхностей на вставках (а и б), оптические спектры отражения для образцов #1 (пунктир) и #2 (сплошные) в легенде подписана значение относительной общей площади $S_{отн}$ занятой НЧ Au (е).

Благодарности:

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда, соглашение № 23-12-2007, Правительства Красноярского края и Красноярского краевого фонда поддержки научной и научно-исследовательской деятельности, соглашение № 256.

Автор выражает благодарность соавторам работы: научному руководителю А.В. Лукьяненко.

Литература:

- [1] Fedorov A. S. et al. The Journal of Chemical Physics, T. 160, №. 8 (2024).
- [2] Lukyanenko A. V. et al. Journal of Siberian Federal University. Mathematics & Physics. T. 17. – №. 6. – С. 754-760 (2024).
- [3] Guo Q. et al. Langmuir. T. 32, №. 18, С. 4530-4537 (2016).

Исследование оптических резонаторов и полосно-пропускающих фильтров на структурах из чередующихся слоев кварца и серебра

Шабанов Дмитрий Александрович

Институт физики им. Л.В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН

Были исследованы характеристики планарных полосно-пропускающих фильтров, в которых полуволновыми резонаторами выступают от трёх до шести кварцевых слоя, а слои из серебра, которые их разделяют, служат зеркалами (Рис. 1, б) [1-2]. Конструкции фильтров были синтезированы подбором толщин слоёв с использованием электродинамического анализа структуры.

Были реализованы фильтры для трёх различных полос в оптическом диапазоне путём послойного напыления (Рис. 1, а). Сравнение характеристик одномерных моделей фильтров и опытных образцов показаны слева на Рис. 1.

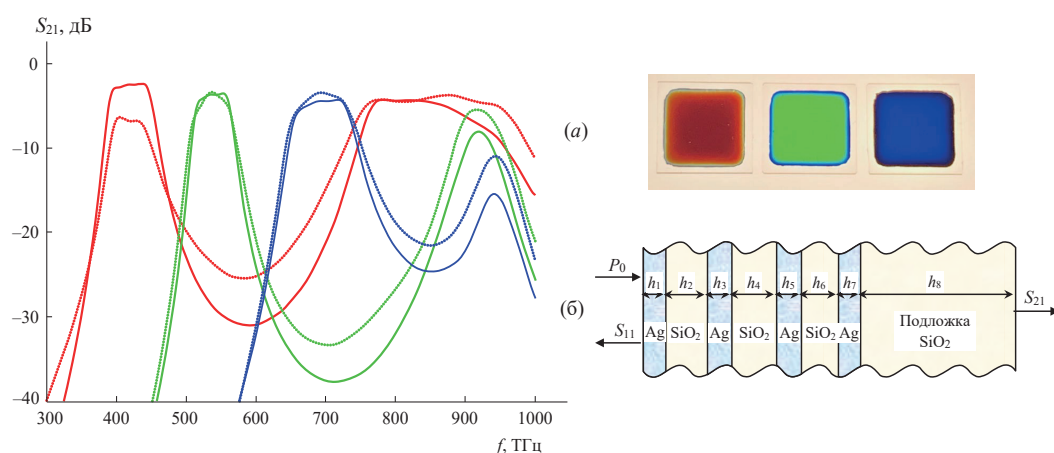


Рис. 1. АЧХ опытных образцов фильтров третьего порядка (точки) и АЧХ их одномерных моделей, настроенных на полосы пропускания опытных образцов по уровню -3 дБ от уровня минимальных потерь (линии). На вставках (а) – фотографии опытных образцов, (б) – конструкция фильтра третьего порядка.

Хорошее согласие электродинамического анализа слоистых структур позволило провести теоретическое изучение фильтров 3-6 порядка с относительной полосой пропускания от 2 до 20%. Высокие характеристики разработанных фильтров, в частности, отсутствие паразитных полос пропускания и значительно большая величина затухания в полосах заграждения, а также в несколько раз меньшее количество слоёв по сравнению с традиционными оптическими фильтрами того же порядка, показывают перспективность их использования в инфракрасном и видимом диапазонах частот.

Благодарности:

Работа выполнена в рамках научной тематики Госзадания ИФ СО РАН. При проведении работ использовано оборудование Учебного центра коллективного прототипирования пассивной электроники антенно-фидерного тракта ФИЦ КНЦ СО РАН.

Литература:

- [1] Беляев Б. А. и др. Оптические полосно-пропускающие фильтры третьего порядка на структурах из чередующихся слоев кварца и серебра. Доклады Российской академии наук. Физика, технические науки, Т. 516, № 1, С. 73-80
- [2] Беляев Б. А., Тюрнев В. В., Шабанов Д. А. Исследование оптических резонаторов и полосно-пропускающих фильтров на структурах из чередующихся слоев кварца и серебра. Известия вузов. Физика. Оптика и спектроскопия, Т. 68, № 1, С. 76-89.

Динамика квантового нелинейного осциллятора в присутствии процессов релаксации

Шаров Дмитрий Романович

Сибирский федеральный университет

Исследование динамики квантового нелинейного осциллятора играет важную роль в понимании процессов, происходящих в мезоскопических и наноструктурах. В данной работе рассматривается динамика осциллятора в присутствии процессов релаксации и внешней накачки. Для численного моделирования применяется метод Рунге—Кутты 4-го порядка.

В качестве основного инструмента анализа исследуется динамика населенностей уровней квантового осциллятора, а также используется подход функции Хусими, которая позволяет связать классическое и квантовое описания. Представлены графики населённости уровней в зависимости от времени при различных значениях коэффициента релаксации γ . Такой подход позволяет изучить влияние диссипации на эволюцию системы и выявить особенности поведения осциллятора в различных режимах.

$$t = 0.1696, \text{index} = 5.00, \hbar = 0.2500, \epsilon = 0.0000, \gamma = 0.0000$$

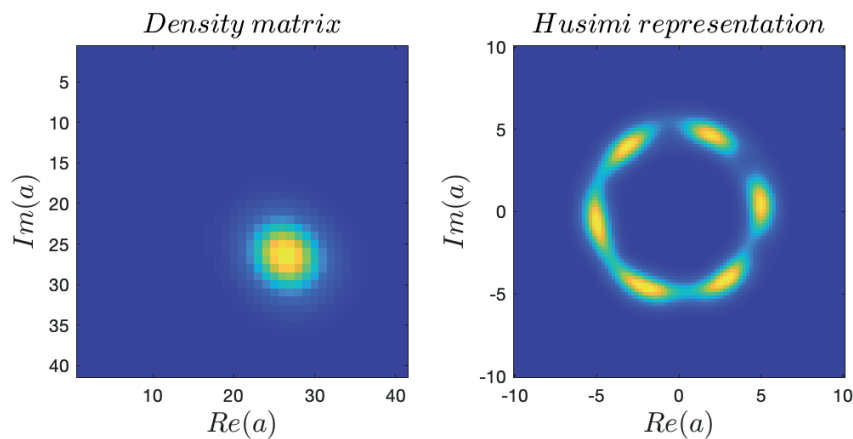


Рис. 1. Справа представлена матрица плотности нелинейного осциллятора в базисе полиномов Эрмита, что позволяет наглядно проанализировать квантовое состояние системы и его эволюцию. Слева изображена функция Хусими, которая даёт возможность исследовать распределение вероятности в фазовом пространстве. Данное представление позволяет выделить области локализации квантового состояния и проанализировать влияние диссипации на его когерентные свойства.

Полученные результаты уточняют механизмы динамики квантовых осцилляторов с учётом релаксационных процессов, что может найти применение при анализе когерентных эффектов в наноструктурах и квантовых вычислениях.

Благодарности:

Автор выражает благодарность научному руководителю Коловскому А.Р. за ценные обсуждения и помощь в подготовке работы.

Выращивание монокристаллов $\text{HoFe}_{1-x}\text{Al}_x\text{O}_3$ методом оптической зонной плавки

Шевченко Виктория Александровна

Институт физики имени Л. В. Киренского СО РАН

Целью работы было выращивание монокристаллов $\text{HoFe}_{1-x}\text{Al}_x\text{O}_3$ методом оптической зонной плавки, а также определение предела растворимости алюминия в данном изовалентном замещении. Рост монокристаллов осуществлялся в печи оптической зонной плавки FZ-T-4000 (Crystal System Corp., Japan). Рост осуществлялся при нормальном давлении, в качестве газовой среды выступал воздух, относительная скорость вращения стержней составляла 30 об/мин, скорость роста 3 мм/ч.

В результате проделанной работы были выращены монокристаллы вышеуказанных составов с размерами: диаметр стержня - 5 мм, длина стержня – 4 см. Качество полученных монокристаллов проверялось методом Лауэ.

Был установлен предел растворимости при вышеуказанных параметрах роста, который составил 25%. Кроме этого на выращенных образцах были проведены магнитные измерения, которые показали изменения температуры спин-ориентационного перехода по мере увеличения концентрации алюминия в кристалле, как проиллюстрировано на рисунке 1.

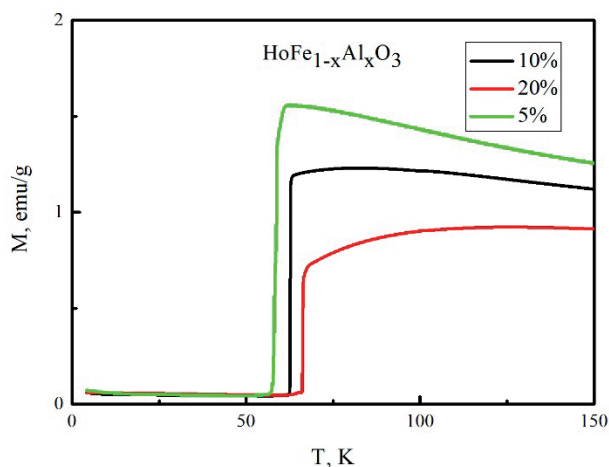


Рис.1 Температурная зависимость намагниченности $M(T)$ в серии монокристаллов, измеренных вдоль направления b . Величина внешнего магнитного поля $H=100$ Э.

В ходе дальнейшей работы планируется всестороннее исследование магнитных свойств выращенных образцов.

Секция «Химия и химические технологии»

Синтез и исследование биоуглей из древесины осины, полученных методом гидротермальной карбонизации

Агеев Ярослав Иннокентьевич

Институт химии и химической технологии СО РАН

В последнее время всё больше возрастает интерес к биотехнологиям и экономике замкнутого цикла. Учитывая это, лигноцеллюлозная биомасса, в том числе древесина и отходы её переработки, рассматривается как сырьё для получения ценных продуктов [1]. К настоящему моменту было разработано множество различных методов переработки биомассы в продукты с добавленной стоимостью - биоугли. Среди них особое внимание привлекает метод гидротермальной карбонизации (HTC). Преимуществами гидротермальной карбонизации являются высокая конверсия, умеренные температуры обработки (180-250°C) и возможность переработки влажного сырья. Типичный процесс HTC проводится в субкритической воде, которая является нетоксичной и недорогой средой [2].

В данной работе впервые проведено исследование ряда гидроуглей (НС), которые были получены из древесины осины при 180-240°C в течение 8 ч. Выходы гидроуглей, полученных при 180 °C, 210 °C, 230 °C и 240°C (НС-180, НС-210, НС-230 и НС-240) составили 69,1%, 56,4%, 45,6% и 46,5% соответственно.

Строение гидроуглей исследовано с помощью РФА, ИКС, химического и элементного анализов (табл. 1). Было обнаружено, что по мере повышения температуры обработки биомассы ускоряется гидролиз гемицеллюлоз и целлюлоз, вплоть до полного их удаления, с последующим взаимодействием образовавшихся простых соединений с получением лигниноподобных структур. ИК спектр показал увеличение интенсивности карбонильной группы. Был проведён термический анализ полученных образцов, исследована их удельная поверхность, и изучены морфологические особенности поверхности с помощью СЭМ.

Таблица 1. Химический состав образцов.

Образец	Лигнин, %	Целлюлоза, %	ЛГПС, %
Древесина осины	21,6	47,2	18,6
НС-180	39	53,6	1,3
НС-210	60	33,1	0
НС-230	93	0,3	0
НС-240	92	0	0

Состав продуктов распада в жидкой фракции был проанализирован с использованием ГХ-МС и ВЭЖХ.

Благодарности:

Исследование выполнено за счет средств бюджета ИХХТ СО РАН, ФИЦ «Красноярский научный центр Сиб. отделения Российской академии наук» в рамках гос. задания ИХХТ СО РАН проект FWES-2021-0017 с использованием оборудования Красноярского регионального центра коллективного пользования ФИЦ КНЦ СО РАН.

Автор выражает благодарность научному руководителю д.х.н., проф. Кузнецову Борису Николаевичу.

Литература:

- [1] Sun D., Lv Z.W., Rao J., Tian R., Sun S.N., Peng F., Carbohydrate polymers, V. 281, PP. 119050 (2022).
- [2] Yuan X., Dissanavake P.D., Gao B., Liu W.J., Lee K.B., Ok Y.S., Journal of Environmental Management., V. 296, PP. 113-128 (2021).

Сульфатирование гуммиарабика сульфаминовой кислотой в присутствии мочевины

Бережная Ярослава Дмитриевна

Институт химии и химической технологии СО РАН

Гуммиарабик (GA) – высушенный экссудат из стеблей и ветвей акации (*Acacia Senegal* или *Acacia Seyal*). Он имеет сильно разветвленную структуру и представляет собой сложную смесь макромолекул разного размера и состава. Физико-химические модификации гуммиарабика изучены мало.

Для большинства полисахаридов известны различные модификации, в частности сульфатирование. Помимо функциональных свойств, сульфатированные полисахариды проявляют высокую биологическую активность. Перспективным сульфатирующим агентом, является сульфаминовая кислота. По свойствам в реакциях сульфатирования и сульфирования сульфаминовая кислота близка к комплексам SO_3 -третичный амин [1].

Были изучены синтез и физико-химические характеристики сульфатов гуммиарабика. Сульфатирование гуммиарабика проводили сульфаминовой кислотой в присутствии мочевины с варьируемыми соотношениями сульфатирующего комплекса. Оценено влияние продолжительности процесса и температуры на содержание серы в сульфатах гуммиарабика (таблица 1).

Таблица 1. Содержание серы в продуктах сульфатирования гуммиарабика сульфаминовой кислотой в среде 1,4-диоксана.

№	Температура °C	Время, ч	GA/SC соотношение, г/моль	Содержание S, %
1	70	2,5	1:30	2,7
2	80	1	1:14	1,8
3	80	2	1:14	6,9
4	80	3	1:14	7,5
5	80	3	1:30	8,8
6	80	4	1:30	10,1
7	85	2	1:14	9,7
8	85	2,5	1:14	11,1
9	85	3	1:14	11,5
10	85	3	1:20	12,8
11	90	2	1:20	12,9
12	90	2,5	1:20	14,8
13	90	3	1:20	15,3
14	95	2,5	1:10	5,3
15	95	2,5	1:14	12,4

Степень сульфатирования гуммиарабика увеличивается как с ростом температуры процесса, так и с увеличением его продолжительности. Уменьшение соотношения комплекс GA/SC до 1:10 (г/ммоль) приводит к резкому снижению содержания серы даже при высоких температурах и продолжительности процесса. Высокое содержание серы в гуммиарабике достигается при проведении процесса сульфатирования в течение 2,0-3,0 часов при температуре 85-95 °C при соотношении GA/SC не менее 1:14 (г/ммоль).

Благодарности:

Данное исследование выполнено в рамках государственного задания №.0287-2021-0017 для Института химии и химической технологии Сибирского отделения РАН, на оборудовании Красноярского краевого центра коллективного пользования Красноярского научного центра Сибирского отделения РАН.

Литература:

[1] Caputo H. E., Straub J. E., Grinstaff M. W. Chemical Society Reviews. V.48, №.8. PP. 2338-2365 (2019).

Азосочетание с лигнином и его мономерами: перспективные полимеры и соединения из возобновляемого сырья

Голубков Виктор Александрович

Институт химии и химической технологии СО РАН

Лигноцеллюлозная биомасса – перспективное сырье для создания устойчивой экономики. Превращение полисахаридов в химические продукты – основное направление биорефайнинга, в это же время лигнин, то есть 20-30 % массы сырья, превращается в отходы. Лигнин – сложный гетерополимер, состоящих из метоксилированных фенилпропановых единиц. Ароматические звенья лигнина могут быть функционализированы. Одним из перспективных методов модификации является реакция азосочетания. Азопроизводные лигнина могут использоваться в органических светодиодах; как носители лекарственных средств, удобрений и гербицидов; а также как фотоактивный компонент солнцезащитных средств для кожи. Они являются светочувствительными молекулами, которые могут менять структуру под действием света.

В результате работы научного коллектива разработана технология модификации лигнина древесины пихты и осины реакцией азосочетания, а также последовательно сульфатированием и азосочетанием [1, 2]. Предложенная технология позволяет использовать отходы растительного сырья в качестве основы для новых функциональных материалов. На примере этаноллигнина сосны синтезированы азопроизводные сочетанием с хлоридами 4-нитробензолдиазония и 4-сульфобензолдиазония и разработаны новые составы солнцезащитных кремов с добавками 2-8 мас.% лигнина как фотоактивного компонента. Реакция азосочетания значительно меняет цвет лигнина и содержащего его крема. Разработанные образцы крема имеют SPF 5-10, что соответствует повседневным солнцезащитным средствам.

Получены новые модификации этаноллигнина сосны путём сочетания с 3 изомерами аминобензойной кислоты. Такие производные вероятно имеют выдающуюся антиоксидантную активность и биоаффинность. Исследован состав и структура продуктов методами элементного анализа, ИК- и ЯМР-спектроскопии, гель-проникающей хроматографии. Изучаются так же аналогичные мономерные соединения: получены 3 новых изомерных 4-гидрокси-3-метокси-5-(карбоксифенил)дiazенилбензальдегида в качестве перспективных антибиотиков, красителей и прекурсоров для новых полимеров. Также эти новые соединения полезны в качестве модельных соединений при исследовании азопроизводных лигнина.

Разработаны основы метода получения аминоллигнина, содержащего аминогруппу в ароматическом кольце, через каскад реакций азосочетания и восстановления. Модифицированный таким образом гидролизный лигнин Кировского гидролизного завода может служить в качестве специализированного энтеросорбента.

Благодарности:

Исследование выполнено в рамках гос. задания ИХХТ СО РАН проект FWES 2021-0012.

Автор выражает благодарность за совместные исследования коллегам: Ю.Н. Малияр, В.С. Боровкова, Н.Ю. Васильева, Т.Ю. Иваненко, С.А. Новикова; и ученикам: А.А. Михейкина, А.С. Танаева, А.Р. Сиделева, А.А. Машенко, В. Дружинина.

Литература:

- [1] Borovkova V.S. Malyar Y.N.; Vasilieva N.Y.; Skripnikov A.M.; Ionin V.A.; Sychev V.V.; Golubkov V.A.; Taran O.P. *Materials* V. 16, PP 1525 (2023).
- [2] Golubkov V.A., Borovkova V.S., Lutoshkin M.A., Zos'ko N.A., Vasilieva N.Y., Malyar Y.N. *Wood Sci Technol*. V. 58, PP. 1861–1879 (2024).

Выделение гемицеллюлоз из соломы пшеницы, их физико-химическая характеристика и антиоксидантная активность

Емельянова Валерия Сергеевна

Институт химии и химических технологий СО РАН

В настоящее время гемицеллюлозы находят широкое применение в качестве функциональных материалов благодаря совокупности ценных свойств, важнейшими из которых являются низкая токсичность, высокая растворимость в воде и биоразлагаемость. Состав и свойства извлекаемых из растительного сырья гемицеллюлоз напрямую зависят от источника сырья, а также способов выделения. В ИХХТ СО РАН разработан одностадийный способ получения микрокристаллической целлюлозы из соломы пшеницы с использованием метода пероксидной делигнификации в среде «уксусная кислота-вода» [1]. При осуществлении данного процесса основное количество гемицеллюлоз, содержащихся в соломе пшеницы, растворяется в реакционной смеси. Состав и строение гемицеллюлоз соломы пшеницы, выделенных методом пероксидной делигнификации, ранее изучены не были.

Целью настоящей работы являлось выделение гемицеллюлоз из соломы пшеницы, анализ полученных образцов физико-химическими методами, изучение их антиоксидантной активности.

Из реакционного раствора, полученного после пероксидной делигнификации соломы пшеницы, методом дробного осаждения были выделены две фракции гемицеллюлоз: спиртовая (этанол) и ацетоновая. Выход спиртовой фракции гемицеллюлоз – 11,5 % , ацетоновой фракции гемицеллюлоз – 4,3 % от массы исходной навески соломы пшеницы. Согласно данным, полученным с использованием метода газовой хроматографии, основным моносахаридом в составе гемицеллюлоз как спиртовой, так и ацетоновой фракции является ксилоза, относительное содержание которой составляет 80,7 % и 78,5 % соответственно. Выделение гемицеллюлоз из растительного сырья с использованием метода пероксидной делигнификации позволяет сохранять ацетильные группы, наличие которых характерно для природных гемицеллюлоз. Рассчитанные по данным ИК спектроскопии значения степени ацетилирования выделенных гемицеллюлоз составляют 0,20 и 0,27 для спиртовой и ацетоновой фракций соответственно. Дробное осаждение позволяет получать фракции гемицеллюлоз, различающиеся по молекулярной массе. Значение средневесовой молекулярной массы спиртовой фракции гемицеллюлоз (M_w) в 2,3 раза больше значения M_w для ацетоновой фракции гемицеллюлоз и составляют 6546 г/моль и 2815 г/моль соответственно. Оба образца гемицеллюлоз хорошо растворимы в воде и характеризуются аморфной структурой.

Антиоксидантная активность, определенная ферро-/феррицианидным спектрофотометрическим методом для спиртовой фракции, составила 58,5 мг/г, для ацетоновой фракции 88,8 мг/г в пересчете на аскорбиновую кислоту.

Благодарности:

Работа выполнена в рамках государственного задания ИХХТ СО РАН проект FWES-2021-0017 с использованием оборудования Красноярского регионального центра коллективного пользования ФИЦ КНЦ СО РАН. Автор выражает благодарность научному руководителю канд. хим. наук, ст. науч. сотр. ИХХТ СО РАН Гарынцевой Н.В.

Литература:

[1] Кузнецов Б.Н., Данилов В.Г., Судакова И.Г., Яценкова О.В., Гарынцева Н.В., Ибрагимова Е.Ф., Химия растительного сырья, №4, С. 39-44 (2009).

Модификация TiO_2 нанотрубок $p\text{-Cu}_2\text{O}$ для повышения его фотоэлектрокаталитической активности

Зосько Николай Андреевич

Институт химии и химической технологии СО РАН

Нанотрубки TiO_2 , получаемые методом электрохимического анодирования титановой фольги, являются одной из эффективных структур для фотокаталитического разложения воды. Однако, несмотря на это, для диоксида титана всё ещё существует ряд ограничений, связанных с высокой скоростью рекомбинации носителей заряда и плохим поглощением света в видимой области [1].

Ранее были предложены различные методы для повышения чувствительности нанотрубок из диоксида титана к видимому свету. Среди них: легирование металлами или неметаллами, нанесение красителей или модификация поверхности полупроводниками с меньшей шириной запрещённой зоны. Однако мало внимания уделяется модификации диоксида титана с использованием недорогих и доступных материалов, которые имеют большой потенциал для масштабирования и широкого применения технологии фотоэлектрокатализа [2]. Один из таких материалов — Cu_2O , который является полупроводником p -типа с шириной запрещённой зоны около 2,2 эВ. Его можно использовать для создания гетеропереходов с широкополосными полупроводниками n -типа, что значительно повышает фотоактивность последних при освещении видимым светом.

В работе представлены результаты изучения фотоэлектрокаталитической активности анодных плёнок TiO_2 , модифицированных Cu_2O с помощью циклической вольтамперометрии (CV) и потенциостатического метода (MP).

Фотоэлектрокаталитическую активность образцов изучали, определяя эффективность преобразования падающих фотонов в ток (IPCE), который рассчитывали по величине фототока при потенциале 0.2 В ($\text{Ag}/\text{AgCl}_{(\text{нас.})}$) при различных длинах волн и мощности падающего излучения [3]. Значения IPCE исходных нанотрубок TiO_2 постепенно увеличивались при синем сдвиге длины волны облучения от 0,002% при 660 нм до 6,2% при 370 нм. Было отмечено, что модификация TiO_2 оксидом меди I оказывает значительное влияние на фотоактивность нанотрубок TiO_2 , повышая её при облучении видимым светом. В видимой области спектра наблюдается рост эффективности с максимумом на 523 нм (IPCE = 0.18 %), что в 7 раз выше по сравнению с исходным образцом. Фотоаноды, модифицированные Cu_2O MP методом, продемонстрировали наименьшую фотоактивность из всех исследованных образцов во всём диапазоне длин волн облучения.

Исследование предварительно электрохимически активированных плёнок TiO_2 [4], модифицированных Cu_2O , показало, что фотоактивность таких образцов существенно выше по сравнению с неактивированными $\text{Cu}_2\text{O}/\text{TiO}_2$ и активированными образцами TiO_2 при облучении видимым светом. Максимальные значения IPCE составляли 2,5% (450 нм) и 3,1% (520 нм) для CV и MP модифицированного образца, соответственно.

Благодарности:

Исследования выполнены в рамках Госзадания № FWES-2024-0032.

Литература:

- [1] Ampelli, C., Tavella, F., Perathoner, S., Centi, G., Chem. Eng. J., V. 320, PP. 352-362 (2017).
- [2] Hou, X., Jiang, S., Li, Y., Appl. Catal., B, V. 258, PP. 117949 (2019).
- [3] Zhang, Z., Hedhili, M. N., Zhu, H., Wang, P., Phys. Chem. Chem. Phys., V. 15(37), PP. 15637-15644 (2013).

Исследование ассоциативных взаимодействий в растворах ионных жидкостей [BMIM]R ($R = BF_4, TFSI$) комплексом методов на основе ЯМР
Иваненко Тимур Юрьевич
Институт химии и химической технологии СО РАН

Ионные жидкости (ИЖ) – это особый класс жидкостей, полностью состоящих из ионов, с температурой плавления ниже 100°C , перспективных для применения в катализе, электрохимии и химической технологии [1]. Являясь воспроизводимыми и нетоксичными для окружающей среды, ИЖ могут применяться в интересах «зелёной химии» как растворители, в том числе для целлюлоз и компонентов природного органического сырья. Уникальный набор свойств ИЖ обусловлен формированием в них микроструктурных и динамических неоднородностей [2], а также ассоциативными взаимодействиями и образованием кластеров в молекулярных растворах, что играет ключевую роль в реакциях и процессах с их участием.

В представленной работе изучено динамическое поведение и фазовый состав ионных жидкостей с катионом 1-бутил-3-метилимидазолия ($[BMIM]^+$) в разбавленных растворах (0,2 – 5 об.%) методами ЯМР спектроскопии, диффузионного и электрофоретического ЯМР (рис. 1).

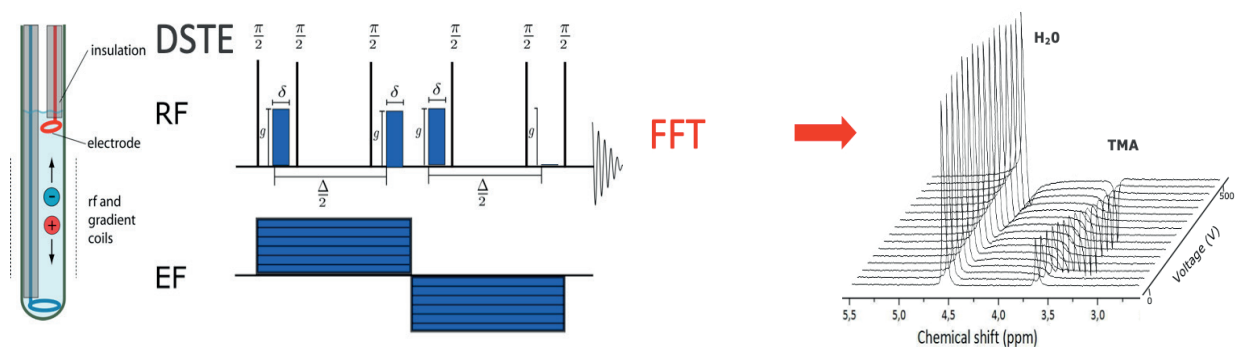


Рис. 1. Схема эксперимента эЯМР.

Получены зависимости химических сдвигов ядер катионного (^1H) и анионного (^{11}B , ^{19}F) фрагментов, коэффициентов диффузии, а также электрофоретической подвижности и эффективного заряда катиона от объёмной доли ИЖ в растворе. Обнаружено фазовое разделение жидкость-жидкость в растворах $[BMIM]BF_4$ в $CDCl_3$ при достижении концентрации 0.6 %. Показано, что замена аниона с высокой плотностью заряда, BF_4^- , на анион с делокализованным зарядом, $TFSI^-$, предотвращает фазовое разделение ИЖ в системах с низкой диэлектрической проницаемостью, ϵ ; при этом, протекание процессов образования кластеров сопровождается снижением молекулярной подвижности катиона ИЖ в растворе.

Благодарности:

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (FWES-2021-0012) с использованием оборудования Красноярского регионального ЦКП ФИЦ “КНЦ СО РАН”. Автор выражает благодарность научному руководителю к.ф.-м.н. Морозову Е.В.

Литература:

- [1] Chen S., Zhang S., Liu X., Wang J., Wang J., Dong K., Sun J., Xu B. Phys.Chem.Chem.Phys., V.16, PP. 5893-5906 (2014).
- [2] Calandra P., Caputo P., Rossi C.O., Kozak M., Taube M., Pachylski M., Gapinski J. Journal of Mol.Liq., V.3, PP. 10-40 (2024).

Непрямое электрокаталитическое окисление крахмала

Капаева Светлана Николаевна

Институт химии и химической технологии СО РАН

Модифицированный крахмал получают путем окисления исходного крахмала с целью улучшения его физико-химических свойств. В процессе окисления крахмал интенсивно деполимеризуется, а гидроксильные группы, в первую очередь в положениях С-2, С-3 и С-6 в D-глюкопиранозильной единице, трансформируются в карбонильные и/или карбоксильные группы. Модифицированные крахмалы проявляют уникальные свойства, поскольку образующиеся диальдегидные группы обладают высокой реакционной способностью и благодаря своим свойствам, таким как биоразлагаемость, нетоксичность и биосовместимость, они нашли разнообразное применение во многих отраслях промышленности, включая фармацевтику, косметику и пищевую промышленность.

Проведено электрокаталитическое окисление картофельного крахмала иодатом натрия в двухкамерной электролитической ячейке с регенерацией окислителя *in situ* на электродах из диоксида свинца (Pb/PbO₂) и оксиднорутениево-титанового (ОРТА).

Для изучения реакции окисления крахмала снимали кинетические зависимости на Pb/PbO₂ и ОРТА, результаты представлены в таблице. Методом ИК-спектроскопии установили, что число колебаний альдегидных групп изменяется с увеличением времени окисления. Для установления химического строения в окисленных звеньях крахмала проводили ЯМР-анализ методом ¹H. В процессе окисления на спектрах появляются сигналы, принадлежащие протону альдегидной группы и полуацеталю. В конце реакции (4,5 ч) появляется сигнал глюкоурановой кислоты.

Таблица 1. Экспериментальные результаты по электрокаталитическому окислению крахмала на диоксиде свинца и оксиднорутениево-титановом анодах в двухкамерной ячейке в кислом электролите.

т, час.	1	2	3	4	5	6	7
C=O, % на аноде Pb/PbO ₂	16	32	50	64	48	32	32
C=O, % на аноде ОРТА	-	16	22	32	39	48	32

На основании полученных результатов можно заключить, что более эффективно электроокисление происходит на диоксиде свинца - за 4 часа электролиза содержание карбонильных групп (C=O, %) составляет 64%.

Благодарности:

Исследование выполнено в рамках Госзадания ИХХТ СО РАН № FWES-2021-0012 с использованием оборудования Красноярского регионального центра коллективного пользования ФИЦ КНЦ СО РАН.

Литература:

- [1] Li J., Zhou M., Cheng F., Materials Today Communications, V.22, PP. 100793 (2020).
- [2] Hongli, L., Changdao M., Wei L., Carbohydrate Polymers, V.84, PP. 881–886 (2011).

Влияние фракционного состава порошка древесины на эффективность её окисления в ванилин

Коваленко Александр Юрьевич

Институт химии и химической технологии СО РАН

Количественное исследование влияния интенсивности массопереноса на скорости поглощения кислорода и накопления ванилина впервые изучено в работах [1-2] на примере окисления костры льна. Цель работы заключается в исследовании влияния фракционного состава загружаемого в реактор порошка сосновой древесины на максимальные выходы ванилина и динамику его накопления.

Результаты и обсуждение. В Табл. 1 представлены выходы ванилина и других продуктов при 160 °С в реакторе с интенсивным перемешиванием для разных фракций размолта сосновой древесины.

Таблица 2. Выходы продуктов окисления различных фракций порошка древесины сосны. (50 г/л сырья, 50 г/л щелочи, 38 г/л сульфата меди, скорость перемешивания 1200 мин⁻¹).

Фракция сырья	Ванилин (В), г/л	Ацетованилон (АВ) (Ванилиновая кислота, ВК), г/л	Время выхода на максимум, мин	Ванилин, в расчете на лигнин, %	В+АВ+ВК, % на лигнин
1-2мм	4,97	0,30 (0,32)	12	36,7	41,2
0,5-1мм	4,90	0,42 (0,41)	12	36,2	42,3
2-12 μм	4,46	0,37 (0,54)	9	30,6	39,6
7-15 μм	5,08	0,43 (0,58)	12	35,0	44,9
2-5 мм	3,89	-	20	26,8	-

Полученные выходы ванилина в расчете на лигнин (30-36%) значительно превышают показатель нитробензольного окисления (28%). Для подтверждения этого результата ванилин выделен из полного объема реакционной массы и проанализирован методами ГЖХ и ПМР, и эти выходы (30-33%) также превышают все известные результаты. Отсутствие влияния размера частиц древесины в широком диапазоне (10 μм – 2 мм) на кинетику поглощения кислорода, накопления и выход ванилина указывают на кинетический режим окисления, лимитируемого химической реакцией делигнификации. Полученные результаты показывают, что для получения высоких выходов ванилина глубокое измельчение древесины не требуется, достаточно использовать опилки фракции менее 2 мм.

Благодарности:

Автор выражает благодарность научному руководителю В.Е. Тарабанько и сотрудникам лаборатории ФХМИМ.

Литература:

- [1] Tarabanko V.E., Vigul D.O. et. al. Biomass conversion and biorefinery. (2022).
- [2] Tarabanko V.E., Kaygorodov K.L., et. al. Catalysts, V.13, P.1490. (2023).

Квантово-химическое моделирование аква- и аквагидроксо-комплексов церия(III), европия(III) и иттербия(III)

Кормес Елизавета Сергеевна

Институт химии и химической технологии СО РАН

Соединения редкоземельных металлов (РЗМ) занимают ключевое место в современных технологиях благодаря своим уникальным магнитным, люминесцентным и каталитическим свойствам. Однако их добыча и разделение сопряжены со значительными трудностями: РЗМ обладают схожими химическими свойствами, а их руды часто содержат смеси элементов с крайне низкой концентрацией. Одним из перспективных методов разделения РЗМ является экстракция в водно-органических средах. На перенос ионов через межфазную границу влияет множество факторов: природа иона и экстрагента, соотношение прочности связей металл-лиганд в обеих фазах, скорость образования и распада комплексов РЗМ, склонность к гидролизу. Понимание структурных и энергетических характеристик этих комплексов критически важно для разработки эффективных и селективных методов разделения. Квантово-химическое моделирование позволит выявить общие закономерности и специфические особенности поведения ионов в водной и органической средах.

В связи с этим, на данном этапе работы, нами была поставлена цель оптимизировать геометрию аква-комплексов Ce^{3+} , Eu^{3+} , Yb^{3+} , представляющих начало, середину и конец лантаноидного ряда, и их гидролизованых форм, используя методы теоретической химии в рамках программного обеспечения *VASP*, а также провести анализ структурных характеристик в сравнении с литературными данными.

Аквакомплексы лантаноидов (III) характеризуются высокими координационными числами (КЧ) из-за большого ионного радиуса и слабого поля лигандов. Однако в ряду лантаноидов наблюдается постепенное уменьшение ионного радиуса, в силу эффекта «лантаноидного сжатия», что в свою очередь влияет на КЧ [1]: у Ce^{3+} с ионным радиусом $\sim 1.15 \text{ \AA}$ в водных растворах образуются аквакомплексы с КЧ = 8–9, у Eu^{3+} с ионным радиусом $\sim 1.066 \text{ \AA}$ КЧ снижается до 8–8.5, а у Yb^{3+} из-за малого ионного радиуса ($\sim 0.985 \text{ \AA}$) размера КЧ уменьшается до 8. В согласии с литературными данными [2] нами было обнаружено, что в ряду Ce^{3+} , Eu^{3+} , Yb^{3+} наблюдается также монотонное уменьшение длины связи М-О на 0,10 $\text{\AA}$ для аквакомплексов и на 0,08–0,09 $\text{\AA}$ для аквагидроксокомплексов.

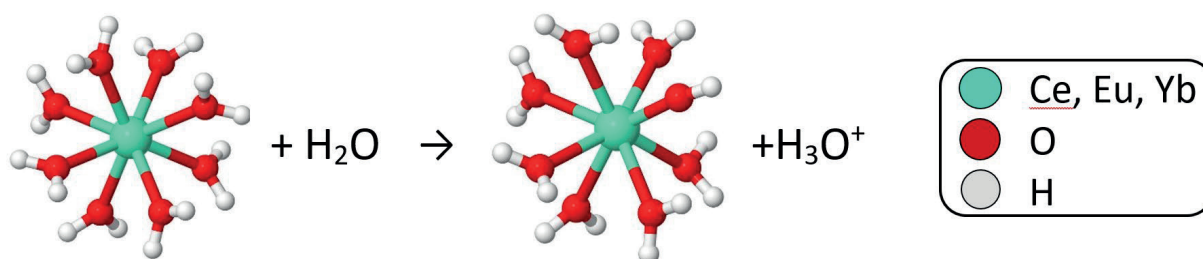


Рис 1. Схема гидролиза аквакомплексов лантаноидов $[M(\text{H}_2\text{O})_8]^{3+}$ ($M = \text{Ce}^{3+}, \text{Eu}^{3+}, \text{Yb}^{3+}$).

Благодарности:

Исследование выполнено в рамках Госзадания № FWES–2021–0012. Автор выражает благодарность соавторам работы: Шору Алексею Марковичу (ИХХТ СО РАН) и научному руководителю Шор Елене Александровне (ИХХТ СО РАН).

Литература:

- [1] P. D. Angelo, R. Spezia, A European Journal, V. 18, PP. 11162–11178 (2012).
[2] Persson I., D'Angelo P., De Panfilis S., Sandström M., Eriksson L., A European Journal, V. 14, PP. 3056–3066 (2008).

Электрохимические превращения левоулиновой кислоты в среде ацетонитрила в присутствии солей свинца

Кузин Николай Демьянович

Институт химии и химической технологии СО РАН

Одним из основных продуктов кислотного каталитического гидролиза растительных полисахаридов является левоулиновая кислота (ЛК), обладающая большим потенциалом в качестве прекурсора для получения продуктов с высокой добавленной стоимостью. Преимущественными продуктами электрохимического гидрирования ЛК в водных средах являются валериановая кислота (ВК) и γ -валеролактон (ГВЛ), конверсия и селективность которых зависит от природы электродного материала. Наиболее эффективным из всех изученных электродов при восстановлении ЛК до ВК является свинцовый. Показано, что гидрирование ЛК до ВК на Pb электроде протекает благодаря образованию металлоорганического интермедиата на поверхности электрода (Рис. 1, путь 2) [1]:

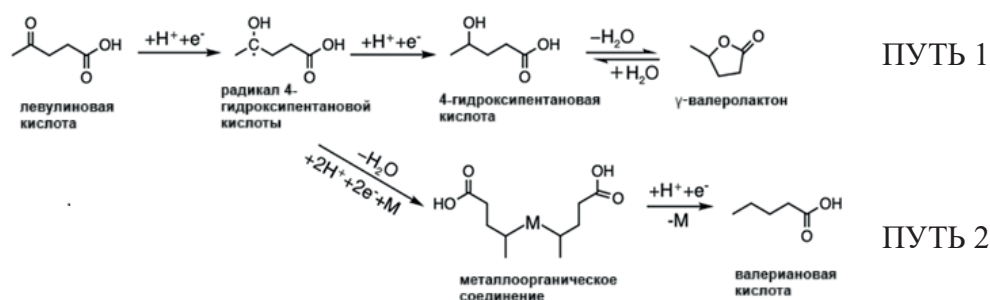


Рис. 1. Электрохимическое восстановление ЛК до ВК и ГВЛ [1].

В настоящей работе методами циклической вольтамперометрии, электролиза при контролируемом потенциале (ЭКП) и высокоэффективной жидкостной хроматографии изучен процесс электрохимического восстановления ЛК до ВК на Cu и Pb электродах в ацетонитриле в присутствии доноров протонов и катионов свинца.

Ранее [2] изучено электрогидрирование ЛК до ВК и/или ГВЛ на различных электродах в ацетонитриле в присутствии доноров протонов ($\text{HBF}_4 \cdot \text{Et}_2\text{O}$). Показано, что на свинцовом электроде можно селективно получить ВК. В настоящей работе оптимизированы условия конверсии ЛК до ВК на Pb электроде. Установлено, что максимальное прогнозируемое значение выхода ВК 50,4 % достигается при проведении ЭКП в течение 3 часов при потенциале -1,09 В и двукратном избытке HBF_4 . Добавление катионов свинца к ацетонитрильному раствору ЛК и протонов показало значительное увеличение конверсии ЛК и выхода целевых продуктов. Таким образом, более полное восстановление ЛК до ВК может протекать через образование комплекса металла с органическим субстратом (Рис. 1, путь 2).

Полученные результаты важны для понимания механизмов электрокаталитических процессов гидрирования продуктов переработки растительной биомассы.

Благодарности:

Исследование выполнено в рамках государственного задания Института химии и химической технологии СО РАН (проект FWES-2021-0012). Автор выражает благодарность соавторам работы: Зимонин Д.В., Сычев В.В., Бурмакина Г.В.

Литература:

- [1] Du Y., Chen X., Qi J., Wang P., Catalysts, V. 10, PP. 692–703 (2020).
- [2] Burmakina G.V., Zimonin D.V., et al., Current Research in Green and Sustainable Chemistry. V.7. 100379 (2023).

Особенности взаимодействия *f*- и *d*-металлов с гетероциклическими β -дикетонами

Лутошкин Максим Александрович

Институт химии и химической технологии СО РАН

π -Сопряженные комплексы редкоземельных металлов обладают ярко выраженными оптическими и люминоформными свойствами, которые в значительной мере зависят от характера связи между металлом и лигандом. Перфторированные гетероциклические дикетоны способны образовывать устойчивые сопряженные хелатные комплексы с *d*- и *f*-металлами, в которых эффекты делокализации π - и σ -донорных заместителей гетероциклического кольца напрямую сказываются на взаимодействии с ионами металлов в водных растворах. В данной работе была изучена серия несимметричных 1,3-дикетонов, их кислотно-основные, кето-енольные и хелатообразующие свойства методами оптической спектrophотометрии, а также квантовохимическое моделирование равновесных процессов с использованием скалярных релятивистских псевдопотенциалов.

