

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ НАУЧНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР
«КРАСНОЯРСКИЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР»
СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК»

Междисциплинарная конференция молодых учёных ФИЦ КНЦ СО РАН

(КМУ-XXIV)

29 апреля 2021, г. Красноярск

Тезисы докладов



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

Тезисы докладов

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

29 апреля 2021 года, г. Красноярск

Красноярск
2021

УДК 50(082)
ББК Б.я431
М43

М43 Междисциплинарная конференция молодых учёных ФИЦ КНЦ
СО РАН (КМУ-XXIV): тезисы докладов (Красноярск, 29 апреля
2021 г.) – Красноярск: ИФ СО РАН, 2021. – 116 с.

ISBN 978-5-6045249-3-0

ISBN 978-5-6045249-3-0

© Авторы, содержание тезисов, 2021
© ФИЦ КНЦ СО РАН, оформление, 2021

**Сборник трудов междисциплинарной конференции
молодых учёных ФИЦ КНЦ СО РАН,
29 апреля 2021 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, председатель Оргкомитета
Александр Артурович Шпедт, д.с.-х. н., зам. Председателя Оргкомитета, ФИЦ КНЦ СО РАН;
Сергей Николаевич Варнаков, д.ф.-м.н., ФИЦ КНЦ СО РАН
Светлана Николаевна Софронова, к.ф.-м.н., ФИЦ КНЦ СО РАН;
Оксана Павловна Таран, д.х.н., профессор, ИХХТ СО РАН;
Эдуард Вильямович Каспаров, д.м.н., профессор, НИИ МПС;
Надежда Николаевна Сущик, д.б.н., ИБФ СО РАН;
Александр Владимирович Пименов, д.б.н., ИЛ СО РАН;
Андрей Михайлович Вьюнышев, к.ф.-м.н., ИФ СО РАН;
Иван Викторович Петерсон, к.х.н., ИХХТ СО РАН (учёный секретарь Оргкомитета).

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;
Е.В. Еремеева, к.б.н., ИБФ СО РАН;
О.В. Перетягтько, к.м.н., НИИ МПС;
С.В. Жила, к.б.н., ИЛ СО РАН;
С.В. Козлова, ИВМ СО РАН.

Содержание

Секция «Физика»	11
<i>Макимова О.А.</i> Исследование оптических и магнитооптических свойств магнитных наноструктур по данным <i>in situ</i> спектральной магнитооптической эллипсометрии.....	12
<i>Балашов Ю.Ю.</i> Возникновение твердофазных реакций между слоями Cu и Sn через барьерный слой Fe	13
<i>Бегунович Л.В.</i> Двумерные металлоорганические полимеры на основе тетраоксо[8]циркулена и атомов s-металлов.....	14
<i>Бельская Н.А.</i> Новый кобальтовый оксиборат $Co_{5/3}Nb_{1/3}VO_4$ со сложной магнитной структурой	15
<i>Бикбаев Р.Г.</i> Таммовские плазмон-поляритоны для органических солнечных элементов	16
<i>Горчаковский А.А.</i> Подшивалов И.В. Сканирующий спектрометр ферромагнитного резонанса.....	17
<i>Драганюк О.Н.</i> Влияние состава и давления на фазовую стабильность и свойства магнитных МАХ-фаз M_2AX ($M=Mn, Fe$; $A=Al, Ga, Ge, Si$; $X=C, N$).....	18
<i>Иконников Д.А., Мыслевец С.А., Архипкин В.Г., Вьюнышев А.М.</i> Трехмерные световые решетки из оптических вихрей	19
<i>Мураев П.С.</i> Квантовый транспорт холодных бозе-атомов в ромбической решетке под действием внешнего искусственного магнитного поля.....	20
<i>Пичковский И.С.</i> Создание эффективных взаимодействий для гамильтониана кластеризации на три группы на кутритах	21
<i>Скоробогатов С.А.</i> Спиновая динамика в ортоферритах $TmFeO_3$ и $TbFeO_3$	22
<i>Смолярова Т.Е.</i> Синтез, морфологические и оптические свойства золотых нанозвезд.....	23
<i>Шадрин Г.В.</i> Бистабильное поведение конечного фотонного кристалла с керровским дефектом.....	24
Секция «Химия и химические технологии»	25
<i>Неделина Т.С.</i> Редокс-свойства моноядерных комплексов родия (I) с O,O- и O,N-бидентатными лигандами	26
<i>Голубков В.А.</i> О влиянии адсорбции электронейтральных реагентов на образование двойного электрического слоя твёрдых кислотных катализаторов.....	27
<i>Куулар А.Ак-ооловна.</i> Механические свойства композитного материала на основе СВМПЭ и добавки из нановолокон оксида алюминия	28

<i>Белаш М.Ю.</i> Разработка биокomпозитного удобрения на основе коры сосны, содержащего аммиачную селитру и его результаты полевых испытаний	29
<i>Сычев В.В.</i> Разработка катализаторов на основе диоксида циркония для процессов межмолекулярного переноса водорода с целью получения гамма-валеролактона из левулиновой кислоты	30
<i>Патрушева А.А.</i> Синтез и изучение карбонил(β -дикетонат)изоцианидных комплексов родия (I)	31
<i>Роговенко Е.С.</i> Исследование диффузионных свойств стеклокристаллических мембранных материалов на основе узких фракций ценосфер	32
<i>Михлина-Утебаева А.В.</i> Моделирование превращений глюкозы в водной среде	33
<i>Воробьев С.А.</i> Синтез, особенности и применение высококонцентрированных гидрозолей серебра	34
<i>Мирошникова А.В.</i> Гидрирование древесины и этанолигнина пихты водородом в присутствии катализатора NiCuMo/SiO ₂	35
<i>Капаева С.Н.</i> Получения и свойства тринитрорезорцината свинца	36
<i>Зосько Н.А.</i> Методы получения и свойства 2,4,6-тринитрорезорцина	37
<i>Ионин В.А.</i> Восстановительное фракционирование Ru-содержащими катализаторами механически активированных образцов коры сосны после экстракционных процессов	38
<i>Акименко А.А.</i> Растворение металлов платиновой группы в автоклавных условиях ...	39
<i>Карачаров А.А.</i> Изучение динамики взаимодействия пузырька воздуха с поверхностями сульфидных минералов и модельных субстратов с применением сверхскоростной съёмки	40
<i>Вигуль Д.О.</i> Влияние массопереноса и кислотного предгидролиза на процесс каталитического окисления костры льна в ванилин и целлюлозу	41
<i>Киришева Е.А.</i> Получение феррит-граната эрбия с использованием анионообменного осаждения и изучение его свойств	42
<i>Казакевич Д.А.</i> Исследование процесса цементации благородных металлов из солянокислых сред в присутствии нитрат и сульфат ионов	43
Секция «Био- и медицинские технологии»	45
<i>Андрущенко П.Ю.</i> Использование чешуи для идентификации жилых и мигрирующих из притоков особей байкальского хариуса на участке реки Енисей с измененным гидрологическим режимом	46
<i>Копылова К.В.</i> Сравнение эффектов коммерческих препаратов пестицидов и их действующих веществ на ферментативные реакции, катализируемые оксидоредуктазами	47
<i>Бульхин А.О.</i> Длинноцепочечные алкеноны в верхних слоях донных отложений озер Северо-Минусинской котловины как потенциальный биоиндикатор палео-климата .	48
<i>Ефремов М.К.</i> Биолюминесцентная реакция искусственной люциферазы NanoLuc с целентеразином и его белок-связанной формой (CBP)	49

<i>Дудаев А.Е.</i> Модификация поверхности плёнок из ПГА разного химического состава методом лазерной абляции	50
<i>Вахрушев В.И.</i> Происхождение аномальной активности ^{137}Cs в слоях донных отложений р. Енисей.....	51
<i>Калябина В.П.</i> Дизайн биосенсора на основе биферментной системы светящихся бактерий для анализа загрязнения сложных по составу сред.....	52
<i>Посохина Е.Д.</i> Выделение и изучение некоторых свойств экстраклеточной оксидазы из высшего гриба <i>Neonothopanus pambii</i>	53
Колесник О.В. Гуминовые вещества как природные радиопротекторы на примере радионуклида трития и морских бактерий	54
<i>Суковатый Л.А.</i> Анализ доступности активного центра бактериальной люциферазы для молекул осмолитов методами молекулярной динамики.....	55
<i>Башмакова Е.Е.</i> Выявление онкомаркера М1А биолюминесцентным микроанализом.....	56
<i>Рыльцева Г.А.</i> Функциональная оценка полигидроксиалканоатов для применения в качестве компонента биоактивных сосудистых имплантатов.....	57
<i>Коротов И.А.</i> Высокоактивные делеционные мутанты люциферазы <i>Metridia longa</i> : получение и характеристика репортерных свойств	58
<i>Лоншакова-Мукина В.И.</i> Стабильные многокомпонентные иммобилизованные препараты на основе бутирилхолинэстеразы для ингибиторного анализа	59
<i>Сапожникова К.Ю.</i> Рост бактерий <i>Cupriavidus necator</i> В-10646 и синтез полигидроксиалканоатов на различных растительных маслах	60
<i>Лисица А.Е.</i> Влияние диффузии на кинетику реакции, катализируемой бактериальной люциферазой	61
<i>Аверьянов А.С.</i> Изменчивость пыльцы внутривидовых форм и морфотипов лиственницы сибирской юга Сибири.....	62
<i>Арясов В.Е.</i> Специфика формирования фитомассы в разнотравных сосновых молодняках Красноярской лесостепи	63
<i>Децура А.Е.</i> Метаногенная активность и структура сообществ архей в донных отложениях реки Енисей	64
<i>Ефременко А.А., Демидко Д.А.</i> Оптимальная плотность поселения полиграфа уссурийского (<i>Polygraphus proximus</i> Blandford).....	65
<i>Махныкина А.В.</i> Эффект сильных дождей на почвенную эмиссию CO_2 в бореальных экосистемах Средней Сибири	66
<i>Пашкеева О.Э.</i> Использование микромицетов рода <i>Trichoderma</i> в выращивании семян сосны обыкновенной	67
<i>Петрунина Е.А., Лоскутов С.Р.</i> Кора <i>Larix sibirica</i> Ldb.: гигроскопичность, термический анализ и пиролиз	68
<i>Полосухина Д.А.</i> Нетто-газообмен CO_2 широкораспространенных мхов и лишайников таежных лесов	69

<i>Прысов Д.А.</i> Многолетние изменения климата на территории криолитозоны Средней Сибири.....	70
<i>Шемберг А.М.</i> Термогравиметрический анализ и дифференциальная сканирующая калориметрия древесины берёзы повислой (<i>Betula pendula roth.</i>) и берёзы извилистой (<i>Betula tortuosa ledeb.</i>)	71
<i>Яровицкая В.В.</i> Индукция соматического эмбриогенеза у сосны обыкновенной (<i>Pinus sylvestris</i>) в культуре <i>in vitro</i>	72
<i>Барило А.А.</i> Аллергия как фактор риска развития псориаза	73
<i>Литвинова И.С.</i> Хемилюминесцентная активность нейтрофильных гранулоцитов и моноцитов крови у детей с <i>Helicobacter pylori</i> - ассоциированным эрозивно-язвенным поражением желудка и 12-перстной кишки	74
<i>Малинчик М.А.</i> Исследование полиморфизма генов иммунного ответа в популяциях Красноярского края и у больных мультифакториальными заболеваниями	75
Секция «Математическое моделирование»	77
<i>Адаев И.Р.</i> Технология построения симметричных многошаговых методов.....	78
<i>Грунчева М.В.</i> Актуальность применения информационных технологий для задач анализа и контроля выполнения требований по пожарной безопасности (на примере свода правил сп 1.13130).....	79
<i>Дергунов А.В.</i> Анализ данных о температурной инверсии в режиме НМУ в Красноярске.....	80
<i>Донцов Д.Ю.</i> Определение интересов пользователей с помощью анализа логов прокси-сервера	81
<i>Ефимов Е.А.</i> Численное моделирование волновых сейсмических полей в вязкоупругой геосреде	82
<i>Жигарев В.А.</i> Математическая модель камеры сгорания дизель-генераторных установок с вентильно-индукторными генераторами	83
<i>Закарлюка П.В.</i> Особенности моделирования процесса развития пожара для пожарных нагрузок с большой мощностью.....	84
<i>Иванова С.В.</i> Численное моделирование процессов вытеснения нефти из пористой среды с помощью наносuspензий	85
<i>Калинин Е.С.</i> Влияние времени начала эвакуации на выполнение условий безопасной эвакуации	86
<i>Краснощечков К.В.</i> Методы ДЗЗ для оценки экологической обстановки Красноярска. 87	
<i>Кром А.И.</i> Моделирование ионной проводимости мембран при заданном постоянном поверхностном потенциале или постоянном поверхностном заряде	88
<i>Малимонов М.И.</i> Модульная система прототипа приложения для разработки прикладных веб-ГИС	89
<i>Матушко А.К.</i> Технологии обработки спутниковых данных для анализа антропогенных преобразований городского ландшафта (на примере Красноярска) ...	90

<i>Миронов В.А.</i> Алгоритмы обработки записей землетрясений Алтае-Саянского региона и Байкальской рифтовой зоны для формирования базы данных сильных движений.....	91
<i>Моисейченко В.А.</i> Оценка влияния объёмно-планировочного решения стадиона на движение людей с помощью компьютерного моделирования.....	92
<i>Нестеров С.А.</i> Зависимость ионосферного электрического поля, проникающего через атмосферу, от магнитного поля.....	93
<i>Петраков И.Е.</i> Расчет чистого изгиба композитной пластинки с учетом различного сопротивления растяжению и сжатию.....	94
<i>Пряжников А.И.</i> Численное исследование режимов течения воды и нефти в микроканале Y-типа.....	95
<i>Пушкарев А.А.</i> Разработка макета веб-приложения для визуализации и обработки пространственно-временных данных аграрного мониторинга.....	96
<i>Смолехо И.В.</i> Численное решение системы уравнений для касательного напряжения и угловой скорости, описывающей воздействие электрического поля на жидкий кристалл.....	97
Секция «Школы РАН»	99
<i>Верецагин К., Сизых К., Рейзмунт А., Семёнов И., Rogozin H., Мацуганов Т., Беленюк В.Д.</i> Исследование активности и жизнеспособности клеток периферической крови при различных условиях инкубации.....	100
<i>Поддубный А., Чистова А., Солтис М., Потапова Е., Василько В., Шилкина К., Хилажсева Е.Д.</i> Исследование дифференцировки нейрональных стволовых и прогениторных клеток.....	101
<i>Дорошкевич И.А., Ворошилов Л., Алябьев Н.В., Обедина Д., Безрученко Ю.Е., Красицкая В.В.</i> Изучение термостабильности целентеразин-зависимых люцифераз <i>Renilla muellery</i> , <i>Metridia longai</i> NanoLuc.....	102
<i>Кротов Г., Зуева К., Талантаева А., Левичева В., Пуговкина Д., Широглазова С., Орлова С., Перетьяко О.В.</i> Морфологическое состояние слизистой оболочки полости рта при использовании зубной пасты.....	103
<i>Семиешина А.П., Портнова Д.В., Котова К.К., Баева А.И.</i> Сравнение эфирного масла апельсина, полученного методом дистилляции и коммерческого эфирного масла с использованием метода хромато-масс-спектрометрии.....	104
<i>Захарченко А.В., Лисицына Ю.М.</i> Выделение пектина из коры лиственницы сибирской.....	105
<i>Бери Д. А., Журкина М.И., Продайвода М. В., Суворова П. И., Ухвакова В.А.</i> Выделение эфирного масла розмарина методом экстракции этанолом и сравнение его с коммерческим эфирным маслом методами хромато-масс-спектрометрии.....	106
<i>Паремский А., Студеникина А., Щедрин Т., Безъязыкова Б., Алещенко Я., Важничая В.</i> Получение кофеина из чая и определение его чистоты методами ВЭЖХ и ГХ-МС.....	107
<i>Кулижников А., Рыжов К., Ленин В.</i> Спектрофотометрическое определение ионов железа в поверхностных и водопродных водах г. Красноярск.....	108

<i>Кутенкова Я.А., Панова А.Л., Дениско В.В.</i> Определение ионов меди в водопроводных и поверхностных водах методом спектрофотометрии.....	109
<i>Величко Г.М., Дмитриева Н.А.</i> Определение тяжёлых металлов в кремах отечественного производства.....	110
<i>Козинский А.С., Кочкина А.В., Курылёв А.В., Прудникова Д.Д., Рунков Д.А.</i> Исследование компонентного состава эфирного масла пихты сибирской (<i>Abies sibirica</i>), полученного методом паровой дистилляции.....	111

Секция «Физика»

Исследование оптических и магнитооптических свойств магнитных наноструктур по данным *in situ* спектральной магнитооптической эллипсометрии

Максимова Ольга Александровна

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

При проведении синтеза новых материалов требуется осуществлять контроль физических характеристик изготавливаемых образцов. Метод *in situ* спектральной магнитооптической эллипсометрии подходит для исследования оптических и магнитооптических свойств, однако сложность представляет решение обратной задачи магнитоэллипсометрии при обработке экспериментальных данных. Нами разработаны алгоритмы обработки данных [1-4] от сверхвысоковакуумного магнитоэллипсометрического комплекса [5], в которых используются различные оптические модели. Все разработанные алгоритмы реализованы в виде программного кода, успешно апробированы и используются для анализа магнитных наноструктур, например, пленок Fe/SiO₂/Si [6] (Рисунок 1) или эпитаксиальных МАХ-фазных пленок Mn₂GaC [7].

Модель	Модель изотропной однородной ферромагнитной среды [1]	Модель тонкой ферромагнитной пленки на немагнитной подложки [2]	Двухслойная модель «ферро магнитный слой / немагнитный буферный слой / немагнитная подложка» [3]	Многослойная среда [4]
Схематическое представление образца в соответствии с моделью				

Рис. 1. Модели, используемые при обработке данных для образцов Fe/SiO₂/Si.

Работа выполнена при поддержке Правительства РФ, Министерства науки и высшего образования РФ, Соглашение №075-15-2019-1886. Благодарность соавторам работы Лященко С.А., Яковлеву И.А., Тарасову И.А., Шевцову Д.В., Высотину М.А., Овчинникову С.Г.

Литература:

- [1] Maximova O.A. et al. JMMM. V. 440, P. 196. (2017).
- [2] Maximova O.A. et al. IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. V. 155, P. 012030. (2017).
- [3] Maximova O.A. et al. Journal of Siberian Federal University. Mathematics & Physics. V. 10, P. 223. (2017).
- [4] Maximova O.A. et al. DDF. V. 386, P. 131. (2018).
- [5] Maximova O.A. et al. JMMM. V. 440, P. 153. (2017)
- [6] Maximova O.A. et al. JETP Lett. V. 110, Is. 3. P. 166-172 (2019).
- [7] Lyaschenko S. et al. JMMM .V.528, P. 167803. (2021).

Возникновение твердофазных реакций между слоями Cu и Sn через барьерный слой Fe

Балашов Юрий Юрьевич

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

В вопросах надежности микроэлектроники, одной из наиболее актуальных проблем является возникновение диффузионных процессов и формирование интерметаллидных соединений в местах пайки между медными токопроводящими дорожками и оловянным припоем. В системе Cu/Sn интерметаллид η -Cu₆Sn₅ образуется уже при комнатной температуре [1]. Что бы решить данную проблему, некоторыми научными коллективами предлагается помещать барьерный слой Ni между реагентами [2]. Согласно современным теориям, диффузия между реагирующими слоями может возникнуть без взаимодействия с барьерным слоем. Нами установлено, что, при помещении тонкого слоя Fe между слоями Cu и Sn, действительно, при комнатной температуре реакции не возникает, но нагрев систему до температуры 150 °С, атомы олова начинают мигрировать в слой Cu, образуя с ним новые твердые фазы, не взаимодействуя со слоем Fe, что представлено на рис. 1.

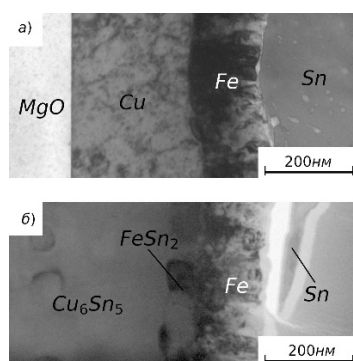


Рис. 1. ПЭМ – изображения образца, после его отжига при 100 (а) и 150 °С (б).

В данной работе, методом вакуумного напыления, были получены тонкопленочные образцы системы Cu/Fe/Sn с толщинами слоев: Cu ~ 300 нм, Fe ~ 170 нм, Sn ~ 400 нм. Далее, образцы подвергались отжигу в вакуумной печи при температурах 100, 150, 200, 250, 300 °С. На каждом этапе отжига и перед ним, с помощью просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) получены общие изображения поперечного среза системы, установлены образующиеся фазы; с помощью энергодисперсионной спектроскопии выполнен поэлементный анализ пленок по толщине. Пробы образцов были взяты с помощью растрового ионного микроскопа Hitachi FB-2100, обладающего установкой фокусируемого ионного пучка, позволившего получить образцы толщиной ~ 100 нм.

В результате представленных исследований в системе Cu/Fe(~170нм)/Sn продемонстрирована возможность протекания твердофазных реакций между реагирующими слоями Cu и Sn без химического взаимодействия с барьерным слоем Fe, установлена температура инициирования реакции, получена фазовая последовательность в зависимости от температуры отжига.

Все проведенные исследования были выполнены на оборудовании центра коллективного пользования ФИЦ КНЦ СО РАН. Данная работа выполнена научным коллективом, в состав которого, кроме докладчика, входят: В.Г. Мягков, В.С. Жигалов, М.Н. Волочаев, все участники которого являются работниками Института физики им. Л.В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН.

Литература:

[1] Wu Y.Q., et al., Acta Materialia, V.60, PP. 6581-6591 (2012).

[2] Chia P.Y., Haseeb A.S.M.A, J Mater Sci: Mater Electron, V.26, PP.294-299 (2015).

Двумерные металлоорганические полимеры на основе тетраоксо[8]циркулена и атомов *s*-металлов

Бегунович Людмила Витальевна

ФГАОУ ВО «Сибирский федеральный университет»

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

Двумерные пористые органические полимеры привлекают большой научный интерес благодаря возможности гибкого контролирования их свойств, которые зависят как от типа мономеров и способа их связывания, так и от размера полученных наноструктур. Кроме того уникальная структура полимеров позволяет равномерно и равноудаленно встраивать атомы металлов, что расширяет возможности регулирования свойств. В данной работе методами квантовой химии изучена структура и свойства металлоорганических полимеров на основе тетраоксо[8]циркулена (ТОС) и атомов щелочных или щелочноземельных металлов. Локализация атомов металла зависит от размера пор: полимеры с более крупными порами способствуют локализации атомов в плоскости поры. Результаты показывают, что атомы металлов оказывают значительное влияние на полимеры, что приводит к изменению их электронной структуры с полупроводниковой на проводящую. ТОС, допированные кальцием, демонстрируют высокую плотность состояний вблизи уровня Ферми. Расчеты функции Элиашберга и константы электрон-фононного взаимодействия показали, что возможна индуцированная сверхпроводимость с $T_c = 14,5$ К. Атомы кальция находятся в дублетном спиновом состоянии, которое характеризуется большим временем спиновой жизни. Сочетание сверхпроводимости и длительного времени жизни спина в дублете на атомах кальция делает ТОС-Са перспективными для создания магнитных квантовых битов [1].

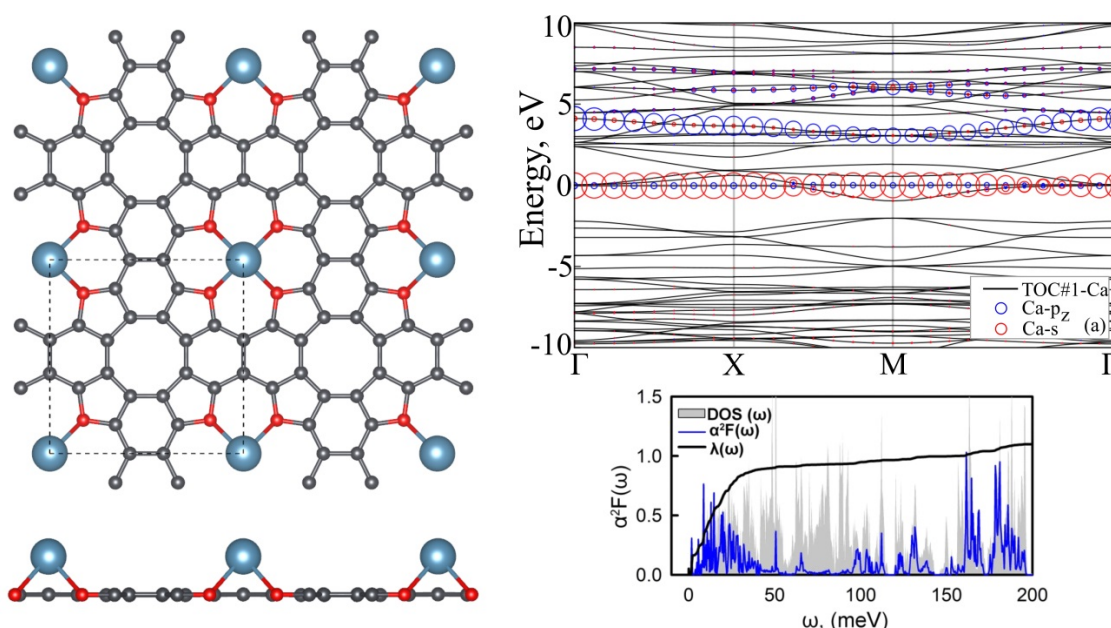


Рис. 1. Структура и свойства металлоорганических полимеров на основе тетраоксо[8]циркулена и атомов кальция.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 19-73-10015). Авторы выражают благодарность ИВЦ НГУ за предоставление возможности использования вычислительных кластеров, на которых и были произведены расчеты.

Литература:

[1] Begunovich L.V., Kuklin A.V., Baryshnikov G.V., Valiev R.R., Ågren H., *Nanoscale*, V.13, P.4799 (2021).

Новый кобальтовый оксиборат $\text{Co}_{5/3}\text{Nb}_{1/3}\text{VO}_4$ со сложной магнитной структурой

Бельская Надежда Алексеевна

СибГУ им. М.Ф. Решетнева

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

Монокристаллы $\text{Co}_{5/3}\text{Nb}_{1/3}\text{VO}_4$ были выращены раствор-расплавным методом в системе $\text{V}_{12}\text{Mo}_3\text{O}_{12} + \text{V}_2\text{O}_5 + \text{Na}_2\text{O} + \text{Co}_2\text{O}_3 + \text{Nb}_2\text{O}_5$. Кристаллическая структура была решена в деталях. Обнаружена ромбическая симметрия $P6mm$, параметры решетки $a=9.3336(1) \text{ \AA}$, $b=9.4039(7) \text{ \AA}$, $c=3.1793(2) \text{ \AA}$, $V=279.05(9) \text{ \AA}^3$. Новый материал изоструктурен минералу варвикит. Металлические ионы занимают две неэквивалентные кристаллографические позиций M1 и M2 в октаэдрической координации. Соединяясь через общие ребра октаэдров формируют ленты, распространяющиеся вдоль короткого кристаллографического направления. Позиция M1 заполнена смесью ионов Co и Nb в соотношении 0.66/0.34, в то время как позиция M2 занята только ионами Co. Расчет валентных состояний (BVS метод) показал, что ионы Co в позициях M1 и M2 имеют заряд: +2.13 и +1.99 соответственно. Таким образом позиция M2 занята исключительно Co^{2+} , тогда как позицию M1 занимают $\text{Co}^{2+}/\text{Nb}^{5+}$.

Проведены измерения статической намагниченности и магнитной восприимчивости в широком интервале температур, полей и при разных ориентациях внешнего магнитного поля относительно кристаллографических осей. Обнаружены две магнитные аномалии при $T_{N1}=27 \text{ K}$ и $T_{N2}=14 \text{ K}$ (рис. 1). Первая из которых связана с установлением дальнего антиферромагнитного порядка, вторая

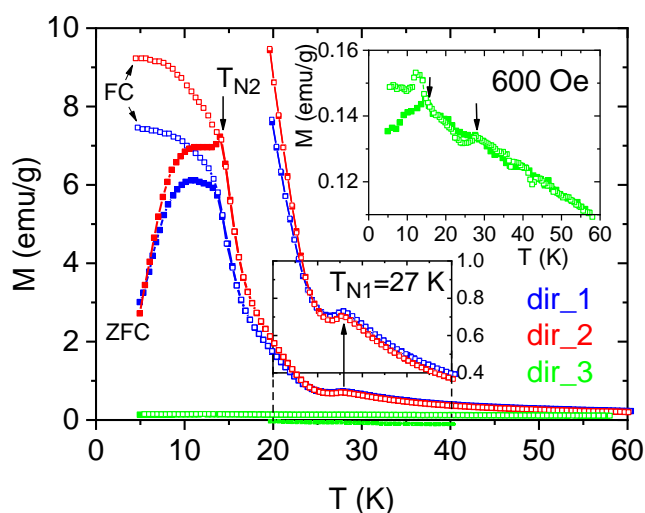


Рис. 1. Температурная зависимость намагниченности для трех кристаллографических направлений, измеренная в поле 600 эрстед

приписывается ферромагнитному переходу. Ниже этой температуры появляется характерная петля гистерезиса, которая трансформируется с уменьшением температуры. При $T=4.2 \text{ K}$ магнитный момент насыщения равен 1.27 \mu B/f.u. Магнитная восприимчивость выше 100 K подчиняется закону Кури-Вейса с параметрами: $\chi_0=1.6 \text{ emu/mol}$, $C=3.81 \text{ emuK/mol}$, $\theta=-8.9 \text{ K}$. Магнитный момент на ион Co^{2+} равен 4.28 \mu B . Измерения удельной теплоемкости обнаружило две аномалии согласующихся с магнитными данными.

Интересно, что магнитное поведение нового оксибората $\text{Co}_{5/3}\text{Nb}_{1/3}\text{VO}_4$ сильно отличается от других гетерометаллических варвикитов, и в тоже время обнаруживает сильную схожесть с кобальтовыми людвигитами. Полученные

экспериментальные данные свидетельствует о сильном структурном и магнитном родстве этих материалов.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект №20-02-00559). Благодарность соавторам работы: Н.В. Казак, А.Д. Васильеву, Л.Н. Безматерных, Е.М. Мошкиной, Д.А. Великанову, С.Ю. Гаврилкину, С.Г. Овчинникову.

Таммовские плазмон-поляритоны для органических солнечных элементов

Бикбаев Рашид Гельмединович

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

Сибирский Федеральный Университет

Развитие солнечной энергетики идет по пути увеличения эффективности преобразования энергии, параллельно решая задачи увеличения надежности и снижения себестоимости солнечных элементов. Органические солнечные элементы (ОСЭ) на основе сопряженных полимеров привлекают к себе все большее внимания в связи с их низкой стоимостью, легкостью изготовления и малым весом. Подобные ОСЭ содержат объемный гетеропереход, вследствие чего идет поиск компромисса между эффективностями поглощения фотонов и транспортировки носителей заряда. Толщина активного слоя, в этом случае, составляет не больше 100 нм, что значительно ограничивает эффективность поглощения падающего света. В связи с этим широкое распространение получили методы увеличения поглощения в активном слое за счет внедрения в него плазмонных частиц (серебро, золото, медь) или сопряжения ОСЭ с фотонным кристаллом [1].

Новой является идея использования допированного наночастицами активного элемента в качестве зеркала [2] (рис. 1). В этом случае на границе активного слоя и фотонного кристалла локализуется таммовский плазмон-поляритон (ТПП) [3].

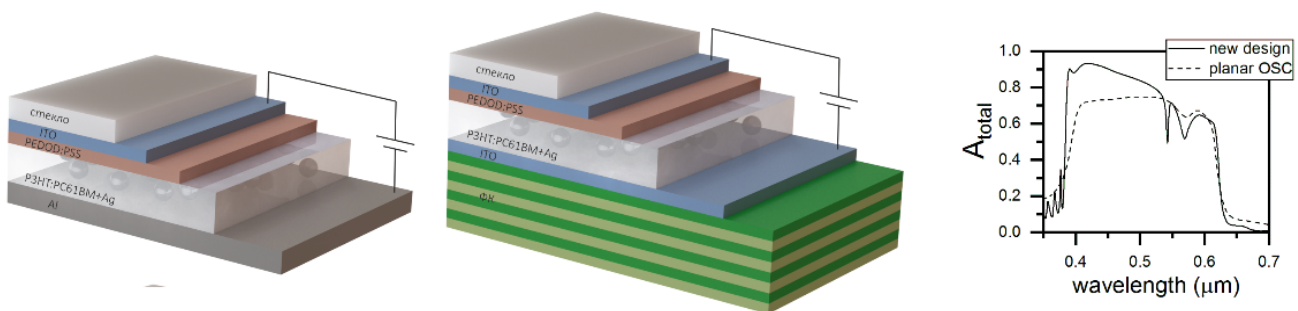


Рис.1. Схематичное изображение ОСЭ, допированного плазмонными наночастицами (слева), ОСЭ на ТПП (в центре) и зависимости интегрального поглощения в активном слое от длины волны падающего излучения (справа).

Исследуемая нами структура содержит активный слой из P3HT:PC61BM толщиной 50 нм, допированный серебряными наночастицами с объемной концентрацией 20%. В качестве контактов использованы пленки ITO с толщинами 15 нм и 45 нм. Элементарная ячейка фотонного кристалла сформирована из двуоксида кремния (SiO₂) и диоксида титана (TiO₂) с толщинами 75 нм и 40 нм, соответственно. Методом трансфер-матрицы было рассчитано интегральное поглощение в активном слое, нормированное на солнечный спектр. Показано, что в предложенной модели ОСЭ интегральное поглощения в исследуемом интервале длин волн увеличивается на 10% [4], в сравнении с аналогичным планарным ОСЭ. Важно отметить, что дополнительное увеличение интегрального поглощения в исследуемом интервале длин волн может быть достигнуто за счет нанесения ФК на тонкий металлический слой. В данном случае интегральное поглощение, в сравнении с исходной структурой, может быть увеличено на 15% [5].

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых № МК-46.2021.1.2.

Литература:

- [1] Qing-Dong Ou et al., Adv. Sci. V.3, P. 1600123 (2016).
- [2] Ветров С.Я., Бикбаев Р.Г., Тимофеев И.В., ЖЭТФ, Т.144, С.112939 (2013).
- [3] Kaliteevski M., et al., Phys. Rev. B. V.76, P.165415 (2007).
- [4] Бикбаев Р.Г., Ветров С.Я., Тимофеев И.В., Шабанов В.Ф., ДАН, Т.492, С. 54-57 (2020).
- [5] Bikbaev R.G., et al., Applied Optics, DOI: 10.1364/AO.421374, (2021).

Сканирующий спектрометр ферромагнитного резонанса
Горчаковский Александр Антонович, Подшивалов Иван Валерьевич
Институт физики им. Л.В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН

Разработан спектрометр ферромагнитного резонанса, позволяющий регистрировать спектры поглощения СВЧ энергии образцами тонких магнитных плёнок при полях развёртки до 500 Э и частотах возбуждения от 0,1 до 6,0 ГГц.

Спектрометр состоит из следующих функциональных блоков: компьютера с программным обеспечением, блока обработки сигналов, блока развёртки, магнитной системы с блоком перемещения образца.

Блок обработки сигналов предназначен для генерации сигналов развёртки и модуляции, питания измерительной головки и обработки сигнала с её детектора путём синхронного детектирования. В качестве опорного для цифрового синхронного детектора принимается внутренний гармонический сигнал, который также используется для генерации модулирующего колебания, поступающего в блок развёртки. Напряжение питания головки формируется интегрирующим усилителем ошибки таким образом, чтобы на выходе детектора сохранялось заранее заданное постоянное напряжение. Чувствительность по входу для сигнала с детектора достигает 10 мкВ при отношении сигнал/шум 25 дБ. Блок обработки присоединяется к компьютеру посредством интерфейса Ethernet.

Блок развёртки представляет собой источник тока, управляемый напряжением, выход которого присоединен к кольцам Гельмгольца магнитной системы. В имеющейся конфигурации позволяет создавать магнитные поля развёртки величиной от минус 500 до плюс 500 Э и поле модуляции амплитудой от 0 до 1 Э с частотой до 1 кГц.

Система перемещения имеет четыре степени свободы и позволяет по заданной программе провести ряд измерений со смещением по площади образца до 25x25 мм с разрешением 0,01 мм, при угле поворота образца относительно вектора поля развёртки от 0° до 360° с разрешением 0,05°.

Спектрометр оснащается измерительными головками новой конструкции [1], позволяющими достичь отношения сигнал/шум более 10 дБ при диаметре измерительного отверстия 0,8 мм и толщине исследуемой плёнки пермаллоя Ni₈₀Fe₂₀ 5 нм.



Рис. 1. Блок развёртки и обработки сигналов (слева), система перемещения образца и магнитная система (по центру), измерительная головка и держатель образца внутри магнитной системы (справа)

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, соглашение №075-11-2019-054.

Литература:

[1] Belyaev V.A., Boev N.M., Gorchakovskiy A.A., Galeev R.G., Instruments and Experimental Techniques, No. 2, PP. 277–284 (2021).

Влияние состава и давления на фазовую стабильность и свойства магнитных МАХ-фаз M_2AX ($M=Mn, Fe$; $A=Al, Ga, Ge, Si$; $X=C, N$)

Драганюк Оксана Николаевна

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

Одной из важнейших задач в физике твердого тела является поиск и исследование новых функциональных материалов. МАХ-фазы $M_{n+1}AX_n$ (МАХ) ($n = 1-3$) [1] представляют собой семейство атомно-слоистых материалов, где M - переходный металл, A - элемент А-группы, а X - углерод и / или азот. С тех пор, как соединения в МАХ-фазах начали активно синтезировать в виде объемных соединений и тонких пленок, оказалось, что они обладают исключительными физическими, химическими, электрическими и механическими свойствами из-за своей слоистой структуры и сочетанием сильных связей $M-X$ и более слабых связей $M-A$. В 2013 году были впервые синтезированы магнитные МАХ-фазы, что расширило область применения данных материалов. В настоящее время МАХ-фазы применяются в спинэлектронных и магнитных охлаждающих устройствах.

Соединения M_2AX -фазы ($M=Mn, Fe$; $A=Al, Ga, Ge, Si$; $X=C, N$) были исследованы методами DFT + GGA в рамках *ab initio* пакета VASP. Было определено основное магнитное состояние, проведен анализ фазовой стабильности. Термодинамическая фазовая стабильность была рассчитана, используя схему «линейная процедура оптимизации» [2], в результате найдены энергетически выгодные фазы для каждого состава. В таблице 1 приведено сравнение энтальпий образования МАХ-фаз и конкурирующих фаз соответствующего состава. Получено, что в исследуемом ряду стабильными являются МАХ фазы Mn_2GeC и Mn_2GaC . При этом образование углеродосодержащих МАХ-фаз выгоднее, чем азотосодержащих при прочих одинаковых элементах в составе. Также важную роль играет А-элемент: МАХ-фазы, содержащие Ga и Ge энергетически выгоднее, чем с Al и Si , что обусловлено особенностями электронного строения валентных *sp*-оболочек. Исследование МАХ фаз под давлением показало возможность стабилизации некоторых нестабильных МАХ-фаз под давлением от 5 ГПа.

Таблица 1. Энтальпии формирования МАХ-фаз

	M_2AX	Конкурирующие фазы	ΔH , эВ/атом		M_2AX	ΔH , эВ/атом
	Fe_2AlC	$0.5C+0.5AlFe+0.5AlFe_3C$	0.07		Fe_2SiC	$C+0.5Fe_3Si+0.5FeSi$
Н, эВ	-29.83	-30.12		Н, эВ	-31.12	-32.30
	Fe_2AlN	$AlN+2Fe$	0.45		Fe_2SiN	$0.24Fe_3N+0.43FeN+0.19Si_3N_4$
Н, эВ	-29.01	-30.81		Н, эВ	-30.48	-31.73
	Mn_2AlC	$0.5MnAl+0.5Mn_3AlC+0.5C$	0.003		Mn_2SiC	$0.5MnSi+0.5Mn_3Si+C$
Н, эВ	-31.69	-31.72		Н, эВ	-33.31	-33.71
	Mn_2AlN	$AlN+2Mn$	0.36		Mn_2SiN	$1.25Mn+0.25Mn_3Si+0.25Si_3N_4$
Н, эВ	-31.43	-32.89		Н, эВ	-32.88	-33.97
	Fe_2GeC	$C+0.5Fe_3Ge+0.5FeGe$	0.16		Fe_2GaC	$C+0.125Ga_3Fe+0.625GaFe_3$
Н, эВ	-29.91	-30.56		Н, эВ	-28.76	-28.99
	Fe_2GeN	$FeN+FeGe$	0.18		Fe_2GaN	$0.5FeN+0.5GaFe_3+0.25GaN$
Н, эВ	-29.09	-29.83		Н, эВ	-27.94	-28.53
	Mn_2GeC	-	0		Mn_2GaC	-
Н, эВ	-32.12	-		Н, эВ	-30.7241	-
	Mn_2GeN	Mn_4N+Mn_2N+Ge	0.03		Mn_2GaN	$0.67Mn_3GaN+0.33GaN$
Н, эВ	-31.59	-31.71		Н, эВ	-30.41	-30.54

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда науки в рамках научного проекта №20-42-240004.

Литература:

- [1] Sokol, Natu V., Kota S., Barsoum M.W., Trends in Chemistry 1 (2), 210-223 (2019).
 [2] Dahlqvist M., Alling B., Rosen J., Physical Review B81, 220102(R) (2010).

