



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-XXV)

КРАСНОЯРСК | 14 АПРЕЛЯ 2022 ГОДА



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

Тезисы докладов

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

14 апреля 2022 года, г. Красноярск

Красноярск
2022

УДК 50(082)
ББК Б.я431
М43

М43 Междисциплинарная конференция молодых учёных ФИЦ КНЦ
СО РАН (КМУ-XXIV): тезисы докладов (Красноярск, 14 апреля
2022 г.) – Красноярск: ИФ СО РАН, 2022. – 120 с.

ISBN 978_5_6045249_8_5

© Авторы, содержание тезисов, 2022
© ФИЦ КНЦ СО РАН, оформление, 2022

ISBN 978_5_6045249_8_5

**Сборник трудов междисциплинарной конференции
молодых учёных ФИЦ КНЦ СО РАН,
14 апреля 2022 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, д.ф.-м.н., академик РАН, Председатель Оргкомитета;
Владимир Викторович Шайдуров, д.ф.-м.н., чл.-корр. РАН, зам. Председателя Оргкомитета;
Александр Артурович Шпедт, д.с.-х.н., зам. Председателя Оргкомитета;
Светлана Николаевна Софронова, к.ф.-м.н., ФИЦ КНЦ СО РАН;
Сергей Николаевич Варнаков, д.ф.-м.н., ФИЦ КНЦ СО РАН
Андрей Михайлович Вьюнышев, к.ф.-м.н., ИФ СО РАН;
Надежда Николаевна Сущик, д.б.н., ИБФ СО РАН;
Александр Владимирович Пименов д.б.н., ИЛ СО РАН;
Оксана Павловна Таран, д.х.н., профессор, ИХХТ СО РАН;
Эдуард Вильямович Каспаров, д.м.н., профессор, НИИ МПС;
Анатолий Иосифович Рубайло, д.х.н., профессор, ФИЦ КНЦ СО РАН;
Иван Викторович Петерсон, к.х.н., ФИЦ КНЦ СО РАН, учёный секретарь Оргкомитета.

Программный комитет

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

Содержание

Секция «Физика».....	10
<i>Абдуллаев А. С.</i> Электрически индуцированный ориентационный переход в холестерических каплях с закрученной радиальной конфигурацией.....	11
<i>Бондарев М. А.</i> Синтез и характеристика эпитаксиальных тонких пленок Mn_5Ge_3 на подложке кремния.....	12
<i>Головкина Е. В.</i> Угловые зависимости поляризованных спектров КРС металлоорганических каркасов	13
<i>Костиков Д. А.</i> Ориентационные структуры нематика с коническим сцеплением при различных углах наклона, задаваемых смесями полиметилакрилатов	14
<i>Ларионов Е. А.</i> Спиновая восприимчивость в реалистичной модели селенидов железа	15
<i>Муратов В. Р.</i> Особенности топологической фазы с двумя парами майорановских мод в модели цепочки Китаева.....	16
<i>Большин Д. С.</i> Неравномерная дырочная проводимость в гидрогеле на основе PEDOT:PSS	17
<i>Бондарев И. А.</i> Влияние магнитного поля на спектральные и температурные характеристики фотовольтаического эффекта в структуре $Mn/SiO_2/n-Si$	18
<i>Бурмитских А. В.</i> Автоматизированный широкополосный спектрометр ферромагнитного резонанса.....	19
<i>Давлетишин Н. Н.</i> Применение спекл-структур, полученных с помощью нематической жидкокристаллической ячейки в системах визуализации с использованием структурированного освещения.....	20
<i>Драганюк О. Н.</i> Формирование ферромагнитного порядка в допированной железом MAX-фазе Mn_2GaC	21
<i>Пичковский И. С.</i> Реализация с помощью радиочастотных импульсов селективных операторов поворотов для квантового процессора на кутритах	22
<i>Скоробогатов С. А.</i> Спиновая динамика в редкоземельном ортоферрите $TbFeO_3$	23
<i>Харченко И. А.</i> Исследование жидкостной проницаемости керамических мембран на основе перлита и пеносиликатов	24
<i>Шумилов Т. Ю.</i> Особенности характеристик полосно-пропускающих фильтров второго порядка на полуволновых и четвертьволновых микрополосковых резонаторах.....	25
<i>Яковлев И. А.</i> Синтез магнитных наноструктур на основе Fe_3Si методом МЛЭ	26

Секция «Химия и химические технологии»	27
<i>Боровкова В. С.</i> Древесные гемицеллюлозы ели <i>Picea abies</i> : выделение, свойства, антиоксидантная активность	29
<i>Вигуль Д.О.</i> Изучение влияния массопереноса на процесс каталитического окисления лигнинов в ванилин и целлюлозу.....	30
<i>Голубков В. А.</i> Катализ с двойной активацией при гидролизе целлобиозы фталевой и соляной кислотами и влияние температуры на него	31
<i>Зимонин Д. В.</i> Влияние природы растворителя и материала рабочего электрода на механизм восстановления левулиновой кислоты.....	32
<i>Зосько Н. А.</i> Повышение характеристик наноструктурированных плёнок TiO ₂ методом электрохимической активации	33
<i>Ионин В. А.</i> Комплексная экстракционно-каталитическая переработка механически активированной коры сосны.....	34
<i>Капаева С. Н.</i> Электрокаталитическое окисление крахмала в неразделенной ячейке с участием активных форм кислорода.....	35
<i>Карпов Д. В.</i> Синтез и характеристика сверхконцентрированных золь наночастиц оксида меди (II).....	36
<i>Киришнева Е. А.</i> Влияние условий термообработки на фазообразование в системе Fe-Fe	37
<i>Куулар А.А.</i> Морфология композита на основе СВМПЭ с добавкой нановолокон оксида алюминия	38
<i>Лутешкин М. А.</i> Синтез и свойства нового перфторированного селен-содержащего лиганда для хелатирования редкоземельных металлов.....	39
<i>Мирошникова А. В.</i> Исследование влияния скорости перемешивания и размера зерна катализатора Ni/C на процесс гидрирования костры льна.	40
<i>Патрушева А. А.</i> Новые карбонил(® -дикетонат)изоцианидные комплексы родия(I) ...	41
<i>Пономарёв И. С.</i> Синтез производных 3,5-диметилпиразола и 2,1,3-бензотиадиазола для получения новых комплексов переходных металлов	42
<i>Сычев В. В.</i> Восстановительное фракционирование костры льна в присутствии катализатора Ru/C на основе углеродного материала Сибунит®-4	43
<i>Троцкий Ю. А.</i> Селективное гидрирование левулиновой кислоты до γ-валеролактона в водной среде в присутствии катализатора Ni-SiO ₂	44
<i>Неделина Т. С.</i> Влияние природы лигандов на редокс-свойства моноядерных карбонильных комплексов родия(I).....	45
Секция «Био- и медицинские технологии»	47
<i>Бурдин Л. А.</i> Макрочастицы древесных углей в донных отложениях озера Ши́ра (Хакасия) как индикатор динамики пожаров на окружающей территории в позднем голоцене.....	49
<i>Драндрова К. А.</i> Получение и характеристика фракции экзосом мочи человека	50

<i>Тропников С. Р.</i> Механизм мутации V617F в гене JAK2 через образование Хугстиновских пар оснований.....	51
<i>Рукоусева Н. В.</i> Влияние мутации K90E на условия фолдинга фотопротейна боровина.....	52
<i>Ефремов М. К.</i> Сайт-направленное конъюгирование люциферазы NanoLuc с биоспецифичными молекулами.....	53
<i>Синнер Е. К.</i> Фекальные стано́лы в донных отложениях озера Шира (Хакасия) как индикатор антропогенной нагрузки в водосборном бассейне озера в позднем голоцене	54
<i>Андрущенко П. Ю.</i> Особенности сезонного формирования годовых колец на чешуе байкальского хариуса в условиях измененного температурного режима.....	55
<i>Вахрушев В. И.</i> Радиоизотопные методы расчета скоростей седиментации донных отложений реки Енисей.....	56
<i>Колесник О.В.</i> Низкоинтенсивное воздействие Th-232 на люминесцентные бактерии. Роль активных форм кислорода	57
<i>Калябина В. П.</i> Закономерности влияния коммерческих препаратов пестицидов на тестовые системы <i>in vitro</i> и <i>in vivo</i>	58
<i>Дудаев А. Е.</i> Потенциал применения лазерной резки для направленной модификации поверхности ПГА-плёнок	59
<i>Коротов И. А.</i> Мутантные формы люциферазы из копепод <i>Metridia longa</i> . Получение и характеристика	60
<i>Маркова Г. М.</i> Критерии наличия рефлексии у простой нейронной сети в рефлексивной игре	61
<i>Лоншакова-Мукина В. И.</i> Стабильные многокомпонентные иммобилизованные препараты на основе бутирилхолинэстеразы для ингибиторного анализа.....	62
<i>Посохина Е. Д.</i> Обнаружение гиспидина в питательной среде при погруженном культивировании базидиомицета <i>Inonotus obliquus</i> (Чага).....	63
<i>Лисица А. Е.</i> Механизмы влияния вязких сред на элементарные стадии биолюминесцентной реакции бактерий.....	64
<i>Колесникова О. Д.</i> Исследование эффективности гербицидных препаратов пролонгированного действия на основе поли-3-гидроксипутирата	65
<i>Стоянов К. Н.</i> Состав и содержание жирных кислот и аминокислот в личинках мух <i>Lucilia sericata</i> (сем. <i>Calliphoridae</i>), выращенных на различных кормах.....	66
<i>Гейс Т. Н.</i> Гидрологический экспорт углерода из мерзлотных ландшафтов среднесибирского плоскогорья.....	67
<i>Ефременко А. А.</i> , Химические компоненты меж- и внутривидовой коммуникации жуков уссурийского полиграфа.....	68
<i>Малинчик М. А.</i> Поиск иммуногенетических маркеров развития различных фенотипов астмы у детей г. Красноярска	69

<i>Овчаренко Е. С.</i> Характеристика физического развития и метаболических показателей лимфоцитов у детей с особыми возможностями здоровья в зависимости от типов вегетативной регуляции.....	70
Секция «Математическое моделирование»	71
<i>Адаев И. Р.</i> Методы типа предиктор-корректор на основе симметричных линейных многошаговых методов.....	73
<i>Гилин С. В.</i> Задача автоматического распознавания зданий в водоохраных зонах на спутниковых снимках.....	74
<i>Голубев А. В.</i> Повышение порядка точности метода Ньюстрёма разностными выражениями правой части	75
<i>Ефимов Е. А.</i> Моделирование волновых процессов в геосреде, описываемой обобщённой моделью стандартного линейного вязкоупругого тела.....	76
<i>Жигарев В. А.</i> Численное исследование транспорта шлама буровыми растворами с добавкой наночастиц.....	77
<i>Закарлюка П. В.</i> Влияние граничных условий, дискретизации расчетной области и геометрических препятствий на результаты моделирования развития пожара.....	78
<i>Иванова С. В.</i> Исследование применения наносuspензий для повышения нефтеотдачи пласта	79
<i>Капитонов А. А.</i> Сравнение 1D- и 2D-моделей нанофильтрации водных растворов солей в мембранах с электропроводящей поверхностью.....	80
<i>Кулясов Н. В.</i> Реализация платформы для обработки данных Интернета вещей.....	81
<i>Мазков В. А.</i> Разработка автоматизированных подходов к сканированию зданий с целью построения цифровой 3D-модели с применением малых летательных аппаратов.....	82
<i>Малимонов М. И.</i> Веб-интерфейс для отображения и взаимодействия с данными температурного профилемера	83
<i>Малышева Ж. О.</i> Одномерная модель явления «сухого кипения» сыпучей среды.....	84
<i>Матушко А. К.</i> Технология обработки спутниковых данных Landsat 8 для восстановления потерянной информации при вычислении температуры поверхности.....	85
<i>Молявко А. А.</i> Крупномодульное распараллеливание метода Шайдурова средствами библиотеки TPL	86
<i>Петраков И. Е.</i> Расчет напряженно-деформированного состояния композитной пластинки с неизвестным положением нейтральной поверхности.....	87
<i>Пушкарев А. А.</i> JavaScript-библиотека для визуализации пространственных GRID-данных	88
<i>Сизаско В.</i> Об отображении ударных процессов в плоскости поляра.....	89
<i>Упорова А. И.</i> Решение задачи о движении вязкой теплопроводной жидкости в вертикальной трубе в случае стационарного и нестационарного течений.....	90