В данной работе были синтезированы несколько новых дикетонов с халькогенсодержащими и полифторароматическими заместителями [1,2]. Для всех лигандов были определены константы устойчивости монокомплексов с шестнадцатью редкоземельными металлами, их константы диссоциации и протонирования, а также спектральные и люминесцентные параметры (Рис. 1).

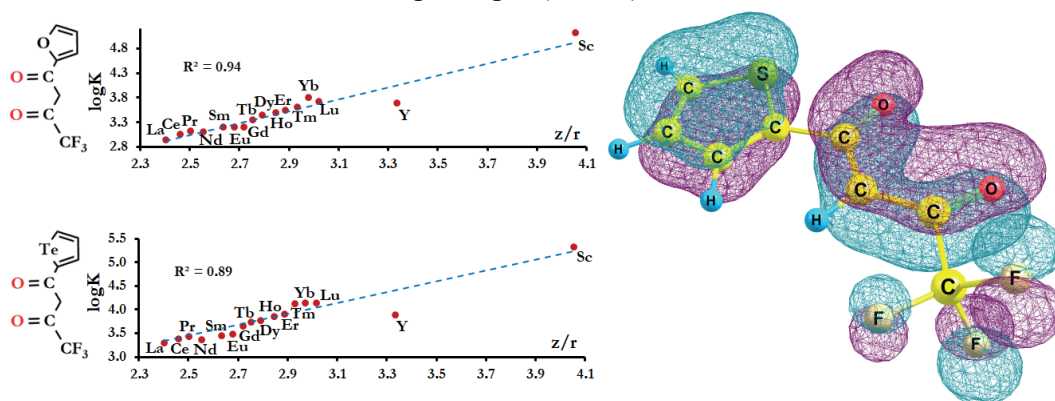


Рис. 2. Типичная структура π -делокализованной молекулярной орбитали ионизированной формы дикетонов (справа) а также линейная корреляция между найденными константами устойчивости монокомплексов и ионным потенциалом металлов (слева).

Было показано [3], что в ряду металлов наблюдается типичное монотонное увеличение энергии взаимодействия с разным вкладом электростатических термов, в то время как в ряду лигандов наблюдается увеличение констант образования в ряду заместителей фурил < теноил < селенофен < теллутофен, что свидетельствует о нековалентных взаимодействиях в данных типах комплексов.

Благодарности:

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (FWES-2021-0012) с использованием оборудования КРЦКП ФИЦ “КНЦ СО РАН”.

Литература:

- [1] Lutoshkin M.A., Taydakov I.V., Polyhedron, V.207, PP. 115383 (2021).
- [2] Lutoshkin M.A., Taydakov I.V., Polyhedron, V.237, PP. 116395 (2023).
- [3] Lutoshkin M.A. J. Phys. Chem. A, V.40, PP. 8383–8391 (2023).

Пинцерные ($^{Ph}POCOR^{Ph}$) комплексы Ni(II) в электрокаталитических реакциях гидрирования левулиновой кислоты

Остапенко Иван Александрович

Институт химии и химической технологии СО РАН

Одним из актуальных направлений развития металлокомплексного катализа в настоящее время является исследование пинцерных комплексов переходных металлов в различных процессах, в том числе каталитических реакциях гидрирования продуктов переработки растительного сырья. В литературе известны единичные примеры применения пинцерных комплексов Fe [1], Ir [2] в гомогенных и Ru [3] в гетерогенных реакциях гидрирования левулиновой кислоты (ЛК).

В работе впервые изучена возможность использования пинцерных ($^{Ph}POCOR^{Ph}$) комплексов Ni (II) в электрокаталитических реакциях гидрирования ЛК.

Методами циклической вольтамперометрии (ЦВА), классической полярографии на Pt, стеклоуглеродном (СУ) и р.к.э. электродах исследованы редокс-свойства комплексов ($^{Ph}POCOR^{Ph}$)NiX [X = I (**1**), OC(O)CF₃ (**2**)] в ацетонитриле без доноров протонов (HBF₄·Et₂O) и в их присутствии. Показано, что редокс-превращения комплексов **1** и **2** зависят от природы терминального лиганда X. Предложены схемы их редокс-реакций. Окисление комплекса **1** на СУ электроде протекает в две последовательные одноэлектронные стадии с изменением степени окисления Ni(II) до Ni(IV), а комплекса **2** - в одну стадию до Ni(III). Комплексы **1** и **2** восстанавливаются по разным механизмам: **1** – ECE, **2** – EECCE (E – электрохимическая, C – химическая стадия).

Ранее показано [4], что электрохимическое гидрирование левулиновой кислоты на СУ в ацетонитриле в присутствии доноров протонов протекает с образованием γ -валеролактона (ГВЛ). В настоящей работе методами ЦВА, электролиза при контролируемом потенциале и высокоэффективной жидкостной хроматографии установлено, что в присутствии комплекса **1** левулиновая кислота восстанавливается на СУ электроде до валериановой кислоты (ВК), а **2** – с образованием ВК и ГВЛ. Таким образом, пинцерные ($^{Ph}POCOR^{Ph}$) комплексы Ni(II) проявляют активность в электрокаталитическом гидрировании левулиновой кислоты.

Полученные результаты важны для понимания механизмов электрокаталитических превращений продуктов переработки растительного сырья, выбора электрокатализатора и потенциального эффективного комплекса-катализатора для селективного получения целевых продуктов.

Благодарности:

Исследование выполнено в рамках государственного задания Института химии и химической технологии СО РАН (проект FWES-2021-0012). Автор выражает благодарность соавторам работы: Зимонину Д.В., Верпекину В.В., Кузину Н.Д., Сычеву В.В., Чудину О.С., Бурмакиной Г.В.

Литература:

- [1] Yi, Y. at all, ChemSusChem, V. 11(9), PP. 1474–1478 (2018)
- [2] Li, W., at all, Green Chemistry, V. 14(9), PP. 2388 (2012)
- [3] Park, K. at all, ChemCatChem, V. 13(2), PP. 695–703 (2020).
- [4] Burmakina G.V., Zimonin. D.V. at all, ChemPhysChem. (2024). e202300900.

Изменение химического состава шихт на основе некондиционных марганцевых руд с целью получения стандартных металлических и силикатных расплавов

Павлов Михаил Вячеславович

Институт космических технологий ФИЦ КНЦ СО РАН

Производство и объёмы потребления марганцевой продукции являются важнейшими показателями экономического развития государства. В общей структуре потребления Mn-ферросплавов большая часть их (более 90%) используется в черной металлургии, при выплавке стали. Добавка его более 10% приводит к значительному увеличению сопротивления атмосферной коррозии. После распада СССР крупные месторождения железомарганцевых руд остались за границами России. У нас в стране они представлены в основном (~90%) труднообогатимыми карбонатными рудами, характеризующимися относительно низким содержанием марганца, высоким – фосфора и слабым качеством концентратов. Работа на привозном сырье не способствует экономической независимости производства и труды, направленные на импортозамещение в современных условиях крайне актуальны. При переработке по традиционным технологиям силикатная составляющая не используется, образуя силикатные отвалы со значительным остаточным содержанием марганца. Mn-содержащие силикатные отходы формируют техногенные месторождения, безотходная переработка которых также перспективна при наличии соответствующих технологий [1].

Целью исследования является стабилизация химического состава расплавов марганецсодержащих руд за счет различных минеральных добавок, их комплексная переработка с использованием метода глубокого восстановительного плавления для выделения Fe-Mn-сплавов и получения силикатных материалов. На диаграмме состояния Al_2O_3 –MgO– SiO_2 данные материалы могут соответствовать определенным областям, например, диопсиду или волластониту, являющимися сырьем для стекла, керамики в аэрокосмической, радиоэлектронной отрасли и промышленности строительных материалов.

На этой основе были рассчитаны составы опытных шихт и на индукционном комплексе КИТ-25 проведена опытная восстановительная плавка марганцевой руды состава, масс. %: MnO 18.04; Fe_2O_3 20.6; MgO 0.7; Al_2O_3 8.3; SiO_2 43.5; P_2O_5 1.3; K_2O 2.62; CaO 2.9; SrO 0.03; BaO 2.01.

В результате эксперимента получен железомарганцевый сплав масс %: Si 18.3; P 0.05; S 0.03; Mn 76.6; Fe 5.02 и вспененный силикатный материал химического состава, масс %: Na_2O 0.53; MgO 1.23; Al_2O_3 6.81; SiO_2 44.22; P_2O_5 0.04; SO_3 0.06; K_2O 0.52; CaO 43.84; TiO_2 0.19; MnO 0.72; Fe_2O_3 0; ZrO_2 0.02; BaO 1.82, соответствующий области кристаллизации волластонита. Силикатная часть – сырье для экологически чистых, негорючих теплоизоляционных и стеклокристаллических материалов различных структур. Металлический сплав близок к требованиям ГОСТ на ферромарганец.

Благодарности:

Исследование выполнено в рамках Госзадания № FWES-2021-0029. Автор выражает благодарность научному руководителю, к.т.н. Жижаеву Анатолию Михайловичу (Институт ИХХТ КНЦ СО РАН), а также Центру коллективного пользования (ЦКП КНЦ СО РАН).

Литература:

[1] Шабанов В.Ф., Кузнецов Б.Н., Щипко М.Л., Волова Т.Г., Павлов В.Ф. Фундаментальные основы комплексной переработки углей КАТЭКа для получения энергии, синтез-газа и новых материалов с заданными свойствами. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2005.

Гидрирование древесины березы на Pd, Ir, Pd-Ir катализаторах, полученных гидротермальным методом

Селезнева Ольга Сергеевна

Институт химии и химической технологии СО РАН

Древесная биомасса состоит из целлюлозы, лигнина и гемицеллюлоз, образуя сложную структуру, что усложняет ее химическую переработку в востребованные химические соединения. Традиционные промышленные технологии в основном сосредоточены на переработке целлюлозной части древесной биомассы. В результате лигнин, который является одним из основных компонентов и потенциальным источником ценных ароматических веществ, остается в качестве отхода.

Восстановительное каталитическое фракционирование растительной биомассы это перспективное направление для комплексной переработки лигноцеллюлозных материалов. Данный процесс направлен на эффективное разложение биомассы с получением ценных химических веществ и топлива, минимизируя отходы и потребление энергии [1].

Восстановительное каталитическое фракционирование включает в себя: деполимеризацию лигнина и гемицеллюлоз с последующим каталитическим гидрированием полученных фрагментов [2].

Целью данной работы является характеристика наночастиц Pd, Ir, Pd-Ir на мезопористом углеродном материале СМК-3 и изучение полученных катализаторов в процессе восстановительного каталитического фракционирования древесины березы.

Использование данных катализаторов в сверхкритическом этаноле приводит к увеличению выхода мономеров в жидких продуктах гидрирования древесины березы.

При использовании катализатора Pd/СМК-3 доля жидких продуктов увеличивается до 58,6 мас.%. В то же время использование данного катализатора приводит к снижению выхода твердого продукта до 39,3 мас.% по сравнению с экспериментом, в котором катализатор не использовался (50,0 мас.%). Использование катализатора Ir/СМК-3 дает выход твердого продукта на уровне 45,6 мас.%, в то время как доля жидкого продукта достигает 52,9 мас.%. Использование биметаллического катализатора Pd-Ir/СМК-3 приводит к увеличению выхода жидких продуктов до 58,6 мас.%. Стоит отметить, что самая высокая конверсия достигается при использовании катализатора Pd/СМК-3 и составляет до 60,7 мас.%.

Полученные результаты свидетельствуют о высокой эффективности синтезированных катализаторов для переработки лигноцеллюлозной биомассы в ценные химические соединения. Это открывает новые перспективы для разработки технологий переработки биомассы с минимальным потреблением энергии. Дальнейшие исследования могут быть направлены на оптимизацию состава катализатора и условий процесса для повышения селективности и выхода целевых продуктов.

Благодарности:

Данное исследование выполнено при финансовой поддержке министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания института химии и химической технологии СО РАН ФИЦ КИХ СО РАН (проект FWES-2021-0017), при использовании оборудования Красноярского краевого центра коллективного пользования Красноярского научного центра Сибирского отделения РАН. Автор выражает благодарность соавторам работы: Казаченко А.С., Борисову Р.В., Мирошниковой А.В., Скрипникову А.М.

Литература:

- [1] Jindal M., Uniyal P., Bioresource Technology, V. 385, P. 129396 (2023).
- [2] Arts W., Van Aelst K. Energy Environ. Sci, V. 16, P. 2518-2539 (2023).

Изучение процесса деполимеризации ксилана с применением твердых кислотных катализаторов

Семке Екатерина Николаевна

Институт химии и химической технологии СО РАН

В последнее время растет интерес к растительным нерегулярным полисахаридам, таким как ксилан, так как его модифицированные формы обладают потенциалом для широкого применения в медицине, в роли гидрогелей и средств доставки лекарств, в качестве эмульгирующих добавок в пищевой промышленности, а также в виде покрытий и пленок [1]. Отдельной формой ксилана являются ксилоолигосахариды (КОС), проявившие себя как перспективные пребиотики, способствующие росту полезных бактерий в кишечнике [2]. Традиционно КОС получают методами гидролиза: кислотным, ферментативным, авто- и гидролизом на твердых кислотных катализаторах, последний обладает рядом преимуществ таких, как простота отделения от реакционной смеси и легкость рецикла катализатора [3].

В данной работе предложен метод получения КОС с длиной цепи 2-10 из ксилана на твердом кислотном катализаторе Zr-Al-SBA15. Продемонстрирована возможность их фракционирования на хроматографической колонке, заполненной активированным углем, и водой в качестве элюента. При вариации температуры от 110 до 150 °С установлена кинетическая зависимость образования КОС из ксилана методами ВЭЖХ и ГПХ.

В результате проведенных исследований были установлены оптимальные условия для гидролиза: 130 °С при 60 мин процесса. При указанных параметрах выход ксилоолигосахаридов достигает максимальных значений. Температура 150 °С оказалась избыточной и приводит к разрушению целевых продуктов, тогда как 110 °С способствует лишь незначительному приросту ксилоолигосахаридов. Для сравнения было осуществлено исследование процесса при 110 °С как с использованием катализатора SBA-15, так и без катализаторов, оба варианта являются менее продуктивными.

Дополнительно была изучена возможность фракционирования продуктов гидролиза. Показана возможность разделения КОС и ксилозы.

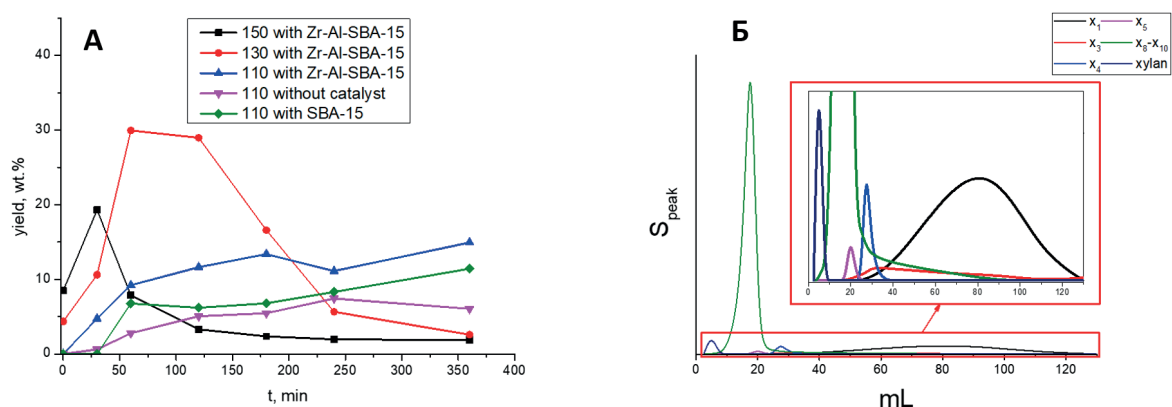


Рис.1.А – Общий массовый выход ксилоолигосахаридов; Б – Кривая элюирования продуктов гидролиза ксилана при 110 °С без катализатора.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда, проект № 22-73-10212, <https://rscf.ru/en/project/22-73-10212/>. Автор выражает благодарность научному руководителю и соавтору работы Маляру Ю.Н., а также Сычеву В.В.

Литература:

- [1] Konduri M. K., Fatehi P., Carbohydrate polymers, V.146, P.26-35 (2016).
- [2] Carlson J. L., Erickson J. M. et. all, Nutrients, V.9, P.1361 (2017).
- [3] HAN Peng-fei, et. all, Sci. and technol. of food industry. V. 38, P. 171-176 (2017).

Получение и физико-химическое исследование поликатионных производных арабиногалактана

Середа Мария Владимировна

Институт химии и химической технологии СО РАН

Арабиногалактан лиственницы сибирской (АГ), проявляет значительную иммуностимулирующую активность, гепатопротекторные свойства, является пребиотиком. В настоящее время наиболее востребованными являются его комплексообразующие свойства [1]. Для усиления способности связываться с другими веществами применяются различные способы модификации АГ. Перспективной является модификация поликатионными группами - кватернизация, которая может привести к улучшению адгезионных свойств, усилению способности связываться с другими веществами, например, с полианионами. Модифицированный АГ может найти применение в создании новых форм лекарственных препаратов, в качестве средств доставки активных компонентов, антимикробных и ранозаживляющих покрытий, а также как компонент биodeградируемых пластиков и упаковочных материалов [2].

В данном исследовании АГ был функционализирован (3-Хлор-2-гидроксипропил)триметиламмоний хлоридом (СНРТАС) для введения групп четвертичного аммония. Кватернизация арабиногалактана была подтверждена методами ГПХ, ИК и ЯМР спектроскопии, элементным анализом, а также приведена оптимизация процесса.

При варьировании условий процесса был получен модифицированный арабиногалактан (AG-N) с максимальной степенью замещения 19,2% при протекании процесса в течение 30 часов и при температуре 50°C. Результатами анализа ГПХ установлено, что помимо функционализации происходит частичная деструкция молекул арабиногалактана. Установлено, что при низких значениях pH промежуточный продукт-2,3-эпоксипропил-триметиламмоний хлорид образуется в малых количествах, что приводит к низкой степени замещения и низкой деструкции, как следствие. Функционализация была подтверждена методами ИК-спектроскопии (Рис.1А), ПМР (Рис.1Б), элементным анализом.

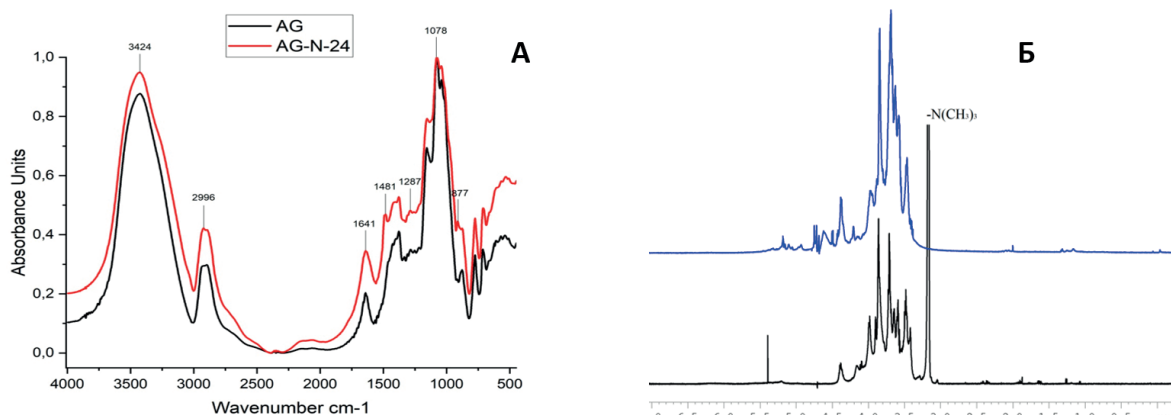


Рис.1. А – ИК-спектр AG и AG-N-; Б – спектр ПМР AG и AG-N.

Благодарности:

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда, проект № 22-73-10212, <https://rscf.ru/en/project/22-73-10212/>. Автор выражает благодарность научному руководителю и соавтору работы Маляру Ю.Н.

Литература:

- [1] Медведева, Е. Н., Химия растительного сырья, №1, С. 18 (2003).
- [2] Uchiyama K., Asamoto H., Minamisawa H., Yamada K., Physchem, V. 3, № 1, P. 61-76 (2023).

Исследование способов извлечения прекурсоров образования хлорорганических соединений из нефти

Синьшинов Павел Алексеевич

Институт химии и химических технологий СО РАН

Хлорорганические соединения представляют собой соединения, в которых один или более атомов водорода замещены атомами хлора. ХОС хорошо растворимы в органических растворителях, маслах и жирах [1].

Результаты ранее выполненных исследований в области определения причин образования ХОС указывают на то, что основной вклад в содержание хлорорганических соединений в нефти связан с техногенным характером – применением химических реагентов, содержащих ХОС, либо их прекурсоры. Также ХОС могут образовываться в результате термоллиза хлорсодержащих соединений в процессе переработки нефти.

По результатам анализа научно-технической литературы, необходимо отметить, что большинство авторов склоняется к гипотезе присутствия хлора в тяжелых фракциях, а также смолах и асфальтенах в нефти именно в ионном виде, содержание и состав прекурсоров ХОС зависят от генетической природы нефти. Идентифицированные в продуктах деструкции асфальтенов соединения имеют в своем составе атомы азота, обладающих основными свойствами и это может свидетельствовать о наличии в исходной нефти гидрохлоридов высокомолекулярных гетероциклических аминов [2]. Таким образом можно предположить, что хлор в нефти присутствует преимущественно в ионной форме.

Для теоретической оценки данной гипотезы был выполнен анализ корреляции содержания общего хлора и азота в пробах нефти по фракциям, в результате которого выявлена наибольшая корреляция между содержанием N и Cl во фракции $>450^{\circ}\text{C}$, что подтверждает гипотезу о содержании хлора в нефти преимущественно в тяжелых фракциях в составе азотсодержащих соединений.

Таким образом, с целью исключения рисков образования ХОС в результате термического воздействия на нефть при её ректификации на блоке АТ НПЗ, необходимо внедрение на этапе подготовки нефти технологического процесса по извлечению хлора либо прекурсоров ХОС из нефти.

Учитывая ионную форму хлора в нефти интерес представляют технологии извлечения хлора с использованием ионообменных экстрагентов. Одним из основных требований к экстрагенту при его подборе будет являться технологическая доступность - возможность использования в условиях месторождения.

Интеграция экстракционной технологии в процесс подготовки нефти может быть выполнена на этапе после проведения первой ступени обезвоживания и отделения ПНГ с последующей водной промывкой слабоминерализованной водой и второй ступенью обезвоживания. Внедрение данной процесса потенциально позволит исключить риски образования ХОС, что особенно актуально для тяжелых нефтей с высоким содержанием гетероатомов.

Автор выражает благодарность научному руководителю к.х.н. Калякину С.Н.

Литература:

- [1] Камьянов В.Ф., Аксенов В.С., Титов В.И. Гетероатомные компоненты нефтей. Новосибирск: Наука, 1983.
- [2] Левченко Д.Н., Бергштейн Н.В., Николаева Н.М. Технология обессоливания нефтей на нефтеперерабатывающих предприятиях. М.: Химия. 1985.

Кислотный гидролиз арабиногалактана на твердых катализаторах Al-Zr-SBA-15

Троцкий Юрий Анатольевич

Институт химии и химической технологии СО РАН

Актуальной проблемой сельского хозяйства и деревообрабатывающей промышленности является образование большого количества лигноцеллюлозных отходов и отсутствие технологий их переработки в продукцию с высокой добавленной стоимостью [1]. Самой распространенной древесиной в России является лиственница, которая содержит арабиногалактан (АГ) в больших количествах [2]. При деполимеризации АГ образуются: арабиноза, галактоза, фурфурол и 5-гидроксиметилфурфурол (5-ГМФ), которые находят широкое применение в различных сферах [3]. Наиболее перспективными считаются гетерогенные каталитические процессы, однако микропористость распространенных катализаторов, например, массивных цеолитов, создаст диффузионные затруднения в реакционной среде. Эффективный массообмен способны обеспечить мезопористые катализаторы, например, на основе мезосиликата SBA-15, допирование которого оксидами Al и Zr привнесет выраженные кислотные свойства, необходимые для эффективной деполимеризации [4].

Целью данной работы является разработка твердых катализаторов на основе мезопористого силиката SBA-15, допированного оксидами Al и Zr, для деполимеризации АГ для получения мономерных продуктов с высокой добавленной стоимостью.

Синтезирована серия катализаторов на основе SBA-15 с различным соотношением оксидов металлов Al/Zr (0,5; 1,0; 2,0). Образцы исследованы методами: РФА, РФЭС, ПЭМ, СЭМ, низкотемпературная адсорбция N₂, рН_{тнз}. С помощью измерений рН_{тнз} было определено, что соотношение Al/Zr, равное 0,5, обеспечивает максимальную кислотность катализатора (рН_{тнз} = 2,43).

Максимальный выход мономеров (61 мас.%) был достигнут в присутствии 2,5Al-5Zr-SBA-15 в течение 4 часов. Максимальное содержание целевых продуктов, а именно арабинозы и галактозы, составляет 4 мас.% (2 ч) и 45 мас.% (3 ч) соответственно. Накопленные арабиноза и галактоза деполимеризуется до фурфурола и 5-ГМФ с выходом 3 мас. % и 16 мас. % соответственно. При увеличении содержания допантов в катализаторе общее содержание продуктов достигает 60 мас.% (5Al-5Zr-SBA-15) и 35 мас.% (10Al-5Zr-SBA-15) в течение 5 ч, предположительно, из-за более низкой кислотности катализаторов.

Таким образом, катализатор с соотношением Al/Zr, равным 0,5, оказался наиболее активным из серии синтезированных катализаторов и может быть использован в качестве носителя при создании твердых биметаллических катализаторов для процесса гидролиза-гидрирования/гидрогенолиза.

Благодарности:

Исследование выполнено в рамках Госзадания FWES-2021-0012 при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта № 21-73-20269.

Литература:

- [1] Anwar Z., Gulfraz M., Journal of radiation research and applied sciences, 7(2), PP. 163-173 (2014).
- [2] Kelly G. S., Alternative medicine review: a journal of clinical therapeutic, 4(2), PP. 96-103 (1999).
- [3] Kusema B. T., et. al. Catalysis letters, 141, PP. 408-412 (2011).
- [4] Gromov N. V., Taran O. P., Parmon V. N. Sustainable Catalysis for Biorefineries. PP. 65-97 (2018).

Некоторые особенности взаимодействия ампициллина и цефокситина с наночастицами серебра

Флерко Максим Юрьевич

Институт химии и химической технологии СО РАН

Уменьшение эффективности антибиотиков связано с увеличением количества патогенных бактерий, обладающих устойчивостью к ним. Разработка новых антибактериальных препаратов требует значительных временных и финансовых затрат. Одним из возможных решений данной проблемы является применение комбинаций существующих антибиотиков и наночастиц серебра (AgNPs).

Целью работы был синтез AgNPs, их комбинация с натриевыми солями ампициллина (NaAmp) или цефокситина (NaCFXT) и исследование стабильности в течение 30 дней методами DLS, TEM, UV-Vis, FTIR, XRD и др.

AgNPs синтезировали по модифицированной методике Кэри Ли при 25 °С, скорости перемешивания 200 об/мин и впрыске 20 мл/с. В 0.1 М водный раствор AgNPs добавляли NaAmp и NaCFXT до молярного соотношения AgNPs:антибиотик = 1:5.

Растворы AgNPs имели желтый цвет с максимумом поглощения полосы плазмонного резонанса (ППР) при 397 нм. Через 30 дней наблюдалось снижение интенсивности ППР и слабое плечо при 503 нм, указывающее на небольшую агрегацию частиц. Размер частиц увеличивался с 9.1 до 12.0 нм (по TEM) и с 9 до 13 нм (по DLS).

Спектры исходных антибиотиков демонстрировали характерные полосы при 193 нм для NaAmp и при 193 и 237 нм для NaCFXT соответственно. В течение 30 дней спектры NaAmp оставались практически неизменными, тогда как для NaCFXT наблюдалось разрушение молекулярной структуры при контакте с воздухом. Согласно FTIR-анализу, через 30 дней в обоих антибиотиках исчезли некоторые полосы, включая сигнал в диапазоне 1760–1770 см⁻¹, характерный для β-лактамной группы.

В комбинации AgNPs с NaAmp через 30 дней отмечалось медленное снижение интенсивности ППР и "красное" смещение, указывающее на увеличение размера частиц. Для комбинации с NaCFXT такое смещение происходило быстрее. По DLS размер частиц возрастал с 9 нм до 14 нм для комбинации AgNPs с NaAmp и 17 нм для AgNPs с NaCFXT. Согласно данным TEM, средний размер частиц возрастал с 9.1 нм до 17.3 и 19.9 нм для комбинаций AgNPs с NaAmp и NaCFXT соответственно.

По данным рентгенофазового анализа (XRD) исходные наночастицы AgNPs и их комбинации с антибиотиками даже после 30 дней контакта содержали лишь фазу чистого металлического серебра. Определение области когерентного рассеяния (ОКР) методом Ритвельда для комбинации AgNPs + NaAmp за 30 дней контакта возрастала с 5.5±0.2 нм до 6.3±0.2 нм. Для комбинации AgNPs + NaCFXT ОКР за 30 дней изменялась с 6.1±0.7 нм до 7.8±0.3 нм.

По всей видимости, наночастицы серебра ускоряют разрушение NaAmp и NaCFXT путем образования фазы Ag₂S на поверхности частиц из атомов серы, входящих в состав антибиотиков. Формирование пленки Ag₂S приводит к снижению агрегативной стабильности частиц и их агрегации и укрупнению по данным TEM, DLS и UV-vis. В противовес этому, ОКР AgNPs в комбинациях с антибиотиками, в том числе через 30 дней хранения изменялась не значительно. Вероятно, покрытие наночастиц граничной пленкой Ag₂S при их агломерации позволяет частично сохранить объем исходных частиц.

Благодарности:

Работа выполнена при финансовой поддержке базового проекта ИХХТ СО РАН FWES-2021-0014. Автор выражает благодарность соавторам работы: научному руководителю Воробьеву Сергею Александровичу.

Особенности техногенного преобразования лежалых хвостов намывных накопителей промышленных отходов золотоизвлекающих фабрик

Целюк Олег Игоревич

ФГБНУ Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук»

В основу исследований положены натурные наблюдения на действующих полигонах размещения намывных отходов. В их число вошли хвостохранилища ведущих предприятий Восточной Сибири: Советской ЗИФ и Артемовский ЗИФ. Объединяющим фактором послужили единые технологические схемы эксплуатации накопителей, а также условия размещения и хранения намывных отходов. Комплекс работ на каждом объекте проводился по единой методике и включал в себя полевые и лабораторные исследования, интерпретацию полученных данных с помощью методов математического моделирования, анализа техногенных и природных процессов, а также экспериментальные мероприятия [1].

Кроме этого, в лабораториях ИХХТ СО РАН и ФГБУ «ВИМС» проводилось исследования минеральных форм методом рентгенофазового и рентгенографического анализов. Применение методов электронной микроскопии позволило изучить строение и степень разрушения минеральных частиц и их фрагментов. Способствовало диагностированию новообразованных минеральных фаз, а также дало возможность проследить последовательность процесса их формирования от коллоидных до микрокристаллических и кристаллических форм. Применение приставки энергодисперсионного микроанализа позволило определить в минеральных выделениях элементный состав.

Ключевое внимание было уделено исследованию процессов внутреннего этапа техногенеза, характеризующего следующую группу взаимосвязывающих компонентов: пульпа-массив техногенных отложений - техногенные воды. Механизмы развития техногенеза обусловлены взаимодействием осадочных толщ и водных растворов. Установлено, что в основе этих процессов выступает способность техногенных вод оказывать деструктивное воздействие на осадкообразующие минералы, а также переводить в растворенное состояние целый ряд элементов, находящихся в составе минеральных зерен.

Наиболее четко это явление выражено в основании техногенных массивов в условиях застойного водообмена. Здесь проявлена заметная трансформация твердых фаз техногенных осадков, а также происходит изменение химического состава техногенных вод. Повышается солевой показатель вод, меняется их кислотно-щелочной баланс. Происходящие модификации минерального состава осадочных толщ выражаются в виде замещения первичных минеральных форм вторичными образованиями и в формировании новообразованных тонкокристаллических и аморфных минеральных фаз на геохимических барьерах. К их числу относятся гидрокарбонаты, водные сульфаты и сульфоарсенаты, а также гидроксиды железа.

Совокупность процессов растворения, разложения и окисления вещества, ионного обмена, сорбции, переноса вещества водными растворами в конечном итоге определяет физико-химический тип техногенных осадков и геохимическую специфику техногенных вод и их производных - растворов техногенного фильтрата, который играет ведущую роль в экологической опасности лежалых хвостов и в загрязнении природных вод.

Литература:

[1] Целюк Д. И., Целюк О. И., Особенности развития техногенеза в намывных накопителях промышленных отходов. Красноярск, 2018.

Электронно-микроскопическое исследование структуры инверсных опалов из диоксида титана

Шабанова Ольга Вильгельмовна

Институт космических технологий ФИЦ КНЦ СО РАН

Инверсные опалы (ИО) - это структуры с регулярно расположенными сферическими порами субмикронных размеров, толщина стенок между порами – 20-30 нм. Это метаматериалы, структура которых характеризуется периодическим изменением показателя преломления, а диэлектрические свойства меняются в одном, двух или трех направлениях с характерным пространственным масштабом порядка оптической длины волны [1]. Для их получения пространство между полимерными опаловыми частицами, осажденными в регулярно упакованные матрицы (темплаты) заполняют прозрачным материалом, а затем частицы удаляют травлением или обжигом. Целью данного исследования является получение ИО из диоксида титана при температуре отжига 550°C.

Полимерные опаловые частицы получены методом эмульсионной полимеризации метилметакрилата в водной среде в азотной атмосфере. В качестве инициатора использовался 2,2'-азобисдиметилпропионамид [2]. Синтезированы частицы диаметром 340 нм с распределением по размерам около 5%. Пропитка шаблонов проводилась 30% раствором тетраэтоксититана в петролейном эфире. По мере испарения эфира тетраэтоксититан подвергался гидролизу влагой воздуха с образованием титановой кислоты, которая после обжига переходит в диоксид титана. Пропитанные шаблоны подвергались многоступенчатому обжигу при 120°C, 250°C и 550°C с выдержкой 4 часа на каждой ступени. Скорость нагрева - 2°C/мин. Исследования структуры полученных образцов проводились на растровом электронном микроскопе Hitachi S-5500 (РЭМ) и просвечивающем электронном микроскопе Hitachi HT-7700 (ПЭМ) (рис. 1). Оборудование предоставлено КрЦКП.

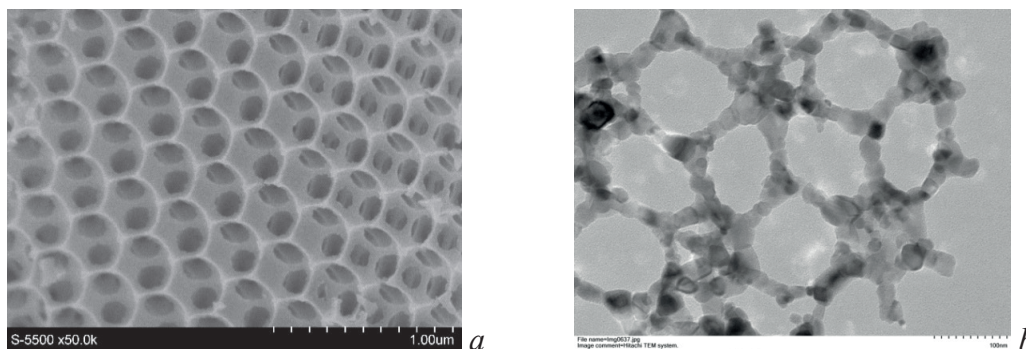


Рис. 1. *а – РЭМ изображение поверхности ИО из TiO₂, б – ПЭМ изображение кристаллитов ИО из TiO₂.*

Видно, что ИО имеют регулярную структуру. Стенки опалов состоят из кристаллитов размером 20-30 нм.

Благодарности:

Автор выражает благодарность своему научному руководителю д.х.н. Павлову Вячеславу Фроловичу за ценные советы при планировании исследования.

Литература:

- [1] Stein A. Sphere Templating Methods for Periodic Porous Solids. Microporous & Mesoporous Materials. V. 44–45. P. 227–239 (2001).
- [2] Шабанов А.В., Шабанова О.В., Коршунов М.А. Синтез монодисперсных субмикронных сферических частиц полиметилметакрилата и его моделирование методом молекулярной динамики. Коллоидный журн. Т.76. № 1 С. 120-126 (2014).

Исследование образования водорода при прямом вскрытии слаборадиоактивных редкометальных руд Томторского месторождения

Энов Олег Анатольевич

Институт химии и химической технологии СО РАН

Исследовано прямое щелочное вскрытие редкометальных руд Томторского месторождения (Россия). Установлено, что процесс вскрытия монацита растворами гидроксида натрия в присутствии различных сопутствующих минеральных компонентов сопровождается выделением водорода и образованием устойчивой пены, заполняющей реактор, и препятствующей удалению опасного газа. Обнаруженное явление уникально, поскольку процесс выделения водорода протекает с высокой скоростью даже при низкой температуре (40°C) и низкой концентрации гидроксида натрия (4 моль/л). По литературным данным выделение водорода может быть связано со щелочным разложением некоторых классов органических веществ [1]. Однако такие процессы протекают при температурах выше 150°C в автоклавных условиях.

Исследование системы с введением различных добавок (пирит, сидерит и др.) не позволил нам установить точную причину газообразования. Предположено, что причиной является длительная радиационная обработка руды при распаде тория и удаления части кислорода из минеральной матрицы руды. Получены косвенные подтверждения этой версии. Показано, что водород выделяется при обработке руды растворами плавиковой кислоты (6-12 моль/л, 50 °C, T:Ж=1:8).

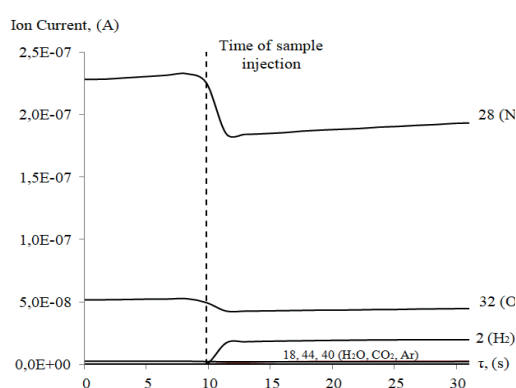


Рис. 1. Результат масс-спектрометрического анализа газовой фазы при вскрытии томторской руды на воздухе (45 % NaOH, t=80°C, T:Ж=1:4).

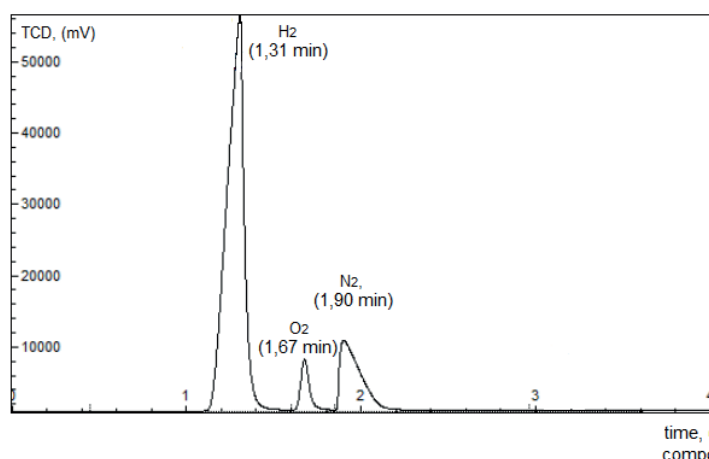


Рис. 2. Хроматограмма газообразных продуктов вскрытия томторской руды в атмосфере азота (45 % NaOH, t=80°C, T:Ж=1:4).

Благодарности:

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта №23-63-10017. Автор выражает благодарность: Кузьмину Д.В., Кузьмину В.И. и Цыгановой С.И.

Литература:

[1] Costine A, Schibeci M, Loh JSC, Power G Understanding the origin and mechanism of hydrogen production in the Bayer process. Proceedings of the 9th International Alumina Quality Workshop, PP. 208-213 (2012).

Секция «Био- и медицинские технологии»

Биохимическая ценность зообентоса озер Верхнеобского и Енисейского бассейновых округов

Андрющенко Светлана Викторовна

Сибирский федеральный университет, Институт биофизики СО РАН

В основе функционирования любой экосистемы лежат потоки вещества и энергии [1]. Кроме продукции биомассы организмов стоит так же учитывать и перенос физиологически важных компонентов, к которым относятся полиненасыщенные жирные кислоты (ПНЖК). Полиненасыщенные жирные кислоты, в частности эйкозапентаеновая (ЭПК) и докозагексаеновая кислоты (ДГК), играют значимую роль в нормальном функционирования нервной и сердечно-сосудистой систем животных и человека [2]. Известно, что незаменимые ПНЖК должны поступать в организм животных с пищей, тогда как зообентос, способный накапливать ЭПК и ДГК за счет питания фитопланктоном, является кормовой базой для многих видов рыб на различных стадиях развития [3].

Сбор проб зообентоса проводили в августе 2023 года озерах Ойское и Собачье и в августе 2024 года озерах Пясино, Белое, Большое, Инголь и Берчикуль. Пробоотбор осуществляли круговым скребком Дулькейта с глубины 0,5 метра. Пробы зообентоса разбирали и фиксировали 80% этанолом для последующей камеральной обработки. Для анализа состава и содержания жирных кислот организмы зообентоса разбирали по систематическим группам, выдерживали в течение суток в емкостях с водой, фиксировали смесью хлороформ: этанола. Анализ метиловых эфиров ЖК проводили на газовом хроматографе с масс-спектрометрическим детектором (модель 7890A/7000 QQQ, «Agilent Technologies», США).

По результатам исследования были определены средняя суточная и годовая продукция и продуктивность зообентоса по сумме ЭПК и ДГК для некоторых озер Верхнеобского и Енисейского бассейновых округов. Так, для озер Ойское и Пясино характеризующихся низкими средними значениями биомассы зообентоса, была отмечена наиболее низкая средняя суточная и годовая продукция и продуктивность зообентоса по сумме ЭПК и ДГК, по сравнению с данными показателями других озер исследования. Средняя суточная и годовая продукция и продуктивность зообентоса по сумме ЭПК и ДГК озера Собачье была сопоставима с таковой озер Инголь и Берчикуль. Наибольшие значения данных показателей были зарегистрированы для озер Белое и Большое, для которых была характерна наибольшая средняя биомасса зообентоса. Таким образом, не смотря на различные трофические статусы озер, местоположение и отношение к разным речным бассейнам наблюдается общая тенденция к увеличению значения продукции и продуктивности зообентоса по сумме ЭПК и ДГК при увеличении средних значений биомассы.