Трехмерные световые решетки из оптических вихрей

Иконников Денис Андреевич, Мыслевец Сергей Александрович, Архипкин Василий Григорьевич, Вьюнышев Андрей Михайлович
Институт физики им. Л.В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН

В последнее время все больший интерес в фотонике привлекает структурированный свет. Ярким примером структурированного света являются так называемые оптические вихри, которые представляют собой пучки с азимутальной фазовой зависимостью $\exp(i\phi l)$ [1], где l – топологический заряд, ϕ – азимутальный угол. Такие пучки нашли применение в таких областях как квантовые коммуникации, сверхъёмкая передача информации и оптические манипуляции [2-5]. Ряд прикладных задач в области захвата и удержания объектов различной природы, высококачественной фотолитографии и структурирования вещества требует создания упорядоченных массивов пучков, в том числе, массивов оптических вихрей, способных переносить орбитальный угловой момент. В связи с этим, актуальной является задача рассмотрения прохождения одиночного вихревого лазерного пучка через двумерную амплитудную решетку. Известно, что при прохождении через периодическую решетку плоской волны в ближнем поле наблюдается эффект Тальбота, который заключается в периодическом самовоспроизведении изображения на расстояниях кратных длине Тальбота [6], таким образом формируется трехмерная оптическая решетка. Эффект Тальбота для пучков с плоским волновым фронтом к настоящему времени хорошо изучен и теоретически рассмотрен для пучков, имеющих фазовые сингулярности [7,8]. Для оптических вихрей терагерцового диапазона данный эффект наблюдался экспериментально [8,9]. В данной работе была теоретически и экспериментально исследована ближнепольная дифракция оптических вихрей видимого диапазона на двумерной амплитудной решетке.

В результате работы было установлено, что имеет место аналог эффекта Тальбота для оптических вихрей, в плоскостях Тальбота свет формируется в кольца. Для падающего пучка с топологическим зарядом равным единице, число колец совпадает с числом отверстий в решетке. При увеличении топологического заряда падающего пучка, каждое кольцо превращается в набор концентрических колец, количество колец в каждом наборе соответствует топологическому заряду падающего пучка. Расчет показывает, что в фазовом распределении присутствуют сингулярности с топологические заряды противоположных знаков, количество которых может заметно превышать топологический заряд падающего вихревого лазерного пучка. Суммарный топологический заряд сингулярностей в пределах всей решетки равняется топологическому заряду падающего излучения, при этом интенсивность имеет асимметричное угловое распределение в окрестности точек сингулярности. За счет того, что картина распределения интенсивности периодически воспроизводится благодаря эффекту Тальбота, образуется трехмерная световая решетка из оптических вихрей. Трехмерные световые решетки из оптических вихрей могут обеспечить новые функциональные возможности для взаимодействия света с веществом, которые невозможны в оптических решетках без топологического заряда.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 19-12-00203).

Литература:

- [1] Yao A.M., Padgett M.J., *Adv. Opt. Photon.*, V. 2. P. 161-204 (2011).
- [2] Shen Y., et al., *Light Sci. Appl.*, V. 8. P. 90 (2019).
- [3] Mair A., et al., *Nature.*, V. 412. P. 313-316 (2001).
- [4] Dada A.C., et al., *Nature Physics*, V. 7. P. 677-680 (2011).
- [5] Willner A.E., et al., *Adv. Opt. Photon.*, V. 7. P. 66106 (2015).
- [6] Wen J., Zhang Y., Xiao M., *Adv. Opt. Photon.*, V 5. P. 83-130 (2013).
- [7] Rasouli S., Hebri D., *J. Opt. Soc. Am. A*, V. 36. P. 800-808 (2019).
- [8] Kotelnikov I.A., Kameshkov O.E., Knyazev B.A., *J. Optics*, V. 22. P. 065603 (2020).
- [9] Knyazev B., et al., *Opt. Express*, V. 26. P. 14174-14185 (2018).

Квантовый транспорт холодных бозе-атомов в ромбической решетке под действием внешнего искусственного магнитного поля

Мураев Павел Сергеевич

Сибирский федеральный университет

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

Задача квантового транспорта частиц через периодические структуры интересовала ученых еще на раннем этапе развития квантовой механики [1]. Сегодня данная задача продолжает активно исследоваться в нескольких областях современной физики, в том числе и в физике холодных атомов.

Данная работа продолжает идеи, заложенные ранее в [2], но вместо линейной цепочки объектом исследования является ромбическая цепочка Бозе-Хаббарда под действием внешнего искусственного магнитного поля (рис. 1).

Для случая невзаимодействующих частиц ($g = 0$) использован формализм одночастичной матрицы плотности. Показано, что при $\Phi = 0$ ток принимает максимальное значение, а при $\Phi = \pi$ ток через цепочку отсутствует из-за эффектов деструктивной интерференции (рис. 2)

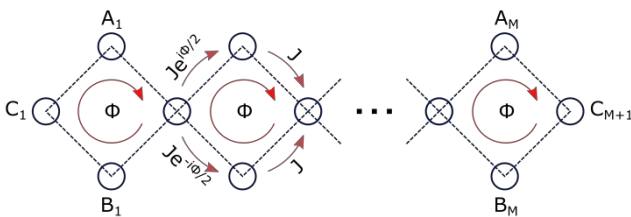


Рис. 1. Ромбическая цепочка, состоящая из M ромбов. Магнитный поток характеризуется фазой Пайерлса Φ , определяющей значение элементов матрицы перескока.

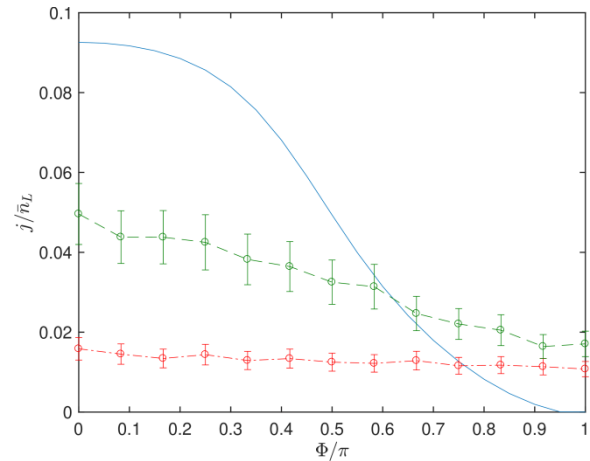


Рис. 2. Стационарный ток как функция Φ для $M = 5$ и $g = 0$ (сплошная линия), $g = 0.7$ (пунктирная линия) и $g = 2$ (штрихпунктирная линия). Значения параметров $\gamma_L = \gamma_R = 0.4$ и $\bar{n}_R/\bar{n}_L = 0.4$. Планки погрешностей соответствуют статистической ошибке, возникшей из-за моделирования случайного процесса методом Монте-Карло

Для случая взаимодействующих частиц ($g \neq 0$) применялось псевдоклассическое приближение. Учет взаимодействия между частицами привел к нарушению симметрии системы, из-за чего ток даже при $\Phi = \pi$ оказывается отличным от нуля (рис. 2)

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 19-12-00167).

Литература:

[1] Bloch F., Zeitschrift für physics **52**, 555 (1928).

[2] Bychek A. A., Muraev P. S., Maksimov D. N., Kolovsky A. R., Phys. Rev. E **101**, 012208 (2020).

Создание эффективных взаимодействий для гамильтониана кластеризации на три группы на кутритах

Пичковский Иван Сергеевич,

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

Задача кластеризации заключается в разделении данных по близости их свойств. Такая задача уже была решена с помощью квантового отжига для двухуровневых квантовых элементов – кубитов [1]. В предыдущей работе [2] мы показали, что переход к трёхуровневым квантовым элементам - кутритам (спинам $S = 1$) позволит решить ту же задачу на меньшем числе элементов. В настоящей работе получены последовательности селективных операторов поворотов, необходимые для реализации данного алгоритма.

При кластеризации методом квантового отжига система изначально приводится к основному состоянию начального гамильтониана, которое легко приготовить. Затем гамильтониан адиабатически изменяют во времени до конечного гамильтониана, в основном состоянии которого закодировано решение задачи. Этот гамильтониан уже получен нами ранее [2]:

$$H_f = \sum_{i,j} H_{ij} \quad H_{ij} = R_{ij} \left(2 \left[|1,1\rangle\langle 1,1|_{i,j} + |0,0\rangle\langle 0,0|_{i,j} + |-1,-1\rangle\langle -1,-1|_{i,j} \right] - 1 \right) \quad (1)$$

где R_{ij} - расстояние между точками данных. Гамильтониан (1) записан через проекторы в вычислительном базисе из собственных векторов с проекциями 1, 0, -1 на ось Z . Для моделирования на реальных физических системах перепишем проекторы в гамильтониане (1) через спиновые операторы [3]:

$$|1\rangle\langle 1| = S^z (1 + S^z) / 2, |0\rangle\langle 0| = 1 - S^z S^z, |-1\rangle\langle -1| = -S^z (1 - S^z) / 2 \quad (2)$$

После чего он примет вид:

$$H_{ij} = R_{ij} \left(S_i^z S_j^z + 3S_i^z S_i^z S_j^z S_j^z - 2S_i^z S_i^z - 2S_j^z S_j^z + 1 \right) \quad (3)$$

Стоящие в гамильтониане (3) взаимодействия надо выразить через диполь-дипольное и зеймановское взаимодействия. С этой целью применим следующие преобразования оператора эволюции с помощью селективных операторов поворотов вокруг осей Y и Z [4]:

$$\exp[-3iJ_{ij}S_i^z S_j^z S_j^z] = \exp[-2iJ_{ij}S_i^z] \{ -\pi \}_{y,j}^{2 \leftrightarrow 3} \exp[-iJ_{ij}S_i^z S_j^z] \{ -\pi \}_{y,j}^{1 \leftrightarrow 2} \exp[-iJ_{ij}S_i^z S_j^z] \{ \pi \}_{y,j}^{1 \leftrightarrow 2} \{ \pi \}_{y,j}^{2 \leftrightarrow 3} \\ \exp[-i\theta S_i^z] = \{ 2\theta \}_{z,i}^{2 \leftrightarrow 3} \{ 2\theta \}_{z,i}^{1 \leftrightarrow 2} \quad \exp[-i3\varphi S_i^z S_i^z] = \{ 2\varphi \}_{z,i}^{1 \leftrightarrow 2} \{ 2\varphi \}_{z,i}^{2 \leftrightarrow 3} \exp[-2i\varphi I]$$

Осталось только «выключить» все лишние в данный момент взаимодействия с помощью операторов инверсии.

Таким образом, после проделанных преобразований был получен гамильтониан, в котором присутствует только диполь-дипольное и зеймановское взаимодействия, что позволит провести симуляцию эксперимента на кутритах.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта фонда развития теоретической физики и математики «Базис» #20-1-5-41-1

Литература:

- [1] Kumar V., Bass G., Tomlin C., et al., Quantum Information Processing, V. 17, PP. 1-14 (2018)
- [2] Zobov V.E., Pichkovskiy I.S., arXiv preprint arXiv:2102.09205 (2021).
- [3] Zobov V.E., Pichkovskiy I.S., Quantum Information Processing, V. 19, PP. 1-12 (2020).
- [4] Zobov V.E., Pichkovskiy I.S., Siberian Journal of Physics, V. 14, PP. 18–30 (2019)

Спиновая динамика в ортоферритах $TmFeO_3$ и $TbFeO_3$

Скоробогатов Станислав Алексеевич

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

Сибирский федеральный университет

Редкоземельные ортоферриты с общим составом $RFeO_3$ (R -редкоземельный ион) представляют собой оксидные магнитные материалы, свойства которых находятся в центре внимания современной физики твердого тела. К таким свойствам относятся: спонтанный спин-переориентационный переход [1], сверхбыстрое вращение намагниченности, индуцированное лазерным импульсом [2], анизотропная эволюция магнитной энтропии [3] возникновение солитонных решеток [4]. Ортоферриты состоят из двух магнитных подрешеток: упорядочение сильно связанной подрешетки ионов Fe^{3+} происходит при $T_N \approx 600$ К и подрешетки редкоземельного иона, упорядочение которой наступает при $T < 10$ К. Общепринято, что уникальные магнитные свойства ортоферритов возникают вследствие $3d-4f$ взаимодействия, однако построение универсальной микроскопической модели наталкивается на ряд трудностей.

В нашем исследовании мы попытались решить эту проблему, изучая полный спин-волновой спектр $TmFeO_3$ и $TbFeO_3$ с помощью неупругого нейтронного рассеяния. Мы исследовали образцы $TmFeO_3$ и $TbFeO_3$, которые были выращены методом оптической зонной плавки. Исследование спиновой динамики на двух различных энергетических масштабах: Fe^{3+} (~ 60 мэВ) и редкоземельной подсистемы Tm^{3+} (~ 4.5 мэВ) [5, 6] и $TbFeO_3$ (~ 15 мэВ) были проведены в Oak Ridge National Laboratory.

Мы описали высокоэнергетические магнитные возбуждения с использованием линейной спин-волновой модели и определили обменные взаимодействия в подсистеме Fe^{3+} в $TmFeO_3$ и $TbFeO_3$. Наши результаты показывают выраженную анизотропию между обменными взаимодействиями в ab -плоскости и вдоль оси c в пространственной группе $Pbnm$. Спектр магнитных возбуждений подсистемы Tm^{3+} состоит из двух переходов CEF, которые имеют дисперсию из-за обменного взаимодействия $Tm-Tm$. Данные возбуждения расположены в области энергий ниже щели магнонов Fe^{3+} . Мы провели расчеты по используя модель точечного заряда и воспроизвели основные особенности наблюдаемых переходов, а также анизотропию магнитной восприимчивости [7].

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 20-32-90142.

Литература:

- [1] White R.L., J. Appl. Phys. 40, 1061 (1969).
- [2] Kimel A.V., et al., Nature (London) 435, 655 (2005).
- [3] Ke Y.J., et al., Sci. Rep. 6, 19775 (2016).
- [4] Artyukhin S., et al. Nature materials 11.8, 694-699 (2012).
- [5] Shapiro S.M., et al., Phys. Rev. B10, 2014 (1974).
- [6] Nikitin S.E., et al., Phys.Rev. B 98, 064424 (2018).
- [7] Skorobogatov S.A., et al., Phys. Rev. B 101, 014432 (2020).

Синтез, морфологические и оптические свойства золотых нанозвезд

Смолярова Татьяна Евгеньевна

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

Золотые наночастицы демонстрируют наличие интенсивного локализованного поверхностного плазмонного резонанса (LSPR), интенсивность которого зависит от формы, размера и состава наночастиц, их оптических свойств и окружающей среды. Возможность управлять плазмонным резонансом стимулировала разработку новых технологий синтеза наночастиц для управления их формой, что, в свою очередь, позволило использовать золотые наночастицы в различных областях, таких как электроника, фотоника и биосенсоры. Золотые нанозвезды представляют особый интерес, вследствие того, что присущий им плазмонный резонанс является результатом гибридизации плазмонов, сосредоточенных в ядре и окружающих его пиках. Ядро частицы усиливает электромагнитное поле остаточных плазмонов, а морфология лучей нанозвезд (длина или угол раскрытия) и их количество также сильно влияют на частоту и интенсивность плазмонного резонанса [1]. В этой работе сообщается о результатах синтеза золотых нанозвезд с использованием двух разных поверхностно-активных веществ: поливинилпирролидона (PVP) и Triton X-100.

Оптические свойства синтезированных золотых нанозвезд были проанализированы с использованием спектров оптической плотности (рис. 1 (а)), которые показывают наличие пиков плазмонного резонанса при 800 нм для нанозвезд, синтезированных с помощью PVP, и при 850 нм для нанозвезд, синтезированных с помощью Triton X-100.

Анализ результатов синтеза с помощью просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) показывает, что полученные нанозвезды имеют совершенно разную морфологию. Нанозвезды, синтезированные с использованием PVP, имеют более короткие пики и более крупные ядра (рис. 1 (б)), чем нанозвезды, синтезированные с помощью Triton X-100 (рис. 1 (в)).

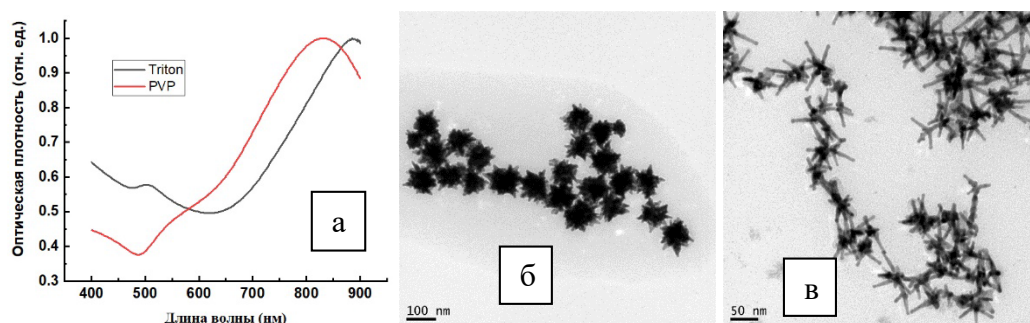


Рис. 1. Спектры оптической плотности (а) и ПЭМ-изображения золотых нанозвезд, синтезированных с помощью (б) PVP, (в) Triton X-100.

Таким образом, были осуществлены два подхода к синтезу золотых нанозвезд с использованием двух поверхностно-активных веществ (PVP и Triton X-100). Результаты синтеза показывают, что оптические и морфологические характеристики синтезированных наночастиц подходят для разработки LSPR-биосенсоров, а также могут быть использованы в качестве фототермического материала для гипертермического разрушения онкологических новообразований использованием излучения ближнего инфракрасного диапазона.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 20-32-90134.

Литература:

[1] Barbosa S. et al. Tuning size and sensing properties in colloidal gold nanostars //Langmuir. – 2010. – Т. 26. – №. 18. – С. 14943-14950.

Бистабильное поведение конечного фотонного кристалла с керровским дефектом

Шадрина Галина Владимировна

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

В работе исследуется отклик нелинейного монополюсного микрорезонатора в конечном двумерном фотонном кристалле (ФК), построенном из диэлектрических цилиндров. Резонатор формируется путем замещения исходного цилиндра на цилиндр с отличающейся диэлектрической проницаемостью. Помещение такого дефектного цилиндра вглубь структуры позволяет наблюдать высокодобротные резонансы на моде, локализованной на дефекте [1] (рис.1.а). Если дефектный цилиндр обладает вдобавок керровской нелинейностью, это приводит к возникновению бистабильного поведения системы при возбуждении системы внешней волной.

Ранее [2] была рассмотрена система, которая возбуждалась посредством волноводных мод. В нашем случае резонатор возбуждается плоской s-поляризованной волной. Обнаружено бистабильное поведение по частоте (ν) и интенсивности (I) падающей волны (рис.1.б, в), что является типичным для подобных систем. Помимо этого, показано, что переход в бистабильный режим может быть спровоцирован просто изменением угла падения плоской волны (рис.1.г).

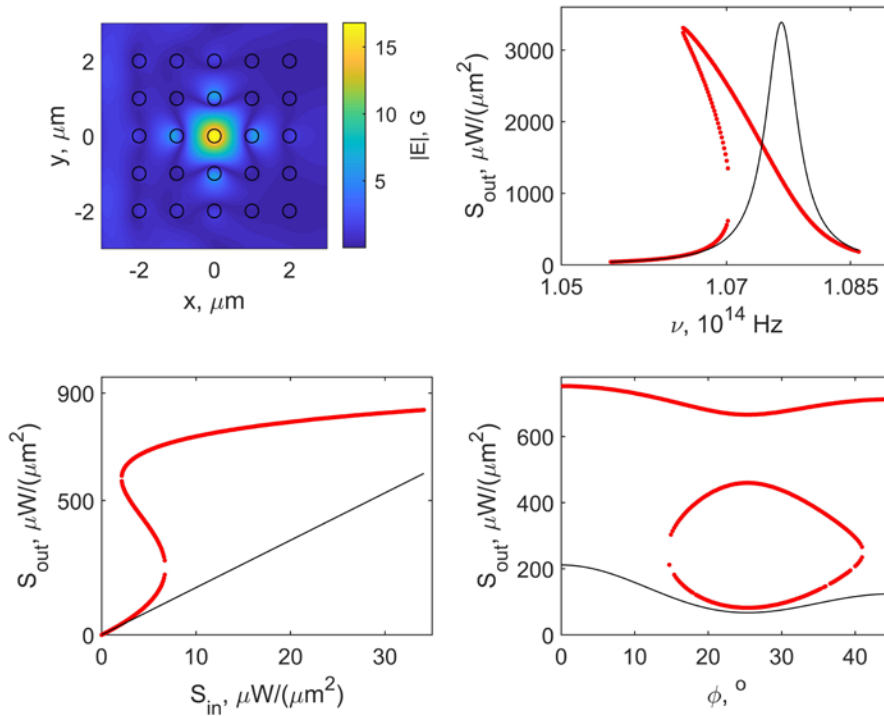


Рис.1.а) Резонансная мода на линейном дефекте в центре массива с $\epsilon=11,56$, $\epsilon_{def}=3$, радиус цилиндров $r=0.18 \mu\text{m}$, $\nu = 1,077 \cdot 10^{14} \text{ Hz}$; б) отклик по частоте для ФК из (а), черная кривая для дефекта с линейным по полю ϵ , красная для дефекта с постоянной Керра $n_2=1.81 \cdot 10^{-11} \text{ cm}^2/\text{W}^2$ ($S_{in}=12 \mu\text{W}$, $\phi=0$); в) и г) отклик по интенсивности внешнего проля ($\nu=1,068 \cdot 10^{14} \text{ Hz}$, $\phi=0$) и углу падения ($\nu=1,068 \cdot 10^{14} \text{ Hz}$, $S_{in}=12 \mu\text{W}$) соответственно, черным цветом – линейный случай, красным - $n_2=8.47 \cdot 10^{-11} \text{ cm}^2/\text{W}^2$.

Литература:

[1]. Yasumoto, K. Electromagnetic Theory and Applications for Photonic Crystals/ K. Yasumoto – New York: CRC Press, 2006. – 457 p.
 [2]. Joannopoulos J. Photonic Crystals: Molding the Flow of Light / J. Joannopoulos, S. Johnson, J. Winn, R. Meade – Princeton: Princeton University Press, 2008. – 305 p.

Секция «Химия и химические технологии»

Редокс-свойства моноядерных комплексов родия (I)

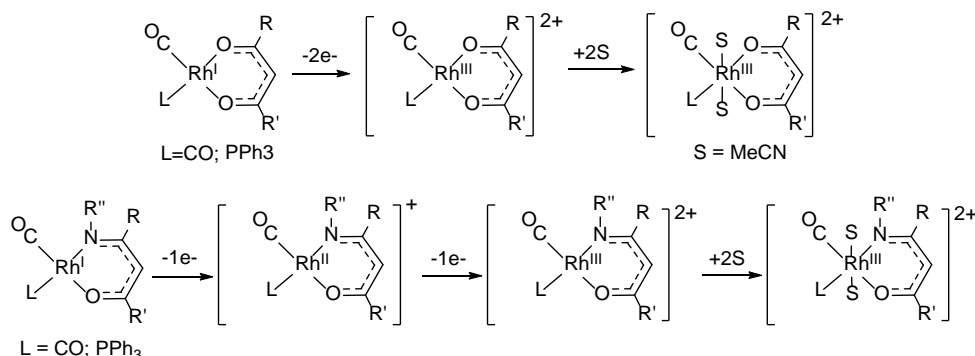
с *O,O*- и *O,N*-бидентатными лигандами

Неделина Татьяна Сергеевна

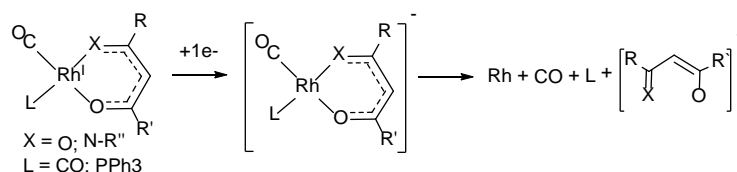
Институт химии и химической технологии ФИЦ КНЦ СО РАН

Интерес к координационной химии соединений родия связан с широкими возможностями их применения в различных каталитических процессах, особенностью которых является изменение степени окисления атома родия в активных интермедиатах [1-2]. В связи с этим много внимания уделяется электрохимии этих соединений. В литературе хорошо изучено окисление β -дикетонатных комплексов родия (I). Однако, практически нет данных по соединениям родия (I) с β -енаминными лигандами. Настоящая работа посвящена сравнительному изучению редокс-свойств моноядерных дикарбонильных и карбонилфосфиновых комплексов родия (I) с β -дикетонатными лигандами типа $(CO)(L)Rh(RC(O)CHC(O)R')$ [$L = CO$ или PPh_3 , $R = R' = Me$ (асас); $R = Me$, $R' = Ph$ (ба); $R = R' = Ph$ (dbm)]; и новых комплексов родия (I) с β -енаминным лигандом типа $(CO)(L)Rh(RC(N-R'')CHC(O)R')$ [$L = CO$ или PPh_3 , $R = Me$, $R' = R'' = Ph$] методами классической полярографии на ртутном капельном электроде, циклической вольтамперометрии на платиновом и стеклоуглеродном электродах.

Установлено, что окисление комплексов родия (I), содержащих β -дикетонатные лиганды, протекает с образованием соединений родия (III) в одну двухэлектронную стадию, а β -енаминных комплексов - в две одноэлектронные стадии по схеме:



Одноэлектронное восстановление изученных комплексов родия (I) приводит к образованию неустойчивого анион-радикала, который в дальнейшем распадается с образованием родия (0) и соответствующих анионов β -дикетона или β -енамина, а в случае карбонилфосфиновых соединений – и трифенилфосфина по схеме:



Работа выполнена в рамках государственного задания ИХХТ СО РАН № 0287-2021-0012 с использованием оборудования ЦКП ФИЦ КНЦ СО РАН. Благодарность соавторам работы: к.х.н., с.н.с. Верпекину В.В. (ИХХТ СО РАН); научный руководитель: д.х.н., г.н.с. Бурмакина Галина Вениаминовна (ИХХТ СО РАН)

Литература:

- [1] Tan N. S. L., Lowe A.B., *Angew. Chem. Int. Ed.*, V.59, PP.5008-5021 (2020).
[2] Rej S., Chatani N., *Angew. Chem. Int. Ed.*, V.58, PP.8304-8329 (2019).

О влиянии адсорбции электронейтральных реагентов на образование двойного электрического слоя твёрдых кислотных катализаторов

Голубков Виктор Александрович

Институт химии и химической технологии ФИЦ КНЦ СО РАН

Особенностью твёрдых кислот, часто используемых как ионообменные мембраны и катализаторы, является их способность диссоциировать в воде, образуя двойной электрический слой (ДЭС). Несмотря на то, что это достаточно хорошо известное явление (например, при гидратации твёрдой сульфокислоты Na^+ion происходит полная диссоциация сульфогрупп [1]), роль ДЭС в катализе твёрдыми кислотами рассматривается редко. Хотя все каталитически активные частицы H^+ могут находиться в диффузном слое, не следует игнорировать адсорбцию электронейтральных реагентов на поверхности, поскольку это приводит к изменениям в структуре ДЭС, в частности, выражающимся в изменении электрокинетического (ζ) потенциала. Адсорбаты могут как усиливать, так и ослаблять ζ -потенциал по различным причинам, зависящим от природы адсорбата и адсорбента. То есть, практически невозможно предугадать эффект адсорбции реагентов на каталитические свойства ДЭС. Целью настоящей работы является установление взаимосвязи адсорбции электронейтральных реагентов на твёрдой кислоте с изменением конфигурации ДЭС, а также с каталитическими свойствами системы на примере гидролиза сложных эфиров в воде на $\text{Cs}_{2,5}\text{H}_{0,5}\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$.

ζ -потенциал коллоида фосфовольфрамата в воде (-59,3 мВ) значительно усиливается в присутствии малополярного этилацетата (-83,9 мВ), но добавка полярного углевода лактозы на потенциал влияет слабо (-52,4 мВ). Это согласуется с фактом, что поверхность этой соли гидрофобна и не склонна сорбировать полярные соединения. Усиление, вероятно, связано с тем, что заряд диффузного слоя сохраняется, но из-за снижения диэлектрической проницаемости (ϵ) слоя Гельмгольца при замене воды на менее полярный этилацетат происходит уплотнение (концентрирование) диффузного слоя протонов.

Таблица 1. Литературные данные по гидролизу сложных эфиров в воде с кислотными катализаторами. [2]

Скорость реакции r $\text{ММОЛЬ}_{\text{эфир}} \cdot \text{МОЛЬ}_{\text{протон}}^{-1} \cdot \text{МИН}^{-1}$	Этилацетат	Циклогексилацетат	<i>орто</i> -толилацетат
$\text{H}_3\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$	70,4	5,7	5,6
$\text{Cs}_{2,5}\text{H}_{0,5}\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$	200,1	35,3	71,3

Литературные данные (табл. 1) показывают: твёрдая соль $\text{Cs}_{2,5}\text{H}_{0,5}\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$ в отношении гидролиза сложных эфиров проявляет более высокую активность, чем гомогенная кислота $\text{H}_3\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$, в расчёте на один протон, что особенно заметно в случае более крупных и гидрофобных молекул. Такие эфиры лучше сорбируются на гидрофобном катализаторе, что приводит к более выраженному вытеснению воды из слоя Гельмгольца и к более сильному концентрированию протонов возле поверхности из-за снижения ϵ этого слоя. Оба фактора резко повышают термодинамическую активность протонов возле поверхности и, соответственно, активность катализатора в гидролизе эфиров. Таким образом, показано, что адсорбция электронейтральных реагентов на поверхности твёрдых кислот способна влиять на их ДЭС и таким путём влиять на каталитическую активность.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИХХТ СО РАН (проект 121031500209-6). Автор выражает благодарность Карачарову А.А. за выполнение измерений ζ -потенциала, Тарабанько Н.В. за руководство в исследовании.

Литература:

- [1] Iwamoto R. et al. The Journal of Physical Chemistry B. V. 106. PP. 6973–6979 (2002).
[2] Kimura M., et al. Applied Catalysis A: General. V. 165, № 1–2. PP. 227–240 (1997).

Механические свойства композитного материала на основе СВМПЭ и добавки из нановолокон оксида алюминия

Куулар Айрана Ак-ооловна

Институт химии и химической технологии ФИЦ КНЦ СО РАН

В настоящей работе рассматривается новая диэлектрическая добавка нановолокна оксида алюминия, с высоким аспектным соотношением, а также её влияние на физико-механические свойства композита на основе сверхвысокомолекулярного полиэтилена (СВМПЭ) [1]. На рис. 1 представлена морфология композитных порошков СВМПЭ, с различной концентрацией нановолокон оксида алюминия 0,01%, 0,1% и 1% соответственно полученные при помощи сканирующей электронной микроскопии.

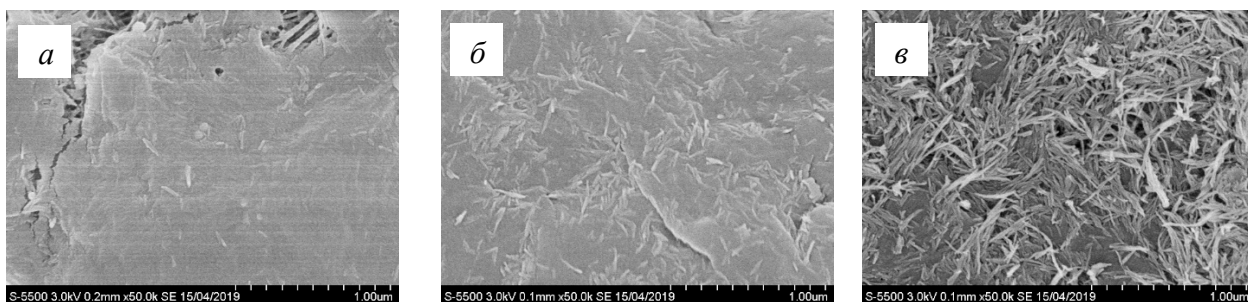


Рис. 1. СЭМ изображение композитного порошка СВМПЭ/нановолокна оксида алюминия с различной концентрацией добавки: 0,01 мас. % (а), 0,1 мас. % (б), 1 мас. % (в).

Распределение нановолокон оксида алюминия на гранулах СВМПЭ однородное. Концентрация нановолокон оксида алюминия 1 мас. % дает плотный слой нановолокон на поверхности гранул СВМПЭ. Влияние добавки модуль Юнга и прочность на растяжение приведены в табл. 1.

Таблица 1. Зависимость Модуля Юнга и предела прочности на растяжение нанокompозитов от концентрации нановолокон оксида алюминия.

Концентрация нановолокон Al_2O_3 , %	Без механоактивации		Механоактивация	
	Предел прочности σ , МПа	Модуль Юнга E , ГПа	Предел прочности σ , МПа	Модуль Юнга E , ГПа
0	22	0,34	23,70	0,36
0,01	23,83	0,36	25,40	0,38
0,1	25,34	0,34	27,02	0,37
1	22,75	0,34	30,92	0,43

Показано положительное влияние процесса механоактивации на физико-механические свойства нанокompозита СВМПЭ/нановолокна оксида алюминия. Увеличение концентрации добавки нановолокна оксида алюминия с 0,01 мас. % до 1 мас. % в сочетании с механоактивацией способствует равномерному увеличению прочности на растяжение и микротвердости нанокompозитов. Показано, что добавка нановолокон оксида алюминия в количестве 1 мас. % приводит к одновременному росту прочности на разрыв на ~ 42,5% относительно чистого СВМПЭ. Зависимость модуля Юнга нанокompозита от концентрации коррелирует с моделью наполнителя со слабой связью с матрицей.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №21-43-242902 р_Енисейская Сибирь "Исследование процесса компаундирования полиэфирных матриц нановолокнами оксида алюминия и их влияния на физико-механические свойства получаемых композитов"

Литература:

[1] Kuular A.A., Voronin A.S., Markevich I.A., Bermeshev T.V., Simunin M.M. Journal of Physics: Conference Series. T. 1679. С. 042100.

Разработка биокомпозитного удобрения на основе коры сосны, содержащего аммиачную селитру и его результаты полевых испытаний
Белаи Михаил Юрьевич
Институт химии и химической технологии ФИЦ КНЦ СО РАН

Кора различных пород деревьев является многотоннажным отходом современных деревообрабатывающих, целлюлозно-бумажных производств [1, 2], поскольку на ее долю приходится 13-21 мас.% от древесной биомассы. Традиционным направлением утилизации отходов древесной коры является получение органоминеральных удобрений для сельского хозяйства. Большой интерес представляет получение удобрений, способных к медленному выделению питательных элементов в почву и обладающих эффектом пролонгированного действия. Медленное выделение питательных элементов в почву повышает их биодоступность для растений, поэтому удобрения пролонгированного действия более эффективны по сравнению с традиционными водорастворимыми удобрениями. Получение азотсодержащих удобрений подобного действия представляет практический и научный интерес, так как азот необходим для достижения высокой урожайности и качества сельскохозяйственных культур. Отходы коры сосны по своему масштабу и распространенности на территории России являются наиболее доступным сырьем для получения новых видов удобрений.

Сырьем для получения удобрения служила воздушно-сухая кора сосны фракции 1-3 мм. Процесс получения удобрения включал две основные стадии: 1) приготовление пористой подложки из коры сосны; 2) нанесение на подложку аммиачной селитры. Для получения подложки на пилотной установке кору сосны обрабатывали 1,0 % водным раствором NaOH при следующих условиях: температура 93 ± 3 °С; продолжительность 1 ч; значение гидромодуля равно 10; перемешивание. Нанесение аммиачной селитры (марка «ч») проводили пропиткой подложки ее водным раствором. Объем пропиточного раствора аммиачной селитры ($4,1 \text{ см}^3$ на 1 г подложки) соответствовал влагоемкости подложки, которую определяли по ГОСТ 24160-80. На 1 кг подложки наносили 800,58 г аммиачной селитры. Это количество рассчитано так, чтобы удобрение содержало 20,0 мас.% азота.

В результате, было приготовлено 50 кг азотсодержащего удобрения следующего состава (мас. %): 42,83 подложка из коры сосны, 57,17 аммиачная селитра (20,0 мас.% азота). Насыпная плотность удобрения составляет $0,17 \text{ г/см}^3$. В результате проведения полевого опыта в 2020 году по выращиванию пшеницы сорта «Красноярская 12» выявлено ростостимулирующее действие азотсодержащего удобрения на основе коры сосны. Данное удобрение по эффективности не уступает аммиачной селитре - повышение урожайности составило 2,7 ц/га при внесении в паровое поле аммиачной селитры и 2,9 ц/га при внесении азотсодержащего удобрения на основе коры сосны. Применение азотсодержащего удобрения на основе коры сосны приводит к увеличению натуре зерна в сравнении с аммиачной селитрой и неудобренным фоном, что характеризует более высокую пищевую ценность выращенного зерна.

Работа выполнена в рамках государственного проекта с КрасНИИСХ № 0287-2019-009 с использованием оборудования Красноярского регионального центра коллективного пользования ФИЦ КНЦ СО РАН.

Выражаю благодарность научному руководителю д.х.н. доц. г.н.с. Чеснокову Н.В., к.т.н. с.н.с. Веприковой Е.В., вед. технологу Соболеву А.А., а также директору КрасНИИСХ к.с.-х.н. Липшину А.Г., д.с.-х.н. г.н.с. Романову В.Н., директору ИХХТ д.х.н. проф. РАН Таран О.П.

Литература:

- [1] Информационно-технический справочник по наилучшим доступным технологиям ИТС 1-2015: Производство целлюлозы, древесной массы, бумаги, картона. М: Бюро НДТ, 2015. 46 5 с.
- [2] Best Available Techniques (BAT) Reference Document for the Production of Pulp, Paper and Board. Industrial Emissions Directive 2010/75/EU (Integrated Pollution Prevention and Control). Luxembourg: Publications Office of the European Union, 2015. 906 p.

Разработка катализаторов на основе диоксида циркония для процессов межмолекулярного переноса водорода с целью получения гамма-валеролактона из леулиновой кислоты

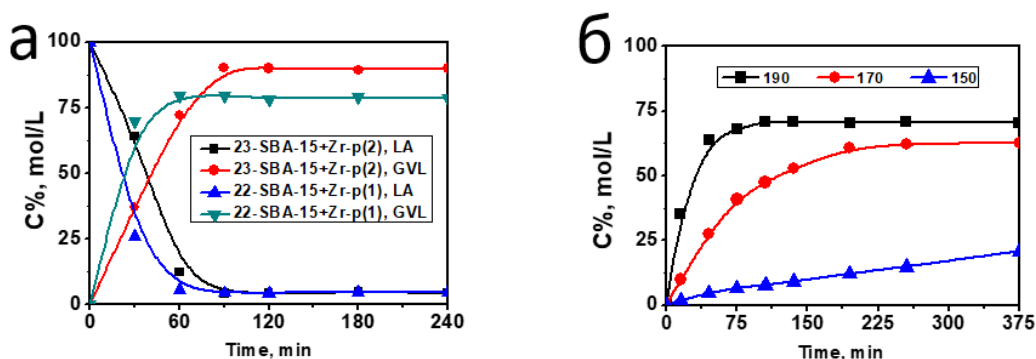
Сычев Валентин Владимирович

Институт химии и химической технологии ФИЦ КНЦ СО РАН

Гамма-валеролактон (ГВЛ) – платформенная молекула, обладающая огромным потенциалом. ГВЛ, может служить сырьем для производства биотоплив, биополимеров, находит свое применение, как в пищевой, так и фармацевтической отраслях промышленности, рассматривается как перспективный растворитель, число публикаций, посвященным методам его получения и возможными областями применения, неуклонно растет [1]. ГВЛ получают методами гидрирования леулиновой кислоты (ЛК) и алкилевулинатов. В процессах прямого гидрирования ЛК до ГВЛ (использование молекулярного водорода), гетерогенные металлические катализаторы на основе Ru, Pt, Pd привлекают к себе наибольшее внимание. Альтернативой прямому гидрированию ГВЛ является использование спиртов в качестве растворителя и источника водорода, данный процесс называют трансферным гидрированием или РПВ (реакция переноса водорода) - гидрированием. Одними из наиболее перспективных катализаторов переноса водорода являются катализаторы на основе Zr [2].

Синтезированы 2 серии катализаторов на основе диоксида циркония, закрепленного на мезопористом силикатном материале SBA-15 методами: послойного нанесения и соосаждения. Катализаторы Zr-SBA-15 исследованы методами адсорбции N₂, РФС, РФА, ПЭМ, ИКС, UV-vis, рН_{тнз}. Испытания, полученных серий катализаторов, в реакции межмолекулярного переноса водорода проводили в автоклаве, при автогенном давлении в диапазоне температур (130-190 °С). В качестве растворителя и источника водорода использовался изопропанол, варьировалось соотношение субстрат/катализатор, а также время процесса, в качестве субстрата использовали ЛК.

Максимальный выход ГВЛ (свыше 90 мол.%), достигнут при использовании катализаторов, полученных методом послойного нанесения. На катализаторах, полученных методом соосаждения максимальный выход ГВЛ составил 71.6 мол.% (Рис. 1).



Условия реакции: ЛК 0.44 г, кат. 0.64 г, 35 мл *i*-prOH,

а – катализаторы, полученные методом послойного нанесения, 190 °С,

б – катализатор 14-SBA-15+Zr+F-p полученный методом соосаждения.

Рис. 1. Кинетика РПВ гидрирования ЛК до ГВЛ в изопропаноле.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 20-03-00636).

Литература:

- [1] Alonso, D.M., Wettstein S.G., Dumesic, J.A. Green Chem. 15 (2013) 584.
- [2] Osatiashtiani, A., Lee A.F., Wilson, K. J Chem Tec & Biotec. 92 (2017) 1125.