<i>Щербакова А. Ю.</i> Геоинформационное обеспечение инвентаризации сети теплоснабжения ФИЦ КНЦ СО РАН.....	91
Секция «Школы РАН»	92
<i>Черных Д., Ткавашвили К., Радзюк Н., Рабинович Ю., Новожилов Е., Гайдашева И. И.</i> Анализ качества мёда реализуемого на территории Красноярского края.....	94
<i>Махмудова В., Васильева Д., Осинский Р., Берштейн К., Завьялов Б., Хачатрян Е., Колосова Е. М.</i> Витамины в питании современного школьника.....	95
<i>Денин С. С., Зуевский Е. М., Калинина Е. А., Проскурдин Б. Д., Фомина С. К., Яндер Я. О., Копылова К. В.</i> Питьевая вода в рационе ученика средней школы.....	96
<i>Галинова С., Костылева Д., Букин Д., Шарыпов М., Панько Т., Ухова Д., Селиванов К., Меркулова Д., Римацкая Н. В.</i> Влияние сна на успеваемость учеников классов РАН г. Красноярск	97
<i>Дворянкина Д., Мордвинова Е., Симутина А., Сошина К., Малинчик М. А.</i> Генетическая предрасположенность человека к многофакторным заболеваниям.....	98
<i>Пахомова К. А., Петрухина В. С.</i> Определение содержания кофеина в энергетических напитках методом высокоэффективной жидкостной хроматографии (ВЭЖХ)	99
<i>Баева А., Котова К.</i> Получение эфирного масла Помело и его антиоксидантная активность.....	100
<i>Безъязыкова С., Алещенко Я.</i> Определение антибиотиков в мясе методом ВЭЖХ.	101
<i>Берш Д. А., Семёшина А. П.</i> Анализ содержания витамина С в апельсинах при изменении условий хранения.....	102
<i>Бударина Т.</i> Определение качества молока	103
<i>Важничая В., Студеникина А.</i> Спектрофотометрическое определение формальдегида в косметических средствах	104
<i>Вешкина Д. В., Капкан С. А., Муравьева А. А.</i> Определение фальсификата мёда, предлагаемого в городе Красноярске.....	105
<i>Захарченко А. В.</i> Оптимизация методов выделения пектинов из коры пихты, поврежденной стволовыми патогенами.....	106
<i>Измоденова П., Гужевская В.</i> Определение нитрит иона в колбасных изделиях фотометрическим методом	107
<i>Карамалла Н., Кушнир А., Сиделёва А.</i> Исследование моносахаридного состава легкогидролизуемых полисахаридов гречневой шелухи физико-химическими методами анализа	108
<i>Кольбзева В., Рыжова А.</i> Изучение состава легкогидролизуемых углеводов костры льна физико-химическими методами анализа	109
<i>Курылев А.В., Рунков Д.А., Николаев В.П.</i> Определение качества молока.....	110
<i>Лебедева С. Д.</i> Исследование устойчивости наночастиц, полученных из этаноллигнина коры кедра при различных условиях	111

<i>Лучковская В. Н., Катцына В. А., Воронцова П. В.</i> Определение нитрат-ионов в овощах и фруктах потенциометрическим методом анализа	112
<i>Портнова Д. В., Малеванная Н.А.</i> Определение содержания диоксида титана в составе зубных паст.....	113
<i>Панова А. Л., Дениско В. В.</i> Определение щелочности поверхностных и водопроводных вод.....	114
<i>Петрова С. М.</i> Изучение жирнокислотного состава сливочного масла высшего сорта методом газовой хроматографии	115
<i>Продайвода М. В., Суворова П. И.</i> Разработка метода извлечения фенола из художественных красок и его количественный анализ ВЭЖХ	116
<i>Ширяева В. В.</i> Определение содержания железа в природных и питьевых водах различными физико-химическими методами	117

Секция «Физика»

Электрически индуцированный ориентационный переход в холестерических каплях с закрученной радиальной конфигурацией

Абдуллаев Абылгазы Сабиралиевич

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

Институт инженерной физики и радиоэлектроники, СФУ

Изучение жидких кристаллов (ЖК) в замкнутых полостях представляют большой интерес в последнее десятилетие. Это связано как с фундаментальной точки зрения, так и с практическими приложениями в технике [1]. Одним из бурных направлений в последние годы является исследование капель холестерических жидких кристаллов (ХЖК). ХЖК характеризуется геликоидальной структурой распределения поля директора с собственным шагом спирали p_0 , на котором директор поворачивается на угол 2π . Формирование структур в ограничивающих полостях зависит от граничных условий и соотношения размера занимаемой полости ХЖК и собственного шага спирали, характеризуемого относительным хиральным параметром $N_0 = d/p_0$. Топологические, оптические, оптомеханические характеристики капель ХЖК зависят от формирующейся ориентационной структуры, которой можно управлять внешними воздействиями. Поэтому исследование поведения структурно-ориентационных переходов в каплях ХЖК при приложении внешнего электрического поля является актуальным.

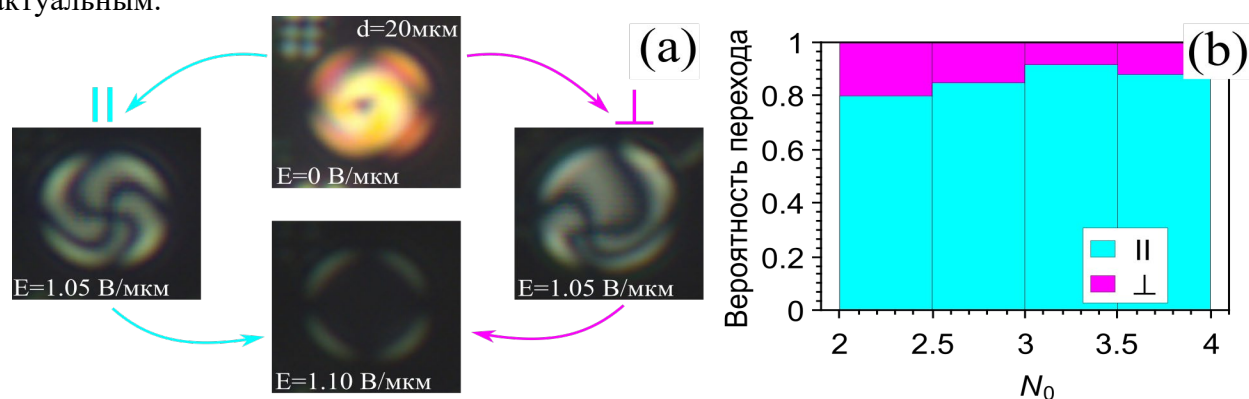


Рис. 1. Два сценария перехода (a) и вероятность трансформаций по этим сценариям (b).

В работе исследовался ХЖК на основе нематика E7 (Merck), допированного холестерилловым эфиром уксусной кислоты (X3) (Sigma Aldrich). Рассматривали капли с относительным хиральным параметром N_0 в диапазоне от 2 до 4. При таких условиях формируются капли с осесимметричной закрученной радиальной конфигурацией директора. Под действием электрического поля закрученная радиальная структура трансформируется в аксиальную конфигурацию [2]. При этом если исходно ось симметрии структуры ориентирована вдоль прикладываемого поля, то наблюдаются два сценария трансформации: 1) ось симметрии остается параллельной направлению поля и 2) ось симметрии структуры ориентируется перпендикулярно полю (рисунок 1a). Проведенный анализ наблюдаемых переходов показал, что в среднем доля трансформаций капель по первому сценарию составляет 86 % (рисунок 1b), что находится в хорошем согласии с результатами численного моделирования.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект No 20-72-10038).

Руководитель Крахалёв М. Н.

[1] M. H. Saeed, S. Zhang, Y. Cao, L. Zhou, J. Hu, I. Muhammad, J. Xiao, L. Zhang, H. Yang, *Molecules* V.25, PP.5510 (2020);

[2] A. P. Gardymova, M. N. Krakhalev, V. Ya. Zyryanov, A. A. Gruzdenko, A. A. Alekseev, V. Yu. Rudyak, *Polymers* V.13(5), PP.732 (2021).

Синтез и характеристика эпитаксиальных тонких пленок Mn_5Ge_3 на подложке кремния

Бондарев Михаил Александрович

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

Ферромагнитные тонкопленочные Mn_5Ge_3 образцы являются перспективными материалами для применения в спинтронике из-за высокой спиновой поляризации и температуры Кюри $T_C = 296$ К.

Актуальность исследования германидов марганца на кремниевой подложке подтверждается тем, что множество работ по тонким пленкам Mn_5Ge_3 выполнено на полупроводниковых подложках Ge [1], эпитаксиальных буферных слоях Ge [2], а также на GaAs(111) [3]. Синтез ферромагнитных германидов марганца на кремнии ранее не был продемонстрирован.

Исследуемая структура была синтезирована методом молекулярно-лучевой эпитаксии на подложке Si(111) при температуре $T = 390$ °C и давлении $6,5 \times 10^{-8}$ Па. На ЭПР Фурье-спектрометре Bruker Elexsys E580 были сняты спектры ферромагнитного резонанса (ФМР) в диапазоне температур от 110 К до 330 К. Для образца наблюдается три линии ФМР которые представлены на рисунке 1 (а). Из экспериментальных данных определены параметры резонансных линий, по которым была построена температурная зависимость резонансного поля.

При температуре выше 300 К образец находится в парамагнитном состоянии, при котором нет явной зависимости резонансного поля от температуры (линия 1). Ниже точки фазового перехода парамагнетик-ферромагнетик линия поглощения разбивается на две. По мере понижения температуры у линии 2 резонансное поле повышается, а у линии 1 – уменьшается. Это может свидетельствовать о том, что в образце присутствует анизотропия типа «легкая ось», перпендикулярная плоскости пленки.

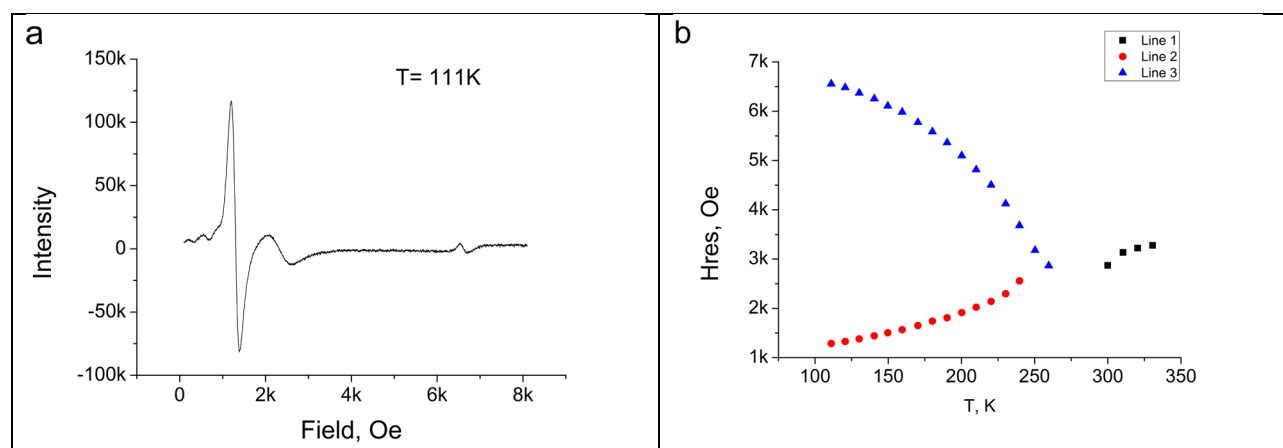


Рис.1 а) Спектр поглощения Mn_5Ge_3 при температуре $T=111$ К; б) зависимость резонансного поля от температуры.

Данная работа выполнена научным коллективом, в состав которого, кроме докладчика, входят: М. В. Рауцкий, И. А. Яковлев, А. С. Тарасов.

Литература:

- [1] A. Spiesser, et. al., Physical Review B V.84, PP.165203 (2011).
- [2] S. Bechler, et. al., Semiconductor Science and Technology, V.33, PP.095008 (2018).
- [3] Dung, et al., Journal of Applied Physics, V.114, PP.073906 (2013).

Угловые зависимости поляризованных спектров КРС металлоорганических каркасов

Головкина Елена Вячеславовна

Сибирский Федеральный Университет

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

Для изучения неориентированных кристаллических веществ появилась необходимость разработки методики измерения спектров микрокристаллов. Несмотря на то, что в природе и в процессе роста кристаллы имеют четко выраженную огранку, их грани не всегда располагаются вдоль кристаллографических осей. По этой причине, а также из-за малых размеров кристаллов, правильно расположить кристалл для измерения поляризованных спектров становится затруднительным. В данной методике стало бы возможным определение угловых зависимостей спектров, а также выявление поведения линий и симметрии колебаний молекул кристаллов.