Литература:

- [1] Сущик Н.Н. Журнал общей биологии, Т.69, №.4, С. 299-316 (2008).
- [2] Gladyshev M.I., Sushchik N.N. Biomolecules, V. 9, P. 485 (2019).
- [3] Гладышев М.И и др. Доклады Академии наук, Т. 403, №. 2, С. 277-278 (2005).

Сравнительный анализ эффективности методов обучения нейронных сетей по алгоритмам Forward-Forward и Backpropagation на задаче классификации изображений

Баранчикова Екатерина Евгеньевна

Институт биофизики СО РАН

Создание искусственного интеллекта, не уступающего живым организмам в скорости и эффективности обучения, является одной из ключевых задач в области машинного обучения. Первым шагом на пути к решению этой задачи может стать применение Forward-Forward – алгоритма обучения искусственных нейронных сетей, который был предложен Джеффри Хинтоном в 2022 году [1]. Данный алгоритм является более биологически подобным в сравнении с методом Backpropagation, что может потенциально дать ему некоторые преимущества. Работа посвящена выявлению возможностей алгоритма обучения Forward-Forward и сравнению его с классическим методом Backpropagation [2, 3].

В качестве задачи была выбрана классификация рукописных цифр из базы данных MNIST. В ходе работы было обучено две нейронные сети с двумя скрытыми слоями по 512 нейронов. Обучение осуществлялось на большой выборке (40.000 изображений) и на малых выборках: 50, 100 и 200 изображений. При использовании десятков тысяч изображений нейронная сеть, обученная по алгоритму Forward-Forward, показала точность классификации изображений сопоставимую с Backpropagation. Также было показано, что на малых обучающих выборках скорость роста точности классификации от эпохи обучения выше при использовании метода Backpropagation, однако максимальное значение точности больше при обучении по алгоритму Forward-Forward.

Forward-Forward демонстрирует конкурентоспособные результаты на больших выборках и превосходит Backpropagation при обучении на малых выборках, что делает его перспективным для использования в ситуациях с ограниченным числом данных. Алгоритм Forward-Forward требует дальнейших исследований, в частности в применении его к другим архитектурам искусственных нейронных сетей.

Благодарности:

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта № 23-21-10041 и Красноярского краевого фонда науки №228 от 10.05.2023. Автор выражает благодарность соавтору и научному руководителю Барцеву Сергею Игоревичу (Институт биофизики СО РАН).

Литература:

- [1] Hinton G. arXiv:2212.13345 (2022).
- [2] Rumelhart D. E., Hinton G. E., Williams R. J. Nature, V. 323, PP. 533-536 (1986).
- [3] Барцев С. И., Охонин В. А. Красноярск: Институт физики, 1989.

Биотехнологический синтез сополимерных полигидроксисалканоатов, содержащих мономеры 3-гидроксивалерата и 4-гидроксивалерата, бактериями *Cupriavidus necator* B-10646 и их свойства

Березовская Арина Владимировна

Институт биофизики СО РАН

Широкое использование синтетических полимеров создает глобальную экологическую проблему: скорость их потребления во много раз превышает скорость восполнения запасов ископаемого топлива на основе углерода, вызывая не только серьезный дисбаланс в углеродном цикле, но также приводит к загрязнению биосферы. В настоящее время для решения этой проблемы рассматриваются два пути. Первый – модификация существующих синтетических материалов для придания им способности к разложению в естественных условиях. Однако этот путь требует введения дополнительных этапов в процесс полимеризации, тем самым повышая себестоимость конечного продукта. Более перспективным является разработка новых материалов – биополимеров. Среди перспективных «зеленых» пластиков – полигидроксисалканоаты (ПГА) – разрушаемые полимеры микробиологического происхождения, способные к естественной деградации природной микрофлорой до CO₂ и H₂O без вреда для биоты и окружающей среды в целом. На данный момент самый распространенный, активно изучаемый и, что важно, коммерчески воспроизводимый представитель ПГА – это гомополимер 3-гидроксисалканоатной кислоты (П(ЗГБ)). Однако высокая степень кристалличности (> 70%) и температура плавления (более 179°C), а также хрупкость, вызванная процессами вторичной кристаллизации, и жесткость, значительно ограничивают сферу его применения. Получение сополимеров, содержащих мономеры отличные от 3-гидроксипропионата позволяет преодолеть нежелательные свойства гомополимера.

Настоящее исследование посвящено изучению способности бактерий *Cupriavidus necator* B-10646 к синтезу необычного и малоисследованного типа ПГА, содержащего в качестве мономеров, помимо 3-гидроксипропионата (ЗГБ) и 3-гидроксивалерата (ЗГВ), также мономеры 4-гидроксивалерата (4ГВ) с использованием субстрата-предшественника – левулиновой кислоты, которая является побочным продуктом в деревообрабатывающей промышленности.

Варьируя концентрацию и количество доз субстрата-предшественника а также основного углеродного субстрата, удалось найти условия, обеспечивающие образование мономеров 3- и 4-гидроксивалерата и их включение в С-цепь поли(3-гидроксипропионата) при одновременном сохранении высокого содержания полимера в клетках (до 80%).

Получен набор сополимеров П(ЗГБ-со-ЗГВ-со-4ГВ) с различным содержанием мономеров ЗГВ (30-70 мол.%) и 4ГВ (1-6 мол.%) и изучены их свойства. Показано, что соотношение мономеров ЗГВ и 4ГВ в составе ПГА значительно влияет на их физико-химические свойства, включая молекулярно-массовое распределение, степень кристалличности и температурные свойства.

Автор выражает благодарность научному руководителю Жила Н.О. и коллективу Лаборатории хемоавтотрофного биосинтеза ИБФ СО РАН.

Литература:

- [1] Koller M., Mukherjee A., Chem. Biochem. Eng, V. 34, PP. 115–129 (2020).
- [2] Muzaiyanah A.R., Amirul A.A, Appl. Biochem. Biotechnol, V. 170, PP. 1194-1215 (2013).
- [3] Raza Z.A., Abid S., Int. Biodeter. Biodegr., V. 126, PP. 45-56 (2018).

Генетическая основа биолюминесценции копепод *Metridia longa*

Вяткина Мария Олеговна

Институт биофизики СО РАН

Функциональным скринингом кДНК-библиотеки копепод *Metridia longa* были идентифицированы 15 кДНК генов, кодирующих небольшие высокоактивные белки, обеспечивающие яркое свечение этих рачков путем окисления субстрата целентеразина с излучением голубого света (эмиссионный максимум ~485 нм) [1]. Клонированные кДНК гены изоформ люциферазы *M. longa* быстро нашли широкое применение в качестве высокоактивных биолюминесцентных репортеров для исследований *in vivo* и *in vitro* [2]. Для лучшего понимания возникновения и эволюции биолюминесценции у копепод *M. longa* необходимо изучение геномных последовательностей люцифераз. Интроны, менее подверженные давлению отбора, могут помочь в точной идентификации паралогичных генов. Это позволит лучше понять генетическую основу и пути эволюции биолюминесцентной функции копепод.

В данной работе идентифицированы геномные варианты люциферазных генов *M. longa*. Биоинформатическим анализом полученные гены классифицированы в 4 группы с учетом сходства последовательностей и экзон-интронная структуре, схема которой приведена на рис. 1. Таким образом, в геноме *M. longa* идентифицировано как минимум четыре пары неаллельных паралогичных генов. Анализ последовательностей показал, что люциферазный ген возник на раннем этапе эволюции суперсемейства копепод *Augaptiloidea* путем дупликации небольшой последовательности с интроном внутри, кодирующей около 70 аминокислотных остатков, не имеющих каталитической функции по отдельности [3]. Последующие дупликации и параллельная эволюция паралогов привели к формированию новых изоформ люцифераз, обеспечивающих поддержание высокого уровня биолюминесцентной активности у *M. longa* в резко меняющихся условиях в процессе ежедневных вертикальных миграций.

Кроме того, для сравнения эффективности геномного и кДНК вариантов генов изоформы MLuc7 была проведена транзientная экспрессия в клетках эмбрионального рака почки человека HEK293. Установлено, что оба варианта имеют одинаково высокий уровень биолюминесцентного сигнала с одинаковым уровнем секреции. Это открывает возможность для использования геномного варианта для создания высокостабильных репортерных клеточных линий.

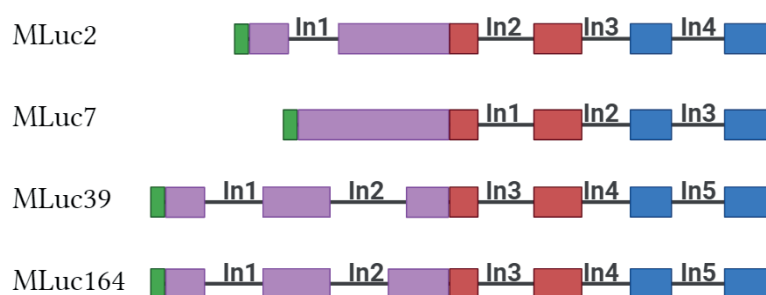


Рис. 3. Схема интронов в генах изоформ люциферазы *M. longa*: зеленый – сигнальный пептид, фиолетовый – вариативный N-конец, красный и синий – 1-й и 2-й повторы, In – интрон.

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 24-44-00009 и гранта FWES-2024-0018 Министерства науки и высшего образования РФ. Автор выражает благодарность своему научному руководителю к.б.н. Марковой Светлане Владимировне.

Литература:

- [1] Markova S.V. et al., Journal of Biological Chemistry, V. 279(5), PP. 3212-3217 (2004).
- [2] Markova S.V. et al., Photochemistry and photobiology, V. 95(3), PP. 705-721 (2019).
- [3] Markova S.V. et. al., Life, V. 13(5), P. 1222 (2023).

Разработка метода определения экспрессии гена CREB3L1 и оценка его диагностического значения у пациентов с хроническими миелопролиферативными заболеваниями

Горбенко Алексей Сергеевич
ФИЦ КНЦ СО РАН

Хронические миелопролиферативные заболевания (ХМПЗ), включая истинную полицитемию, эссенциальную тромбоцитемию и первичный миелофиброз, представляют собой клональные заболевания кроветворной системы, ассоциированные с мутациями генов JAK2, CALR и MPL. Дифференциальная диагностика ХМПЗ и реактивных состояний (реактивной тромбоцитоз, эритроцитоза и др.) часто затруднена на ранних этапах, особенно у пациентов без характерных мутаций (тринегативные случаи). В связи с этим актуален поиск новых молекулярных маркеров, которые упростили бы диагностику ХМПЗ. В исследовании [1] было выявлено резкое повышение уровня мРНК CREB3L1 при эссенциальной тромбоцитемии по сравнению с реактивными тромбоцитозами. Таким образом, анализ экспрессии CREB3L1 в тромбоцитах может служить простым неинвазивным тестом для первичной диагностики ХМПЗ.

Целью исследования было оценить диагностическую значимость уровня экспрессии мРНК гена CREB3L1 в тромбоцитах для обнаружения Ph-негативных ХМПЗ на архивных образцах пациентов с подозрением на ХМПЗ.

В исследование включены архивные образцы кДНК тромбоцитов пациентов, проходивших обследование в 2015 г. по поводу подозрения на ХМПЗ. Основную группу составили образцы 49 пациентов с впоследствии подтверждённым диагнозом Ph-негативного ХМПЗ (истинная полицитемия – 26, эссенциальная тромбоцитемия – 18, первичный миелофиброз – 5 случаев). Среди них у 43 пациентов выявлена мутация JAK2 V617F (медиана аллельной нагрузки 33,5%), у 1 – мутация JAK2 в 12 экзоне, у 1 – сочетанная мутация JAK2 V617F + делеция CALR, и у 3 пациентов драйверные мутации отсутствовали (тринегативные). Группу сравнения составили образцы 65 пациентов, поступивших с реактивными изменениями гемопоэза. Уровень экспрессии CREB3L1 определяли методом количественной ПЦР с обратной транскрипцией (RT-qPCR) в образцах кДНК тромбоцитов, с расчётом относительного содержания транскрипта по методу ΔC_t . Статистическая обработка выполнена с использованием пакета R; различия между группами оценивали непараметрическими тестами, уровень значимости $p < 0,05$.

У пациентов с подтверждённым ХМПЗ выявлен существенно более высокий уровень экспрессии CREB3L1 в тромбоцитах по сравнению с пациентами без ХМПЗ. Медиана относительной экспрессии в группе МПН составила 62,5 (41,4-88,1), тогда как в контрольной группе – 10,0 (5,8-12,1); различие статистически достоверно ($p < 0,0001$). Полученные данные свидетельствуют, что гиперэкспрессия CREB3L1 является специфической чертой клональных тромбоцитов при ХМПЗ, отсутствующей при реактивном повышении кроветворения.

Наше исследование на архивных образцах подтвердило диагностическую значимость CREB3L1 как молекулярного маркера ХМПЗ.

Литература:

[1] Morishita S., Yasuda H., Yamawaki S., et al. CREB3L1 overexpression as a potential diagnostic marker of Philadelphia chromosome-negative myeloproliferative neoplasms // Cancer Sci. 2021;112(2):884-892.

Влияние штаммов дрожжей на качественные характеристики пива

Дружинин Александр Геннадьевич

Красноярский научно-исследовательский институт сельского хозяйства
ФИЦ КНЦ СО РАН

1. Ключевые положения:

Исследовано влияние 4 штаммов *Saccharomyces cerevisiae* (17290, 14061, 9502, 9518) на параметры пива из смеси ячменного солода и немолочёного эммера

Сравнивались два метода пивоварения: ВР1 (длительный процесс) и ВР2 (оптимизированный сокращённый процесс)

Основные анализируемые показатели: фенольный профиль, антиоксидантная активность, содержание летучих соединений, сенсорные характеристики

2. Основные результаты:

По штаммам:

17290: максимальное содержание фенолов (411 мг/л), но высокая кислотность

14061: рекордное содержание фруктовых эфиров (11,26 мг/л)

9502: лучшие сенсорные показатели (оценка 4,5/5), низкая кислотность

9518: высокое содержание терпенов (6,31 мг/л)

По методам:

ВР2 показал преимущество по:

Антиоксидантной активности (2,66 vs 2,23 ммоль Trolox/л)

Сохранению гидроксикоричных кислот

Стабильности пены

3. Практическая значимость:

- Штамм 9502 рекомендован для сбалансированных сортов
- Метод ВР2 оптимален для работы с немолочёными злаками
- Комбинация ВР2+9502 позволяет получить пиво с:
 1. Высокой антиоксидантной активностью
 2. Сбалансированным вкусом
 3. Хорошей пеной

4. Перспективы исследований:

- Изучение комбинаций штаммов
- Оптимизация ферментации для других немолочёных злаков
- Разработка специализированных дрожжевых культур

Литература:

- [1] Tufariello M. et al. (2024). Effects of brewing procedures and oenological yeasts on chemical composition, antioxidant activity, and sensory properties of emmer-based craft beers. *LWT*, 199, 116044.
- [2] Baiano A. et al. (2023). Single and interactive effects of unmalted cereals, hops, and yeasts on quality of white-inspired craft beers. *Beverages*, 9(1), 9.
- [3] Capone S. et al. (2013). Analytical characterisation of Negroamaro red wines by "aroma wheels". *Food Chemistry*, 141(3), 2906–2915.

Сравнение динамических характеристик бактериальных люцифераз методами триптофановой люминесценции

Ерошенко Полина Андреевна

Сибирский федеральный университет

Ранее было показано [1], что бактериальные люциферазы *V. harveyi* и *P. leiognathi* демонстрируют различия в ферментативной активности при вариации температуры (5–45°C). *P. leiognathi* остается активной при более низких температурах, в то время как температурный диапазон *V. harveyi* оказался смещен в область более высоких температур. Также был сделан вывод, что люцифераза *V. harveyi* проявляет бóльшую термостабильность. На основании вышеупомянутых результатов можно предположить, что бактериальные люциферазы данных семейств демонстрируют разные динамические свойства. Для сравнения характеристик бактериальных люцифераз были использованы методы оптической спектроскопии, включающие стационарную и время-разрешенную флуоресценцию, а также фосфоресценцию.

Для оценки жесткости глобулы люцифераз был использован метод триптофановой фосфоресценции при комнатной температуре (RTTP). Были получены спектры и спады интенсивности фосфоресценции деоксигенированных растворов белков при 5–35°C. При 5°C обе люциферазы демонстрировали одинаковую максимальную интенсивность. При 10–35°C интенсивность *V. harveyi* была выше. Из спадов были получены два времени жизни фосфоресценции: 0,15–0,33 и 0,9–5,5 мс. Более длительным было время жизни для *V. harveyi*, что является признаком более жесткого окружения триптофанов внутри белка.

Были получены спады флуоресценции после импульсного возбуждения при 315–400 нм. Были построены время-разрешенные спектры флуоресценции (TRES) для времен 0,1–20 нс после возбуждения. Для каждой температуры изменение центра тяжести TRES белка было описано двумя временами релаксации микроокружения. Получено, что фермент *V. harveyi* характеризуется меньшим временем релаксации при 3–10 нс, чем белок *P. leiognathi*. Это свидетельствует о более жесткой конформации люциферазы *V. harveyi*.

Таким образом, полученные результаты говорят о более жесткой структуре глобулы люциферазы *V. harveyi*, что согласуется с данными о термостабильности люцифераз. Результаты опубликованы в [2].

Автор выражает благодарность Немцевой Е.В. за научное руководство, а также Герасимовой М.А. за помощь в обработке результатов.

Литература:

- [1] Deeva A.A., Lisitsa A.E., Sukovatyi L.A., International Journal of Molecular Sciences, V. 23, №. 15, P. 8119 (2022).
- [2] Nemtseva E.V., Gulnov D.V., Eroshenko P.A., Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics, PP. 1-7 (2025).

Влияние сезона рождения на рост и развитие тёлочек красно-пёстрой породы

Зазнобина Татьяна Вячеславовна, Ефимова Любовь Валентиновна

Красноярский научно-исследовательский институт сельского хозяйства
ФИЦ КНЦ СО РАН

При разведении крупного рогатого скота молочных пород важным технологическим этапом является выращивание ремонтных тёлочек, при этом следует учитывать влияние на их организм не только генетических, но и паратипических факторов. К числу последних относится сезон рождения. По утверждению многих авторов, наилучшими сезонами рождения тёлочек являются осенний и зимний [1-3].

В ОПХ «Курагинское» – филиале ФИЦ КНЦ СО РАН Курагинского района Красноярского края по материалам зоотехнического и племенного учёта с помощью программы «Селэкс» были отобраны тёлочки красно-пёстрой породы, которых распределили на 4 группы по 10 голов в каждой в зависимости от сезона рождения (зима, весна, лето, осень).

В результате исследований установлено, что тёлочки, рождённые осенью, достоверно превосходили тёлочек, рождённых зимой, по живой массе в возрасте 6 и 12 месяцев на 14,1 и 28,3 кг соответственно ($p < 0,01$) (табл. 1).

Таблица 1. Показатели живой массы тёлочек, кг

Возраст	Сезон рождения			
	зима	весна	лето	осень
	1	2	3	4
при рождении	33,9±0,91	35,1±0,11	35,0±0,03	35,0±0,05
6 мес.	162,1±3,37*(2)**(4)	171,8±2,15	168,6±4,79	176,2±3,50
12 мес.	271,8±5,98*(2)**(3,4)	290,1±4,41	294,6±5,60	300,1±7,11
18 мес.	434,6±13,13	429,0±8,94	424,0±5,74	432,6±9,48

* $p < 0,05$; ** $p < 0,01$; *** $p < 0,001$, здесь и далее.

Наибольшими абсолютным, среднесуточным и относительным приростами в период с 12 до 18 месяцев характеризовались тёлочки, рождённые зимой. Разница с тёлочками, рождёнными осенью и летом, по абсолютному приросту составила 30,4 и 33,5 кг ($p < 0,05$), по среднесуточному – 166,4 и 183,4 г ($p < 0,01$); по относительному приросту разница была с тёлочками всех сезонов рождения – 7,5...9,8 % ($p < 0,05$; 0,001).

Дисперсионным анализом подтверждено достоверное влияние сезона рождения на живую массу тёлочек в возрасте 12 месяцев ($\eta^2 = 28,1$ %, $p < 0,01$), на показатели абсолютного, среднесуточного и относительного приростов в возрасте от 12 до 18 месяцев ($\eta^2 = 30,2...40,9$ %, $p < 0,01...0,001$).

Таким образом, при выращивании тёлочек от рождения до 18-месячного возраста для увеличения интенсивности их роста и развития рекомендуется планировать проведение отёлов коров в осенне-зимний период года.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования России, номер государственного учёта НИОКТР: 122031400484-7.

Литература:

- [1] Игнатъева Н. Л., Андреева С. Г. Влияние различных факторов на показатели роста телят. Научно-образовательные и прикладные аспекты производств аи переработки сельскохозяйственной продукции: сб. мат-лов VIII Международной научно-практической конференции. Чебоксары, С. 395-402 (2024).
- [2] Мельникова Н. В., Неверова О. П. Технология выращивания молодняка в зависимости от сезона рождения. Молодежь и наука, № 5-6, С. 46 (2019).
- [3] Садыков М. М., Симонов Г. А., Садыков Р. М., Зейналова З. Г. Влияние сезона рождения на продуктивность тёлочек калмыцкого скота. Известия Дагестанского ГАУ, № 1(17), С. 138-144, DOI: 10.52671/26867591_2023_1_138 (2023).

Биотестирование и биотрансформация оксоанионов селена светящимися бактериями

Зеньков Андрей Валерьевич

Институт биофизики СО РАН

Селен является микроэлементом, но в виде водорастворимых оксоанионов – селенатов и селенитов – он токсичен. Селеновые биогеохимические аномалии (антропогенные или природные) оказывают негативное влияние на экосистемы и здоровье человека [1], поэтому важен контроль (биотестирование и биоремедиация) таких аномалий.

Ряд микроорганизмов способны к химическому восстановлению селенатов и селенитов, то есть имеют потенциал для биоремедиации и сопутствующего биосинтеза наночастиц селена. Люминесцентные бактерии перспективны в этом направлении. Нами впервые была описана реакция люминесцентных бактерий *Photobacterium phosphoreum* на селенит натрия и его биологическая трансформация.

Обнаружено изменение интенсивности бактериального свечения при биотестировании. Наблюдался рост интенсивности люминесценции при концентрациях 10^{-7} – $5 \cdot 10^{-4}$ М и уменьшение его (токсический эффект) при $>10^{-4}$ М Na_2SeO_3 . Эффективная концентрация Na_2SeO_3 EC_{50} составила 10^{-3} М. Таким образом, люминесцентные бактерии можно использовать для биотестирования сред с избытком анионов селена.

После воздействия селенита натрия (24 часа) методами электронной микроскопии обнаружены наноструктуры внутри клеток и околоклеточном окружении. Энергодисперсионный анализ показал высокое содержание селена в этих наноструктурах. Спектроскопия комбинационного рассеяния показала, селен в наночастицах имеет аллотропную модификацию (пик на 248 см^{-1} , Рис. 1).



Рис. 1. Спектр комбинационного рассеяния света биомассы *Photobacterium phosphoreum* после 24-часового воздействия селенита натрия (5 мМ).

Таким образом, люминесцентные бактерии обладают высоким потенциалом для биотрансформации селена, что важно для экологической биотехнологии и бионанотехнологии. Одновременно эти бактерии могут быть использованы в качестве традиционного биотеста благодаря их чувствительности к оксоанионам селена.

Исследование было поддержано Российским научным фондом и Красноярским краевым и Красноярским региональным фондом науки (грант № 24–24–20001).

Литература:

[1] Ермаков В.В., Ковальский В.В. (1974). Наука, 300 с.

Природные подкормки в рационе крупного рогатого скота

Иванов Евгений Анатольевич, Терещенко Вера Александровна, Любимова Юлия Германовна

Красноярский научно-исследовательский институт сельского хозяйства – обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН

Цель исследований – изучение влияния бентонитовой глины и вспученного вермикулита на молочную продуктивность коров. Продолжительность опыта составляла 100 дней, исследования выполнялись в ОПХ «Михайловское» – филиале ФИЦ КНЦ СО РАН Красноярского края на коровах черно-пестрой породы. Для опыта было сформировано три группы животных (контрольная и две опытные) по 10 голов. Контрольная группа получала основной рацион, 1-я опытная группа в дополнение к основному рациону получала бентонитовую глину (150 г/гол/сут.), 2-я – вспученный вермикулит (150 г/гол/сут.). В процессе исследования учитывали удой животных, проводили анализ биохимического состава крови и определяли сыропригодность молока.

В результате исследований установлено, что удой коров 1-й опытной группы был наибольшим и составлял 2131,44 кг, что достоверно превышало контроль на 2,5 % ($P>0,95$). Количество жира и белка в молоке подопытных коров между группами значительно не отличались, разница составляла до 0,1 % и 0,04 % соответственно. Показатели биохимического состава крови в конце опыта соответствовали норме для лактирующих коров и не имели существенных различий межгрупповых различий.

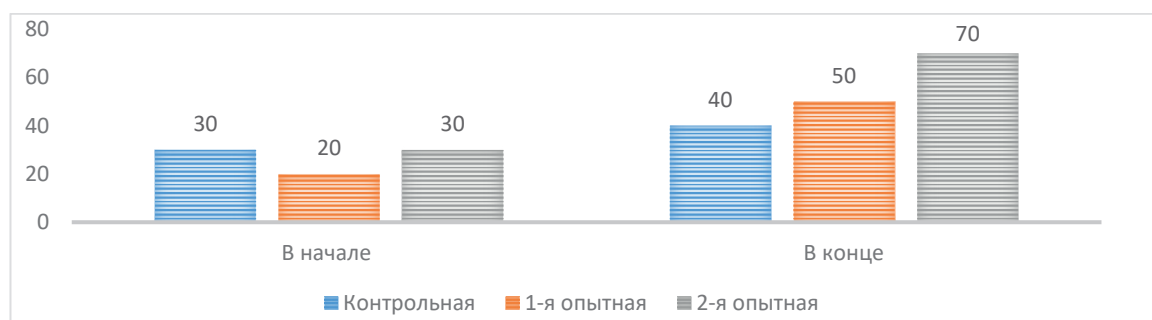


Рисунок – Распределение молока коров по классам сыропригодности, %

В результате исследований молока на сыропригодность (рисунок 1), установлено, что в начале опыта по 30 % проб молока в контрольной и 2-й опытной групп относилось к I классу для сыропригодности, тогда как в 1-й опытной группе этот показатель был равен 20 %. В конце опыта доля проб молока, относящихся к I классу для сыропригодности, во всех группах увеличилась на 10-40 %. При этом наибольшее количество проб молока I класса (70 %) было во второй опытной группе, тогда как в контрольный аналогичный показатель не превышал 40 %.

Таким образом в результате проведенных исследований установлено, что дополнительное введение в рацион коров бентонитовой глины положительно повлияло на молочную продуктивность коров. Лучшие результаты отмечались в 1-й опытной группе при скормливания коровам бентонитовой глины: удой увеличился на 2,5 % ($P>0,95$), а также в опытных группах улучшились показатели сыропригодности молока.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках проекта № 0356-2019-0003.

Сравнение состава и содержания жирных кислот в мышечной ткани карпа и сазана (*Cyprinus carpio*), выращенных в условиях аквакультуры и обитающих в естественных водоёмах

Карпов Владимир Алексеевич

Институт биофизики СО РАН, Сибирский федеральный университет

Традиционно, основным источником полиненасыщенных жирных кислот (ПНЖК) считаются рыбы, прежде всего, лососевые, однако, ввиду своей высокой стоимости и недостатка в объёмах вылова и выращивания, другие представители пресноводной фауны, вылавливаемые/выращиваемые в большем объеме, становятся потенциальными источниками ЭПК (эйкозапентаеновая кислота) и ДГК (докозагексаеновая кислота). Кроме видовой специфичности, существуют мнения о том, что рыбы, выращенные в условиях аквакультуры и рыбы из естественных экосистем будут иметь существенные отличия [1]. В свою очередь, даже в условиях аквакультуры наблюдается существенная вариабельность содержания ЭПК и ДГК в мышечной ткани. Так, для карпа вариабельность составляет от 1,4 до 3,8 мг/г ЭПК и от 3,8 до 10,1 мг/г ДГК (сухой массы) [2]. Это делает карпа потенциальным источником ПНЖК для человека.

Цель работы – сравнить состав и содержание жирных кислот (ЖК) в мышечной ткани (филе) карпов из естественных водоёмов и аквакультуры.

Объектом нашей работы послужили карпы и сазаны *Cyprinus carpio* (Linnaeus, 1758) товарного размера из естественных водоёмов и аквакультурных хозяйств. Для всех особей был проведён полный биологический анализ и пробы мышечной ткани для проведения биохимического анализа. Определение состава и содержания ЖК в мышечной ткани особей проводилось с использованием метода газовой хроматографии и масс-спектрометрии.

В результате исследования выявлено, что рацион карпа из аквакультурных хозяйств и сазана из естественных водоёмов отличается, что, в свою очередь, сказывается на составе жирных кислот и биохимической ценности мышечной ткани этих рыб.

Сазаны из естественных водоёмов (Красноярское водохранилище и оз. Сосновое, республика Хакасия) содержали от 1,1 до 1,7 мг/г (сырой массы) ЭПК и ДГК, а соотношение n-3/n-6 имело значение более 1, что делает сазана из аквакультуры ценным источником омега-3 ПНЖК.

В естественных экосистемах Сибири численность сазана невысокая. Чтобы уменьшить нагрузку на природные запасы этой рыбы и обеспечить людей полезной рыбной продукцией, необходимо развивать аквакультуру карпа с использованием современных и правильно разработанных кормов.

Литература:

- [1] Gladyshev M.I., Makhrov A. A., Baydarov I.V., Biomolecules, V. 12, PP. 144 (2022).
- [2] Schultz S., Koussoroplis A. M., Changizi-Magrhor Z., Aquaculture Research, V. 46, PP. 2174-2184 (2015).

Сравнительная характеристика технологического качества зерна пшеницы сортов сибирской и зарубежной селекции

Козулина Наталья Станиславовна, Бобровский Александр Владимирович, Василенко Альбина Владимировна, Герасимова Наталья Сергеевна, Степаненко Наталья Ивановна

*Красноярский научно-исследовательский институт сельского хозяйства
ФИЦ КНЦ СО РАН*

Главным направлением сельскохозяйственных производителей является обеспечить пищевую промышленность качественным зерном, для получения муки с высокими хлебопекарными свойствами [1].

В следствие многолетней работы по созданию новых сортов пшеницы в Сибири и Красноярском крае были получены сорта, обладающие полезными свойствами, которые могут быть более перспективными для производства отечественной муки и хлебобулочных изделий из нее, как альтернатива импортной муке [2, 3, 4].

Исследования проводились в лаборатории оценки технологических качеств зерна КрасНИИСХ, ФИЦ КНЦ СО РАН на основании ГОСТ 9353-2016. Цель исследования - выявить и сравнить технологические качества зерна яровой мягкой пшеницы сибирской и зарубежной селекции. Объект исследования - зерно и мука из сортов яровой пшеницы сибирской селекции (Красноярская 12, Канская, Бейская, Свирель) и иностранной (Аквилон, Джетстрим, Сансет, Торридон) селекции. Задачи исследования проведение оценки технологических качеств зерна пшеницы сибирской и зарубежных сортов. Полученные результаты показывают, что зерно сорта сибирской селекции Красноярская 12 имеет максимальное содержание белка (16,99%) и количество клейковины (50,52%), что позволяет получить наибольшую хлебопекарную способность и объем хлеба (600 см³) в сравнении с другими исследуемыми сортами. По показателю объем хлеба выделились сорта сибирской селекции Бейская и Свирель и сорт иностранной селекции Сансет с показателем 590 см³. Максимальная натура зерна отмечена у сорта Аквилон – 826 г/л, по этому показателю он превзошел сорта Красноярская 12 и Джетстрим на 28 г/л и на 15 г/л, соответственно. Сорта яровой пшеницы сибирской селекции не уступают по многим технологическим показателям качества зерна качеству зарубежной пшеницы и могут быть рекомендованы для широкого использования в пищевой промышленности.

Литература:

- [1] Барковская Т.А., Гладышева О.В., Кокорева В.Г. Оценка потребительских свойств зерна селекционных линий яровой мягкой пшеницы // Аграрная наука Евро-Северо-Востока. 2021;22(2):204-211.
- [2] Руднев С. Д., Мещанинов А.В., Иванов В.В., Крюк Р.В. О влиянии структурообразования теста при замесе на реологические свойства хлеба // Хранение и переработка сельхозсырья. 2019. № 3. С. 124-137. DOI 10.36107/spfp.2019.146.
- [3] Shewry, P. R. What do we really understand about wheat gluten structure and functionality? // Journal of Cereal Science. 2024. Vol. 117.
- [4] Асеева Т.А., Зенкина К.В., Ломакина И.В., Рубан З.С. Технологические и хлебопекарные свойства зерна яровой мягкой пшеницы // Вестник Дальневосточного отделения Российской академии наук. 2020. № 4(212). С. 14-19.

**Сезонные тренды популяции ручейников *Apatania crytophila*,
ассоциированных с водным мхом, на модельном участке р. Енисей**
Коновалова Дарья Андреевна
Институт биофизики СО РАН

Водный мох – вечнозелёный макрофит, который вегетирует в Енисее круглый год, образуя среду обитания для беспозвоночных гидробионтов – бриофауны. В среднем течении реки Енисей на водном мхе была зарегистрирована высокая численность личинок ручейников *Apatania crytophila* McLachlan, 1880, которые являются одним из основных компонентов питания ценной промысловой рыбы – хариуса. Причины доминирования личинок ручейников этого вида в бриофауне Енисея пока не ясны, однако очевидно, что беспозвоночные водного мха, в том числе ручейники, вносят вклад в потоки вещества в экосистеме среднего Енисея, при этом возрастная структура популяции и сезонная динамика количественных показателей этих насекомых остаются практически неизученными.

Цель данной работы – изучить сезонные тренды популяции личинок ручейников *A. crytophila* на водном мхе на модельном участке среднего течения р. Енисей, где водный мох является единственным представителем погруженных макрофитов.

Пробы сообщества беспозвоночных водного мха (водная бриофауна) и пробы беспозвоночных минерального грунта (зообентос) собирали в р. Енисей в июне-ноябре 2022-2023 гг. на расстоянии около 19 км ниже плотины Красноярской ГЭС на участке, где из-за влияния вод, сбрасываемых ГЭС, температура воды летом не превышает 13 °С, а зимой не формируется ледяной покров. Для определения биомассы популяции личинок на водном мхе возникла необходимость получения размерно-весовых зависимостей, ввиду большой численности выборок. Анализ зависимостей между линейными размерами домика, а также ширины головной капсулы и массой личинок показал, что связь массы личинок с длиной домика является наиболее сильной и статистически значимой и описывается линейной зависимостью $y = 0.36x - 1.11$ ($R^2 = 0.74$, $p < 0.001$). Для изучения возрастной структуры популяции ручейников был предложен способ разделения личинок на возрастные группы, основанный на математическом разделении выборки на размерные классы по длине домиков. Изучение сезонной динамики личинок ручейников на водном мхе и на галечном дне показало, что популяции достигали максимума численности и биомассы в октябре, что отличается от популяции вида в естественных водоёмах с неизменённым термическим режимом, где максимум этих показателей приходится на август [1]. В р. Енисей было отмечено два поколения личинок, в то время как у популяции личинок этого вида в неизменённых естественных условиях отмечается лишь одно поколение [1]. Сезонная продукция личинок ручейников на водном мхе в 2023 году была в два раза выше, чем в 2022 году, что, возможно, обусловлено аномально низким уровнем воды в реке в 2022 году. Таким образом, мы предполагаем, что изменённый термический режим в р. Енисей, вероятно, способствует массовому развитию ручейников *A. crytophila*.

Литература:

[1] Irons J. G. Canadian Journal of Zoology, V. 66, PP. 1258-1265 (1988).

Влияние длины пептидной цепи на биолюминесцентные свойства химерных фотопротеинов гидромедуз

Коновалова Ольга Вячеславовна

Сибирский федеральный университет

Ca^{2+} -регулируемые фотопротеины гидромедуз образуют стабильный комплекс апобелка с целентеразином. Ионы кальция связываются в EF-hand петлях, запуская реакцию биолюминесценции. Фотопротеины гидромедуз отличаются друг от друга по свойствам и находят широкое применение в анализе. На примере белка «Photina» была показана возможность создания фотопротеинов с улучшенными характеристиками [1]. Предполагается, что в рациональном дизайне влияние на белок может также оказывать длина аминокислотной цепи. Ранее было показано, что укорочение N-конца акворина не влияет на его биолюминесцентную активность [2], тогда как модификация С-концевого участка отрицательно сказывается на стабильности фотопротеинов [3], за исключением удаления С-концевого Туг у митрокомина [4]. При этом влияние изменения длины аминокислотной цепи в центральной ее части исследовано не было. В предыдущих экспериментах нами были получены два варианта экспрессионных конструкций, содержащих гены акворина с заменой II EF-hand на таковой митрокомина (AVI-MCII-AVII-IV) и с обратной заменой (MCI-AVII-MCIII-IV). Анализ свойств этих белков показал их низкую функциональность. Длина полипептидных цепей этих белков отличалась от таковых фотопротеинов дикого типа на три аминокислотных остатка (Рис. 1), что, по нашему предположению, могло являться основной причиной их дисфункциональности.

	76	86	96	106
AVI_MCII_AVIII_IVcorr	QKC	VEDFFGGAGLE	EYDKDTTWPEYIEGWKR	---LASEELK
AVI_MCII_AVIII_IV	QKC	VEDFFGGAGLE	EYDKDTTWPEYIEGWKR	LAKLASEELK
AV7	KDA	VEAFFGGAGMKY	GVETEWPEYIEGWKR	---LASEELK
MCI_AVII_MCIII_IVcorr	KDA	VEAFFGGAGMKY	GVETEWPEYIEGWKR	---LAKTELE
MCI_AVII_MCIII_IV	KDA	VEAFFGGAGMKY	GVETEWPEYIEGWKR	---L---ELE
MC2	QKC	VEDFFGGAGLE	EYDKDTTWPEYIEGWKR	---LAKTELE

Рис. 1. Фрагмент аминокислотных последовательностей химер и белков дикого типа.

Целью работы являлась оптимизация размера двух ранее созданных генноинженерных конструкций на основе акворина и митрокомина для повышения биолюминесцентной активности и стабильности кодируемых ими химерных белков.

В данной работе с помощью сайт-направленного мутагенеза была проведена коррекция нуклеотидных последовательностей генов химер, в результате чего функциональность химерных фотопротеинов была восстановлена, а их свойства проанализированы. Таким образом, получены два варианта химерных белков с новыми характеристиками.

Литература:

- [1] Bovolenta S. et al., Journal of Biomolecular Screening, V. 12, PP. 694-704 (2007).
- [2] Malikova N.P. et al., Photochemistry and Photobiology, V. 98, PP. 276-284 (2022).
- [3] Eremeeva E.V. et al., Photochem. Photobiol. Sci., V. 13, PP. 541-547 (2014).
- [4] Burakova L.P. et al., J Photochem. Photobiol. B: Biology, V. 162, PP. 286-297 (2016).

Влияние питательной среды на спорообразование Сибирских штаммов грибов *p. Fusarium*

Кукушкина Кристина Владимировна

*Красноярский научно-исследовательский институт сельского хозяйства
ФИЦ КНЦ СО РАН*

Грибы *p. Fusarium* являются одними из наиболее распространённых и вредоносных возбудителей болезней сельскохозяйственных растений, а способность к продуцированию микотоксинов делает представителей данного вида опасными также для человека и сельскохозяйственных животных [1]. Для борьбы с представителями *p. Fusarium* применяют целый спектр методов защиты растений. [2]. Однако в лабораторных условиях способность представителей *p. Fusarium* к продуцированию конидий в значительной степени зависит от состава питательной среды [3].

Объектами исследования служили 11 штаммов *Fusarium spp*, выделенные из корней и зерна пшеницы урожая 2021 года. В качестве питательных сред использовали среду №2 ГРМ (далее среда Сабуро), среду Чапека-Докса и картофельно-сахарозный агар (далее среда КСА). По истечению 7-ми суток после посева проводили смыв с поверхности выросших культур и определяли образование макро- и микроконидии в полученных суспензиях [4].

Таблица 1. Образование макро- и микроконидии протестированных штаммов на питательных средах (количество штаммов)

Питательная среда	Макроконидии	Микроконидии	Макро- и микроконидии
Чапека- Докса	10	11	10
Сабуро	4	5	4
КСА	7	7	5

Из трёх изученных сред образование конидий у всех протестированных штаммов обеспечила только среда Чапека-Докса. На этой среде 10 штаммов из 11 сформировали как макро- так и микроконидии, 1 штамм сформировал только микроконидии. На втором месте по способности индуцировать образование конидий находится среда КСА, на которой 5 штаммов из 11 сформировали макро- и микроконидии. Минимальную способность индуцировать образование конидий продемонстрировала среда Сабуро, на которой лишь 4 штамма из 11 сформировали макро- и микроконидии.

Литература:

- [1] Mirmajlessi S. M. (ed.). *Fusarium: An Overview of the Genus.* – 2022. <https://www.intechopen.com/books/10904>
- [2] Bakker M. G. et al. *Fusarium mycotoxins: A trans-disciplinary overview* // *Canadian Journal of Plant Pathology.* – 2018. – Vol. 40. – No. 2. – pp. 161-171. <https://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/07060661.2018.1433720#d1e279>
- [3] Астапчук И. Л., Марченко Н. А., Якуба Г. В., Насонов А. И. Подбор оптимальной среды для культивирования *Fusarium sporotrichioides* Sherb // *Современное состояние, проблемы и перспективы развития аграрной науки.* 2020. – С. 17.
- [4] *Practical training in microbiology: textbook. the manual* // Edited by A. I. Netrusov. Moscow: Akademiya, 2005. 608 p.

Дисбаланс системы «перекисного окисления липидов-антиоксидантной защиты» в зависимости от носительства вариантов гена HFE (rs1800562, rs1800730 и rs1799945) у пациентов с неалкогольной жировой болезнью печени

Лагутинская Дарья Владимировна

Научно-исследовательский институт медицинских проблем Севера

НИИ МПС ФИЦ КНЦ СО РАН

Неалкогольная жировая болезнь печени (НАЖБП) в настоящее время является одним из самых распространенных хронических заболеваний печени. Ее патогенез является комплексным и включает в себя взаимодействие внешних факторов, таких как образ жизни, так и внутренних, например, наследственность [1]. В последние годы, роль метаболизма железа и его влияния на состояние ПОЛ-АОЗ изучается весьма активно. Процесс ферроптоза, связанный с нарушением метаболизма железа и работы системы антиоксидантной защиты в настоящее время рассматривается как один из маркеров неблагоприятного прогноза при НАЖБП. В качестве фактора изменений метаболизма железа могут быть рассмотрены варианты гена *HFE* (rs1800562, rs1800730 и rs1799945), влияющие на одноименный регуляторный белок и связанные с усилением абсорбции железа гепатоцитами. Целью работы стало изучение влияния вариантов гена *HFE* (rs1800562, rs1800730 и rs1799945) на работу системы ПОЛ-АОЗ у пациентов с НАЖБП и здоровых добровольцев [2, 3].