Синтез и изучение карбонил(β -дикетонат)изоцианидных комплексов родия (I)

Патрушева Анастасия Андреевна

Институт химии и химической технологии ФИЦ КНЦ СО РАН

Изоцианидные комплексы переходных металлов находят широкое применение в химии в качестве прекурсоров функциональных материалов и катализаторов [1], полимеров с ценными техническими характеристиками [2, 3, 4]. Однако, сведения об β -дикетонатных комплексах родия (I) с изоцианидными лигандами ограничены только одной публикацией по синтезу и изучению комплексов типа $\text{Rh}(\text{acac})(\text{CN-R})_2$ и $\text{Rh}(\text{acac})(\text{CN-R})(\text{PPh}_3)$ [5]. Единственный пример превращения координированных изоцианидов в гетероциклические карбены изучен на примере комплекса родия(III) [6]. Настоящая работа посвящена разработке методики синтеза и исследованию свойств новых изоцианидных комплексов карбонил(β -дикетонатов) родия (I), а также изучению возможности получения на их основе ациклических диаминокарбеновых комплексов (Рисунок 1).

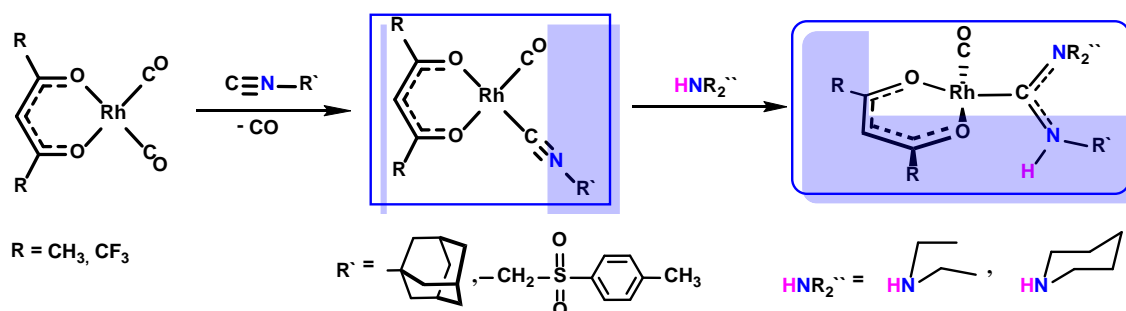


Рис. 1. Схема образования карбонил(β -дикетонат)изоцианидных комплексов родия (I) и соответствующих ациклических диаминокарбеновых соединений.

В результате проведенного исследования показана возможность введения изоцианидных лигандов $\text{C}\equiv\text{N-R}$ ($\text{R} = 1\text{-Ad}, \text{CH}_2\text{Tos}$) в координационное окружение атома родия (I) путем замещения карбонильных групп в известных комплексах $\text{Rh}(\text{acac})(\text{CO})_2$ и $\text{Rh}(\text{hfac})(\text{CO})_2$. Строение новых соединений предложено на основании данных ИК и ЯМР спектров. Установлено, что взаимодействие изоцианидных лигандов с азот-содержащими нуклеофилами в координационной сфере атома родия(I) приводит к образованию диаминокарбеновой группировки путем присоединения нуклеофила к электрофильному атому углерода лиганда $\text{C}\equiv\text{N-R}'$. Эффективность протекания данного процесса определяется заместителями R в β -дикетонатных лигандах при атоме родия, а также функциональными группами R' в координированных изоцианидах $\text{C}\equiv\text{N-R}'$.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИХХТ СО РАН № 0287-2021-0012 с использованием оборудования ЦКП ФИЦ КНЦ СО РАН. Благодарность соавторам работы: к.т.н., с.н.с. Кондрасенко А.А. (ИХХТ СО РАН), к.х.н., с.н.с. Верпекину В.В. (ИХХТ СО РАН); научные руководители: к.х.н., н.с. Чудин Олег Сергеевич (ИХХТ СО РАН), г.н.с., д.х.н. Рубайло Анатолий Иосифович (СФУ)

Литература:

- [1] Peris E., Chem. Rev., V. 118 (19), PP. 9988-10031 (2018).
- [2] Yamada T., Sugimoto M., Macromolecules, V. 43, PP. 3999-4002 (2010).
- [3] Boyarskiy V., Bokach N., et al., Chem. Rev., V. 115 (7), PP. 2698-2779 (2015).
- [4] Lo L. T.-L., Ng C., Feng H., et al., Organometallics, V. 28, PP. 3597-3600 (2009).
- [5] Kaneshima, T., Kawakami, K., Tanaka, T., Inorg. Chim. Acta, V. 15, PP. 161-166 (1975).
- [6] Motoyama Y., Shimozono K., et al., Organometallics, V. 21, PP. 1684 - 1696 (2002).

Исследование диффузионных свойств стеклокристаллических мембранных материалов на основе узких фракций ценосфер

Роговенко Елена Сергеевна

Институт химии и химической технологии ФИЦ КНЦ СО РАН

Гелий является ключевым компонентом современных высокотехнологичных и наукоемких отраслей промышленности, для которых получение высокочистого гелия (99.9950 об.%) базируется на его выделении из природного газа энергоемким криогенным способом [1]. Альтернативным способом получения гелия высокой чистоты является энергосберегающая мембранная технология, для успешной реализации которой необходимы материалы с высокой гелиевой проницаемостью и селективностью [2]. Перспективными мембранными материалами для получения высокочистого гелия являются ценосферы – полые стеклокристаллические алюмосиликатные микросферы, которые образуются в процессе промышленного пылевидного сжигания угля. Исследование диффузионных свойств стеклокристаллических материалов выполнено в отношении He и Ne на морфологически однородных узких фракциях немагнитных неперфорированных ценосфер в широком диапазоне изменения макрокомпонентного и фазового составов, с преобладающим содержанием глобул кольцевого или сетчатого строения. Установлено, что коэффициенты проницаемости стеклофазы ценосфер прямо пропорциональны содержанию оксида-стеклообразователя SiO₂ и существенно превышают аналогичные значения для силикатных стекол. Лучшей проницаемостью обладают узкие фракции ценосфер с глобулами сетчатого строения. Для них коэффициенты проницаемости превышают аналогичные значения для ценосфер кольцевого строения близкого состава, например, с 10% ионов-модификаторов, в случае гелия в 2 раза, а неона – в 24 раза при 280°C. В сравнении с силикатным стеклом с близким значением SiO₂ = 92 мол.% наблюдаемое превышение коэффициентов проницаемости Ne составляет около одного порядка [3, 4]. В сравнении с кварцевым стеклом, в котором ионы-модификаторы отсутствуют, значения гелиевой проницаемости практически совпадают, а для неона превышают в 12 раз [3]. Увеличение проницаемости связано с фрагментарным строением стеклокристаллической оболочки ценосфер, а также с расширенной структурой стеклофазы, сформированной благодаря кристаллизации дефектных фаз муллита, кристобалита и анортита, которая облегчает процесс диффузии газов. Значения селективности $\alpha(He/Ne)$ находятся на высоком уровне, составляя при 280°C для ценосфер кольцевого строения 74–324, сетчатого – 22–45. Сочетание высокой селективности и проницаемости определяет перспективность использования стеклокристаллических мембранных материалов на основе ценосфер в мембранной технологии получения и очистки гелия.

Исследование выполнено в рамках государственного задания ИХХТ СО РАН (проект 121031500198-3).

Автор выражает благодарность д.х.н., проф. Аншицу А. Г. и к.х.н. Фоменко Е. В. за помощь в обсуждении и интерпретации экспериментальных данных.

Литература:

- [1] Молчанов С. А. Особенности выделения гелия из природного газа. М.: Недра, 2011. 285 с.
- [2] Baker R. W. Membrane technology and applications. UK: Wiley & Sons Ltd, 2004.
- [3] Altomose V.O., Appl. Phys., V. 32, PP. 1309-1316 (1961).
- [4] Tsugawa R.T., Moen I., Roberts P.E., Souers P.C., Appl. Phys., V. 47, PP. 1987-1993 (1976).

Моделирование превращений глюкозы в водной среде

Михлина-Утебаева Анна Васильевна

Институт химии и химической технологии ФИЦ КНЦ СО РАН

В работе представлено теоретическое изучение равновесной молекулярной структуры и относительной энергии молекул D-глюкозы в газовой и в водной среде: открытой формы D-глюкозы, циклических α -D-глюкозапиранозы и β -D-глюкозапиранозы, а также её гидратных форм. Эта работа является начальным этапом в изучении реакций окисления глюкозы на Au/Pd наночастицах [1]. Целью нашей работы было идентифицировать наиболее стабильные структуры, а так же формы способные закрепиться на металлическом носителе.

Все расчеты проводились на стационарном компьютере с помощью программы MOPAC2016 [2] полуэмпирическими методами AM1 [3] и PM6 [4]. Сольватационная модель COSMO использовалась для учета эффектов растворителя – воды ($\epsilon=78,4$) [5].

Расчеты показали, что в газовой фазе более стабильна α -D-глюкозапираноза, а в водной среде стабильнее становится β -D-глюкозапираноза. Открытая форма D-глюкозы стабильнее в водной среде, чем в газовой фазе.

Сравнение результатов наших расчетов длин связей полуэмпирическими методами AM1 и PM6 с методом BLYP/DZVP и экспериментальными данными, показало, что для открытой формы D-глюкозы, α -D-глюкозапиранозы и β -D-глюкозапиранозы различие не значительное и составляет не более 0,1 Å, что говорит о применимости методов AM1 и PM6 для экспресс-оценки структуры глюкозных форм.

Расчет гидратных форм показывает, что в щелочной среде D-глюкоза более устойчива в анионной форме. Три рассмотренных изомера, отличающихся локализацией отрицательного заряда, близки по энергии в пределах 8 ккал/моль. Нейтральная гидратная форма менее устойчива, чем анионные формы на 20-45 ккал/моль.

Выполненные расчеты позволяют выбрать наиболее энергетически выгодные структуры для дальнейших расчетов методом функционала плотности адсорбции и окисления глюкозы на металлическом Au/Pd нанокластере.

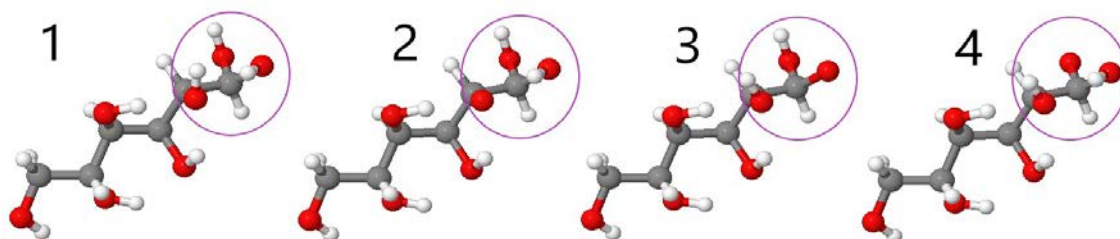


Рис. 1. Оптимизированные структуры гидратных форм D-глюкозы:
1 – нейтральная форма; 2,3,4 – анионные формы.

Литература:

- [1] Zhang H., Toshima N., Catal. Sci. Tech. V.3, PP. 268-278 (2013).
- [2] MOPAC2016, Version: 21.013L, James J. P. Stewart, Stewart Computational Chemistry, web: <http://openmopac.net>.
- [3] Dewar M.J.S., Zoebisch E.G., Healy E.F., Stewart J.J.P., J. Am. Chem. Soc. V.107, PP. 3902-3909 (1985).
- [4] Stewart J.J.P., J. Mol. Modeling. V.13, PP. 1173-1213 (2007).
- [5] Klamt A., Schüümann G., J. Chem. Soc. Perkin Transactions 2, PP. 799-805 (1993).

Синтез, особенности и применение высококонцентрированных гидрозолей серебра

Воробьев Сергей Александрович

Институт химии и химической технологии ФИЦ КНЦ СО РАН

Наночастицы (НЧ) серебра используются в таких областях, как катализ, биомедицина, 2D и 3D-печать, оптоэлектроника, нанофлюидика, аналитика и др. Наиболее распространенный «мокрый» метод синтеза позволяет приготовить лишь разбавленные растворы наночастиц с выходом металла до 1 г/л, что влечет за собой обработку и переработку или утилизацию больших объемов отработанных растворов. Уникальным исключением является простой метод синтеза гидрозолей серебра с концентрацией до 60 г/л, предложенный ученым Кэри Ли, где нитрат серебра восстанавливают водным раствором цитратного комплекса железа (II). Несмотря на продолжительную историю и уникальность, эта система осталась практически неизученной. В литературе отсутствуют исчерпывающие данные о влиянии условий реакции на размер, состав, морфологию и стабильность наночастиц.

Нами была собрана установка для воспроизводимых условий синтеза (температура, скорость перемешивания, скорость и объем инъекции). С использованием установки было изучено взаимное влияние различных реакционных факторов. В результате чего были найдены условия для масштабного синтеза высокостабильных наночастиц с заданными параметрами и настраиваемым размером от 5 до 80 нм. Оптимизация системы позволила почти в два раза снизить молярное отношение $\text{AgNO}_3 : \text{FeSO}_4 : \text{Na}_3\text{Cit}$ с 1.0 : 1.6 : 3.2 (в классическом подходе) до 1.0 : 1.0 : 1.5. Полученные в таких условиях гидрозолы были заведомо чище и содержали мономодальные частицы серебра с размером 4.99 ± 0.06 нм.

Было установлено, что присутствующие в гидрозоле загрязнения имеют самое сильное влияние на агрегативную стабильность и «растворимость» частиц Кери Ли. Были найдены условия и методы, позволяющие максимально «глубоко» очистить золи, не вызывая деструкции и агрегации частиц. Метод заключается в осаждении гидрозолей растворами Na_3Cit (0.3 М), фильтровании осадка через фильтр PTFE и далее редиспергировании частиц в деионизованной воде (операцию повторяли 3-4 раза).

На основе полученных в оптимальных условиях монодисперсных и «глубоко» очищенных частиц путем их пептизации в минимальном объеме деионизованной воды были получены гидрозолы серебра с концентрацией до 2100 г/л. По данным UV-VIS, DLS, XPS и ТЕМ агрегация частиц в столь концентрированных растворах не наблюдалась по крайней мере на протяжении 3 недель. Все попытки разделения полученных монодисперсных золей на фракции с использованием центрифугирования, электролитической коагуляции и электрофореза приводили к агрегации и деградации однородных по своим свойствам частиц.

Очень высокая концентрация и стабильность полученных гидрозолей, вероятно, связана с низкой остаточной концентрацией ионов электролита. Следует отметить, что плотные гидрозолы SiO_2 , производились с 1950-х годов на основании работ P.G. Bird, который предложил удалять ионы щелочных металлов и других электролитов ионным обменом или сорбцией «насколько это возможно». Мы полагаем, что стабильность данных коллоидов может заключаться в отталкивающем эффекте гидрофильных сил, возникающих между слоями воды на поверхности наночастиц, которые все еще плохо изучены.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант № 18-73-00142 с использованием оборудования Красноярского регионального центра коллективного пользования ФИЦ КНЦ СО РАН. Выражаю благодарность соавторам работы: Лихацкому М.Н., Казаченко А.С. и Михлину Ю.Л.

Гидрирование древесины и этаноллигнина пихты водородом в присутствии катализатора NiCuMo/SiO₂

Мирошникова Ангелина Викторовна

Институт химии и химической технологии ФИЦ КНЦ СО РАН

Каталитическое восстановительное гидрирование является перспективным методом переработки лигноцеллюлозной биомассы, который позволяет осуществить ее фракционирование на основные компоненты (целлюлоза, гемицеллюлозы, лигнин) с получением низкомолекулярных продуктов из лигнина [1].

В данной работе изучено влияние бифункционального катализатора NiCuMo/SiO₂ на выход и состав жидких, твердых и газообразных продуктов в процессе гидрирования древесины и этаноллигнина пихты.

Показано что с использованием катализатора в процессе гидрирования древесины пихты, выходы жидких и газообразных продуктов увеличились и составили 42,0 мас.% и 11,8 мас.%, соответственно, а выход твердого продукта уменьшился и составил 39,5 мас.%. Этаноллигнин пихты практически полностью превращается в жидкие и газообразные продукты. По сравнению с некаталитическим экспериментом, выход жидких продуктов возрастает с 75,0 до 88,0 мас.%. Одновременно снижается выход твердого продукта с 14 до 0,4 мас.% (рис.1).

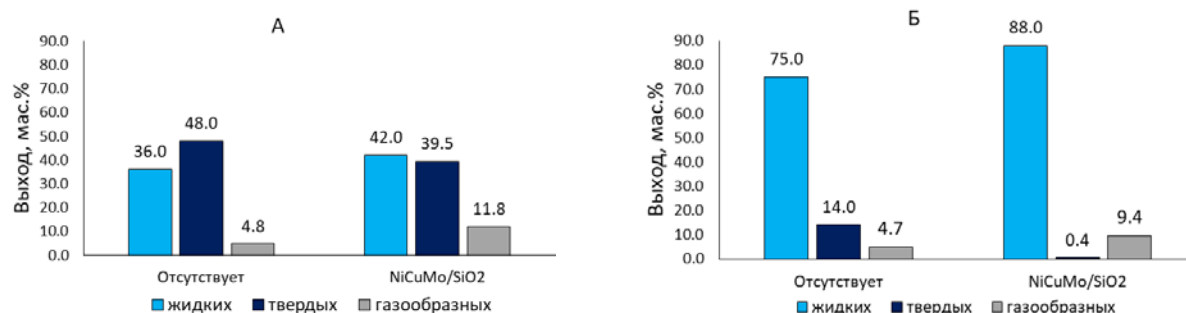


Рис.1 Результаты гидрирования А) древесины пихты, Б) этаноллигнина в сверхкритическом этаноле при 250 °С

По данным ГХ-МС основные продукты гидрирования древесины и этаноллигнина представлены гваяколом и его алкил производными, среди которых преобладали 4-пропанолгваякол и 4-пропилгваякол. Бифункциональный катализатор NiCuMo/SiO₂ увеличивал выход алкильных производных метоксифенолов для этаноллигнина пихты до 9,2 мас.%, в то время как для древесины пихты суммарный выход мономеров и димеров в присутствии катализатора увеличивался до 37,8 мас.%. Увеличение выхода мономеров в присутствии бифункционального катализатора происходит в основном за счет разрыва β-O-4 связей в макромолекулах лигнина на кислотных центрах Льюиса и последующим восстановлением промежуточных соединений водородом на металлических центрах катализатора.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № № 21-13-00250. Выражаю благодарность соавторам данной работы: С.В. Барышникову, А.С. Казаченко, Ю.Н. Маляру, В.А Яковлеву, А.М. Скрипникову, О.Ю. Фетисовой, О.П. Таран, а также научному руководителю д.х.н., проф. Б.Н. Кузнецову.

Литература:

[1] Kuznetsov B.N., Sharypov V.I., Baryshnikov S.V., Miroshnikova A.V., et. al., Catalysis Today (2020).

Получения и свойства тринитрорезорцината свинца

Капаева Светлана Николаевна

Институт химии и химической технологии ФИЦ КНЦ СО РАН

Тринитрорезорцинат свинца (ТНРС) ($C_6H(NO_2)_3O_2Pb \cdot H_2O$) – это средняя свинцовая соль стифниновой кислоты, относится к классу инициирующих взрывчатых веществ. [1].

Чистый ТНРС представляет собой кристаллическое вещество от золотисто-желтого до темно-красного цвета. Не гигроскопичен, малорастворим в воде и органических растворителях, минеральные кислоты и растворы едких щелочей разлагают ТНРС до стифниновой кислоты и соответствующих соединений свинца. С металлами не взаимодействует. ТНРС в обычных условиях снаряжения не способен вызвать детонацию бризантных взрывчатых веществ (ВВ), т.е. является псевдоинициирующим ВВ. Он чувствителен ко всем видам простого начального импульса. ТНРС способен электризоваться, т.е. чувствителен к статическому электричеству, что определяет некоторые особенности его получения.

Способ получения ТНРС описан следующим уравнением реакции (1):



Получение ТНРС имеет свои особенности. Непосредственное получение ТНРС из стифниновой кислоты и нитрата свинца практически невозможно по двум причинам:

1. плохая растворимость стифниновой кислоты в воде;
2. разложение ТНРС, выделяющейся в результате реакции HNO_3 .

В связи с этим проводится предварительный перевод стифниновой кислоты в хорошо растворимую магниевую соль. Затем образующаяся соль взаимодействует с нитратом свинца с образованием ТНРС и нитрата магния.

Применяется в капсулах-детонаторах, некорродирующих ударных составах, в составах накольного действия, в капсульных составах электрозапалов.

Преимущество этого метода заключается в том, что процесс полностью автоматизирован, аппаратчики не присутствуют при ведении технологического процесса.

Получение тринитрорезорцината свинца остается актуальным в наше время т.к. в настоящее время используется в средствах инициирования.

Проект выполнен в ИХТ СибГУ им. М. Ф. Решетнёва.

Литература:

[1] Технологический регламент.- АО “НМЗ ”Искра”, 150с.– Текст: непосредственный.

[2] Багал Л.И. Химия и технология инициирующих взрывчатых веществ, М., Машиностроение,1975,456 с.– Текст : непосредственный.

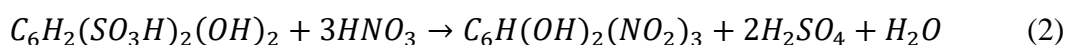
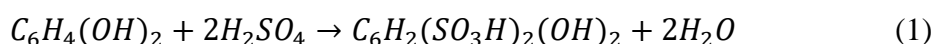
Методы получения и свойства 2,4,6-тринитрорезорцина

Зосько Николай Андреевич

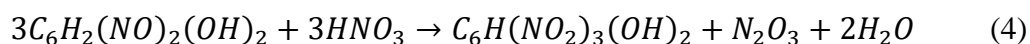
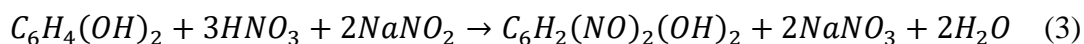
Институт химии и химической технологии ФИЦ КНЦ СО РАН

2,4,6 – тринитрорезорцин (стифниновая кислота) является мощным бризантным взрывчатым веществом, мощность которого сравнима с тротилом или превосходит его за счёт химического строения. Проявляет сильные кислотные свойства, сравнимые с тринитрофенолом, способен образовывать соли с тяжёлыми металлами с образованием высокочувствительных взрывчатых веществ. Важнейшее сырьё для получения тринитрорезорцината свинца[1].

В России применяются два промышленных способа получения стифниновой кислоты. Первый способ состоит в предварительном сульфировании резорцина с последующим нитрованием его кислотной смесью (87% HNO₃ и 7,5% H₂SO₄). Метод получения может быть описан следующими уравнениями реакции (1 и 2) [2].



Второй метод получения состоит в нитрозировании резорцина с последующим окислительным нитрованием [3]. Второй метод получения стифниновой кислоты описывается уравнениями 3 и 4:



Наиболее экономически выгодным и безопасным вариантом промышленного получения стифниновой кислоты является метод получения через динитрозосоединение с последующим окислительным нитрованием.

Дальнейшее развитие этого метода предусматривает разработку технологии и оборудования, полностью исключающих присутствие человека при ведении технологического процесса.

Проект выполнен в ИХТ СибГУ им. М. Ф. Решетнёва

Литература:

- [1] Орлова Е. Ю. Химия и технология бризантных взрывчатых веществ / Е. Ю. Орлова. – Ленинград: «Химия». - 1973. – 688с. – Текст: непосредственный.
- [2] Багал Л. И. Химия и технология инициирующих взрывчатых веществ / Л. И. Багал. – Москва: «Машиностроение». – 1975. – 456с. – Текст: непосредственный.
- [3] Регламент технических процессов получения стифниновой кислоты: (ТР 07511608-106-2018): официальное издание: введён в действие 24.05.2018. - Бийск: ФКП «Бийский олеумный завод», 2018. - 193с. – Текст: непосредственный.

Восстановительное фракционирование Ru-содержащими катализаторами механически активированных образцов коры сосны после экстракционных процессов

Ионин Владислав Александрович

Институт химии и химической технологии ФИЦ КНЦ СО РАН

Известно, что механическая активация растительной биомассы приводит к переводу части основных компонентов из связанного состояния в свободное [1, 2], однако существующие данные не дают представления о влиянии применяемых методов активации на химический состав коры сосны, что является потенциалом для создания интегрированной технологии экстракционно-каталитических методов переработки растительного сырья, широко распространенного в Сибирском округе.

В ходе работы проводилась экстракционная обработка измельченных, механически активированных образцов коры сосны гексаном, этанолом, водными растворами кислот с последующей оптимизацией наиболее ценных выделяемых при экстракции веществ [3 – 5]. Выделенные вещества были проанализированы методами ГХ, ВЭЖХ, ГПХ, ИК. Для остатков образцов коры после экстракционной обработки проводился РФЭС, ИК анализ для оценки влияния способов механической активации и выделения экстрактивных веществ на степень кристалличности исходной коры сосны, а также потенциала для полной переработки растительной биомассы. Выявлено, что наиболее предпочтительным методом активации для выделения экстрактивных веществ из коры сосны является метод взрывного автогидролиза.

Параллельно, на основе УМ Сибунит 4 производилась серия экспериментов с катализаторами, различной кислотности, размерами гранул и содержанию активного компонента. Катализаторы исследованы методами ПЭМ, адсорбции N₂, РФЭС и рНтнз. Установлено, что по мере повышения температуры окислительной обработки носителя, происходит образование поверхностных кислородсодержащих функциональных групп, ответственных за улучшенное распределение Ru. Наличие кислородсодержащих поверхностных групп подтверждается методами РФЭС, рНтнз.

Изучено влияние бифункциональных катализаторов, содержащих нанодисперсные частицы рутения (1 и 3 мас.%) на окисленном при 450 °С мезопористом графитоподобном углеродном носителе Сибунит, на выход и состав продуктов в процессах гидрирования коры сосны в среде субкритического этанола при температуре 225 °С. При этом отмечается положительное влияние наибольшего содержания частиц Ru в катализаторе.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и ККФН (проект No 19-43-240011). В работе использовано оборудование Красноярского регионального центра коллективного пользования ФИЦ КНЦ СО РАН. Благодарность соавторам работы: Веприковой Е.В., Скрипникову А.М., Казаченко А.С., Белаш М.Ю., Таран О.П. Научный руководитель: Таран О.П.

Литература:

- [1] Дейнеко И.П., Д.И.В., Белов Л.П., Исследование химического состава коры сосны Химия растительного сырья, 2007 1: р. 19-24.
- [2] Кузнецов Б.Н., Л.В.А., Кузнецова С.А. , Химические продукты из древесной коры. 2012
- [3] Krasutsky, P., Birch Bark Research and Development. Natural product reports, 2007 23: р. 919-42.
- [4] Tai, K., et al., Effect of β -sitosterol on the curcumin-loaded liposomes: Vesicle characteristics, physicochemical stability, in vitro release and bioavailability. Food Chemistry, 2019 293: р. 92-102.
- [5] Wusigale, L. Liang, and Y. Luo, Casein and pectin: Structures, interactions, and applications. Trends in Food Science & Technology, 2020.

Растворение металлов платиновой группы в автоклавных условиях

Акименко Алексей Андреевич

Институт химии и химической технологии ФИЦ КНЦ СО РАН

Перевод в раствор наиболее инертных металлов платиновой группы – родия и иридия, является актуальной задачей для областей прикладной, аналитической химии и металлургии [1, 2]. Для растворения иридия и родия обычно используют способ спекания с пероксидом бария или натрия с последующим выщелачиванием в соляной кислоте. К сожалению, данный процесс характеризуются большим количеством стадий, трудоемкостью и не всегда обеспечивают требуемую чистоту продуктов. Гидрометаллургические методы одностадийного перевода в раствор металлов платиновой группы в автоклавах перспективны и обладают рядом преимуществ. Они экологически безопасны, требуют меньших временных затрат и не приводят к потерям и загрязнению примесями ценных металлов.

Цель настоящей работы заключалась в исследовании влияния температуры, времени процесса, размеров частиц, окислителей на процессы растворения металлических родия и иридия.

Для опытов по растворению металлов использовали иридий различной дисперсности в виде черни, аффинированный иридий, родиевую пластинку. Растворение металлов исследовали в среде соляной кислоты, в качестве окислителя использовали добавки диоксида марганца и пероксида водорода. Исследования проводили в диапазоне температур 170 – 210°C в лабораторных кварцевых и фторопластовых автоклавах [3]. Установлено, что растворение иридиевой черни ($S_p \sim 5 \text{ м}^2/\text{г}$) в растворах 6М соляной кислоты с добавками MnO_2 при температурах 170°C и 180°C не превышает 20%, а при 195°C показатели растворения черни приближаются к количественным. При изучении зависимости скорости растворения иридиевой черни в широком диапазоне размеров частиц было установлено, что скорость растворения имеет обратно пропорциональную зависимость от крупности материала.

Изучение процессов растворения аффинированного иридия проводили при температурах выше 200°C в 6М соляной кислоте с добавками пероксида водорода. Обнаружено, что в течение 50 часов в раствор переходит при 200°C около 20% иридия, а при 210°C – 80%.

Растворение металлической родиевой пластинки в растворах соляной кислоты, при использовании в качестве окислителя кислорода при 200°C практически не происходит, а при увеличении температуры до 210°C протекает количественно за 10 часов.

Полученные результаты могут быть использованы для аналитического определения платиновых металлов, для получения комплексных соединений с высокой степенью чистоты, в аффинаже благородных металлов.

Работа выполнена в рамках государственного задания Института химии и химической технологии СО РАН (проект 121031500206-5) с использованием оборудования Красноярского регионального центра коллективного пользования ФИЦ КНЦ СО РАН. Выражаю благодарность научному руководителю в.н.с. Белоусову О.В. и соавтору н.с. Борисову Р.В.

Литература:

- [1] Hodgson A. P. J., Jarvis, K. E., Grimes, R. W. et al., J of Radioanalytical and Nuclear Chem, V.307, PP. 2181-2186 (2016).
- [2] Карпов Ю. А., Орлова В. А., Зав.лаб. Диагн. матер, Т. 73, №1. С. 4–11. (2007).
- [3] Belousova. N.V., Belousov O.V., Borisov R.V. et al., Russ. J. Appl. Chem, V.92, PP 1102-1105 (2019).

Изучение динамики взаимодействия пузырька воздуха с поверхностями сульфидных минералов и модельных субстратов с применением сверхскоростной съёмки

Карачаров Антон Александрович

Институт химии и химической технологии ФИЦ КНЦ СО РАН

Флотационное обогащение является одним из наиболее крупнотоннажных промышленных процессов, основанным на контрастности свойств поверхности минералов. Для увеличения флотуемости сульфидных минералов используют различные собиратели, чаще всего ксантогенаты и дитиофосфаты. Ключевым процессом в пенной флотации является взаимодействие пузырька воздуха с частицей минерала. Между тем, остаётся не выясненным вопрос, каким образом адсорбция коллекторов влияет на данный процесс; не ясна роль в этом процессе наноразмерных поверхностных газовых структур (нанопузырьков). Наиболее подходящим методом изучения быстропротекающих процессов является метод сверхскоростной съёмки. Однако, большинство работ с использованием данного метода были выполнены с использованием в качестве субстратов модельных объектов (высокоориентированный пиролитический графит (ВОПГ), SiO_2 , слюда и др.).

Цель работы - изучение с помощью сверхскоростной съёмки особенностей взаимодействия всплывающего пузырька воздуха с природными (галенит, сфалерит, пирит) и модельными (ВОПГ, SiO_2 , золотая фольга (Au)) субстратами до и после их модификации растворами *n*-бутилксантогената калия и эмульсией дибутилксантогена.

Взаимодействие погруженной поверхности с пузырьком воздуха было изучено с использованием высокоскоростной видеокамеры CP70-1-M-1000 (Optronis, Германия) со скоростью 4087 кадров/с и измерений краевых углов на оптическом анализаторе ОСА 15ЕС (DataPhysics, Германия). В экспериментах определяли время закрепления пузырька к поверхностям субстратов, скорость роста диаметра границы раздела газ (воздух)-твёрдое тело (г.-т.), анализировали роль предварительной сорбции *n*-бутилксантогената калия (KBuX) и дибутилксантегената (Bu_2X_2) на динамику данных процессов.

Согласно полученным данным, время прилипания миллиметрового пузырька воздуха к немодифицированным поверхностям составляло 20-150 мс для гидрофобных ВОПГ, пирита, золота, а на галените (PbS) и сфалерите (ZnS) прилипания не происходило.

После обработки 0,1 мМ р-ром KBuX время сокращалось до 2-3 мс на ВОПГ и галените, 20 мс на золоте. При повышении концентрации KBuX увеличивалось на порядок время прилипания для ВОПГ, пирита, PbS, но продолжало уменьшаться для Au (<1 мс). Действие 1 мМ эмульсии Bu_2X_2 вызывало практически мгновенное, прилипание пузырька к поверхности пирита, PbS и Au.

В случае исходного ZnS, после шлифовки, а также после действия KBuX, или активированного ZnS, не обработанного KBuX не наблюдали разрыва плёнки воды. Только после обработки активированного ZnS растворами KBuX или Bu_2X_2 происходит разрыв плёнки воды за 40-150 мс. Отметим, что аналогично ведет себя синтезированная пленка ZnS, то есть примесь железа или иные особенности состава и строения минерала не являются причиной гидрофильности. Предполагаем, что такое поведение объясняется особенностями электронной структуры поверхностного слоя ZnS, возможно, отрицательным зарядом металлдефицитной поверхности, образующейся при окислении.

Для большинства гидрофобизированных собирателем минералов после разрыва пленки воды происходит медленное, в течение десятков секунд, увеличение площади границы минерал – пузырек воздуха за счет удаления воды. Существование медленного «дренажа», вероятно, связано с диффузией газов в пузырек воздуха, в том числе из соседних поверхностных газовых структур, и, видимо, является одним из признаков их присутствия.

Влияние массопереноса и кислотного предгидролиза на процесс каталитического окисления костры льна в ванилин и целлюлозу

Вигуль Дмитрий Олегович

Институт химии и химической технологии ФИЦ КНЦ СО РАН

Костра льна - многотоннажный отход производства с высоким содержанием лигнина (18-28%). Наиболее перспективным методом для получения ванилина и серенового альдегида является каталитическое окисление лигнинов молекулярным кислородом [1]. Цель настоящей работы заключается в изучении влияния интенсивности массопереноса на процесс каталитического окисления костры льна кислородом в ароматические альдегиды и целлюлозу.

Полученные зависимости поглощения кислорода от времени при окислении исходной костры имеют ступенчатый плохо воспроизводимый характер. При окислении предгидролизованного сырья поглощение кислорода становится более равномерным, увеличивается скорость и количество поглощенного кислорода (рис. 1 А). Скорость поглощения кислорода возрастает при увеличении скорости перемешивания (рис. 1 В), и не зависит от объема реакционной массы в интервале 200-350 мл (рис. 1 С).

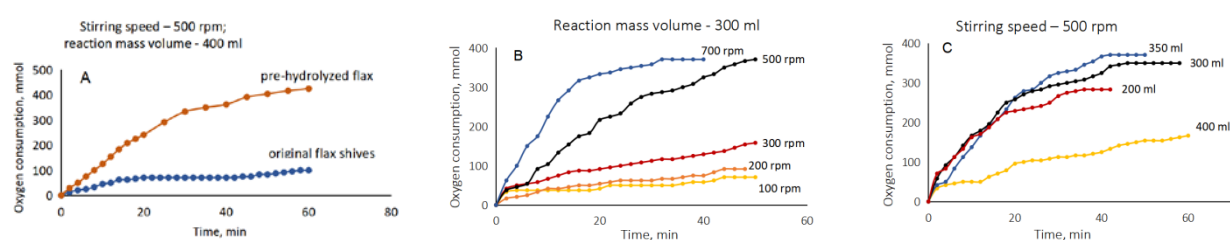


Рис. 1. Динамика поглощения кислорода при окислении исходной и предгидролизованной костры льна (А), влияние скорости перемешивания (В) и объема реакционной массы (С) на кинетику поглощения кислорода при окислении предгидролизованной костры льна.

Полученные результаты показывают, что каталитическое окисление кислородом позволяет переработать костру льна в ванилин, сиреневый альдегид и целлюлозу. При окислении предгидролизованной костры интенсификация массообмена увеличивает скорость поглощения кислорода до 25 раз, изменяя не максимальный выход ванилина, а время достижения максимума.

Полученные результаты по кинетике поглощения кислорода и накопления ванилина весьма точно описываются моделью интенсивности массопереноса в системе жидкость-газ, определяемой плотностью энергии перемешивания в объеме жидкой фазы. При больших нагрузках реакционной массы в реактор следует учитывать не Ньютоновское поведение окисляемой суспензии.

Впервые показано, что, несмотря на отчетливо диффузионный режим окисления костры кислородом, выход ванилина в таких условиях по сравнению с теоретическим максимумом выхода ванилина в процессах окисления лигнинов снижается незначительно.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда грант № 20-63-47109.

Литература:

[1] Tarabanko V.E., Kaygorodov K.L., Vigul D.O., Tarabanko N., Chelbina Y.V., Smirnova M.A., Journal of Wood Chemistry and Technology, 2020, V. 40, Iss. 6, p. 421-433.

Получение феррит-граната эрбия с использованием анионообменного осаждения и изучение его свойств

Киришева Елизавета Александровна

Институт химии и химической технологии ФИЦ КНЦ СО РАН

Железо–эрбиевый гранат (ЖЭГ), представленный формулой $\text{Er}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$, обладает выраженными оптическими и магнитными свойствами, в связи с чем широко применяется в медицинском оборудовании, а также в качестве компонентов миниатюрных антенн, магнитных носителей записи, изоляторов, циркуляторов [1].

Синтез феррит-граната эрбия проводился с использованием анионообменного осаждения. Целью работы является подбор оптимальных условий получения железо-эрбиевого граната (ЖЭГ) с использованием анионообменного осаждения, и изучение продукта синтеза физико-химическими методами.

Анионообменное осаждение осуществляли с помощью сильноосновного анионита АВ-17-8 гелевого типа в различных формах: карбонатной (А- CO_3), гидроксидной (А-ОН), а также в гидроксидной форме, прошедшей дополнительную очистку от примесных карбонат-ионов (А-ОН*). Методика проведения анионообменного осаждения подробно описана в более ранней работе [2].

По данным, полученным в ходе эксперимента, было выявлено, что наиболее оптимальным является проведение анионообменного осаждения при комнатной температуре в течение 1 ч с использованием анионита А-ОН*. Данный метод обеспечивает высокий выход (85%) стехиометричного продукта осаждения за 1 ч, при этом молярная доля металлов в анионите не превышает 5%. Дальнейший обжиг полученных образцов стехиометричного состава при температуре 800°C приводит к образованию железо-эрбиевого граната с незначительной примесью фаз перовскита и Fe_2O_3 . Размер частиц граната, вычисленный по данным РФА, составляет 50 нм. По результатам просвечивающей электронной микроскопии выявлено, что частицы имеют близкую к сферической форму, а средний размер частиц составляет 45 нм. Для формирования фазы граната из нестехиометричных образцов, полученных иными методами, обжиг необходимо проводить при более высоких температурах (900°C), вследствие чего частицы граната укрупняются до 100 нм.

Таблица 1. Элементный состав осадков, полученных анионообменным осаждением с применением различных форм анионита

Номер образца	Форма анионита	Молярная доля металлов в анионите, %	Равновесная величина рН	Выход осадка, %	$n_{\text{Me}}/n_{\text{Fe}}$
1	А- CO_3	11	7,2	75	0,5
2	А-ОН	9	5,9	51	0,6
3	А-ОН*	5	11,1	85	0,6

Работа выполнена совместно с М.В. Пантелеевой, и Е.В. Григорьевой. Научный руководитель С.В. Сайкова.

Литература:

[1] Уткин Н. И. // *Металлургия цветных металлов*. М.: *Металлургия*, 1985. 216 с.

[2] Сайкова С. В., Киришева Е.А., Пантелеева М.В., Пикурова Е.В., Евсевская Н.П.// *Журнал неорганической химии*. 2019. Т. 64., № 10. С. 1013.

Исследование процесса цементации благородных металлов из солянокислых сред в присутствии нитрат и сульфат ионов

Казакевич Дмитрий Алексеевич

Институт химии и химической технологии ФИЦ КНЦ СО РАН

Вопрос извлечения благородных металлов из промпродуктов основных технологических цепочек аффинажных предприятий будет актуален всегда. Наиболее простым, дешевым и эффективным способом извлечения небольших количеств благородных металлов из растворов от выщелачивания рассматриваемых промпродуктов является способ цементации железным порошком [1].

На рисунке 1 представлен график с коэффициентами распределения при цементации благородных металлов из солянокислого раствора железным порошком в присутствии нитрат и сульфат ионов в сравнении с цементацией из чистого солянокислого раствора с благородными металлами.

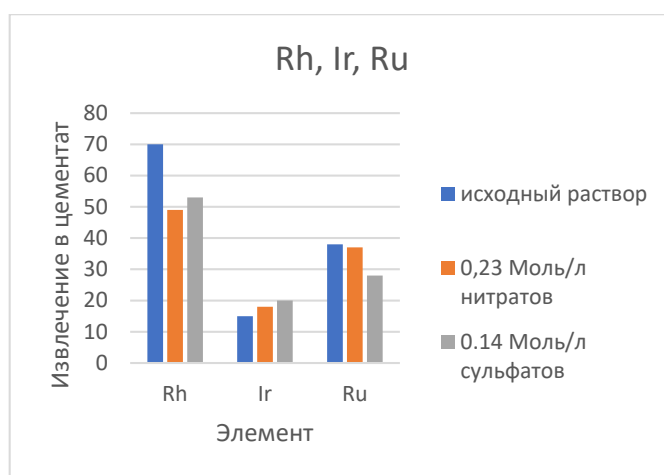


Рис. 1. Извлечение Rh, Ir, Ru в цементат.

Из представленных графиков видно, что присутствующий в системе нитрат и сульфат ион оказывает влияние на цементацию Rh, Ir, Ru. Rh хуже всего зацементировался при избытке нитрат иона, но сульфат ион так же оказал влияние на коэффициент извлечения в цементат. Ir показал стабильно низкое извлечение в цементат независимо от анионного состава раствора. Ru хуже всего перешел в цементат при избытке сульфат иона.