Металлоорганические каркасы представляют собой кристаллические твердые вещества, в которых атомы металла или оксида металла соединены органическими линкерами и образуют кристаллическую решетку. Металлоорганические каркасы приобрели большой интерес из-за их высокой пористости, большой площади поверхности и характеристик поглощения. Наличие пор позволяет использовать их для селективной абсорбции. Некоторые из таких веществ являются перестраиваемыми, что означает, что несколько стабильных кристаллических структур могут быть получены путем абсорбции и десорбции.

Кристаллы металлоорганических каркасов имеют размер менее 0.1 мкм и не имеют правильной огранки вдоль кристаллографических осей. Поэтому для измерения спектров комбинационного рассеяния света неориентированных кристаллов металлоорганических каркасов была использована разработанная методика измерения угловых зависимостей спектров. Для проведения автоматизированного эксперимента была сконструирована приставка для КР-спектрометра, подключаемая к управляющему компьютеру. В результате периодического вращения кристалла и измерения соответствующих данному углу спектров были построены угловые зависимости спектров, анализ которых дает распределение максимумов линий спектра по углам.

В работе проведено исследование металлоорганических каркасов DUT-8(Ni), синтезированных в Дрезденском техническом университете. Сопоставляя результаты с модельными расчетами, представляется возможность распознать группу симметрии колебаний кристалла, а также выяснить отличительные признаки спектра различных фаз металлоорганических каркасов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Немецкого научно-исследовательского сообщества в рамках научного проекта № 21-52-12018. Данная работа выполнена научным коллективом, в состав которого, кроме докладчика, входят: А.Н. Втюрин, А.С. Крылов, С.Н. Крылова.

Ориентационные структуры нематика с коническим сцеплением при различных углах наклона, задаваемых смесями полиметилакрилатов

Костиков Денис Андреевич

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

Институт инженерной физики и радиоэлектроники, СФУ

Жидкие кристаллы (ЖК) за счет своей уникальной структуры и необычных свойств заняли большую нишу в оптической технике. В зависимости от ориентации директора (вектора, который характеризует преимущественное положение длинных осей молекул) изменяются свойства ЖК, в особенности, электрические и оптические. В свою очередь, ориентационная структура директора определяется ориентацией директора на границах ячейки (граничные условия), которая характеризуется углом наклона. Планарные и гомеотропные граничные условия соответствуют углам наклона директора $\theta_{0, \text{планар}} = 0^\circ$ и $\theta_{0, \text{гомеотроп}} = 90^\circ$, соответственно. Электрооптические свойства таких ЖК ячеек уже хорошо исследованы. Отличные от них граничные условия называются коническими, вариация которых способна привести задачу получения необходимых параметров ЖК системы к более точному и/или простому решению, что делает их изучение актуальным.

В работе исследовались ЖК ячейки на основе нематика ЛН-396, показатели преломления которого $n_e = 1,716$, $n_o = 1,52$ [1]. На нижней подложке планарные граничные условия задавались натертой пленкой поливинилового спирта (ПВС), на верхней подложке конические граничные условия обеспечивались благодаря подобранной смеси полимеров полиизобутилметакрилата (ПиБМА) и полиметилметакрилата (ПММА). Углы наклона определялись посредством измерения зависимости фазовой задержки между обыкновенным и необыкновенным лучами от угла падения излучения [2, 3]. Вариация состава ПиБМА : ПММА позволила нам получить различные углы наклона директора (рис. 1а) [4]. Для различных углов наклона директора исследованы формирующиеся ориентационные структуры в слое нематика, а также их отклик на приложенное электрическое поле.

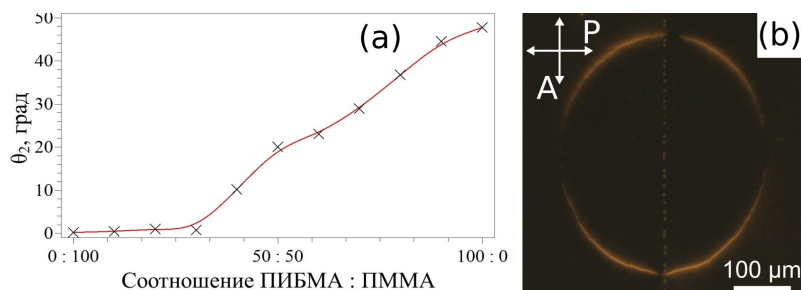


Рис.1 Зависимость угла наклона директора от соотношения ПиБМА:ПММА в ориентирующей пленке полимера (а), доменная стенка в ячейке с весовым соотношением ПиБМА : ПММА = 80 : 20 (b).

Работа выполнена при поддержке РФФИ, Правительства Красноярского края и Красноярского краевого фонда науки (грант No 20-42-240007). Руководитель Крахалёв М. Н.

Литература:

- [1] V.S. Sutormin et al, Optical Materials Express V.11(5), PP.1527 (2021).
- [2] S.Y. Wang, H.M. Wu and K.H. Yang, Applied Optics V.52(21), PP.5106 (2013).
- [3] М. Клеман, О.Д. Лаврентович, Основы физики частично упорядоченных сред, Физматлит, 2007.
- [4] D.A. Kostikov, M.N. Krakhalev, O.O. Prishchepa and V.Y. Zyryanov, Polymers V.13, PP.2993 (2021).

Спиновая восприимчивость в реалистичной модели селенидов железа

Ларионов Егор Александрович

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

Институт инженерной физики и радиоэлектроники, СФУ

Интерес к высокотемпературной сверхпроводимости в селенидах железа определяется как практическим применением исследуемых соединений, так и наличием нерешенных проблем, связанных с описанием таких систем. В работе представлен расчет спиновой восприимчивости для соединений железа без учета спин орбитального взаимодействия. Расчет был сделан в десятиорбитальной модели из работы [1]. Параметры модели подбирались для схожести с Ферми поверхностью из статьи [3]. Восприимчивость $\chi(\mathbf{q}, \omega)$ вычислялась как спиновый коррелятор [2], затем анализировались орбитальные вклады. Установлено, что максимальные вклады вблизи вектора $Q = (\pi, \pi)$, см. Рис.1.

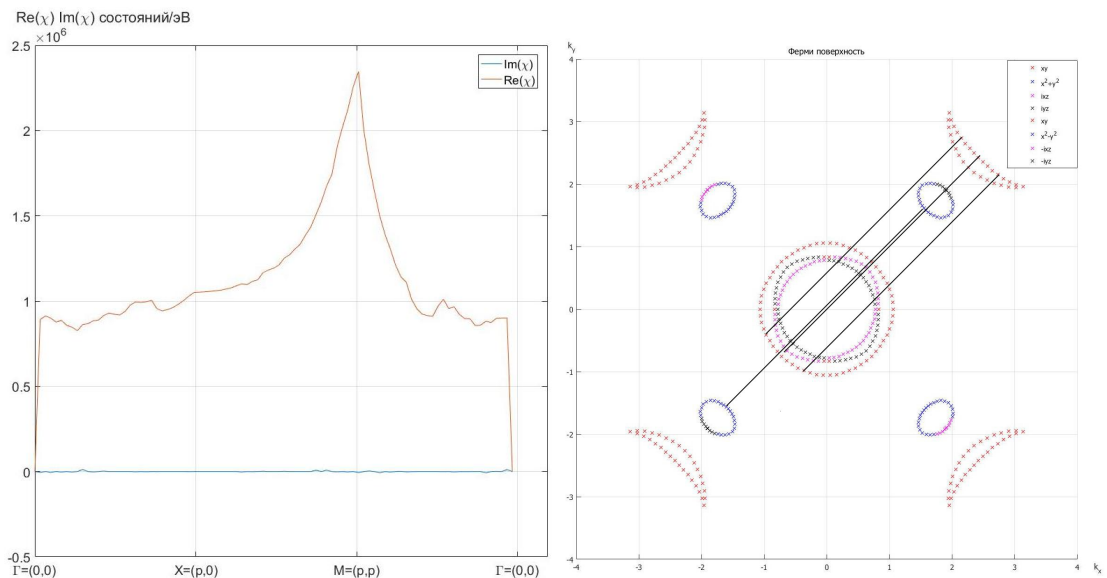


Рис. 1. Слева – $Re(\chi)$ и $Im(\chi)$ на нулевой частоте $\omega = 0$ эВ как функции импульса $q \in$ ГХГМ. Справа – поверхность Ферми и характерные вектора, рассеяние на которых даёт максимальный вклад в спиновую восприимчивость

Основной вклад на векторе Q дают процессы рассеяния, включающие орбитали xu и $xu, x^2 - y^2$ и $x^2 - y^2, xz$ и xu , т.е. в основном, внутриорбитальные процессы. Ожидается, что при учёте локальных кулоновских взаимодействий в приближении хаотических фаз отклик на векторе Q усилится, поскольку самый большой по величине матричный элемент взаимодействия - внутриорбитальное хаббардовское U .

Руководитель Коршунов М. М.

Литература:

[1] H. Eschrig, K. Koepernik, Physical Review B, V.80, PP.104503 (2009)

[2] М.М. Коршунов, Успехи Физических Наук, V.184, PP.882–888 (2014)

[3] A.A. Kordyuk V.B. Zabolotnyy D.V. Evtushinsky A.N. Yaresko B. Büchner S.V. Borisenko, Journal of Superconductivity and Novel Magnetism, V.26, PP.2837-2841 (2013)

Особенности топологической фазы с двумя парами майорановских мод в модели цепочки Китаева

Муратов Вадим Рустямович

Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН
Сибирский федеральный университет

В последнее время большой интерес вызывают топологические сверхпроводники, в которых реализуются майорановские моды (ММ). Наиболее простой моделью, допускающей формирование ММ является модель Китаева [1], описывающая бесспиновые фермионы в 1D цепочке. Известно, что учет дальних перескоков и сверхпроводящих спариваний электронов качественно изменяет топологическую фазовую диаграмму [2].

В данной работе в рамках модели Китаева на основе анализа аналога фазы Берри γ показано формирование новой топологической фазы с $\gamma = \pm 2$ при учете перескоков и сверхпроводящих спариваний между следующими за ближайшими соседями, характеризующейся формированием двух пар ММ. На рисунке 1 представлена топологическая фазовая диаграмма в переменных амплитуда перескоков t_2 во вторую координационную сферу – химпотенциал μ для параметров $\Delta_1 = |t_1|$ и $\Delta_2 = 0,8|t_1|$. Топологические переходы между фазами с различными значениями γ сопровождаются закрытием щели в спектре возбуждений замкнутой цепочки. Также на диаграмме отмечен вид функции основного состояния цепочки в различных топологических фазах.

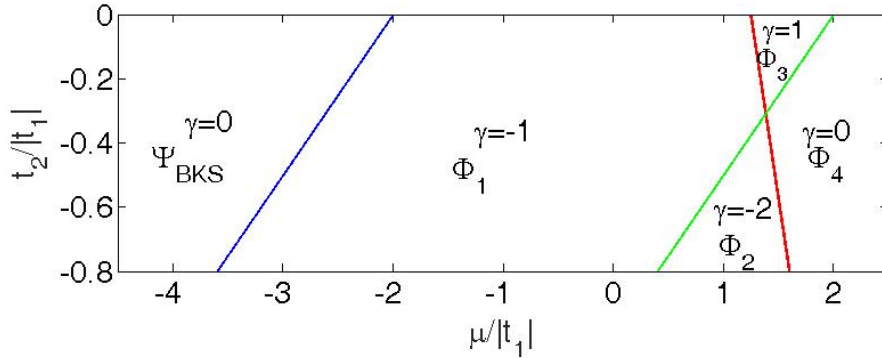


Рис.1. Топологическая фазовая диаграмма в переменных t_2 - μ .

На рисунке $|\Psi_{BKS}\rangle$ – функция основного состояния, имеющая вид аналогичный с функцией Бардина, Купера, Шриффера, записанной для бесспиновых фермионов. Функции $|\Phi_1\rangle = C_0^+ |\Psi_{BKS}\rangle$ и $|\Phi_3\rangle = C_{-k}^+ C_k^+ C_0^+ |\Psi_{BKS}\rangle$ в топологических фазах с одной парой ММ ($\gamma = \pm 1$) обладают нечетной фермионной четностью. $|\Phi_2\rangle = C_\pi^+ C_0^+ |\Psi_{BKS}\rangle$ реализуется в топологически нетривиальной фазе с двумя парами ММ ($\gamma = -2$) и представляется в виде суперпозиции состояний, содержащих четное число фермионов, как и функции $|\Psi_{BKS}\rangle$ и $|\Phi_4\rangle = C_{-k}^+ C_k^+ C_\pi^+ C_0^+ |\Psi_{BKS}\rangle$ в топологически тривиальных фазах ($\gamma = 0$).