Для исследования были отобраны 52 пациента с НАЖБП и 72 здоровых добровольцев. Генотипирование проводилось с использованием метода ПЦР-РВ. Показатели системы ПОЛ-АОЗ (МДА, СОД, каталаза и церулоплазмин) в плазме оценивались с использованием спектрофотометрических методов. Статистическая обработка данных осуществлялась в программах Statistica 10 и SPSS 26.

У пациентов с НАЖБП отмечалось снижение активности каталазы в сравнении со здоровыми добровольцами в 4 раза ($p < 0,001$), однако, это снижение не имело связи с носительством вариантов гена *HFE*. У пациентов с НАЖБП отмечалось повышение уровня церулоплазмينا в 1,5 раза в сравнении с контрольной группой ($p < 0,05$), которое не было связано с носительством определенного варианта гена *HFE*. Изменения в активности СОД и концентрации МДА при сравнении групп между собой отмечено не было.

Таким образом, у пациентов с НАЖБП был обнаружен дисбаланс в работе системы ПОЛ-АОЗ: уменьшение активности каталазы на фоне возрастания концентрации каталазы в плазме, которое не было связано с носительством определенного варианта гена *HFE*. Вероятно, изменение активности белка *HFE* не влияет на изученные нами звенья системы ПОЛ-АОЗ.

Благодарности:

Исследование выполнено в рамках Госзадания №124020100066-0. Автор выражает благодарность научному руководителю профессору, д.м.н. Смирновой О.В. (НИИ МПС).

Литература:

- [1] Juanola O., Martinez-Lopez S. et.al. International Journal of Environmental Research. V. 18, № 10. P. 5227. (2021).
- [2] Wang Z., Liu J., et al. Biomedicine & Pharmacotherapy. T. 153. C. 113374. (2022).
- [3] Tan T., Crawford D. et al. American Journal of Physiology-Gastrointestinal and Liver Physiology. V. 301, № 5. PP. G865-G876. (2011).

Фитопатогенная активность штаммов грибов рода *Fusarium*, ассоциированных с пшеницей

Литовченко Ангелина Николаевна

Красноярский НИИСХ – обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН;
ФГБОУ ВО Красноярский ГАУ

Грибы рода *Fusarium* — это токсинообразующие грибы, которые широко распространены в природе и являются возбудителями заболеваний более 200 видов культурных растений, а также животных и человека. Присутствуя в зерне в больших количествах, они делают его непригодным для использования на пищевые и кормовые цели [1]. Проведенная нами фитопатологическая экспертиза зерна пшеницы сорта Красноярская 12 урожая 2023 г. выявила наличие в нем микромицетов родов *Fusarium*, *Alternaria*, *Bipolaris*, *Penicillium*, ***Epicoccum*** (Рис.1А). Штаммы грибов р. *Fusarium* были выделены в чистую культуру и идентифицированы до вида или комплекса видов по морфолого-культуральным признакам [2-4]. Также в ходе исследования отсеивали штаммы р. *Epicoccum*, представители которого являются потенциальными агентами биозащиты зерновых от патогенов. В данном эксперименте модифицированным методом Челковского-Манки [5] на проростках пшеницы сорта Красноярская 12 проверяли фитопатогенную активность 8 штаммов р. *Fusarium* (*F.sporotrichioides* – *F.n.n.*; *F.poa* – П 6.1, П 7.1, П 9.1, П 11.1; комплекс видов *F.tricinatum* – П 1.2, П 1.3, П 2.1, П 4.1) и 1 штамма р. *Epicoccum*. Оценивали длину проростка (патогенность) и наличие некроза корней (агрессивность) по сравнению с контролем.

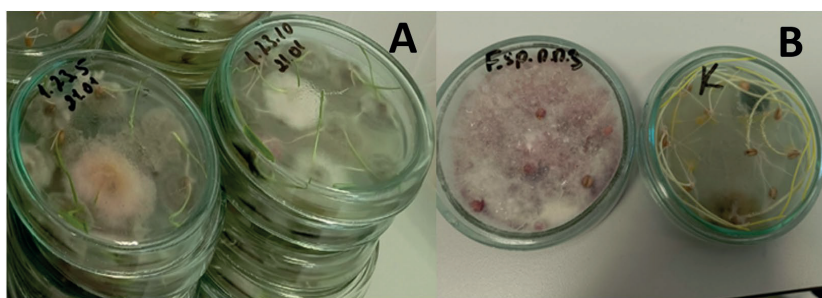


Рис.1. – А – фитопатологическая экспертиза зерна пшеницы; В – оценка фитопатогенная активности штаммов

Изученные сибирские штаммы грибов р. *Fusarium* в различной степени достоверно ингибировали ростовые процессы у проростков пшеницы. Максимальная фитопатогенная активность была отмечена для комплекса видов *Fusarium sambucinum* (штаммы ***F.n.n.***, П 6.1, П 7.1), в меньшей степени – у штаммов, принадлежащих к комплексу *Fusarium tricinctum*. Так, например, как видно на Рис.1В, штамм ***F.n.n. F.sporotrichioides*** полностью подавлял развитие проростков пшеницы в сравнении с контрольным вариантом. В то же время штамм р. ***Epicoccum*** стимулировал рост корней, они были достоверно длиннее, чем в остальных вариантах опыта.

Литература:

- [1] Гагкаева Т.Ю., Гаврилова О.П., Левитин М.М., Новожилов К.В. Защита и карантин растений, № 5, С. 70-120 (2011).
- [2] Шипилова Н.П., Иващенко В.Г. Систематика и диагностика грибов рода *Fusarium* на зерновых культурах, Санкт-Петербург: Всероссийский научно-исследовательский институт защиты растений РАСХН, 2008.
- [3] Booth C. The genus *Fusarium*, Common wealth Mycological Institute, Kew, Surrey, England, 1971.
- [4] Gerlach W., Nirenberg H. The genus *Fusarium* – a Pictorial Atlas, Berlin: Mitt. Biol. Bundesanst. Ld, 1982.
- [5] Соколова Г.Д. Микология и фитопатология, Т. 34, № 2, С. 63–66 (2000).

Влияние микроволнового метода обработки семян на распространение корневых гнилей Пшеницы Новосибирская 15

Максимова Анастасия Алексеевна, Тарханова Ольга Алексеевна

*Красноярский научно-исследовательский институт сельского хозяйства,
ФИЦ КНЦ СО РАН*

В Красноярском крае каждый год возрастает вред от корневых гнилей; при этом в последние годы, наравне с традиционными возбудителями этого заболевания (видов р.р. *Bipolaris* и *Fusarium*), в патогенном комплексе выросла доля участия грибов р. *Alternaria* [1-3]. Огромная часть территории Красноярского края находится в условиях слабой самоочищающей способности почвы и приземных слоев атмосферы, становится безусловным значением выбора из числа существующих такого приема, который способен отвечать требованиям как высокой производительности, так и биоэкологической безопасности. На фоне зараженности семян разработанная специальная технология СВЧ – обеззараживания семян яровой пшеницы, в силу своей результативности и экологичности – востребована [1]. По результатам фитоэкспертизы семян пшеницы Новосибирская 15 без обработки установлено, что состав фитопатогенных микроорганизмов представлен грибами р. *Bipolaris* (5,5%), р. *Fusarium* (4,5%), р. *Alternaria* (38,5%), бактериоз 2,5%. При этом общее число пораженных семян составило 48,0 %, всхожесть составила 83,5% (табл. 1).

Таблица 1 - Результаты фитоэкспертизы семян пшеницы Новосибирская 15 методом рулонов без обработки.

№	Число семян	Всхожесть, %	Число пораженных, %	Доля семян, %, зараженных:			
				р. <i>Bipolaris</i>	р. <i>Fusarium</i>	р. <i>Alternaria</i>	бактериоз
1	100	80	45	5	5	39	2
2	00	87	51	6	4	38	3
среднее		83,5	48,0	5,5	4,5	38,5	2,5

По результатам фитоэкспертизы семян пшеницы Новосибирская 15, обработанные микроволновым методом установлено, что зараженность грибами р. *Bipolaris* составила 2,5%, что на 3 процентных пункта ниже, чем без обработки. Зараженность грибами р. *Fusarium* составила 0,6%, что на 3,9 процентных пункта ниже по сравнению с контрольным вариантом. Зараженность грибами р. *Alternaria* составила 4,5%, что на 34 процентных пункта ниже по сравнению с контрольным вариантом. Зараженность бактериозом составила 1,5 %, что на 1 процентных пункта ниже по сравнению с вариантом без обработки (табл. 2).

Таблица 2 - Результаты фитоэкспертизы семян пшеницы Новосибирская 15, обработанные микроволновым методом.

№	Число семян	Всхожесть, %	Число пораженных, %	Доля семян, % зараженных:			
				р. <i>Bipolaris</i>	р. <i>Fusarium</i>	р. <i>Alternaria</i>	бактериоз
1.	100	78	14	2	0	3	1
2.	100	84	12	3	1	6	2
среднее		81,0	13,0	2,5	0,6	4,5	1,5

Таким образом, полученные результаты позволяют заключить, что обработка семян микроволновым методом помогает в борьбе против возбудителей корневых гнилей таких как р. *Fusarium*, р. *Alternaria* и р. *Bipolaris*. Так же стоит отметить, что обработка микроволновым методом благоприятно влияет на всхожесть растений, так как обработанные семена меньше угнетаются возбудителями корневых гнилей.

Автор выражает благодарность соавторам работы: Тархановой Ольге Алексеевне.

Литература:

- [1] Василенко А.А. Влияние параметров СВЧ-поля на зараженность семян пшеницы грибами р. *Alternaria*. 2015, 18-20 с.
- [2] Василенко А.В. Комплексная оценка влияния микроволнового нагрева на фитосанитарное состояние зерна ячменя: на примере доминирующих видов возбудителей в лесостепной зоне Красноярского края. 2009, 57 с.
- [3] Фадеев, Ю.Н. и др. Защита зерновых культур от корневых гнилей: Рекомендации / Ю.Н. Фадеев [и др.]. – М.: Агропромиздат, 1986. – С. 36.

Морфология пыльцы сибирских шелковников (Ranunculus sect. Batrachium, Ranunculaceae) в световом и сканирующем электронном микроскопах

Минаков Илья Дмитриевич

Институт биофизики СО РАН

Водяные лютики (*Batrachium*) являются одной из самых распространённых групп макрофитов в сибирских водных объектах. Между тем эта секция внутри рода *Ranunculus* является таксономически сложной за счёт частой гибридизации и высокой фенотипической изменчивости [1]. Палинологические признаки часто оказываются полезны при решении ряда таксономических вопросов, особенно при идентификации гибридов [2]. Однако, для большинства видов шелковников эти данные отсутствуют, в том числе и для сибирских.

Материалами для исследования послужили растения, идентифицированные (в том числе с привлечением методов молекулярной генетики) как пять встречающихся на территории Сибири видов: *Ranunculus circinatus* Sibth., *Ranunculus subrigidus* W. B. Drew, *Ranunculus trichophyllus* Chaix, *Ranunculus kauffmannii* P. Clerc, *Ranunculus mongolicus* (Krylov) Serg. Всего было изучено 23 популяций этих видов из Красноярского края, Новосибирской области, Алтайского края и республики Алтай. Пыльца исследуемых образцов извлекалась из гербаризованных цветков, окрашивалась йодным методом и просматривалась под световым микроскопом для получения первичных данных о её фертильности и морфологии. В целях уточнения особенностей микроструктуры, пыльцевые зёрна также изучались на базе КРЦКП СО РАН с помощью сканирующего электронного микроскопа Hitachi TM4000Plus с напылением платины. В пределах одного поля зрения рассчитывалось процентное соотношение нормальной и дефектной пыльцы, с разделением последней на подклассы. Замеры морфометрических показателей: полярной и экваториальной длины, длины апертуры, плотности покрытия шипиками эскины производились на изображениях 20 зёрен пыльцы правильной формы.

В результате проведённого исследования было установлено, что пыльца диплоидных видов, принадлежащих одной филогенетической кладе, *Ranunculus circinatus* и *Ranunculus subrigidus* в основном имеет правильную эллиптическую форму и меньше по размеру, чем пыльца тетраплоидных видов другой клады. Пыльца *Ranunculus kauffmannii* крупнее пыльцы других видов шелковников, а также имеет большой процент сильно деформированных зёрен, что косвенно подтверждает гипотезу о гибридогенном происхождении этого вида [1]. Пыльца *Ranunculus trichophyllus* и *Ranunculus mongolicus* показывает сильную вариацию между популяциями этих видов, что характерно и для их макроморфологических признаков. В тоже время для изученных нами образцов *Ranunculus mongolicus* характерна более частая встречаемость, по сравнению с другими образцами, пыльцы аномальной кубической формы. Образцы пыльцы из популяций, для которых подозревается гибридная природа, имели низкий процент пыльцы правильной формы. Палинологические признаки показали свою ценность как ключевые при идентификации видов сибирских водяных лютиков. Также они демонстрируют направления и тенденции эволюции группы в большей степени, чем вегетативные параметры.

Автор выражает благодарность соавторам работы: Путилину И. Р., Зотиной Т. А., Ямских И.Е., Киприяновой Л.М., Куцеву М.Г., Жижаеву А.М.

Литература:

- [1] Wiegleb G., Bobrov A.A., Zalewska-Gałosz J., Phytotaxa. V. 319, № 1. PP. 1-55 (2017).
- [2] Halbritter H. et al. Illustrated Pollen Terminology. Berlin/Heidelberg: Springer Cham, 2018.

Использование *Letna minor* и *Dunaliella salina* для обработки урины человека в биорегенеративной системе жизнеобеспечения

Митрофанова Софья Кирилловна

Институт биофизики СО РАН

Отходы человека и растений в биорегенеративной системе жизнеобеспечения (БСЖО) должны быть преобразованы в полезные продукты и повторно введены в среду обитания растений и людей для потребления [1]. Одним из потоков отходов, покидающих человеческий модуль, является урина. Целью исследования была оценка последовательной схемы обработки урины человека с помощью ряски *L. minor* и водоросли *D. salina* для получения пищевой биомассы в условиях БСЖО.

Есть сообщения об использовании *L. minor* [2] и *D. salina* [3] для потребления человеком. Ранее *L. minor* [2] и *D. salina* [3] изучались как кандидаты на включение в системы жизнеобеспечения.

При выращивании ряски использовали среду Кнопа и среду с добавлением разбавленной урины. Собранные растения анализировали на содержание минеральных элементов. При культивировании водоросли *D. salina* использовали среду после выращивания ряски и повышенным до 100–120 г/л содержанием NaCl (таблицы 1 и 2).

Таблица 1. Содержание биогенных элементов в биомассе *L. minor*

Среда	Содержание элементов в биомассе <i>L. minor</i> , % от сухого веса					
	P	N	K	Na	Ca	Mg
Среда Кнопа	0,57	3,6	3,59	0,54	2,87	0,56
Среда с разбавленной уриной	0,92	4,2	2,5	0,81	1,23	0,56
Вода из натурального озера	0,40	2,2	3,19	0,94	4,98	0,37

Таблица 2. Содержание биогенных элементов биомассе *D. salina* с примесью NaCl.

Среда	Содержание элементов в биомассе <i>D. salina</i> , % от сухого веса					
	P	N	K	Na	Ca	Mg
Среда, с содержанием NaCl 100–120 г/литр	1,54	4,46	0,85	18,4	3,01	0,04

Непрерывное (в течение нескольких месяцев) выращивание *L. minor* и *D. salina* по предлагаемой схеме показывает перспективность использования этих культур для получения пищевого белка в БСЖО.

Благодарности:

Автор выражает благодарность соавтору работы О.В. Щепетневой, руководителю работы С.В. Трифонову и консультантам Н.С. Мануковскому и В.С. Ковалеву.

Литература:

- [1] Lisovsky G.M., Gitelson J.I., Shilenko M.P. Advances in Space Research, V. 20(10), PP. 1801-1804 (1997).
- [2] Escobar C.M., Escobar A.C. Proceedings of 47th International Conference on Environmental Systems, 16–20 July 2017, Charleston, South Carolina.
- [3] Alizadeh S., Nostrati S., Maghsoodi M.S. Biological Forum – An International Journal, V. 7(2), PP. 325-334 (2015).

Оценка диагностического потенциала экзосомальных маркеров *FOLR1*, *CD151*, *EpCAM*, *HER2* и *Trop2* при раке мочевого пузыря (РМП)

Пиппаринен Софья Александровна

Институт биофизики СО РАН

Экзосомы, секретируемые опухолевыми клетками, играют важную роль в прогрессии локальной инвазии, подавлении противоопухолевых иммунных реакций и формировании отдаленных метастазов. Показано, что биохимический состав экзосом сохраняет признаки секретирующей их клетки. Ранее было показано, что мембранные белки различных опухолевых клеток (рака легких, яичников, молочной железы, РМП и других) – *FOLR1*, *CD151*, *EpCAM*, *HER2* и *Trop2*, могут служить биомаркерами онкозаболевания, однако данных, по исследованию экзосом, выделенных из мочи человека в литературе не обнаружено [1].

Цель работы – оценка диагностического потенциала этих мембранных белков экзосом, выделенных из образцов мочи человека, как маркеров для неинвазивной диагностики РМП.

В исследование были включены 72 образца мочи от пациентов с диагнозом РМП и 71 образец мочи здоровых доноров. Выделение экзосом из мочи человека проводили аффинной хроматографией с использованием наночастиц магнетита, активированных конканавалином А. Наличие целевых мембранных белков определяли с помощью твердофазного билюминесцентного анализа, используя молекулярную сенсорику разного типа: в случае выявления рецепторов *FOLR1*, *CD151* и *CD63* в качестве специфических молекул использовали соответствующие антитела, а рецепторов *EpCAM*, *HER2*, *Trop2* – ДНК аптамеры. В качестве репортера использовали конъюгат люциферазы *NanoLuc* с антителом к множественно представленному рецептору экзосом *CD81* (Рис. 1.).

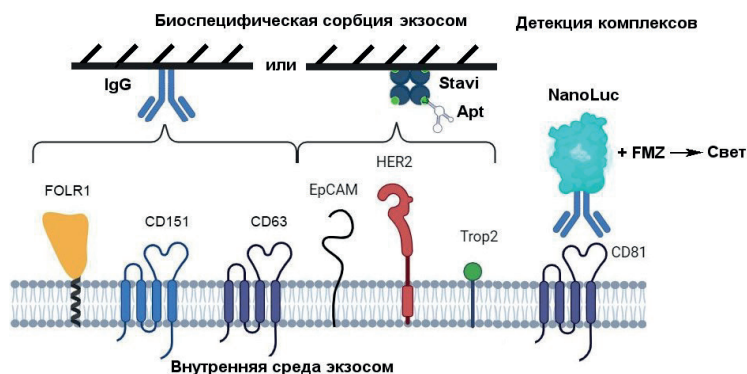


Рис. 1. Выявление экзосомальных рецепторов билюминесцентным анализом. *Stavi* – стрептавидин; *Apt* – ДНК аптамер; *FMZ* – фуримазин.

Полученные результаты анализировали с помощью программы *MedCalc* 18.2.1. Статистическую значимость, установленную на уровне 0,05, рассчитывали по тесту Манна-Уитни. Обнаружено, что представительность исследуемых рецепторов на поверхности экзосом, выделенных из мочи пациентов с РМП не является диагностически значимой: различия в наличии этих экзосомальных биомаркеров в образцах мочи пациентов и здоровых доноров статистически недостоверны.

Исследование выполнено при совместной поддержке Российского научного фонда и Красноярского краевого фонда науки, проект № 25-15-20021. Автор выражает благодарность научному руководителю д.б.н. Л.А. Франк и консультанту к.б.н. В.В. Красицкой.

Литература:

[1] Bryan R.T., Shimwell N.J., Wei W., British Journal of Cancer, №110, PP. 679-685 (2014).

Влияние БАП на ростовые показатели сорта Садон в культуре *in vitro*

Помыткин Николай Сергеевич, Луговцова Светлана Юрьевна

Красноярский научно-исследовательский институт сельского хозяйства СО РАН

Размножение картофеля в культуре *in vitro* необходимо для получения большого количества безвирусного посадочного материала в семеноводстве картофеля. Для этой цели используются различные гормоны стимуляторы роста. Реакция картофеля на экзогенные гормоны является сортоспецифичной. Поэтому необходим подбор их концентрации и сочетаний отдельно для каждого сорта. Оптимизация гормонального состава сред является актуальной задачей и в случае новейшего сорта российской селекции (институт им. Лорха) Садон. Одним из часто используемых регуляторов роста растений в микроразмножении картофеля является банзиламинопурин (БАП) [1]. В данной работе анализируется влияние БАП на эффективность микроклонального размножения картофеля сорта Садон в культуре *in vitro*.

На протяжении всего периода культивирования, БАП подавлял рост микрорастений (рис. 1), снижая длину растений в 2-3 раза, а скорость формирования новых междоузлий в 1,5-2 раза.

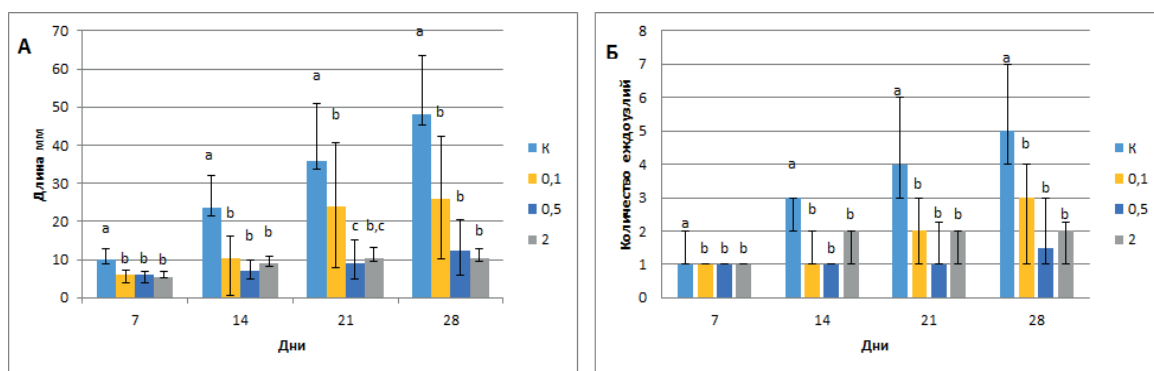


Рисунок 1 Длина растений (А) и количество междоузлий (Б) картофеля сорта Садон на среде MS с различным содержанием БАП (мг/л) (медиана±[25/75]). Одинаковыми буквами отмечены значения статистически значимо не различающиеся при $p < 0,05$ в пределах одних суток.

В отдельных случаях БАП может стимулировать каллусогенез. БАП значительно стимулировал каллусообразование у растений сорта Садон. На среде с 2 мг/л БАП 78% образовали каллус уже на 7-й день, а 95% растений образовали каллус за всё время эксперимента. БАП значительно изменил морфологию каллусов. На среде без гормонов образовывался рыхлый белый каллус, в то время как на средах с БАП каллус образовывался плотный, зелёного цвета. Так же было отмечено микроклубнеобразование на средах с БАП.

Исходя из полученных данных, БАП не является оптимальным гормоном для не подходит для использования в микроразмножении сорта Садон. Аналогичные данные о негативном влиянии БАП на показатели микроразмножения имеются и в других исследованиях [2]. Возможно, сорт Садон имеет высокое эндогенное содержание цитокининов. Необходимо использования других гормонов для микроразмножения этого сорта. Однако, БАП может оказаться полезным в инициации каллуса и микроклубнеобразовании у сорта Садон.

Литература:

- [1] Ahmad M. Z. et al. In vitro response of cytokinin and auxin to multiple shoot regeneration in *Solanum tuberosum* L // The American-Eurasian Journal of Agricultural & Environmental Sciences. – 2012. – Т. 12. – №. 11. – С. 1522-1526.
- [2] Armin M., Asgharipour M. R., Yazdi S. K. Effects of different plant growth regulators and potting mixes on micro-propagation and mini-tuberization of potato plantlets // Advances in Environmental Biology. – 2011. – Т. 5. – №. 4. – С. 631-638.

Роль фитогормонов в соматическом эмбриогенезе

лиственницы сибирской

Помыткин Николай Сергеевич, Пак Мария Эдуардовна

Институт леса им. В.Н. Сукачева ФИЦ КНЦ СО РАН

Гормоны являются сигнальными молекулами для растений, что позволяет им адекватно реагировать на изменяющиеся условия окружающей среды. В биотехнологии растений экзогенные гормоны используются для перепрограммирования клеток с одного пути развития на другой. Первым признаком перехода соматических клеток на эмбриональный путь развития является растяжение клеток и локализация ауксина (ИУК) в одном конце удлинённой клетки. В пролиферирующей эмбриогенной ткани происходит полярное распределение гормонов. ИУК, цитокинины и АБК локализуются в глобуле зародыша, в то время как суспензор остается неокрашенным, т. е. в нем не содержатся гормоны. Такая локализация фитогормонов в глобулярных зародышах сохраняется в течении многих лет пролиферации. При длительной пролиферации культур, (15 лет более) происходит накопление ИУК) в эмбриогенной ткани, что приводит к потере эмбриогенной активности культур. При прорастании у таких соматических зародышей корень не развивается, но развиваются гипокотиль, семядоли и апикальная меристема побега. У таких растений происходит интенсивное накопление гормонов в гипокотиле, семядолях и апикальной меристеме. Иммуногистохимический анализ гормонов в проростках показал, что цитокинины в базальной части соматических зародышей практически отсутствовали. Нарушено распределение АБК.

Таким образом, фитогормоны выполняют ключевую роль в процессе соматического эмбриогенеза. От локализации и накопления в эмбриогенных структурах зависит успех развития соматических зародышей и их прорастание.

Работа выполнена в рамках базового проекта «Биоразнообразие лесов Сибири: эколого-динамический, генетико-селекционный, физико-химический и ресурсно-технологический аспекты» (2024-2026 гг.) FWES-2024-0028. Регистрационный номер НИОКТР 124012900557-0.

Накопление гиспидина в разных питательных средах при погруженном культивировании базидиомицета *Inonotus obliquus*

Посохина Екатерина Дмитриевна

Институт биофизики СО РАН

Базидиальные грибы являются источниками широкого спектра низкомолекулярных биологически активных веществ. Среди этих соединений интерес вызывают стирилпироны, являющиеся природными антиоксидантами [1]. Наиболее распространенным и изученным представителем стирилпиронов является вторичный метаболит базидиомицетов – гиспидин (ГП), проявляющий ряд значимых фармакологических эффектов: противовоспалительный, противовирусный, цитотоксический и противораковый [2].

Установлено, что ГП участвует в биолуминесценции высших грибов и является предшественником субстрата ферментной люминесцентной системы базидиомицетов [3]. Это открывает возможности тестирования ГП в образцах люминесцентным методом.

Цель работы заключалась в оценке наличия и динамики накопления ГП в питательных средах разного состава при культивировании базидиомицета *Inonotus obliquus*. В работе была использована культура базидиального гриба *I. obliquus* (штамм IBSO 2430) из коллекции микроорганизмов ИБФ, ФИЦ КНЦ СО РАН. Культивирование гриба осуществляли в разных питательных средах с постоянным их перемешиванием при температуре 25°C [4]. Для выращивания грибного мицелия использовали питательные среды: 1 – сусло с дрожжевым экстрактом (10 г/л глюкозы, 5 г/л пептона, 3 г/л дрожжевого экстракта, 3 г/л экстракта сусла); 2 – картофельно-декстрозную (200 г/л картофельного экстракта, 20 г/л декстрозы); 3 – сабуро (40 г/л глюкозы, 10 г/л микологического пептона). В ходе культивирования базидиомицета наличие и количество ГП в питательных средах определяли биолуминесцентным методом с помощью ферментной люминесцентной системы, выделенной из базидиального гриба *Armillaria borealis* (штамм IBSO 2328) [5]. Содержание ГП в питательных средах оценивали по величине светового сигнала, который регистрировали на люминометре Glomax® 20/20 (Promega, США) после добавления к грибной люминесцентной системе НАДФН и образца тестируемой питательной среды.

Показано: при глубинном культивировании базидиомицета *I. obliquus* наблюдается рост мицелия в форме шарообразных пеллет с большим количеством поверхностных гиф; состав питательной среды влияет на морфологию получаемых при выращивании пеллет. Установлено: при росте в использованных в работе питательных средах гриб синтезирует и секретирует ГП в среды культивирования; в ходе культивирования выявлена одинаковая динамика накопления ГП в разных питательных средах – вначале повышение количества аналита в среде с последующим снижением после достижения максимума. Максимальное содержание ГП в питательных средах наблюдается на 7–10 сутки культивирования гриба и варьирует от 0,2 до 0,27 мг на 1 мл. Полученные данные открывают возможности использования базидиомицета *I. obliquus* для биотехнологического производства ГП.

Исследование выполнено в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (проект № FWES-2024-0018). Автор выражает благодарность соавторам работы Н.О. Ронжину и В.С. Бондарю.

Литература:

- [1] Lee I.-K. et al., The J. of Antibiotics, V. 64, PP. 349-359 (2011).
- [2] Palkina K.A. et al. J. Fungi, V. 7, 323, PP. 1-13 (2021).
- [3] Purtov K.V. et al., Angewandte Chem. Inter. Ed., V. 54, PP. 8124-8128 (2015).
- [4] Mogilnaya O.A. et al., Curr. Res. Env. Appl. Mycol., V. 8, PP.75-85 (2018).
- [5] Puzyr A.P. et al., Curr. Res. Env. Appl. Mycol., V. 7, PP. 227-235 (2017).

Влияние поверхностно-активных веществ на биолюминесценцию фотопротейна обелина и фотолюминесценцию его продукта

Райков Александр Валентинович

Институт Биофизики СО РАН

В современном мире поверхностно-активные вещества (ПАВ) играют важную роль как в промышленности, так и в повседневной жизни. Однако при определённых условиях они могут оказывать токсическое воздействие на живые организмы. Ранее в работе [1] изучалось воздействие ПАВ на люминесцентные бактерии и их ферментативную систему. Продemonстрировано значительное токсическое действие на биферментную систему: при достижении критической концентрации мицеллообразования (ККМ) активность ферментов снижалась на 10-50% относительно контроля в то время, как бактерии демонстрировали слабую чувствительность к ПАВ. В результате ПАВ способны существенно угнетать активность ферментов, что может приводить к нарушению ключевых биологических процессов и ухудшению функционирования живых организмов.

В качестве другой биолюминесцентной системы мы решили выбрать фотопротейн кишечнорастворимых – обелин. Интерес к фотопротейнам связан с их свойствами: это преактивированные фермент-субстратные комплексы, где в результате реакции биолюминесценции (триггерами выступают ионы Ca^{2+}), образуется устойчивый комплекс, в котором образовавшийся продукт (целентерамид) является эффективным флуорофором, связанным с белком. В статье [2], было предложено использование фотолюминесценции продукта биолюминесцентной реакции (разряженного фотопротейна) как «цветового» маркера токсичности, так как изменение «цвета» флуоресценции связано с изменением эффективности фотохимической реакции переноса протона между продуктом и аминокислотами белка.

В данной работе мы проанализировали спектры биолюминесценции обелина и фотолюминесценции продукта его реакции (разряженного обелина) в присутствии трёх типов ПАВ (анионогенного, катионогенного, неионогенного) различных концентраций. Был изучен общий квантовый выход биолюминесценции и фотолюминесценции продукта реакции. Получены следующие результаты. Наибольший ингибирующий эффект среди ПАВ оказали ионогенные ПАВ, неионогенные наименьший. Самое эффективное ингибирование наблюдалось вблизи ККМ соответствующих ПАВ. Изменения спектрального состава биолюминесценции не обнаружено. Однако спектральный состав фотолюминесценции разряженного обелина сильно изменяется при приближении к ККМ для каждого ПАВ. При этом общий квантовый выход сильно падает в присутствии ионогенных ПАВ, и практически не меняется в присутствии неионогенного ПАВ. Результат хорошо согласуется с результатом из работы [1].

В результате эксперимента, было показано токсическое действие на биолюминесцентный фермент-субстратный комплект кишечнорастворимых. Это доказывается изменением квантового выхода био- и фотолюминесценции, а также изменением спектрального состава фотолюминесценции продукта реакции (разряженного обелина), что свидетельствует об изменении характера фотохимического переноса протона в комплексе продукт-белок разряженного обелина.

Литература:

- [1] Sutormin O.S., Kolosova E.M., International Journal of Molecular Sciences, V. 24, P. 515 (2023).
- [2] Alieva R.R., Kudryasheva N.S., Talanta, V. 170, PP. 425-431 (2017).

Иммунологические маркеры постковидного синдрома

Садовский Иван Сергеевич

Научно-исследовательский институт медицинских проблем Севера СО РАН

Введение. Постковидный синдром (PCS) характеризуется разнообразными симптомами и изменениями в организме, которые сохраняются после перенесенного COVID-19. Изменения в клиническом анализе крови могут свидетельствовать о развитии PCS.

Цель исследования Определение прогностической ценности показателей клинического анализа крови для диагностики PCS.

Материалы и методы. На базе клиники НИИ МПС СО РАН и Краевой клинической больницы было проведено ретроспективное обсервационное исследование историй болезни 373 больных, прошедших углубленное диспансерное обследование, не ранее чем через 8 недель после перенесенного COVID-19. Исходное течение заболевания оценивалось с использованием шкалы клинического прогрессирования ВОЗ [1]. Характеристика постковидного синдрома оценивались по шкале функционального состояния после COVID-19 [2]. Все исследуемые разделены на четыре группы, 1-ая группа «Легкий Covid-19/Без утраты трудоспособности» куда вошли 229 человек, 2-ая группа «Легкий Covid-19/С утратой трудоспособности» куда вошли 64 человека, 3-я группа «Средний и тяжёлый Covid-19/Без утраты трудоспособности» куда вошло 22 человека, 4-я группа «Средний и тяжёлый Covid-19/ Без утраты трудоспособности» куда вошли 58 человек. Определение типа и характеристики реакции иммунитета осуществляли с помощью программы ПРОТИСТ (ООО «МедБиоТех», Красноярск, Россия, Госрегистрация № 2017619658). Статистический анализ данных проводился с помощью программного обеспечения Statistica 8.0 (StatSoft, Tulsa, OK, США; 2007 г.)

Результаты. Наиболее выраженными достоверными ($p \leq 0,05$) изменениями стали относительный гранулоцитоз в группе 4 (60,5% [54,2-71,2]) в сравнении с остальными группами (группа 1 - 56,1% [51,5-62,1]; группа 2 - 56,7% [49,2-63,3]; группа 3 - 52,9% [50,2-55,7]), а также относительная лимфопения, в группе 4 (29,5% [19,2-35,1]), в сравнении с остальными группами (группа 1 - 34,2% [28,3-38,9]; группа 2 - 33,3% [26,4-39,9]; группа 3 - 37,7% [34,5-40,1]). При оценке иммунного ответа с помощью программы ПРОТИСТ ($\chi^2 = 64,787$, $p = 0,002$), в группах 1 и 3 процент пациентов с ареактивностью иммунитета 80,3% и 77,3% соответственно, доля ареактивности снижается у пациентов с развитием PCS, и составляет 57,8% в группе 2 и 53,4% в группе 4. Наиболее выраженным типом иммунного ответа является активация врожденного ответа - в группах 2 и 4 доля таких пациентов 15,6% и 36,2% соответственно, при 10% в группе 1 и отсутствии таких пациентов в группе 3.

Выводы. Выраженные лимфопения и/или гранулоцитоз у пациентов, перенесших COVID-19, являются индикатором развития PCS. У пациентов с развитием PCS средней и тяжелой степени тяжести преобладает иммунный ответ по типу активации врожденного иммунитета. Это доступные, экономически выгодные методы оценки иммунной системы, позволяющие начать этиотропную и выделить пациентов, нуждающихся в топической диагностике иммунных нарушений.

Литература:

- [1] Klok FA et al.; The Post-COVID-19 Functional Status scale: a tool to measure functional status over time after COVID-19. Eur Respir J. 2020 Jul 2;56(1):2001494. doi: 10.1183/13993003.01494-2020.
- [2] Rubio-Rivas M et al.; SEMI-COVID-19 Network. WHO Ordinal Scale and Inflammation Risk Categories in COVID-19. Comparative Study of the Severity Scales. J Gen Intern Med. 2022 Jun;37(8):1980-1987. doi: 10.1007/s11606-022-07511-7.

Крупномасштабное картографирование олиготрофных болот на основе данных аэрофотосъёмки с использованием беспилотных летательных аппаратов (БПЛА)

Садыков Руслан Тахирович

Лаборатория экспериментальной и прикладной экологии ФИЦ КНЦ СО РАН

Аэрофотоснимки, полученные с помощью беспилотных летательных аппаратов (БПЛА), служат ключевым инструментом для классификации ландшафтов, мониторинга растительности и экосистем. Картографирование позволяет визуализировать объекты в определённом масштабе, выявлять закономерности их распределения и анализировать взаимосвязи с другими элементами среды. Особое значение имеет крупномасштабное картографирование растительности, которое детализирует структуру покрова и его взаимодействие с компонентами физико-географической среды.

Целью работы являлось создание типологической карты олиготрофного болота, основанной на данных высокоточных снимков БПЛА в зоне охвата эколого-климатической станции в районе с. Зотино.

Мультиспектральная съёмка проводилась с БПЛА DJI Phantom 4 Multispectral на болотном массиве в северной части междуречья Сым-Дубчеса. Снимки были сделаны в период с июля по сентябрь 2023 года на высоте 20 и 100 метров, в одинаковое по освещенности и погодным условиям время. Выбранный участок представляет собой полигон размерами 210×210 м.

В ходе полевых исследований на территории изучаемого участка выделено пять классов болотных синузий, характерных для среднетаежной зоны Западной Сибири: пушицевые кочки, древостой, мочажинный комплекс, сфагновые гряды и кустарничково-сфагновые гряды. На основе классифицированной карты определена площадь каждого класса. Наибольшую площадь занимают кустарничково-сфагновые гряды (37%, 14364 м²), далее следуют сфагновые гряды (27%, 11398 м²), а наименьшую площадь среди классов занимают мочажины (8%, 3513 м²). По мультиспектральным снимкам был рассчитан вегетационный индекс NDVI за июль-сентябрь и определены значения для каждого класса. Установлено, что максимальные значения NDVI характерны для классов мочажин (0,21), кустарничково-сфагновых (0,20) и сфагновых гряд в июле (0,22). Минимальные значения NDVI (0,13) зафиксированы для класса древостоя.

Впервые выполнено крупномасштабное картографирование болотного массива с пространственным разрешением 1 см/пиксель. В качестве основы карты использован ортофотоплан, созданный на основе аэрофотоснимков, полученных с применением БПЛА. Использование БПЛА, в отличие от дорогостоящих данных космической съёмки или авиационных платформ, позволяет проводить аэрофотосъёмку в оптимальных условиях, включая различные фазы развития растений.

Полученные аэрофотоснимки в естественном видимом спектре (в отличие от спутниковых снимков с условной цветовой палитрой) обеспечивают более точное выделение дешифровочных признаков растительных сообществ и корректное нанесение их границ на карту. Таким образом, применение БПЛА позволяет не только отслеживать сезонную динамику растительности, но и детально картографировать различные растительные сообщества, что имеет значение для экологического мониторинга.

Исследование выполнено в рамках государственного задания № FWES-2024-0040. Автор выражает благодарность соавтору работы Третьякову П. Д. и научному руководителю Панову А.В.

Сравнительный анализ эффективности импульсной и классической нейронных сетей в решении задач классификации изображений

Самсонов Михаил Константинович

Институт биофизики СО РАН

Создание общего искусственного интеллекта становится всё более реалистичным событием. Однако вопрос о его алгоритмах обучения и функционирования, а также их схожести с тем, что наблюдается в биологическом мозге, остаётся открытым. Биологический мозг использует импульсную форму передачи сигнала, в то время как в классических искусственных нейронных сетях используется постоянный сигнал, который преобразуется внутри нейрона с помощью активационной функции. Необходимо понимание и экспериментальное подтверждение наличия преимуществ импульсных нейронных сетей перед классическими нейронными сетями в тех аспектах обучения и функционирования, которые позволят искусственному интеллекту демонстрировать интеллектуальные и физические способности, не уступающие живым организмам.

Для сравнения эффективностей импульсной и классической нейронных сетей на языке программирования Python были реализованы две идентичные по своей структуре нейронные сети. Импульсная нейронная сеть обучалась одновременно по методам STDP и All-LTD. Оба этих метода реализуются мозгом человека в процессах, связанных с обучением и памятью [1]. Классическая нейронная сеть обучалась по методу обратного распространения ошибки (Backpropagation of error) [2]. В качестве задачи для сравнения эффективностей нейронных сетей была выбрана классификация изображений рукописных цифр из базы данных MNIST. Обе сети обучались и тестировались на одинаковых выборках, что исключало влияние датасета на результат работы.

Для импульсной нейронной сети наблюдается высокая точность распознавания (82%) уже при предъявлении одной обучающей картинки для каждого класса. Таким образом, у данного алгоритма наблюдается предрасположенность к импринту – обучению с одного предъявления [3]. Максимальная средняя точность достигается на 5 обучающих изображениях для каждого класса и составляет 96,3%. Точность классической нейронной сети оказывается выше – 99%, но достигается лишь после 300 обучающих изображений для каждого класса. Также импульсная нейронная сеть обладает меньшей чувствительностью к перемешиванию изображений в обучающей выборке, в то время как у классической нейронной сети присутствуют колебания значений точности в зависимости от порядка подачи обучающих изображений.

Таким образом, в задачах классификации импульсная нейронная сеть обладает несколькими преимуществами по сравнению с классической нейронной сетью, но уступает ей в точности. Большой потенциал вкупе с выявленными особенностями делают импульсную форму передачи сигнала крайне интересной для дальнейших исследований.

Благодарности:

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках гранта № 23-21-10041 и Красноярского краевого фонда науки №228 от 10.05.2023. Автор выражает благодарность соавтору и научному руководителю Барцеву Сергею Игоревичу (Институт биофизики СО РАН).

Литература:

- [1] Yang D., Mu-ming P. Physiological reviews, V. 86, PP. 1033-1048 (2006).
- [2] Rumelhart D. E., Hinton G. E., Williams R. J. Nature, V. 323, PP. 533-536 (1986).
- [3] Туманян А. Г., Барцев С. И. Компьютерные исследования и моделирование, Т. 6, № 5, С. 793-802 (2014).