Представленные данные показывают присутствие вышеописанных проблем способных возникнуть при извлечении металлов платиновой группы. Анионный состав растворов оказывает влияние на процесс выделения их из раствора.

Литература:

[1] Пат. 2204620С2 РФ. Способ переработки осадков на основе оксидов железа, содержащих благородные металлы / Ю.А. Сидоренко, Л.К. Герасимова, Э.В. Мальцев, А.В. Москалев, Оpubл. 20.05.2003.

Секция «Био- и медицинские технологии»

Использование чешуи для идентификации жилых и мигрирующих из притоков особей байкальского хариуса на участке реки Енисей с измененным гидрологическим режимом

Андрущенко Павел Юрьевич

Институт биофизики ФИЦ КНЦ СО РАН

Сибирский федеральный университет

Зарегулирование стока рек плотинами гидроэлектростанций (ГЭС) оказывает существенное воздействие на популяции мигрирующих видов рыб, препятствуя их перемещению между участками верхнего и нижнего бьефа. Нарушение урванного и термического режима реки в нижнем бьефе ГЭС также может приводить к изменению миграционного процесса между основным руслом и его придаточной системой. Ранее такой эффект был описан для некоторых популяций европейского хариуса *Thymallus thymallus*, перешедших к оседлому образу жизни на участках ниже плотин (Northcote, 1995). Мы предполагаем, что сходная ситуация наблюдается в р. Енисей на участке нижнего бьефа Красноярской ГЭС, где вследствие изменения температурного режима, обитающий здесь хариус частично перестал мигрировать в притоки (Зуев и др., 2021), а также нарастил свою численность и скорость роста. Вместе с этим, хариус по-прежнему встречается в притоках термически измененного участка Енисея, что ставит вопрос о его происхождении, объеме покатной миграции и, как следствие, современной роли притоков в поддержании численности хариуса в основном русле Енисея.

В работе оценивалась возможность использования чешуи байкальского хариуса *Thymallus baicalensis* Dybowski, 1874, как маркера мигрирующих и жилых рыб на участке реки Енисей с измененным термическим режимом в нижнем бьефе Красноярской ГЭС. Тестировалась выборка из 161 особи хариуса, отловленных в основном русле Енисея вблизи устья одного из крупных притоков – реки Кан, в июле-ноябре 2019 года. Общая выборка была дифференцирована на потенциально жилых рыб, имеющих 15 и более склеритов во втором законченном годовом кольце чешуи, и потенциально мигрирующих (менее 15 склеритов). Доля мигрантов в общей выборке составила 18,6%. Наибольший их процент был отмечен в июле (24%), в августе-сентябре он составлял 20-22%, в октябре — 15%, в ноябре мигранты не встречались. Статистически значимые различия по линейным размерам между жилыми и мигрирующими рыбами 2-3 летнего возраста выявлены в июле-августе; различия по содержанию радиоцезия (^{137}Cs) зафиксированы в августе. На основании полученных результатов предложена модель распределения хариуса, согласно которой молодые особи в летнее время массово перемешаются из крупных прогретых притоков Енисея в основное русло Енисея, где температура воды не превышает 12°C. Предложенный метод выявляет преимущественно неполовозрелых и впервые созревающих особей, расселяющихся из притоков, но мало пригоден для идентификации половозрелых рыб, осуществляющих кратковременные нерестовые миграции.

Работа выполнена при финансировании гранта Российского фонда фундаментальных исследований и Красноярского краевого Фонда поддержки научной и научно-технической деятельности № 20-44-240009.

Литература:

- [1] Northcote T.G. (1995) Comparative biology and management of Arctic and European grayling (*Salmonidae*, *Thymallus*). *Rev. Fish. Biol. Fisheries*. 5 (2): 141-194.
- [2] Зуев И.В., Андрущенко П.Ю., Чупров С.М., Зотина Т.А. (2021) Особенности строения чешуи байкальского хариуса *Thymallus baicalensis* в условиях измененного гидрологического режима. *Биология внутренних вод*. 1: 47-54.

Сравнение эффектов коммерческих препаратов пестицидов и их действующих веществ на ферментативные реакции, катализируемые оксидоредуктазами

Копылова Ксения Васильевна

Институт биофизики ФИЦ КНЦ СО РАН

Пестициды используются в сельском хозяйстве для повышения урожайности сельскохозяйственных культур и борьбы с вредителями. Многообразие целевых объектов применения пестицидов и различные физико-химические свойства действующих веществ (д.в.) привели к созданию множества препаративных форм пестицидов. Пестицидные составы содержат действующие вещества и вспомогательные ингредиенты (формулянты), которые добавляются для усиления их эффекта и стабильности. Недавние исследования показали, что формулянты не могут быть классифицированы как однозначно инертные компоненты поскольку в некоторых случаях способны оказывать негативный эффект на живые организмы. Представленная работа направлена на изучение эффектов воздействия пестицидных препаратов на ферментные системы. В рамках оценки риска концепция Путей неблагоприятного исхода (Adverse Outcome Pathways) позволяет связать экспериментальные данные с фактическими неблагоприятными исходами.

Наша работа предлагает ответить на вопрос: можно ли сделать вывод о токсичности препаративных форм пестицидов на основе сведений о токсичности их действующих веществ. Были поставлены следующие задачи: а) Оценить влияние коммерческих пестицидных препаратов и их действующих веществ на ферментные системы, катализируемые оксидоредуктазами; б) Сравнить чувствительность ферментных реакций разной длины цепи сопряжения ферментов к пестицидным препаратам и их действующим веществам.

В качестве тест-объектов были использованы: моноферментная система, катализируемая алкогольдегидрогеназой (ADH), биферментная система светящихся бактерий НАДН: ФМН-оксидоредуктаза и люцифераза (R + L), и триферментная система алкогольдегидрогеназа + NADH:FMN-оксидоредуктаза + люцифераза (ADH + R + L). Анализ изменений активности ферментов в присутствии и отсутствие анализируемых веществ проводили оптическими методами. Для количественной оценки ингибирующего действия токсикантов на ферменты использовали параметр IC_{50} , представляющий собой концентрацию токсиканта, вызывающую снижение активности ферментных систем на 50%.

Проведен анализ влияния пестицидных препаратов «Дельцид» (д.в. дельтаметрин) и «Ликвидатор» (д.в. глифосат) и их действующих веществ на ферментные системы. Было показано, что препарат «Ликвидатор» оказывает больший ингибирующий эффект на ферментные системы по сравнению с действующим веществом. Значения IC_{50} для глифосата и «Ликвидатора» составили $10561 \pm 950,5$ и $0,8 \pm 0,08$ мг/л соответственно при использовании в качестве тест-объекта биферментной системы светящихся бактерий R+L. Аналогично значения IC_{50} для дельтаметрина и «Дельцида» составили $1 \pm 0,12$ и $0,06 \pm 0,007$ мг/л соответственно при использовании в качестве тест-объекта триферментной системы ADH+R + L. Исходя из наших данных, можно сделать вывод, что анализ токсичности исключительно действующих веществ может не позволить в полной мере оценить токсичность пестицидных препаратов в целом.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ, Правительства Красноярского края и Красноярского краевого фонда науки в рамках научного проекта № 20-44-242001.

Длинноцепочечные алкеноны в верхних слоях донных отложений озер Северо-Минусинской котловины как потенциальный биоиндикатор палео-климата

Бульхин Александр Олегович

Институт биофизики ФИЦ КНЦ СО РАН

Использование молекулярных биохимических маркеров палео-климата является передовым направлением в области палео-лимнологических реконструкций. Одним из наиболее перспективных классов биомаркеров являются длинноцепочечные алкеноны (ДЦА) – липиды, синтезируемые исключительно микроводорослями отдела *Haptophyta* порядка *Isochrysidales*, служащие индикаторами температуры и в некоторых случаях солености среды обитания. Химическая структура ДЦА представлена С35 – С42 метил- и этил-кетонами с 2 – 4 ненасыщенными связями в алифатической цепи. Было показано, что длина углеродной цепи алкенонов коррелирует с соленостью воды, а также, что содержание тетра-ненасыщенных алкенонов снижается с увеличением солености. В настоящее время, выделение гаптофитовых водорослей из природных водоемов в чистую культуру является трудной задачей, поэтому их биоразнообразие в озерах выявляется молекулярно-генетическими методами. Цель работы – выявить зависимости в распределении количества и состава ДЦА в верхних слоях донных отложений двадцати озер Северо-Минусинской котловины и видовое биоразнообразие алкенон-продуцентов от физико-химических факторов среды.

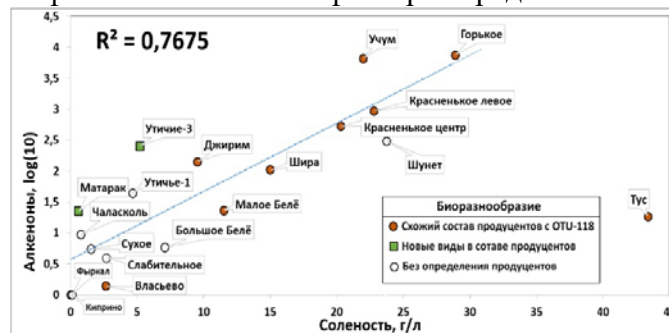


Рис. 1. Зависимость содержания алкенонов от солености озер и видовой состав продуцентов.

Керны донных отложений озер отбирали в конце июля 2019 г и конце мая 2020 г. В лаборатории от кернов отделяли верхний слой толщиной в 1 см. Пробы высушивали, фильтровали и омыляли. Неомыляемые фракции с алкенонами анализировались методом газовой хроматографии с масс-спектрометрическим детектированием. Отбор проб воды и полевые измерения проводились вблизи точек отбора донных отложений. Было выявлено, что в верхних слоях донных отложений основными фракциями являются ДЦА С37, С38 и С39 с 4, 3 и 2-мя транс-двойными связями, а С40 с 3 и 2-мя. Содержание алкенонов ранжировалось от 7,4 мг/г до 0,4 мкг/г. Основными алкенон-продуцентами являются представители семейства *Isochrysidales* II группы, схожие по видовому составу во всех выбранных для генетического анализа озерах, особо часто встречался вид OTU-118. В исключения попали озера Матарак и Утичье-3, где отличался состав продуцентов и наблюдалась III группа. Озеро Тус выбивается из ряда по содержанию ДЦА при высоких концентрациях солей, что соотносится с литературными данными. Зависимость содержания ДЦА от солености озер с основными алкенон-продуцентами представлены на рисунке 1. Содержание алкенонов было переведено в log(10) для удобства.

Показано, что содержание алкенонов может служить качественным индикатором солености озера, что позволит реконструировать динамику солености водоемов по распределению алкенонов в кернах донных отложений.

Работа выполнена при поддержке совместного гранта РФФИ-Тайвань 21-54-52001.

Биолюминесцентная реакция искусственной люциферазы NanoLuc с целентеразином и его белок-связанной формой (СВР)

Ефремов Максим Константинович

Сибирский федеральный университет

Институт биофизики ФИЦ КНЦ СО РАН

NanoLuc – искусственная люцифераза, созданная на основе каталитической субъединицы люциферазы глубоководной креветки *Oplophorus gracilirostris*. В результате мутагенеза (финальный вариант белка содержит более 10% аминокислотных замен) получен вариант, который при использовании нового синтетического субстрата — фуримазина, проявляет 150-кратную активность по сравнению с люциферазами *Photinus* и *Renilla* [1]. Малый размер (19 kDa) и уникальная яркость биолюминесценции делают NanoLuc привлекательной для применения в качестве биолюминесцентного репортера в молекулярном анализе.

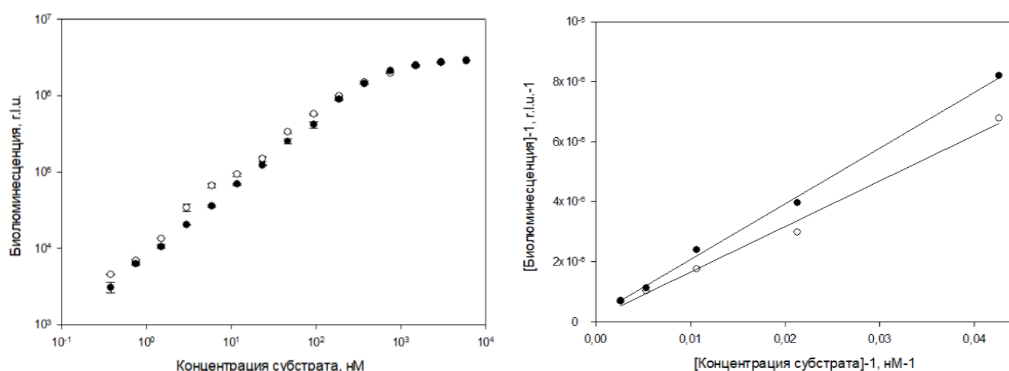


Рис. 1. Слева – зависимость биолюминесцентного сигнала от концентрации целентеразина (-●-) и СВР (-○-). Справа – график в двойных обратных координатах (Лайнуивера-Берка). Концентрация NanoLuc = 1 нМ в обоих экспериментах. Каждая точка – среднее значение от 3 независимых измерений.

В ходе данной работы был получен препарат рекомбинантной люциферазы NanoLuc в высокоочищенном виде и изучены параметры его ферментативной кинетики при взаимодействии с двумя типами субстрата целентеразина – свободным и иммобилизованным в Ca^{2+} -зависимом целентеразин-связывающем белке (СВР) мягкого коралла *Renilla muclery* [2] (Рис. 1).

Таблица 1. Параметры ферментативной кинетики NanoLuc¹

Параметр ферментативной кинетики	Субстрат	
	Целентеразин	Целентеразин-связывающий белок
K_m , М	$3,7 \cdot 10^{-7}$	$0,45 \cdot 10^{-7}$
V_{max} , r.l.u.	$2,9 \cdot 10^{-3}$	$0,36 \cdot 10^{-3}$
K_{cat} ($V_{max}/[E]$), c^{-1}	$2,9 \cdot 10^6$	$0,36 \cdot 10^6$
k_{cat}/K_m , $\text{M}^{-1}\text{c}^{-1}$	$7,9 \cdot 10^{12}$	$8 \cdot 10^{12}$

¹термин «кажущиеся» опущен

Как видно из представленных данных (Таблица 1), отношение k_{cat}/K_m составило приблизительно $8 \cdot 10^{12} \text{ M}^{-1}\text{c}^{-1}$ для обоих субстратов, что может означать, что оба типа субстрата окисляются люциферазой с одинаковой эффективностью.

Автор выражает благодарность соавторам работы, д.б.н. Л. А. Франк и к.б.н. В. В. Красицкой.

Литература:

[1] Hall M. P., Unch J., Binkowski B. F., et al., Chem. Biol., V.7, PP. 1848–1857 (2012).

[2] Titushin M. S., Markova S. V., Frank L. A., et al., Photochem Photobiol Sci, V.7(2), PP.189-196 (2008).

Модификация поверхности плёнок из ПГА разного химического состава методом лазерной абляции

Дудаев Алексей Евгеньевич

Институт биофизики ФИЦ КНЦ СО РАН

Ассортимент материалов синтетического и природного происхождения постоянно расширяется, но лишь немногие из них находят применение в практике, особенно в области биомедицины. Материалы биомедицинского назначения, особенно предназначенные для технологий клеточной и тканевой инженерии, должны отвечать спектру требований, среди которых комплиментарность поверхности по отношению к культивируемым клеткам, гидрофобно-гидрофильный баланс, адгезивные характеристики и т.п. В связи с этим актуальным направлением медицинского материаловедения является поиск перспективных биоматериалов и модификация поверхностных свойств изделий из них [1].

Одним из наиболее перспективных биоматериалов для медицины являются полигидроксиалканоаты (ПГА) – микробиологически синтезируемые полимеры, которые подвергаются полному биоразложению в естественной среде без образования токсичных отходов [2]. Эти биополимеры биосовместимы, однако вследствие высокой кристалличности обладают высокой гидрофобностью, что затрудняет прикрепление и пролиферацию эукариотических клеток.

Для преодоления таких ограничений применяют биологические, химические и физические методы. Новым и перспективным направлением является лазерная обработка поверхности с применением различных типов лазеров и режимов работы. Эта техника позволяет модифицировать химию поверхности, формировать микро- и наноразмерные трёхмерные структуры, а также изменять механику поверхности.

Впервые исследовано влияние обработки поверхности пленок, полученных из 4-х типов ПГА: поли-3-гидроксибутирата и его сополимеров с включением мономеров 3-гидроксиивалерата, 4-гидроксибутирата и 3-гидроксигексаноата с близким содержанием последних (порядка 30 мол.%) в двух режимах обработки CO₂ лазером – в постоянном и квазиимпульсном (периодическом).

При постоянном облучении векторными линиями при мощности 3 Вт на поверхности пленок формировались оплавленные области в виде бороздок, в которых у большинства образцов были повышенные значения краевого угла смачивания и снижение шероховатости. Квазиимпульсный режим растровым методом при мощности 13,5 Вт сопровождался образованием лунок без выраженных оплавленных зон с пониженной величиной краевого угла и повышением шероховатости у большинства образцов.

В культуре фибробластов мыши NIH 3T3 в МТТ-тесте исследована биосовместимость поверхности пленок и выявлено противоположное действие режимов облучения на развитие фибробластов. Количество жизнеспособных клеток на образцах при постоянном режиме обработки сопровождалось снижением по сравнению к исходным пленкам, от 13.0 до 27.2%, однако при квазиимпульсном режиме, значительно выросло; от 1.26 до 1.76 раз и от 1.66 до 1.83 раза, по сравнению к исходным и обработанными постоянным излучением, соответственно. Этот важный результат открывает возможность направленного влияния на адгезионные свойства полимерных изделий по отношению к клеточным культурам. Например, ограничение развития микробного обрастания при изготовлении упаковки пищевых продуктов и, наоборот, стимулирование развития эукариотических культур при конструировании скаффолдов в клеточных технологиях.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 19-43-240012. Благодарность научному руководителю Воловой Т.Г. за концептуализацию и анализ результатов.

Литература:

[1] Geyer R., Jambeck J.R., Law K.L., Production, use, and fate of all plastics ever made. Geyer, Jambeck. LawSci. Adv. 2017, 3,170-782.

[2] Volova T.G., Shishatskaya E.I.; Sinsky A.J., Degradable polymers: Production, properties, applications. Nova Science Pub Inc., NY, USA, 2013, 380 p.

Происхождение аномальной активности ^{137}Cs в слоях донных отложений р. Енисей

Вахрушев Вадим Игоревич

Сибирский федеральный университет

Институт биофизики ФИЦ КНЦ СО РАН

Пойма реки Енисей загрязнена техногенными радионуклидами в результате деятельности Горно-химического комбината (ГХК) Росатома и глобальных выпадений [1]. В начальный период радиоактивных сбросов ГХК с 1958 по 1965 год сформировался относительно низкий уровень радиоактивного загрязнения ^{137}Cs поймы р. Енисей. Экстремальный паводок 1966 года на р. Енисей, сопровождающийся расходом воды до 18000 м³/с [2] через плотину Красноярской ГЭС, привёл к затоплению береговой промзоны ГХК и выносу из неё взвешенных частиц с радионуклидами на большие расстояния. Вследствие этого образовались слои донных отложений (ДО) и пойменных почв с аномальным содержанием ^{137}Cs по течению реки от ГХК [1].

Цель работы – определение происхождения аномального содержания ^{137}Cs в слоях ДО р. Енисей, отобранных на разном расстоянии по течению реки от сбросов ГХК.

В изученных нами кервах ДО поймы р. Енисей, отобранных в период 2009 – 2018 гг. на расстоянии до 330 км по течению реки от ГХК, были обнаружены слои аномального (до 26000 Бк/кг) содержания ^{137}Cs (табл. 1). Ранее у береговой зоны вблизи г. Енисейска также были обнаружены аномальные слои [1] с удельной активностью ^{137}Cs до 19900 Бк/кг. Авторы [1] на основании отношения изотопов цезия ($^{137}\text{Cs}/^{134}\text{Cs}$) показали, что эти слои в пойме района г. Енисейска образовались в результате переноса ДО из зоны ГХК во время экстремального паводка 1966 года. Обнаруженные нами активности ^{137}Cs в слоях ДО других районов р. Енисей (табл. 1) сопоставимы или превышают максимальные значения ^{137}Cs для радиоактивной аномалии береговой зоны г. Енисейска. Рассчитанные нами изотопные отношения $^{137}\text{Cs}/^{152}\text{Eu}$ и $^{137}\text{Cs}/^{60}\text{Co}$ в слоях ДО соответствуют отношениям этих радионуклидов в работе [1], также в изученных нами аномальных слоях отсутствуют техногенные радионуклиды с коротким периодом полураспада. Проведённая датировка слоёв кернов из районов вблизи сбросов ГХК (Балчуг) с использованием метода отношения радионуклидов $^{137}\text{Cs}/^{60}\text{Co}$ подтвердила образование аномальных слоёв в 1966 году. Всё это позволяет отнести обнаруженные нами аномальные слои ДО к паводку 1966 г.

Таблица 1. Диапазоны удельной активности ^{137}Cs (Бк/кг) и отношения техногенных радионуклидов в аномальных слоях кернов ДО и пойменных почв реки Енисей

Район, годы отбора	^{137}Cs , Бк/кг	$^{137}\text{Cs} / ^{152}\text{Eu}$	$^{137}\text{Cs} / ^{60}\text{Co}$
Енисейск, 1997 [1]	3500 ÷ 19900	290 ÷ 810	7000 ÷ 48000
Балчуг, 2009-2018	1000 ÷ 26000	150 ÷ 2090	2000 ÷ 16000
Стрелка, 2012	1100 ÷ 3100	160 ÷ 240	1500 ÷ 2000

При новых экстремальных паводках возможен перенос радиоактивных ДО и вынос их с глубины на поверхность. Поэтому выявление участков аномального радиоактивного загрязнения поймы реки Енисей позволит оценить масштаб перераспределения радиоактивных ДО по течению реки.

Автор выражает благодарность соавтору работы Дементьеву Д.В.

Литература:

[1] Сухоруков Ф.В. и др. «Закономерности распределения и миграции радионуклидов в долине реки Енисей». Новосибирск, 2004. 287 с.

[2] Бабкин В.И. «О регулировании речного стока в XXI веке». Москва, 2018. 215 с.

Дизайн биосенсора на основе биферментной системы светящихся бактерий для анализа загрязнения сложных по составу сред

Калябина Валерия Павловна

Сибирский федеральный университет

Сложные по составу среды, к которым относятся почва и плодоовощная продукция, способны в значительной степени аккумулировать потенциально токсичные вещества [1], становясь источником для дальнейшего загрязнения. Современные биосенсоры, основанные на ингибировании ферментов, применяются для обнаружения загрязнителей и токсичных соединений в различных средах [2]. При тестировании сложных по составу сред существует ряд трудностей, в том числе для точной интерпретации результатов необходимо учитывать свойства и эффекты природных компонентов незагрязненных образцов. Билюминесцентные методы анализа на основе ферментативных систем могут быть использованы при создании интегрального метода анализа сложных сред, загрязненных смесью токсических веществ [3]. Целью исследования являлась разработка схемы конструирования новых ферментативных сенсоров для оценки безопасности сложных по составу сред. Предложенная схема была апробирована при создании билюминесцентного ферментативного сенсора на основе биферментной системы светящихся бактерий NAD(P)H:FMN-оксидоредуктаза+ люцифераза (P+Л).

На первом этапе конструирования ферментативного сенсора была установлена чувствительность ферментов к ряду тяжелых металлов и пестицидов на уровне их предельно допустимого содержания в пище. На следующем этапе оценивали влияние образцов плодоовощной продукции на активность биферментной системы P+Л в отсутствие загрязняющих веществ. При необходимости модифицировали процедуру пробоподготовки, чтобы уменьшить влияние контрольных (незагрязненных) сложных сред на ферменты. На третьем этапе были проведены модельные эксперименты по оценке чувствительности биферментной системы P+Л к смеси супернатантов образцов плодоовощной продукции и исследуемых токсикантов. Для создания билюминесцентного сенсора на четвертом этапе был разработан элемент биораспознавания, состоящий из ферментов P+Л и их субстратов – NADH и алифатического альдегида, совместно иммобилизованных в крахмальном геле. Для обеспечения высокой чувствительности распознающего элемента варьировали соотношение его компонентов и условия их иммобилизации в микрофлюидных чипах. В качестве завершающего шага разработки необходимо подобрать подходящий датчик, обеспечивающий детектирование сигнала биосенсора.

Предложенные принципы конструирования билюминесцентного ферментативного теста могут быть применены для разработки других ферментативных биосенсоров для интегральной экспрессной оценки безопасности сложных сред.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ, Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда науки в рамках проекта №. 20-44-242001.

Литература:

- [1] Silva V., Mol H. G. J., Zomer P., et al., *Sci. Tot. Environ.*, V. 653, PP. 1532-1545 (2019).
- [2] Amine A., Arduini F., Moscone D., Paleschi G., *Biosens. Bioelectron.*, V. 76, PP. 180–194 (2016).
- [3] Kalyabina V.P., Esimbekova E.N., Torgashina I.G., et al., *Dokl. Biochem. Biophys.*, V. 485, N 1., PP. 107-110 (2019).

Выделение и изучение некоторых свойств экстраклеточной оксидазы из высшего гриба *Neonothopanus nambi*

Посохина Екатерина Дмитриевна

Институт биофизики ФИЦ КНЦ СО РАН

Базидиальные грибы обладают значительным биотехнологическим потенциалом для получения широкого спектра ценных целевых продуктов, востребованных в медицине, биологии, фармакологии, пищевой и химической промышленности. Для ученых большой интерес представляют экстраклеточные оксидазы базидиомицетов (в частности, гем- и ФАД-содержащие), благодаря возможности их использования в аналитических приложениях. При этом исследователи ведут активный поиск для выявления среди базидиомицетов новых перспективных продуцентов известных оксидаз и обнаружения ферментов с новыми свойствами.

Цель данной работы состояла в выделении экстраклеточного фермента с оксидазной функцией из мицелия светоизлучающего гриба *Neonothopanus nambi* и изучении некоторых его свойств.

В работе использовали культуру базидиального гриба *N. nambi* IBSO 3293 из Коллекции микроорганизмов (ССIBSO 836) ИБФ СО РАН, ФИЦ «КНЦ СО РАН» (Красноярск). Биомассу получали методом глубинного культивирования мицелия в картофельно-сахарозной среде в течение 7-9 дней по разработанной ранее технологии [1].

Выделение экстраклеточных белков осуществляли инкубацией биомассы мицелия в растворе β -глюкозидазы при ее концентрации 0,5 МЕ/мл. Полученный водный экстракт, содержащий экстраклеточные белки, диализовали ультрафильтрацией через мембрану с пределом исключения 30 кДа для концентрирования белковых компонентов и удаления низкомолекулярных соединений. Белковый концентрат разделяли гель-фильтрационной хроматографией на колонке (1,6 x 33 см) с неподвижной фазой Sephadex G-200, уравновешенной раствором 50 мМ NaCl, используемым как элюент. Хроматографические фракции, содержащие наибольшую активность изучаемого фермента, объединяли и концентрировали. Для оценки нативной молекулярной массы выделенного фермента при указанных выше условиях проводили хроматографию маркерных белков – БСА и цитохрома С. Белковый состав финального препарата и молекулярную массу выделенного фермента в денатурирующих условиях оценивали с помощью SDS-электрофореза в полиакриламидном геле. Количественную оценку белка в образцах проводили с помощью микробиуретового метода. Активность изучаемого фермента в хроматографических фракциях и финальном препарате оценивали реакцией соокисления фенола с 4-аминоантипирином (4-ААП).

Установлено, что фермент, выделенный из гриба *N. nambi* с помощью описанной выше технологии, имеет высокую степень чистоты и является мономерным белком с молекулярной массой около 60 кДа. Выявлено, что фермент является ФАД-содержащим и катализирует соокисление фенола с 4-ААП без добавления H_2O_2 , что отличает его от известных пероксидаз. Это позволило высказать предположение, что данный фермент является оксидазой со смешанной функцией. Кинетические параметры полученной оксидазы K_m и V_{max} для фенола составляют 0,21 мМ и 0,40 мкМ·мин⁻¹. Фермент проявляет наибольшую каталитическую активность в температурном диапазоне 55–70 °С и при pH 5.

Мы предполагаем, что выделенная из базидиомицета *N. nambi* оксидаза может быть полезным ферментом для применения в аналитике, в частности, для колориметрического обнаружения фенола в водной среде без использования H_2O_2 .

Автор выражает благодарность соавторам работы Н.О. Ронжину, О.А. Могильной, В.С. Бондарю

Литература:

[1] Mogilnaya O.A., Ronzhin N.O., Posokhina E.D., Bondar V.S., Asian Journal of Mycology, V.3, PP. 408–418 (2020).

Гуминовые вещества как природные радиопротекторы на примере радионуклида трития и морских бактерий

Колесник Ольга Владиславовна

Институт биофизики ФИЦ КНЦ СО РАН

Низкодозовые биологические эффекты в настоящее время представляют особый интерес в связи с расширением районов с радиоактивными загрязнениями. Продукты радиоактивного распада могут воздействовать на сопряженные химические и биологические процессы в природных экосистемах, что может сопровождаться изменением баланса экосистемы в целом. Гуминовые вещества (ГВ) – продукты естественной трансформации органики в почве, водных отложениях, основной компонент плодородного слоя почв, полимерные полифункциональные соединений нерегулярного строения. Изучение воздействий низкоинтенсивного радиационного излучения в присутствии ГВ формирует основу для прогнозирования реакции живых организмов на больших территориях, зараженных низкоинтенсивным излучением после аварий, сбросов атомных станций или подземной разработки природных ресурсов.

Морские люминесцентные бактерии являются оптимальным биотестовым объектом для изучения низкодозового воздействия на водные микроорганизмы. Физиологическая активность бактерий оценивается по интенсивности их биолюминесценции. Люминесцентные бактериальные биотесты дают количественную меру токсичности и часто превосходят другие биотесты по быстрдействию, точности, чувствительности и простоте.

Известно, что метаболическая активность бактерий связана с продукцией ими активных форм кислорода (АФК). Различные воздействия на бактериальную культуру, включая низкодозовую радиацию, способны изменять производство АФК.

Образцы бактериальной суспензии готовили из лиофилизированных препаратов бактерий по стандартной методике; для имитации морской среды и балансировки осмотических процессов использовали 3% раствор NaCl.

В качестве источника трития использовали тритиевую воду (НТО). НТО добавляли к растворам 3% NaCl и смешивали с бактериальными суспензиями до конечных удельных радиоактивностей: 2, 50 и 200 МБк/л.

В качестве источника гуминовых веществ использовали препарат Гумат-80, («Гумат», Иркутск, Россия), полученный методом безэкстракционной обработки угля. Выбранная концентрация ГВ составляла 10^{-3} г/л.

Измерения интенсивности биолюминесценции и хемилюминесценции проводили с помощью планшетного люминометра Luminoskan Ascent (Thermal Fisher Corp.).

Биолюминесцентный отклик морских бактерий на воздействия трития соответствовал модели «гормезиса»: он включал стадии ингибирования и активации биолюминесценции, а также отсутствие эффекта. Показано, что присутствие ГВ в растворе снижает ингибирующие и активирующие эффекты трития. Выявлены корреляции между интенсивностью биолюминесцентного свечения и содержанием АФК в бактериальной суспензии в присутствии трития.

Результаты демонстрируют важную роль гуминовых веществ в природных процессах в регионах с низким уровнем радиоактивного загрязнения: ГВ могут смягчать радиотоксические эффекты, влияющие на микроорганизмы, выполняя радиопротекторную функцию.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ №18-44-240004. Авторы выражают благодарность за руководство и участие в работе Кудряшевой Н.С., Рожко Т.В. и Бадуну Г.А.

Анализ доступности активного центра бактериальной люциферазы для молекул осмолитов методами молекулярной динамики

Суковатый Лев Алексеевич

Сибирский федеральный университет

Условия протекания биохимических реакций в буфере отличны от окружения ферментов внутри клетки. Для приближения условий *in vitro* к *in vivo* используют, в том числе, осмолиты – низкомолекулярные соединения, которые синтезируются и накапливаются клетками для защиты от неблагоприятных внешних факторов (температура, давление, рН и др.). Известно, что присутствие ряда осмолитов повышает стабильность структуры белков и способствует сохранению их биологической активности. В настоящее время эффект осмолитов на биохимические процессы еще не до конца изучен. Так, некоторые из них могут проникать в активный центр фермента, что может напрямую влиять на эффективность катализа [1]. В данной работе исследованы механизмы действия полиолов и сахаридов на структуру и функцию бактериальной люциферазы, катализирующей в микроорганизмах биолюминесцентную реакцию.

Целью работы являлось определить доступность активного центра бактериальной люциферазы для осмолитов разного размера и химической природы с помощью методов молекулярной динамики (МД).

Для подготовки молекулярных систем, релаксации и вычисления МД использовали программный пакет GROMACS 5.1.4 и силовое поле CHARMM36. Каждая из систем представляла собой трехмерную структуру бактериальной люциферазы *V. harveyi* (PDB ID: 3FGC) в окружении молекул воды и 10, 20, 30, 40 вес.% водных растворов глицерина и сахарозы. Время расчетов динамики белка в каждом окружении составляло 40 нс.

Анализ плотности пространственного распределения молекул осмолитов вблизи поверхности люциферазы показал, что молекулы глицерина могут проникать в активный центр фермента и при высоких концентрациях (30, 40 вес. %) присутствуют там на протяжении всего времени МД, в отличие от молекул сахарозы, которые остаются у входа в сайт связывания флавина при любых концентрациях. Было сделано предположение, что наблюдаемый эффект объясняется различием в размере молекул и для проверки выполнено вычисление пространственного распределения других осмолитов: сорбитола, который примерно в 2 раза больше глицерина, и глюкозы, которая примерно в 2 раза меньше сахарозы. Была рассчитана функция парного распределения молекул осмолитов относительно аминокислотного остатка αGlu43 , расположенного на дне каталитической области активного центра люциферазы. Для 40%-й концентрации осмолитов установлено, что их проникновение в активный центр характеризуется следующим минимальным расстоянием до αGlu43 : глицерин – 1,6 Å, глюкоза – 5,5 Å, сорбитол – 6,7 Å и сахароза – 9,3 Å, что коррелирует с размерами молекул (эффективными гидродинамическими радиусами). Экспериментальное исследование показало, что глицерин и глюкоза ингибируют активность люциферазы, в то время как сорбитол и сахароза – нет, что говорит о наличии дополнительного механизма влияния осмолитов на каталитическую функцию фермента, помимо воздействия на аминокислотные остатки активного центра.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-34-90118

Литература:

[1] Petrović D. et al. Shuffling active site substate populations affects catalytic activity: the case of glucose oxidase // ACS catalysis. – 2017. – Т. 7. – №. 9. – С. 6188-6197.

Выявление онкомаркера MIA биolumинесцентным микроанализом

Башмакова Евгения Евгеньевна

Институт биофизики ФИЦ КНЦ СО РАН

Белок с меланома-ингибирующей активностью MIA (Melanoma Inhibitory Activity protein) ассоциирован с прогрессированием меланомы и выступает в роли раннего индикатора терапевтического ответа для оценки эффективности новых меланома-ингибирующих препаратов. Высокие требования к чувствительности анализа по выявлению MIA обусловлены низким пороговым значением данного белка в сыворотке (6.5 – 9.4 нг/мл). В качестве репортерных молекул для высокочувствительной детекции мишени особо интересны светоизлучающие (биolumинесцентные) белки – люциферазы и фотопротейны. В частности, метки на основе Ca^{2+} -регулируемого фотопротейна обелина обеспечивают чувствительность анализа, сравнимую с радиоизотопной меткой. Для выявления онкомаркера MIA разработан дизайн твердофазного биolumинесцентного иммуноанализа конкурентного типа. Для этого сконструирован, получен и охарактеризован гибридный белок MIA- Ca^{2+} -регулируемый фотопротейн обелин как конкурирующий элемент аналитической системы. В модельных экспериментах по выявлению онкомаркера предложенным способом показана зависимость биolumинесцентного сигнала от концентрации MIA в диапазоне от 9 до 2304 нг/мл (Рис.1). Полученные результаты определяют целесообразность поиска оптимальных условий анализа для повышения чувствительности, а также последующую адаптацию предложенного способа для клинического применения.

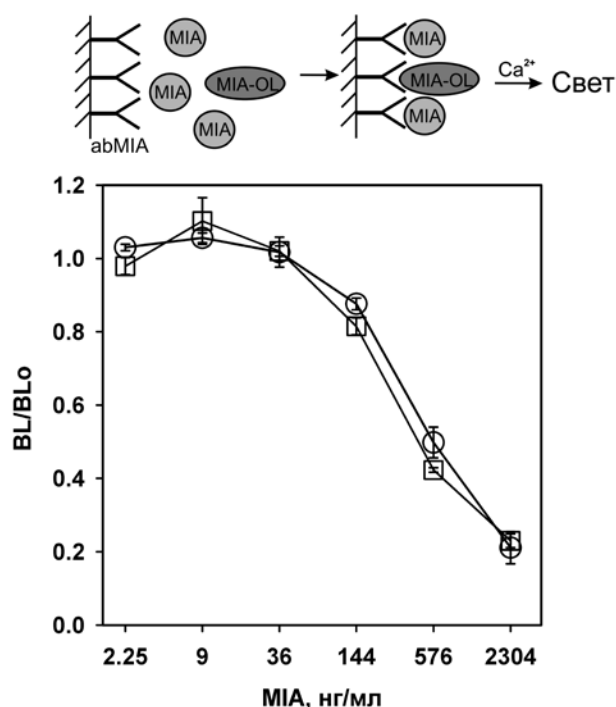


Рис. 1. Результаты биolumинесцентного конкурентного анализа MIA в модельных сыворотках. Каждая точка – среднее от трех независимых измерений, BL/BL0 – отношение биolumинесцентного сигнала от данного образца к сигналу от образца, не содержащего MIA. (-○-) – образцы MIA в буфере, (-□-) – в сыворотке крови, abMIA-антитела к MIA, MIA-OL- гибридный белок MIA- Ca^{2+} -регулируемый фотопротейн обелин.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта президента РФ для молодых ученых - кандидатов наук МК-772.2020.4 Автор выражает благодарность соавторам работы Кудрявцеву А.Н. и д.б.н. Франк Л.А.

Функциональная оценка полигидроксиалканоатов для применения в качестве компонента биоактивных сосудистых имплантатов

Рыльцева Галина Александровна

Институт биофизики ФИЦ КНЦ СО РАН

Актуальным направлением исследований во всем мире является изучение нанотопографии имплантируемых медицинских изделий. Экспериментальные и клинические исследования свидетельствуют об успешном эксплуатировании подхода, включающего анализ особенностей механохимического сигналинга и направленной модификации нанотопографии для использования биоматериалов в реконструктивной биоинженерии различных органов и тканей. Для применения в кардиохирургии и рентгенхирургии актуальна разработка биоактивных сосудистых имплантатов, в том числе для сосудов малого и среднего диаметра, графтов и стентов, в условиях атеросклероза.

Неудачи сосудистых имплантатов обычно вызваны отсутствием адекватного формирования нео-эндотелия, что приводит к формированию в стент-графте тромбов и гиперплазии неоинтимы. Перспективным подходом к преодолению этих проблем является направленное создание функционального монослоя эндотелиальных клеток на поверхности имплантатов и экспериментальных образцов бионаноматериалов [1].

Первые данные о молекулярно-клеточных механизмах взаимодействия биополимерных материалов на основе полигидроксиалканоатов, ПГА, с другими функциональными клетками сердечно-сосудистой системы получены по отношению к моноцитам/макрофагам [2].

В исследовании анализировали механизмы взаимодействий эндотелиальных клеток пупочной вены человека (HUVES) с подложками из поли3-гидроксibuтирата (ПЗГБ), его сополимера с 3-гидроксивалератом [П(ЗГБ/ЗГВ), 85.0/15.0], а также с 4-гидроксibuтиратом [П(ЗГБ/4ГБ) 92.0/8.0], и трехкомпонентный образец с 3-гидроксигексаноатом [П(ЗГБ/ЗГВ/ЗГГ) 66.4/23.4/10.2] в сравнении с Pellethane 2363-80A, известный как полиуретан, используемый в качестве одного из основных полимеров сосудистых имплантатов.

HUVES, выделенные из пупочной вены человека здоровых доноров, были получены из биобанка Института регенеративной медицины МГУ им. М.В. Ломоносова, идентификатор коллекции: MSU_HUVES. Клетки культивировали на покрытом желатином пластике в среде для роста эндотелия (EGM-2, Lonza) и использовали для экспериментов на 2–3 пассажах.

Оценку биологической активности образцов производили с помощью теста AlamarBlue в культуре HUVES *in vitro*. Установлены пределы нормального функционирования HUVES для бионанополимерных материалов разных типов. Показано отсутствие негативного влияния материалов группы ПГА на физиологическое состояние клеток и увеличение жизнеспособности на 30% при сравнении с Pellethane 2363-80A. Наилучшие показатели установлены для образца П(ЗГБ/4ГБ). Контакт с полимерными пленками всех типов ПГА не приводил к ухудшению биологических свойств клеток.

Литература:

[1] Franco D., et al. Accelerated endothelial wound healing on microstructured substrates under flow. *Biomaterials*, (2012).

[2] Shishatskaya E.I., et al. The effect of the chemical composition and structure of polymer films made from resorbable polyhydroxyalkanoates on blood cell response. *International Journal of Biological Macromolecules*, (2019).