Работа выполнена при поддержке РФФИ и Правительства Красноярского края (грант № 20-42-243001), а также Гранта Президента РФ МК-4687.2022.1.2. Руководитель Злотников А. О.

Литература:

- [1] Kitaev A. Y., Physics-Uspekhi, V.44, PP. 131-136 (2001).
- [2] Tao Z., Yan T., Liu W., Niu J., Zhou Y., Zhang L., Jia H., Chen W., Liu S., Chen Y., Yu D., Physical Review B, V.101(3), P.035109 (2020).

Неравномерная дырочная проводимость в гидрогеле на основе PEDOT:PSS

Большин Даниил Сергеевич

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

PEDOT:PSS (поли(3,4-этилендиокситиофен) полистирен сульфат) –полимер обладающий высокой электропроводностью, стабильностью и биосовместимостью, что определяет повышенный интерес к нему в части биомедицинского применения [1]. В силу гидрофильности этот полимер требует физической фиксации. Технологически перспективным является фиксация этого полимера в гидрогеле. В этом случае требуется обширное исследование физических и электрофизических свойств полученной структуры.

Исследуемый в работе гидрогель представляет собой устойчивую матрицу поливинилового спирта и кантана с добавлением PEDOT:PSS. К концам набухшего в физиологическом растворе NaCl (8.4г/л) гидрогеля на равные промежутки времени прилагалось постоянное напряжение. У гидрогеля, после релаксации наблюдается остаточная разность потенциалов, монотонно зависящая от прикладываемого напряжения. В текущей работе была сформулирована и подтверждена гипотеза о природе этого явления.

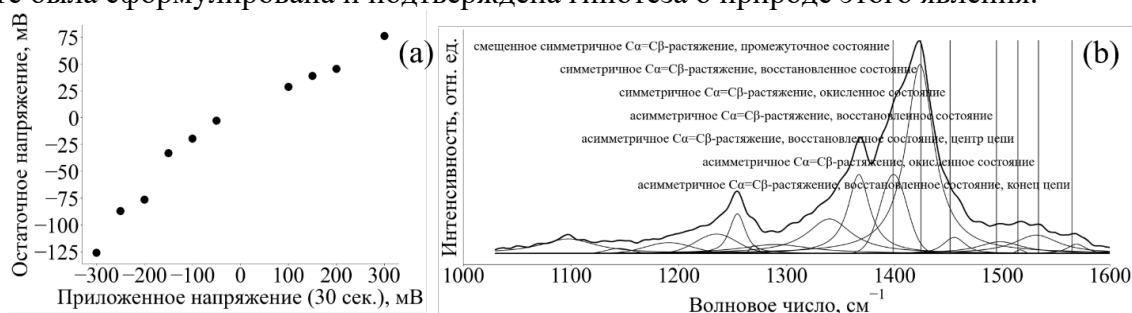


Рис. 1. Зависимость остаточного напряжения в гидрогеле после релаксации от величины приложенного напряжения в течение 30 сек. (а); декомпозиция спектра комбинационного рассеяния набухшего гидрогеля для определения степени окисления PEDOT:PSS (б).

PEDOT:PSS имеет дырочной тип проводимости, концентрация дырок зависит от степень окисления цепи PEDOT [2]. Опираясь на работу [3], по спектрам комбинационного рассеяния света во времени и пространстве сравнивались степени окисления проводящего полимера в гидрогеле под напряжением, набухшем в физрастворе. Помимо качественных изменений зафиксирован монотонный рост разницы в степени окисления проводящего полимера от анода к катоду с ростом времени приложенного напряжения 0.3 В.

Под действием поля ионы Na⁺ и Cl⁻ диффундируют, Na⁺ связывается с акцепторной цепью PSS, провоцируя восстановление цепи PEDOT. Повышение концентрации Cl⁻ провоцирует окисление цепи PEDOT для поддержания объемной электронейтральности. После снятия поля и замыкания концентрация подвижных ионов в течении 100с становится равномерной, а PEDOT:PSS продолжает находится в разных состояниях. Таким образом причиной остаточной разности потенциалов является градиент дырочной проводимости вдоль геля от анода к катоду. Отсутствие различий во времени и пространстве для спектров геля под напряжением в дистиллированной воде, подтверждает предложенное объяснение.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 20-32-90221, «Аспиранты»). Данная работа выполнена научным коллективом, в состав которого, кроме докладчика, входят: П.М. Готовцев, П.К. Кашкаров

Литература:

- [1] C. Boehler, Z. Agraw and M. Asplund, Bioelectronic Medicine, V. 2, № 2 (2019)
- [2] S. Garreau, G. Louarn, J. P. Buisson et al., Macromolecules, V.32, P.6807 (1999)
- [3] D. S. Bolshin, P. K. Kashkarov, Nanotechnologies in Russia, V. 17, № 3, (2022) (в печати)

Влияние магнитного поля на спектральные и температурные характеристики фотовольтаического эффекта в структуре Mn/SiO₂/n-Si

Бондарев Илья Александрович

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

Латеральный фотовольтаический эффект (ЛФЭ), обнаруженный Шоттки, и описанный Волмарком для р-п переходов [1] находит широкое применение в индустрии фотодетектирования и солнечной энергетики. Особый интерес представляет исследование ЛФЭ в структурах металл/диэлектрик/полупроводник, обладающих уникальной комбинацией магнитных и электрических свойств. Сочетание ЛФЭ и особенностей МДП структур позволяет манипулировать электронным и спиновым транспортом при помощи оптического излучения, что представляет интерес в контексте создания магнитооптических сенсоров и устройств спинтроники.

Исследуемая структура Mn/SiO₂/n-Si была приготовлена на допированной фосфором монокристаллической подложке n-Si. Подложка была предварительно обработана методом Шираки [2] (химическое травление и долгий отжиг при температурах 400-650°C). Для формирования слоя SiO₂ толщиной 1.5 нм, подложка подвергалась воздействию водного раствора H₂O₂ и NH₄OH в соотношении 1:1:1 в течение 30 мин при 60°C. Плёнка марганца толщиной 15 нм была напылена методом химического испарения в сверхвысоком вакууме при скорости напыления 0,25 нм/мин. Давление в базовой камере составляло $8,6 \times 10^{-6}$ Па. Напыление осуществлялось на установке Ангара [3].

Спектральные зависимости латерального фотонапряжения (ЛФН) оказались чувствительны как к величине магнитного поля, так и к его знаку. Отсутствие ЛФН в областях высоких и низких λ обусловлены особенностями поглощения света в полупроводнике. Температурная зависимость ЛФН демонстрирует два ярко выраженных максимума, при этом низкотемпературный максимум существенно подавляется магнитным полем, тогда как высокотемпературный пик не изменяется. Влияние магнитного поля на ЛФЭ в первую очередь обусловлено силой Лоренца, однако также не исключаются механизмы спин-зависимого рассеяния и рекомбинации горячих электронов на занятых донорных состояниях.

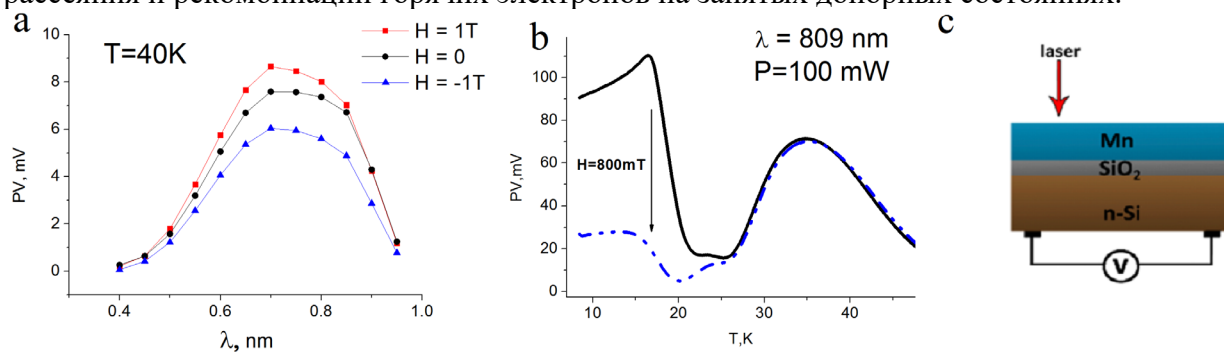


Рис. 1. а) Спектральная зависимость фотонапряжения при температуре 40 К, в магнитных полях $H = 0; 1T; -1T$; б) температурная зависимость фотонапряжения при длине волны $\lambda = 809$ нм и мощности облучения $P = 100$ мВт; в) схема эксперимента.

Данная работа выполнена научным коллективом, в состав которого, кроме докладчика, входят: М.В.Рауцкий, И.А. Яковлев, М.Н. Волочаев, А.В. Лукьяненко, А.С. Тарасов и Н.В. Волков

Литература:

- [1] J. T. Wallmark, Proceedings IRE, V.45, P.474 (1957).
- [2] A. Ishizaka and Y. Shiraki, Journal of The Electrochemical Society, V.133, P.666 (1986).
- [3] S. N. Varnakov, A. A. Lepeshev, S. G. Ovchinnikov, A. S. Parshin, M. M. Korshunov, and P. Nevoral, Instruments and Experimental Techniques, V.47, P.839 (2004).

Автоматизированный широкополосный спектрометр ферромагнитного резонанса

Бурмитских Антон Владимирович

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

В работе представлена конструкция автоматизированного широкополосного спектрометра, предназначенного для исследования тонкопленочных ферромагнитных наноструктур методом ферромагнитного резонанса. Отличительной особенностью конструкции спектрометра является наличие дополнительных калибровочных колец, изменяющих направление вектора намагниченности в тонкопленочном образце ортогонально направлению внешнего магнитного поля в процессе калибровки измерительной системы. Это позволяет снизить влияние рассогласования измерительной системы и проводить широкополосные измерения спектров поглощения СВЧ энергии при ФМР, вплоть до собственного резонанса измерительной ячейки. Влияние магнитного поля земли на тонкопленочный образец скомпенсировано дополнительными компенсационными кольцами, позволяющими получать суммарную напряженность постоянного магнитного поля вблизи образца менее 0.01 Э (в отсутствие внешнего магнитного поля). Вращение постоянного магнитного поля относительно СВЧ поля (создаваемого над поверхностью образца отрезком несимметричной короткозамкнутой микрополосковой линии) позволяет получать спектры ФМР при различном направлении магнитных полей, с амплитудой постоянного магнитного поля до $1,5 \text{ кТл}$. Таким образом, возможно проведение исследований спектров поглощения при ФМР вплоть до собственной резонансной частоты измерительной ячейки (около 15 ГГц), без появления паразитных резонансов, вызванных изменением волнового сопротивления измерительной системы в процессе вращения колец Гельмгольца, создающих постоянное магнитное поле.

Использование элементов цифровой фильтрации и последующей обработки экспериментальных данных удается проводить измерения образцов толщиной от сотен ангстрем, со скоростью примерно 1 образец в сутки (10^6 точек) и получать значения намагниченности насыщения, величины и направления поля одноосной и однонаправленной анизотропий, коэффициента затухания, в развертке по углу и величине постоянного магнитного поля.

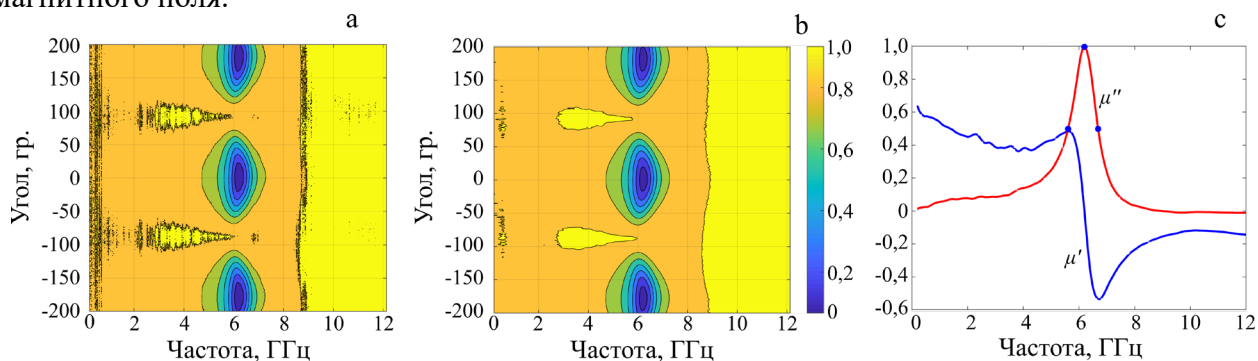


Рис. 1. Результаты измерения образца $\text{Ni}_{80}\text{Fe}_{20}$ толщиной 200 \AA (а – нормированное значение модуля S_{11} (б – после применения цифровой фильтрации); с – нормированное значение действительной и мнимой частей комплексной магнитной проницаемости)

Данная работа выполнена научным коллективом, в состав которого, кроме докладчика, входят: С.А. Клешнина, С.Д. Крёков.