Использование овсяной муки в производстве бисквитного полуфабриката
Степаненко Наталья Ивановна
Красноярский научно-исследовательский институт сельского хозяйства
ФИЦ КНЦ СО РАН

Мучные кондитерские изделия представляют собой стабильно развивающуюся область пищевой промышленности. Согласно статистике, проведённой командой Ingate Performance в 2024 году потребление кондитерских изделий в России распределяются следующим образом: торты и пирожные занимают 43%, шоколад и конфеты – 30%, пироги, булочки и печенье – 16%, зефир, пастила и мармелад – 11% [1]. Мучные кондитерские изделия являются одним из перспективных направлений для разработки функциональных пищевых продуктов. Традиционно изготовленные мучные кондитерские изделия обладают высоким содержанием жиров и углеводов, что может способствовать возникновению ожирения и последующему развитию таких заболеваний, как сахарный диабет и сердечно-сосудистые патологии [2]. Наиболее популярным полуфабрикатом является бисквит, которые служит основой для приготовления тортов и пирожных, а также может быть использован в качестве самостоятельного продукта, посыпанного сахарной пудрой или покрытого кондитерской глазурью.

Актуальность данного исследования определяется использованием цельномолотого овсяного зерна как отечественной, так и зарубежной селекции в производстве бисквитного полуфабриката, что позволит расширить ассортимент продуктов специального назначения. Основная цель исследования заключается в анализе влияния 100% овсяной цельносмолотой муки на качество бисквитного полуфабриката, а также в установлении зависимости между сортной принадлежностью и качеством конечного продукта. Задачи исследования являлась оценка качество бисквитного полуфабриката с использование органолептических и физико–химических показателей. Объектом исследования является цельносмолотая овсяная мука тонкого помола, полученная из различных сортов овса как отечественной, так и зарубежной селекции. В ходе исследования были использованы следующие сорта овса: отечественные – Тубинский, Голец и Саян, а также зарубежные – Симфония, Макс и Авеню.

По результатам исследования по физико–химических характеристик сорта «Макс» зарубежной селекции выявило его выдающиеся показатели: упёк составил 14,05%; пористость – 89,0%; намокаемость – 441%; влажность – 23,1%. Корреляционный анализ продемонстрировал положительную зависимость между «упёком» и «намокаемостью», равную 0,533, а также отрицательную зависимость «упёком» и «пористостью» составившую -0,681. Эти статистические данные позволяют считать данный сорт оптимальным для приготовления бисквитного полуфабриката на основе овсяной муки.

Литература:

- [1] Кондитерский рынок в 2025: аналитика и тренды. Электронный ресурс. URL: <https://adpass.ru/konditerskij-rynok-v-2025-analitika-i-trendy/> - 18.12.2024 (дата обращения 7.01.2025).
- [2] Голивец, Т. П. Ожирение и ассоциированное с ним заболевания проблемные вопросы патогенеза и современные стратегии диагностики и лечения / Т. П. Голивец, Д. Г. Дубоносова, С. В. Ликризон // Актуальные проблемы медицины. 2023. № 2. – С. 123–143.

Изменчивость анатомической структуры хвои *Pinus Sylvestris* L. в окрестностях Красноярска

Степаниденко Светлана Олеговна

Институт леса им. В.Н. Сукачева ФИЦ КНЦ СО РАН

Целью данной работы являлось выявление характера популяционной изменчивости признаков анатомического строения хвои сосны обыкновенной в окрестностях Красноярска. Для этого нами был отобран материал в виде пучков хвои согласно общепринятой методике [1]. В период с 01.06.2023 по 31.07.2023 рекогносцировочным методом нами было отобрано 117 деревьев, принадлежащих виду *Pinus Sylvestris* L. на шести пробных площадях. Деревья отбирались в пределах возрастной группы от 15 до 40 лет. С выбранных деревьев осуществлялся сбор материала в виде хвои 1 года от 16 до 30 штук (8-15 пар). Была измерена длина хвои в пяти повторностях. Из измеренных хвоинок были приготовлены и проанализированы микропрепараты по одной из общепринятых методик [2]. Срезы сделаны в пяти повторностях, от руки со средней части хвои. Полученные срезы фиксировались в глицерине и изучались при помощи светового микроскопа, сделаны микрофотографии. Производились линейные замеры следующих морфолого-анатомических характеристик: больший и меньший диаметры среза, больший и меньший диаметр стели, средняя длина проводящих пучков, количество смоляных ходов, средний диаметр смоляных ходов.

Сравнительный анализ измерений показывает, что наиболее изменчивым признаком является длина хвои, меньший диаметр среза (толщина) и количество смоляных ходов. Наиболее стабильные признаки: больший диаметр среза (ширина), размеры стели, средняя длина проводящих пучков, средний диаметр смоляного хода.

Было проведено сравнение признаков между популяциями. В большинстве признаков точка Академгородок выделяется в отдельную группу. Наиболее отличная от Академгородка точка урочище Титенкино, что подтверждается методом главных компонент.

Литература:

- [1] Егорова Н. Н, Кулагин А. А. Анатомическое строение ассимиляционного аппарата сосны обыкновенной (*Pinus Sylvestris* L.) в экстремальных лесорастительных условиях. Лесной вестник, №. 6, С. 38-47 (2006).
- [2] Хазова Е. П. Влияние генетических и экологических факторов на анатомо-морфологические показатели хвои. Успехи современного естествознания, №. 4, С. 7-13 (2019).

Влияние погодных условий на фактическую и биологическую урожайность сортов яровой пшеницы в условиях Красноярской лесостепи

Сурина Екатерина Александровна, Бутковская Лидия Кузьминична

*Красноярский научно-исследовательский институт сельского хозяйства
ФИЦ КНЦ СО РАН*

В экстремальных климатических условиях Красноярского края очень важно соблюдать сортовую агротехнику для получения стабильных и высоких урожаев. Сорта должны обладать как высокой потенциальной продуктивностью, так и экологической устойчивостью к нерегулируемым факторам [1, 2].

Объекты исследования: сорта яровой пшеницы Новосибирская 31, Канская, Красноярская 12. Схема опыта: сроки посева – 15 и 22 мая и нормы высева – 4,5, 5,0, 5,5 млн всх. зер. на га. Опыты и наблюдения проводились согласно методике [3].

Таблица 1. Влияние сроков посева и норм высева на урожайность сортов яровой пшеницы, т/га

Культура, сорт	Норма высева, млн всх. зер. га	Урожайность 2021, 2023 гг.				Урожайность 2020, 2024 гг.			
		I срок	II срок	Ср.	± к I сроку	I срок	II срок	Ср.	± к I сроку
Новосибирская 31	4,5	3,40	3,50	3,45	+0,1	1,37	1,85	1,61	+0,48
	5,0	3,55	3,73	3,64	+0,18	1,68	1,90	1,79	+0,22
	5,5	3,65	3,78	3,72	+0,13	1,87	1,99	1,93	+0,12
Канская	4,5	3,74	3,83	3,79	+0,09	1,73	1,74	1,74	+0,01
	5,0	3,85	3,91	3,88	+0,06	1,85	1,87	1,86	+0,02
	5,5	3,87	3,97	3,92	+0,1	1,93	1,93	1,93	0
Красноярская 12	4,5	3,72	3,88	3,80	+0,16	1,68	1,66	1,67	-0,02
	5,0	3,78	3,92	3,85	+0,14	1,72	1,87	1,80	+0,15
	5,5	3,80	3,90	3,85	+0,1	1,76	1,92	1,84	+0,16
		НСП _{0,5} норма высева – 0,1; НСП _{0,5} срок посева – 0,1				НСП _{0,5} норма высева – 0,2; НСП _{0,5} срок посева – 0,2			

Таблица 2. Влияние сроков посева и норм высева на биологическую урожайность сортов яровой пшеницы, т/га

Культура, сорт	Норма высева, млн всх. зер. га	Биологическая урожайность 2021, 2023 гг.				Биологическая урожайность 2020, 2024 гг.			
		I срок	II срок	Ср.	± к I сроку	I срок	II срок	Ср.	± к I сроку
Новосибирская 31	4,5	4,83	7,01	5,92	+2,18	5,82	5,85	5,84	+0,03
	5,0	5,51	6,07	5,79	+0,56	6,01	6,11	6,06	+0,1
	5,5	5,22	5,28	5,25	+0,06	6,14	7,16	6,65	+1,02
Канская	4,5	5,86	6,36	6,11	+0,5	4,35	5,63	4,99	+1,28
	5,0	6,01	6,50	6,26	+0,49	5,37	5,76	5,57	+0,39
	5,5	6,36	6,88	6,62	+0,52	5,50	5,56	5,53	+0,06
Красноярская 12	4,5	5,37	6,27	5,82	+0,9	4,86	5,63	5,25	+0,77
	5,0	5,74	6,22	5,98	+0,48	5,05	5,12	5,09	+0,07
	5,5	6,18	6,39	6,29	+0,21	5,21	5,44	5,33	+0,23

В благоприятные годы фактическая и биологическая урожайность различались в 1,5 раза, а в неблагоприятные годы биологическая урожайность была выше в 2–3 раза. Урожайность сортов пшеницы зависела от количества продуктивных стеблей на м² во все годы исследований. Закономерной связи между урожайностью и другими элементами структуры урожайности не наблюдалось.

Литература:

- [1] Бутковская, Л. К. Влияние удобрений и сроков посева на формирование элементов структуры продуктивности овса / Л. К. Бутковская, Д. Н. Кузьмин, В. В. Казанов // Земледелие. – 2020. – № 1. – С. 20–22
- [2] Волынкина, О. В. Влияние удобрения, предшественника и срока посева на продуктивность яровой пшеницы в трехпольных севооборотах / О. В. Волынкина, А. Н. Притчин // Агрохимия. – 2024. – № 11. – С. 19–25
- [3] 3. Доспехов, Б. А. Методика полевого опыта (с основами статистической обработки результатов исследований). – М.: Альянс, 2014. - 351 с.

Дистанционные данные в оценке состояния ландшафтов криолитозоны Сибири

Сыроежко Михаил Юрьевич

Институт леса им. В.Н. Сукачева СО РАН

Активное хозяйственное освоение Арктики приводит к высокому уровню техногенной нагрузки на ландшафты криолитозоны, характеризующиеся особой хрупкостью и сравнительно медленным восстановлением [1]. Цель исследования заключалась в оценке степени трансформации ландшафтов на основе обзорной классификации тестовых участков в районе Норильского промышленного района. Выбор района интересов обусловлен проведением серии наземных обследований в 2022-2024 гг., где анализировалось влияние техногенного фактора на состояние и физические характеристики почв. Калибровка результатов обработки данных ДЗ выполнялась с привязкой к двум пробным площадям (ПП): ПП1 Боганида (торфяно-криозём) и ПП2 Оганер (криозём). В работе использованы данные Landsat -8,-9 различных спектральных каналов за летний период с обработкой по стандартным методам в программе с открытым кодом QGIS, а также в сопряжении с данными натурных исследований. При обзорной классификации выявлено 11 классов состояния подстилающей поверхности. Точность классификации достигает 70% и варьирует в зависимости от детализации классов, уровня генерализации, а также экспертной корректировки на основе натурных обследований (Рисунок 1.А). Коэффициент Каппа-статистики равен 0,56. В выделенных классах были выделены 3 категории ландшафтов по степени трансформации в сравнении с фоном: фоновые, с долей трансформации <9% (ПП1-ПП1.2 Боганида), умеренно трансформированные с уровнем 12% (ПП2.2 Оганер), сильно трансформированные – с процентом трансформации 53-77% (П2, ПП2.1 Оганер) (Рисунок 1.Б).

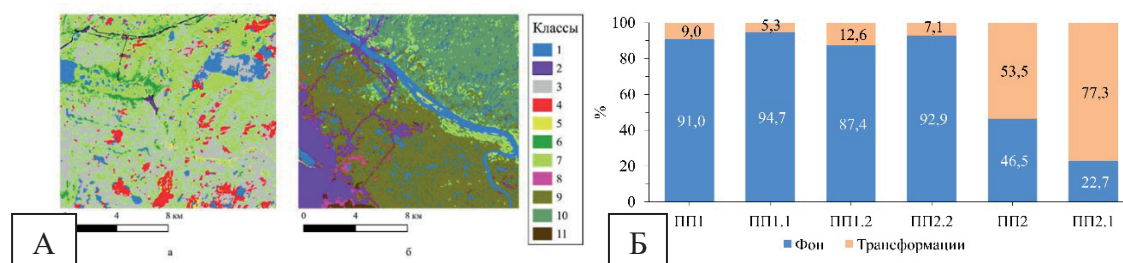


Рисунок 1 – А- Результат классификации на участок: а – ПП1 Боганида, б – ПП2 Оганер; Б – Оценка доли трансформации полигона.

Проверена гипотеза о качественной связи степени трансформации ландшафта с измерением глубины сезонно-талого слоя (СТС) на основе тепловых профилей почв. На фоновом участке наблюдался уровень СТС в диапазоне глубины ~25-50 см, а на участке с сильным уровнем трансформации достигал ~45-100 см. Комплексное использование данных дистанционного зондирования в сочетании с материалами натурных экспериментов эффективно в целях долговременного мониторинга криолитозоны. Классификация позволяет оптимизировать выбор дополнительных точек наземных обследований в районе интересов.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 23-14-20007), <https://rscf.ru/project/23-14-20007/>, Красноярского краевого фонда науки.

Литература:

[1] Шишкин А. С. Организация исследований техногенных территорий. Сибирский лесной журнал, № 2, С. 102-119 (2016).

Влияние СВЧ обработки на распространение листостебельных болезней Пшеницы Красноярская 12

Тарханова Ольга Алексеевна, Максимова Анастасия Алексеевна,
Красноярский научно-исследовательский институт сельского хозяйства,
ФИЦ КНЦ СО РАН

В Красноярском крае ежегодно нарастает ущерб от листостебельных инфекций. В последние годы, яровая пшеница поражается такими болезнями как септориоз, бурая листовая ржавчина, грибные пятнистости. Локальные эпифитотии приводят к загрязнению зерна пшеницы и продуктов его переработки фитотоксинами, опасными для жизни и здоровья человека и животных. В результате зерно не отвечает базисным и ограничительным кондициям по фитосанитарным, технологическим и биологическим свойствам. В решении создавшейся ситуации, с одной стороны фитосанитарной, с другой – экономической, основная роль не без оснований отводится предпосевной подготовке семян к посеву. На фоне стопроцентной зараженности семян в крае разработанная технология СВЧ – обеззараживания семян яровой пшеницы, в силу своей эффективности и экологичности – актуальна [1,2].

Учет заболеваний проводился на 100 растениях, отобранных в 10 местах по диагонали поля. При учете листостебельных болезней определяли два показателя: распространенность и индекс развития болезни (ИРБ). Для определения степени пораженности растений листостебельными инфекциями использовали специальные шкалы, характеризующие интенсивность развития той или иной болезни. Учеты проводили в фазы кущения и молочно - восковой спелости. Индекс развития возбудителей листостебельных болезней на яровой пшенице Красноярская 12 в различных вариантах обработки семян в таблице (табл.1).

Таблица 1 - Индекс развития возбудителей листостебельных болезней на яровой пшенице Красноярская 12 в различных вариантах обработки семян.

Варианты	Индекс развития бурой листовой ржавчины	Индекс развития септориоза	Индекс развития бурой пятнистости
Контроль	30	60	30
СВЧ	20	40	20

Индекс развития бурой листовой ржавчины пшеницы, обработанные микроволновым методом, составил 20%, что на 10 процентных пунктов меньше по сравнению с контрольным вариантом. Индекс развития септориоза пшеницы, обработанным микроволновым методом составил 40%, что на 20 процентных пунктов меньше по сравнению с контрольным вариантом. Индекс развития бурой ржавчины пшеницы, обработанный микроволновым методом составил 20%, что на 10 процентных пунктов меньше по сравнению с контрольным вариантом.

В результате исследований были обнаружены такие возбудители листостебельных заболеваний как, фитопатогенные грибы *Septoria* sp., вызывающий септориоз пшеницы, *Russinia* sp., вызывающие бурую листовую ржавчину пшеницы и бурая листовая пятнистость. Исходя из наблюдений, обработка микроволновым методом значительно снижает развитие фитопатогенных грибов *Septoria* sp, вызывающих септориоз пшеницы.

Автор выражает благодарность соавторам работы: Максимовой Анастасии Алексеевне.

Литература:

- [1] Пучкова Е.П., Ивченко В.К. Грибы – возбудители инфекционных болезней растений. Красноярск: изд-во Краснояр. гос. аграр. ун-т. 2020. 199 с.
[2] Василенко А.А. Влияние параметров СВЧ-поля на зараженность семян пшеницы грибами р. *Alternaria*. 2015, 18-20 с.

Влияние способов скормливания хвойно-минеральной добавки на биохимический статус крови и мочи телят

Терещенко Вера Александровна, Иванов Евгений Анатольевич, Любимова Юлия Германовна

Красноярский научно-исследовательский институт сельского хозяйства – обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН

Для балансирования рационов и достижения высокого уровня их биологической полноценности в кормлении сельскохозяйственных животных актуально применять кормовые добавки на основе нетрадиционного природного минерального и растительного сырья. При этом способ скормливания кормовых добавок животным может оказывать существенное влияние на усвоение питательных и биологически активных веществ. Цель исследований – изучение влияния способов скормливания хвойно-минеральной кормовой добавки на биохимический статус крови и мочи телят. Исследования продолжительностью 90 дней выполнялись в ОПХ «Михайловское» – филиале ФИЦ КНЦ СО РАН Красноярского края на трех группах телят по 14 голов в каждой группе черно-пестрой породы (контрольная и две опытные) в возрасте 2-х месяцев. Животные контрольной группы получали основной рацион, опытным группам в дополнение к основному рациону скормливали кормовую добавку (вспученный вермикулит, хвойная мука, скорлупа кедрового ореха, арабиногалактан) разными способами: 1-й опытной группе – в сухом виде; 2-й – в виде высушенной смеси (вермикулит, обогащенный водным экстрактом из лесной биомассы). Биохимический состав сыворотки крови телят определяли на автоматическом биохимическом анализаторе «Chem Well 2910 с» (США), биохимический состав мочи телят – на анализаторе LabUReader Plus 2 (Венгрия). В результате исследований установлено, что скормливание телятам изучаемой добавки разными способами не оказало отрицательного влияния на их биохимические показатели крови и мочи. Все показатели соответствовали физиологической норме для здоровых животных. Лучший биологический эффект на биохимический состав крови оказало скормливание изучаемой добавки в виде высушенной смеси (2-я опытная группа), поскольку это позволило достоверно повысить содержание общего белка в крови по сравнению с контролем на 10,25 % ($p \leq 0,01$), альбумина – на 8,84 % ($p \leq 0,01$), кальция – на 3,67 % ($p \leq 0,05$) (табл. 1).

Таблица 1. Биохимические показатели крови телят в конце опыта ($M \pm m$, $n=14$)

Показатель	Группа		
	контрольная	1-я опытная	2-я опытная
Общий белок, г/л	67,84 $\pm$ 1,49	72,63 $\pm$ 1,87	74,79 $\pm$ 1,30**
Альбумин, ммоль/л	32,81 $\pm$ 0,49	34,32 $\pm$ 0,78	35,71 $\pm$ 0,69**
Глюкоза, ммоль/л	3,19 $\pm$ 0,05	3,29 $\pm$ 0,09	3,36 $\pm$ 0,07
Кальций ммоль/л	3,00 $\pm$ 0,04	3,09 $\pm$ 0,03	3,11 $\pm$ 0,03*
Фосфор ммоль/л	2,92 $\pm$ 0,02	2,89 $\pm$ 0,013	2,94 $\pm$ 0,01
Железо мкмоль/л	27,23 $\pm$ 0,45	28,42 $\pm$ 0,968	27,69 $\pm$ 0,62

Физико-биохимические свойства мочи телят в конце опыта по группам практически не различались, за исключением показателя активной кислотности (рН), разница по которому между группами была также незначительной и находилась в пределах 0,1-0,2. Моча подопытных телят не содержала кетоновых тел, билирубина, белка, глюкозы, нитритов, что свидетельствовало о нормальном протекании обменных процессов в организме животных без нарушений гомеостаза.

Таким образом, наиболее эффективно скормливать изучаемую растительно-минеральную кормовую добавку в виде высушенной смеси (вермикулит, обогащенный водным экстрактом из лесной биомассы), поскольку это позволяет улучшить обмен веществ в организме телят.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках проекта № 122031400484-7.

Температурные тренды и их связь с вариацией спектрального индекса NDVI в арктической зоне Сибири по данным дистанционного зондирования

Третьяков Павел Дмитриевич

Институт леса им. В.Н. Сукачева ФИЦ КНЦ СО РАН

На данный момент актуальны исследования закономерностей климатических изменений и их воздействия на экосистемы. Особое внимание уделяется климатогенной динамике растительного покрова на севере Сибири. Это обусловлено значительными изменениями климатических показателей, а также ключевой ролью растительности в стабилизации температурного режима многолетнемерзлых пород. Для анализа динамики растительности широко применяются дистанционные методы, вегетационные индексы, в частности NDVI.

Цель исследования – определить тренды изменения NDVI, выявить зависимость NDVI от метеопараметров таких как температура воздуха, сумма осадков и инсоляция за летний период в арктической зоне Сибири.

Район исследования – арктическая зона Сибири (64-74° с.ш. 60-150° в.д.). На территории исследования рассмотрены пять бассейнов крупных рек Сибири: Оби (I), Енисея (II), Хатанга (III), Лена (IV) и Яны/Индиگیрки/Колымы (V). Был использован продукт MOD13 со значениями NDVI полученным с сайта USGS. Расчеты метеопараметров выполнялись на основе данных реанализа (<https://www.globalclimatemonitor.org/#>) за 2001-2024 гг. Обработка была выполнена в программной оболочке QGIS-3.12.

За 2001-2024 гг. в арктической зоне Сибири зафиксированы положительные тренды температуры воздуха и инсоляции, а также снижения суммарных осадков за летний период. Максимальное повышение температуры воздуха за июнь-август на градиенте долготы зафиксировано в IV и V бассейне (0,05-0,09 С/год) на 75% территории, минимальное – 0,017-0,04 С/год – в I, II и III бассейне – на 20-30% территории. Наибольшее снижение количества осадков за летний период зафиксировано на 80% территории II и IV бассейна, повышение количества осадков зафиксировано на 50% территории бассейна III и V. На 15% всей исследуемой территории осадки остаются неизменными.

Значения NDVI, имели общую тенденцию к возрастанию с скоростью 0,001/год. Наибольшие значения NDVI (0,63-0,65) отмечены в II и IV бассейне рек где преобладают лесные сообщества, минимальные (0,53) – в тундровых сообществах (III и V бассейн).

По данным корреляционного анализа, величина NDVI во всех исследуемых бассейнах в большей степени зависит от температуры воздуха ($r=0,65$), в наименьшей степени – от суммы осадков и инсоляции ($r=0,15$). С учетом вариации растительного покрова выявлено, что максимальная связь корреляции среднелетней температуры воздуха и NDVI наблюдается для еловых лесов ($r=0,71$), умеренная связь для лиственных ($r=0,46$) и тундровых ландшафтов ($r=0,52$), минимальная связь для ландшафтов с кедровым стлаником ($r=0,35$) и сибирской сосной ($r=0,17$).

Можно предполагать, что влияние осадков и инсоляции на вегетацию менее значимо, что подчеркивает доминирующую роль теплового фактора в условиях Арктики.

Автор работы выражает благодарность научному руководителю к.т.н. Пономареву Е. И. за ценные замечания.

**Создание среднераннего селекционного материала в условиях
Красноярской лесостепи**
Федосенко Денис Федорович
Красноярский научно-исследовательский институт сельского хозяйства

Одним из основных разделов в селекции растений является длительность вегетационного периода. Для яровой пшеницы он определяет адаптивность сорта к условиям выращивания: урожай, его качество, уход от заморозков и засухи, поражения болезнями [1]. Основные площади яровой пшеницы в Красноярском крае расположены в лесостепной зоне, характеризующейся укороченным безморозным периодом, июньской засухой и неравномерностью распределения осадков [2]. 72,3% посевных площадей пшеницы на территории края занято раннеспелыми и среднеранными сортами.

Цель исследований: создание среднераннего сорта яровой мягкой пшеницы для лесостепной и подтаёжной зон Красноярского края. Опыт проводился в 2023-2024 гг. согласно методике государственного сортоиспытания [3].

Комплексная оценка по урожайности, качеству зерна и устойчивости к основным грибным болезням показала, что, хотя и каждый изученный образец имеет свои сильные и слабые стороны, номера К-1011-1 и К-858-2 выделяются по оптимальному сочетанию в себе рассмотренных признаков (табл. 1).

Таблица 1. Результаты испытания среднеранних образцов пшеницы (2023-2024 гг).

Образец	Урожайность, т/га		Вегетац. пер., дней	Основные параметры качества зерна			Максимальное поражение на инфекционных фонах	
	$\bar{x}$	+/- к стандарту		белок, %	клейк., %	ИДК-1	пыльная головня, %	бурая ржавчина, т. р.
Алтайская 70, ст.	3,44	-	76	14,6	44,6	84	5,9	4
К-1011-1	4,01	0,57	75	13,6	41,7	95	2,3	3
К-858-2	4,16	0,72	75	13,7	37,7	69	0,0	2

Наибольшая прибавка к стандарту по урожайности была у номеров К-1011-1 и К-858-2. По содержанию белка и клейковины все образцы уступили стандарту, но по белку соответствовали классу 2, по клейковине классу 1. По устойчивости к болезням К-1011-1 устойчив к пыльной головне, умеренно восприимчив к бурой ржавчине. К-858-2 не поражался головнёй и умеренно устойчив к бурой ржавчине.

Образцы имеют разную морфологию. К-1011-1 относится к разновидности лютеценс (безостый), а К-858-2 к разновидности эритроспермум (остистый). В производстве сегодня есть запрос на безостые сорта. Таким образом, на основе сравнения признаков и результатов экологического испытания было принято решение о дальнейшей передаче в сортоиспытание образца К-1011-1 как наиболее перспективного.

Исследование выполнено в рамках проекта № 124082200040-7 «Селекция зерновых культур на адаптивность и продуктивность, разработка приемов ускоренного размножения и технологий возделывания новых сортов в экстремальных условиях Средней Сибири».

Литература:

- [1] Сидоров А. В. Селекция яровой пшеницы в Красноярском крае: монография. Красноярск: ФИЦ КНЦ СО РАН, 2018. 208 с.
- [2] Сидоров А. В., Федосенко Д. Ф., Голубев С. С. Вестник КрасГАУ, № 3, С. 3-8 (2017).
- [3] Методика государственного сортоиспытания сельскохозяйственных культур. Выпуск первый (общая часть). М.: Колос, 2019. 329 с.

Связь между реактивацией бактериальных люцифераз после каталитического акта и интенсивностью их флуоресценции

Шахматов Илья Вячеславович

Сибирский Федеральный Университет

Ферменты – это биокатализаторы, структура которых должна, с одной стороны, стабилизировать интермедиаты в каталитическом цикле, а с другой – способствовать увеличению скорости химической реакции и скорости оборота фермента. Одной из причин снижения скорости оборота ферментов зачастую является медленное высвобождение продукта после каталитического акта. Бактериальная люцифераза обеспечивает непрерывное свечение бактерий, поэтому высокая скорость её оборота важна для яркой биолюминесценции клеток [1]. Наличие триптофановых остатков в области активного центра люциферазы позволяет предположить, что различные стадии реакции отражаются на кинетике флуоресцентного сигнала белка. Целью работы было сравнение механизмов реактивации люцифераз двух кинетических подсемейств (быстрые и медленные), используя метод собственной люминесценции белка.

Была исследована кинетика реакций, катализируемых люциферазами *Photobacterium leiognathi* и *Vibrio harveyi*, с помощью комбинации методов остановленного потока и флуоресценции белка. При этом использовали восстановленный флавиномононуклеотид (FMNH₂) и альдегиды с длиной цепи 8, 10, 12 и 14 углеродных атомов (C8, C10, C12 и C14) в качестве субстратов. Сначала были получены данные по восстановлению активности люцифераз после первого оборота фермента, используя параметры биолюминесцентных вспышек в ответ на повторное введение FMNH₂. Было установлено, что активность люциферазы *P. leiognathi* в течение 15 с восстанавливается до начального уровня, в то время как для фермента *V. harveyi* степень восстановления активности за 60 с не превышала 30%. В дополнительной серии экспериментов было установлено, что к снижению количества активного фермента приводит инкубирование люцифераз с альдегидами, при этом данный эффект гораздо более выражен для люциферазы *V. harveyi*, чем для *P. leiognathi*.

Далее кинетика биолюминесценции была сопоставлена с кинетикой флуоресценции люциферазы в ходе реакции (при длине волны возбуждения 280 нм и регистрации 330 нм). Было установлено, что в ходе катализа флуоресцентный сигнал белка в течение ~0,15 с снижается по экспоненциальному закону, после чего возрастает до стационарного уровня в течение ~15 с. Первый этап оказался не зависимым от присутствия альдегида, что говорит об его обусловленности связыванием FMNH₂. Скорость второго этапа оказалась соответствующей скорости реактивации люциферазы после каталитического акта, определённой по биолюминесцентному сигналу, что говорит о применимости метода флуоресценции белка для экспериментальной регистрации скорости оборота фермента. Сравнение кинетики флуоресценции люцифераз в реакции с разными альдегидами показало, что с участием C14 образование продуктов по световому пути проходит с большей скоростью, что в целом приводит к ускорению реактивации люциферазы.

Благодарности:

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта №25-24-00617. Автор выражает благодарность соавторам работы: научному руководителю Немцовой Елене Владимировне и Лисице Альберту Евгеньевичу.

Литература:

[1] Li Z., Meighen E. A., Journal of Biological Chemistry, V. 269, PP. 6640-6644 (1994).

Особенности прохождения микроспорогенеза *Larix sibirica* Ledeb. и *Larix gmelinii* Rupr. в Сибири

Шемберг Антон Михайлович

Институт леса им. В.Н Сукачева ФИЦ КНЦ СО РАН

Для большинства видов рода *Larix* характерен особый тип прохождения мейоза: микроспорогенез начинается осенью и заканчивается весной [1].

Цель данной работы – сравнение особенности развития генеративных органов лиственницы сибирской и лиственницы Гмелина в условиях Красноярской лесостепи.

В качестве объектов исследования служили деревья лиственницы сибирской и лиственницы Гмелина, произрастающие на территории дендрария Института леса им. В. Н. Сукачева СО РАН г. Красноярск.

Сбор генеративных органов лиственницы сибирской и лиственницы Гмелина проводился с конца октября 2021 года по конец ноября 2024 года. Проведённые исследования позволили обнаружить более раннее развитие генеративных органов лиственницы Гмелина по сравнению с лиственницей сибирской. Мейоз у лиственницы Гмелина завершается в конце февраля – начале марта при низких положительных температурах, Сумма эффективных к периоду завершения микроспорогенеза для данного вида составляла всего 13-35°C. У лиственницы сибирской прохождение всех стадий мейоза требует значительно большего промежутка времени. Мейоз у лиственницы сибирской заканчивается в начале апреля при сумме эффективных температур 33-58°C. В тёплую осень 2024 г. лиственница Гмелина полностью завершила мейотические деления в ноябре при сумме эффективных температур 13,4° С.

Таким образом, температурный фактор оказывает решающее значение на прохождение микроспорогенеза у лиственницы.

Автор работы выражает искреннюю благодарность д.б.н., профессору Третьяковой И. Н. за неоценимую помощь в исследовании.

Литература:

[1] Круклис М. В., Милютин Л. И. Лиственница Чекановского. Москва: Наука, 1977. 212 с.

Антропогенное воздействие на залив Варча (Красноярское водохранилище) на основе анализа углистых частиц в донных отложениях

Шмурова Анна Андреевна

Сибирский Федеральный Университет, Институт биофизики СО РАН

Углистые частицы, как продукт горения биомассы, служат маркером для реконструкции истории пожаров, как природных и антропогенных. В донных отложениях залива Варча (Хакасия, Красноярское водохранилище) проведен анализ углистых частиц (1D, 2D, 3D) размером более 100 мкм за период последних 50 лет. Методы исследования включали микроскопический анализ и подсчет частиц, что позволило установить хронологию и выявить периоды повышенной пожарной активности.

Показано, что поток углистых частиц в донные отложения залива Варча возрос в последние около 20 лет, что вероятно обусловлено человеческой деятельностью. Эти данные вносят вклад в понимание взаимодействия природных и антропогенных факторов в формировании экосистем региона и могут быть использованы для прогнозирования последствий современных изменений климата.

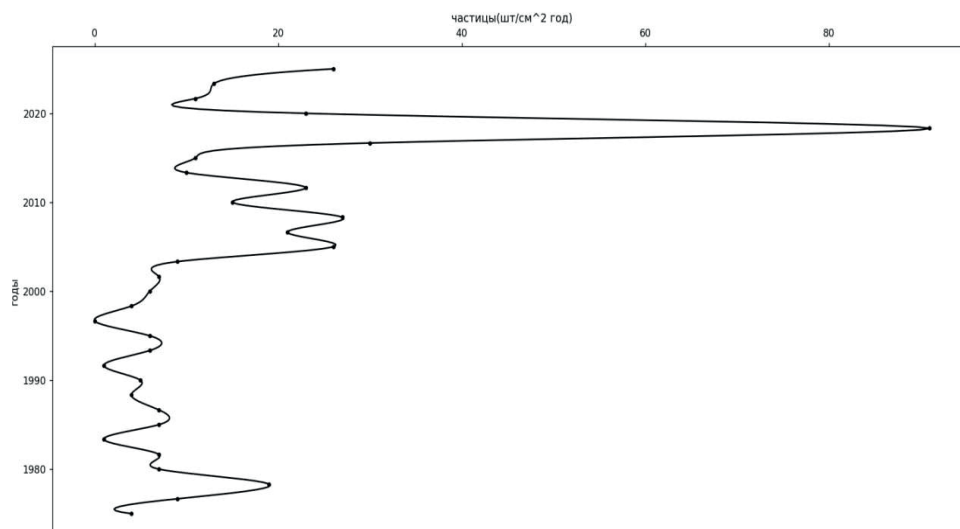


Рис. 1. Динамика потока углистых частиц размером > 100 мкм в донные отложения залива Варча.

Благодарности:

Работа выполнена в рамках государственного задания Института биофизики ФИЦ КНЦ СО РАН, тема FWES 2024-0024 Авторы благодарны сотрудникам ИБФ СО РАН к.б.н. Зыкову В.В. и к.б.н. Бульхину А.О. за помощь при отборе донных отложений.

Литература:

- [1] Marlon, J. R. Quaternary Research, 96, PP. 66-87 (2020).
- [2] Рогозин Д.Ю. и др. Науки о Земле. Т. 511, № 2. 280-286 (2023).

Секция «Математическое моделирование»

Конференция молодых учёных 2025 по математическому моделированию, информационным технологиям и фундаментальной математике проводится при поддержке Красноярского математического центра, финансируемого Минобрнауки РФ в рамках мероприятий по созданию и развитию региональных НОМЦ (Соглашение № 075-02-2025-1606).

Моделирование решёточных газов на основе клеточных автоматов

Баженев Евгений Аркадьевич

Институт математики и фундаментальной информатики СФУ

Клеточные автоматы — семейство универсальных моделей, применяемых в самых разных областях, где необходимо моделирование и визуализация сложных процессов. В работе рассмотрены классические клеточно-автоматные модели газовой динамики (модели решёточного газа), среди которых основное внимание уделено методу решёточных уравнений Больцмана (*LBM*) — дискретному аналогу уравнения Больцмана.

Первые модели газовой динамики появились в 80 гг. XX века. Модель *HPP* [1] основана на четырехугольной сетке, что делает ее неинвариантной относительно вращений. Модель *FHP* [2] использует шестиугольную сетку, а в некоторых улучшенных вариантах модели добавлена седьмая скорость, описывающая частицу в состоянии покоя. В отличие от предшествующих моделей, *LBM* рассматривает не отдельные частицы, а функцию распределения вероятностей частиц по координатам и скоростям. Это устраняет главный недостаток моделей *HPP* и *FHP* — большую длину свободного пробега частиц. В работе проведены все этапы метода: перемещение, расчет макроскопических величин (плотность и скорость), процессы столкновения и обновления, рассмотрены отражающие и периодические граничные условия, играющие важную роль в точности модели.

Для проверки точности метода *LBM* использован вихрь Тейлора-Грина — классический пример течения, который широко используется в моделировании благодаря наличию аналитического решения, выраженному в двумерном случае формулами (1)-(2).

$$u_x = \sin x \cos y e^{-2\nu t}, \quad (1)$$

$$u_y = -\cos x \sin y e^{-2\nu t}, \text{ где } \nu - \text{кинематическая вязкость.} \quad (2)$$

Это решение позволяет сравнивать вычисленные результаты с точным решением, что делает вихрь Тейлора-Грина удобным инструментом для проверки точности методов.

Этот подход дал возможность изучить влияние параметров вязкости и размерности решетки на динамику течения. Расчетные данные согласуются с аналитическим решением с низкой погрешностью. Полученные контур и векторный график скорости (рис. 1) соответствуют ожидаемым результатам и подтверждают высокую точность метода.

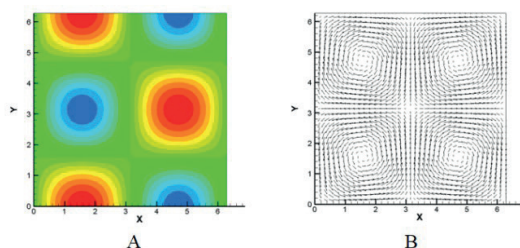


Рис. 4. А – контур скорости вихря Тейлора-Грина; В – векторный график скорости вихря Тейлора-Грина, полученные методом *LBM*.

В заключение можно отметить, что в рамках данного исследования была успешно проведена проверка точности метода *LBM* на примере вихря Тейлора-Грина. В дальнейшем планируется расширить область применения метода *LBM* для моделирования более сложных систем, включая турбулентные течения.

Автор выражает благодарность научному руководителю Кучуновой Елене Владимировне.

Литература:

- [1] Hardy J., Pazzi de O., Pomeau Y. Molecular dynamics of a lattice gas: Transport properties and time correlation functions, P. 1949-1961 (1976).
- [2] Frisch U., Hasslacher B., Pomeau Y. Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equation, P. 1505-1508 (1986).

Построение регулярного политопа по С-струнным группам

Бактыбеков Бек Бактыбекович

Институт математики и фундаментальной информатики СФУ

Политоп, как математический объект, представляет собой частично упорядоченное множество с дополнительными аксиомами, ограничивающими структуру. Впервые политопы были введены в 1970-х годах в работе Грюнбаума, а их определение и теория были разработаны Данцером и Шульте и подробно описаны в книге по этой теме МакМулленом и Шульте [1].

Определение 1. [2] Группа, порождённая инволюциями $\{\rho_0, \rho_1, \dots, \rho_{n-1}\}$, называется С-группой, если

$$\forall J, K \subseteq \{0, 1, \dots, n-1\}, \langle \rho_j | j \in J \rangle \cap \langle \rho_k | k \in K \rangle = \langle \rho_i | i \in J \cap K \rangle.$$

Определение 2. [2] Группа, порождённая множеством инволюций $\{\rho_0, \rho_1, \dots, \rho_{n-1}\}$, называется струнной С-группой, кратко n -струнной или просто струнной, если

$$(\rho_j \rho_k)^2 = 1 \forall j, k \in \{0, 1, \dots, n-1\}, \text{ при } |j - k| \geq 2.$$

Теорема 1. [2] Для любого регулярного политопа P его группа автоморфизмов $Aut(P)$ является струнной группой. Более того, существует взаимно однозначное соответствие между регулярными политопами ранга n и n -струнными группами.

В докладе приводятся определения абстрактного политопа и С-струнной группы. Также представлена теорема 1, которая связывает регулярные политопы с С-струнными группами.

Работа поддержана Красноярским математическим центром, финансируемым Минобрнауки РФ (Соглашение № 075-02-2025-1790).

Автор выражает благодарность соавтору работы Нужину Якову Нифантьевичу, д-ру физ.-мат. наук, профессору, заведующему кафедры алгебры и математической логики ИМиФИ СФУ.

Литература:

- [1] McMullen P., Schulte E. Encyclopedia Math. Appl., V. 92, Cambridge University Press (2002)
- [2] Baktybekov B. B., Conder M. D. E., Nuzhin Ya. N., Rezantseva A. V. J. Siberian Federal University. Mathematics Physics (submitted).

**Доказательство финитарного типа унификации в
суперинтуиционистских логиках методом n -характеристической модели**
Брылякова Елизавета Валерьевна
Институт математики и фундаментальной информатики СФУ

Исследование дедуктивных систем, включая интуиционистскую и модальную логики, составляет основу анализа неклассических логик. Центральным аспектом таких исследований выступает унификация, которая открывает возможности для системного изучения структурных особенностей этих систем и их взаимодействия.

Проблема проверки доказуемости сохраняет фундаментальную значимость в любой логической парадигме. Особое внимание в современных исследованиях приковано к задачам трансформации формул в доказуемые формы путём замены переменных.

Формула $\varphi(p_1, \dots, p_n)$ называется **унифицируемой** в логике $L \Leftrightarrow \exists \sigma : p_i \mapsto \sigma(p_i), \forall p_i$, такая, что $\varphi(\sigma(p_1), \dots, \sigma(p_n)) \in L$, [1]. Важным направлением в теории унификации является классификация логик по типам унификации. Логика обладает *унитарным* типом, если каждая унифицируемая в ней формула имеет наиболее общий унификатор (н.о.у.). Если же существуют формулы без н.о.у., логика может относиться к следующим типам:

- финитарный — все унифицируемые формулы имеют конечные наборы максимальных унификаторов;
- инфинитарный — существуют формулы с бесконечным числом максимальных унификаторов;
- нулевой — некоторые унифицируемые формулы не имеют максимальных унификаторов.

В данной работе доказывается финитарный тип унификации для предтабличных расширений интуиционистской логики $L2$ и $L3$. Доказательство основано на методе n -характеристических моделей, разработанном В.В. Рыбаковым [2].

Работа поддержана Красноярским математическим центром, финансируемым Минобрнауки РФ (Соглашение № 075-02-2025-1790).

Литература:

- [1] Ghilardi S. Annals of Pure and Applied Logic, P. 183-198 (2000).
[2] Rybakov V.V. Studies in logic and the foundations of mathematics, P. 279-383 (1997).

Применение метода CUSUM для поиска разладок в измерениях систем мониторинга воздуха города Красноярска

Голубев Роман Андреевич

Институт вычислительного моделирования СО РАН

Проблема загрязненности воздуха города Красноярска с каждым годом становится все более актуальной. Для мониторинга ситуации в городе и окрестностях развернута система мониторинга приземленного слоя атмосферы, включающая в себя более 20 постов наблюдения. На каждом посту расположены датчики, раз в 20 минут фиксирующие такие характеристики состояния атмосферы как температура, влажность, давление, концентрация взвешенных частиц РМ 2.5 и пр. Таким образом, накопленные за период 2019-2023 гг. измерения представляют собой временные ряды, которые содержат как пропуски, так и существенные изменения в структуре. Эти изменения являются физически значимыми, поскольку могут соответствовать, например, сменам температурных режимов или резкому повышению концентрации загрязнителя в атмосфере (так называемому режиму «черного неба»). Моменты времени, в которые произошли существенные изменения в структуре временного ряда, называют разладками. Проблема поиска разладок в имеющихся данных также усугубляется наличием малой сезонности – суточных колебаний, которые при неправильном подборе метода могут быть ошибочно классифицированы как разладки.