Высокоактивные делеционные мутанты люциферазы *Metridia longa*: получение и характеристика репортерных свойств

Коротов Игорь Александрович

Институт биофизики ФИЦ КНЦ СО РАН

Биолюминесцентные репортеры нашли широкое применение в медицинских и биологических исследованиях благодаря высокой чувствительности, нетоксичности для объекта исследований и возможности наблюдать сигнал в реальном времени. Люциферазы – это общее наименование ферментов, катализирующие окисление субстрата кислородом воздуха с образованием квантов света. Несмотря на общую функцию, биолюминесцентные белки различных таксонов совершенно различны по структуре, свойствам и механизмам действия вследствие эволюционно независимого возникновения биолюминесцентной функции в различных таксонах. На сегодняшний день клонировано около десятка типов биолюминесцентных белков и все они опробованы в качестве репортеров. Но поиск новых и улучшение репортерных свойств существующих люцифераз постоянно продолжается в попытках расширить области применения и получить спектр репортеров с различными характеристиками, подходящих для решения конкретных задач.

Целентеразин-зависимая люцифераза из морских копепод *Metridia longa* катализирует простую реакцию окисления субстрата с излучением света без дополнительных кофакторов. Обладая небольшим размером, высокой яркостью и термостабильностью люцифераза *Metridia* была успешно использована как репортерный белок *in vitro* и *in vivo* [1]. Одна из изоформ люциферазы *Metridia*, MLuc7 размером всего 168 аминокислотных остатков (16.5 кДа) имеет наименьшие размеры среди природных люцифераз, что позволяет минимизировать метаболическую нагрузку на клетку-хозяина в исследованиях *in vivo*, уменьшить стерические и функциональные интерференции в случае использования репортера в составе фьюжин-белков.

Целью нашей работы было исследование возможности дальнейшего уменьшения размеров люциферазы MLuc7 как для исследования структуры каталитического домена, так и для получения полностью функционального биолюминесцентного репортерного белка с минимально возможными размерами. Для этого была получена серия делеционных мутантов MLuc7 люциферазы укороченных с N- и C-конца путём создания рекомбинантных плазмид с последующей трансформацией в клетки *E. coli*. Предварительная характеристика делеционных мутантов была выполнена при измерении активности грубых лизатов бактериальных клеток. Варианты ML7-G28 (укорочен на 28 аминокислот с N-конца) и ML7-28G4C (укорочен на 28 аминокислот с N-конца и 4 аминокислоты с C-конца) были отобраны как наиболее перспективные для практического применения, так как сохраняют высокую биолюминесцентную активность и термостабильность. Процедуры рефолдинга и очистки из клеток *E. coli* рекомбинантных укороченных люцифераз были оптимизированы для получения высокочистых препаратов, которые далее были использованы для характеристики их люминесцентных свойств. Показано, что делеционные мутанты ML7-G28, укороченный на 28 аминокислот, и ML7-28G4C, укороченный на 32 аминокислоты, могут оказаться перспективными биолюминесцентными репортерами, одними из наименьших на сегодняшний момент.

Литература:

[1] Markova S.V., Larionova M.D., Vysotski E.S. Shining light on the secreted luciferases of marine copepods: current knowledge and applications. *Photochem Photobiol*, 2019, May; 95(3):705-721.

Стабильные многокомпонентные иммобилизованные препараты на основе бутирилхолинэстеразы для ингибиторного анализа

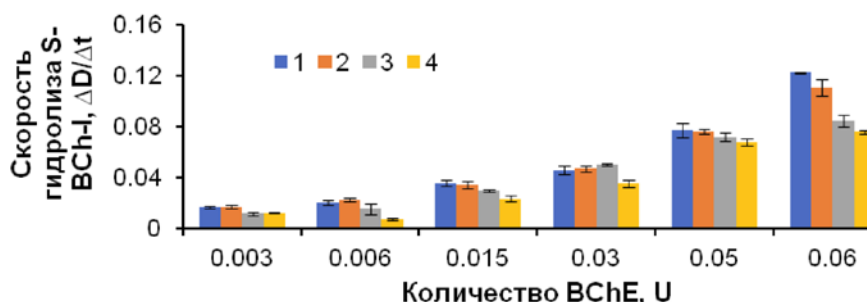
Лоншакова-Мукина Виктория Ивановна

Сибирский федеральный университет

Бутирилхолинэстераза (BChE) фермент из группы эстераз, типа гидролаз, активно применяется в ингибиторном анализе поскольку позволяет на широком круге материалов изучить вопросы субстрат-ингибиторной специфичности, а также влияние иммобилизации и условий измерения на аналитические характеристики ферментативных биосенсоров, применяемых для контроля остаточных количеств фосфорорганических пестицидов в различных средах. Для решения проблемы недостаточной стабильности BChE при её использовании и хранении используют различные методы иммобилизации. Целью работы является получение стабильных ферментных препаратов для ингибиторного анализа путем совместной иммобилизации компонентов ферментативных реакций в гели природных полимеров крахмала и желатина.

Активность BChE определяли по методу Элмана. По изменению оптической плотности во времени вычисляли скорость гидролиза субстрата BChE – S-бутирилтиохолина йодистого (S-BChI), по полученным результатам делали вывод об активности фермента. Определение оптической плотности образцов проводили на спектрофотометре UV-2700 (Shimadzu, Япония) на длине волны 412 нм

Установлено что, иммобилизация BChE совместно с индикатором на тиоловую группу в крахмальный или желатиновый гель обеспечивает выход активности фермента не менее 62% по сравнению с растворимой BChE (Рис.1).



*Рис. 1. – Зависимость скорости гидролиза S-BCh-I от количества BChE;
1 – растворимая BChE, 2 – BChE, иммобилизованная в крахмальный гель,
3 – BChE, иммобилизованная в крахмальный гель совместно с индикатором,
4 – BChE, иммобилизованная в желатиновый гель совместно с индикатором.*

Оптимизирован состав иммобилизованного препарата и условия иммобилизации, обеспечивающие высокую активность и стабильность препаратов при хранении и использовании в сочетании с чувствительностью к воздействию токсикантов и хорошей воспроизводимостью результатов. Показано, что препарат, на основе BChE, иммобилизованной совместно с индикатором на тиоловую группу в крахмальный и желатиновый гели, сохраняет активность более 300 суток. Большую чувствительность к действию веществ антихолинэстеразного действия имеют ферментные препараты на основе крахмального геля. Для малатиона полученное значение IC₅₀ составляет 8 мкг/л.

Разработана методика для определения веществ антихолинэстеразного действия в различных образцах с использованием многокомпонентного препарата на основе бутирилхолинэстеразы, иммобилизованной совместно с индикатором тиоловых групп в крахмальный гель.

Рост бактерий *Cupriavidus necator* В-10646 и синтез полигидроксиалканоатов на различных растительных маслах

Сапожникова Кристина Юрьевна

Институт биофизики ФИЦ КНЦ СО РАН

Полигидроксиалканоаты (ПГА) – полимеры гидроксипроизводных жирных кислот, синтезируемые микроорганизмами, представляют собой конкурентоспособную альтернативу синтетическим пластикам, но их производство – дорогостоящий процесс [1]. Одним из способов снижения стоимости ПГА является использование недорогих источников углерода, таких как растительные масла [2].

В качестве источников углерода использовали подсолнечное, рыжиковое и пальмовое масло. Культивирование бактерий в течение 72 ч на пальмовом масле привело к наибольшей сухой массе клеток (6,2 г/л) и содержанию внутриклеточного полимера (63%). Наименьшие значения были получены в эксперименте с подсолнечным маслом: 3,9 г/л биомассы, содержащей 29 % внутриклеточного полимера. В процессе роста бактерий показано избирательное и неравномерное потребление жирных кислот в составе масел.

Для увеличения доступности субстрата два типа эмульгаторов были протестированы – Твин-80 и кокоил глутамат натрия. Выходы биомассы и полимера для пальмового и растительного масел увеличились до 8-8.2 г/л и 5,2-5,4 г/л, а содержание полимера достигло 79-83% и 50-55% соответственно, в случае с рыжиковым маслом показатели практически не изменились (рис. 1).

Показано, что на растительных маслах бактерии синтезируют трехкомпонентный сополимер, состоящий из 3-гидроксибутирата (97-99 мол.%), 3-гидроксивалерата (0.9-1.9 мол.%) и 3-гидроксигексаноата (0.4-1.3 мол.%). Исследованы молекулярно-массовые характеристики и температурные свойства синтезированного полимера.

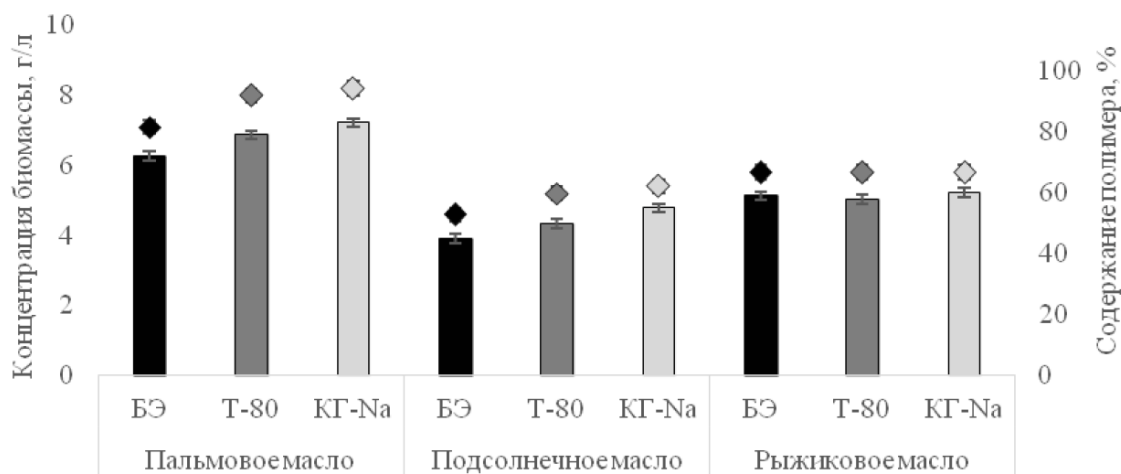


Рис. 1. Выходы бактериальной биомассы и ПГА при росте в течение 72 часов бактерий *Cupriavidus necator* В-10646 на различных маслах с добавлением эмульгаторов.

◆ - концентрация биомассы бактерий, ■ - содержание полимера;

БЭ – без обработки эмульгаторами, Т-80 – Твин-80, КГ-Na – кокоил глутамат натрия.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта «Агропрепараты нового поколения: стратегия конструирования и реализация» (Соглашение № 074-02-2018-328). Автор выражает благодарность соавторам работы.

Литература:

- [1] Koller M., Maršálek L., de Sousa Dias M. M. et al., *New biotechnology*, V.37, PP 24-38 (2017).
- [2] Fukui T., Doi Y., *Applied Microbiology and Biotechnology*, V.49, PP 333-336 (1998).

Влияние диффузии на кинетику реакции, катализируемой бактериальной люциферазой

Лисица Альберт Евгеньевич

Сибирский федеральный университет

Изучение особенностей работы ферментов в условиях, приближенных к внутриклеточным, является важной задачей на пути к пониманию функционирования живых клеток как устойчивых саморегулирующихся систем. Одним из следствий неоднородности микроокружения ферментов в клетке является замедление диффузии компонентов реакции, что, с одной стороны, воздействует на скорость биохимических реакций, а с другой стороны, в некоторых случаях имеет важное функциональное значение. В данной работе было исследовано влияние замедленной диффузии на кинетику реакции, катализируемой бактериальной люциферазой, в вязких средах с различными концентрациями глицерина и сахарозы.

В работе использовали рекомбинантную люциферазу бактерий *P. leiognathi*, полученную в Институте биофизики СО РАН (Красноярск). Кинетику биолюминесцентной реакции в нестационарном режиме регистрировали методом остановленного потока на анализаторе SX-20 (Applied Photophysics). Константы скоростей отдельных стадий реакции определили при помощи математической модели, разработанной в программном пакете SciLab в лаборатории теоретической биофизики Института биофизики СО РАН (Красноярск). Молекулярно-динамические расчеты структуры люциферазы в воде и в окружении глицерина и сахарозы были проведены с помощью программного пакета GROMACS 5.1.4.

Были получены кинетические кривые биолюминесценции в реакции, катализируемой люциферазой *P. leiognathi*, в присутствии 10–40 вес.% глицерина и сахарозы. Установлено, что помимо замедления кинетики вследствие вязкости среды, играет роль природа косольвента: глицерин снижает квантовый выход и максимум интенсивности с ростом концентрации, в то время как для сахарозы они остаются близки к контрольному уровню. При помощи математической модели было проанализировано изменение скоростей отдельных стадий реакции в вязких средах. Результаты моделирования показали, что процесс связывания восстановленного флавиномононуклеотида является диффузионно-контролируемым, в то время как связывание кислорода не демонстрирует зависимости от вязкости, что может быть связано с высокой скоростью этой стадии. Разница в эффекте двух исследованных сред была обнаружена во влиянии на скорость формирования возбужденного интермедиата реакции: в присутствии сахарозы она увеличивается, в то время как в присутствии глицерина – остается такой же, как в буфере, или уменьшается.

Молекулярно-динамические расчеты позволили установить возможные механизмы влияния используемых косольвентов на биолюминесцентную реакцию. Расчеты показали, что молекулы глицерина, в отличие от сахарозы, проникают в активный центр фермента, хоть и не формируют постоянных водородных связей с аминокислотными остатками. Также интересным результатом является то, что при высоких концентрациях сахарозы происходит изменение предпочтительной конформации функционально важного остатка αGlu175 , что может способствовать формированию конформации активного центра, обладающей более высокой каталитической активностью.

Таким образом, установлено, что помимо замедления диффузионно-контролируемых стадий реакции, катализируемой бактериальной люциферазой, наблюдается специфический эффект сред на каталитическую константу.

Изменчивость пыльцы внутривидовых форм и морфотипов лиственницы сибирской юга Сибири

Аверьянов Алексей Сергеевич

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

Впервые для лиственницы сибирской (*Larix sibirica* Ledeb.) определены основные морфометрические параметры пыльцы – экваториальный диаметр (длина) и полярная ось (высота), позволяющие адекватно оценить размер и форму пыльцевых зерен. Объекты исследования представляют естественные популяции и искусственные насаждения *L. sibirica*, произрастающие в экологически контрастных условиях Южной Сибири – степных, предгорных, болотных (Ширинский р-н Республики Хакасия) и подтаежных (район Академгородка г. Красноярск). Пыльца собрана с типичных деревьев, а также внутривидовых форм и морфотипов, дифференцированных по окраске женских шишек (красношишечные и их вариации, зеленошишечные) и их размерам (мелкошишечные, крупношишечные), с учетом типа половой конституции (мужской сексуализации), возраста, наличия поврежденности лиственничной почковой галлицей. Установлено, что во всех исследованных происхождениях *L. sibirica* юга Сибири пыльца имеет крупный размер и преобладающую почти-сплюснутую форму. Во всех образцах обнаружена пыльца с аномалиями развития (тератоморфная). В основном аномалии представлены плазмоллизом цитоплазмы пыльцевых зерен. Иногда наблюдались недоразвитие и деформация пыльцы, разрывы экзины, единично – двойные микрогаметофиты и аномально крупные пыльцевые зерна. Появление тератоморфных пыльцевых зерен может быть обусловлено влиянием ряда неблагоприятных погодных и экологических факторов.

Специфическим признаком красношишечных форм деревьев *L. sibirica* является формирование более крупной пыльцы и меньшее число аномалий ее развития по сравнению с зеленошишечной формой, что может играть адаптивную роль, учитывая факт преимущественного произрастания особей с красной окраской кроющих чешуй женских шишек в Сибири, в частности, в ее южных районах. Особенностью форм *L. sibirica* с крупными шишками является продуцирование более крупной пыльцы по сравнению с особями с мелкими и обычными по размеру шишками. В некоторых случаях у крупношишечных и мелкошишечных форм деревьев изменяется соотношение классов формы пыльцевых зерен. Деревья молодого возраста и мужского типа сексуализации, характеризуются более мелкой пыльцой, чем обычные экземпляры, но не отличаются от них по количеству тератоморфных пыльцевых зерен. Несмотря на то, что заселение *L. sibirica* лиственничной почковой галлицей не оказывает влияния на размер пыльцевых зерен и число аномалий их развития, у пораженного дерева выявлено изменение соотношения классов формы пыльцы. Наиболее мелкие пыльцевые зерна и максимально высокая доля тератоморфной пыльцы выявлены у деревьев из болотного происхождения, что связано с экстремальным температурным режимом их произрастания на торфяных криоземах.

Таким образом, можно заключить, что специфические особенности морфологии пыльцы лиственницы сибирской – ее размер, форма, соотношение нормально развитых и тератоморфных пыльцевых зерен – не только диагностируют формовые различия деревьев, но и отражают условия их произрастания в разнообразных экотопах юга Сибири.

Благодарности. Автор выражает благодарность д.б.н. Седельниковой Т.С., д.б.н. Пименову А.В. за курирование данной работы, д.б.н. Третьяковой И.Н. – за консультации.

Специфика формирования фитомассы в разнотных сосновых молодняках Красноярской лесостепи

Арясов Владимир Евгеньевич

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

Для обеспечения устойчивого и сбалансированного развития лесного комплекса Сибири необходимо сохранение ресурсного потенциала и расширение экосистемных услуг, генерируемых лесами [1]. В этой связи большой интерес представляет изучение специфики роста насаждений различной структуры [2].

Цель: выявить особенности формирования фитомассы сосновых молодняков разной густоты. Объект: насаждения сосны обыкновенной (*Pinus sylvestris* L.), сформировавшиеся естественным путем на бывших сельскохозяйственных угодьях.

Результаты исследований свидетельствуют о том, что структура формирующегося прироста различных компонентов фитомассы сосновых молодняков обусловлена густотой ценозов. С увеличением густоты снижается относительная величина прироста корневой массы, но возрастает доля прироста массы ветвей, хвои и стволов (рис. 1А). В абсолютных величинах, прирост всех компонентов фитомассы на пробной площади с густотой 25600 шт./га (ПП2А) всегда выше, чем на пробной площади с густотой 10800 шт./га (ПП2Б). Так, по массе корней в первом случае он оказался в 2, а по остальным фракциям в 3,5-4 раза выше, чем во втором (рис. 1Б).

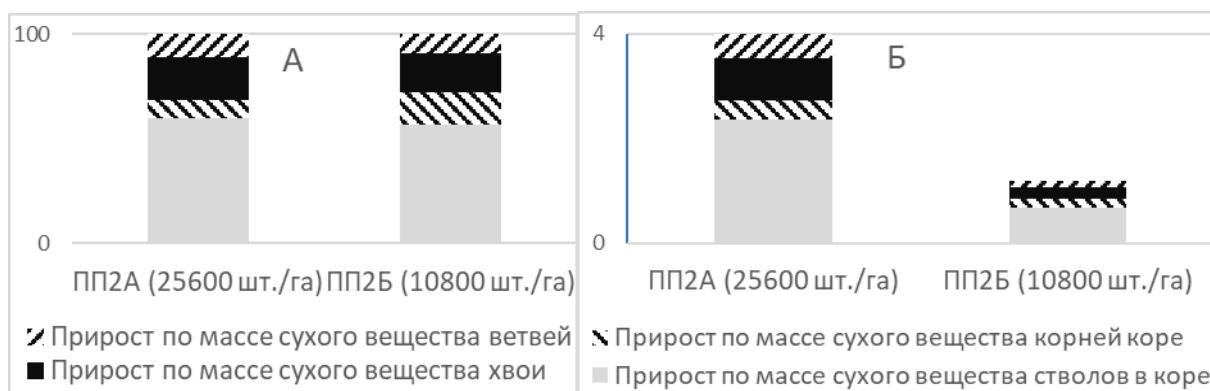


Рис. 1 Средние значения распределения прироста между различными компонентами фитомассы за период с 2006 по 2008 год, А- в %, Б – в т./га.

Таким образом, показано, что густота является важнейшей характеристикой ценозов, которая обуславливает биологические механизмы внутренней регуляции, процессов роста и формирования различных компонентов фитомассы.

Литература:

- [1]. Соколов В.А, Онучин А.А., Втюрина О.П., Соколова Н. В, Кучмистов А.А. О стратегии развития лесного комплекса Красноярского края // Лесная таксация и лесоустройство. 2011. №1-2 (4546). С. 144-153.
- [2]. Онучин А.А., Маркова И.И., Павлов И.Н. Влияние рубок ухода на радиальный прирост стволов и формирование сосновых молодняков // Хвойные бореальной зоны. 2011. Т.24. № 3-4. С. 257-265.

Метаногенная активность и структура сообществ архей в донных отложениях реки Енисей

Децура Анна Евгеньевна

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

Разнообразие и активность метаногенных и метанотрофных архей в речных донных отложениях являются важными аспектами изучения процессов биогеохимической трансформации и переноса углерода и биогенных соединений из наземных экосистем в водные. Пресноводные донные отложения являются местом активного производства метана, однако исследования концентрации и эмиссии CH_4 приурочены лишь к эстуариям крупнейших рек Сибири, а одной из наименее исследованных рек арктического бассейна остается р. Енисей [1]. Цель работы заключалась в использовании метагеномного анализа для реконструкции биогеохимических процессов метанообразования в донных отложениях р. Енисей. Для проведения исследования в ходе экспедиционных работ, проведенных сотрудниками ИЛ СО РАН, было отобрано 18 образцов донных отложений по течению реки Енисей в районе от 56.0° с.ш. до 67.4° с.ш.

Для выявления метаногенного потенциала донных отложений были проведены инкубационные эксперименты, где измерялись концентрации CO_2 и CH_4 , а также величины $\delta^{13}\text{C}-\text{CH}_4$ и $\delta^{13}\text{C}-\text{CO}_2$ (Picarro 2201-i, США). Для определения структуры сообщества архей производился анализ операционных таксономических единиц (ОТЕ) полученных при секвенировании области V4 гена 16S рНК.

В результате метагеномного анализа было обнаружено 52 различных вида бактерий и архей, среди которых метаногенные археи составляли всего 0.5-0.6% от общего числа последовательностей в ампликонных библиотеках (в зависимости от образца). В структуре метаногенного сообщества архей донных отложений р. Енисей доминировали археи, принадлежащие к родам *Methanosarcina*, *Methanosaeta* и *Methanoregula*. ОТЕ данных архей преобладали в отложениях, находящихся в промежутке реки с 56° с.ш. по 61° с.ш. На этом участке речного русла значения величины $\delta^{13}\text{C}-\text{CH}_4$ увеличились с -54 до -43‰ VPDB, что свидетельствовало о метилотрофном и ацетокластическом метаногенезе, показатели выделения CH_4 при этом были наибольшими. На участке реки между 61° с.ш. и 64° с.ш. резко (в 5-190 раз) уменьшилось количество ОТЕ метаногенных архей, которое сопровождалось резким снижением метаногенной активности и величины $\delta^{13}\text{C}-\text{CH}_4$ до -60 - -80‰ VPDB, что указывало на переход к гидрогенотрофному пути производства CH_4 . На ряду с этим, на данном отрезке реки наблюдалось возрастание числа ОТЕ анаэробных метанотрофов, принадлежащих к *Candidatus Methanoperedens*. Далее к северу по течению (64-67° с.ш.) наблюдалось обогащение $\delta^{13}\text{C}-\text{CH}_4$ и увеличение количества метаногенных архей, принадлежавших родам *Methanosarcina* и *Methanoregula*.

Таким образом, наибольшую метаногенную активность показывали сообщества донных отложений, в которых разнообразие представителей архей было наибольшим, с количественным преобладанием в составе *Methanosarcina spp.*, использующих все известные метаболические пути метаногенеза.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 18-05-60203 Арктика. Автор выражает благодарность своему научному руководителю Евграфовой С.Ю., а также Прокушкину А.С., Звереву А.А. и Абакумову Е.В. за неоценимую помощь в отборе и анализе образцов и обсуждении полученных результатов.

Литература:

[1] Shakhova N. et al. The East Siberian Arctic Shelf: towards further assessment of permafrost-related methane fluxes and role of sea ice //Philosophical Transactions of the Royal Society A, V. 373, №. 2052, PP. 1-13 (2015).

Оптимальная плотность поселения полиграфа уссурийского (*Polygraphus proximus* Blandford)

Ефременко Антон Андреевич, Демидко Денис Александрович
Институт леса им. В.Н. Сукачева ФИЦ КНЦ СО РАН

Уссурийский полиграф *Polygraphus proximus* Blandf. (Coleoptera, Curculionidae, Scolytinae) (далее УП) – аборигенный вид для Дальнего Востока, который был непредумышленно завезен в Сибирь и Европейскую часть России. Короед в тандеме с офиостомовым грибом *Grosmantia aoshimae* (Охтака, Masuya & Yamaoka) достаточно быстро освоился в инвазионном ареале, где начали происходить вспышки его массового размножения в насаждениях с преобладанием пихты сибирской *Abies sibirica* Ledeb.

Особенностью биологии насекомых-ксилофагов, в том числе короедов, личинки которых на определенной стадии развития питаются флоэмой ствола дерева-хозяина, служит конечность кормового запаса, так как личинки не могут покинуть ствол. Перенаселение их кормовых объектов приведёт к дефициту корма и повышенной смертности. При свойственном короедам массовом нападении на дерево должен быть сохранен баланс между количеством поселившихся семей и их продуктивностью – т.е. в идеале должна быть достигнута некая оптимальная плотность поселения, при которой продукция максимальна. Нами сделана экспериментальная попытка определить эту плотность.

Сравнительно легко учесть количество жуков как родительского (по количеству гнёзд), так и дочернего (непосредственно по жукам или по выходным отверстиям на коре) поколений. Благодаря этому, можно исследовать зависимость одного из ключевых показателей успеха размножения – продукции (количество молодых жуков на дм^2 поверхности ствола) – от плотности поселения (ПП) (количество жуков родительского поколения на дм^2 поверхности ствола).

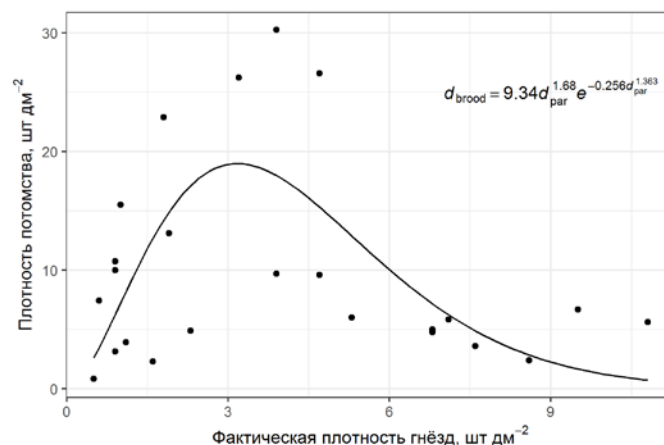


Рис. 1. Зависимость продукции *P. proximus* от плотности его поселения.

Полученные результаты показывают (рисунок 1), как меняется продукция молодых жуков при увеличении плотности гнёзд. Видно, что оптимальная ПП находится в пределах 4–5 гнёзд/ дм^2 . Оказалось, что с высокой плотностью поселения свыше 6 семей дм^2 снижается продукция, из-за высокой конкуренции и нехватки кормовых ресурсов, а у участков с плотностью ниже 2 семей на дм^2 , продукция невысока из-за неполного освоения кормовых ресурсов. Зависимость коэффициента размножения и плотности поселения описывается отрицательной экспоненциальной функцией. При этом коэффициент размножения при оптимальной плотности поселения крайне невелик: 0,8 – 2,2. Ещё один важный вывод из полученных результатов – высокая изменчивость продукции в области оптимума ПП, которую можно объяснить изменчивостью пригодности кормовых объектов для развития полиграфа уссурийского.

Эффект сильных дождей на почвенную эмиссию CO₂ в бореальных экосистемах Средней Сибири

Махныкина Анастасия Владимировна

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

Бореальные леса являясь стоком атмосферного CO₂ представляют собой важный регион исследования, в значительной мере реагирующий на текущие климатические изменения [3]. Отмечено, что в почвах бореальных лесов находится в четыре раза больше углерода, чем сосредоточено во всей надземной фитомассе [2]. Однако на процесс связывания углерода влияет ряд факторов, естественного и антропогенного происхождения, которые зачастую приводят к дополнительному выделению CO₂ из лесов бореальной зоны. На сегодняшний день также участились экстремальные погодные явления, ливневые осадки или же наоборот засухи в течение летнего периода [1]. Их влияние на естественные динамические процессы в экосистемах, в том числе почвенную эмиссию CO₂ вызывает ряд вопросов. Поэтому целью данной работы было оценить эффект сильных дождей на эмиссионные потоки CO₂ с поверхности почв в бореальных экосистемах Средней Сибири.

Объектами исследования стали сосняки лишайниковые, сформированные на песчаных подзолах, расположенные на территории Сымско-Дубческого междуречья Средней Сибири. В качестве сильных дождей мы определили атмосферные осадки более 10 мм за сутки.

Таблица 1. Вклад почвенной эмиссии после сильных дождей в общий эмиссионный поток с поверхности почвы

Месяц	Поток, %
Июнь	45
Июль	48
Август	28
Сентябрь	65
Среднее за сезон	47

В ходе работы было установлено, что в течение вегетационного сезона сильные атмосферные осадки могут вносить вклад в формирование почвенной эмиссии в различной степени. Данный факт зависит от ряда внешних условий: температура, напочвенный покров, активность почвенной микробиоты и другое. Таким образом, проанализировав полученные результаты можно заключить, что сильные дожди приводят к быстрому импульсному ответу со стороны почвенной эмиссии и как следствие выбросу в атмосферу дополнительного количества CO₂ из почвы.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 18-34-00736. Благодарность соавторам работы, а также сотрудникам стационара «Станция высотной мачты ZOTTO» за неоценимую помощь в проведении исследования.

Литература:

- [1] Lee X., Wu H.J., Sigler J., et al. Rapid and transient response of soil respiration to rain // Glob. Change Biol., 2004. Vol. 10(6). P. 1017–1026.
- [2] Mukhortova L., Schepaschenko D., Shvidenko A., McCallum I., Kraxner F. 2015. Soil contribution to carbon budget of Russian forests // Agricultural and Forest Meteorology, 2015. Vol. 200. P. 97–108.
- [3] Pan, Y., Birdsey, R., Fang, J., et al., 2011. A large and persistent carbon sink in the world's forests // Science, 2011. № 33. P. 988–993.

Использование микромицетов рода *Trichoderma* в выращивании сеянцев сосны обыкновенной

Пашкева Оксана Эриковна

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

Для выращивания посадочного материала одними из наиболее часто используемых биологических антагонистов являются грибы р. *Trichoderma*, поскольку способны к сверхпаразитизму и продуцированию различных биологически активных веществ [1].

В связи с чем, целью исследования было сравнение влияния предпосевной обработки семян сосны обыкновенной биопрепаратами на основе грибов р. *Trichoderma* на качество и сохранность сеянцев, а также на биогенность почвы под ними, в мелкоделяночных опытах и производственных посевах (в лесопитомнике) Казачинского лесничества (Красноярский край).

Мелкоделяночный опыт закладывали на посевном отделении ИЛ СО РАН: на опытных участках высевали семена сосны обыкновенной по следующей схеме: *T. harzianum* (Т1), *T. lignorum* (Т2), *T. longibrachiatum* (Т3), Контроль (Н₂О), *T. harzianum*+*T. lignorum* (Т1+Т2), *T. lignorum*+*T. longibrachiatum* (Т2+Т3), *T. longibrachiatum*+*T. harzianum* (Т1+Т3). Перед посевом семена замачивали в 0,5% растворе КМnО₄ на 2,5 ч, высушивали и обрабатывали биопрепаратами в виде водных суспензий грибов (титр 10⁸⁻⁹ спор / мл) (3 ч.). В качестве контроля семена сосны замачивали на то же время в водопроводной воде.

Производственные посева семян сосны проводили в лесном питомнике Казачинского лесничества, вблизи села Мокрушинское. Для посевов были отобраны наиболее эффективные варианты биопрепаратов (Т1+Т2). Перед снегованием семена сосны были обработаны фунгицидом "Бункер" (действующее вещество – тебуконозол), а перед посевом – водными суспензиями микромицетов, как описано выше. Посевные площади состояли из контрольных (без биопрепаратов) и опытных (с биопрепаратами) гряд. На исследуемых участках вели учет взошедших и погибших сеянцев, почву исследовали на биологическую и ферментативную активность, сеянцы отбирали на морфометрические исследования.

Результаты мелкоделяночного опыта показали, что все варианты биопрепаратов увеличивали всхожесть семян и сохранность сеянцев, по сравнению с контролем в 1,5-7 раз, особенно Т1 и Т1+Т2. Обработка биопрепаратами также способствовала повышению биогенности почвы за счет увеличения содержания микробной биомассы и ряда ферментов (инвертаза фосфатаза). Результаты производственных посевов в питомнике показали, что несмотря на некоторый ингибирующий эффект от одновременной обработки семян фунгицидом и биопрепаратом, они способны повысить всхожесть семян и улучшить качество посадочного материала по сравнению с контролем.

Таким образом, созданные в лаборатории микробиологии и экологической биотехнологии ИЛ СО РАН биопрепараты (на основе грибов рода *Trichoderma* Pers.) для оптимизации лесовыращивания в искусственных фитоценозах подтвердили свою эффективность не только в мелкоделяночных опытах, но и в производственных посевах. Предпосевная обработка семян сосны обыкновенной биопрепаратами способствовала повышению грунтовой всхожести семян и качества сеянцев. Полученные результаты свидетельствуют, что разработанные биопрепараты могут быть рекомендованы при искусственном лесоразведении для получения качественного посадочного материала.

Благодарность соавторам работы И.Д. Гродницкой, Г.Г. Поляковой, В.А. Сенашовой, Г.И. Антонову, Н.В. Пашеновой и А.Ю. Баглаеву

Литература:

[1] Попов Ф.А. Экологические основы биологического контроля фитопатогенов в защите растений от болезней // Известия академии аграрных наук Республики Беларусь. 1988. №3. С.61-64.

Кора Larix sibirica Ldb.: гигроскопичность, термический анализ и пиролиз

Петрунина Елена Александровна, Лоскутов Сергей Реджинальдович

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

В данном исследовании получен ряд физико-химических показателей коры (ритидома) лиственницы, которые могут быть использованы для создания перспективных технологий её переработки в востребованные продукты.

Анализ изотерм сорбции воды корой (при $t = 20 \pm 1.5$ °С) осуществлен с помощью уравнений Гугенгейма-Андерсона-де Бура (ГАБ), Цимма-Лундберга (ЦЛ), теории объемного заполнения микропор (ТОЗМ) и Флори-Хаггинса (ФХ) – табл. 1 [1].

Таблица 1. Показатели сорбционных свойств коры лиственницы

ГАБ: емкость монослоя u_m , г H ₂ O/г СВ; удельная поверхность $S_{уд}$, м ² /г	0.071; 256.4
ЦЛ: образования водного кластера при u , г H ₂ O/г СВ	0.088
ТОЗМ: характеристическая энергия сорбции E_a , Дж/моль	972.6
ФХ: зона гидрофильности по параметру Флори-Хаггинса χ_1 (при $h < 0.60$)	- 5.0 < χ_1 < - 0.5
h – относительное давление водяного пара; $\chi_1 \cong -5.0$ отвечает высокой гидрофильностью материала. $E_a < 1$ кДж/моль свидетельствует об отсутствии или очень малых внутренних механических напряжениях в структуре коры.	

С помощью методов термогравиметрии (ТГ/ДТГ) и дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК) определены параметры термостабильности коры и энтальпия термодеструкции при программируемом нагреве в атмосфере воздуха.

Установлено, что термостабильность коры и энергия активации термического разложения [2], довольно высокие по сравнению с другими натуральными лигниноцеллюлозными материалами. Процесс термодеструкции «фракционирован», на что указывает зависимость $f(t) = \partial^4(\text{ДТГ})/\partial t^4$ и профиль потери массы во всем температурном интервале термического разложения.

В экспериментах по ДСК коры установлена невысокая теплота испарения влаги (91.4 Дж/г) и приемлемая, с точки зрения использования коры в качестве биотоплива, интегральная энтальпия сгорания (окисления) – -15.1 кДж/г.

В результате флэш-пиролиза коры лиственницы идентифицировано 78 индивидуальных соединений с помощью программных средств аналитической системы хромато-масс-спектрометрии с функцией пиролиза GCMS-QP2020 («Shimadzu»).

Установлен ряд продуктов пиролиза применяемых в производстве синтетической резины, пестицидов; используемых в качестве ароматизаторов в парфюмерии и пищевой промышленности; являющихся прекурсорами для создания композиций в парфюмерии и фармацевтике и т.п.

Гигроскопические и термические свойства коры лиственницы, результаты пиролитической хромато-масс-спектрометрии указывают на целесообразность её индустриального использования для производства теплоизоляционных плитных материалов, биотоплива (пеллет) и в качестве лесохимического сырья в производстве готовых товарных продуктов и соединений-прекурсоров, используемых в различных отраслях промышленности.

Литература:

[1] Лоскутов С.Р., Взаимодействие древесины с физически активными низкомолекулярными веществами, 171 (2004).

[2] Mamleev V., Dourbigot S., Le Bras M., Lefebvre J., J. Therm. Anal. Calorim., V.78, PP.1009-1027 (2004).

Нетто-газообмен CO₂ широкораспространенных мхов и лишайников таежных лесов

Полосухина Дарья Александровна

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

Сибирский федеральный университет

Актуальной задачей современных биогеохимических исследований продолжают оставаться количественные оценки диоксида углерода бореальных экосистем в виду происходящих климатических изменений [1]. В северных лесах бриофиты и лишайники выступают доминантами в живом напочвенном покрове и могут обеспечивать до 50 % валового обмена CO₂ [2]. Фотосинтетическая деятельность пойкилогидритов связана с абиотическими факторами среды и значительно меняется в зависимости от условий микрообитания [3]. Адаптация к потерям влаги и способность к быстрой регидратации у многих видов происходит благодаря отсутствию устьиц и кутикулы, что в свою очередь определяет свободный обмен растворами и газами через клеточные стенки [4].

Целью данной работы являлось количественное определение интенсивности фотосинтетической деятельности доминантных видов мхов и лишайников в ходе полевых экспериментов при изменении их влагосодержания. Исследования выполнялись на Средне-Енисейском стационаре Института леса им. В.Н. Сукачева СО РАН (Международная обсерватория ZOTTO, 60° с.ш., 89° в.д.). Объектами исследования были доминанты мохово-лишайникового яруса: *Cladonia stellaris* O., *Cladonia rangiferina* L., *Cetraria islandica* L., *Pleurozium schreberi* W. ex V., *Hylocomium splendens* H., *Aulacomnium palustre* H. Измерения обменных потоков CO₂ производилось ИК газоанализатором (Li-cor 8100A, (США) с использованием световой камеры (Li-Cor 8100-104C, (США)). Эксперименты проводились в середине вегетационного сезона 2020 г. Нетто-газообмен CO₂ определялись при полевой влажности (исходной), 100% от полевой влагоемкости и далее последовательно при достижении 75, 50, 25, 5 % влажности талломов. По окончании экспериментов исследуемые образцы высушивались до абсолютно сухой массы при 105 °С для дальнейшего пересчета величин нетто-газообмена CO₂.

Согласно полученным данным в середине вегетационного сезона нетто-газообмен CO₂ у лишайников, как правило, отрицательный, что свидетельствует о преимущественном поглощении диоксида углерода из атмосферы. Мхи, наоборот, характеризовались значительным выделением CO₂. При увеличении влагоемкости талломов мхов и лишайников наблюдался рост выделения CO₂. Так, при увлажнении до 100% влагоемкости у мхов эмиссионный поток CO₂ достигал 0.272±0.040 мкмоль/г/с, а у лишайников – 0.072±0.003 мкмоль/г/с. При наблюдаемых в полевых условиях значениях влажности талломов (30-50%) чистый газообмен лишайника *C. stellaris* варьировал от -0,1 до 0,01 мкмоль/г/с, мха *P. schreberi* – от -0,01 до 0,22 мкмоль/г/с. При этом поглощение CO₂ при прямых измерениях фотосинтеза, проведенных в 2018 году, составило 0.204±0.020 мкмоль/г/с у *C. stellaris*, а у мха *P. schreberi* – 0.323±0.025 мкмоль/г/с. Для выяснения причин значительных эмиссионных потоков диоксида углерода у исследованных видов мхов и лишайников при использовании световой камеры изучение нетто-газообмена CO₂ мхов и лишайников будет продолжено в 2021 г.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ №18-05-60203. Докладчик благодарит соавторов работы Прокушкина А.С. и Масыгина О.В.. Авторы признательны за помощь в организации полевых исследований сотрудникам лаборатории биогеохимических циклов лесных экосистем Института леса им. В.Н. Сукачева СО РАН.

Литература:

- [1] Bianchi T.S., Biogeochemistry, <https://doi.org/10.1007/s10533-020-00708-0> (2020).
- [2] Goulden M. L., Crill P. M., Tree Physiology, V.17 (8), PP. 537–542, (1997).
- [3] Skre O., Oechel W.C., Oecologia, V. 48.1, PP. 50-59, (1981).
- [4] Шпак О.В., Шмакова Н.Ю., Лукьянова Л.М., Ботанический журнал, Т. 94, № 6., С. 866-876, (2009).

Многолетние изменения климата на территории криолитозоны Средней Сибири

Прысов Дмитрий Александрович

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

Материалами для анализа климатических трендов на исследуемой территории Средней Сибири служили значения среднемесячных и среднегодовых температур воздуха за период с 1952 по 2012 год и годовых сумм осадков за 1966-2012 годы на метеорологических станциях, имеющих наиболее длинные ряды наблюдений. С учетом этого были выбраны двенадцать метеостанций: Хатанга, Волочанка, Дудинка, Игарка, Агата, Янов Стан, Туруханск, Тура, Верхнеимбатск, Байкит, Бор и Ванавара.