Литература:

- [1] Б. А. Беляев, А. В. Бурмитских, А. В. Изотов, Н. М. Боев, Патент № 2747912. 2020.
- [2] A.V.Izotov, V.A.Belyaev, N.M.Boev, A.V.Burmitskikh, G.V.Skomorokhov, S.M.Zharkov, P.N.Solovev, Journal of Alloys and Compounds, V.900, P. 163416 (2022)

Применение спекл-структур, полученных с помощью нематической жидкокристаллической ячейки в системах визуализации с использованием структурированного освещения

Давлетшин Николай Николаевич

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

Метод структурированного освещения, который можно применять для визуализации в проходящем или отраженном свете, требует освещения объекта неоднородным пучком света. Системы визуализации, основанные на структурированном освещении, часто называют однопиксельными камерами или вычислительными фантомными изображениями [1]. Одной из первых работ в этой области стала работа по получению фантомных изображений с использованием псевдотермического источника света [2]. Метод восстановления изображения объекта, так называемого фантомного изображения является нетрадиционным для классической оптики. Это связано с тем, что информацию об объекте хранит функция пространственной корреляции двух световых полей: одно из которых взаимодействует с объектом, но не несет в себе пространственной информации, второе содержит пространственную информацию, но не взаимодействует с объектом [2,3]. Возможной реализацией такой системы является использование скоррелированных световых полей со случайным распределением интенсивности и фазы (спекл-структур). Для формирования спекл-структур используют различные устройства: пространственные модуляторы света, цифровые микрзеркальные устройства, вращающиеся матовые стёкла и т.д. [2].

В данной работе была изучена возможность создания устройства визуализации на основе методики структурного освещения с использованием нематического жидкого кристалла (НЖК), в котором возбуждается электрогидродинамическая неустойчивость. Экспериментально показана низкая степень взаимных корреляций спекл-структур, генерируемых НЖК ячейкой. Продемонстрирована способность НЖК ячейки генерировать случайные пространственные распределения интенсивности на примере восстановления фантомного изображения с использованием псевдотермического источника света (рис. 1). Для анализа сходства полученного фантомного изображения с исходным объектом был использован индекс структурного сходства.

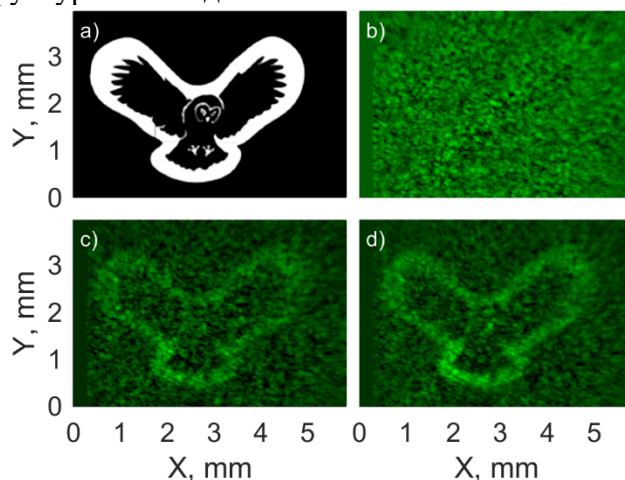


Рис. 1. Амплитудная маска (а). Фантомное изображение маски, восстановленное спустя 100 (b), 2500 (c) и 5000 (d) реализаций.

Данная работа выполнена научным коллективом, в состав которого, кроме докладчика, входят: Д.А. Иконников, В.С. Сутормин, А.М. Вьюнышев

Литература:

- [1] G. M. Gibson, S. D. Johnson, and M. J. Padgett, *Optical Express*, V.28 PP.28190-28208 (2020).
- [2] A. Gatti, E. Brambilla, M. Bache, and L.A. Lugiato, *Physical Review Letters*, V.93, P/093602 (2004).
- [3] M.J. Padgett, R.W. Boyd, *Philosophical Transactions*, V.375, P.20160233 (2017).

Формирование ферромагнитного порядка в допированной железом МАХ-фазе Mn_2GaC

Драганюк Оксана Николаевна

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

Первопринципные исследования функциональных материалов позволяют предсказать существование новых материалов с перспективными свойствами и направить экспериментальный поиск, снизив затраты на исследования. МАХ-фазы Mn_2AX [1] представляют собой атомно-слоистые материалы, где М - переходный металл, А - элемент А-группы, а Х - углерод и / или азот. МАХ-фазы активно применяются в спиэлектронных и магнитных охлаждающих устройствах, а в последнее время большое внимание стало уделяться исследованию магнитных МАХ-фаз, в том числе на основе железа и марганца.

Антиферромагнитная МАХ-фаза Mn_2GaC была экспериментально синтезирована [2] и теоретическое исследование [3] показало, что ферромагнитное и антиферромагнитное состояния Mn_2GaC энергетически очень близки. В рамках DFT+GGA было проведено изучение влияния замещения атомов марганца и галия в Mn_2GaC атомами железа и расчет стабильности полученных сплавов. Было обнаружено, что при замещении 12.5% атомов марганца на позиции М атомами железа соединение является стабильным (рис.1) антиферромагнетиком, в то время как при замещении 12.5% атомов галия на позиции А атомами железа соединение также остается стабильным, но при этом в нем формируется ферромагнитный порядок с большими значениями магнитного момента на атомах железа и марганца 2.8 μ_B , 1.7 μ_B , соответственно.

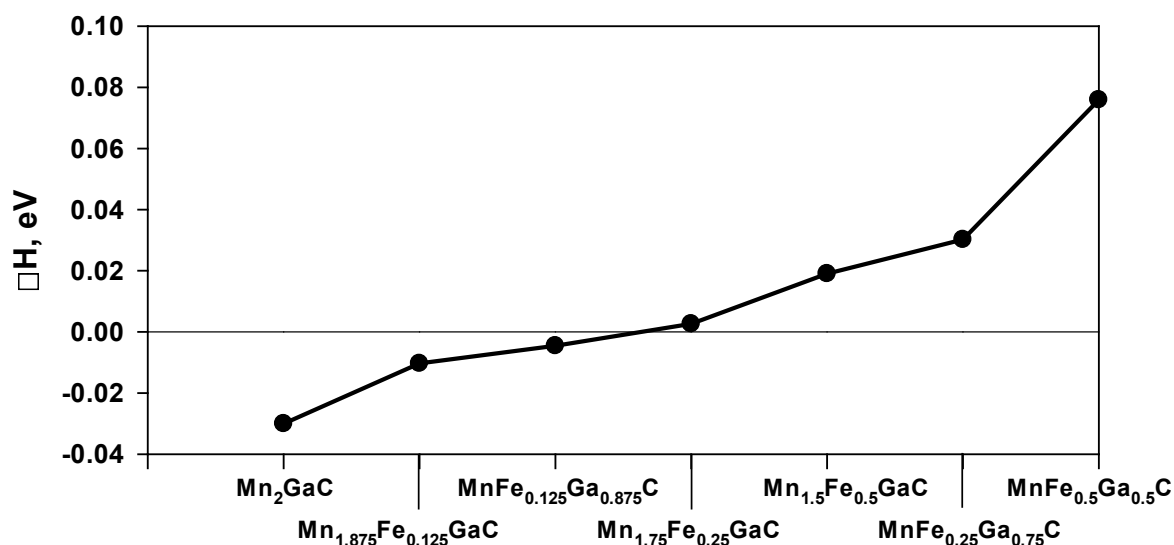


Рис. 1. Зависимость энергии формирования от состава МАХ-фазы.

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, V. Natu, S. Kota and M. W. Barsoum, Trends in Chemistry V.1(2), PP.210-223 (2019).
- [2] A. S. Ingason, A. Petruhins, M. Dahlqvist, A. Mockute, B. Alling, L. Hultman, I.A. Abrikosov, P.O.Å. Persson, J. Rosen, Materials Research Letters, V. 2, PP.89-93 (2014).
- [3] V.S. Zhandun, N.G. Zamkova, O.N.Draganyuk, A.S.Shinkorenko, U.Wiedwald, S.G.Ovchinnikov and M. Farle, Physical Chemistry Chemical Physics, V.23, 26376-26384 (2021)

Реализация с помощью радиочастотных импульсов селективных операторов поворотов для квантового процессора на кутритах

Пичковский Иван Сергеевич

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

В предыдущей работе [1] мы рассмотрели управление системой из 5 кутритов посредством селективных операторов поворота для решения задачи кластеризации. В данной работе мы рассмотрим реализацию этих операторов с помощью прямоугольных радиочастотных (РЧ) импульсов. Для этого рассмотрим нашу систему из 5 спинов с $S=1$ во вращающейся системе координат [2]:

$$H = -(W_1 - W_{rf})S_1^z - (W_2 - W_{rf})S_2^z - (W_3 - W_{rf})S_3^z - (W_4 - W_{rf})S_4^z - (W_5 - W_{rf})S_5^z + Q_1(3[S_1^z]^2 - 2I) + Q_2(3[S_2^z]^2 - 2I) + Q_3(3[S_3^z]^2 - 2I) + Q_4(3[S_4^z]^2 - 2I) + Q_5(3[S_5^z]^2 - 2I) + H_y + H_{dd}$$

В качестве констант гамильтониана примем $Q_1 = 15000$, $Q_2 = 10000$, $Q_3 = 12000$, $Q_4 = 18000$, $Q_5 = 30000$ и $W_1 = 3000$, $W_2 = 2500$, $W_3 = 2800$, $W_4 = 3200$, $W_5 = 3800$, а W_{rf} - частота РЧ импульса, которая выбирается равной величине частоты одного из переходов между энергетическими уровнями определённых спинов. Эти частоты для спина S_i примут вид: между уровнями 1 и 2 - $W_{rf} = -3Q_i + W_i$ и между уровнями 2 и 3 - $W_{rf} = 3Q_i + W_i$. С помощью этих частот мы отстраиваем селективность поворота, но при этом мы воздействуем на другие спины, что будет являться источником «cross talk» ошибки. S_i^z - матрицы проекции спинов в вычислительном базисе из собственных функций операторов проекции на ось Z , I единичная матрица.

$H_y = h_y \sum_{i=1}^5 S_i^z$ - гамильтониан взаимодействия с поперечным магнитным полем РЧ импульса, направленным вдоль оси Y , где h_y амплитуда РЧ импульса. Для уменьшения «cross talk»

ошибки эта величина должна быть малой. $H_{dd} = \sum_{i=1}^5 J_{ij} S_i^z S_j^z$ - гамильтониан диполь-дипольного взаимодействия (ДДВ), приведённый в работе [1]. Соотношение констант ДДВ определяется расстоянием между точками в задаче кластеризации, а для уменьшения ошибки их масштаб должен быть много меньше h_y . Помимо «cross talk» и ошибки, вызванной ДДВ, существует ошибка, вызванная набегом фазы. Чтобы ее избежать возьмём длительность импульса поворота на угол θ $t_i = \theta / \sqrt{2}h_y$, кратным $2\pi / Q_i$ и $2\pi / W_i$ [3]. Отсюда было найдено значение поля $h_y = (W_i \theta) / (2\sqrt{2}\pi n)$ для различных целых чисел n при условии, что число $k = (t_i Q_i) / 2\pi$ целое. Результаты для поворотов на угол π , направления которых определяется направлением магнитного поля: $h_1 = 0.5124$, $h_2 = 0.5124$, $h_3 = 0.5124$, $h_4 = 0.5277$, $h_5 = 0.5277$. Найдены параметры РЧ импульсов всех селективных поворотов, необходимых для реализации в процессоре на пяти кутритах алгоритма из работы [1].

Данная работа выполнена при поддержке Фонда развития теоретической физики и математики «Базис» по гранту #20-1-5-41-1.

Литература:

- [1] V. E. Zobov, I. S. Pichkovskiy, International Conference on Micro-and Nano-Electronics 2021. – SPIE, 12157. 540-548 (2022)
- [2] Сликтер Ч. П. и др. Основы теории магнитного резонанса, 1981.
- [3] Зобов В. Е., Ермилов, Журнал экспериментальной и теоретической физики. V.141, PP.1060-1070 (2012).