В связи с указанными особенностями одним из перспективных методов поиска разладок в имеющихся данных является метод CUSUM (cumulative sum) [1,2]. В основе метода лежит предположение, что распределение исходных данных известно, и в точке разладки происходит смена этого распределения. Такой подход позволяет не учитывать мелкие колебания в данных и небольшое число выбросов.

В рамках исследования проведен анализ применимости метода CUSUM для поиска разладок в измерениях температуры воздуха, полученных системами экологического мониторинга. Исследована чувствительность метода к структурным особенностям ряда. Определены дальнейшие перспективы метода для использования более сложных наборов данных.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта 24-71-10022.

Автор выражает благодарность соавторам работы: Кареповой Евгении Дмитриевне (Институт вычислительного моделирования СО РАН) и Петраковой Виктории Сергеевне (Институт вычислительного моделирования СО РАН).

Литература:

- [1] Basseville M, I. Nikiforov. Detection of abrupt changes: Theory and application, P. 35-43 (1993).
- [2] Granjon, P. The CUSUM algorithm a small review (2012).

Распространение волн в структурно-неоднородных упругих средах блочного строения

Ефимов Евгений Александрович

Институт вычислительного моделирования СО РАН

Горные породы — яркий пример структурно-неоднородных сред блочного строения. Концепция блочно-иерархического строения массивов горных пород с вложенными друг в друга блоками была разработана в работах М. А. Садовского [1]. Блоки разделяются между собой достаточно тонкими прослойками, представляющими собой частично разрушенную породу. Прослойки обладают сложной реологией и, как правило, податливее блоков. Для описания тонких прослоек предлагается использовать уравнения, представляющие собой внутренние граничные условия для блоков. Для обоснования применения упрощённой модели прослоек решена задача о распространении плоских монохроматических волн в упругой среде со слоем. Проведена оценка коэффициентов отражения и преломления в зависимости от отношения толщины прослойки к длине монохроматической волны.

Рассматривается задача динамики упругой блочно-слоистой среды в трёхмерной постановке. Для расчётов использовался авторский программный комплекс, предназначенный для многопроцессорных систем кластерной архитектуры. Проведено сравнение решений задачи Лэмба в блочно-слоистой и в дискретно-периодической среде [2]. Результаты численного эксперимента сопоставлены с данными лабораторного эксперимента из [3]. На рисунке 1 показаны линии уровня вертикальной составляющей вектора скорости в блочных средах с податливыми прослойками различной толщины.

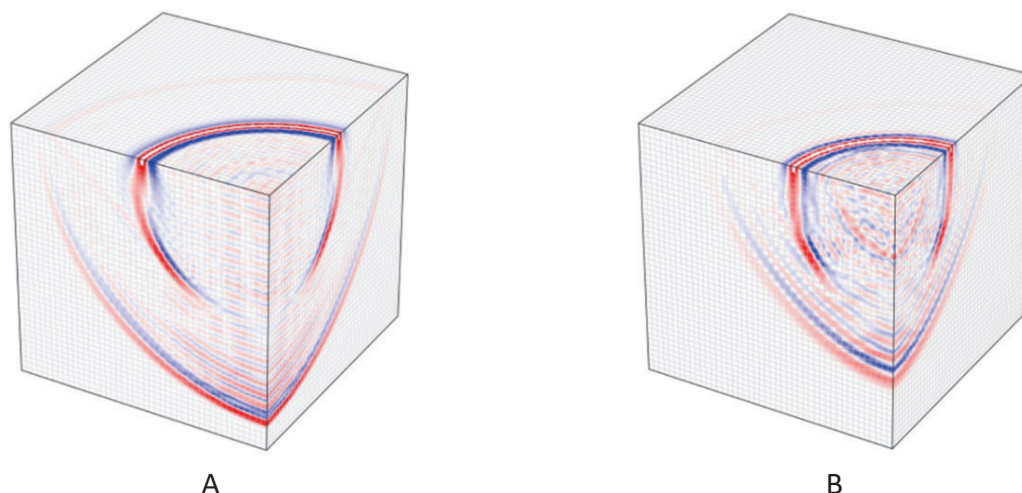


Рис. 1. Поле вертикальной компоненты скорости в средах из $45 \times 45 \times 45$ одинаковых кубических блоков, отношение толщины прослойки к размеру блока $A - \delta/H = 0.01$; $B - \delta/H = 0.05$.

Работа поддержана Красноярским математическим центром, финансируемым Минобрнауки РФ в рамках мероприятий по созданию и развитию региональных НОМЦ (Соглашение 075-02-2025-1606).

Литература:

- [1] Садовский М.А. ДАН СССР, Т. 247, С. 829-832 (1979).
- [2] Александрова Н.И. Фундаментальные и прикладные вопросы горных наук, Т. 2, № 2, С. 194-198 (2015).
- [3] Сарайкин В.А., Черников А.Г., Шер Е.Н. Прикладная механика и техническая физика, Т. 56, № 4, С. 170-181 (2015).

Разработка прототипа системы оповещения по данным IoT устройств
Камышев Никита Львович
Институт математики и фундаментальной информатики СФУ

В рамках данного проекта разработан прототип системы, предназначенной для мониторинга показателей состояния воздуха в технологических помещениях с телекоммуникационным оборудованием ИВМ СО РАН. Основной задачей системы является выявление аномальных данных и оперативное информирование пользователей о событиях, которые могут свидетельствовать об отклонениях в параметрах работы оборудования и изменениях характеристик окружающей среды. Для обнаружения аномалий применяются методы анализа на основе динамических критериев. Работоспособность системы обеспечивается технологией «Heartbeat»-мониторинга.

Архитектурные решения системы базируются на интеграции современных инструментов сбора, хранения, визуализации и анализа данных. Сбор показателей выполняется по протоколу *MQTT*. Для интеграции информации, получаемой из различных источников, строятся *API*-запросы. В качестве системы хранения выбрана СУБД *MongoDB*, обеспечивающая гибкость и масштабируемость базы данных. Визуализация и мониторинг реализованы с помощью связки *Prometheus* и *Grafana*. В *Prometheus* создаются метрики для последующего отслеживания, а оповещения формируются через *Alert Manager*. *Grafana* предоставляет расширенные механизмы визуализации. Для проверки состояния всего проекта используется механизм «Dead man», который сигнализирует о возможных сбоях в работе системы.

Итоговым результатом проекта является программный механизм оповещений в мессенджере *Telegram*. Система формирует специализированные уведомления и графические представления отслеживаемых аномалий. Методология выявления аномалий включает следующие подходы: использование стандартного отклонения, квантилей и средних значений для вычисления границ нормальных данных, выявление корреляции между основными параметрами с усреднением данных, учёт сезонности, построение гистограмм для выявления выбросов, расчёт скорости изменения данных и пр. При анализе учитываются индивидуальные характеристики каждого источника данных.

Таким образом, разрабатываемая система представляет собой комплексное решение для мониторинга и оповещения, объединяющее современные методы обработки данных и технологии их визуализации.

Автор выражает благодарность научному руководителю Исаевой Ольге Сергеевне (Институт вычислительного моделирования СО РАН).

Литература:

- [1] [Электронный ресурс]. URL: <https://builtin.com/machine-learning/anomaly-detection-algorithms> (дата обращения: 03.03.2025).
- [2] Seif Rajhi. [Электронный ресурс]. URL: <https://seifrajhi.github.io/blog/securing-monitoring-stack-dead-man-switch/> (дата обращения: 03.03.2025).
- [3] Исаева О.С., Кулясов Н.В., Исаев С.В. Информационные и математические технологии в науке и управлении, V. 3, № 27. С.113-125 (2022).
- [4] Белли Л. Journal of Big Data, T. 6, № 1, С. 14-28 (2019).

Анализ и сравнение данных различных климатических моделей для обработки временных рядов метеорологических факторов

Кулясов Никита Владимирович

Институт вычислительного моделирования СО РАН

Для сложных временных рядов метеорологических данных, содержащих пропуски, выбросы, разладки и физически значимые аномалии необходимость применения интеллектуальных методов анализа данных и их комбинаций обусловлена большей точностью и эффективностью таких подходов в сравнении с традиционными. К таким комбинированным методам можно отнести методы машинного обучения, такие как Random Forest, XGBoost, а также более специализированные подходы, например Bidirectional Recurrent Imputation for Time Series (BRITS) [1] и другие методы для восстановления пропусков и обнаружения аномалий. Эти методы позволяют учитывать различия в структуре временных рядов, а также менее чувствительны к пропускам и выбросам.

Для повышения качества предсказаний и уменьшения ошибки моделей необходимо обеспечить более богатое и разнообразное представление входных данных. Одним из таких подходов является обогащение данных [2]. Это метод увеличения числа параметров путем добавления дополнительной информации, полученной из внешних источников. В частности, для метеорологических данных, такими источниками могут выступать:

- данные, предоставляемые с других измерительных станций;
- исторические данные;
- метеорологические прогнозы.

В работе рассмотрены наборы данных различных моделей прогноза метеорологических показателей доступные из открытых источников [3], представлены объёмы и перечни доступных параметров, произведено сравнение с историческими данными натурных измерений.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта № 24-71-10022.

Литература:

[1] Gupta M., Beheshti R. arXiv preprint arXiv:2009.08900. – 2020.

[2] Хозяинов И. [Электронный ресурс]. URL:

<https://habr.com/ru/companies/itsumma/articles/552100/> (дата обращения: 03.02.2025).

[3] Zippenfenig, Patrick. Open-Meteo.com Weather API., Zenodo, 2023, doi:10.5281/ZENODO.7970649.

Нейросетевые модели временных рядов для прогнозирования уровня загрязнения атмосферы в г. Красноярске

Лев Никита Андреевич

Институт космических и информационных технологий СФУ

В работе представлены результаты прогнозирования величины концентрации твердых взвешенных частиц $PM_{2.5}$ в атмосфере города Красноярска с помощью моделей рекуррентных нейронных сетей разновидности *LSTM* [1]. Проведено сравнение с ранее построенными моделями временных рядов *ARIMAX*, которые показали лучшее качество прогнозирования по сравнению с другими моделями машинного обучения [2].

Для прогнозирования были взяты данные наземных станций оперативного мониторинга [3] по метеоусловиям и концентрациям $PM_{2.5}$ в атмосферном воздухе г. Красноярска за 5 лет с 2019 по 2024 гг. Исходные данные были разделены на временные периоды, в зависимости от величины концентрации $PM_{2.5}$, приблизительно соответствующие сезонам года [4].

Модель *LSTM* (*Long short-term memory*) представляет собой цепочку повторяющихся блоков, каждый из которых состоит из четырех слоёв, взаимодействующих между собой при помощи вентилях забывания, входа, выхода и внутреннего состояния.

Были построены различные модели *LSTM* на данных, усреднённых по суткам и по часам. Наилучшее качество прогнозирования продемонстрировали модели, обученные на почасовых данных $MAE = 5,27$, в то время как на среднесуточных $MAE = 10,83$. Затем почасовой прогноз также был усреднен до среднесуточного.

Проведено сравнение моделей *LSTM* с ранее построенными моделями *ARIMAX*. На Рис. 1 приведены результаты прогнозирования с 10 по 12 марта 2023 года.

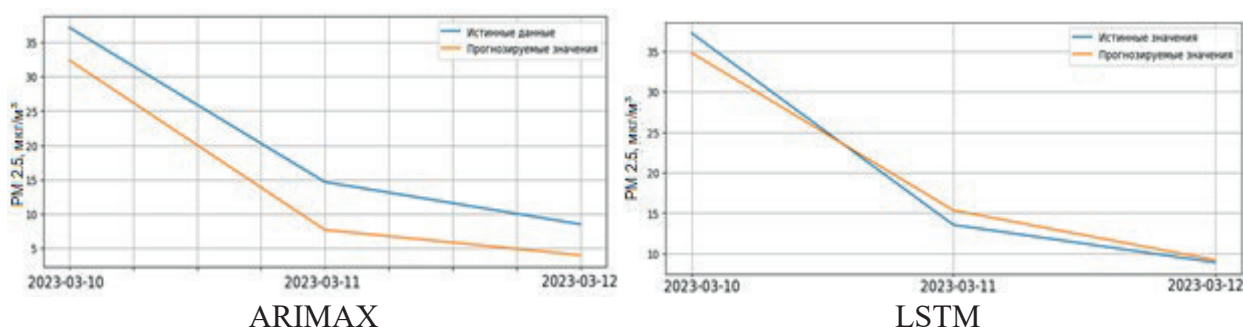


Рис. 1. Истинные и прогнозируемые значения, слева – модель *ARIMAX*, справа – модель *LSTM*

Согласно полученным результатам, модель *LSTM* продемонстрировала лучшее качество прогнозирования. Для модели *ARIMAX* значение метрики $MAPE = 0,58$, для модели *LSTM* – $MAPE = 0,54$.

Литература:

- [1] Das R., Middy A. I., Roy S.. Artif. Intell. Rev, V. 55, P. 1253-1287 (2022).
- [2] Лев Н.А. «Перспектива Свободный – 2024» Материалы XX Международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых, С. 463-466 (2024).
- [3] Геопортал – данные оперативного мониторинга [Электронный ресурс]. URL: <http://sensor.krasn.ru/sc/> (дата обращения: 11.02.2025).
- [4] Volodko O., Yakubailik O., Lapo T., Dergunov A. E3S Web of Conf. V. 392, P. 02022 (2023).

Сравнительный анализ моделей концентрационной поляризации при фильтрации водных растворов в ячейке с радиальным потоком

Максимова Анна Алексеевна, Рыжков Илья Игоревич

Институт вычислительного моделирования СО РАН, Институт космических и информационных технологий СФУ

Для разделения, очистки и концентрирования растворов широко используются баромембранные процессы: микрофильтрация, ультрафильтрация, нанофильтрация и обратный осмос [1]. В данных процессах создается трансмембранная разность давлений, которая вызывает поток растворителя и растворенного вещества через мембрану. Растворенное вещество полностью или частично задерживается мембраной, в результате чего на ее поверхности возникает высококонцентрированный слой, оказывающий сопротивление массопереносу. Это явление называется концентрационной поляризацией [2]. Поляризационные явления сопровождают многие мембранные процессы разделения. Так как падение потока негативно сказывается на технико-экономических показателях мембраны, необходимо принимать меры для устранения причин, связанных с этим явлением. Для уменьшения проявлений концентрационной поляризации применяют перемешивание раствора, регулируют скорость потока вдоль мембраны либо влияют на коэффициент массопереноса путем изменения форм и размеров модуля, снижая длину или увеличивая его гидродинамический диаметр [3]. Для более глубокого понимания и предсказания эффектов концентрационной поляризации активно используется математическое моделирование.

В работе рассмотрены двумерная осесимметричная и трехмерная математические модели течения растворителя и растворенного в фильтрационной ячейке с мембраной в виде плоского диска заданного диаметра. Данные численной модели сравниваются с корреляциями, основанными на автомоделных решениях упрощенных уравнений движения и массопереноса [4].

Показано, что при фиксированной скорости сырьевого потока увеличение скорости через мембрану увеличивает концентрацию вблизи нее, а при фиксированной скорости потока через мембрану увеличение скорости сырьевого потока уменьшает среднюю концентрацию и влияние концентрационной поляризации. Также было установлено хорошее согласие данных, полученных на основе численного расчёта в Ansys Fluent с корреляциями на основе автомоделного решения упрощенных уравнений движения и массопереноса. Полученные результаты могут быть использованы для совершенствования дизайна фильтрационной ячейки с радиальным течением раствора.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект № 23-19-00269.

Литература:

- [1] Mulder M.K. Academic pub-lishers, Dodrecht. Boston. London, 1999.
- [2] Andrew L.Z. Journal of Membrane Science, V. 130, P. 275-281 (1997).
- [3] Miranda M., Campos B.L.M., Journal of Membrane Science, V. 182, P. 257-270 (2001).
- [4] De S., Bhattacharya P.K. Journal of Membrane Science, V. 128, P. 119-131 (1997).

Исследование влияния выбора начального шума на генерацию изображений с помощью диффузионной вероятностной модели

Мирза Михаил Алексеевич

Институт математики и фундаментальной информатики СФУ

В данной работе исследуется влияние фиксированного начального шума (seed) на качество генерации изображений с использованием диффузионной модели [1] StableDiffusion v2.1 [3]. Диффузионные модели - класс вероятностных генеративных моделей, которые превращают шум в репрезентативную выборку данных, при помощи процесса обратной диффузии. Цель работы заключается в выявлении зависимости оценочных метрик (ISC [4], CLIPScore [2]) и стилистических особенностей генерируемых изображений от значений seed. Задача исследования состоит в изучении возможности оптимизации качества генерации изображений диффузионными моделями без существенного увеличения вычислительных затрат, а также в формировании групп максимально разнообразных изображений.

В рамках работы проводился вычислительный эксперимент по генерации изображений с помощью диффузионной модели. В рамках эксперимента было сгенерировано 60 тысяч изображений (по 600 изображений из датасета party-prompts [5] с использованием 100 случайных значений seed). Для полученных данных был выполнен анализ распределения оценок и латентных представлений, извлеченных с помощью модели CLIP [2].

В результате исследования установлено, что некоторые значения начального шума приводят к генерации изображений с заметно более высокими или низкими оценками, что свидетельствует о значительном влиянии начального шума на итоговое качество изображений.

Автор выражает благодарность научному руководителю Барановой Ирине Владимировне (Институт математики и фундаментальной информатики СФУ).

Литература:

- [1] Ho J., Jain A., Abbeel P. Denoising Diffusion Probabilistic Models. // arXiv preprint arXiv:2006.11239, 2020.
- [2] Radford A., Kim J.W., Hallacy C., et al. CLIP: Learning Transferable Visual Models From Natural Language Supervision. OpenAI, 2021.
- [3] Rombach R., Blattmann A., Lorenz D., Esser P., Ommer B. Stable Diffusion: High-Resolution Image Synthesis with Latent Diffusion Models. 2022.
- [4] Salimans T., Goodfellow I., Zaremba W., et al. Advances in Neural Information Processing Systems, 2016.
- [5] [nateraw/party-prompts](https://huggingface.co/datasets/nateraw/party-prompts) [Электронный ресурс]. URL: <https://huggingface.co/datasets/nateraw/party-prompts> (дата обращения: 16.01.2025).

Численное интегрирование гравитационной задачи N тел с сохранением энергии и углового момента

Морозов Никита Витальевич

Институт математики и фундаментальной информатики СФУ

Гравитационная задача N тел является одной из основных задач небесной механики и астрофизики. В относительной системе отсчета в ней существует четыре сохраняемых величины: полная энергия E , три компоненты (L_x, L_y, L_z) вектора углового момента $\mathbf{L}$. Соблюдение законов сохранения на протяжении всего процесса численного интегрирования задачи позволяет существенно улучшить точность посчитанных орбит тел системы. Классические методы численного интегрирования не сохраняют инварианты движения [1], либо требуют значительных вычислительных затрат. Различные методы поправок были предложены и в других работах [2-5], однако все они позволяют сохранять лишь полную энергию системы, не сохраняя при этом угловой момент.

В данной работе предложен метод поиска поправок к шагу произвольного алгоритма численного интегрирования, позволяющих сохранить все инварианты движения.

В гамильтоновой формулировке задачи каждое из N тел описывается радиус вектором $\mathbf{r}_n$, импульсом $\mathbf{p}_n$ и массой m_n . Численное интегрирование задачи предполагает дискретизацию по времени, поэтому обозначим $E_0, \mathbf{L}_0$ соответственно полную энергию и угловой момент системы в начальный момент времени. Поправки к радиус-векторам и импульсам каждого тела системы будем искать в виде $\mathbf{p}' = \alpha \mathbf{p}$, $\mathbf{r}' = \beta \mathbf{r}$. Решение найдем путем введения методом множителей Лагранжа функционала

$$\frac{(\sum_i \frac{\bar{p}_i'^2}{2m_i} - \sum_{i < j} G \frac{m_i m_j}{|\bar{\mathbf{r}}_i' - \bar{\mathbf{r}}_j'|} - E_0)^2}{E_0^2} + \frac{(\sum_i \bar{\mathbf{r}}_i' \times \bar{\mathbf{p}}_i' - \bar{\mathbf{L}}_0)^2}{\bar{\mathbf{L}}_0^2} + \bar{\lambda}_p \sum_i \bar{p}_i' + \bar{\lambda}_r \sum_i m_i \bar{r}_i' - extr.$$

Проведение большого числа численных экспериментов показало, что данный метод позволяет строго сохранять инварианты движения при численном решении гравитационной задачи N тел. Он не зависит ни от выбранного метода численного интегрирования, ни от величины его шага и не требует значительных вычислительных затрат.

Автор выражает благодарность своему научному руководителю канд. физ.-мат. наук, доценту базовой кафедры ММиПУ ИМиФИ СФУ Золотову Олегу Александровичу.

Литература:

- [1] Yoshida H. Physics letters A, V. 150, № 5-7, P. 262-268 (1990).
- [2] Ma D.Z., Wu X., Zhong S. Y. The Astrophysical Journal, V. 687, № 2, P. 1294 (2008).
- [3] Fukushima T. The Astronomical Journal, V. 126, № 2, P. 1097 (2003).
- [4] Liu L., Liao X.H., Acta Astron. Sinica, V. 28, P. 225 (1987).
- [5] Zolotov O.A., Zalizniak V.E. Nanosystems: physics, chemistry, mathematics, V. 4, № 5, P. 657-669 (2013).

О полуполевых проективных плоскостях, допускающих A_4

Окунева Дарья Андреевна, Анай-оол Орлан Маадырович, Тухтасинов Рустам Алишерович, Валиев Владислав Денисович

Институт математики и фундаментальной информатики СФУ

Решается задача построения и исследования конечных проективных плоскостей, координатизируемых неассоциативными алгебраическими системами — полуполями (подробнее см., например, [1]).

Рассматривая полуполе Q как векторное пространство размерности n над полем $\mathbb{Z}_p$, можно построить отображение θ из Q в $GL_n(p) \cup \{0\}$, такое что:

- 1) $\forall x, y \in Q \det(\theta(x) - \theta(y)) = 0 \Leftrightarrow x = y$;
- 2) $\theta(0,0) = 0, \exists e \in Q: \theta(e) = E$;
- 3) θ — аддитивная функция: $\theta(x + y) = \theta(x) + \theta(y) \forall x, y \in Q$.

Множество $R = \{\theta(x) | x \in Q\}$ будем называть *регулярным множеством* полуполя Q и полуполевого пространства π , координатизируемой этим полуполем. Предполагая выполнение некоторых ограничений на автоморфизмы плоскости π , можем получить матричное представление регулярного множества и построить примеры искомых плоскостей (при условии их существования).

Основным результатом является матричное представление регулярного множества плоскости порядка p^4 (p — простое число), допускающей знакопеременную группу A_4 в группе коллинеаций:

$$\theta(x, y, z, t) = \begin{pmatrix} t & j^2 z & bj^2 y & c j x \\ b j z & t & j x & c j^2 y \\ y & b x & t & c z \\ x & y & z & t \end{pmatrix}, \quad x, y, z, t \in \mathbb{Z}_p,$$

где $j, b, c \in \mathbb{Z}_p$ и $j^3 = 1$. Полученный результат уточняет следствие из [1]. Непосредственный компьютерный перебор показывает, однако, что для простых чисел $p < 4500$ определитель матрицы при определенных наборах (x, y, z, t) равен нулю, и регулярное множество указанного вида не существует. Выявленные в ходе расчетов закономерности позволяют надеяться на доказательство более общего результата.

Работа поддержана Красноярским математическим центром, финансируемым Минобрнауки РФ (Соглашение № 075-02-2025-1790).

Литература:

[1] Кравцова О.В. Известия вузов. Серия «Математика», № 9, С. 10-25 (2016).

Кортежная семантика в линейной модальной логике

Поляков Александр Алексеевич

Институт математики и фундаментальной информатики СФУ

Теория унификации занимает важное место в современных исследованиях в области модальных логик. Наибольший интерес в теории унификации представляют следующие задачи: определение типа унификации в логике, исследование унифицируемости её формул, поиск эффективных алгоритмов построения унификаторов и сопутствующие вопросы. При разрешении этих вопросов применительно к модальной логике Alt_1 в [1] было введено два типа семантик.

Логика Alt_1 — минимальная нормальная модальная логика, содержащая аксиому $\Diamond x \rightarrow \Box x$. Данная логика характеризуется классом линейных шкал Крипке. В то же время, в качестве альтернативы семантике Крипке, авторы [1] вводят кортежную семантику, в которой истинность формул определяется конечными упорядоченными наборами множеств переменных. Доклад посвящён исследованию этого нестандартного подхода для логики Alt_1 , проводимую совместно с Т. Ю. Зверевой.

Данный подход легко переложить на линейную временную логику $LTL.sl$, в которой временное отношение достижимости не рефлексивно и не транзитивно. В процессе его обоснования доказывается свойство конечной модели для логики $LTL.sl$. Кроме того, в докладе даётся обобщение кортежной семантики, применимое к рефлексивным и транзитивным линейным логикам.

Работа поддержана Красноярским математическим центром, финансируемым Минобрнауки РФ (Соглашение № 075-02-2025-1790).

Литература:

[1] Balbiani P., Tinchev T. *Advances in Modal Logic*, V. 11, P. 117-134 (2016).

Критерий 3-струнности и его следствия

Резанцева Анна Владимировна

Институт математики и фундаментальной информатики СФУ

Теорема 1. [1] Пусть конечная группа G порождается тремя инволюциями α, γ, β , первые две из которых перестановочны, причем порядки произведений $\alpha\beta$ и $\beta\gamma$ больше 2. Тогда G является группой автоморфизмов регулярного 3-политопы или содержит нетривиальную нормальную подгруппу N , лежащую в $\langle\alpha\beta\rangle$ или в $\langle\beta\gamma\rangle$.

Теорема 2. [2] Пусть конечная группа G порождается тремя инволюциями α, β и γ , такими что α и γ перестановочны, а порядки произведений $\alpha\beta$ и $\beta\gamma$ больше 2. Тогда только одно из следующих утверждений выполняется:

- А. Порождающее множество $\{\alpha, \beta, \gamma\}$ делает G группой автоморфизмов регулярного 3-политопы. (б) Пересечение $\langle\alpha\beta\rangle \cap \langle\beta\gamma\rangle$ содержит нетривиальную нормальную подгруппу группы G .
- Б. Пересечение $\langle\alpha, \beta\rangle \cap \langle\beta, \gamma\rangle$ является элементарной абелевой подгруппой порядка 4.

Следствие 1. [2] Пусть конечная группа G порождается тремя инволюциями α, γ, β , первые две из которых перестановочны, причем порядки произведений $\alpha\beta$ и $\beta\gamma$ больше 2, и хотя бы один из них является простым числом. Тогда справедливо одно из следующих двух утверждений:

- А. G является группой автоморфизмов регулярного 3-политопы.
- Б. G — диэдральная группа, и в этом случае порядок одного из произведений $\alpha\beta$ или $\beta\gamma$ является четным числом (а другого простым).

Следствие 2. [2] Пусть конечная группа G порождается тремя инволюциями α, γ, β , первые две из которых перестановочны, причем порядки произведений $\alpha\beta$ и $\beta\gamma$ больше 2. Тогда, если порядки обоих произведений $\alpha\beta$ и $\beta\gamma$ — нечетные числа, и хотя бы порядок одного из них — простое число, то G является группой автоморфизмов регулярного 3-политопы.

Литература:

- [1] Conder M., Oliveros D. Combinatorial Theory, Series A, V. 120, № 6, P. 1291-1304 (2013).
- [2] Baktybekov B. B., Conder M. D. E., Nuzhin Ya. N., Rezantseva A. V. Siberian Federal University. Mathematics Physics (submitted).
- [3] Leemans D. Contemporary Mathematics, V. 764, P. 157-178 (2021).

Применение генетического алгоритма для построения оптимальной беспроводной сенсорной сети на трехмерной модели здания

Сиротинин Анатолий Андреевич

Институт вычислительного моделирования СО РАН

В настоящей работе представлены результаты решения задачи оптимизации для расстановки связующих узлов (хабов) в беспроводной сенсорной сети (БСС) на трехмерной модели здания. Проблематика построения БСС, выбора радиоволновой модели и алгоритма оптимизации обсуждались в работе [1]. Построение БСС рассматривается на примере здания научного института для создания в нем безопасного и комфортного автоматизированного рабочего пространства.

Для решения задачи оптимальной расстановки хабов комбинируется радиоволновая модель — дополненная модель Мотли-Кинана [2], которая учитывает затухание сигнала в стенах и межэтажных перекрытиях и оптимизационный метод — классический генетический алгоритм [3].

Целью работы является проектирование структуры оптимальной базовой сети для технологии интернета вещей на трехмерной модели здания. В предлагаемой структуре в качестве базовой сети для соединения хабов используется стандарт Wi-Fi, а датчики подключаются по стандарту ZigBee. Такая гибридная структура позволяет существенно увеличить энергоэффективность сети. Построение беспроводной сенсорной сети рассматривается на примере здания научного института. Задача оптимизации заключается в оптимальной расстановке хабов с учётом максимально возможного уровня мощности сигнала и минимально возможных затрат на хабы и коммуникации.

Для реализации генетического алгоритма всё здание разбивается на клетки, каждая из которых представляет собой куб заданного размера. В качестве хромосомы выбран бинарный вектор, который описывает расстановку хабов во всём здании. Для части здания проведены модельные расчеты и определены оптимальные места для расстановки хабов базовой сенсорной сети.

Литература:

- [1] Сиротинин А.А., Володько О.С. Информационные и математические технологии в науке и управлении, Т. 34, № 2, С. 135-143 (2024).
- [2] Zhang Y., Wang F., Shen Y. et al. Information Computing and Applications: Second International Conference, Qinhuaangdao, China. Proceedings, Part I 2, P. 458-465 (2011).
- [3] Goldberg D.E. Canada: Addison-Wesley Longman Publishing Co., Inc., P.412, (1989).

О малых 2-подгруппах автотопизмов конечных полуполевого проективных плоскостей

Скок Дарья Сергеевна

Институт вычислительного моделирования СО РАН

В связи с проблемой классификации конечных полуполей и известной гипотезой Дэниэла Хьюза 1959 года [1] о разрешимости группы коллинеаций (автоморфизмов) конечной недезарговой полуполевого проективной плоскости большое значение имеет информация об автотопизмах, то есть коллинеациях, фиксирующих треугольник. Изучается также возможность существования полуполевого проективных плоскостей с условиями на группу автотопизмов. Отсутствие определенных подгрупп автотопизмов может служить базой для продвижения в решении проблемы Хьюза.

Продолжая исследование [2] существования диэдральных или кватернионных подгрупп порядка 8 в группе автотопизмов конечного полуполя, представляем следующие результаты (в том числе см. [3]).

Пусть π – недезаргова полуполевого проективная плоскость порядка p^N ($p > 2$ простое), Λ — ее группа автотопизмов.

1. В случае $p \equiv 1 \pmod{4}$ группа автотопизмов Λ содержит подгруппу $H \simeq D_8$ тогда и только тогда, когда Λ содержит подгруппу $F \simeq Q_8$, причем подгруппы H и F обязательно содержат гомологию.
2. В случае $p \equiv -1 \pmod{4}$ и $N > 4$ группа автотопизмов Λ может содержать подгруппу, изоморфную D_8 или Q_8 , в которой нет гомологий. При $N = 4$ подгруппы $H \simeq D_8$ без гомологий в группе автотопизмов нет.
3. Если S – силовская 2-подгруппа в группе автотопизмов Λ недезарговой полуполевого проективной плоскости π порядка p^4 , где $p > 2$ – простое, то элементарная абелева 2-подгруппа $F < S$ имеет порядок 4, 8 или 16, причем $|F \cap Z(\Lambda)| = 4$.
4. Не существует недезарговых полуполевого проективных плоскостей порядка 81 с диэдральной подгруппой автотопизмов порядка 8 без гомологий. Существует единственная недезаргова полуполевого проективная плоскость порядка 81, в группе автотопизмов которой есть подгруппы кватернионов порядка 8 без гомологий.

Автор выражает благодарность научному руководителю Ольге Вадимовне Кравцовой (Институт математики и фундаментальной информатики СФУ).

Литература:

- [1] Hughes D.R., Piper F.C. New York Inc: Springer-Verlag, 1973.
[2] Kravtsova O.V., Skok D.S. J. Siberian Federal University. Math & Physics, V. 16, № 6, P. 705-719 (2023).
[3] Кравцова О.В., Скок Д.С. Труды Института математики и механики УрО РАН, Т. 31, № 1, С. 90-100 (2025).

Разрешимость STLK^{REL}

Смелых Кирилл Александрович

Институт математики и фундаментальной информатики СФУ

Реляционная семантика логики STLK^{REL} [1], в отличие от классических подходов в виде TPS или сетей Петри, позволяет моделировать иерархические и дерево-видные структуры взаимодействий агентов. Это делает её особенно полезной для анализа систем, где присутствуют как кооперативные, так и конкурентные отношения между агентами [2].

Доклад посвящен исследованию разрешимости STLK^{REL} и оценке сложности логики. В работе предложена методология синтаксического анализа, включающая построение абстрактного синтаксического дерева (AST), преобразование формул в отрицательную нормальную форму (NNF). Показаны леммы, ограничивающие раскрытие временных операторов и ограничивающие размер модели на основе модальной глубины и степени ветвления. Разработан алгоритм построения модели, основанный на сформулированных леммах, а также алгоритм проверки её корректности.

Работа поддержана Красноярским математическим центром, финансируемым Минобрнауки РФ (Соглашение № 075-02-2025-1790).

Литература:

[1] Башмаков С.И., Смелых К.А. Известия Иркутского государственного университета. Серия Математика, Т. 47, С. 78-92 (2024).

[2] Halpern J.Y., Vardi M.Y. Journal of Computer and System Sciences, V. 38, № 1, P. 195-237 (1989).

Оценка адекватности функции распределения среднемесячных температур воздуха в городе Термез

Соколова Ангелина Антоновна, Татарников Артем Павлович

СибГУ науки и технологий им. М.Ф. Решетнева

В современном мире анализ данных играет ключевую роль в науке, бизнесе и технологиях. Гибким инструментом описания эмпирических функций распределения являются смеси нормальных распределений (СНР) [1]. Задача оценки адекватности СНР эмпирическим данным решается применением статистических критериев согласия Фроцини, омега-квадрат, Колмогорова. Статистика критериев оценивалась методами имитационного моделирования по результатам проведения 2000 вычислительных экспериментов [2, 3]. Результаты вычислительных экспериментов позволяют оценить статистику изменения параметров СНР и доверительные области из изменения, что важно при решении задач формирования виртуальных цифровых двойников объектов, корреляционные матрицы и законы распределения параметров которых адекватны реальным объектам [3]. Параметры СНР оценивались методом максимального правдоподобия [4].

В табл. 1 представлены результаты проверки по критериям Фроцини, Омега-квадрат, Колмогорова адекватности четырехкомпонентной СНР и эмпирической функции распределения среднемесячной температуры воздуха в городе Термез [5]. Показано, что сравнение эмпирической и теоретической СНР по рассматриваемым критериям согласия не противоречит гипотезе их адекватности при 5% уровне значимости.

Таблица 1. Оценка адекватности эмпирической и четырехкомпонентной СНР по критериям Фроцини, омега-квадрат, Колмогорова при 5% уровне значимости

Параметры	Критерий Фроцини				Критерий омега-квадрат				Критерий Колмогорова			
	F_{fp}	F_{fk}	α_{fp}	α_{fk}	F_{fp}	F_{fk}	α_{fp}	α_{fk}	F_{fp}	F_{fk}	α_{fp}	α_{fk}
Значения	0,111	0,11	0,121	0,05	0,020	0,14	0,126	0,05	0,011	0,57	0,016	0,05
n – число компонент СНР; $F_{рас}$, $F_{кр}$ – расчетное и критическое значения критериев согласия; $\alpha_{рас}$, $\alpha_{кр}$ – уровни значимости, соответствующие $F_{рас}$, $F_{кр}$.												

Авторы выражают благодарность научному руководителю работы к.т.н., доценту Ушанову Сергею Викторовичу (СибГУ науки и технологии им. М.Ф. Решетнева).

Литература:

- [1] Кобзарь, А. И. Прикладная математическая статистика. Для инженеров и научных работников, Москва, С. 320-350 (2006).
- [2] Лемешко Б. Ю. Москва: Инфра-Москва, 2015.
- [3] Лепп Н.Э., Ушанов С.В. Актуальные проблемы авиации и космонавтики. Красноярск, С. 342-344 (2022).
- [4] Ушанов С.В., Лепп Н.Э. Решетневские чтения. Красноярск, С. 35-37 (2022).
- [5] Погода и климат. [Электронный ресурс]. URL: <https://www.pogodaklimat.ru/> (дата обращения: 17.02.2025).

Оценка параметров функции распределения среднемесячных температур воздуха в городе Термез

Соколова Ангелина Антоновна, Татарников Артём Павлович

СибГУ науки и технологий им. М.Ф. Решетнева

Современный анализ данных часто сталкивается с задачами, требующими моделирования сложных распределений. Одним из эффективных инструментов для решения таких задач является применение смеси распределений, которые позволяют описывать данные как комбинацию нескольких компонент, каждая из которых соответствует отдельной подгруппе с уникальными характеристиками [1, 2].

Компоненты смеси нормальных распределений характеризуются тремя параметрами: математическое ожидание, стандартное отклонение, доля в смеси. Оценка параметров распределений проводится методом максимального правдоподобия (ММП) и методами оценки минимальных расстояний, получаемых минимизацией расчетных значений статистических критериев согласия Фроцини, омега-квадрат, Колмогорова [3]. Для перехода от задачи условной оптимизации к эквивалентной задаче безусловной оптимизации принята предложенная в [3] замена параметров, характеризующих доли компонентов в смеси.

В табл. 1 представлены результаты ММП-оценки четырехкомпонентной смеси нормальных распределений (СНР), полученных аппроксимацией распределения среднемесячных температур воздуха в городе Термез [4]. Оценки математических ожиданий каждой компоненты соответствуют средним температурам соответствующего сезона. Стандартные отклонения характеризуют сезонную изменчивость среднемесячных температур [2]. Доля компонентов в смеси связана с продолжительностью сезонов.

Таблица 1. Оценка распределения среднемесячных температур в Термезе четырехкомпонентными СНР

Переменная	1 компонента			2 компонента			3 компонента			4 компонента		
	M_1	S_1	λ_1	M_2	S_2	λ_2	M_3	S_3	λ_3	M_4	S_4	λ_4
Значения	7,75	4,37	0,437	17,42	2,03	0,143	23,30	1,46	0,155	29,02	1,55	0,265
n – номер компоненты СНР; M_n , S_n , λ_n – ММП-оценки математического ожидания, стандартного отклонения, доли n компоненты в СНР.												

Авторы выражают благодарность научному руководителю работы к.т.н., доценту Ушанову Сергею Викторовичу (СибГУ науки и технологии им. М.Ф. Решетнева).

Литература:

- [1] Лепп Н.Э., Ушанов С.В. Актуальные проблемы авиации и космонавтики. Красноярск, С. 342-344 (2022).
- [2] Кобзарь, А. И. Прикладная математическая статистика. Для инженеров и научных работников, Москва, С. 320-350 (2006).
- [3] Ушанов С.В., Лепп Н.Э. Решетневские чтения. Красноярск, С. 35-37 (2022).
- [4] Погода и климат. [Электронный ресурс]. URL: <https://www.pogodaklimat.ru/> (дата обращения: 12.02.2025).

Оценка адекватности теоретической и эмпирической функций распределений методами статистических испытаний

Трусов Михаил Андреевич

СибГУ науки и технологий им. М.Ф. Решетнева

Одна из важнейших задач обработки экспериментальных данных связана с оценкой адекватности теоретической и эмпирической функций распределения. Для решения этой задачи в работе применяются критерии согласия Фроцини, омега-квадрат, Колмогорова. Статистики этих критериев оцениваются методом статистических испытаний в условиях проверки сложной гипотезы [1, 2].

Параметры теоретических функций распределения оцениваются методом максимального правдоподобия (ММП) и методами оценки минимальных расстояний, получаемых минимизацией расчетных значений статистических критериев согласия Фроцини, омега-квадрат, Колмогорова [1, 2].

В табл. 1 представлены результаты проверки адекватности 4-х компонентной смеси нормальных распределений (СНР) и эмпирической функции распределения среднемесячных температур воздуха в г. Красноярск [3].

Таблица 1. Оценка адекватности четырехкомпонентными СНР и эмпирической функции распределения среднемесячных температур воздуха в Красноярске.

Параметр	Период времени 1843-1937				Период времени 1938-2000				Период времени 2001-24			
	1*	2*	3*	4*	1*	2*	3*	4*	1*	2*	3*	4*
Ffp	0.091	0.081	0.082	0.096	0.092	0.088	0.089	0.105	0.084	0.070	0.071	0.102
Ffk	0.124	0.103	0.108	0.179	0.122	0.104	0.106	0.177	0.123	0.105	0.106	0.174
αfp	0.56	0.52	0.51	0.89	0.51	0.29	0.32	0.73	0.67	0.67	0.84	0.84
αfk	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05
Fwp	0.013	0.011	0.011	0.013	0.014	0.012	0.012	0.016	0.013	0.009	0.009	0.016
Fwk	0.027	0.019	0.019	0.044	0.026	0.019	0.018	0.043	0.027	0.021	0.019	0.042
αwp	0.63	0.52	0.54	0.90	0.55	0.37	0.40	0.75	0.60	0.72	0.78	0.75
αwk	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05
Fkp	0.013	0.015	0.013	0.010	0.014	0.013	0.013	0.011	0.022	0.019	0.018	0.018
Fkk	0.021	0.019	0.017	0.017	0.021	0.019	0.017	0.017	0.032	0.031	0.027	0.026
αkp	0.81	0.31	0.50	0.88	0.71	0.67	0.48	0.78	0.73	0.60	0.74	0.66
αkk	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05

Ffp, Ffk, αfp, αfk – расчетное, критическое значение критерия Фроцини и уровни значимости им соответствующие; Fwp, Fwk, αwp, αwk – расчетное, критическое значение критерия омега-квадрат и уровни значимости им соответствующие; Fkp, Fkk, αkp, αkk – расчетное, критическое значение критерия Колмогорова и уровни значимости им соответствующие; 1*, 2*, 3*, 4* – критерии оценки параметров: ММП, Фроцини, омега-квадрат, Колмогорова.

Автор выражает благодарность научному руководителю работы к.т.н., доценту Ушанову Сергею Викторовичу (СибГУ науки и технологий им. М.Ф. Решетнева).

Литература:

- [1] Лепп Н.Э., Ушанов С.В. Актуальные проблемы авиации и космонавтики. Красноярск, С. 342-344 (2022).
- [2] Огурцов Д.А., Ушанов С.В. Решетневские чтения. Красноярск, С. 200-201 (2019).
- [3] Погода и климат. [Электронный ресурс]. URL: <https://www.pogodaiklimat.ru/> (дата обращения: 16.02.2025).