Анализ линейных трендов осредненных годовых температур приземного воздуха за 1952-2012 годы показал, что в районе исследований за этот период наблюдалась устойчивая тенденция к повышению температуры воздуха от 0,26 до 0,36 °С за десять лет. Максимальные значения температурных трендов (0,33-0,36 °С/10 лет) характерны для более северных территорий. Наиболее интенсивно увеличение температуры происходит в северо-восточной части полуострова Таймыр, что подтверждают наибольшие по величине коэффициенты линейного тренда [2]. Анализ линейных трендов температуры воздуха по сезонам показал, что максимальные тренды (0,45-0,62 °С/10 лет) наблюдаются весной, значительное потепление отмечено также и в осенние месяцы (0,24-0,50 °С/10 лет). Летом и зимой температурные тренды менее значительны, тем не менее, они отражают динамику потепления климата.

В отличие от температурных трендов коэффициенты трендов атмосферных осадков имеют не только значительные различия в абсолютных величинах, но различаются и по знаку. На пяти метеостанциях из двенадцати коэффициенты линейных трендов атмосферных осадков имеют знак минус, а для семи метеостанций характерны тенденция увеличения осадков, интенсивность увеличения годовой суммы осадков составляет 3,1-21,1 мм/10 лет [2].

1976 год выбран в качестве условного начала современного потепления. В среднем коэффициент линейного тренда среднегодовой температуры воздуха для исследуемых метеостанций за период с 1976 по 2012 год составил 0,40 °С/10 лет, полученные результаты согласуются с данными Росгидромета за этот же период (0,43 °С/10 лет) [1]. Максимальные значения среднегодовых температурных трендов (0,39-0,75 °С/10 лет) за этот период, как и за период с 1952 по 2012 год характерны для более северных метеостанций (Игарка, Дудинка, Волочанка и Хатанга). Интенсивность роста годовой суммы осадков на исследованной территории за 1976-2012 гг. составляет 2,7-28,6 мм/10 лет.

Таким образом, статистический анализ рядов среднегодовой температуры воздуха за 1952-2012 годы показал наличие на всех метеостанциях исследуемой территории статистически достоверных положительных трендов. Следует отметить, что за период с 1976 по 2012 год средний коэффициент линейного тренда для исследуемых метеостанций составил 0,40 °С/10 лет, что на 0,08 °С/10 лет, выше, чем за период с 1952 по 2012 год, что свидетельствует об усилении темпов потепления в последние годы.

Литература

[1] Доклад об особенностях климата на территории Российской Федерации за 2012 год. М.: Росгидромет, 2013. – 86 с.

[2] Прысов Д.А., Буренина Т.А., Мусохранова А.В., Кошкаров А.Д. Трансформация стока рек криолитозоны Средней Сибири при различных сценариях изменения лесистости и климата // Сибирский лесной журнал. 2021. № 1. С. 30-44.

Термогравиметрический анализ и дифференциальная сканирующая калориметрия древесины берёзы повислой (*Betula pendula roth.*) и берёзы извилистой (*Betula tortuosa ledeb.*)

Шемберг Антон Михайлович

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

Ценность некоторых видов берёз для деревообрабатывающей промышленности обеспечивается особой структурой годичных колец, а именно – их неповторимыми изгибами. На подобный свилеватый характер древесины влияет содержание углеводов в структуре древесных волокон [1, 2] – их избыточное содержание может повлиять на структуру годичных колец.

Цель данного исследования – выявить сходства и различия в содержании органических веществ древесины берёзы повислой (*Betula pendula* Roth. (Fagales: Betulaceae)) и берёзы извилистой (*Betula tortuosa* Ledeb. (Fagales: Betulaceae)), собранной на восточном макросклоне Кузнецкого Алатау (Орджоникидзевский район Республики Хакасия).

Термический анализ образцов древесины осуществляли с помощью методов термогравиметрии (ТГ/ДТГ) и дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК) с использованием прецизионных приборов TG 209 F1 и DSC 204 F1 (“NETZSCH”, Германия), соответственно.

Результаты проведённых анализов свидетельствуют о различиях в содержании органических веществ и влаги в древесине *B. pendula* и *B. tortuosa*. Термогравиметрический анализ древесины, формировавшейся на протяжении 10 лет (1996-2005 гг.) выявил более высокую скорость потери гигроскопической влаги, целлюлозы и лигнина в древесине *B. tortuosa*, чем в древесине *B. pendula*. Термогравиметрический анализ каждого отдельного года показал более высокую скорость потери гигроскопической влаги, целлюлозы и лигнина в древесине *B. pendula* по сравнению с древесиной *B. tortuosa* (1996 г., 1998-2000 гг., 2004 г). Данные результаты подтверждаются проведённым анализом дифференциальной сканирующей калориметрии. Это может свидетельствовать о более высоком содержании влаги, целлюлозы и лигнина в древесине *B. tortuosa* по сравнению с древесиной *B. pendula*.

Термогравиметрический анализ и дифференциальная сканирующая калориметрия выполнены на базе КРЦКП ФИЦ КНЦ СО РАН. Автор выражает благодарность своему научному руководителю Пименову Александру Владимировичу, доктору биологических наук, зав. Лабораторией фитоценологии и лесного ресурсоведения Института леса СО РАН за значимые замечания и ценные советы при оформлении данных тезисов и Тютьковой Екатерине Александровне, сотруднику лаборатории физико-химической биологии древесных растений Института леса СО РАН за помощь в получении данных для исследования.

Литература:

- [1] Николаева Н. Н., Новицкая Л. Л. Структурные особенности ассимиляционного аппарата и формирование аномальной древесины карельской берёзы // Лесоведение. 2007. № 1. – С. 70-73.
- [2] Шуляковская Т. А., Ильинова М. К., Карелина Т. В. Липидный состав тканей ствола *Betula pendula* и *B. pendula* var. *carelica* (Betulaceae) // Растительные ресурсы. 2014. Т. 50. № 1. – С. 94-104.

Индукция соматического эмбриогенеза у сосны обыкновенной (*Pinus sylvestris*) в культуре *in vitro*

Яровицкая Вера Васильевна

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

Технология соматического эмбриогенеза широко применяется при клонировании хвойных видов. В 2020г. были начаты исследования по индукции соматического эмбриогенеза у сосны обыкновенной в Институте леса им. В.Н. Сукачева. В качестве объектов были взяты 18 селекционно отобранных деревьев, произрастающих в дендрарии Института и стационаре «Погорельский бор» ИЛ СО РАН (38 км от г. Красноярска). В 3-й декаде июля 2020 г. с деревьев собирали женские шишки. В асептических условиях извлекали зародыши на предсемядольной стадии развития и инокулировали их на питательные среды DCR и ½LV. Среда дополняла регуляторами роста 2,4-дихлорфеноксиуксусной кислоты (2,4-Д) – 2 мг/л (Sigma-Aldrich, США) и 6-бензоаминопурина (6-БАП) – 1 мг/л (Sigma-Aldrich, США), мезоинозитом – 100 мг/л (Sigma-Aldrich, США), гидролизатом казеина – 500–1000 мг/л (Sigma-Aldrich, США), L-глутамином – 500 мг/л (Sigma-Aldrich, США), сахарозой 10 г/л (ЗАО «Омскреактив», Россия) и агаром – 7 г/л (Sigma-Aldrich, США). В качестве антиоксидантов применяли аскорбиновую кислоту (АК) (Sigma-Aldrich, США) в концентрации 400 мг/л. Культуры инокулировались в темноте при температуре 24±1°C. Пересадки на свежую питательную среду проводились каждые 14 суток.

Результаты исследований показали, из эксплантов (зиготических зародышей) сосны обыкновенной формировались эмбриогенные культуры и каллусы. Частота формирования каллуса составила 90% и эмбриогенных культур 19%. Каллус состоял из комочков плотной структуры, а эмбриогенные культуры формировались рыхлыми. Цитологический анализ показал, что плотный каллус составили изодиаметрические клетки диаметром $65 \pm 3,5$ мкм, рыхлый – удлиненные клетки, достигающие в длину $95,0 \pm 3$ мкм. Впоследствии из рыхлого каллуса формировалась эмбрионально-суспензорная масса (ЭСМ), состоящая из глобулярных зародышей и суспензоров. Получено четыре эмбриогенные клеточные линии, активно продуцирующие ЭМС.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ, Правительства Красноярского края и Регионального научного фонда, проект № 19-44-240009.

Аллергия как фактор риска развития псориаза
Барило Анна Александровна
НИИ медицинских проблем Севера ФИЦ КНЦ СО РАН

Псориаз представляет собой аутоиммунное хроническое воспалительное заболевание, при котором поражаются различные органы и системы организма, но в основном кожа. В последние годы активно обсуждается вопрос об ассоциации аутоиммунных заболеваний с атопией [1]. Данные литературы, посвященные изучению связи между атопией и псориазом крайне немногочисленны и весьма противоречивы, что обуславливает актуальность проводимого исследования. **Цель работы.** Изучить и провести сравнительный анализ спектра сенсибилизации больных псориазом и атопическим дерматитом к пищевым аллергенам, пыльцевым и грибковым аллергенам. **Материалы и методы.** В исследование включены больные псориазом (1 группа, n=20) и атопическим дерматитом (2 группа, n=20) в возрасте от 18 до 57 лет. Спектр сенсибилизации к пищевым, пыльцевым и грибковым аллергенам определен методом prick-тестирования. Статистическую обработку данных проводили методами вариационного анализа с использованием t-критерия для качественных признаков. **Результаты и обсуждение.** В группе больных атопическим дерматитом сенсибилизация к рису и сое отмечена статистически значимо чаще в сравнении с группой больных псориазом: 33,3% относительно 5,2% и 66,7% относительно 29,4%. Сенсибилизация к аллергенам пыльцы растений (микст сорных трав) статистически значимо чаще выявлена в группе больных атопическим дерматитом в сравнении с группой больных псориазом: 90,0% и 58,8%, соответственно. Отмечено, что в группе больных псориазом в сравнении с группой больных атопическим дерматитом чаще отмечена сенсибилизация к грибкам рода *Candida albicans*, *Alternaria alternate*, *Penicillium notatum*, однако различия не достигали статистической значимости. **Заключение.** Таким образом, в результате проведенного исследования установлено, что при атопическом дерматите чаще определяется сенсибилизация к пищевым и пыльцевым аллергенам, а при псориазе – к пищевым и грибковым аллергенам. Предварительное prick-тестирование ориентирует нас в плане применения в дальнейшем других методов специфической аллергологической диагностики: элиминационных и провокационных тестов, и назначении персонализированной терапии.

Таблица 1. Особенности спектра сенсибилизации к пищевым и пыльцевым аллергенам больных псориазом и атопическим дерматитом, % (n)/N

Наименование аллергена Allergen	1 группа 1 group	2 группа 2 group	p
Рис	5,2% (1)/19	33,3% (6)/18	0,03
Соя	29,4% (5)/17	66,7% (10)/15	0,04
Сорные травы	58,8% (10)/17	90,0% (18)/20	0,03

Источник финансирования. Исследование выполнено при поддержке Совета по грантам при президенте РФ (МК-396.2020.7).

Литература:

[1] Барило А.А., Смирнова С.В. Сравнительный анализ спектра сенсибилизации к пищевым, пыльцевым и грибковым аллергенам пациентов с псориазом и атопическим дерматитом. Вопросы питания. 2020. Т. 89. № 5. С. 28-34.

Хемиллюминесцентная активность нейтрофильных гранулоцитов и моноцитов крови у детей с Helicobacter pylori- ассоциированным эрозивно-язвенным поражением желудка и 12-перстной кишки

Литвинова Ирина Сергеевна

НИИ медицинских проблем Севера ФИЦ КНЦ СО РАН

Цель исследования: Изучение хемиллюминесцентной активности нейтрофильных гранулоцитов и моноцитов крови у детей с Helicobacter pylori – ассоциированного эрозивно-язвенного поражения желудка и 12-перстной кишки.

Материалы и методы: Объектами исследования служили нейтрофильные гранулоциты и моноциты крови, выделенные у 46 лиц с H. pylori-ассоциированным эрозивно - язвенным поражением желудка и 12-перстной кишки в возрасте от 11 до 18 лет и 55 практически здоровых лиц, у которых было исключено эрозивно-язвенное поражение желудка и 12-перстной кишки в аналогичном возрастном диапазоне. Для постановки диагноза использовались: анализ жалоб, сбор анамнеза, данные общего осмотра, методы лабораторной диагностики; ЭГДС, ультразвуковое исследование органов брюшной полости, дыхательный уреазный карбамид-тест. Для определения специфического H.p-антигена был использован stooltest; гистологическое исследование биоптата и регистрация специфических антител в плазме крови (ИФА). Исследование кислородозависимого фагоцитоза моноцитов и нейтрофильных гранулоцитов крови проводили хемиллюминесцентным методом. Статистическую обработку результатов осуществляли с помощью пакета прикладных программ Statistica 7.0 (StatSoft, Inc., 2004).

Результаты: Исследование кислородозависимого фагоцитоза в группе больных показало значимое снижение времени выхода на пик и повышение интенсивности и площади под кривой люминол-зависимой спонтанной реакции относительно контрольного диапазона. При индукции нейтрофильных гранулоцитов зимозаном также наблюдалось снижение времени выхода на пик и повышение интенсивности и площади под кривой относительно контроля. Индекс активации характеризующий отношение площади индуцированной хемиллюминесценции к площади спонтанной в группе больных достоверно снижался. Сравнительное изучение респираторной активности общей фракции нейтрофильных гранулоцитов и моноцитов крови у больных с H. pylori-ассоциированным эрозивно-язвенным поражением желудка и 12-перстной кишки показало увеличение интенсивности в люминол-зависимом спонтанном и зимозан-индуцированном процессе у нейтрофильных гранулоцитов, при этом площади под кривой снижена относительно общей фракции моноцитов крови. Исследование люцигенин-зависимого процесса показало достоверное повышение активности общей популяции нейтрофильных гранулоцитов (интенсивность и площадь под кривой) как при спонтанной реакции, так и в зимозан-индуцированном процессе относительно моноцитов крови. При этом повышен индекс активации в нейтрофилах.

Выводы: Таким образом интенсивность «респираторного взрыва» в общей фракции нейтрофильных гранулоцитов крови выделенных у больных с H. pylori-ассоциированным эрозивно-язвенным поражением желудка и 12-перстной кишки в спонтанном процессе и при индукции зимозаном активизируется относительно контроля. В сравнительном аспекте выявлено снижение площади под кривой моноцитов крови относительно нейтрофильных гранулоцитов, что в целом характеризует недостаточность цитотоксической активности моноцитов по сравнению с нейтрофилами у больных с H. pylori-ассоциированного эрозивно-язвенного поражения желудка и 12-перстной кишки.

Исследование полиморфизма генов иммунного ответа в популяциях Красноярского края и у больных мультифакториальными заболеваниями

Малинчик Марина Александровна

НИИ медицинских проблем Севера ФИЦ КНЦ СО РАН

Заболевания органов дыхания, в частности бронхиальная астма, являются одними из ведущих причин заболеваемости и смертности. Активация системы комплемента играет двойственную роль: с одной стороны, может предотвратить множество респираторных инфекций, но, с другой стороны, может усугубить повреждение тканей или способствовать неблагоприятным побочным эффектам [1]. Маннозо-связывающая лектин-ассоциированная сериновая протеаза (MASP-2) является одним из основных компонентов, участвующих в активации комплемента, образуя комплексы с колектинами и фиколинами [2, 3]. Аллель G* полиморфизма rs72550870 гена *MASP2* ассоциирован с низкой концентрацией белка и, соответственно, снижением способности белка связываться с MBL и фиколинами и неспособностью активировать комплемент [4]. Дефицит MASP-2 может быть ассоциирован с предрасположенностью к развитию бронхиальной астмы и других респираторных заболеваний [2, 5].

Целью данной работы было выявить популяционно-этнические различия распределения частот аллельных вариантов полиморфизма rs72550870 гена *MASP2* в популяциях Красноярского края.

Объектами исследования являлись новорожденные дети популяций Красноярского края (n=920): 1) новорожденные из деревень с ненецким населением (n=323); 2) новорожденные из деревень с долгано-нганасанским населением (n=112); 3) новорожденные из деревень со смешанным национальным составом населения (n=243). Группу контроля составили новорожденные дети европеоидного происхождения г. Красноярска (n=242). Материалом исследования послужила ДНК, выделенная сорбентным методом из пятен крови, для генотипирования *MASP2* (rs72550870) был применен метод RT-PCR. Сравнение частот аллелей и генотипов осуществляли с помощью online-калькулятора, теста χ -квадрат.

Анализ распространенности генотипов гена *MASP2* выявил низкие частоты гетерозиготного генотипа по полиморфизму rs72550870 у Арктических популяций по сравнению с европеоидами г. Красноярска. Частота генотипа AG у контрольной группы (6,6%) статистически значимо выше по сравнению с группами арктических популяций (ненцы: 0,3%, $p < 0,001$; долгань-нганасаны: 0,9%, $p = 0,02$; смешанные: 2,1%, $p = 0,02$). Ни в одной из групп не было обнаружено гомозигот по минорному аллелю G*. Частота аллеля G* в европеоидной популяции 4%, полученная нами в ходе исследования – 3,3%.

Результаты настоящего исследования показывают, что у населения Арктических территорий более низкие цифры распространенности генетического маркера MASP-2 дефицита, и вероятно, более высокий уровень защиты от респираторных заболеваний по сравнению с европеоидами г. Красноярска. В дальнейшем мы планируем провести анализ полиморфизма rs72550870 гена *MASP2* у пациентов с бронхиальной астмой.

Работа выполнена при финансовой поддержке ККФН (грант № 2020090306591). Выражаю искреннюю благодарность за помощь в осуществлении работы своим научным руководителям к.б.н. Смольниковой М.В. и д.м.н. Терещенко С.Ю.

Литература:

- [1] S´wierzko A.S., *Frontiers in Immunology*, V. 11 (2020);
- [2] Thiel S., Steffensen R., *Genes Immun.*, V. 8, PP. 154-163 (2007);
- [3] Feinberg H., Uitdehaag J., Davies J., *EMBO J.*, V. 22, PP. 2348-2359 (2003).
- [4] Stengaard-Pedersen K., Thiel S., Gadjeva M., et al., *N Engl J Med*, V. 349 (2003);
- [5] Olszowski T., Poziomkowska-Gęsicka I., et al., *Immunobiology* (2013).

Секция «Математическое моделирование»

Проведение и подготовка трудов Открытой конференции ИВМ СО РАН по математическому моделированию и информационным технологиям в 2021 году поддержано Красноярским математическим центром, финансируемым Минобрнауки РФ в рамках мероприятий по созданию и развитию региональных НОМЦ (Соглашение 075-02-2020-1631).

В работе предложен один из алгоритмов генерации семейства линейных k -шаговых явных и неявных симметричных методов $\sum_{j=0}^k \alpha_j x_{n+j} = h^2 \sum_{j=0}^k \beta_{n+j} f_{n+j}(t_{n+j}, x_{n+j})$ численного интегрирования обыкновенного уравнения второго порядка $x'' = f(t, x)$, где $x(t)$ – положение точки в момент времени t , $f(t, x)$ – сила, не зависящая от скорости. Симметричный метод определяется парой многочленов $\rho(\xi) = \sum_{j=0}^k \alpha_j \xi^j$, $\sigma(\xi) = \sum_{j=0}^k \beta_j \xi^j$, где $\alpha_j = \alpha_{k-j}$, $\beta_j = \beta_{k-j}$, $\alpha_0 \neq 0$, $\sum_{j=0}^k |\beta_j| \neq 0$. В теории при линейном анализе устойчивости ($f = -\lambda^2 x$, $\lambda \in \mathbb{R}$) симметричный метод имеет ненулевой интервал периодичности, если для всех $H := \lambda h \in (0, H_0)$ все корни многочлена устойчивости $\pi(r; H^2) = \rho(r) + H^2 \sigma(r)$ лежат на единичной окружности и ρ не имеет кратных корней за исключением $\xi = 1$ кратности 2, который называется главным [1]. Все остальные корни ρ называются побочными. Коэффициенты симметричного метода определяются неоднозначно даже при задании порядка метода и его явности.

Мы предлагаем следующий алгоритм построения семейства линейных k -шаговых явных и неявных симметричных методов p -го порядка. Коэффициенты α выбираются из множества $\{0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \pm 4\}$, тогда коэффициенты β определяются однозначно. В результате получается большое методов с $\alpha \in \mathbb{Q}$. Из всех полученных методов мы выбираем нуль-устойчивые и периодичные при $H^2 \rightarrow +0$. Далее, мы исключаем методы, для которых многочлен ρ имеет кратные побочные корни, поскольку такие методы неустойчивы для нелинейных задач. Для каждого выбранного метода интервал периодичности определяется как минимальный положительный корень дискриминанта полинома устойчивости $\pi(r; H^2)$. После сортировки методов по интервалу периодичности, мы тестируем десять лучших методов на модельных задачах (см. табл. 1). В работе отобраны и исследованы лучшие явные и неявные методы 8, 10 и 12 порядков. В табл. 1 методы расположены слева направо в порядке убывания длины интервала периодичности. Символом «QT» помечен метод, полученный в работе [2]. Лучшие методы имеют достаточно большой интервал периодичности, но не обязательно максимальный.

Таблица 1. Точность построенных явных методов и шаг интегрирования для трехмерной задачи Кеплера при фиксированном максимальном отклонении ρ^h численного решения от точного 2 мм за год

метод	P8-0	P8-1	P8-2	P8-3	P8-QT	P8-5	P8-6	P8-7	P8-8
$\rho h s^*$	213447	169823	185403	179171	173718	169044	158917	150348	165928
N^{**}	274	218	238	230	223	217	204	193	213
$h.c$	147.90	185.89	170.27	176.19	181.73	186.75	198.65	209.97	190.26
H^2	5.26E-04	8.31E-04	6.97E-04	7.46E-04	7.94E-04	8.38E-04	9.49E-04	1.06E-03	8.70E-04
$\rho^h, м$	1.99E-03	2.00E-03	1.97E-03	1.94E-03	1.99E-03	1.99E-03	1.96E-03	1.97E-03	1.97E-03
$\delta_r^h, м^{***}$	9.47E-05	9.46E-05	9.37E-05	9.21E-05	9.41E-05	9.43E-05	9.28E-05	9.32E-05	9.36E-05
$\delta_r^h, м^{***}$	1.99E-03	2.00E-03	1.97E-03	1.94E-03	1.99E-03	1.99E-03	1.96E-03	1.97E-03	1.97E-03
$\delta_{\Omega}^h, м^{***}$	3.13E-22	2.09E-23	3.56E-23	1.92E-23	3.32E-23	6.34E-24	6.29E-24	2.21E-24	4.37E-24
* количество вычислений правых частей уравнения									
** количество шагов интегрирования на период $T = 2\pi/\lambda$									
*** максимальная радиальная, трансверсальная и бинормальная ошибки									

Работа поддержана Красноярским математическим центром, финансируемым Минобрнауки РФ в рамках мероприятий по созданию и развитию региональных НОМЦ (Соглашение 075-02-2020-1631).

Литература:

[1] Quinlan G., Tremaine S., Symmetric multistep methods for the numerical integration of planetary orbits, *Astron. J.*, 100(5), 1694-1700 (1990).
 [2] Lambert J.D., Symmetric Multistep Methods for Periodic Initial Value Problems, *J. Inst. Maths. Applics.*, 18, 189-202 (1976).

Актуальность применения информационных технологий для задач анализа и контроля выполнения требований по пожарной безопасности (на примере свода правил СП 1.13130)

Грунчева Мария Викторовна

Институт вычислительного моделирования ФИЦ КНЦ СО РАН

Обеспечение пожарной безопасности – одна из важнейших функций государства. Данная деятельность включает, в том числе, разработку нормативных документов по пожарной безопасности и надзор за соблюдением существующих требований. В работе выполнен анализ структуры и содержания одного из нормативных документов в области пожарной безопасности – свода правил СП 1.13130 «Системы противопожарной защиты. Эвакуационные пути и выходы», показаны проблемы представления информации, актуальность структурирования информации, извлечения и формализации знаний [1].

Анализ фрагмента документа – пункта 4.2.4, регламентирующего виды аварийных выходов и требования к конструктивным элементам в зависимости от типа выхода, показал следующее. В подпункте а) предъявляются требования не только к аварийным выходам на балкон или лоджию, но и конструктивные требования к окнам, перегородкам и простенкам с указанием пределов огнестойкости. В подпункте д) указывается, что выход на кровлю здания I, II и III степеней огнестойкости классов С0 и С1 осуществляется через окно, дверь или люк. Такой составной характер требований, сложность и неоднородность условий затрудняют понимание и требуют выделения различных уровней при структурировании информации. Результат структурирования требований, указанных в п. 4.2.4 представлен в виде схемы на рисунке 1.

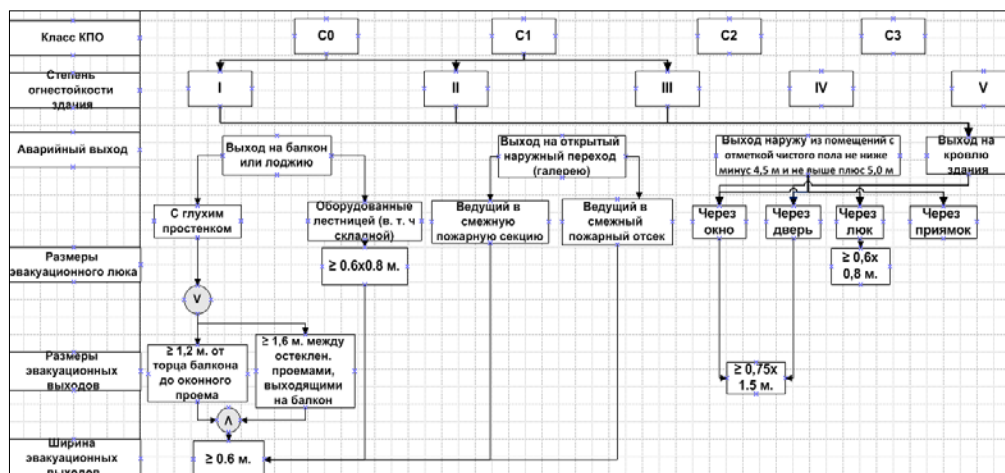


Рис. 1. Результат структурирования требований к видам аварийных выходов.

Вышеуказанный пример демонстрирует сложность, возникающую в ходе поиска необходимой информации и проверки выполнения изложенных требований.

Проблемы, выявленные для СП 1.13130 характерны для всех Сводов правил, что требует единого подхода к систематизации и формализации представленных в них знаний. Формализация знаний, информационная интеграция сопряженных нормативных документов, создание единых системообразующих ресурсов, позволят обеспечить автоматизированную поддержку задач обеспечения пожарной безопасности.

Литература:

[1] Об утверждении свода правил СП 1.13130 «Системы противопожарной защиты. Эвакуационные пути и выходы» [Электронный ресурс]: Приказ МЧС России от 19.03.2020 г. № 194; введ. 19.09.2020 г. // Справочная правовая система «КонсультантПлюс». – Режим доступа: <http://www.consultant.ru>.

Анализ данных о температурной инверсии в режиме НМУ в Красноярске

Дергунов Александр Владимирович

Институт вычислительного моделирования ФИЦ КНЦ СО РАН

Одна из главных проблем крупных городов – это загрязнение атмосферы. Метеорологические процессы вносят значительный вклад в создание неблагоприятных экологических условий. Например, температурная стратификация нижних слоев атмосферы может вызвать температурную инверсию – слой теплого воздуха, ограничивающий вертикальное рассеяние вредных примесей в атмосфере [1].

По данным Министерства экологии и рационального природопользования в г. Красноярске 14-18 февраля 2020 г. был установлен режим неблагоприятных метеоусловий (НМУ) (рис. 1, б). Периоды НМУ характеризуются почти штилевым ветром и концентрациями взвешенных в воздухе твердых частиц (PM), значительно превышающими среднесуточную предельно допустимую концентрацию (ПДК) (0.035 мг/м^3).

В работе изучались метеоусловия в г. Красноярске в период 12-22 февраля 2020 г. по данным наземных постов наблюдения и метеоинформации модели прогноза погоды Global Forecast System (GFS). Использовалась информация о температуре воздуха на изобарических поверхностях 1000-700 мбар, высоте планетарного пограничного слоя [2]. Данные о PM_{2.5} и скорости ветра были получены на геопортале ИВМ СО РАН [3].

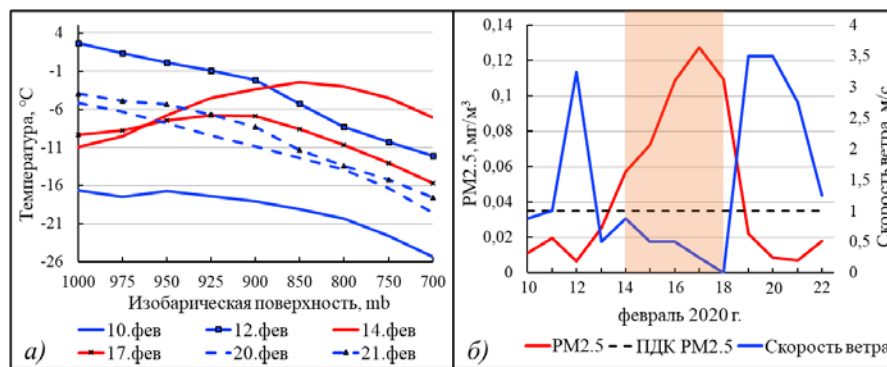


Рис. 1. Метеорологические условия в Красноярске в феврале 2020 г. а) – температуры воздуха на изобарических поверхностях; б) – концентрации PM_{2.5} и скорости ветра, оранжевым цветом выделен период НМУ.

На рис. 1, а красные линии соответствуют дням во время периода НМУ. В период с 14 по 18 февраля наблюдалась температурная инверсия, что показано на графиках, помеченных красным цветом. На рис. 1, б показана связь среднесуточных концентраций PM_{2.5} со скоростью ветра в феврале 2020 г. В периоды увеличения скорости ветра концентрация PM_{2.5} опускается ниже значения среднесуточного ПДК.

Проведено сравнение вариации высоты планетарного пограничного слоя атмосферы со скоростью ветра в исследуемый период. Коэффициент корреляции составил 0.89. Это связано с тем, что при высокой скорости ветра уменьшается устойчивость атмосферы, увеличивается турбулентность, что ведет к увеличению высоты пограничного слоя [4].

Литература:

- [1] Смит, К. Основы прикладной метеорологии, Л.: Гидрометеиздат, С. 424 (1978).
- [2] NCEP GFS 0.25 Degree Historical Archive. [Электрон. ресурс]. URL: <https://rda.ucar.edu/datasets/ds084.1/> (дата обращения 02.03.2021).
- [3] Геопортал ИВМ СО РАН. [Электрон. ресурс]. URL: <http://gis.krasn.ru/blog/> (дата обращения 02.03.2021).
- [4] Безуглая Э. Ю., Елекоева Л. И., Завадская Е. К. Климатические характеристики условий распространения примесей в атмосфере: справочное пособие. – Гидрометеиздат, (1983).

Определение интересов пользователей с помощью анализа логов прокси-сервера

Донцов Денис Юрьевич

Институт вычислительного моделирования ФИЦ КНЦ СО РАН

В настоящее время все большее число бизнес-процессов организации выносятся в киберпространство. Их эффективность зависит от устойчиво функционирующей телекоммуникационной инфраструктуры организации и ее информационных ресурсов. Выявление киберугроз и оценка рисков информационной безопасности внутри организации является одной из актуальных задач [1].

Цель исследования – выявить типичный набор интернет-ресурсов для каждого пользователя внутренней сети и изучить изменчивость этого набора со временем.

Первым этапом исследования является обработка исходных данных и выделение полезной информации из огромного потока данных. Исходный поток данных разбивается на короткие сессии с помощью метода одномерной кластеризации KDE [2]. За каждую сессию пользователь генерирует некоторое число запросов, большинство из которых не несут никакой полезной информации и поэтому могут быть проигнорированы. Следует заметить, что большая часть из посещаемых интернет-ресурсов встречаются в записях довольно редко, например, не более 10 раз в год. Для повышения качества и скорости анализа такие ресурсы были исключены.

На втором этапе исследования выполняется определение ресурсов, стабильно посещаемых каждым пользователем. Под стабильной посещаемостью предполагается посещаемость ресурса более чем в 50% дней, когда пользователь был активен. Эти ресурсы генерируют некоторое множество ресурсов для каждого пользователя, которое, по предположению, плавно изменяется с течением времени.

Заключительный этап исследования заключается в определении метрики для вычисления «расстояния» между двумя множествами ресурсов. Такая метрика позволяет исследовать изменчивость множества стабильно посещаемых ресурсов для каждого пользователя, и, следовательно, определять его интересы, и реагировать на их резкое изменение.

Исследования показали, что с помощью представленного алгоритма можно выявлять предпочтения пользователей, но для дальнейших исследований нужна тщательная настройка его параметров.

Литература:

[1] Исаев С. В., Кибербезопасность научного учреждения – активы и угрозы, Информатизация и связь, №1, С. 53-57 (2015).

[2] Węglarczyk S., Kernel density estimation and its application, ITM Web Conferences, V. 23, (2018).

Численное моделирование волновых сейсмических полей в вязкоупругой геосреде

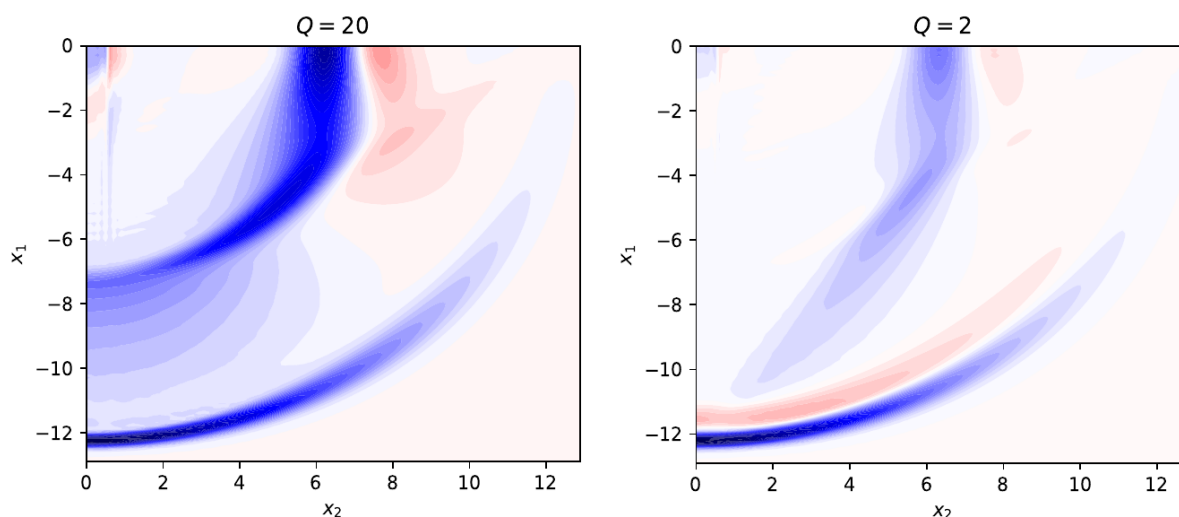
Ефимов Евгений Александрович

Сибирский федеральный университет

В исследовании рассматривается модель грунта с плоскостной структурой с однородными изотропными слоями. Такое допущение позволяет перейти к осесимметричной задаче динамики деформируемого твёрдого тела. Вязкоупругие свойства материалов слоёв учитываются в рамках реологической модели Пойнтинга–Томсона [1].

Численный алгоритм основан на методе двуциклического покомпонентного расщепления [2]. На этапах расщепления возникают одномерные задачи теории упругости вдоль направлений осей, для решения которых применяется ENO-схема, основанная на методе распада разрыва С. К. Годунова [3]. Отдельным этапом рассчитывается система уравнений, в которую входят слагаемые, описывающие вязкие процессы. Полученная на данном этапе система уравнений решается при помощи разностной схемы Кранка–Николсона.

Численные эксперименты проведены при использовании комплексов программ для многопроцессорных вычислительных систем. На рис. 1 показаны волновые картины, полученные в результате импульсного воздействия на вязкоупругие среды с различными значениями добротности. В первом случае приведена картина для реального грунта, во втором случае – для среды с низкой добротностью, где в большей степени проявляются вязкие свойства.



*Рис. 1. Линии уровня вертикальной компоненты скорости
для сред с разными значениями добротности.*

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Красноярского краевого фонда науки № 2020091506614.

Литература:

- [1] Рейнер М., Реология. М.: Наука, 223 с. (1965).
- [2] Марчук Г.И., Методы расщепления. М.: Наука, 263 с. (1988).
- [3] Годунов С.К., Уравнения математической физики. М.: Наука, 392 с. (1979).

Математическая модель камеры сгорания дизель-генераторных установок с вентильно-индукторными генераторами

Жигарев Владимир Алексеевич

Сибирский федеральный университет

Для Красноярского края характерно то, что значительная часть его территории представляет собой удалённые энергетически изолированные районы, в которых для электроснабжения используются дизель-генераторные установки (ДГУ), работающие на дизельном топливе, что требует значительных ежегодных дотаций из бюджета края для реализации доставки дизельного топлива. Всего на территории края работают 118 дизельных электростанций, имеющих в своём составе более 400 ДГУ. Сами установки электроснабжения, в силу суровых условий северных широт, должны обладать повышенной надёжностью, ремонтпригодностью, экономичностью и универсальностью. Этим и другим требованиям в большей степени соответствуют разработанные в последнее время дизель-генераторные установки с переменной частотой вращения (ДГУ ПЧВ).

Одним из перспективных типов генерирующего оборудования является ДГУ ПЧВ с применением вентильно-индукторных генераторов (ВИГ), имеющего ряд преимуществ перед широко применяемыми сегодня ДГУ с синхронными генераторами. К ним относятся пониженный на 15÷30% расход топлива и большая надёжность электроснабжения. Однако при автоматическом регулировании частоты вращения дизельного двигателя в камере сгорания происходят переходные процессы. Двигатель начинает работать на частоте вращения отличной от номинальной, вследствие чего может возрасти вредные выбросы (например, оксиды азота и серы). Поэтому необходимо учитывать процессы, которые происходят в камере сгорания дизельного двигателя. Задачей данного исследования является разработка математической модели камеры сгорания ДГУ.

Для моделирования процессов, происходящих в камере сгорания двигателя дизель-генератора с переменной частотой вращения, была разработана математическая модель процессов горения в камере сгорания с учётом характеристик впрыска, воспламенения и сгорания топливной смеси.

Для моделирования распыливания дизельного топлива использовалась модель полного конуса, которая включает в себя распыливание топлива, дробление его капель их столкновение и слияние и испарение. При этом начальные характеристики спрея (диаметр капель и их скорость) определялись эмпирически с помощью коэффициента расхода форсунки. Для моделирования дальнейшего распада и дробления капель топлива использовалась модель Рэля-Тейлора [1].

С помощью разработанной модели проведено исследование основных характеристик дизель-генератора в широком диапазоне режимов его работы. Частота вращения коленчатого вала в расчётах варьировалась от 900 до 2400 об/мин. Проанализированы характеристики распыла, дробления и воспламенения топлива в камере сгорания. Исследованы особенности поведения локальных и интегральных характеристик камеры сгорания двигателя. При этом рассмотрены не только его энергетические характеристики, но и экологические параметры.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, Правительства Красноярского края, Краевого фонда науки и ООО «Нижнебогучанская ГЭС» в рамках гранта РФФИ № 20-48-242909. Благодарность соавторам работы Пантелееву В.И., Гузей Д.В., Минакову А.В.

Литература:

[1] Sun Y., Reitz R. D. Modeling Low-Pressure Injections in Diesel HCCI Engines, ILASS Americas, 20th Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, Chicago, (2007).

Особенности моделирования процесса развития пожара для пожарных нагрузок с большой мощностью

Закарлюка Павел Владимирович

Институт вычислительного моделирования ФИЦ КНЦ СО РАН

На сегодняшний день нормативно закреплено применение компьютерного моделирования развития пожара для решения задач в области пожарной безопасности. Пользователями таких компьютерных программ, как правило, являются пожарные инженеры, которые не имеют специализированного образования в области численных методов. Для корректного использования соответствующих моделей требуется разработка методических рекомендаций (выбор параметров численных алгоритмов, определение начальных и граничных условий моделирования). В настоящей работе проведено исследование влияния параметров пространственной и временной дискретизации.

Расчеты проводились для двух параллелепипедов, в основании которых лежали квадрат и прямоугольник. Исследовалось влияние следующих параметров: высота блока расчетной области, площадь горючей нагрузки, величина расчетного шага по времени, количество ячеек сетки расчетной области. В каждом расчетном случае контролируемой величиной являлось время достижения первым опасным фактором своего критического значения. Во всех рассмотренных случаях этим фактором являлась оптическая плотность дыма.

В качестве горючей нагрузки принята ГН № 63 из [1] – индустриальное масло. Для данной нагрузки удельная мощность пожара составляет 1.83 МВт/м^2 . Время достижение критических значений опасными факторами пожара определялось в середине одной из боковых граней исследуемых объектов на высоте 1.7 м от уровня пола и на уровне потолка. Все иные условия и параметры были одинаковыми: адиабатные граничные условия, температура внутри и снаружи здания – $20 \text{ }^\circ\text{C}$, параметры эвакуации.

Из Рисунка 1 видно, что разница достижения критического значения в зависимости от изменения исследуемых параметров может составлять порядка 100 секунд. Для решения задач в области пожарной безопасности значение этой величины оказывает существенное влияние.