Спиновая динамика в редкоземельном ортоферрите TbFeO₃

Скоробогатов Станислав Алексеевич

*Институт физики им. Л.В. Киренского, ФИЦ КНЦ СО РАН
Сибирский федеральный университет, Красноярск, Россия*

Редкоземельные ортоферриты с общим составом $R\text{FeO}_3$ (R -редкоземельный ион) представляют собой оксидные магнитные материалы, исследование свойств которых не прекращается уже более века. Многообразие уникальных магнитных свойств [1 - 4] принято считать следствием $3d-4f$ взаимодействия, которое возникает между подсистемами ионов Fe^{3+} и ионов R^{3+} , однако построение полной микроскопической модели наталкивается на ряд трудностей.

В нашем исследовании мы пытаемся решить эту проблему, изучая магнитные свойства ортоферритов с разными редкоземельными ионами (Yb, Ho, Tm и Tb), используя для этого неупругое рассеяние нейтронов и другие эмпирические методы. Исследование спиновой динамики на двух различных энергетических масштабах: Fe^{3+} (~60 мэВ) и редкоземельной подсистемы Tb^{3+} (ниже 40 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 [5 - 7] и TbFeO_3 . Наши результаты показывают выраженную анизотропию между обменными взаимодействиями в **ab**-плоскости и вдоль оси **c** в пространственной группе $P6mm$. Спектр магнитных возбуждений подсистемы Tb^{3+} состоит из нескольких переходов кристаллического электрического поля (CEF), которые были определены на 17, 25 и 35 мэВ. Расчет, проведенный с использованием метода точечного заряда (PCM), показал схожие энергии переходов для иона Tb^{3+} . Также на основе данной модели нами был построен спектр магнитных возбуждений и намагниченность, которые воспроизвели экспериментальные данные.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 20-32-90142. Выражаем свою благодарность А. А. Подлесняку за помощь в экспериментах на INS и С. Е. Никитину за идейное и содержательное сопровождение работы на всех этапах. Данная работа выполнена научным коллективом, в состав которого, кроме докладчика, входят: К. А. Шайхутдинов, Д. А. Балаев, М. С. Павловский, А. А. Красиков, К. Ю. Терентьев

Литература:

- [1] R.L. White, Journal of Applied Physics, V.40, P.1061 (1969).
- [2] A.V. Kimel et al., Nature, V.435, P.655 (2005).
- [3] Y.J. Ke et al., Scientific Reports, V.6, P.19775 (2016).
- [4] S. Artyukhin, et al. Nature materials, V.11(8), PP.694-699 (2012).
- [5] S.M. Shapiro et al., Physical Review B V.10, P.2014 (1974).
- [6] S.E. Nikitin et al., Physical Review B V.98, P.064424 (2018).
- [7] S.A. Skorobogatov et al., Physical Review B V.101, P.014432 (2020).

Исследование жидкостной проницаемости керамических мембран на основе перлита и пеносиликатов

Харченко Иван Александрович

Институт вычислительного моделирования СО РАН

Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН

В настоящее время пористые керамические материалы находят широкое применение в мембранных технологиях разделения смесей и получения чистых веществ. Одним из перспективных приложений керамических мембран является водоподготовка и очистка сточных вод. Цель данной работы - исследование жидкостной проницаемости керамических мембран на основе перлита и пеносиликатов для процессов водоподготовки.

В данной работе представлена методика получения новых типов керамических материалов на основе перлита и пеносиликатов [1]. Получены образцы двухслойных керамик на основе полидисперсного порошка минерала перлита и пеносиликатов. Размер пор определяли методом пузырька в воде и с помощью электронной микроскопии. Средний размер пор несущей подложки и модифицирующего слоя составляет 40 мкм и 17 мкм. В работе была измерена жидкостная проницаемость полученных мембран на основе экспериментальной зависимости потока воды через мембрану от приложенной разности давлений. На рис. 1 приведены указанные зависимости в диапазоне давлений от 0.01 до 2 бар.

На основании полученных результатов были сделаны следующие выводы: 1) нанесение модифицирующего слоя вызывает снижение жидкостной проницаемости подложек с 485 до 272 м³/ч·м²·бар, это объясняется уменьшением размеров сквозных пор в два раза; 2) зависимость объемного потока от разности давлений в диапазоне до 2 бар для модифицированных подложек хорошо описываются законом Дарси, в то время как для подложек из перлита наблюдаются отклонения от этого закона при давлениях, превышающих 0.8 бар.

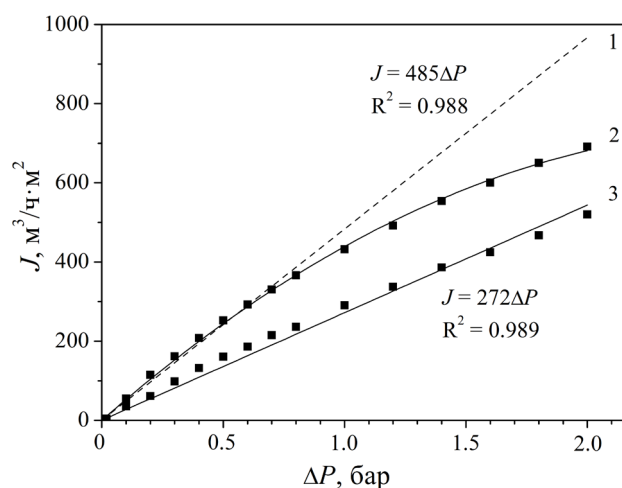


Рис. 1. Зависимость объемного потока воды от разности давлений для подложки из перлита (кривые 1 и 2) и подложки из перлита, модифицированной слоем пеносиликата (кривая 3).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 18-29-19078 мк. Физико-химический анализ материалов был выполнен в Красноярском региональном центре коллективного пользования ФИЦ КНЦ СО РАН. Выражаем благодарность соавторам работы – Н.П. Фадеевой, М.В. Павлову, М.М. Симунину, К.А. Шабановой, В.Ф. Павлову. Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук Рыжков И.И.

Литература:

[1] Н.П. Фадеева, М.В. Павлов, И.А. Харченко, М.М. Симунин, К.А. Шабанова, В.Ф. Павлов, И.И. Рыжков, Мембраны и мембранные технологии, V.12(3), PP.1-8 (2022).

Особенности характеристик полосно-пропускающих фильтров второго порядка на полуволновых и четверть волновых микрополосковых резонаторах

Шумилов Тимофей Юрьевич

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

Полосно-пропускающие фильтры, как известно, являются важнейшими элементами систем связи, радиолокации, радионавигации, измерительной и специальной радиоаппаратуры. В настоящее время наиболее широкое распространение в радиотехнике получили микрополосковые фильтры. Простейшие конструкции микрополосковых фильтров представляют собой связанные полуволновые резонаторы с параллельными друг другу полосковыми проводниками. Существенно меньшие размеры имеют конструкции фильтров на четвертьволновых микрополосковых резонаторах (МПР), в которых один из концов полоскового проводника каждого МПР соединяется с экраном.

В настоящей работе теоретически и экспериментально исследуются шесть конструкций микрополосковых фильтров второго порядка, построенных на полуволновых и четвертьволновых резонаторах. В качестве подложек в конструкциях фильтров использовались пластины из высокочастотной керамики ТБНС толщиной $h = 0.5$ мм, имеющей относительную диэлектрическую проницаемость $\epsilon = 80$. Резонаторы образованы отрезками микрополосковой линии с шириной полоскового проводника $w = 4$ мм, имеющей волновое сопротивление $Z_L \approx 4.5 \Omega$. В рассматриваемых конструкциях порты подключены к концам полосковых проводников, поэтому резонаторы во всех фильтрах имеют максимально возможную связь с входными и выходными линиями передачи.

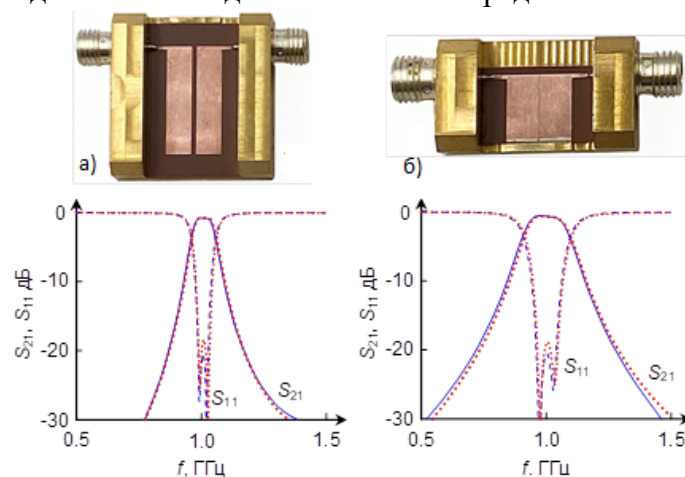


Рис. 1 Фотографии экспериментальных образцов двух конструкций двухзвенных фильтров на а) полуволновых и б) четвертьволновых МПР и их АЧХ. Линии – расчет, точки – эксперимент

Цель исследования – выяснение соотношения между характеристическими сопротивлениями полуволновых и четвертьволновых резонаторов и их отличия от волнового сопротивления образующей их микрополосковой линии.

В результате исследования показано, что характеристическое сопротивление полуволнового резонатора в два раза меньше, чем характеристическое сопротивление четвертьволнового резонатора [1].

Данная работа выполнена научным коллективом, в состав которого, кроме докладчика, входят: Я.Б. Завьялов

Литература:

[1] Беляев Б. А., Бальва Я. Ф., Лексиков Ан. А., Сержантов А. М., Ходенков С. А., Шумилов Т. Ю. Изв. вузов. Физика, V.65(2), PP. 71–81 (2022).

Синтез магнитных наноструктур на основе Fe_3Si методом МЛЭ

Яковлев Иван Александрович

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

Разработка новых и усовершенствование современных приборов требует создание и исследование новых материалов. Тонкие магнитные пленки (ТМП) широко используются со времен начала эры микроэлектроники, и научное сообщество постоянно изобретают новые материалы, в том числе и многокомпонентные. Изготовление современных наноматериалов требует использование сверхвысоковакуумных технологий. Метод молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) позволяет создать многослойные многокомпонентные высокочистые структуры для применения в различных областях микро-, радио- электроники, в том числе и спинтроники, которая является новым витком развития микроэлектроники.

Одним из перспективных материалов для ТМП является ферромагнитный силицид Fe_3Si , который обладает достаточно высокой намагниченностью насыщения $M_S = 1248$ Гс [1], и температурой Кюри $T_C = 840$ К [2]. Используя для синтеза метод МЛЭ, можно синтезировать данный силицид в различных структурных состояниях – от парамагнитных наночастиц, до многослойных сверхрешеток для устройств спинтроники.

В нашей работе представлены данные о методах получения силицида Fe_3Si в виде различных наноструктур: наночастицы, поликристаллические и монокристаллические ТМП, а также многослойные пленки с прослойкой Ge, и результаты исследования их структуры, магнитных и электрических свойств.

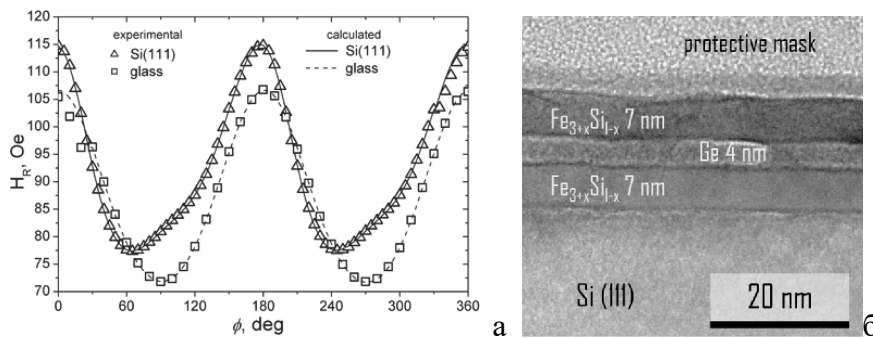


Рис.1. а) Угловые зависимости поля ФМР для пленок Fe_3Si с поликристаллической (glass), и монокристаллической (Si(111)) структурой [1]; б) ПЭМ поперечного среза для трехслойной пленки на основе $Fe_{3+x}Si_{1-x}$ [3]

Все образцы были получены методом МЛЭ при одновременном напылении железа и кремния, а также германия из эффузионных ячеек Кнудсена на подложки: Si(111), NaCl и кварц – при различных температурах. Были исследованы магнитные свойства методом ферромагнитного резонанса (ФМР), структура – методом дифракции отраженных быстрых электронов, сканирующей и просвечивающей электронной микроскопией (ПЭМ), электросопротивление и вольтамперные характеристики для некоторых пленок.