Оценка параметров теоретических функций распределений по эмпирическим данным

Трусов Михаил Андреевич

СибГУ науки и технологий им. М.Ф. Решетнева

Одна из важнейших задач обработки экспериментальных данных связана с оценкой закона распределения, описывающего случайную величину для исследуемой выборки. Значимость решения этой задачи возрастает в связи с созданием объектов цифровой виртуальной реальности, при формировании которых необходимо знание теоретических функций распределения, адекватных эмпирическим функциям распределения [1].

При выборе теоретической функции распределения применяются классические распределения, распределения Джонсона, семейства распределений Пирсона, ряды Грама-Шарлье, ряды специальных функций, семейства смесей распределений. Оценка параметров распределений проводится методом максимального правдоподобия (ММП) и методами оценки минимальных расстояний, получаемых минимизацией расчетных значений статистических критериев согласия Фроцини, омега-квадрат, Колмогорова [2].

В табл. 1 представлены результаты оценки параметров 4-х компонентной смеси нормальных распределений (СНР), полученных при аппроксимации среднемесячных температур воздуха в г. Красноярск [3].

Таблица 1. Оценка распределения среднемесячных температур воздуха в Красноярске четырехкомпонентными СНР

Параметр	Период времени 1843-1937				Период времени 1938-2000				Период времени 2001-24			
	1*	2*	3*	4*	1*	2*	3*	4*	1*	2*	3*	4*
N	723	723	723	723	723	723	723	723	288	288	288	288
M ₁	-12.32	-12.43	-12.46	-12.39	-11.46	-11.40	-11.37	-11.41	-8.59	-7.92	-7.80	-8.46
S ₁	6.47	6.54	6.47	6.46	6.10	6.09	6.05	5.90	7.53	8.08	8.17	7.63
Λ ₁	0.453	0.450	0.448	0.453	0.440	0.442	0.442	0.441	0.489	0.516	0.522	0.488
M ₂	1.75	1.77	1.77	1.75	2.01	1.99	1.99	2.01	3.43	3.22	3.27	3.43
S ₂	1.69	1.86	1.91	1.68	2.12	2.03	1.99	2.12	1.83	1.32	1.22	1.83
Λ ₂	0.126	0.134	0.137	0.123	0.146	0.142	0.140	0.146	0.093	0.064	0.059	0.084
M ₃	9.21	9.21	9.23	9.16	9.03	8.95	8.93	9.06	9.62	9.75	9.73	9.64
S ₃	1.70	1.53	1.51	1.66	1.18	1.19	1.22	1.18	1.48	1.94	1.94	1.49
Λ ₃	0.163	0.153	0.148	0.161	0.151	0.149	0.149	0.152	0.156	0.178	0.177	0.169
M ₄	16.90	16.74	16.72	16.75	16.39	16.30	16.29	16.33	17.48	17.79	17.79	17.57
S ₄	2.26	2.37	2.35	2.22	2.07	2.11	2.17	2.08	1.93	1.83	1.79	2.00
Λ ₄	0.258	0.263	0.266	0.263	0.263	0.267	0.269	0.261	0.261	0.243	0.248	0.259

n – объем выборки; i = 1,...,4 – номер компоненты в СНР; M_i, S_i, Λ_i – оценки математического ожидания, стандартного отклонения, доли i – й компоненты; 1*, 2*, 3*, 4* – критерии оценки параметров: ММП, Фроцини, омега-квадрат, Колмогорова.

Автор выражает благодарность научному руководителю работы к.т.н., доценту Ушанову Сергею Викторовичу (СибГУ науки и технологии им. М.Ф. Решетнева).

Литература:

- [1] Лепп Н.Э., Ушанов С.В. Актуальные проблемы авиации и космонавтики. Красноярск, С. 342-344 (2022).
- [2] Ушанов С.В., Лепп Н.Э. Решетневские чтения. Красноярск, С. 35-37 (2022).
- [3] Погода и климат. [Электронный ресурс]. URL: <https://www.pogodaiklimat.ru/> (дата обращения: 16.02.2025).

Оптическая хроматография сверхмалых частиц в наклонном оптическом потенциале

Шадрина Галина Владимировна

Институт вычислительного моделирования СО РАН

Манипулирование микронными и субмикронными частицами с использованием бесконтактных сил является важной областью современных прикладных исследований [1]. Для этой цели подходят оптические лучи, которые как линейно поляризованы, так и имеют угловой импульс, что позволяет генерировать оптические силы и крутящие моменты для оптического кодирования, захвата, связывания, сортировки и перемещения наночастиц из одного места в другое. Важно, чтобы силы, действующие со стороны электромагнитного поля (ЭМП), были сравнимы с силой броуновского движения наноразмерных частиц. Только тогда внешнее ЭМП может оказывать влияние на положение частицы в пространстве. Традиционно, в качестве источника ЭМП для цели сортировки частиц по выбранному параметру (радиус, диэлектрическая проницаемость и др.) используют резонансные моды. И теоретические расчеты показывают, что такая схема работает для разделения частиц, различающихся размером в разы: 200 нм, 300 нм и 500 нм [2]. Но ведь множество объектов, которые мы хотим научиться сортировать имеет размер, гораздо меньший сотни нанометров! В том числе, молекулы и вирусы. Поэтому, проблема состоит в том, что до сих пор не было предложено схемы эксперимента, в котором бы удавалось бы разделить действительно наноразмерные объекты (радиусом порядка 1 нм). Техническая сложность состоит в том, что чем меньше частица по размеру, тем более интенсивное ЭМП требуется для ее удержания. А обычные резонансные моды не дают требуемой интенсивности поля. Выходом может стать использование оптического квази-связанного состояния в континууме, давно известного в оптике фотонно-кристаллических структур. В данной работе мы предлагаем и обосновываем способ сортировки сверхмалых частиц по размеру (радиусом в районе 3 нм и точностью сортировки $\pm 0,6$ нм) за счет броуновского движения в наклонном оптическом потенциале, индуцированном квази-связанным состоянием в континууме [3].

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта № 22-12-00070.

Автор выражает благодарность научному руководителю и соавтору работы: Булгакову Евгению Николаевичу (КНЦ ИФ СО РАН).

Литература:

- [1] Gao D., Ding W., Nieto-Vesperinas M., et al. Light: Science & Applications, V. 6, e17039 (2017).
- [2] Zhao H., Chin. L., Shi. Y., et al. Sensors and Actuators: B. Chemica, V. 331, 129428 (2021).
- [3] Bulgakov E., Shadrina G. Journal of the Optical Society of America B, V. 42, P. 358 (2025).

Численное исследование выноса частиц с помощью буровых растворов, модифицированных углеродными нанотрубками

Шебелев Александр Валерьевич, Гаврилов Андрей Анатольевич, Минаков Андрей Викторович

Сибирский федеральный университет

В работе представлены результаты моделирования течения неньютоновских жидкостей с частичками в кольцевых каналах, модифицированных углеродными нанотрубками. Показано влияние их концентрации в растворе на эффективность к выносу шлама и перепад давления. Также получены картины течения суспензии в кольцевом канале.

Оптимизация буровых растворов с использованием наноматериалов (наночастицы оксидов металлов, углеродные трубки) способствует повышению эффективности выноса шлама за счет улучшения реологических и фильтрационных свойств. Однако механизмы их взаимодействия с компонентами раствора и влияние на гидродинамику при высоких давлениях и температурах недостаточно изучены. Численное моделирование многофазных течений методами CFD (Computational Fluid Dynamics) позволило определить оптимальные концентрации нанодобавок. Результаты исследования прогнозируют их эффективность в реальных условиях бурения. Это создает основу для разработки инновационных решений в нефтегазовой отрасли.

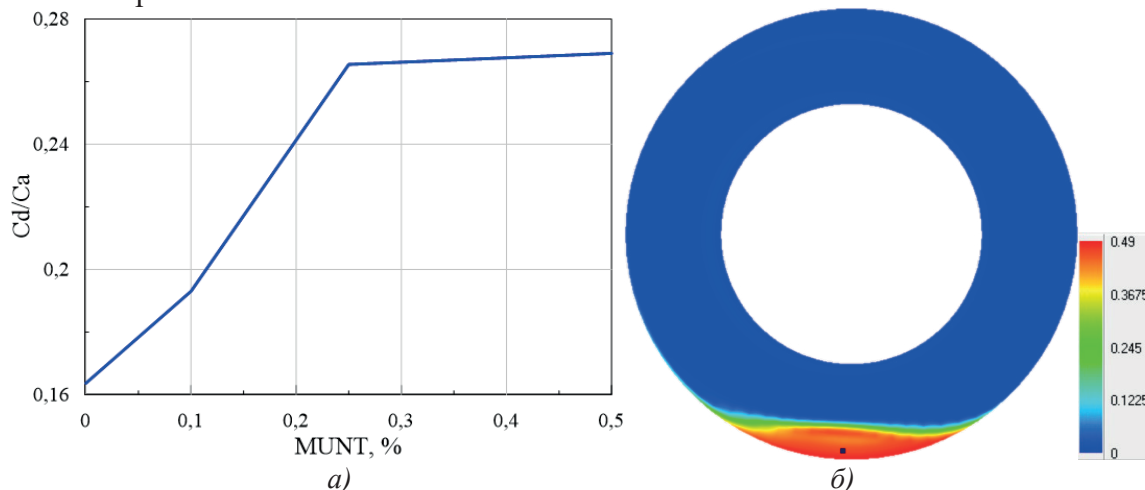


Рис.1. а) Зависимость эффективности выноса шлама от концентрации добавки МУНТ для растворов на УВ основе и б) распределение концентрации частиц в центральном сечении канала для бурового раствора с концентрацией МУНТ 0,1 масс. %.

На рисунке 1а видно, что добавление МУНТ в базовый буровой раствор положительно сказывается на способности жидкости к выносу шлама. Максимальный вынос достигается при добавлении 0,25 % МУНТ и составляет 1,56 раза от базового бурового раствора, дальнейшее увеличение концентрации МУНТ практически не меняет эффективность выноса.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-79-30022.

Литература:

- [1] Гаврилов А.А., Шебелев А.В. Известия РАН. Механика жидкости и газа, № 2, С. 84-98 (2018).
- [2] Johnson P. C, Jackson R. Journal of Fluid Mechanics, V. 176, P. 67-93, (1987).

Подходы к анализу результатов alignment-free метода сравнения символьных последовательностей

Шехова Анна Андреевна

Институт вычислительного моделирования СО РАН

В работах [1-3] предложен и описан метод сравнения генетических последовательностей и поиска в них совпадающих фрагментов, который принципиально отличается от наиболее распространенного в данной области метода выравнивания. Основная идея метода заключается в преобразовании каждой генетической (в общем случае символьной) последовательности в набор бинарных и вычислении попарных сверток последних с последующим суммированием результатов. Ускорение процесса вычислений достигается благодаря использованию быстрого преобразования Фурье.

Этот подход применим не только к генетическим последовательностям, но и к любым символьным. При сравнении двух последовательностей метод формирует целочисленную последовательность, где каждое значение отражает количество совпадающих символов во всех возможных конфигурациях/наложениях исходных последовательностей, независимо от расположения этих совпадений. Анализ этой итоговой последовательности позволяет выявить значимые совпадения и определить их местоположение в исходных последовательностях.

Для анализа итоговой последовательности разработано несколько подходов, преследующих главным образом две цели. Первая: выделение значимых конфигураций/наложений с использованием

- 1) статистических оценок,
- 2) преобразования алфавита исходных последовательностей,
- 3) алгоритма, который подсчитывает совпадающие подстроки путем свертки одной и той же пары последовательностей при изменении алфавита.

Вторая цель — локализация, подходы к которой основаны на:

- 1) методе дихотомии,
- 2) применении весовой функции при вычислении свертки.

Работа поддержана Красноярским математическим центром, финансируемым Минобрнауки РФ в рамках мероприятий по созданию и развитию региональных НОМЦ (Соглашение 075-02-2025-1606).

Литература:

- [1] Shaidurov V., Karepova E., Sadovsky M., Molyavko A. Lecture Notes in Computer Science, V. 12108 LNBI, P. 472-481 (2020).
- [2] Molyavko A., Karepova E., Sadovsky M. [et al.] CEUR Workshop Proceedings, V. 2727, P. 108-114 (2020).
- [3] Молявко, А.А., Каропова Е.Д., Садовский М.Г. Информатизация и связь, № 4, С. 80-84 (2022).

Автомодельное решение для дальней области турбулентного слоя смешения

Юргенсон Кирилл Сергеевич

Институт вычислительного моделирования СО РАН

Для описания течения в дальних областях турбулентного слоя смешения привлекается *k-epsilon* модель турбулентности [1, 2]

$$\begin{aligned}\frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial y} &= 0, \\ U \frac{\partial U}{\partial x} + V \frac{\partial U}{\partial y} &= \frac{\partial}{\partial y} \left(C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \frac{\partial U}{\partial y} \right), \\ U \frac{\partial k}{\partial x} + V \frac{\partial k}{\partial y} &= \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{C_\mu k^2}{\sigma_k \varepsilon} \frac{\partial k}{\partial y} \right) + C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \left(\frac{\partial U}{\partial y} \right)^2 - \varepsilon, \\ U \frac{\partial \varepsilon}{\partial x} + V \frac{\partial \varepsilon}{\partial y} &= \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{C_\mu k^2}{\sigma_\varepsilon \varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial y} \right) + C_{\varepsilon 1} C_\mu k \left(\frac{\partial U}{\partial y} \right)^2 - C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k},\end{aligned}\tag{1}$$

где x — переменная, вдоль которой преимущественно развивается слой смешения, y — поперечная координата, U — продольная компонента скорости осредненного движения, V — поперечная компонента скорости осредненного движения, k — кинетическая энергия турбулентности, ε — скорость диссипации кинетической энергии турбулентности, $C_{\varepsilon 1}$, $C_{\varepsilon 2}$, σ_k , σ_ε , C_μ — эмпирические постоянные.

Построена автомодельная редукция уравнений *k-epsilon* модели (1) к системе обыкновенных дифференциальных уравнений. Для численного решения соответствующей краевой задачи для редуцированной системы применялся модифицированный метод стрельбы — данные для пристрелки определялись в результате решения вспомогательной краевой задачи с привлечением первых членов асимптотического разложения в окрестности особой точки. Отметим, что рассматриваемая краевая задача сложна для решения, так как система обыкновенных дифференциальных уравнений имеет особенность в коэффициентах в граничной точке.

Проведено сопоставление с имеющимися экспериментальными данными для дальних областей турбулентного слоя смешения. Получено удовлетворительное соответствие.

Автор выражает благодарность научному руководителю Шмидту Алексею Владимировичу (Институт вычислительного моделирования ИВМ СО РАН).

Литература:

- [1] Фрик П.Г. Турбулентность: модели и подходы. Курс лекций. Часть I. Пермь: Пермский государственный технический университет (1998).
- [2] Юн А. А. Москва: Книжный дом "ЛИБРОКОМ" (2010).

Обзор инструментальных средств визуализации и анализа данных объектов инфраструктуры в концепции «умного города»

Юров Антон Романович

Институт вычислительного моделирования СО РАН

В условиях стремительного роста городского населения и необходимости повышения эффективности управления городской инфраструктурой концепция «умного города» становится все более актуальной. Исследование направлено на оценку объемов данных и выбор инструментов анализа для задач анализа данных в концепции «Умный город».

Концепция «умного города» подразумевает интеграцию технологий и данных для создания устойчивых, эффективных и комфортных городских систем, где инновации служат для повышения качества жизни горожан. Инфраструктура «умного города» охватывает широкий спектр объектов города.

Частота взаимодействия с данными в рамках концепции «умного города» может варьироваться от минут до часов, в зависимости от типа объекта и целей анализа.

Объемы и типы данных в концепции «умного города» включают как структурированные данные, так и неструктурированные данные. Анализ объектов инфраструктуры включает в себя оценку состояния, производительности и устойчивости различных систем, что позволяет выявлять узкие места и предлагать оптимизации.

Ключевым аспектом является выбор инструментов, которые должны быть адаптированы к специфике данных и задачам. Например, приложение «Умные парковки» использует технологии интернета вещей (*IoT*) для мониторинга свободных мест и оптимизации процессов парковки.

Результатом исследования стал выбор подходящего инструмента и технологии для эффективного анализа и визуализации данных. Были подробно рассмотрены такие инструменты как Apache SuperSet, Yandex DataLens, Grafana. При сравнении данных инструментов, наш выбор пал на Apache SuperSet

Автор выражает благодарность научному руководителю Исаеву Сергею Владиславовичу (Институт вычислительного моделирования СО РАН).

Литература:

- [1] Попов Е. В., Семячков К.А. Москва: Издательство Юрайт (2025).
- [2] Портал о современных технологиях мобильной и беспроводной связи: официальный сайт. [Электронный ресурс]. URL: <https://1234g.ru/novosti/smart-city> (дата обращения: 10.01.2025).
- [3] Блог компании INTELVISION: официальный сайт. [Электронный ресурс]. URL: <https://www.intelvision.ru/services/smartcity> (дата обращения: 15.01.2025).
- [4] Портал новостей Интернета вещей: официальный сайт. [Электронный ресурс]. URL: <https://iot.ru/wiki/umnyy-gorod> (дата обращения: 02.02.2025).

Секция «Школы РАН»

Оценка автотранспортной нагрузки на атмосферный воздух города Красноярска

Акбулатова Дарья Тимуровна, Михайлова Кристина Владимировна
МБОУ СОШ №10 имени академика Ю.А. Овчинникова

Постоянное возрастание антропогенной нагрузки на воздух города требует более серьезного контроля качества воздуха.

В г. Красноярске уже в который раз вводится режим неблагоприятных метеоусловий, при котором из-за отсутствия ветра вредные вещества не рассеиваются в воздухе. Выхлопные газы автомобилей в Красноярске негативно сказываются на чистоте воздуха и осаждаются в придорожном снеге. Снежный покров накапливает в себе различные соединения.

В данном исследовании применяется новый метод в мониторинге – биолюминесцентный анализ [1]. Это простой в использовании экспресс метод, который чувствителен к широкому спектру токсикантов, а также не требует специфической подготовки к анализу. Тестирование базируется на исследовании живых объектов. Ученые с каждым годом всё больше изучают экологическое состояние различных сред и экосистем. Существует большое количество научных исследований, подтверждающих возможность оценки различных сред сложного состава с помощью метода биотестирования, в том числе и воды, слюны, косметики и так далее [3].

Дата сбора проб [2]: 13 февраля 2025 года 13:00 – 14:00 часов.

Места сбора: Проспект им. Газеты Красноярский рабочий; ТРЦ Планета (со стороны ул. Алексеева); Предмостная площадь (у Коммунального моста); Остановка «Центральный рынок»; СФУ (пр. Свободный, 79); Академгородок (ул. Академгородок, 50А).

Биолюминесцентное тестирование проводилось с использованием иммобилизованной ферментной системы, представленной в виде реагента «Энзимолум». Реагент «Энзимолум» – это высушенный крахмальный диск диаметром 7-8 мм (сухой вес $9 \pm 0,5$ мг), который содержит люциферазу из рекомбинантного штамма *Escherichia coli* и NAD(P)H:FMN-оксидоредуктазу из бактерий *Vibrio fischeri* (ИБФ СО РАН, Красноярск), длинноцепочечный альдегид C14 («GERBU», Германия) и FMN («Fluka», Германия). Измерения проводились на биолюминометре «LumiShot» (ООО «Прикладные системы», Красноярск).

По данным измерения максимальной интенсивности свечения, самый чистый район города – возле СФУ (ул.Свободный,79), самый грязный – около ТРЦ Планета (со стороны ул. Авиаторов). В дальнейшем, результаты, полученные с помощью биотестирования будут сопоставлены с данными системы мониторинга воздуха ФИЦ КНЦ СО РАН.

Литература:

- [1] Кудряшева Н.С., Есимбекова Е.Н., Медведева С.Е. и др. – Litres, 2022.
- [2] ГОСТ Р 59024-2020 Вода. Общие требования к отбору проб. - г.Москва, Российский институт стандартизации, 2022.
- [3] Сайт портативного люминометра LumiShot. Режим доступа: [<https://enzymolum.info/>]. Дата обращения: 24.03.2025 г.

Определение металл-содержащих молекул методом электронного парамагнитного резонанса в асцитной карциноме Эрлиха после криоконсервации

Анушенков П.М.¹, Крюкова О.В.^{1,2}

¹МАОУ Гимназия № 13 "Академ", ²ФИЦ КНЦ СО РАН

Криоконсервация биологических образцов в жидком азоте считается безопасным и экономически эффективным вариантом долгосрочного хранения. Разработка протоколов криоконсервации связана с пониманием процессов, протекающих при замораживании клеток, а также с методиками, позволяющими фиксировать изменения, происходящие при замораживании и размораживании клеток [1].

Метод электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) дает уникальную информацию о молекулах в биологических образцах, имеющих в своем составе металлы с переменной валентностью. В результате окислительно-восстановительных реакций молекула из диамагнитного состояния переходит в парамагнитное, давая хорошо различимый спектр ЭПР сигнала, который можно использовать для характеристики ткани [2].

Цель работы - оценка методом ЭПР содержания металл-содержащих молекул в суспензии асцитной карциномы Эрлиха (АКЭ) после криохранения образцов при разных температурах.

Клетки АКЭ забирали у мышей на 10 сутки развития опухоли. Для криоконсервации образцов использовали среду, состоящую из среды DMEM, FBS и DMSO (10%). Замораживание проводили в криопробирках при -20°C, -80°C, -196°C. Через 2 месяца получали спектры на ЭПР спектрометре EleXsys E500 (Bruker) и определяли жизнеспособность клеток на цитометре Cytotflex (Beckman Coulter).

По результатам ЭПР спектроскопии получено, что при всех используемых температурных режимах хранения образцов в суспензии АКЭ отсутствует пик резонансного поглощения, соответствующий церрулоплазмину (Cu²⁺), который выполняет важнейшую роль в клетках, регулируя процесс окисления Fe²⁺ в Fe³⁺. Интенсивность ЭПР сигнала молибден-содержащих (Mo⁵⁺) молекул в суспензии АКЭ после 2 месяцев хранения при температурах -80°C и -196°C имеет статистически значимые различия относительно уровня сигнала до замораживания ($p \leq 0,05$). Хранение образцов при температуре -20°C приводит к гибели клеток асцитной карциномы Эрлиха, обусловленной протеканием процессов окисления в клетках, о чем свидетельствует появление ЭПР сигнала Fe³⁺ в образцах и статистически значимое снижение интенсивности сигнала от молибден-содержащих белков ($p \leq 0,05$). Таким образом, несмотря на низкие температуры хранения образцов, процессы окисления в клетках продолжают, следовательно для оптимизации протоколов криохранения клеточных культур, в частности, асцитной карциномы Эрлиха, в качестве добавок к криосреде можно использовать компоненты, обладающие антиоксидантными свойствами для повышения жизнеспособности клеток.

Авторы выражают благодарность научному консультанту - к.б.н. Смольниковой М.В. (НИИ МПС), а также Красноярскому региональному ЦКП ФИЦ КНЦ СО РАН за предоставленное оборудование.

Литература:

- [1] Raju R., Bryant S.J., Wilkinson B.L., Bryant G. Biochim Biophys Acta Gen Subj. V/865(1). PP129749. (2021).
- [2] Тихонов А.Н. Электронный парамагнитный резонанс в биологии // Соросовский Образовательный Журнал. № 11. С. 8-15 (1997).

Параметры сна и полиморфизм гена рецептора окситоцина (OXTR)

Попова А. И.¹, Кузнецова П. В.¹, Горева Т. В.¹, Сподобаева Т. В.¹,

Миронов К.В.^{1,2}, Милейко А.Г.^{1,2}, Афоничева К. В.^{1,2}, Смольникова М.В.^{1,2}

¹МАОУ "Гимназия №13 "Академ",

²Научно-исследовательский институт медицинских проблем Севера НИИ МПС, ФИЦ КНЦ СО РАН

Сон играет критически важную роль в жизни подростков, нарушения сна могут влиять на психическое и физическое здоровье, академическую успеваемость, подверженность к патологическим зависимостям [1]. На качество сна влияет множество факторов, в том числе генетические варианты, оказывающие влияние на регуляцию сна посредством вариативности концентрации нейромедиаторов. Полиморфный ген окситоцинового рецептора *OXTR* – один из кандидатных генов, он активно исследуется в отношении социальных функций человека [2], однако данных об их ассоциации с параметрами сна недостаточно для оценки влияния полиморфизмов *OXTR* на сон. Целью работы было исследование ассоциации генетических вариантов полиморфизма гена рецептора окситоцина (rs53576 A>G, rs2268498 T>C, rs2254298 G>A) с параметрами сна у школьников.

Объектом исследования были обучающиеся 8 РАН класса в возрасте 14-15 лет (n=30). От подростков и их родителей получены информированные согласия. Для оценки параметров сна обучающиеся заполняли Питтсбургский опросник для определения индекса сна (Pittsburgh Sleep Quality Index, PSQI). У каждого респондента был взят образец буккального эпителия, из которого выделена ДНК. Генотипирование полиморфизмов проводили с помощью ПЦР в режиме реального времени.

По результатам опросника PSQI показано, что большинство респондентов проводят во сне менее рекомендуемых 8 часов, средняя продолжительность сна около 7 часов. Индекс сна PSQI более 6 баллов свидетельствует о значительных нарушениях сна. Согласно полученным данным 18 из 30 опрошенных набрали более 6 баллов (60%).

В доминантной модели наследования, для которой было определено наименьшее значение информационного критерия Акаике (AIC=29,6), показана тенденция к преобладанию генотипа GG rs53576 гена *OXTR* среди подростков с нормальным (до 15 минут) временем засыпания, а наличие в генотипе хотя бы одного аллеля А (AG+AA) данного полиморфизма ассоциировано с повышенным риском длительного времени засыпания (< 15 минут) (p=0,077). Релевантной моделью с наименьшим критерием Акаике (AIC=28,7) при анализе ассоциации вариантов полиморфизма гена *OXTR* с индексом сна PSQI показана рецессивная модель. Так, выявлена тенденция к более частой встречаемости аллеля G в генотипе rs53576 гена *OXTR* у респондентов с повышенным индексом сна (более 6 баллов) (p=0,095). При этом не было обнаружено отличий в распределении частот генотипов rs2268498 и rs2254298 гена *OXTR* в группах с разным временем засыпания и индексом сна.

Известно, что наличие аллеля G rs53576 гена *OXTR* свидетельствует о повышенной способности справляться с подавленными психологическими состояниями, что способствует лучшему расслаблению перед сном и быстрому засыпанию. При этом носители аллеля G могут испытывать более высокие уровни стресса или тревожности, что может объяснять повышенную частоту нарушений сна. Результаты нашего исследования могут помочь в разработке методов улучшения качества и снижения риска развития нарушений сна у подростков.

Литература:

- [1] Owens J., Adolescent Sleep Working Group, Committee on Adolescence Insufficient sleep in adolescents and young adults: an update on causes and consequences. *Pediatrics*. 2014;134(3):e921-932. DOI: 10.1542/peds.2014-1696.
- [2] Christ C.C. Carlo G., Stoltenberg S.F. Oxytocin Receptor (OXTR) Single Nucleotide Polymorphisms Indirectly Predict Prosocial Behavior Through Perspective Taking and Empathic Concern. *J Pers.* 2016;84(2):204-13. DOI: 10.1111/jopy.12152.

Синтез наночастиц золота

Грицфельд Павел Сергеевич, Мирзакаримов Ярослав Ойбекович
МБОУ СОШ № 10 имени академика Ю.А. Овчинникова

Наночастицы золота находят широкое применение в медицине, нанотехнологиях и аналитической химии [1]. Из-за их уникальных свойств они используются в качестве сенсоров, катализаторов и носителей лекарств. Для получения стабильных наночастиц с воспроизводимыми характеристиками необходим точный контроль параметров синтеза. Целью работы являлся синтез наночастиц золота методом Туркевича [2] и исследование их характеристик. Основными задачами были: изучение теоретических основ метода, проведение эксперимента по восстановлению золота цитратом натрия, визуализация результатов и их интерпретация.

Синтез проводился при температуре близкой к температуре кипения с добавлением раствора цитрата натрия к раствору хлорауровой кислоты. В результате происходило восстановление HAuCl_4 до металлического золота и формирование коллоидного раствора. Полученные наночастицы имели характерное рубиновое окрашивание, свидетельствующее об успешном синтезе. Цвет раствора обусловлен поверхностным плазмонным резонансом, типичным для частиц размером 10 – 20 нм [3]. Дополнительная визуализация, методом УФ-спектроскопии [1], позволила количественно подтвердить размер частиц (Рис. 5).

Таким образом, метод Туркевича позволяет эффективно получать стабильные наночастицы золота. Работа дала представление о ключевых параметрах синтеза и возможностях применения наноматериалов.

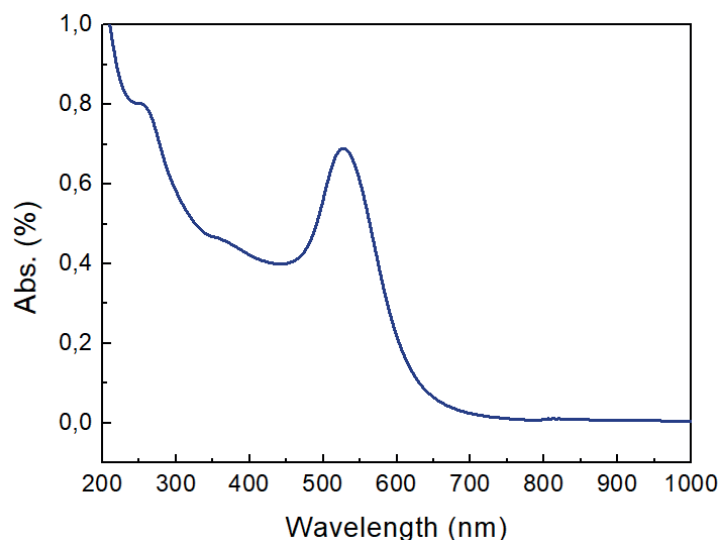


Рис. 6. Оптический спектр поглощения наночастиц золота

Благодарности:

Работа выполнена на базе ИФ СО РАН. Авторы выражают благодарность научному руководителю Лукьяненко А.В. за консультации и помощь в проведении экспериментов.

Литература:

- [1] Dreaden E. C. et al. Chemical Society Reviews. – 2012. – Т. 41. – №. 7. – С. 2740-2779.
- [2] Turkevich J., Stevenson P. C., Hillier J. Discussions of the faraday society. – 1951. – Т. 11. – С. 55-75.
- [3] García M. A. Journal of Physics D: Applied Physics. – 2011. – Т. 44. – №. 28. – С. 283001.

Полиморфизм генов углеводного и жирового обмена веществ: связь с индексом массы тела у подростков

Деймунд Д.А.¹, Полуян Р.Д.¹, Дик Д.И.¹, Ташикина А.С.¹, Ключанцев А.О.¹, Клейн М.А.¹, Миронов К.В.^{1,2}, Афоничева К.В.^{1,2}, Смольникова М.В.^{1,2}

¹МАОУ Гимназия №13 «Академ», ²Научно-исследовательский институт медицинских проблем Севера НИИ МПС, ФИЦ КНЦ СО РАН

Подростковый возраст является критически важным периодом развития человека, требующим полноценного и достаточного питания. В последние годы продвигается концепция персонализированного питания, основанного на индивидуальных генетических особенностях человека [1]. Одним из условий создания такого подхода является изучение маркеров, связанных с изменениями метаболизма, включая полиморфные варианты гена разобщающего белка 2 (*UCP2*), участвующего в защите клеток от окислительного стресса, и гена β 3-субъединицы G-белка (*GNB3*), участвующей в регуляции уровня глюкозы [2,3]. Целью данной работы было выявить связь полиморфизмов rs660339 гена *UCP2* (C>G) и rs5443 гена *GNB3* (C>T) с особенностями метаболизма у подростков. От 120 подростков были получены образцы буккального эпителия и показатели индекса массы тела (ИМТ). Генотипирование осуществляли при помощи ПЦР в режиме реального времени с использованием олигонуклеотидных праймеров («ДНК Синтез», Россия). Статистическая обработка данных проводилась в программе RStudio 4.3.2 (Posit, США).

На основе показателей ИМТ подростки были разделены на группы 1 (ИМТ<18,5 кг/м²), 2 (18,5 – 25 кг/м²), 3 (25 – 30 кг/м²) и 4 (ИМТ>30 кг/м²). Распределения аллелей и генотипов для двух полиморфизмов в исследуемой выборке подростков сравнили с данными в мировых выборках европеоидов. Статистически значимые различия (Таблица 1) наблюдались в доминантной модели наследования между группами 1 и 2, 1 и 3 для rs660339 гена *UCP2* и между группами 1 и 3 для rs5443 *GNB3*.

Таблица 1. Частоты генотипов rs660339 гена *UCP2* и rs5443 гена *GNB3* в доминантной модели наследования

Генотипы	Недостаточный вес n=30 (1)	Нормальный вес n=64 (2)	Избыточный вес n=13 (3)	Ожирение n=13 (4)	χ^2	p
rs660339 гена <i>UCP2</i> (доминантная модель)						
GG	13,3 (4)	34,4 (22)	46,2 (6)	30,8 (4)	1,2=4,52; 1,3=5,47	1,2=0,034; 1,3=0,020
AG + AA	86,7 (26)	65,6 (42)	53,8 (7)	69,2 (9)		
rs5443 гена <i>GNB3</i> (доминантная модель)						
CC	56,7 (17)	45,3 (29)	23,1 (3)	30,8 (4)	1,3=4,11	1,3=0,043
TC + TT	43,3 (13)	54,7 (35)	76,9 (10)	69,2 (9)		

Настоящее исследование обнаружило генетические маркеры, связанные с ИМТ. Выявлена тенденция, при которой частоты минорных аллелей встречались реже в группах сравнениях при больших значениях ИМТ для rs660339 гена *UCP2* (A) и чаще для rs5443 гена *GNB3* (T). Это указывает на потенциальную роль данных генетических вариантов в патогенезе ожирения, других расстройств, связанных с изменениями массы тела.

Литература:

- [1] Kiani A.K. et al., Journal of Preventive Medicine and Hygiene, V.63, PP. E125–E141 (2022).
- [2] Sierra-Ruelas E. et al., Lifestyle Genomics, V.18, PP. 27–35 (2025).
- [3] Mărginean C. et al., Medicine (Baltimore), V.98, PP. e16414 (2019).

Цито- и генотоксичность меди в корневом апексе проростков пшеницы
Аминова Д. Э.¹, Гаспарян К. К.¹, Данилова Д. Д.¹, Кислова С. С.¹, Козырева А. В.¹, Коростелева П. С.¹, Устюгова В. Е.¹, Штатолкина В. А.¹, Пятинина С. А.^{1,2}
¹МАОУ "Гимназия №13 "Академ", ²Сибирский федеральный университет

Процессы индустриализации и урбанизации, зависимость агротехнологий от фунгицидов на основе солей меди, использование в системах ирригации неочищенных или частично очищенных сточных вод является причиной тотального антропогенного загрязнения почвенных экосистем тяжелыми металлами [1]. В ряду фитотоксической активности тяжелых металлов в корневой системе медь стоит на первом месте [2]. Медь (63,546 а. е. м., плотность 8,89 г/см³) в результате специфической абсорбции на минеральных и органических фракциях депонируется в верхних слоях почвы и накапливается преимущественно в корневой системе [3].

Цель данной работы заключалась в оценке цито- и генотоксичности ионов меди в корневом апексе 2-суточных проростков пшеницы (*Triticum aestivum* L.). Все эксперименты проводились в условиях гидропонного культивирования.

Наряду с классическими интегральными маркерами токсичности (длина корня и выход корневой биомассы) в текущей работе были оценены цитотоксические эффекты меди по изменениям численности пограничных клеток (ПК) корневого апекса и их секреторной активности. ПК – это локализованная на поверхности корневого апекса клеточная популяция с высоким уровнем секреторной активности. Экзометаболиты ПК формируют вокруг корневого апекса молекулярную систему - корневую внеклеточную ловушку (RET), которая иммобилизует различные токсические химические агенты и споры патогенов, препятствуя их проникновению в апикальную меристему корня [4]. В результате работы показано, что дозозависимые эффекты меди в популяции ПК имеют нелинейный характер. Снижение численности ПК (в 2,3 раза, $p < 0,05$) наблюдалось только в варианте культивирования на среде с максимальной концентрацией меди (20 мг/мл). При этом количество общего белка и внеклеточной ДНК, из которых состоит RET, с увеличением концентрации меди в среде повышалось в 1,5 ($p < 0,05$) и 2 раза ($p < 0,05$) соответственно. Так же цитотоксические эффекты меди выражались в уменьшении величины митотического индекса в 2 раза ($p < 0,05$) на среде с максимальной концентрацией меди (20 мг/мл).

Генотоксичность меди реализовывалась в дозозависимом увеличении клеток с аномалиями митоза в апикальной меристеме. Таким образом количество клеток с аномалиями митоза относительно клеток без аномалий митоза составило 19,67% ($p < 0,05$), 32,81% ($p < 0,05$) и 32,84% ($p < 0,05$) для концентраций меди в среде 1, 10 и 20 мг/мл, соответственно. Анализ классов встречающихся аномалий митоза показал наличие дополнительного класса аномалий в меристеме проростков пшеницы, культивируемых на средах с медью – хромосомные aberrации.

Таким образом, выявленные закономерности влияния меди на корневой апекс проростка пшеницы показывают, что увеличение количества пограничных клеток и формирование корневой внеклеточной ловушки с высоким содержанием внеклеточной ДНК приведет к формированию устойчивости всего растения к токсическим эффектам меди.

Благодарности:

Авторы выражают благодарность научному консультанту: к.б.н., Смольниковой Марине Викторовне (НИИ МПС ФИЦ КНЦ СО РАН).

Литература:

- [1] He, Z., [et al.]. Journal of Environmental Indicators, V. 9, P. 17-18 (2015).
- [2] Shabbir, Z., [et al.]. Chemosphere, V. 259, P. 127436 (2020).
- [3] Mir, A. R., Pichtel, J., Hayat, S. Biometals, V. 34(4), PP. 737-759 (2021).
- [4] Hawes, M., [et al.]. Annual Review of Phytopathology, V. 54, PP. 143-161 (2016).

Воздействие нефтепродуктов на развитие растений биоиндикаторов

Звейник Е.М.¹, Харитонов Т.А.¹, Темерова О.А.¹, Садыков Р.Т.^{1,2}

¹МАОУ Гимназия №13 «Академ», ²ИЛ ФИЦ КНЦ СО РАН

Загрязнение окружающей среды нефтью и нефтепродуктами представляет собой одну из наиболее значимых экологических проблем современности, оказывая негативное воздействие на биологические системы [1]. Существуют неоднозначные данные о чувствительности фотосинтетических характеристик сосудистых растений к таким загрязнениям [2]. Тем не менее, растения могут выступать в качестве биоиндикаторов, позволяющих оценивать степень загрязнения экосистем и токсическое воздействие нефтепродуктов [1,2]. Цель работы - оценить воздействие широко применяемых нефтепродуктов на развитие растений-биоиндикаторов.

Объектами исследования были выбраны растения-биоиндикаторы кресс-салат сорта «Темп» и редис сорта «Заря». В качестве нефтепродуктов были выбраны: автомобильный бензин маркировки АИ-92-К5 производства АО «ГАЗПРОМНЕФТЬ – МОСКОВСКИЙ НПЗ», керосин «Вершина» (Россия), и трансмиссионное масло GL-4 80W-85 Gazpromneft. Для каждой культуры были выделены 3 экспериментальные группы, в каждой из которых полив осуществлялся с добавлением соответствующего нефтепродукта с концентрацией в 1600, 5600, и 8000 мг/кг соответственно. Температурный режим содержания растительного материала составлял 19-24С, при естественном освещении.

Для оценки фитотоксичности нефтепродуктов на растения, в отличие от стандартных методов биотестирования, были использованы показатели нормализованного вегетационного индекса (NDVI), а также содержание фотосинтетических пигментов: хлорофилла α и β , каротиноидов и ксантафилов, как маркеры физиологического состояния.

В ходе работы полученный растительный материал экстрагировался для дальнейшего анализа пигментного состава с использованием фотоколориметра КФК-2 (ЗОМЗ, Россия). Статистическая обработка данных проводилась в Microsoft Excel, в работе указаны только значения, достигшие уровня значимости $p \leq 0,05$.

На основе индекса NDVI установлено, что у редиса во всех экспериментальных группах при максимальных концентрациях нефтепродуктов наблюдалось значительное угнетение развития ($NDVI = 0,11-0,17$). Кресс-салат проявил чувствительность только к топливу АИ-92 при концентрации в 8000 мг/кг ($NDVI = 0,17$).

Установлено, что по содержанию фотосинтетических пигментов у кресс-салата во всех экспериментальных группах отмечается снижение показателей (хл. α от $2,7 \pm 0,71$ до $4,83 \pm 0,65$, хл. β от $1,22 \pm 0,24$ до $2,29 \pm 0,26$) по сравнению с контролем (хл. α $6,76 \pm 0,60$ хл. β $2,86 \pm 0,16$).

У редиса негативное влияние на пигментное содержание отмечалось лишь при максимальной концентрации (8000 мг/кг) нефтепродуктов, тогда как низкие дозы (1600 мг/кг) масла и керосина оказывали стимулирующий эффект. Полученные данные указывают на видоспецифичность реакции растений на углеводородное загрязнение.

Результаты исследования отображают фитотоксичность нефтепродуктов и их дозозависимое влияние на фотосинтетические параметры растений-биоиндикаторов. Полученные данные могут быть использованы для разработки комплексных методов биоиндикации и мониторинга нефтяных загрязнений, а также для прогнозирования последствий антропогенного воздействия на растительные сообщества.

Авторы выражают благодарность научному консультанту, к.б.н., руководителю группы молекулярно-генетических исследований НИИ МПС ФИЦ КНЦ СО РАН, Смольниковой М.В.

Литература:

- [1] Рубин В. М. и др. Гигиеническое обоснование нормативов ПДК нефтепродуктов в почвах республики Беларусь //Гигиена и санитария. – 2013. – №. 2. – С. 99-101.
- [2] Тишин А. С. Фитотестирование почв, загрязненных нефтепродуктами //Международный научно-исследовательский журнал. – 2020. – №. 12-2 (102). – С. 78-83.

Выделение нового штамма-продуцента бактериальных экзополисахаридов

Алпатова М.¹, Андропова Е.¹, Карпова П.¹, Кастерин М.¹, Михалева А.¹,
Мысин А.¹, Чаплыгина Л.¹, Шубин И.¹, Сапожникова К.Ю.^{1,2}

¹МАОУ "Гимназия №13 "Академ",

²Институт Биофизики ФИЦ КНЦ СО РАН

Бактериальные экзополисахариды (ЭПС) – это природные биополимеры, обладающие уникальными свойствами: геле- и пленкообразование, стабилизация эмульсий и др. [1], что обуславливает их востребованность в различных областях применения (пищевой, медицинской, нефтяной и др.) [2]. Сдерживающим фактором применения ЭПС являются высокие затраты на их биотехнологическое производство, преодолеть которые можно с помощью выявления новых эффективных штаммов-продуцентов и привлечением дешевых субстратов [3]. Цель настоящей работы заключалась в выделении и характеристике эффективных штаммов-продуцентов бактериальных экзополисахаридов.