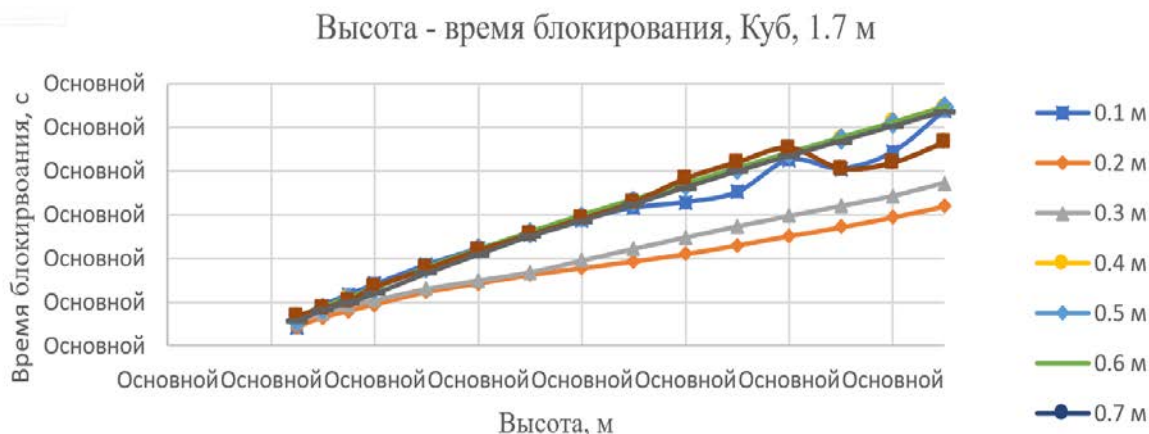


Рис. 1. Изменение времени блокирования в зависимости от изменения высоты и шага сетки расчетной области, $Q_{уд} = 1.83 \text{ МВт/м}^2$.

Результаты исследования показали, что такие параметры численных алгоритмов, как: количество ячеек сетки расчетной области и величина расчетного шага по времени оказывают существенное влияние на время достижения опасными факторами пожара критических значений.

Литература:

[1] Кошмаров Ю.А. Прогнозирование опасных факторов пожара в помещении: Учебное пособие. - М.: Академия ГПС МВД России, 2000. 118 с.

Численное моделирование процессов вытеснения нефти из пористой среды с помощью наносуспензий

Иванова София Васильевна

Сибирский федеральный университет

В работе проведено численное исследование увеличения нефтеотдачи с помощью заводнения суспензиями с наночастицами. Задача повышения эффективности вытеснения нефти из пласта является на сегодняшний день крайне актуальной. Современные методы добычи позволяют достичь значений коэффициента извлечения нефти (КИН) от 20 до 40%. Одним из распространенных методов добычи нефти является заводнение пласта, при котором нефть из пористой среды вытесняется водой или растворами с поверхностно-активными веществами (ПАВ) или добавками полимеров. В последнее время появились работы, в которых в качестве перспективного агента для заводнения пласта и увеличения нефтеотдачи предлагается использовать суспензия частицами наноразмеров различного состава. Для процесса вытеснения нефти важнейшими физическими свойствами являются вязкость, краевой угол смачиваемости и коэффициент межфазного натяжения. Эти свойства для наносуспензий существенно зависят от типа, концентрации и размера наночастиц. Это дает возможность управлять свойствами заводняющей жидкости.

Исследование проводилось для двумерной микропористой модели. Численный метод основан на решении системы уравнений Навье-Стокса. Для описания течения двухфазного потока в пористой среде использовался метод VOF [1]. Модель описывает несмешивающийся многокомпонентный поток жидкость-жидкость, для этого необходимо решить уравнения импульса и уравнения переноса объемной доли фаз. В качестве граничных условий на входе в расчетную область используется постоянное значение скорости наножидкости. На выходе из расчетной области – условия Неймана. На стенках канала задавалось условие прилипания. Для численного моделирования использовались экспериментально измеренные значения межфазного натяжения и краевого угла смачивания. Использовалась водная суспензия наночастиц оксидом кремния (5 нм) и массовой концентрацией 1%.

Проведено численное исследование процессов вытеснения нефти из пористой среды с помощью наносуспензий. Расчеты проведены для различных значений коэффициента вязкости нефти. В расчетах были рассмотрены различные материалы породы: доломит, метабаза, песчаник. Результаты численного исследования показали, что применение наносуспензий оказывает существенное влияние на движение фронта вытеснения в микропористой модели и значение коэффициента извлечения нефти. Эффективность использования наносуспензий для увеличения КИН усиливается с увеличением вязкости нефти. Добавление наночастиц делает процесс вытеснения менее чувствительным к вязкости нефти. Показано, что использование наносуспензий позволяет повысить коэффициент извлечения нефти. Наибольшее увеличение коэффициента извлечения нефти при использовании наносуспензий наблюдаются в режиме капиллярного потока и превышают коэффициент извлечения нефти для воды на 40%.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (№ FSRZ-2020-0012). Выражаю благодарность соавторам работы: Гузей Д.В., Платонову Д.В.

Литература:

[1] Hirt C.W., Nichols B. D., J. Comput. Phys., V.39, PP.201-226 (1981).

Влияние времени начала эвакуации на выполнение условий безопасной эвакуации

Калинин Егор Сергеевич

Институт вычислительного моделирования ФИЦ КНЦ СО РАН

На сегодняшний день в области пожарной безопасности считается, если выполняются требования, прописанные в определенном наборе документов, то здание соответствует требованиям пожарной безопасности. В частности, Свод правил СП 1.13130.2020 [1] включает в себя требования к объемно-планировочным решениям зданий, т.е. геометрическим характеристикам путей эвакуации (ширина, высота, протяженность коридоров, ширина и высота дверных проемов на путях эвакуации и т.п.). Единые минимальные требования установлены для зданий разного назначения (класса функциональной пожарной опасности (ФПО)). Но класс ФПО определяет время начала эвакуации из здания. Здания со схожей планировкой могут относиться к различным классам ФПО. В данном исследовании стояла цель с помощью компьютерного моделирования эвакуации при пожаре показать влияние времени начала эвакуации на обеспечение условий безопасной эвакуации.

Для исследования был выбран объект коридорного типа, такие объекты могут относиться к разным классам ФПО (административные здания, гостиницы, общежития). Для расчетов были выбраны 4 помещения, в которых принималась одинаковая по характеристикам горючая нагрузка, для размещения очагов пожара. Для каждого очага пожара рассмотрены варианты эвакуации с $t_{\text{нач.эв.}}$ - 30, 60, 90 и 120 секунд от начала пожара, что соответствует классам ФПО Ф2, Ф3, Ф4 и Ф5 при III-V типе СОУЭ.

Ширина коридоров составила 2,6 м, высота – 3,3 м протяженность не более 60 м, имеется по 2 выхода из коридоров на этажах, что соответствует требованиям СП 1.13130.2020. Для каждого очага пожара все иные условия и параметры рассмотренных сценариев были одинаковыми: расчетная область для моделирования развития пожара, граничные условия, описывающие теплообмен с ограждающими конструкциями – адиабатные, температура внутри и снаружи здания принята 37°C, расчетная область для моделирования эвакуации, начальное положение людей, их количество и характеристики.

Из таблицы 1 видно, что вероятность эвакуации из коридора, примыкающего к помещению с очагом пожара, снижается во всех вариантах размещения очагов (сценариях) при увеличении времени начала эвакуации людей из здания, кроме сценария 1. Это обусловлено большим объемом помещения с очагом пожар, опасные факторы пожара (ОФП) не успевают достигнуть критических значений за время эвакуации.

Таблица 1. Вероятность эвакуации при выбранном времени начала движения людей

	Сценарий 1 (очаг 1)	Сценарий 2 (очаг 2)	Сценарий 3 (очаг 3)	Сценарий 4 (очаг 4)
30	0,999	0,999	0,999	0,999
60	0,999	0,999	0,999	0,999
90	0,999	0,293	0,993	0,869
120	0,999	0	0,751	0

Таким образом, можно сделать вывод, что нельзя в полной мере оценить пожарную безопасность объекта, опираясь лишь на общие рекомендации. Быстро и точно получить полную оценку условий безопасной эвакуации на объекте можно только прибегнув к вычислительному моделированию распространения ОФП и эвакуации.

Литература:

[1] СП 1.13130.2020. Системы противопожарной защиты. Эвакуационные пути и выходы. МЧС РФ 19 марта 2020 г.

Методы ДЗЗ для оценки экологической обстановки Красноярска

Краснощеков Константин Вячеславович

Институт вычислительного моделирования ФИЦ КНЦ СО РАН

Город Красноярск активно развивается. Он расположен на реке Енисей и имеет координаты центра 56°00' с.ш. и 92°52' в.д. У города очень уникальный рельеф. С юга и запада от города – леса и холмистая местность, с севера и востока рельеф преимущественно равнинный. Как и во всех крупных городах, экологическая обстановка Красноярска подвержена негативному влиянию. Аэрозоли или взвешенные в воздухе твердые частицы (PM) оказывают влияние на окружающую среду и здоровье человека [1]. Мониторинг PM основан в основном на наземных измерениях. На данный момент в Красноярске существует сеть наземных постов мониторинга, насчитывающая 25 станций. Однако данные, полученные с постов мониторинга являются точечными и не дают информации о пространственном распределении загрязнения в масштабе районов города. Получить данные о пространственном распределении загрязнения по городу возможно используя данные спутникового мониторинга. Наиболее перспективным является продукт MAIAC (Multi-Angle Implementation of Atmospheric Correction), предоставляющий данные об аэрозольной оптической толщине (AOD) в вертикальном столбе атмосферы. Данный продукт обеспечивает равномерное разрешение сетки в 1 км в выбранной проекции независимо от угла сканирования.

Цель работы – рассмотреть возможные методы оценки качества воздуха, используя спутниковые данные над городом Красноярском.

В работе рассмотрена возможность оценки загрязнения атмосферы Красноярска взвешенными частицами на основе спутниковых данных об аэрозольной оптической толщине. Так же представлены уровни загрязнения по районам города, используя данные спутникового мониторинга.

Используя спутниковые данные алгоритма MODIS MAIAC совместно с данными наземного экологического мониторинга PM_{2.5} научно-исследовательской сети ФИЦ КНЦ СО РАН проведен сравнительный анализ взаимосвязи расчетных значений PM_{2.5}, полученных по данным AOD, и наземных измерений PM_{2.5} в летний период 2019 и 2020 годов. Данный анализ был рассчитан по нескольким моделям.

Для того, чтобы сопоставить спутниковые данные по AOD с наземными измерениями PM_{2.5} используется следующая формула [2]

$$PM_{2.5} = \frac{AOD}{K \left(\frac{1 - RH}{1 - RH_0} \right)^\gamma}$$

где AOD – данные аэрозольной оптической толщины, полученные спутниковыми методами, RH – влажность воздуха, H – высота пограничного слоя. Коэффициенты K и γ рассчитываются эмпирически.

В ходе работы установлено, что дистанционные данные (AOD) имеют высокую корреляцию с данными наземных постов мониторинга (R=0.7). На основании полученных результатов можно говорить о возможности применимости данных спутникового мониторинга для оценки экологической обстановки в городе.

Литература:

- [1] Kaufman Y. J., Tanré D., Boucher O., A satellite view of aerosols in the climate system, Nature, V. 419, P. 215 (2002).
- [2] Lin C., et al., Observation of PM_{2.5} using a combination of satellite remote sensing and low-cost sensor network in Siberian urban areas with limited reference monitoring, Atmospheric Environment, V 227, P. 117410 (2020).

Моделирование ионной проводимости мембран при заданном постоянном поверхностном потенциале или постоянном поверхностном заряде

Кром Артур Игоревич

Институт вычислительного моделирования ФИЦ КНЦ СО РАН

Мембранные технологии активно развиваются благодаря большому количеству направлений промышленности, использующих процессы мембранного разделения (химическая сенсорика, разделение смесей, преобразование энергии и т.д.). Одной из таких технологий является повышение ионной проводимости мембран, способных менять селективные свойства при изменении направления действия электрического поля.

В данной работе рассмотрены двумерная (2D) модель пространственного заряда и одномерная (1D) модель однородного потенциала [1] движения водного раствора электролита через мембрану с электропроводящей поверхностью при заданных постоянном поверхностном потенциале либо постоянном поверхностном заряде. Движение раствора вызвано разностью потенциалов между разделяемыми резервуарами. Результаты численных расчетов представлены на рисунке 1, где сплошные кривые соответствуют 2D модели, а пунктирные – 1D модели (алгоритм численной реализации моделей см. в [2,3]).

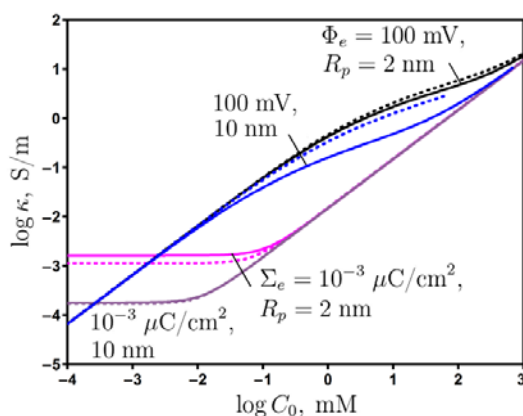


Рис. 1. Ионная проводимость в зависимости от концентрации электролита.

Можно видеть, что при высоких концентрациях проводимость совпадает с проводимостью раствора. Если же концентрация падает, то, в случае постоянного заряда (Σ_e) она достигает порогового значения, после которого проводимость перестаёт уменьшаться с дальнейшим уменьшением концентрации, тогда как при постоянном потенциале (Φ_e) снижение проводимости продолжается. При большем радиусе поры (10 нм) одномерная модель отклоняется от двумерной модели из-за большей ошибки радиального осреднения. Заключаем, что проводимость растёт быстрее при заданном постоянном поверхностном потенциале, но при низких концентрациях падает ниже порогового значения, достигаемого при заданном постоянном поверхностном заряде.

Работа поддержана Красноярским математическим центром, финансируемым Минобрнауки РФ в рамках мероприятий по созданию и развитию региональных НОМЦ (Соглашение 075-02-2020-1631). Автор выражает благодарность научному руководителю Илье Игоревичу Рыжкову.

Литература:

- [1] Peters P. B., van Roij R., Bazant M. Z., Physical Review E., V. 93, 053108 (2016).
- [2] Ryzhkov I. I., Vyatkin A. S., Mikhlina E. V., Membranes and Membrane Technologies, V. 2, PP. 10–19 (2020).
- [3] Krom A. I., Medvedeva M. I., Ryzhkov I. I., J. Siber. Fed. Univer.: Mathematics & Physics, V. 14, PP. 1-13 (2021).

Модульная система прототипа приложения для разработки прикладных веб-ГИС

Малимонов Максим Игоревич
ФИЦ КНЦ СО РАН

С развитием веб-технологий рядовые пользователи получили возможность работать с различной информацией, используя программы и веб-приложения как инструменты анализа и просмотра [1, 2]. В основном, таким приложением является веб-браузер, который позволяет без предварительной установки пользоваться информационными системами. Веб-среда служит прекрасной основой для разработки, имея в своей области огромное количество библиотек, которые позволяют создавать пользовательские интерфейсы и разворачивать программное обеспечение на стороне сервера. Несмотря на разнообразие, существует немного решений для быстрой разработки геоинформационных веб-систем. В связи с этим появляется необходимость в разработке инструментария для развертки прикладных веб-ГИС на основе геопортальных технологий.

В данной статье продемонстрирован компонентный подход прототипа системы для быстрой разработки и развертки прикладных веб-ГИС. На рисунке показана модульная система, состоящая из компонентов, которые взаимодействуют между собой и предоставляют различного рода функционал: создание и просмотр проектов, загрузка различных ресурсов с разных серверов и редактирование отображения этих ресурсов, а также сохранение проектов в базе данных.

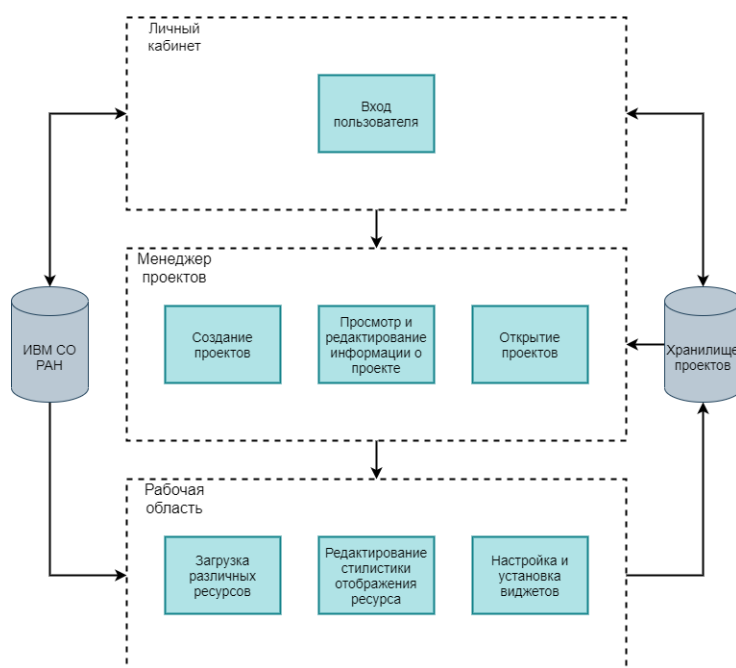


Рис. 1. Модульная система веб-приложения для быстрой развертки веб-ГИС

В проекте используется javascript-фреймворк Vue.js и программная платформа Node.js. Используемые библиотеки: openlayers и bootstrap.

Литература:

- [1] Brendel C, Dymond R, Aguilar M. An interactive web app for retrieval, visualization, and analysis of hydrologic and meteorological time series data, *Environmental Modelling & Software*, V. 117, PP. 14-28 (2019).
- [2] Mao F, Richards K, Toland M, Shi Y, Hannah D and Krause S. Rivervis: A tool for visualising river ecosystems, *Computers & Geosciences*, V. 123, PP. 59-64 (2019).

Технологии обработки спутниковых данных для анализа антропогенных преобразований городского ландшафта (на примере Красноярска)

Матузко Александра Константиновна

Институт вычислительного моделирования ФИЦ КНЦ СО РАН

Спутниковые снимки на сегодняшний день являются основным источником дистанционных данных для ландшафтного картографирования. Дешифрирование спутниковых снимков земной поверхности основано на применении процедур классификации изображений и экспертной оценки результатов. Набор процедур и их параметры определяются экспертом – специалистом в предметной области. Исследования городских ландшафтов были известны уже в середине 1960-х годов. Основное представление о городском ландшафте заключалось в том, что это комплекс природных компонентов, сильно изменённых человеком [1]. Анализ городского ландшафта состоит в анализе его отдельных компонентов, таких как рельеф, грунт, садово-парковые зоны, промышленные и жилые строения.

Технология выявления преобразований городского ландшафта основана на использовании температурных карт, полученных по спутниковым данным. Для исследования было принято решение рассматривать только спутниковые изображения бесснежного периода. После выбора источника спутниковых данных на территорию исследования, одной из главных проблем использования этих изображений является зашумленность их облаками и тенями от облаков, необходимо исключить зашумленные части или сцены целиком. После такого отбора количество подходящих сцен может сократиться в два и даже в три раза. В работе рассмотрено применение технологии на данных 10-го теплового канала Landsat-8 и видимых диапазонов Planet Scope. Обязательным этапом является предварительная обработка спутниковых данных, которая включает проведение атмосферной коррекции, классификацию изображения по типу подстилающей поверхности. В работе применяется классификация изображения с обучением [2].

Составлен архив температурных карт для анализа антропогенных преобразований города Красноярска, сформированный по спутниковым снимкам с 2013 по 2020 годы. В работе рассмотрены примеры изменений температуры поверхности земли в городе Красноярске за двухлетний период с сентября 2016 года по сентябрь 2018 года. Проведенная апробация позволила выявить три категории температурных изменений, которые соответствуют трем вариантам ландшафтных преобразований: без изменений, незначительные изменения с разницей 1-3 градуса и значительные изменения с разницей температур более 4 градусов.

При анализе участков с максимальными изменениями температуры, отмечено, что динамика изменений связана с изменением городской застройки, а именно, со строительством новых микрорайонов, торговых центров. Так же изменение температуры поверхности связано с изменением лесных ландшафтов, например, в местах вырубки древесных насаждений. Данная методика подходит для решения задач дистанционного мониторинга изменения городской территории, легка в организации и хорошо автоматизируется.

Литература:

[1] Ландсберг Г.Е., Климат города; перевод с англ. под ред. Дубова А. С., Л.: Гидрометеиздат, С. 248 (1983).

[2] Matuzko A.K., Yakubailik O.E., Assessment of thermal conditions in Krasnoyarsk urban area with use of different satellite data and geographic information system, Thermal Science, (2019).

Алгоритмы обработки записей землетрясений Алтае-Саянского региона и Байкальской рифтовой зоны для формирования базы данных сильных движений

Миронов Василий Александрович

Институт вычислительного моделирования ФИЦ КНЦ СО РАН

Красноярский филиал ФИЦ ИВТ

Оценка сейсмической опасности для площадки строительства – это неотъемлемая часть комплекса инженерно-геологических изысканий при проектировании ответственных объектов. В большинстве стран мира, например, в странах Европы, США, а также в Российской Федерации нормативные оценки сейсмической опасности носят вероятностный характер. Каталоги землетрясений лежат в основе построения моделей зон возникновения очагов землетрясений и моделей сейсмического эффекта, которые используются для дальнейшего расчета вероятностных карт сейсмической опасности. От того, насколько корректно отобраны, обработаны и проанализированы исходные записи землетрясений будет зависеть адекватность построенных вышеуказанных моделей и точность итоговых оценок.

Настоящая работа посвящена развитию алгоритмов и разработке программных модулей обработки записей землетрясений. В качестве исходной информации использованы 567 трёхкомпонентных записи от 86 землетрясений магнитудой $MLH > 4$, зарегистрированных 7 сейсмостанциями, расположенными в Алтае-Саянском регионе и в Байкальской рифтовой зоне за период времени с 01.07.2020 по 18.01.2021 гг.

В основе алгоритмов лежит методология, использованная Тихоокеанский центром инженерных исследований землетрясений (PACIFIC EARTHQUAKE ENGINEERING RESEARCH CENTER) для реализации научного проекта NGA-West2, в результате которых разработана обширная база данных мелкофокусных коровых землетрясений в активных тектонических регионах (Калифорния, Китай, Тайвань, Япония и др.), а также реализованы новые модели сейсмического эффекта [1].

Данная методология адаптирована под имеющиеся данные, а процесс обработки исходных записей землетрясений состоял из следующих шагов: выделение первых вступлений продольной и поперечной волны; определение границ полезного сигнала землетрясения; коррекция и фильтрация выделенного участка записи; вычисление значений PGA (пиковое ускорение грунта), PGV (пиковая скорость грунта) и спектра реакции ускорений грунта; анализ корректности полученных результатов. Вычисленные данные сопоставлены с модельными значениями современных отечественных и зарубежных уравнений прогнозирования движения грунта (УПДГ): Ф.Ф. Аптикаев, 2012 [2]; Campbell and Bozorgnia, 2014; Chiou and Youngs, 2014; Abrahamson et al., 2014 [3].

Реализация, автоматизация и совершенствование предложенных алгоритмов, а также привлечение большего объема исходных данных (записей землетрясений) в дальнейшем позволит составить обоснованное логическое дерево моделей сейсмического эффекта для отдельных регионов Российской Федерации с целью получения уточненных оценок сейсмической опасности.

Литература:

- [1] Bozorgnia Yousef et al., NGA-West2 research project, Earthquake Spectra, V. 30, No. 3, P. 973–987 (2014).
- [2] Аптикаев Ф.Ф., Инструментальная шкала сейсмической интенсивности. М.: Наука и образование, 176 с. (2012).
- [3] Douglas J., Ground motion prediction equations 1964–2020, Department of Civil and Environmental Engineering University of Strathclyde, Glasgow, United Kingdom (2021).

Оценка влияния объёмно-планировочного решения стадиона на движение людей с помощью компьютерного моделирования

Моисейченко Вячеслав Александрович

Институт вычислительного моделирования ФИЦ КНЦ СО РАН

Объёмно-планировочное решение стадиона оказывает влияние на организацию движения людей при загрузке и выгрузке, а также при чрезвычайной ситуации (ЧС). Усугубить ситуацию может одновременное (экстренное) покидание здания.

Оценить степень влияния планировочного решения на движение людей можно с помощью применения компьютерного моделирования.

Для исследования была построена 3D-модель стадиона, произведено моделирование движения людей при разгрузке. Для выполнения моделирования использовалось ПО «Сигма ПБ» [1], в котором реализована индивидуально-поточная модель движения людей (эвакуации) [2]. В качестве объекта исследования служит футбольный стадион в городе Москве, рассчитанный примерно на 15000 зрителей, рис. 1.

Выход с трибун расположен на отметке +14.2, далее организовано круговое движение по внешнему стилобату к восточным воротам и к западной лестнице, по которой зрители спускаются на отметку 0.0 и двигаются по территории к западным воротам.

Анализ результатов показал, что объёмно-планировочное решение, при котором организуется круговое движение, может привести к образованию заторов у выходов на стилобат. Влияние схемы движения по стилобату на образование скоплений внутри здания (у выходов) показано на примере симметричных по нагрузке и расположению выходов В1-В2 и В8-В9. Выходу через В1-В2 препятствует плотный поток людей, движущийся по стилобату, в то время как через В8-В9 зрители выходят практически беспрепятственно. Разница в освобождении этих выходов составила 120 секунд.

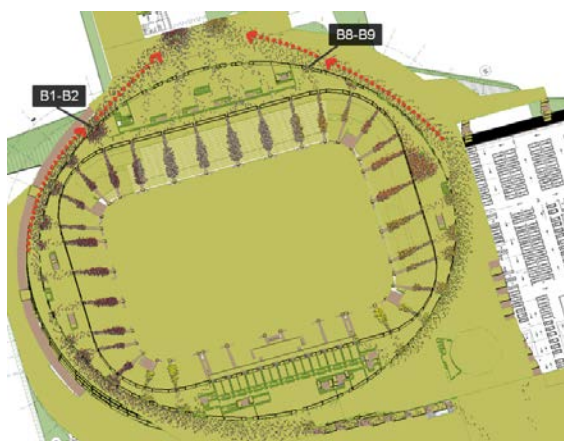


Рис. 1. Состояние разгрузки на 100 секунде. Влияние примыкающей к зданию территории на образование скоплений внутри здания.

Чтобы минимизировать скопления у выходов на стилобат, необходимо применение ограждений для отвода людского потока, движущегося по стилобату, от выходов со стадиона.

Литература:

[1] Литвинцев К. Ю., Кирик Е. С., Дектерев А. А., Харламов Е. Б., Малышев А. В., Попел Е. В. Расчетно-аналитический программный комплекс «Сигма ПБ» по моделированию развития пожара и эвакуации, Пожарная безопасность, № 4. С. 51–59 (2016).

[2] Кирик Е.С., Малышев А.В. Тестирование компьютерных программ по расчету времени эвакуации на примере модуля SigmaEva, Пожарная безопасность, № 1. С. 78-85 (2014).

Зависимость ионосферного электрического поля, проникающего через атмосферу, от магнитного поля

Нестеров Семен Александрович

Институт вычислительного моделирования ФИЦ КНЦ СО РАН

Интерес к изучению взаимосвязи ионосферы и литосферы обусловлен желанием прогнозирования землетрясений. Накануне землетрясений спутниковые данные показывают возмущения электрического поля ионосферы над сейсмическими регионами. Популярные модели литосферно-ионосферных связей рассматривают в качестве основного физического механизма проникновение квазистационарного электрического поля от земной поверхности в ионосферу. Известны трехмерные и двумерные модели [1], [2] в рамках которых показано, что проникающие за счет электропроводности электрические поля не могут быть обнаружены спутниками. Однако такие модели построены для вертикального магнитного поля и применимы только в высоких широтах.

Целью настоящей работы является построение трехмерной математической модели проникновения квазистационарного электрического поля от земной поверхности в ионосферу с наклонным магнитным полем. Построена трехмерная модель, которую можно рассматривать как усовершенствованную двумерную модель [3], применимую, когда зона подготовки землетрясения вытянута перпендикулярно магнитному меридиану. На рис. 1 представлена зависимость напряженности электрического поля в ионосфере от

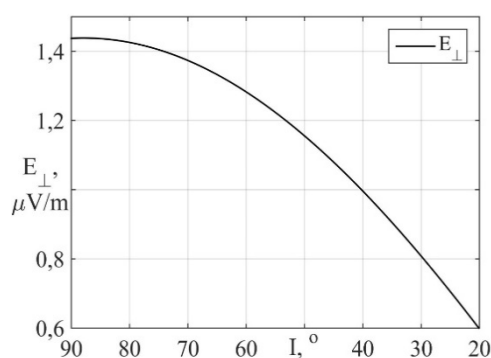


Рис. 1. Зависимость напряженности электрического поля в ионосфере от наклона магнитного поля.

наклона магнитного поля. В построенной модели полученное электрическое поле на три порядка меньше, чем обсуждаемые в [4] вариации поля. Следовательно, модель подтверждает вывод о необходимости исследования других физических механизмов, определяющих взаимодействие в цепи литосфера-атмосфера-ионосфера.

Литература:

- [1] Denisenko V. V., Ampferer M., Pomozov E. V., Kitaev A. V., Hausleitner W., Stangl G., Biernat H.K.. On electric field penetration from ground into the ionosphere, *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, V. 102. P. 341-353. (2013) DOI: 10.1016/j.jastp.2013.05.019.
- [2] Hegai V. V., Kim V. P., Liu J. Y. On a possible seismomagnetic effect in the topside ionosphere, *Adv. Space Res.* P. 1707-1713. (2015). DOI: 10.1016/j.asr.2015.07.034
- [3] Denisenko V. V., Nesterov S. A., Boudjada M. Y., Lammer H. *Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*, V.179, P. 527. (2018)
- [4] Zolotov O. V., Namgaladze A. A., Prokhorov B. E. *Russian Journal of Physical Chemistry B*, V.7, P. 599. (2013).

Расчет чистого изгиба композитной пластинки с учетом различного сопротивления растяжению и сжатию

Петраков Игорь Евгеньевич

Институт вычислительного моделирования ФИЦ КНЦ СО РАН

Композитные материалы являются существенно разномодульными, то есть их поведение при растяжении и сжатии характеризуют разные модули упругости [1]. Примерами таких материалов могут служить стеклопластики, углепластики, армированный геосинтетическими нитями лёд [2] и др.

В работе рассматривается задача чистого изгиба многослойной композитной пластинки, по-разному сопротивляющейся растяжению и сжатию в которой существует нейтральная плоскость. Уравнение изгиба получено с помощью вариационного принципа Лагранжа. Составлен функционал упругой энергии:

$$J(w) = \frac{1}{2} \iint_{\Omega} (D_{11} \left| \frac{\partial^2 w}{\partial x_1^2} \right|^2 + D_{22} \left| \frac{\partial^2 w}{\partial x_2^2} \right|^2 + 2D_{12} \frac{\partial^2 w}{\partial x_1^2} \frac{\partial^2 w}{\partial x_2^2} + F_{12} \left| \frac{\partial^2 w}{\partial x_1 \partial x_2} \right|^2 + 2F_{11} \frac{\partial^2 w}{\partial x_1^2} \frac{\partial^2 w}{\partial x_1 \partial x_2} + 2F_{22} \frac{\partial^2 w}{\partial x_2^2} \frac{\partial^2 w}{\partial x_1 \partial x_2} - 2qw) dx_1 dx_2 - \int_{\Gamma} (Qw + M \frac{\partial w}{\partial n}) ds,$$

где Ω – двумерная область с границей Γ , $q(x_1, x_2)$ – распределенная поперечная нагрузка, $Q(x_1, x_2)$ и $M(x_1, x_2)$ – поперечное усилие и изгибающий момент на краях пластинки. Изгибные жесткости D_{ij} и F_{ij} являются интегралами по толщине пластинки зависящими от положения нейтральной плоскости η и состояния сжатия или растяжения:

$$D_{ij} = \int_0^h (x_3 - \eta)^2 E_{ij} dx_3, \quad F_{ij} = \int_0^h (x_3 - \eta)^2 G_{ij} dx_3.$$

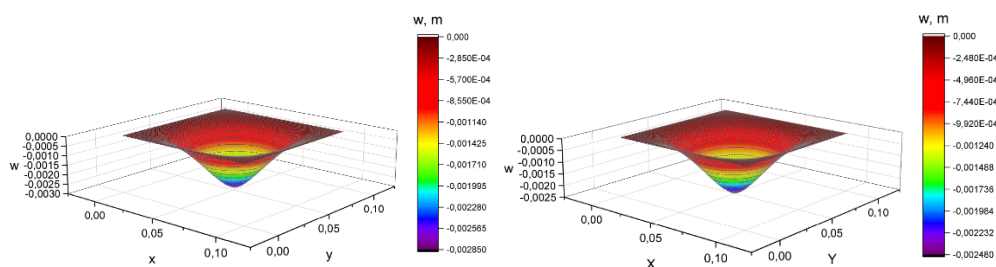


Рис. 1. Изгиб однослойной композитной пластинки под действием поперечной нагрузки.

Полученное уравнение численно решено с помощью метода конечных элементов с использованием треугольного элемента Белла. Проведены вычислительные эксперименты и показано влияние учета разномодульности на полученное решение. На рис. 1 представлены прогибы однослойной пластинки с учетом и без учета разномодульности, разница между которыми составляет около 15%.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 20-31-90032. Благодарность соавтору работы В. М. Садовскому.

Литература:

- [1] Мешков Е.В., Кулик В.И., Упитис З.Т., и др., Деформирование ортогонально армированных органопластиков при одноосном растяжении и сжатии, *Механика композитных материалов*, №4, С. 609-615 (1987).
- [2] Якименко О.В., Сиротюк В.В., Усиление ледовых переправ геосинтетическими материалами, Омск.: СибАДИ, С. 168 (2015).

Численное исследование режимов течения воды и нефти в микроканале Y-типа

Пряжников Андрей Иванович

Сибирский федеральный университет

Повышение нефтеотдачи является весьма актуальной задачей. Улучшение нефтеотдачи в терригенных породах (сложенных, например, песчаником) во многом определяется структурой течения в поровом пространстве. Режимы течения, возникающие в микропористой среде, зависят от многих факторов (например, геометрии пористой среды, физических свойств нефти и вытесняющей жидкости). Течения несмешивающихся жидкостей широко распространены [1]. Для практических приложений важно знать карту режимов течения, а также их гидродинамические характеристики. Целью данной работы являлось систематическое исследование режимов течения воды и сырой нефти в микроканале Y-типа.

Для моделирования течения вода-нефть в Y-микроканале использовалась численная методика, основанная на методе VOF (Volume of Fluid) [2]. Суть метода VOF заключается в рассмотрении системы вода-нефть как единой двухкомпонентной среды. Пространственное распределение фаз в пределах расчетной области определяется при помощи специальной функции маркера, величина которой задает объемную долю жидкой фазы в расчетной ячейке. Поскольку свободная поверхность движется вместе с жидкостью, то отслеживание перемещения свободной границы в пространстве осуществляется путем решения уравнения переноса объемной доли жидкой фазы в ячейке.

При рассмотрении течений жидкости с границей раздела необходимо учитывать поверхностное натяжение в микроканале. Чаще всего для моделирования поверхностного натяжения в рамках метода VOF используют CSF (Continuum surface force) алгоритм [3], суть которого состоит во введении в уравнения движения дополнительной объемной силы.

Постановка задачи. В один из входов Y-микроканала поставляется вода, а в другой – легкая нефть (0.825 г/см^3 , $8.5 \text{ мПа}\cdot\text{с}$). Ширина, высота и длина микроканала составляла 0.5, 0.2 и 10 мм соответственно. Размеры входных участков: ширина – 0.325 мм, длина 5 мм.

В качестве граничных условий на входах в микроканал задается значение массового расхода, соответствующего условиям эксперимента, с установившимся профилем скорости, на выходе – условия фиксированного давления. На стенках канала используется условие прилипания.

В результате систематического исследования было установлено четыре различных типа режима течения вода-нефть в Y-микроканале: снарядный, капельный, стратифицированный и хаотический. Полученные в ходе расчетов картины течения для различных режимов хорошо согласуются с экспериментальными фотографиями. Определены гидродинамические характеристики (длина и частота отрыва снарядов/капель) режимов течения. Построены корреляции безразмерной длины и числа Струхала отрыва снарядов и капель.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания СФУ (номер FSRZ-2020-0012). Выражаю благодарность соавторам Скоробогатовой А.Д., Гузей Д.В, Пряжникову М.И.

Литература:

- [1] Yao C., Zhao Y., Ma H., et al., Chem. Eng. Sci., V.229, 116017 (2021).
- [2] Hirt C. W., Nichols B. D., J. Comput. Phys., V.39, PP. 201-226 (1981).
- [3] Brackbill J. U., Kothe D. B., Zemach C., J. Comput. Phys. V.100, PP. 335–354 (1992).

Разработка макета веб-приложения для визуализации и обработки пространственно-временных данных аграрного мониторинга

Пушкарев Александр Александрович

ФИЦ КНЦ СО РАН

Построение программных решений для визуализации, обработки и анализа пространственно-временных данных постепенно меняет свой вектор развития от десктопных программ в сторону веб технологий и облачных вычислений. В работах [1, 2] представлены некоторые из существующих систем, позволяющих выполнять базовые, а также некоторые более сложные операции над пространственно-временными данными. В настоящей работе рассматриваются некоторые особенности клиентской и серверной реализации веб-приложения для визуализации и анализа разнородных пространственно-временных данных аграрного мониторинга с применением JavaScript библиотек React и OpenLayers.

Разрабатываемая информационно-аналитическая система включает в себя множество различных компонентов, одним из которых является клиентское веб-приложение. Для построения клиентских частей веб-приложений существуют различные подходы, основными из которых являются использование движков, либо готовых решений, разработка без использования фреймворков и крупномасштабных библиотек, и построение приложений на базе JavaScript фреймворков. В данной работе, реализация происходит при помощи JavaScript библиотеки React. Библиотека React позволяет разрабатывать гибкие и быстрые клиентские веб-приложения, с применением передовых технологий и высокой масштабируемостью конечного продукта. Так как React не является фреймворком, то есть не диктует разработчику жестких правил по написанию кода, эта библиотека обладает большей гибкостью, нежели фреймворки, но в тоже время нуждается в поддержке сторонних библиотек, которые упростят разработку приложений, как например библиотека redux, которая позволяет удобно управлять глобальным состоянием приложения.

Серверная часть разрабатывается на базе Node.js с использованием фреймворка Express, в связке с NoSQL базой данных MongoDB, использование которой обусловлено отсутствием потенциально сложных схем хранения данных на сервере. Такой подход позволяет использовать всего один язык программирования JavaScript для разработки всего веб-приложения что в разы упрощает разработку.

На текущий момент в веб-приложении реализована страница администрирования, а также некоторые возможности визуализации и анализа пространственных данных. На странице администрирования оператор системы может добавлять источники пространственных данных, предоставляемых по протоколу WMS, которые будут визуализироваться на карте, с возможностью просмотра временной динамики и атрибутивной информации. Также в панели администрирования вносятся изменения в некоторые начальные параметры карты, такие как тайловая подложка, центр и исходный масштаб. На стороне сервера реализована организация хранения и обработки запросов к ссылкам на пространственные данные, дополнительную информацию о данных, а также настройкам стартового состояния веб-приложения, и данным о пользователях системы.

Литература:

[1] Tamiminia H., Salehi B., Mahdianpari M., et al., Google Earth Engine for geo-big data applications: A meta-analysis and systematic review, ISPRS Journal of Photogrammetry and Remote Sensing, V. 164, PP. 152-170 (2020).

[2] Liangfeng Z., Xinlan C., Zhiwen L. Multiple-view geospatial comparison using web-based virtual globes, ISPRS Journal of Photogrammetry and Remote Sensing, V. 156, PP. 235-246 (2019).

Численное решение системы уравнений для касательного напряжения и угловой скорости, описывающей воздействие электрического поля на жидкий кристалл

Смолехо Ирина Владимировна

Институт вычислительного моделирования ФИЦ КНЦ СО РАН

Для исследования динамических процессов в жидких кристаллах была предложена общая математическая модель, описывающая механические, температурные и электрические воздействия [1]. На основе уравнений модели в [2, 3] получена и исследована подсистема уравнений второго порядка для касательного напряжения и угловой скорости, учитывающая только механическое воздействие. В настоящей работе подсистема усложняется с целью учета возмущений жидкого кристалла электрическим полем. Модель электрического воздействия предложена в [4]. Протяженный жидкокристаллический слой помещается между пластинами-обкладками конденсатора. Электрическое поле возникает за счет появления зарядов на пластинах. В правые части уравнений для касательного напряжения и угловой скорости входят объемные силы и моменты, обусловленные воздействием электрического поля. Разработан алгоритм численного решения этой подсистемы при заданных начальных данных и граничных условиях. Первый этап алгоритма заключается в определении электрического потенциала с использованием метода прямых и итерационного метода. Затем касательное напряжение и угловая скорость вычисляются с помощью конечно-разностной схемы «крест» второго порядка точности. На основе спектрального анализа Фурье показана устойчивость схемы при некотором фиксированном шаге по времени. Доказано, что при выборе меньшего шага по времени, схема остается устойчивой. Вычислительный алгоритм реализован в виде параллельной программы на языке C++ с применением технологии CUDA для компьютерных систем с графическими ускорителями. Для демонстрации работоспособности алгоритма и программы проведена серия расчетов переориентации молекул жидкого кристалла под действием электрического поля.

Работа поддержана Красноярским математическим центром, финансируемым Минобрнауки РФ в рамках мероприятий по созданию и развитию региональных НОМЦ (Соглашение 075-02-2020-1631).