Из данных ФМР установлено, что одноосная анизотропия у пленок Fe_3Si может достигать 17,49 Э. Установлено также, что трехслойная пленка на основе $Fe_{3+x}Si_{1-x}$ имеет полупроводниковый характер поведения электросопротивления от температуры.

Данная работа выполнена научным коллективом, в состав которого, кроме докладчика, входят: С.А. Лященко, А.С. Тарасов, Б.А. Беляев, М.Н. Волочаев, И.В. Немцев, С.Н. Варнаков

[1] И.А. Яковлев, Б.А. Беляев, И.А. Тарасов, С.Н. Варнаков, *Фундаментальные проблемы радиоэлектронного приборостроения*, V.1, P.43, (2017).

[2] K. Lenz, E. Kosubek, K. Baberschke, J. Herfort, H.-P. Schönherr, K. H. Ploog, *Physica Status Solidi*, V.3, P.122 (2006).

[3] A.S. Tarasov, I.A. Tarasov, I.A. Yakovlev, et. al. *Nanomaterials*, V.12, P.131 (2022).

Секция «Химия и химические технологии»

Древесные гемицеллюлозы ели *Picea abies*: выделение, свойства, антиоксидантная активность

Боровкова Валентна Сергеевна

Институт химии и химической технологии ФИЦ КНЦ СО РАН

Древесные гемицеллюлозы (ГЦ) являются вторыми по распространенности возобновляемыми природными полимерами после целлюлозы и являются побочным продуктом процессов делигнификации лигноцеллюлозной биомассы. Основными препятствиями широкого применения ГЦ являются их неоднородная структура и загрязненность лигнином. Однако существуют перспективные разработки для применения ГЦ во многих направлениях [1, 2], благодаря таким преимуществам как нетоксичность, биосовместимость, способность к биологическому разложению. ГЦ, полученные в процессе окислительной делигнификации с использованием катализаторов, имеют низкое содержание лигнина и пригодны для дальнейшей переработки.

Максимальный выход ГЦ достигается при использовании в качестве катализаторов $(\text{NH}_4)_6\text{Mo}_7\text{O}_{24}$ и MnSO_4 при температуре процесса 100°C и составляет до 10,9 % масс.

Установлено, что полученные ГЦ состоят в основном из галактоглокоманнана и некоторого количества арабиноглокуронозилана, не содержат остаточного лигнина.

Согласно данным молекулярно-массового распределения (рис. 1) все образцы являются достаточно однородными, с небольшой полидисперсностью (1.8-3.3).

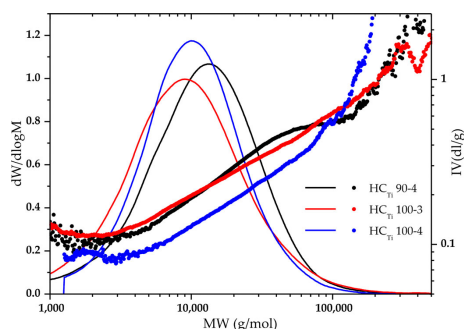


Рис. 1. Молекулярно-массовое распределение и графики Марка-Хаувинка-Сакурады гемицеллюлоз, полученных в процессе окислительной делигнификации древесины ели.

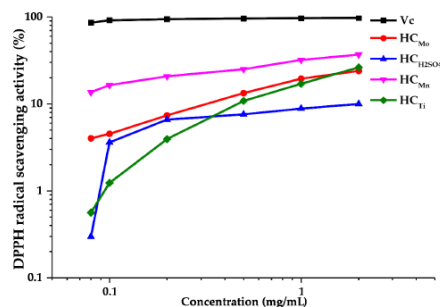


Рис. 2. Активность улавливания свободных радикалов ДФПГ Vc и гемицеллюлоз, полученных в процессе окислительной делигнификации древесины ели.

ГЦ, полученные из древесины ели, устойчивы к нагреванию до температуры 100°C , далее наблюдается стремительная потеря массы при $270-320^\circ\text{C}$.

Гемицеллюлозы, экстрагированные с использованием катализатора MnSO_4 показали относительно высокую антиоксидантную активность во всем диапазоне концентраций 0,08-2 мг/мл (рис.2). Полученные гемицеллюлозы могут быть использованы в биомедицинских целях, в многокомпонентных покрытиях и наполнителях для пищевой и фармацевтической промышленности.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ и ККФН №20-43-242906. Благодарность соавторам: Маляру Ю.Н., Судаковой И.Г., Чудиной А.И.

Литература:

[1] Mendes F.R.S., Bastos M.S.R., Mendes L.G., Silva A.R.A., Moreira R.A. Food Hydrocoll, V.70, P.181 (2017).

[2] Xu W., Pranovich A., Uppstu P., Wang X., Kronlund D., Hemming J., Öblom H., Moritz N., Preis M., Sandler N., Willför S., Xu C. Carbohydr. Polym., V.187, P.51 (2018).

Изучение влияния массопереноса на процесс каталитического окисления лигнинов в ванилин и целлюлозу

Вигуль Д. О.

Институт химии и химической технологии ФИЦ КНЦ СО РАН

Наиболее перспективным методом для получения ванилина является каталитическое окисление лигнинов молекулярным кислородом. Мало исследованной проблемой каталитического окисления лигнинов является влияние интенсивности массопереноса реагентов, в первую очередь O_2 , на скорость и селективность этого процесса [1]. Целью настоящей работы является изучение влияния интенсивности массопереноса на скорость процесса каталитического окисления лигнинов кислородом в ванилин и целлюлозу.

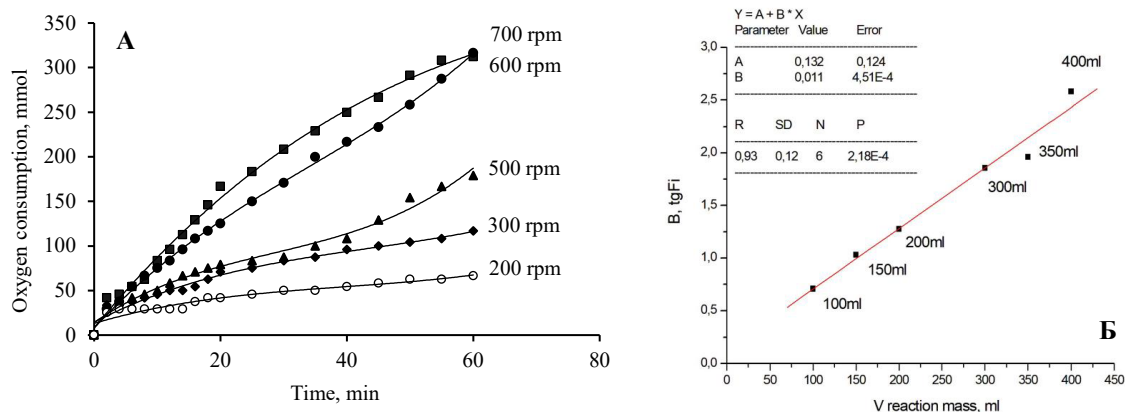


Рисунок 1. Влияние скорости перемешивания на кинетику поглощения O_2 при окислении древесины сосны, 300 мл (А) и зависимость $tg\phi$ от объема реакционной массы.

Впервые количественно исследовано влияние основных параметров массопереноса, скорости перемешивания и объема реакционной массы на скорость окисления нативных лигнинов. Обнаружена линейная зависимость, связывающая скорость процесса окисления со скоростью перемешивания, вычислены тангенсы угла наклона этих прямых, $tg\phi$. Установлена ранее неизвестная линейная связь $tg\phi$ с объемом реакционной массы. Полученные зависимости позволяют сократить трудоемкость поиска оптимальных условий получения ванилина и ароматических альдегидов окислением лигнинсодержащего сырья.

Проведенное исследование показывает, что установленная ранее зависимость скорости поглощения кислорода от скорости перемешивания воспроизводится при переходе от костры льна к сосновой древесине.

Показано, что зависимость $tg\phi$ от объема является линейной, а ее экстраполяция на близкое к нулевому значению скорости перемешивания дает $tg\phi = 0$. Это означает, что эта линейная зависимость объединяет как диффузионные, так и кинетически контролируемые области процесса окисления.

Сравнение полученных результатов с известными данными показывает, что максимальные теоретические выходы ванилина можно получить в условиях диффузионного режима, а не только в условиях кинетического контроля.

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

Литература:

[1] Tarabanko V.E., Vigul D.O., Kaygorodov K.L., Kosivtsov Yu., Tarabanko N., Chelbina Y.V., Bio. Conv. & Bioref (2022)

Катализ с двойной активацией при гидролизе целлобиозы фталевой и соляной кислотами и влияние температуры на него

Голубков Виктор Александрович

Институт химии и химической технологии ФИЦ КНЦ СО РАН

В литературе реакция гидролиза целлобиозы, катализируемая различными производными бензойной кислоты, рассматривалась в качестве удобной модели гидролиза целлюлозы на окисленных углеродных катализаторах. Салициловая и фталевая кислоты, имеющие вицинальные кислые группы, показывают особенно высокую активность [1]. DFT расчёты связывают этот эффект с прочной ассоциацией ароматической кислоты с дисахаридом за счёт водородных связей. Предполагается, что подобный комплекс особенно легко атакуется протоном извне [2]. По сути, это синергетическое действие двух кислот Брэнстеда, выраженное катализом двойной активацией, и подобные эффекты не находили иного отражения в литературе.

В целях экспериментального доказательства возможности синергетического эффекта общего и специфического кислотного катализа в реакции гидролиза целлобиозы нами были проведены кинетические опыты по гидролизу целлобиозы в воде в присутствии фталевой, соляной или эквимольной комбинации кислот.

При 70 °С псевдоконстанта скорости реакции первого порядка с комбинированным катализатором превышает сумму псевдоконстант для кислот по отдельности: около 38 % целлобиозы конвертировано за счёт синергии, что подтверждает начальную гипотезу! Однако повышение температуры на 10 градусов снижает эффект до 10 %, а при 90 °С наблюдается замедление реакции примерно на 8 % при совместном действии двух катализаторов по сравнению с суммой их собственных псевдоконстант скорости.

Данное нами объяснение такой температурной зависимости основывается на предположении, что в системе имеется равновесие образования комплекса целлобиозы с фталевой кислотой. Протон может атаковать свободную целлобиозу (маршрут с одинарной активацией), либо её комплекс с фталевой кислотой (маршрут с двойной активацией). Вклад этих маршрутов зависит от соотношения равновесных концентраций двух форм углевода и от соотношения констант скоростей маршрутов. Образование комплекса в заметном количестве должно быть экзотермическим, соответственно нагрев ослабляет комплексование, необходимое для двойной активации. Поскольку синергетический маршрут может обладать значительно меньшей энергией активации [2], соотношение энергий активации двух маршрутов также неблагоприятно для совместного маршрута при нагреве. Кроме того, связывание некоторой доли субстрата в комплекс делает невозможной её участие в маршруте с одинарной активацией, который более выгоден при высокой температуре. За счёт этого добавление фталевой кислоты приводит к замедлению процесса, то есть антисинергетическому эффекту. Более полное объяснение и кинетическая модель представлены в статье [3]. Данные результаты подтверждают существование синергетического действия общего и специфического кислотного катализа, и вероятно, в дальнейшем помогут в направленном и рациональном дизайне новых эффективных катализаторов гидролиза целлюлозы.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 21-73-20269). Благодарность соавторам работы и коллегам, принявшим участие в работе над докладом: Тарабанько Н.В., Таран О.П., Тарабанько В.Е., Зайцева Ю.Н.

Литература:

- [1] Kobayashi H. et al., Journal of Physical Chemistry C. V. 119. PP. 20993-20999. (2015)
- [2] De Chavez D. P. et al., Molecular Catalysis V. 475, P.110459 (2019)
- [3] Tarabanko N. et al., ChemPhysChem. doi.org/10.1002/cphc.202100804. (2021)

Влияние природы растворителя и материала рабочего электрода на механизм восстановления левулиновой кислоты

Зимонин Д.В.

Институт химии и химической технологии, ФИЦ КНЦ СО РАН

Методом циклической вольтамперометрии (ЦВА) изучен процесс восстановления левулиновой кислоты в органических (ацетонитрил, ацетон, этиловый спирт, ДМСО) и водно-органических (ацетонитрил-вода (1:1)) средах на различных электродах (Pt, Rh, Cu, Fe, Cu, Pb).

Показано, что использование органических растворителей позволяет изучать механизмы редокс-реакций ЛК в более широкой области потенциалов по сравнению с водными растворами. Значения потенциалов восстановления ЛК в зависимости от природы растворителя смещаются в анодную область в ряду: ДМСО < ацетонитрил < ацетон < этанол < ацетонитрил-вода. Электрохимическое восстановление ЛК протекает с образованием γ -валеролактона (ГВЛ): в ацетоне, этиловом спирте, ацетонитриле в одну двухэлектронную стадию, в ДМСО - в две последовательные одноэлектронные стадии через образование относительно устойчивого промежуточного радикала.