Потенциальные штаммы-продуценты ЭПС были выделены из образцов почвы горшечных растений путем получения накопительной культуры в жидкой среде Эшби. После инкубации при 30 °С в течение 96 ч пленку, образовавшуюся на поверхности среды, пересекали на плотную среду Эшби, инкубировали в аналогичных условиях. Далее отбирали изолированные колонии, имеющие выраженную слизистую поверхность. В результате были получены чистые культуры микроорганизмов, которые засевали в жидкую питательную среду, стимулирующую синтез ЭПС (дрожжевой экстракт, 1 г/л, K₂HPO₄, 1 г/л, MgSO₄, 0,2 г/л). Культивирование проводили в течение 72 ч, после чего определяли содержание биомассы бактерий и выход ЭПС весовым методом. Штаммы, показавшие способность к синтезу ЭПС, были охарактеризованы с точки зрения следующих признаков: культуральные свойства, морфо-тинкториальные свойства, подвижность, наличие каталазной активности [4].

Из четырех выделенных из почвы штаммов к синтезу ЭПС оказались способны два со следующими выходами биомассы и ЭПС соответственно: штамм № 1 – 2,4±0,2 и 1,1±0,2 г/л и штамм № 2 – 1,3±0,3 и 0,4±0,2 г/л. Штамм № 1 характеризовался следующими признаками: колонии среднего размера (3-5 мм) округлой формы, выпуклые, непрозрачные, сероватые, поверхность гладкая, блестящая, край ровный, консистенция слизистая, клетки представлены граммотрицательными палочками, подвижны, каталазоположительны; штамм № 2 – колонии мелкие (0,5-3 мм), выпуклые, прозрачные, бесцветные, поверхность гладкая, блестящая, край ровный, консистенция слизистая клетки граммотрицательные палочки, неподвижны, каталазоотрицательны.

Таким образом, в ходе настоящей работы были выделены и охарактеризованы два штамма-продуцента бактериальных ЭПС, которые по первичным признакам (культуральные и морфо-тинкториальные свойства) можно отнести к семейству *Rhizobiaceae*. По результатам первичной оценки штамм №1 обладает высоким потенциалом с точки зрения продукции бактериальных ЭПС и может быть в дальнейшем исследован для увеличения выходов биомассы и ЭПС.

Благодарности:

Авторы выражают благодарность научному консультанту: к.б.н., Смольниковой Марине Викторовне (НИИ МПС ФИЦ КНЦ СО РАН).

Литература:

- [1] Канарский, А.В., [и др.]. Вест. Казан. технол. унив. № 14 (15)., С. 186-190 (2012).
- [2] Freitas, F., [et al.]. Trends Biotechnol. № 29 (8)., Р. 388-398 (2011).
- [3] Хусаинов, И. А., [и др.]. Вест. Казан. технол. унив. №. 6 (17)., С. 208-212 (2014).
- [4] Прудникова С.В. [и др.]. Микробиология: учебно-методическое пособие для лабораторного практикума (2018).

Получение полисахаридов из древесины тополя

Гнездилова Варвара Сергеевна, Кузнецова Таисия Владимировна, Гребенюк Майя Ильинична

МАОУ лицей №7 имени Героя Советского Союза Б. К. Чернышева

Тополь широко распространён в городах, и каждый год производят его санитарную обработку. В результате образуется большое количество древесинных отходов, из которых можно получать востребованные химические продукты с добавленной стоимостью. Целлюлоза и гемицеллюлозы являются древесными полисахаридами, которые находят применение в получении моносахаридов, полиолов, органических кислот, биотоплив и других востребованных продуктов [1]. Традиционные технологии в основном направлены на получение целлюлозы, а гемицеллюлозная составляющая остается в виде отходов. Помимо этого, традиционные технологии производства целлюлозы приводят к попаданию в окружающую среду миллионов тонн серы в виде сероводорода, органических сульфидов, сернистого ангидрида и других вредных соединений. В этой связи актуальна задача совершенствования методов фракционирования древесины с получением востребованных полисахаридов. В качестве исходного сырья использовали древесные опилки (фракция менее 2,5 мм) тополя, произрастающего в окрестностях г. Красноярск. Химический состав (мас. %): гемицеллюлозы – 24,1, целлюлоза - 42,0, лигнин - 23,3 экстрактивные вещества – 6,1, зола – 0,5. Фракционирование древесины тополя на полисахариды осуществляли по следующей схеме, изображенной на рис.1. Схема фракционирования включала следующие стадии: щелочная экстракция гемицеллюлоз из древесины тополя, с последующим осаждением гемицеллюлоз этанолом, получение целлюлозного продукта из лигноцеллюлозы пероксидной делигнификацией в присутствии уксусной кислоты, пероксида водорода и катализатора TiO_2 .

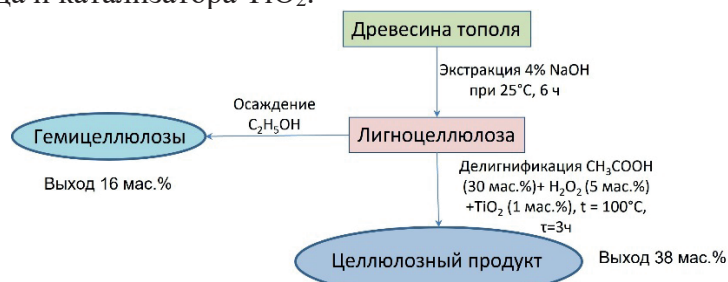


Рис. 1. Схема фракционирования древесины тополя на полисахариды.

В результате щелочной экстракцией древесины тополя были получены гемицеллюлозы с выходом 16 % от массы абсолютно сухой древесины (66 % от массы гемицеллюлоз в древесине). Установлено, что основным моносахаридным звеном в гемицеллюлозах древесины тополя является ксилоза, что делает их пригодными для получения ксилозы, фурфурола, ксилита, этиленгликоля, пропиленгликоля и других востребованных химических продуктов. Делигнификацией лигноцеллюлозы древесины тополя в среде «уксусная кислота-пероксид водорода – вода – катализатор TiO_2 » был получен целлюлозный продукт с выходом 38 мас. % от массы абсолютно сухой древесины, содержащий 91 мас. % целлюлозы. Содержание остаточных лигнина и гемицеллюлоз не превышало 4,7 мас. %. Полученная целлюлоза может быть использована в получении волокон целлюлозы, глюкозы, 5-гидроксиметилфурфурола, сорбита, биоэтанола и других востребованных продуктов.

Авторы выражают благодарность руководителю Скрипникову А.М.

Литература:

- [1] Okolie J. A., Nanda S., Dalai A. K., Kozinski J. A., Chemistry and Specialty Industrial Applications of Lignocellulosic Biomass. Waste and Biomass Valorization, - 2021. - V. 12. - N. 5. - P. 2145-2169.

Модификация гидролизного лигнина через реакции азосочетания и восстановления азогрупп для введения ароматических аминогрупп

Дружинина Виктория Васильевна

МАОУ «Лицей № 7», г Красноярск

Институт химии и химической технологии СО РАН

Лигнин являясь полимером фенольной природы способен выступать в качестве азосоставляющей в реакции азосочетания. Азосочетание – получение азосоединений (Ar-N=N-R) взаимодействием ароматических диазосоединений с веществами, содержащими подвижный атом водорода (фенолы, ароматические амины, жирноароматические эфиры и др.). Азосочетание является одной из наиболее интересных реакций модификации лигнина.

Целью нашей работы стала разработка метода модификации ароматического ядра лигнина с введением аминогруппы NH_2 . Для этого была выбрана реакция азосочетания с последующим восстановлением азогруппы до амина (рис. 1). Гидролизный лигнин был получен на Кировском биохимическом заводе в результате гидролиза растительного сырья разбавленной серной кислотой. Утилизация этого отхода является важной задачей как для региона, так и для всей России

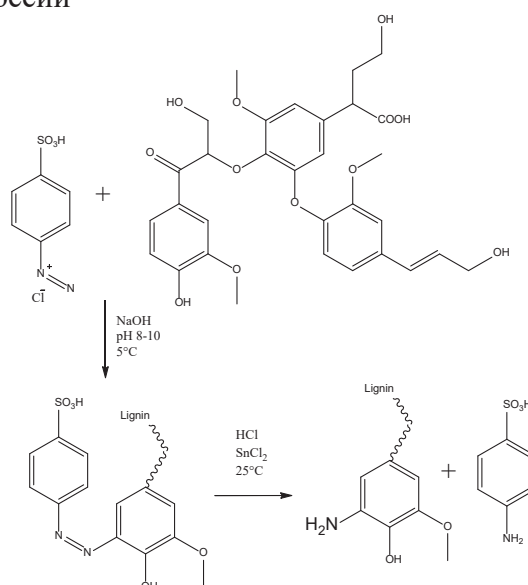


Рис. 1. Структурная формула модели лигнина и схема реакций.

Основываясь на предыдущих работах [1, 2] была выполнена модификация гидролизного лигнина азосочетанием с хлоридом 4-диазонийбензосульфокислоты. Затем азопроизводное восстанавливали хлоридом олова (II) в водно-этанольном растворе до аминопроизводного. Групповой состав подтверждён методом ИК-спектроскопии и качественными реакциями.

Благодарности:

Автор выражает благодарность научному руководителю: Голубкову Виктору Александровичу

Литература:

- [1] Borovkova V.S. Malyar Y.N.; Vasilieva N.Y.; Skripnikov A.M.; Ionin V.A.; Sychev V.V.; Golubkov V.A.; Taran O.P. Materials V. 16, PP 1525 (2023).
- [2] Golubkov V.A., Borovkova V.S., Lutoshkin M.A., Zos'ko N.A., Vasilieva N.Y., Malyar Y.N. Wood Sci Technol. V. 58, PP. 1861–1879 (2024).

Изучение состава окисленного крахмала

Заболоцкая Амалия Витальевна, Авдей Яна Витольдовна, Литвяк Зоя

Дмитриевна, Черепанова Вероника Евгеньевна

***МАОУ Лицей №7 г. Красноярск, Институт химии и химической технологии
СО РАН***

Крахмал, биосовместимый, биоразлагаемый, нетоксичный полимер, который широко встречается в природе, стал одним из важных возобновляемых ресурсов для пищевой и непищевой промышленности благодаря множеству преимуществ[1].

Областью применения крахмала являются текстильная промышленность, производство косметики и красок, фармацевтика, строительство. На основе крахмалсодержащих пластиков изготавливаются пленки, упаковка и бутылки для пищевых продуктов и др. изделия [2].

Несмотря на все эти достоинства, у крахмала есть некоторые проблемы с растворимостью в воде, ретроградацией, потерей вязкости и т.д. поэтому, чтобы преодолеть эти недостатки и расширить область его применения, крахмал модифицируют. Используют физические, химические или ферментативные методы. Наиболее важным является химическая модификация, с использованием различных окислителей, таких как гипохлорит натрия, периодат натрия, озон, перекись водорода, хромовая кислота, диоксид азота и перманганат калия, при определенных условиях реакции: времени, pH, концентрации окислителя и температуры [3]. При окислении крахмала происходит снижение молекулярной массы полисахарида, гидроксильные группы в позициях C2, C3, C6 переходят в карбонильные и/или карбоксильные группы.

Целью работы являлось исследование качественного и количественного состава окисленного крахмала.

Качественный анализ продуктов окисления крахмала на присутствие альдегидных групп проводили с реактивом Фелинга. При добавлении к окисленному крахмалу равного объема реактива Фелинга и нагревании, выпадает красный осадок оксида меди (I), что свидетельствует о наличии альдегидных групп.

Количественное содержание альдегидных групп определяли с помощью обратного титрования по методике оксимирования.

Литература:

[1] Oladebeye A. O., Oshodi A., Amoo I., Food Chemistry, V. 141, PP. 1416-1423 (2013).

[2] Валеева Н. Ш., Хасанова Г. Б., Вестник Казанского технологического университета, Т. 16, №. 22, С. 184-187 (2013).

[3] Akhila P. P., Bangar S. P., Sunooj K. V. Starch: CRC Press, 2024.

Селективная конверсия фруктозы до фурфурола на твердом кислотном катализаторе

Лапушова Алина, Попков Максим, Мартынова Елена, Волкова Соня

МАОУ лицей №7 имени Героя Советского Союза Б. К. Чернышева

Фурфурол – молекула платформа, которую используют для производства биотоплив, биополимеров, а также фармацевтических препаратов [1].

Классический подход к синтезу фурфурола – применение растворимых кислотных катализаторов, таких как серная и соляные кислоты. Привычным сырьем для получения фурфурола является ксилоза – C5 сахар, однако в качестве альтернативного сырья в недавних работах также рассматривают C6 сахар – фруктозу. Для фруктозы в присутствии кислот характерна конверсия в другой немаловажный продукт – 5-гидроксиметилфурфурол (5-ГМФ), однако подбор катализатора и условий реакции способны повысить селективность процесса по отношению к фурфуролу [2,3].

Целью данной работы является проведение селективного синтеза фурфурола из фруктозы на ранее не изученном в данной реакции твердом кислотном катализаторе – оксиде молибдена. Выполнены следующие задачи: (1) Синтез и изучение катализатора, (2) Проведение конверсии фруктозы до фурфурола в автоклавном реакторе.

Оксид молибдена синтезировали золь-гель методом: парамолибдат аммония растворяли в воде, затем добавляли раствор аммиака и стабилизатор – этилсиликат-32, затем суспензию высушивали и прокаливали при 550 °С.

Методом Зёренсена – де Брюина (определение рН точки нулевого заряда суспензии твердого тела) показана высокая кислотность катализатора, значение $pH_{\text{тнз}} = 2.2$, которое превосходит кислотность большинства известных твердых кислотных катализаторов.

Конверсию фруктозы осуществляли в автоклаве при 160 °С, в течении 1 ч, реакционную смесь анализировали методом ВЭЖХ на приборе Милихром А-02 и Agilent 1260 Infinity II.

Показана полная конверсия субстрата, селективность по фурфуролу составила 52 %, по 5-ГМФ – 12 %.

Процесс требует оптимизации, подбор условий реакций в присутствии ранее неизученного катализатора, способен повысить селективность процесса по целевому продукту – фурфуролу.

Благодарности:

Авторы выражают благодарность научному наставнику – м.н.с. Лаборатории каталитических превращений возобновляемых ресурсов ИХХТ СО РАН, ФИЦ КНЦ СО РАН, Сычеву Валентину Владимировичу.

Литература:

- [1] Machado, Grazielle, et al. Natural Resources 7.03 (2016): 115.
- [2] Wang, Yueqing, et al. Applied Catalysis B: Environmental 235 (2018): 150-157.
- [3] Olivito, Fabrizio, Pravin Jagdale, and Goldie Oza. ACS Sustainable Chemistry & Engineering 11.50 (2023): 17595-17599.

Влияние напряжения анодирования на морфологию и фотоэлектрокаталитическую активность нанотрубок диоксида титана

Лосев Захар, Иванова Ксения

МАОУ лицей №7 имени Героя Советского Союза Б. К. Чернышева

Производство водорода непосредственно из воды и солнечного света с помощью фотоэлектрокатализа является безусловно зелёной стратегией и открывает большие перспективы для расширения масштабов производства экологически чистой энергии. Разработка фотокатализатора для этих целей является приоритетной задачей. Нанотрубки TiO_2 , получаемые методом электрохимического анодирования титановой фольги, являются эффективной структурой для фотокаталитического разложения воды [1-3]. Вертикально ориентированные нанотрубки имеют большую площадь поверхности и однородную межфазную структуру, которая обеспечивает значительную глубину поглощения света и улучшает разделение зарядов. Однако, ключевым моментом является оптимизация параметров производства нанотрубок TiO_2 для каждой конкретной установки анодирования. Уже известные факторы в каждом случае будут оказывать несколько различное воздействие на морфологию получаемых образцов. В свою очередь, морфология и размеры нанотрубок TiO_2 имеют решающее значение для определения их фотоактивности.

В работе представлены результаты изучения влияния длительности ведения процесса анодирования на морфологию и фотоэлектрокаталитическую активность нанотрубок TiO_2 .

Методом электрохимического окисления в водно-органическом электролите при постоянном напряжении $U=50$ В и различном времени анодирования (1-5 часов) были синтезированы наноструктурированные TiO_2 пленки.

Для анализа оптических свойств образцов и морфологии поверхности нанотрубок, были получены спектры диффузного отражения и SEM-изображения. Анализ SEM-изображений показал, что с увеличением времени анодирования толщина слоя возрастает с 7 мкм при 1 ч. до 20 микрон свыше 1 ч. Отсутствие прямой зависимости между толщиной слоя нанотрубок и временем анодирования свыше 1 ч., по-видимому следует связывать с образованием так называемого “nano grass”, т.е. частично растворившихся и опавших стенок нанотрубок. Оптические свойства являются важной характеристикой каталитических материалов, поскольку они содержат информацию о ширине запрещенной зоны (E_{bg}) и особенностях электронной структуры, оказывающих влияние на взаимодействие катализаторов с реагентами. Ширина запрещенной зоны для непрямого межзонного перехода определялась с помощью модифицированной функции Кубелки-Мунка. Результаты измерений показывают, что ширина запрещенной зоны практически не изменяется с изменением времени анодирования.

Для оценки влияния на фотоактивность, мы измеряли фототоки при трёх длинах волн, наибольшую фотоактивность демонстрируют образцы, полученные при длительности анодирования от 3-х часов. Однако, увеличение длительности ведения процесса свыше 3-х часов не приводит к значительному повышению фотоактивности. Исходя из этого наиболее оптимальным временем анодирования можно считать 3 часа.

Литература:

- [1] Bie C., Wang L., Yu J., *Chem.*, Vol. 8, PP. 1567-1574 (2022).
- [2] Ishaq H., Dincer I., Crawford C., *Int. J. Hydrog. Energy*, Vol. 47, PP. 26238-26264 (2022).
- [3] Pingkuo L., Junqing G., *Int. J. Hydrog. Energy*, Vol. 84, PP. 700-717 (2024).

Синтез наночастиц лигнина и его азопроизводного и изучение их размеров

Мащенко Анна

МАОУ Лицей №7 г. Красноярск,

Институт химии и химической технологии СО РАН

Последние годы лигнин рассматривается в качестве перспективного химического блокатора УФ-излучения. Лигнин является одним из основных компонентов биомассы, это нерегулярный полимер ароматической природы, он обладает высокой антиоксидантной активностью, противоопухолевыми, противовирусными и противомикробными свойствами, что открывает многообещающие перспективы для его биомедицинского применения. Целью данной работы является разработка методов синтеза наночастиц лигнина на примере этаноллигнина и его азопроизводных, в том числе в интересах создания солнцезащитных средств нового поколения.

В качестве исходного субстрата нами выбран органосольVENTный этаноллигнин (ЭЛ) сосны обыкновенной (*Pinus sylvestris*). Его модифицировали реакцией азосочетания с 4-нитродиазония хлоридом по ранее разработанной методике [1, 2]. Исходный и модифицированный лигнин структурировали для получения наночастиц методом замены растворителя. Лигнин растворяли в этаноле (EtOH) или диметилсульфоксиде (DMSO), затем с помощью перистальтического насоса перекачивали в интенсивно перемешивающуюся чистую воду. Лигнин, попадая в среду, в которой он не растворим, перешел в коллоидную форму. Образующиеся суспензии стабильны более 2 месяцев.

Нами изучены размеры частиц лигнина методом фотонкорреляционной спектроскопии на приборе Malvern Zetasizer. Размер частиц исходного этаноллигнина, который обработали ультразвуком, составил 300 нм, а размер частиц лигнина наноструктурированного с использованием эталона составил 80 нм, при использовании DMSO – меньше, 60 нм. Поскольку азопроизводное плохо растворимо в спирте получили суспензию только с использованием DMSO, размер составил 110 нм. При попытке выделения наночастиц из раствора путем центрифугирования и лиофильной сушки частицы агрегировали, размер агрегатов составил 3 мкм. Целесообразно изменить подход к выделению наночастиц

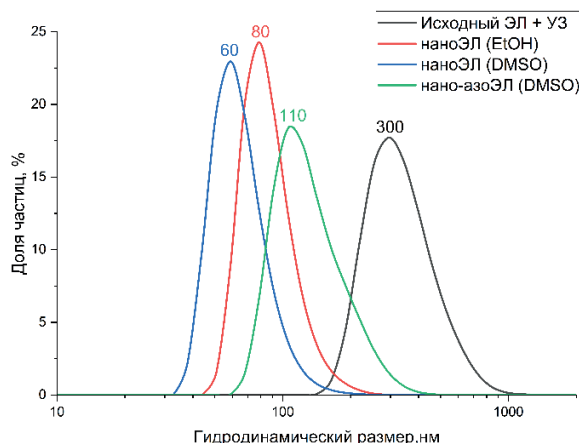


Рис. 1. Распределения частиц по размеру по данным фотонкорреляционной спектроскопии.

Автор выражает благодарность научному руководителю Голубкову В.А. и с.н.с. к.х.н. Воробьеву С.А. за помощь в исследовании.

Литература:

- [1] Borovkova V.S. Malyar Y.N.; Vasilieva N.Y.; Skripnikov A.M.; Ionin V.A.; Sychev V.V.; Golubkov V.A.; Taran O.P. Materials V. 16, PP 1525 (2023).
- [2] Golubkov V.A., Borovkova V.S., Lutoshkin M.A., Zos'ko N.A., Vasilieva N.Y., Malyar Y.N. Wood Sci Technol. V. 58, PP. 1861–1879 (2024).

Функциональные биопленки на основе галактоглокоманнана ели (*Picea Abies*)

Пахомова Ксения Андреевна

МАОУ лицей №7 имени Героя Советского Союза Б. К. Чернышева

На сегодняшний день в мире имеются две глобальные проблемы, связанные между собой: переход от ископаемых ресурсов к возобновляемым источникам сырья и тенденция минимального использования синтетических веществ, которые пагубно влияют на окружающую среду и человечество в целом. Лигноцеллюлозная биомасса (ЛЦБ) уже успела зарекомендовать себя как идеальный альтернативный ресурс, который позволяет сократить применение ископаемых источников сырья. В составе ЛЦБ основными компонентами являются целлюлоза, гемицеллюлозы и лигнин. Гемицеллюлозы (ГЦ) всё больше привлекают к себе внимание ученых в качестве потенциального ресурса для практического применения в различных областях благодаря их большому количеству, короткому циклу регенерации, биоразлагаемости и экологичности. Кроме того, альтернативным способом для придания востребованных свойств ГЦ используются различные методы химической модификации. Одним из перспективных таких методов является метод кросс-сшивки, который основан на реакции этерификации [1].

Целью данной работы является получение и изучение новых функциональных материалов на основе галактоглокоманнана ели *Picea Abies*. Исходным сырьем служил галактоглокоманнан, выделенный по отработанной методике [2], в качестве сшивающих агентов использовались янтарная (ЯК) и лимонная (ЛК) кислоты, а также глицерин (пластификатор) и NaH_2PO_2 (катализатор) для увеличения эффективности протекания процесса сшивки. Для завершения процесса полимеризации проводили постепенное высушивание образцов при 50 °С в течение 12 ч с последующим увеличением температуры до 150 °С в сушильном шкафу. В результате было получено 4 образца пленок (Рисунок 1).

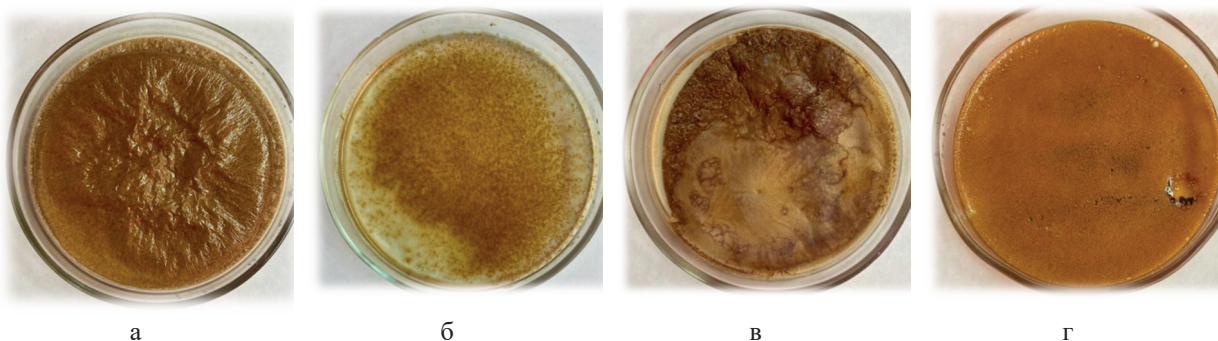


Рис. 1. Образцы модифицированных гемицеллюлоз: а - ГТМ+ $\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_7$; б - ГТМ+глицерин+ NaH_2PO_2 + $\text{C}_6\text{H}_8\text{O}_7$; в - ГТМ+ $\text{C}_4\text{H}_6\text{O}_4$; г - ГТМ+глицерин+ NaH_2PO_2 + $\text{C}_4\text{H}_6\text{O}_4$.

Методом гель-проникающей хроматографии определено, что эффективность протекания реакции этерификации напрямую зависит от структуры сшивающего агента и использования вспомогательных реагентов. Методом ИК-спектроскопии установлены характерные полосы поглощения высокой интенсивности в областях ~ 1720 и ~ 1600 cm^{-1} , соответствующие образованным сложноэфирным карбонильным связям ($\text{C}=\text{O}$) между карбоксильной группой кислоты и гидроксильными группами полисахаридов.

Автор выражает благодарность научному руководителю Боровковой В.С.

Литература:

- [1] Coma V., Sebti I., Pardon P., et.al. Carbohydrate Polymers, V.51(3), PP. 265-271 (2003).
- [2] Borovkova V.S., Malyar Y.N., Sudakova I.G., et.al. Molecules, V. 27(1), P. 266 (2022).

Изучение солнцезащитных кремов на соответствие заявленному SPF методом электронной спектроскопии

Рыдченко Владимир, Задолинная Арина, Авулова Динара, Штейнгарт Михаил
МАОУ Лицей №7 г. Красноярск,
Институт химии и химической технологии СО РАН

Излучение Солнца необходимо для человека и его здоровья. Однако воздействие ультрафиолетовых лучей на незащищенную кожу человека может приводить к солнечной эритеме (ожогу кожи), фототоксическим и фотоаллергическим реакциям, является фактором риска для развития добро- и злокачественных новообразований. Предотвратить негативное влияние на кожу человека можно, используя солнцезащитные средства, которые поглощают или отражают часть излучения. Сразу возникает вопрос, а какие солнцезащитные средства действительно эффективны? Оказывается, часто солнцезащитные кремы продаются только с маркировкой по ГОСТ 31460-2012 «Кремы косметические. Общие технические условия» или ТУ категории «Кремы косметические», а подтверждение защитных свойств (значение SPF) по ГОСТ добровольно, и такая маркировка может присутствовать без подтверждения. Поэтому поставлена цель провести измерения показателя SPF ряда популярных солнцезащитных средств с сопоставлением заявленных и измеренных SPF. Наиболее экономичным и доступным является подход «in vitro» – измерение с использованием приборов, например, метод электронной спектроскопии.

Мы наносили необходимое количество крема на кварцевую пластинку и, накрывая второй идентичной пластинкой, равномерно распределяли образец. После этого регистрировали спектр пропускания на спектрометре «Эковью 6900» и рассчитывали SPF как отношение интегральной мощности сглаженного эффективного спектра к нему же, умноженному на спектр пропускания образца крема. Каждый образец измеряли 10 раз.

Как видно почти половина образцов – 4, показала значительное занижение, два – завышение. Показатели SPF трёх образцов хорошо соответствуют заявленным (рис 1. Б). Ошибка измерения велика, зачастую больше 20%. Требуется совершенствование метода для повышения точности измерений, например, создание метода равномерного и точного нанесения крема на пластинки.

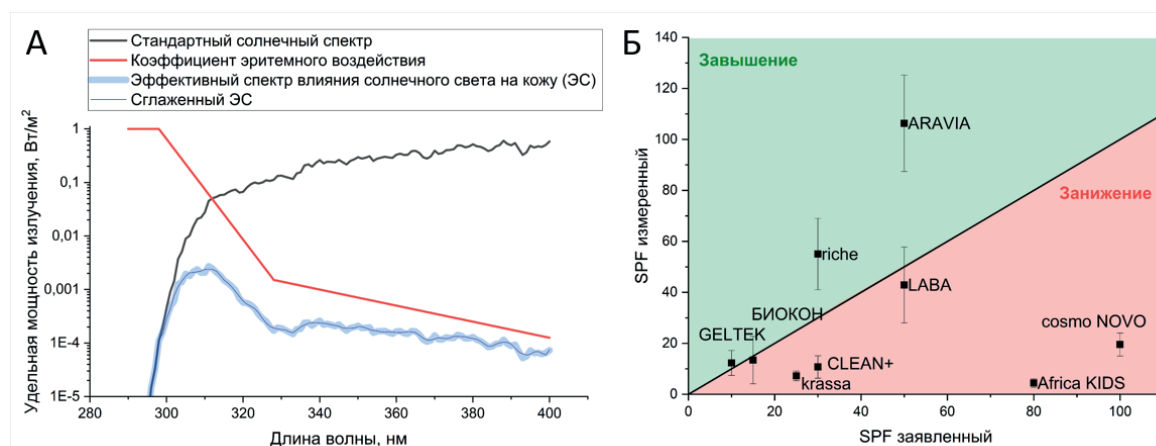


Рис. 1. А – спектры Солнечного излучения; Б – результаты измерения SPF кремов.

Благодарности:

Авторы выражают благодарность научному руководителю Голубкову В.А. и куратору направления «Химия» Маляру Ю.Н.

Изучение и идентификация химического состава напитка Кока-кола
Смирехин Леонид Владимирович, Ситничук Софья Ростиславовна
МАОУ Лицей №7 г. Красноярск, Институт химии и химической технологии
СО РАН

Газированные напитки представляют собой водные растворы смесей сахарного сиропа, красителей, ароматизаторов с добавлением углекислоты. Искусственные вкусовые добавки придают напиткам различные вкусы. Химический состав напитков оказывает губительное действие на здоровье: разрушаются зубы, становятся хрупкими кости, может возникнуть ожирение, аллергия, заболевания желудка, кофеиновая зависимость [1]. Целью нашего исследования заключалось в определении химического состава компонентов напитка кока-кола. Для определения наличия ключевых веществ в исследуемых напитках провели качественные реакции на наличие углекислого газа, сахара, ортофосфорной кислоты.

Добавление известковой воды к образцам напитка показало помутнение, что свидетельствует о наличии CO_2 . Для обнаружения сахаров использовали реактив Фелинга. Образование красного осадка медного оксида указывает на наличие восстанавливающих сахаров. Все образцы дали положительную реакцию. Наличие фосфорной кислоты определяли при помощи реакции с хлоридом бария и нитратом серебра. Наблюдали положительную реакцию, что свидетельствует о присутствии ортофосфорной кислоты.

Для оценки возможности удаления красителей из напитков провели эксперименты с использованием молока и активированного угля. В некоторых образцах наблюдали незначительное осветление, что говорит о различной стойкости красителей в разных напитках.

Для точного измерения содержания ортофосфорной кислоты использовали потенциометрический метод титрования. Этот способ основан на изменении потенциала раствора при воздействии кислоты с щелочью. Результаты представлены в таблице 1.

Таблица 1. Количественное содержание ортофосфорной кислоты в напитках.

Название напитка	Количество H_3PO_4 , %
Evervess	0,039
Добрый	0,058
Bochkari	0,039
Любимая	0,029
Черноголовка	0,098

Проведенный анализ показал, что, хотя аналоги напитков колы имеют схожий базовый состав, но существуют различия.

Благодарности:

Авторы выражают благодарность научному руководителю Капаевой С.Н.

Литература:

[1] Первакова А. А. Молодежь и наука, №. 3, С. 42-42 (2015).

Разработка методики получения фотонно-кристаллических структур для получения зелёного водорода

Шеяпова Кира, Захарова Виктория, Коноплёва Юлия, Суханова Елизавета
МАОУ лицей №7 имени Героя Советского Союза Б. К. Чернышева

В последние годы наблюдается значительный интерес к изучению фотонно-кристаллических наноструктур на основе диоксида титана (TiO_2) с целью повышения эффективности преобразования солнечной энергии. Было проведено множество исследований фотонных кристаллов из TiO_2 с различными структурами: инверсные опалы [1], периодическая бамбукообразная структура [2] и нанотрубки с иерархическим верхним слоем [3]. Во всех этих работах было отмечено значительное увеличение фотоактивности, что, по мнению авторов, связано с эффектом медленных фотонов, который возникает, когда границы фотонной запрещённой зоны и области поглощения материала ФК совпадают.

Массивы нанотрубок TiO_2 , полученные путем анодного окисления титановой фольги при периодическом изменении напряжения или тока, имеют упорядоченную структуру и проявляют свойства фотонных кристаллов (ФК). Это происходит благодаря периодической модуляции диэлектрической проницаемости, что приводит к образованию фотонной запрещенной зоны, положение и ширина которой зависят от внутреннего диаметра, толщины стенок нанотрубок и расстояния между ними. В процессе анодирования, когда напряжение периодически изменяется от высокого к низкому, можно создать бамбукообразную структуру нанотрубок. Регулируя величину и длительность импульса, можно изменять положение фотонной запрещенной зоны и использовать эффект медленных фотонов для усиления оптического поглощения диоксида титана.

В работе представлены результаты изучения влияния изменения длительности импульса напряжения и периодичности переключения в процессе анодирования на морфологию и фотоэлектрокаталитическую активность бамбукообразных нанотрубок TiO_2 . Были получены 3 образца: образец №1 был получен при статичном переключении напряжения 90В/40В (30 сек./15 мин., соответственно) в течение 1 часа, образец №2 был получен аналогично образцу №1, но в течение 2 часов и образец №3 был получен переключением напряжения 90В/40В по прохождению заданного количества электричества, которое было равным для обоих напряжений анодирования.

Для анализа оптических свойств образцов и морфологии поверхности нанотрубок, были получены спектры диффузного отражения и SEM-изображения. Для определения концентрации доноров (N_D) в исследуемых образцах, был проведен анализ Мотта-Шоттки по результатам измерений электрохимической спектроскопии импеданса, выполненных в темноте. Отмечено незначительное расхождение в плотностях доноров для всех исследуемых образцов. Фотоэлектрокаталитическую активность образцов изучали, определяя эффективность преобразования падающих фотонов в ток (IPCE), который рассчитывали по величине фототока при потенциале 0.2 В ($\text{Ag}/\text{AgCl}_{(\text{нас.})}$) при различных длинах волн и мощности падающего излучения. Значения IPCE для обычных нанотрубок TiO_2 постепенно увеличиваются при синем сдвиге длины волны облучения от 0,002% при 660 нм до 6% при 360 нм. Было отмечено, что формирование бамбукообразной структуры нанотрубок TiO_2 существенно не изменяет ход кривой IPCE относительно обычных нанотрубок TiO_2 . Однако, приводит к возрастанию в 1,3 раза значения IPCE при облучении светом с длиной волны 360 нм, для образца №3.

Литература:

- [1] Krishna S., Cheng C., Liu J., Su L., Fan H., Tok A., *Nano Energy*, Vol. 1, PP. 322-327 (2012).
- [2] Albu S., Kim D., Schmuki P., *Angew. Chem.*, Vol. 47, PP. 1916-1919 (2008).
- [3] Liu K., Wang G., Meng M., Chen S., Li J., Sun X., Yuan H., Sun L., Qin N., *Mat. Lett.*, Vol. 207, PP. 96-99 (2017).

Щелочное каталитическое окисление лигнина для получения лигнокислот – антиоксиданты из возобновляемого сырья
Шульга Яна, Черепанова Софья, Мацкова Мария, Бондаренко Артём
МАОУ Лицей №7 г. Красноярск,
Институт химии и химической технологии СО РАН

Каталитическое окисление нативных лигнинов молекулярным кислородом является перспективным методом переработки растительной биомассы в химические продукты с высокой добавленной стоимостью. Эта технология соответствует концепции «Lignin first». Целевыми продуктами являются ароматические альдегиды (ванилин, сиреневый альдегид), востребованные в фармацевтике, пищевой и парфюмерной промышленности.

Нами проведено исследование процесса щелочного каталитического окисления опилок сосны обыкновенной, осины и костры льна, отходов лесопереработки и сельского хозяйства, которые могут служить сырьём для производства ценных химических продуктов, а также охватывают все 3 основных типа лигнина. При окислении опилок сосны ванилина образуется 19 мас.% на содержание лигнина; опилок осины – 27 %; костры льна – 16 %. Сиреневый альдегид образуется в значимых количествах (12 мас.% на лигнин) только при окислении опилок осины. В качестве побочных продуктов с образуются *пара*-гидроксibenзальдегид, ацетованилин, ванилиновая кислота и сиреневая кислота. Вторым продуктом является целлюлозный остаток, выход которого составил ~23 мас.% на сырьё во всех случаях. Он состоит из целлюлозы на 85-90 %, содержание лигнина и гемицеллюлоз менее 10%.

Инновационным продуктом процесса, который только недавно получил внимание, являются лигнокислоты – окисленный водорастворимый лигнин [1, 2]. Нами разработан метод выделения лигнокислот экстракцией тетрагидрофураном из кислого водного раствора. Лигнокислоты имеют высокую антиоксидантную активность, изученную по способности подавлять стабильный радикал дифенилпикрилгидразил (рис. 1).

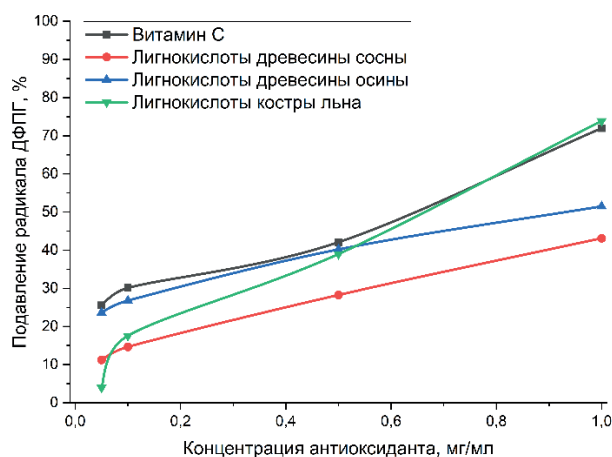


Рис. 1. Активность подавления ДФПГ радикалов витамином С и лигнокислотами.

Благодарности:

Авторы выражают благодарность научному руководителю Голубкову В.А. и сотрудникам ИХХТ СО РАН Маляру Ю.Н., Боровковой В.С., Тарабанько В.Е., Кайгородову К.Л., Смирновой М.А.

Литература

- [1] Golubkov V. A., *Khimija rastitel'nogo syr'ja*. №. 4, PP. 137-145 (2023).
[2] Смирнова М. А., *Химия растительного сырья*. №. 4, С. 427-437 (2024).

Валоризация твердого остатка восстановительного каталитического фракционирования костры льна

Ярмоленко Наталья, Анциферов Геннадий, Веселова Ксения, Коц Ева

МАОУ Лицей №7 г. Красноярск,

Институт химии и химической технологии СО РАН

В Красноярском крае можно встретить поля, на которых выращивают лен. После первичной переработки льна образуется отход, известный как костра льна. Растительное сырье можно разделить на три категории: целлюлозу, гемицеллюлозу и лигнин [1]. Одним из перспективных способов переработки является восстановительное каталитическое фракционирование (ВКФ), которое осуществляется с использованием гетерогенных катализаторов в присутствии водорода [2]. Продукты ВКФ можно разделить на три основные фракции: газовые, жидкие и твердые. Газовая фракция представляет собой побочный продукт и образуется в небольших количествах. Жидкая фракция представляет собой комплекс химически ценных продуктов, таких как полиолы, метоксифенолы, сульфатированные полисахариды и другие. Твердая фракция содержит целлюлозу, но для её дальнейшего использования в качестве целлюлозы требуется дополнительная очистка.

В связи с этим целью данной работы является создание методики комплексного анализа твёрдого продукта, полученного в результате восстановительного каталитического фракционирования костры льна.

В ходе исследования был изучен химический состав целлюлозосодержащего продукта, полученного с использованием порошкового (ТПП) и гранулированного (ТПГ) катализаторов (Табл. 1). Было обнаружено, что содержание лигнина в ТПП составляет 17,5%, а в ТПГ — 21,3%. Это свидетельствует о том, что порошковый катализатор более активно взаимодействует с полимерами в процессе восстановительного каталитического фракционирования по сравнению с гранулированным.

Таблица 1. Химический состав твердого продукта ВКФ костры льна.

Образец	Химический состав, %				
	Целлюлоза	Гемицеллюлоза	Лигнин	Экстрактивные вещества	Зольные вещества
ТПГ	49,9	17,5	21,3	3,8	3,2
ТПП	49,6	19,2	17,5	4,1	4,6

Из твёрдых продуктов, полученных с использованием обоих типов катализаторов, была выделена целлюлоза с помощью азотно-спиртового метода. Содержание целлюлозы в твёрдом продукте, полученном в результате восстановительного каталитического фракционирования костры льна, достигает 49,9%. Полученные образцы целлюлозы были исследованы на степень полимеризации и содержание альфа-целлюлозы. Установлено, что степень полимеризации целлюлозы, выделенной из ТПП, ниже (636), чем у целлюлозы, полученной из ТПГ (685). Содержание альфа-целлюлозы у образцов не превышает 78%.

Полученные свойства целлюлозы открывают широкие возможности для применения в различных областях. Например, её можно использовать для изготовления удобрений, строительных материалов, биотоплива и сорбентов.

Благодарности:

Авторы выражают благодарность научному руководителю Троцкому Ю.А.

Литература:

[1] Anwar Z., Gulfranz M. Journal of radiation research and applied sciences. 7(2). P.163-173 (2014).

[2] Мирошникова А.В., Казаченко А.С., Кузнецов Б.Н., Таран О.П. Биокатализ. 21(6), 425-443 (2021).

Тезисы докладов
Междисциплинарной конференции молодых
учёных ФИЦ КНЦ СО РАН (КМУ-XXVIII)
г. Красноярск, 17 апреля 2025 г.

ISBN 978-5-6050879-7-7



Материалы конференции
публикуются в авторской редакции

Подписано в печать 17.04.2025 г.
Бумага офсетная. Печать цифровая. Гарнитура «Times New Roman».

Формат 60x84 1/16. Усл. печ. л. 6,95. Уч.-изд. л. 6,82. Заказ № 4. Тираж 100 экз.
Отпечатано на Участке оперативной печати ИФ СО РАН. 660036, г. Красноярск,
Академгородок, 50/38.

Оформление — Д. С. Цикалов, Ю. В. Князев,
Дизайн обложки — А. В. Шайхутдинова

ФИЦ КНЦ СО РАН
660036, г. Красноярск, ул.Академгородок, 50
тел. +7 (391) 290-79-88
e-mail: fic@ksc.krasn.ru