Литература:

- [1] Sadovskii V., Sadovskaya O., Acoustic approximation of the governing equations of liquid crystals under weak thermomechanical and electrostatic perturbations. In: *Advances in Mechanics of Microstructured Media and Structures. Ser.: Advanced Structured Materials. V. 87, chapt. 17. PP. 297–341. Cham: Springer (2018).*
- [2] Смолехо И.В., Садовская О.В., Садовский В.М., Численное моделирование акустических волн в жидком кристалле с использованием технологии CUDA, *Вычислительные технологии*, Т. 22, спец. вып. 1. С. 87–98 (2017).
- [3] Smolekho I., Sadovskaya O., Sadovskii V., Numerical analysis of acoustic waves in a liquid crystal taking into account couple-stress interaction, *CEUR Workshop Proc.: Mathematical and Information Technologies (MIT-2016). V. 1839. PP. 473–486 (2017).*
- [4] Sadovskii V.M., Sadovskaya O.V., Smolekho I.V., Parallel implementation of the algorithm describing the behavior of liquid crystals under the action of electric field, *AIP Conf. Proc. V. 2025. P. 070005-1–070005-9 (2018).*

Секция «Школы РАН»

Исследование активности и жизнеспособности клеток периферической крови при различных условиях инкубации

Верецагин К., Сизых К., Рейзмунт А., Семёнов И., Рогозин Н., Мацуганов Т., Беленюк В.Д.

МАОУ Гимназия № 13 г. Красноярск

НИИ медицинских проблем Севера ФИЦ КНЦ СО РАН

В XXI веке из культур клеток получают ферменты, синтетические гормоны, моноклональные антитела, и многие другие. Важно отметить, что культивирование клеток является неотъемлемой частью технологии культивирования тканей и тканевой инженерии, поскольку именно оно определяет основы выращивания клеток и поддержания их в жизнеспособном состоянии *ex vivo*. **Целью** нашей работы было изучение зависимости роста клеток крови *in vitro* от различных условиях.

Материалы и методы. Используя градиент Фиколла (1,077) выделялись мононуклеары из периферической крови 4-х относительно здоровых доноров. Полученные клетки отмывали и инкубировали 120 часов в CO₂ инкубаторе в различных контролируемых условиях при температуре 37 °С.

Таблица 1. Выживаемость и активация клеток при инкубации в различных условиях

№	CO ₂	Глюкоза	Ср. 199	Ср. RPMI 1640	Ультрафиолет	Живые клетки	Актив. клетки	Агрегаты
1	+	+	+			80	40	2
2	+		+			70	10	5
3				+		65	10	12
4	+			+		99	10	8
5	+			+	+	70	70	10
6	+	+		+		95	40	5

Результаты. Показана четкая зависимость выживаемости и уровня активации клеток от изменений в условиях инкубации. Так, в образце с ограниченным доступом CO₂ наблюдалась наибольшая гибель клеток и большое количество агрегатов, на фоне низкого процента активированных клеток. Образцы со средой, обогащенной глюкозой, показали относительно высокий процент активированных клеток, на фоне низкого количества агрегатов и хорошими показателями выживаемости. В образце, подвергнутому облучению ультрафиолетом, наблюдался наибольший процент активированных клеток на фоне высоких значений клеточной гибели и процента агрегатов. Остальные образцы продемонстрировали низкий процент активированных клеток, при относительно небольшом проценте агрегатов. В тоже время, лучшие результаты выживаемости клеток были получены при использовании культуральной среды RPMI 1640.

Заключение. В ходе нашей работы мы подтвердили гипотезу, что даже незначительные изменения в условиях инкубации одних и тех же клеток могут приводить к разным результатам выживаемости и активации клеток. Следовательно, стоит с особой осторожностью подходить к вопросу подбора условий инкубации, особенно когда речь заходит об аутологичных клетках человеческих тканей, играющих значимую роль в сфере регенеративной медицины и терапии многих тяжелых заболеваний, в том числе онкологических.

Выражаем благодарность нашему научному руководителю, к.б.н. НИИ МПС ФИЦ КНЦ СО РАН, Смольниковой Марине Викторовне.

Исследование дифференцировки нейрональных стволовых и прогениторных клеток

Поддубный А., Чистова А., Солтис М., Потапова Е., Василько В., Шилкина К., Хилажева Е.Д.

МАОУ Гимназия № 13 г. Красноярск

ФГБОУ ВО КрасГМУ им. проф. В.Ф. Войно-Ясенецкого Минздрава России

В настоящее время существуют различные методологические подходы к получению клеток-компонентов для создания моделей гематоэнцефалического барьера *in vitro*, в том числе основанные на выделении и культивировании стволовых и прогениторных клеток головного мозга – нейросфер (НСФ) и их последующей дифференцировке в астроциты и нейроны [1]. Между тем, результат процесса дифференцировки зависит от многих факторов, в числе которых – состав питательной среды и длительность культивирования НСФ, количество их пересевов - пассажей. В связи с этим нами была поставлена **цель** - исследовать процессы дифференцировки нейрональных стволовых и прогениторных клеток в различных условиях.

Материалы и методы. В работе использовали крысиные НСФ, полученные по описанному ранее протоколу [2]. НСФ разных пассажей (П2 и П8) подвергали дифференцировке в питательных средах разного состава. Первая среда на основе DMEM с добавлением 25% FBS, L-глутамина и пенициллина/стрептомицина. Вторая среда – NeuroCultNS-ADifferentiationKit (StemCell, Канада). В течение недели наблюдали за процессом дифференцировки, после чего клетки подвергали иммуоцитохимическому окрашиванию на маркеры астроцитов (GFAP) и нейронов (NeuN). Микроскопию осуществляли на флуоресцентном микроскопе ZOE (BioRad, США).

Результаты исследования. В таблице 1 представлено полученное соотношение количества астроцитов и нейронов в культуре после дифференцировки НСФ в разных экспериментальных группах.

Таблица 1. Соотношение количества астроцитов и нейронов после дифференцировки НСФ

	НСФ (П2) + DMEM	НСФ (П8) + DMEM	НСФ (П2) + NeuroCult	НСФ (П8) + NeuroCult
Астроциты, %	47,5 ± 2,9	55,9 ± 4,4	27,1 ± 2,5	35,4 ± 3,6
Нейроны, %	52,5 ± 2,9	44,1 ± 4,4	72,9 ± 2,5	64,6 ± 3,6

Из представленных данных видно, что при дифференцировке НСФ в среде на основе DMEM образуется гораздо больше астроцитов, а в среде NeuroCult - нейронов. Также выявлено, что при дифференцировке НСФ с меньшим количеством пассажей образуется большее количество нейронов. Кроме того, в ходе наблюдения за процессом дифференцировки было выявлено, что НСФ дифференцируются значительно быстрее в среде на основе DMEM.

Таким образом, нами показано, что скорость дифференцировки и клеточный состав полученных культур отличаются в зависимости от пассажа НСФ и состава среды. Полученные данные могут применяться исследователями при создании модели гематоэнцефалического барьера *in vitro* для изучения закономерностей его развития и функционирования в норме и при экспериментальной патологии.

Выражаем благодарность нашему научному руководителю, к.б.н. НИИ МПС ФИЦ КНЦ СО РАН, Смольниковой Марине Викторовне.

Литература:

- [1] Моргун А.В., и др. *Анналы клинической и экспериментальной неврологии*, 4 (2012).
[2] Хилажева Е.Д., и др. *Цитология*, 57, 10 (2015).

Изучение термостабильности целентеразин-зависимых люцифераз *Renilla muellery*, *Metridia longau NanoLuc*

Дорошкевич И.А., Ворошилов Л., Алябьев Н.В., Обедина Д., Безрученко Ю.Е.,
Красицкая В.В.

МАОУ Гимназия № 13 г. Красноярск

Институт Биофизики ФИЦ КНЦ СО РАН

Современные биомедицинские исследования, например, высокопроизводительный скрининг лекарственных препаратов, детальные исследования механизмов развития заболеваний и разработка новых методов для персонализированной медицины, основаны на различных аналитических методиках, в которых все активнее используют репортерные системы на основе биолюминесцентных белков. Биолюминесцентные люциферазы, в качестве репортеров, обладают очень высоким квантовым выходом, простотой химической реакции и не требуют возбуждающего излучения, что определяет популярность их использования для разработки новых биоимиджинговых и аналитических методов в биомедицине [1]. Определение биохимических и биолюминесцентных свойств различных люцифераз, открывает возможности целенаправленного выбора репортера при разработке технологий биоимиджинга *in vivo* для клеточной биологии и экспериментальной медицины, а также методов анализа *in vitro* для медицинской диагностики [2]. Термостабильность фермента является одним из важнейших параметров, определяющих возможность его практического применения. В литературе имеется большое количество способов представления данных о стабильности, но наиболее объективным является исследование кинетики термоинактивации, поскольку только такие данные позволяют точно прогнозировать стабильность фермента через любой промежуток времени.

Целью работы было измерить термостабильность целентеразин-зависимых люцифераз *Renilla muellery*, *Metridia longa* и *NanoLuc* и выявить люциферазу, обладающую наибольшей стабильностью. Термоинактивацию образцов люцифераз проводили, инкубируя образцы при температурах 20°C, 30°C, 40°C и 50°C, с периодическим измерением их остаточной биолюминесцентной активности.

Результаты. Показано, что целентеразин-зависимые люциферазы *Renilla muellery*, *Metridia longa* и *NanoLuc* обладают разной термостабильностью. Наименее устойчива к нагреванию люцифераза *Renilla muellery*: инкубирование в течение часа при 30°C приводит к потере 62% активности, в то время как *NanoLuc* и люцифераза *Metridia longa* теряет только 40% и 30% активности, соответственно. Инкубирование в течение часа при 50°C приводит к потере 80%, 60% и 40% активности люцифераз *Renilla muellery*, *NanoLuc* и *Metridia longa*, соответственно. Устойчивость к нагреванию люциферазы *Metridia longa* может быть объяснена наличием в ее структуре 5 цистеиновых мостов, стабилизирующих молекулу. Небольшой размер молекул люцифераз *NanoLuc* и *Metridia longac* сочетанием с устойчивостью при нагревании делают их наиболее перспективными маркерными белками для использования в биоимиджинге *in vivo*, а также при разработке методов молекулярной диагностики.

Выражаем благодарность нашему научному руководителю, к.б.н. НИИ МПС ФИЦ КНЦ СО РАН, Смольниковой Марине Викторовне.

Литература:

- [1] Маркова С.В., Высоцкий Е.С. Целентеразин-зависимые люциферазы. Биохимия, Т.80, Вып.6, С.845-866 (2015).
- [2] Котлобай А.А., Каськова З.М., Ямпольский И.В. Палитра люцифераз: природные инструменты для новых методов в биомедицине. Т.12, №2(45), С.15-26 (2020).

Морфологическое состояние слизистой оболочки полости рта при использовании зубной пасты

Кротов Г., Зуева К., Талантаева А., Левичева В., Пуговкина Д., Широглазова С., Орлова С., Перетяцько О.В.

МАОУ Гимназия № 13 г. Красноярск

НИИ медицинских проблем Севера ФИЦ КНЦ СО РАН

Здоровье полости рта зависит от качественного ухода. Буккальный эпителий обладает большой информативностью в оценке состояния полости рта. В настоящее время производители предлагают большое количество зубных паст разнообразных по составу, свойствам и оказываемому действию. В нашем исследовании мы выдвинули **гипотезу**, что зубная паста оказывает воздействие на морфологическое состояние слизистой оболочки полости рта. Таким образом, **целью** работы явилось сравнить морфологическое состояние слизистой оболочки полости рта до и после использования зубной пасты.

Материалы и методы. Объектом исследования являлся буккальный эпителий, собранный из полости рта. Были исследовали зубные пасты с различным составом и стоимостью («Лесной бальзам», «SILCAMED», «Aquafresh»). Основным методом исследования был выбран метод жидкостной цитологии с окраской по Романовскому-Гимза (для оценки клеточного состава), Папаниколау (для оценки степени зрелости эпителия) и Граму (для выявления микрофлоры) с визуализацией в световом микроскопе и оценкой количества клеточных элементов в полях зрения при увеличении в 100 раз и 1000 - при оценке микрофлоры.

Результаты. В результате нашего исследования мы оценили морфологический состав слизистой оболочки полости рта и установили, что количество слизи (голубой фон препарата), лейкоцитов, незрелых клеток буккального эпителия (окрашивание в оттенки зеленого) и обсемененность бактериями Грам (-) выражено больше до использования зубной пасты (Рис. 1).

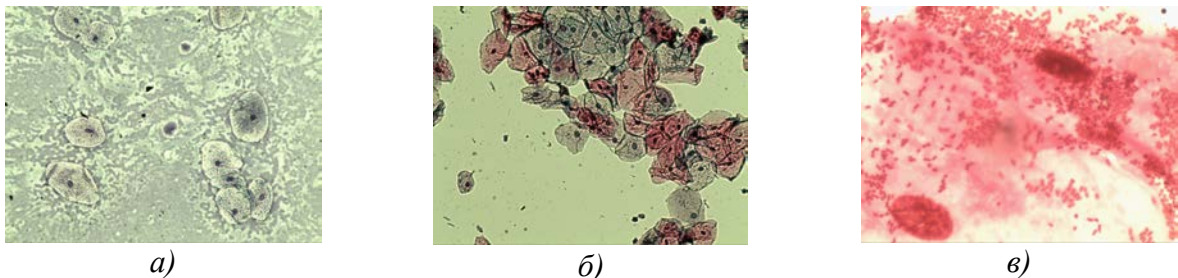


Рис. 1. Цитопрепарат буккального эпителия до использования зубной пасты: а) увеличение $\times 100$. Окраска Романовский-Гимза; б) увеличение $\times 100$. Окраска Папаниколау; в) увеличение $\times 1000$. Окраска по Граму.

После использования зубной пасты различных производителей было отмечено снижение количества слизи, лейкоцитов и количества незрелых эпителиоцитов слизистой оболочки полости рта.

Таким образом, можно **заключить**, что микроскопическое строение буккального эпителия отличается до и после использования зубной пасты, а все испытуемые образцы оказывают одинаковое противовоспалительное и очищающее воздействие на морфологическое строение слизистой оболочки полости рта вне зависимости от своего состава и стоимости.

Выражаем благодарность нашему куратору – Мельниковой Анастасии и нашему научному руководителю, к.б.н. НИИ МПС ФИЦ КНЦ СО РАН, Смольниковой Марине Викторовне.

Сравнение эфирного масла апельсина, полученного методом дистилляции и коммерческого эфирного масла с использованием метода хромато-масс-спектрометрии

Семиешина А.П., Портнова Д.В., Котова К.К., Баева А.И.

МАОУ Лицей №7 им. Героя Советского Союза. Б.К. Чернышева г. Красноярск

На настоящий момент очень возросла потребность в использовании продуктов на натуральной основе, так как искусственные препараты имеют широкий спектр побочных эффектов. Эфирные масла являются продуктами природного происхождения и уже широко используются в различных сферах жизни. Из цитрусовых эфирных масел масло апельсина, состоящее из лимонена, пинена, мирцена и других компонентов известно своими возможностями, такими как: снижение стресса, подъема настроения, расслабления и другими [1]. Согласно литературным данным состав апельсинового масла варьируется в зависимости от его получения [2]. Гидродистилляция - один из самых простых методов получения эфирных масел.

В работе использовали классическую установку при гидродистилляции, 117 г апельсиновой корки измельченной до состояния порошка, помещали в колбу с большим количеством воды, через которую проходило тепло с помощью горелки. Полученную смесь воды и эфирного масла впоследствии разделяли с помощью делительной воронки.

Полученное эфирное масло анализировали методом хромато-масс-спектрометрии (ГХ-МС). По данным ГХ-МС установили, что в составе эфирных масел преобладают такие компоненты как лимонен (75,89 отн. %), мирцен (5,49 отн. %), линалоол (1,55 отн. %), α -пинен (1,34 отн. %), терпинеол (1,33 отн. %). Далее проводили сравнение коммерческого эфирного масла и полученного с хроматографическим профилем, установленным ГОСТ. При сравнение результатов с литературными данными не было замечено существенных отклонений от норм содержания компонентов [3].

Табл.1 Полученные данные о содержании основных компонентов в эфирных маслах апельсина.

Соединени	Содержание отн.%	
	Лабораторное масло	Коммерческое масло
α -Пинен	1,34	1,81
Мирцен	5,49	5,33
Лимонен	75,89	81,36
Линалоол	1,55	1,56
Терпинеол	1,33	0,17

Таким образом методом гидродистилляции было получено эфирное масло апельсина, компонентный состав которого позволяет судить о том, что в работе использовался апельсин сладкого сорта, по более низкому содержанию лимонена [4].

Литература:

- [1] Soldatchenko S., Kashchenko G., Pidaev A., "Aromatherapy. Prevention and treatment of diseases with essential oils". 4: 69-73 (1998).
- [2] Steinke, K., Jose, E., Sicker, D., Siehl, H.-U., Zeller, K.P. Berger, C. (2013), Sinensetin. Chemie in unserer Zeit, 47: 158–163.
- [3] Verzera A., Trozzi A., Dugo G., Di Bella G., Cotroneo A., "Biological lemon and sweet orange essential oil composition". Flavour and Fragrance Journal. 19 (6): 544–548 (2004).
- [4] ГОСТ ISO 3140-2019 Essential oil of sweet orange expressed [Citrus sinensis (L.)]

Выделение пектина из коры лиственницы сибирской

Захарченко А.В., Лисицына Ю.М.

МАОУ Лицей №7 им. Героя Советского Союза. Б.К. Чернышева г. Красноярск

Пектины - полисахариды, образованные остатками главным образом галактуроновой кислоты. Присутствуют во всех высших растениях, особенно во фруктах, и в некоторых водных растениях [1]. Пектины являются сырьем для пищевой, фармакологической промышленности, а также имеют перспективные свойства связывания тяжелых металлов. Одним из источников пектина может служить кора хвойных растений [2]. Известно, что Красноярский край обладает крупнейшими в России лесосырьевыми ресурсами. Ежегодно производится заготовка древесины, в основном хвойной, в объеме около 13 млн. м³. Отходы достигают 50% от заготавливаемой и перерабатываемой древесины [3]. Таким образом, выделение пектинов из коры лиственницы, которая является обременительным отходом при лесозаготовках, является актуальной задачей.

Для выделения пектина из коры лиственницы использовался метод ступенчатой экстракции, согласно которому сначала в аппарате Сокслета проводилась экстракция коры гексаном для удаления хвойного воска. Далее кора экстрагировалась водным раствором этанола. Остаток спирта вымывался из коры путем нагрева в колбе с дистиллированной водой. Операция выделения пектинов проводилась с помощью обработки водным раствором соляной кислоты с последующим концентрированием отфильтрованного раствора и осаждением пектинов холодным раствором этилового спирта. Выход пектинов составил 4,5%.

Исследование полученных пектинов проводили с помощью метода гель-проникающей хроматографии. Было установлено, что пектины из коры лиственницы характеризуются высокой молекулярной массой и однородностью. Средневесовая молекулярная масса составила 145000 г/моль. Определение уронидной составляющей проведено карбазольным методом с использованием спектрофотометра при длине волны 535 нм. Полученное значение уронидной составляющей 63,4 %, что является неплохим показателем для пектина. Это говорит о том, что выделенные пектины обладают хорошими желирующими свойствами.

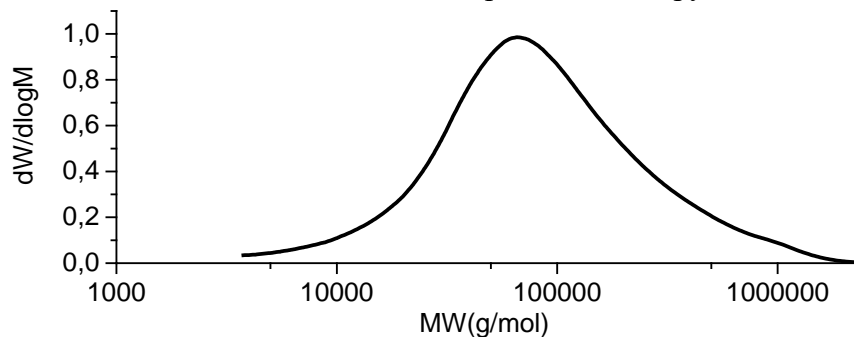


Рис. 1. Кривая молекулярно-массового распределения пектинов коры лиственницы.

Литература:

[1] Машанов, А.И. Биоконверсия растительного сырья: учеб. пособие / А.И. Машанов, Н.А. Величко, Е.Е. Ташлыкова; Краснояр. гос. аграр. ун-т. – Красноярск, 2014. – 223 с.

[2] Дитрих В.И., Андрияс А.А., Пережилин А.И., Корпачев В.П. Оценка объемов и возможные пути использования отходов лесозаготовок на примере Красноярского края. Хвойные бореальной зоны. 2010. Т. XXVII. № 3 – 4. С. 346-351

[3] Донченко Л.В. Технология пектина и пектинопродуктов. – М.: Дели, 2000. – 256 с.

Выделение эфирного масла розмарина методом экстракции этанолом и сравнение его с коммерческим эфирным маслом методами хромато-масс-спектрометрии

Берш Д. А., Журкина М.И., Продайвода М. В., Суворова П. И., Ухвакова В.А.

МАОУ Лицей №7 им. Героя Советского Союза. Б.К. Чернышева г. Красноярск

Эфирные масла, будучи продуктами природного происхождения, состоящими из терпенов, терпеноидов, спиртов, эфиров и др., широко используются в различных сферах жизни. Эфирное масло розмарина, состоящее из α -пинена, цинеола, камфоры и других компонентов известно своими полезными свойствами, такими как: улучшение памяти, нервного состояния, а также облегчение головной боли и др. [1]. Состав эфирного масла во многом зависит от метода получения [2]. Таким образом варьированием методики получения эфирных масел возможно получить продукты разнообразного назначения. Зачастую, из-за сложности добычи, эфирные масла фальсифицируют, что повышает важность установления точного компонентного состава масла.

При получении эфирного масла розмарина использовали экстракцию в аппарате Сокслета свежих измельченных до 2-5 мм листьев розмарина массой 30 г 70% раствором этилового спирта в течение 10 часов. Из полученного экстракта отгоняли этиловый спирт, и отфильтровали полученный концентрат.

Полученное эфирное масло анализировали методом хромато-масс-спектрометрии (ГХ-МС). По данным ГХ-МС установили, что в составе эфирных масел преобладают такие компоненты как α -пинен, камфен, цинеол, камфара, вербенон. При сравнении результатов с литературными данными [1-3], отмечено повышенное содержания вербенона и пониженное содержание цинеола. Такое различие можно обосновать окислением α -пинена и переходом его в вербенон [4] в процессе выделения методом экстракции и очистки эфирного масла, а пониженное содержание цинеола, вероятно, связано с его высокой растворимостью в этиловом спирте. При сравнении коммерческого образца и выделенного в лабораторных условиях было выявлено явное различие в содержании α -пинена и цинеола, что обуславливается разными странами произрастания исходного сырья.

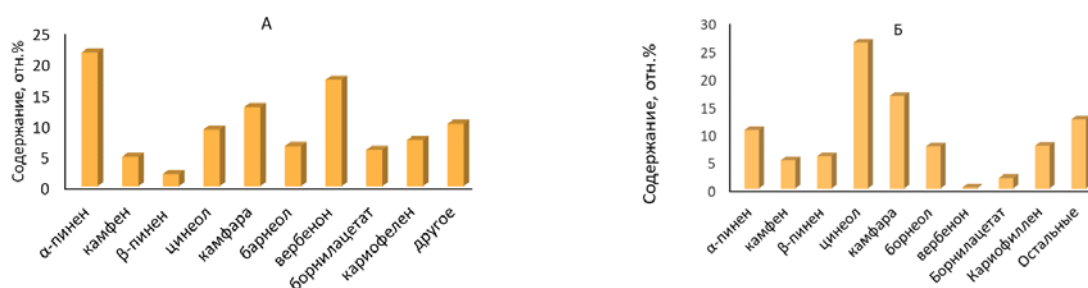


Рис. 1. Выход основных компонентов А) в полученном, Б) коммерческом образце эфирного масла розмарина.

В данной работе методом экстракции этиловым спиртом было выделено эфирное масло розмарина, компонентный состав которого позволяет судить о том, что использованный в работе розмарин относится к испанскому виду, а коммерческий к тунискому [3]. В двух анализируемых нами экземплярах не было найдено посторонних соединений, что свидетельствует о натуральности производства коммерческого и лабораторного масел.

Литература:

- [1] Lapko I.V., Aksenova U.B., Kuznecova O.V., Vasilevskij S.V., et al., Scientific Center «Signal»; Analitika i kontrol' (2019)
- [2] Boutekedjiret C., Belabbes R., Journal of Essential Oil Research. Vol. 16, (2004).
- [3] Laiq ur Rahman, Kukerja A.K., Shishir K. Singh, Anand Singh, Anju Yadav & S P S Khanuja. J. Spices Arom. Crops. Vol. 16 (1) PP. 55–57 (2007)
- [4] Hu, Q.; Lin, G.-S.; Duan, W.-G.; Huang, M.; Lei, F.-H. Molecules 2017, 22, 1678.

Получение кофеина из чая и определение его чистоты методами ВЭЖХ и ГХ-МС

Паремский А., Студеникина А., Щедрин Т., Безъязыкова Б., Алещенко Я., Важничая В.

МАОУ Лицей №7 им. Героя Советского Союза. Б.К. Чернышева г. Красноярск

Кофеин – вещество, которое в натуральном виде содержится во многих растениях и широко применяется для производства тонизирующих продуктов и лекарств [1]. Для применения в пищевой и фармацевтической промышленности актуальным является получение чистого кофеина. Таким образом, целью нашей работы было экстракционное выделение кофеина из Цейлонского чая с последующим определением его чистоты современными хроматографическими методами.

Объектом исследования был цейлонский черный чай марки «Принцесса Канди». Для осаждения танинов при кипячении использовали оксид магния. В качестве основного экстрагента использовали хлороформ. Полученный продукт анализировали на жидкостном хроматографе МилиХром А-02 и методом ГХ-МС на хроматографе Agilent technologies 7890 GC system.

Проанализировав полученный образец методом ВЭЖХ, получили хроматограмму (рис.1). По калибровочному отклику (большой пик) и площади полученного пика оценили процентное содержание кофеина. Оно составило 65 %. Более детальное рассмотрение хроматограммы показало наличие примесей в образце (выделенный участок). Методом ГХМС определяли состав примесей. На рисунке 2 представлена хроматограмма всех летучих соединений нашего образца в задаваемом диапазоне температур (до 300 С). Основной пик соответствует кофеину (полученный масс-спектр соответствует кофеину [2]). Было установлено, что сопутствующие пики с малой интенсивностью соответствуют примесям растворителя, а не примесям продукта.

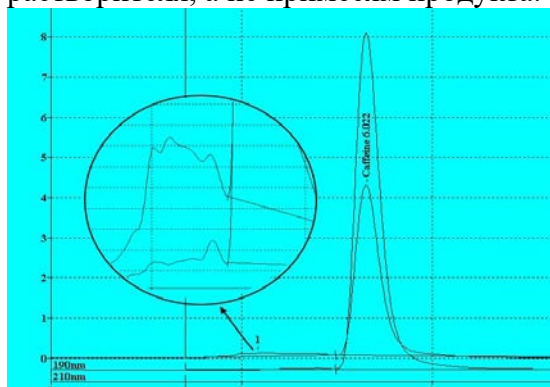


Рис. 1. Хроматограмма продукта полученная методом ВЭЖХ.

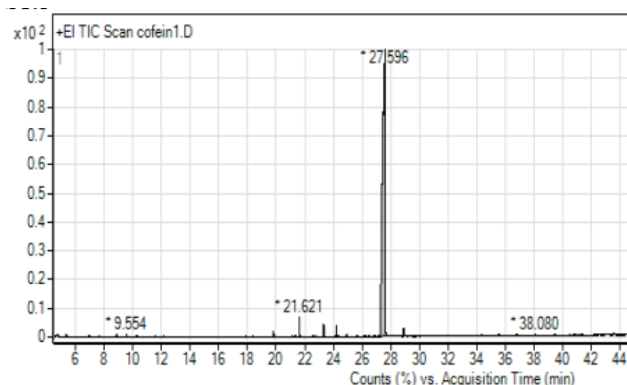


Рис. 2. Хроматограмма продукта полученная методом ГХ-МС.

В результате нашей работы удалось выделить кофеин из чая экстракционным методом. Получено 0.5 грамм продукта, чистотой 65% из 25 граммов чая. Выход продукта составил 1.3%. Методом ГХ-МС не удалось достоверно установить состав примесей, однако литературные источники указывают на то, что сопутствующими компонентами при экстракции кофеина из чая являются танины. Затруднение с их идентификацией, вероятно, связаны с тем, что они не летучи в заданном интервале температур работы хроматографа. В дальнейшей работе мы планируем определить состав примесей используя жидкостную.

Выражаем благодарность руководителям группы Д.В. Кузьмину и Д.О. Вигулю.

Литература:

- [1] Bennett Alan Weinberg, Bonnie K. Bealer. The World of Caffeine: The Science and Culture of the World's Most Popular Drug (англ.). — Routledge, 2004. — P. 235. — ISBN 978-1-135-95817-6.
- [2] Новиков А.В., Бубляев Р.А., Корнев Д.И., Краснов Н.В.. "ВЭЖХ-МС-анализ сверхмалых количеств лекарственных препаратов". // Научное приборостроение, 2010, Том 20, №4, С.67-70.

Спектрофотометрическое определение ионов железа в поверхностных и водопроводных водах г. Красноярск

Кулижников А., Рыжов К., Ленин В.

МАОУ Лицей №7 им. Героя Советского Союза. Б.К. Чернышева г. Красноярск

Железо в воде является одним из его ключевых источников для растений и человека. Как следствие от его содержания зависит экологическая ситуация местности, а также здоровье близ проживающих людей и животных. Поэтому постоянный мониторинг содержания железа в поверхностных и водопроводной водах является актуальной задачей из года в год. Таким образом нашей целью было определение концентрации ионов железа в водах г. Красноярск и сравнение полученных результатов с нормами ПДК.

Объектами исследования служили образцы воды из р. Енисей в районе г. Красноярск, а также водопроводная вода, отобранная из кранов трех различных районов г. Красноярск. Пробоотбор проводился в середине февраля 2021г.

Содержание ионов железа определяли спектрофотометрическим методом по стандартной методике [1], в основе которой лежит определение оптической плотности раствора, прямо пропорционально зависящей от концентрации ионов железа. Сначала готовили стандартный раствор соли железа с концентрацией 100 мг/л. Далее из него готовили растворы для построения градуировочного графика. После чего строился градуировочный график. И затем с его помощью определяли концентрацию железа в отобранных пробах воды.

На рисунках 1 и 2 представлены графики содержания железа в поверхностных и водопроводной водах г. Красноярск.

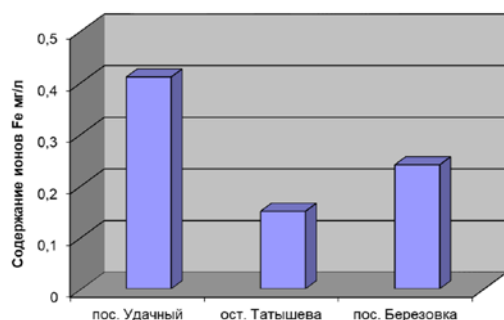


Рис. 1. Содержание ионов железа в поверхностных водах г. Красноярск.

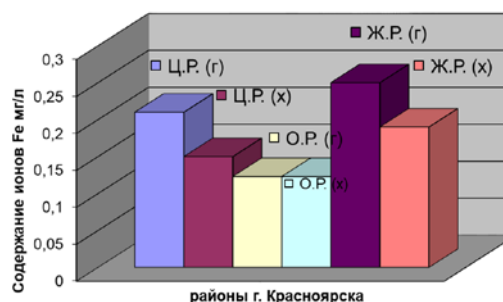


Рис. 2. Содержание ионов железа в водопроводной воде г. Красноярск.

Ц.р – Центральный район,

О.р. – Октябрьский район,

Ж.р. – Железнодорожный район.

Х – холодная вода, г – горячая вода.

Содержание ионов железа в поверхностных водах около пос. Берёзовка и о. Татышева находится в пределах допустимой нормы и не превышает значений ПДК (0,3 мг/л). Однако содержание ионов железа возле пос. Удачный немного завышено, что может быть связано с такими факторами как, сезонность и методика пробоотбора.

Во всех районах г. Красноярск содержание железа в водопроводной воде находится в пределах нормы и не превышает 0,3 мг/л.

Выражаем благодарность руководителям группы Д.В. Кузьмину и Д.О. Вигулю.

Литература:

[1] Методика измерений массовой концентрации общего железа в питьевых, поверхностных и сточных водах фотометрическим методом с сульфосалициловой кислотой. Москва.1996 г. (издание 2011 г.).

Определение ионов меди в водопроводных и поверхностных водах методом спектрофотометрии

Кутенкова Я.А., Панова А.Л., Дениско В.В.

*МАОУ Лицей №7 им. Героя Советского Союза. Б.К. Чернышева г. Красноярск
Институт химии и химической технологии ФИЦ КНЦ СО РАН*

Медь является биогенным элемент, необходимым для нормальной жизнедеятельности организма человека. Её переизбыток, также как и недостаток, пагубно влияют на здоровье [1, 2]. Основным источником поступления ионов меди является вода. В этом проекте мы предлагаем проверить образцы водопроводных и поверхностных вод из нашего города на количество этого металла в ней, ПДК которого составляет 100 мкг/л.

Цель работы: спектрофотометрическим методом выявить содержание ионов меди в водопроводных и поверхностных водах в различных районах г. Красноярск.

Методика обнаружения ионов меди основана на реакции с аммиаком, приводящей к образованию устойчивого комплексного иона $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$, придающего растворам яркое синее окрашивание. На первом этапе работы установлен максимум поглощения этого соединения, который составил 440 нм. На втором – построен градуировочный график. На третьем этапе работы определено содержание ионов меди в реальных образцах с помощью градуировочного графика и рассчитана погрешность измерений (таблица 1).

Таблица 1. Результаты спектрофотометрического определения ионов меди в различных проб поверхностных и водопроводных вод ($\lambda = 440$ нм, $l = 1$ см)

№	Расположение водного ресурса	C ₁ , мкг/л	C ₂ , мкг/л	C ₃ , мкг/л	C _{ср} ±Δ, мкг/л
1	Железнодорожный район, улица Ладо Кецхавели	50	48	46	48±4
2	Железнодорожный район, улица Меньжинского	49	47	45	47±4
3	Енисей, п. Удачный	70	72	75	72±5
4	Енисей, п. Березовка	50	42	60	51±18
5	Железнодорожный район, улица Ладо Кецхавели (кранный фильтр «Барьер ВWT»)	10	10	9	10±1

Таким образом, спектрофотометрическим методом определено, что содержание ионов меди во всех исследуемых образцах не превышает ПДК (100 мкг/л). Установлено, что применение кранного фильтра снижает содержание ионов меди в образце в пять раз.

Хотим выразить благодарность нашему наставнику Д. В. Зимонину за помощь в осуществлении общего проекта.

Литература:

- [1] Побилат А.Е., Волошин Е.И. Микроэлементы в медицине, 18(1), С. 3-7 (2017).
- [2] Будников Г.К. Соросовский образовательный журнал, № 5, С. 23-28 (1998).

Определение тяжёлых металлов в кремах отечественного производства

Величко Г.М., Дмитриева Н.А.

МАОУ Лицей №7 им. Героя Советского Союза. Б.К. Чернышева г. Красноярск

Пользуясь косметическими средствами, в частности, кремами ежедневно, очень важно знать о наличии в их составе тяжёлых металлов, которые способны накапливаться в организме, что в дальнейшем может привести к интоксикации. [1] Интоксикация тяжёлыми металлами приводит к аллергическим реакциям или к патологиям, таких как кожные язвы, потеря памяти, повреждение ДНК. Тяжёлые металлы могут попадать в косметические крема в качестве примесей с водой, растительным сырьем, в которых они содержатся и компонентов, содержащие соли оксида цинка и меди, хоть они и запрещены. О косметических средствах зарубежных стран написано очень большое количество работ, в которых указано на превышение допустимой концентрации, особенно в больших количествах был замечен кадмий, попадающий с растительными компонентами [2], в то время как о кремах отечественного производства информации в литературе представлено мало.

Целью работы являлось определение при помощи метода атомно-эмиссионной спектроскопии наличие тяжёлых металлов в кремах отечественного производства. [3]

Для определения тяжелых металлов брали образцы в количестве 1 грамма и последовательно добавляли 5% HNO_3 и H_2O_2 , после чего выпаривали и отправляли на озоление в муфельной печи на 6 часов при температуре 500°C , фильтровали и доводили до 50 мл деионизированной водой.

Данные проведенного анализа с предельно допустимой концентрацией тяжёлых металлов в кремах отечественного производства отражены в таблице 1.

Таблица 1. Данные исследования с предельно допустимой концентрацией тяжёлых металлов в кремах отечественного производства

Образцы	As мг/л	Ca мг/л	Cd мг/л	Cr мг/л	Cu мг/л	Pb мг/л	Zn мг/л
AURA	0,00229	6,265	-	0,0021	0,01462	0,00177	0,02292
Бархатные ручки	0,00275	6,977	-	0,0038	0,01506	0,00015	0,03626
Чёрный жемчуг	0,00428	5,641	-	0,0027	0,01016	0,00536	0,01407
Dr. Herbarium	0,00173	6,099	-	0,0026	0,01064	0,00001	0,01467
Допустимая концентрация	0,05	140,28	0,1	0,05	0,15	5,0	0,5

Результаты данного исследования показывают, что в кремах отечественного производства не наблюдается превышение тяжелыми металлами допустимой концентрации. Также можно заметить, что кадмий в принципе не наблюдается в данных образцах.

Выражаем благодарность руководителю группы А. В. Мирошниковой

Литература:

[1] Marcia Foster Mesko, Diogo La Rosa Novo, Vanize Caldeira Costa, et.al., *Analytica Chimica Acta*, V. 1098, PP. 1-26 (2020).

[2] Hamna Arshad, Moniba Zahid Mehmood, Munir Hussain Shah, Arshad Mehmood Abbasi, *Saudi Pharmaceutical Journal*. V. 28, No. 7, PP 779-790 (2020).

[3] Брайкова, А. М., Матвейко, Н. П. – Витебск: Новое в технике и технологии текстильной и лёгкой промышленности (2013) – С.211-213.

Исследование компонентного состава эфирного масла пихты сибирской (*Abies sibirica*), полученного методом паровой дистилляции

Козинский А.С., Кочкина А.В., Курьлёв А.В., Прудникова Д.Д., Рунков Д.А.

МАОУ Лицей №7 им. Героя Советского Союза. Б.К. Чернышева г. Красноярск

В связи с развитием «Зеленой химии» становится все более актуальным переработка древесного растительного сырья с получением ценных веществ, имеющих широкое применение. Одним из таких веществ являются эфирные масла, которые обладают широким спектром биологической активностью и являются перспективными для применения в пищевой и фармацевтической промышленности.

Несмотря на обилие методов выделения эфирных масел (мацерация, анфлераж, экстракция, селективными растворителями, холодное прессование [1-2]), наиболее доступным и экологичным является метод паровой дистилляции, к его достоинствам можно отнести простоту, отсутствие токсичных растворителей, чистоту получаемого эфирного масла, чем при других методах выделения.

В данном проекте объектом исследования выступало эфирное масло Пихты Сибирской (*Abies sibirica*). Растительный материал был собран в сосновом бору Октябрьского р-на гор. Красноярск.

В работе использовали классический паровой дистиллятор, навеску хвои массой 90 граммов, измельченную до фракции 2-5 мм, помещали в дистилляционную колбу через которую проходил пар из парогенератора в течение 6 часов. Полученную смесь воды и эфирного масла впоследствии разделяли и проводили экстрагирование компонентов из сконденсированной воды с помощью диэтилового эфира. Далее объединяли полученные эфирные фракции. Выход масла составил 3,67%, что является достаточно высоким показателем.

В результате проведенного анализа методом ГХ-МС было идентифицировано более 40 компонентов полученного эфирного масла пихты сибирской, из которых характерными являются α -пинен, камфен, карен, лимонен и борнилацетат. При этом борнилацетат является преобладающим компонентом полученного эфирного масла хвои пихты (19,61 отн. %), что соответствует информации из литературных источников [3].

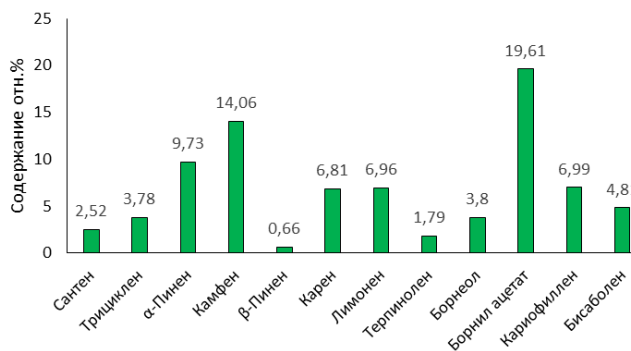


Рис. 1 Основные компоненты полученного эфирного масла хвои пихты.

Таким образом, метод паровой дистилляции позволил получить эфирное масло с высоким содержанием основных компонентов, обладающих высокой биологической и антимикробной активностью [3].

Литература

- [1] Food and Agriculture Organization of the United Nations (1995). Basic Principles of Steam Distillation. Retrieved August 18, 2005
- [2] Burt S: Essential oils: their antibacterial properties and potential applications in foods: a review. Int J Food Microbiol 2004, 94:223-253.
- [3] Radulescu A., Saviuc C., Chifiriuc C. et al Chemical Composition and Antimicrobial Activity of Essential Oil from Shoots Spruce (*Picea abies* L.). V. 62, 2011, P. 69-74.

Тезисы докладов
Междисциплинарной конференции молодых
учёных ФИЦ КНЦ СО РАН (КМУ-XXIV)
г. Красноярск, 29 апреля 2021 г.

ISBN 978-5-6045249-3-0



9 785604 524930

Материалы конференции
публикуются в авторской редакции

По дписано в печать 29.04.2021 г.
Бумага офсетная. Печать цифровая. Гарнитура «Times New Roman».

Формат 60x84 1/16. Усл. печ. л. 5,28. Уч.-изд. л. 5,21. Заказ № 5. 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
е-mail: fic@ksc.krasn.ru