Изучение влияния природы материала рабочего электрода на восстановление ЛК в ацетонитриле в присутствии донора протонов показало, что этот процесс протекает по двум различным механизмам. На инертных (Pt, Rh и Cu) электродах происходят последовательные процессы: первоначальное восстановление протонов до адсорбированного на поверхности катода атомарного водорода, и в дальнейшем – ЛК до ГВЛ (рис.1-I). На неинертных (Fe, Cu, Pb) электродах протекает ряд параллельных реакций: электрохимическое восстановление протонов и левулиновой кислоты, что приводит к более глубокому гидрированию ЛК с образованием валериановой кислоты (рис.1-II).

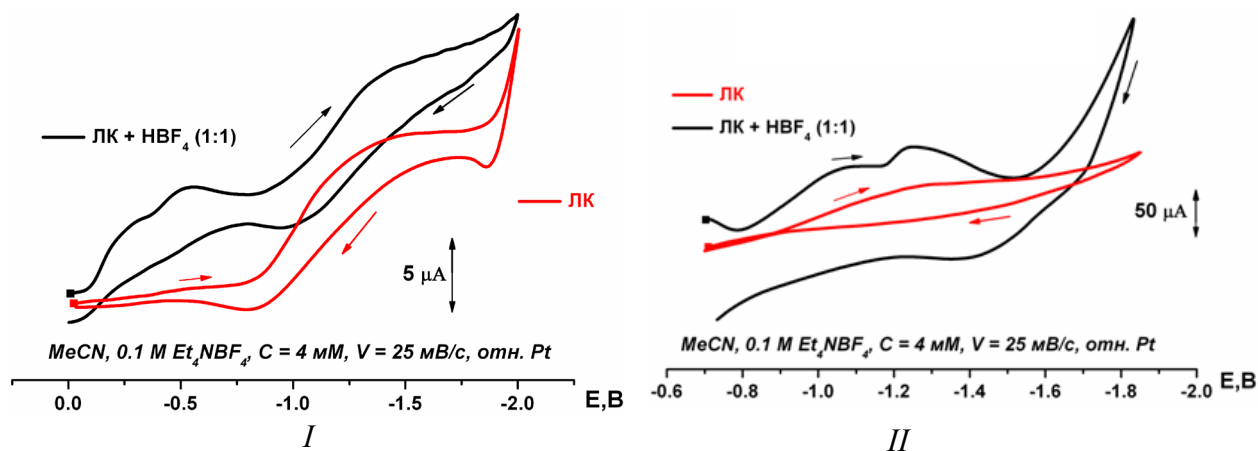


Рис. 1. ЦВА ЛК и ЛК + HBF₄ (1:1) на Pt(I) и Cu(II) электродах

Таким образом, варьируя природу растворителя и материала рабочего электрода можно регулировать процесс восстановления ЛК до ГВЛ или валериановой кислоты.

Благодарности.

Соавтор: с.н.с., к.х.н. Верпекин Виктор Васильевич

Научный руководитель: г.н.с., д.х.н. Бурмакина Галина Вениаминовна

Работа выполнена в рамках государственного задания Института химии и химической технологии СО РАН

Повышение характеристик наноструктурированных плёнок TiO_2 методом электрохимической активации

Зосько Н.А.

Институт химии и химической технологии ФИЦ КНЦ СО РАН

На фоне распространенных методов самодопирования наноструктурированных плёнок TiO_2 , которые требуют больших затрат [1], перспективным методом представляется электрохимическое гидрирование. Под действием внешнего электрического поля водород внедряется в решетку TiO_2 и восстанавливает Ti^{4+} до Ti^{3+} [2]. В данной работе исследован метод электрохимической активации электродов (допирование Ti^{3+}) на основе диоксида титана с целью увеличения фотокаталитических характеристик при разложении воды.

Процедура электрохимической активации проводилась в стандартной трёхэлектродной ячейке путём повторяющегося наложения потенциала от -1,5 до 2 В относительно хлоридсеребряного электрода сравнения. Количество циклов варьировалось от 30 до 60 раз.

Анализ SEM-изображений показал, что TiO_2 представлен массивом нанотрубок с диаметром 60 нм и толщиной слоя 7 мкм.

Исследование фотоактивности при помощи метода линейной развёртки потенциала показало значительное увеличение плотности фототока (в 3-3,5 раза) для образцов, подвергнутых электрохимической активации. Для оценки стабильности работы, образцы выдерживались длительное время при постоянном освещении и сдвиге потенциала 1 В. В первые 200 с выдержки, для всех образцов наблюдается снижение фототока примерно на 18–26 %. Это связано, по-видимому, с установлением равновесия на межфазной границе электрод-электролит. Дальнейшее изменение плотности тока было незначительным и находилось в пределах от 4 до 8 %.

С помощью метода электрохимической импеданс спектроскопии показано увеличение проводимости электрода и снижение сопротивления переносу заряда на границе электрод/электролит. Это приводит к снижению скорости рекомбинации носителей заряда и, как следствие, увеличению фотоклика электрода.

Для определения влияния допирования на электронные свойства TiO_2 электродов в растворе электролита были получены зависимости емкости межфазной границы электрод/электролит от потенциала (Мотт–Шоттки зависимости). Наклон полученных зависимостей был положительным, что характерно для полупроводников n-типа, процесс электрохимической активации электродов не приводит к изменению типа полупроводника. При этом гораздо меньший линейный наклон кривых свидетельствует об увеличении плотности носителей заряда в восстановленных TNTs. Например, плотность носителей заряда для неактивированного электрода по данным кривой М-Ш составляет $2,94 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$, в то время как для активированного электрода это значение составляет $5,57 \cdot 10^{24} \text{ см}^{-3}$. Анализ зависимости М-Ш для активированных электродов также свидетельствует о сдвиге потенциала плоских зон в область более положительных значений и, соответственно, таком же сдвиге уровня Ферми, что благоприятствует разделению зарядов и увеличению фотоэлектрохимических характеристик допированных электродов.

Благодарность соавтору работы Кеновой Т.А.

Литература:

[1] A. V. Puga, *Coordination Chemistry Reviews*, V.315. PP. 1-66 (2016).

[2] Xu, C., Song, Y., Lu, L. et al., *Nanoscale Research Letters*, V.8, PP. 391(2013).

Комплексная экстракционно-каталитическая переработка механически активированной коры сосны

Ионин Владислав Александрович

Институт Химии и Химической технологии ФИЦ КНЦ СО РАН

Сосна по объему лесозаготовок регионов Сибири составляет около 70 % заготавливаемого древесного сырья [1, 2]. Анализ показателей баланса использования сырья показывает, что большое количество отходов предприятий ЛПК используются нерационально [1, 2], что обуславливает высокую актуальность развития методов безотходной переработки коры сосны, которая по своему составу является ценным источником для получения широкого ассортимента веществ с повышенной добавленной стоимостью.

В данной работе предложена схема комплексной экстракционно-каталитической переработки механически активированной коры сосны. Получены результаты, демонстрирующие преимущества применения активирующих воздействий на кору сосны, в частности, механическая активация с использованием процесса взрывного автогидролиза, способствуют выделению максимального количества наиболее ценных экстрактивных веществ (смолистые вещества – 9,89 мас.%, β -ситостерин – 0,78 мас.%, дубильные вещества – 16,78 мас.%, пектиновые вещества – 6,68 мас.%).

При этом предварительная активация коры сосны в барабанной мельнице в свою очередь позволила достичь максимального выхода жидких продуктов (21,63 мас.%) с максимальной степенью превращения сырья (68,08 мас.%) в процессах восстановительно-каталитического фракционирования.

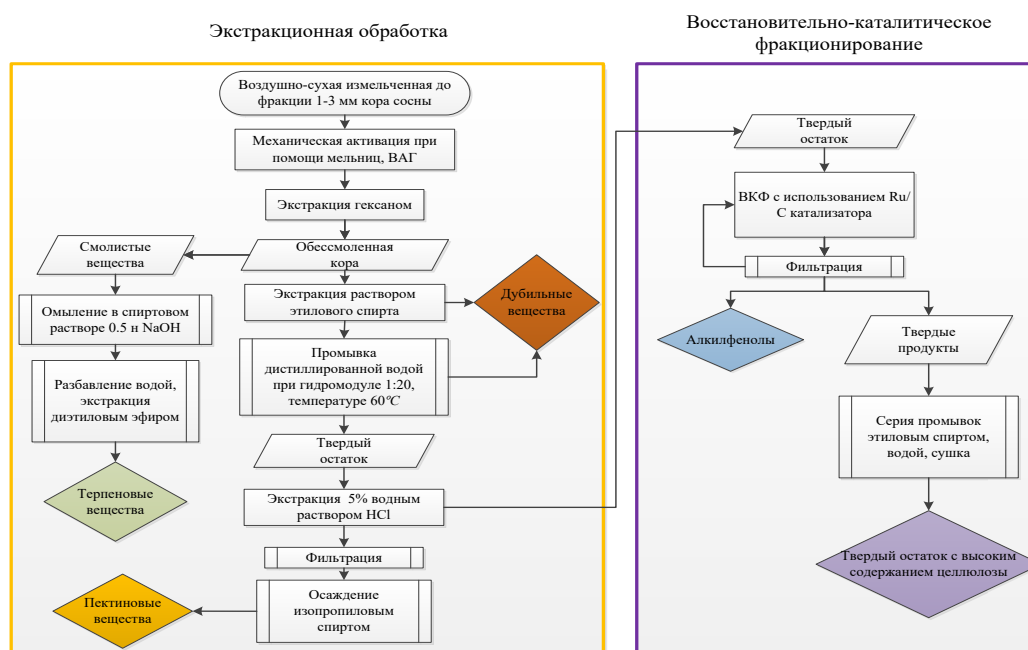


Рис. 1. Схема эксперимента комплексной переработки коры сосны

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 19-43-240011. В работе использовано оборудование Красноярского регионального центра коллективного пользования ФИЦ КНЦ СО РАН. Благодарность соавторам работы: Таран О.П., Скрипников А.С., Веприкова Е.В., Казаченко А.С., Маляру Ю.Н.

Литература:

- [1] I.V., Melman., Regional economy: theory and practice, V. 26, p.6. (2008)
- [2] Sobolev S.V., T.V.N., Success of modern natural science, V.4, PP.168-171. (2004)

Электрокаталитическое окисление крахмала в неразделенной ячейке с участием активных форм кислорода

Капаева С. Н.

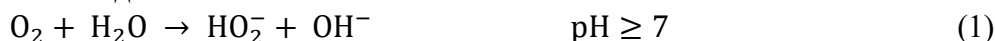
Институт Химии и Химической технологии ФИЦ КНЦ СО РАН

В настоящее время крахмал является практически важным и интересным биополимером для промышленности из-за широкой доступности и низкой стоимости. Его применение в различных отраслях промышленности, таких как пищевая, бумажная и текстильная, может быть увеличено за счет использования различных методов модификации. Известно, что окисление крахмала проводят различными методами: химическими, каталитическими и электрокаталитическими. Наиболее интересным продуктом окисления крахмала является диальдегид крахмала (ДАК). В процессе окисления, крахмал теряет свою первоначальную кристаллизацию, а гидроксильные группы в кольце глюкозы частично окисляются до альдегидных или кетонных групп, которые ослабляют водородные связи между цепями крахмала, образуя ДАК, и другие продукты окисления [1-3].

Целью данного исследования является электрокаталитическое окисление крахмала до ДАК на электродах из Pb/PbO₂ и допированном бором алмазе (ДБА) в неразделенной ячейке с участием активных форм кислорода (АФК: HO·, HO₂·, HO₂⁻), которые могут быть генерированы в водных растворах по реакциям согласно уравнениям (1-6) [4].

Согласно уравнениям (1-6), АФК могут быть сравнительно просто генерированы *in situ* в водных средах на основании сопряженных процессов при анодном окислении воды на платине, ДБА, на электродах на основе оксидов металлов переменной валентности (диоксид свинца, никеля, олова и т.д.), и катодным восстановлением кислорода до пероксида водорода на углеродистых материалах.

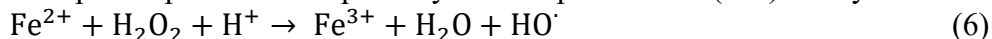
На катоде:



На аноде:



Введение в раствор ионов Fe²⁺ реализует электро-Фентон (ЭФ) схему:



Изучено влияние плотности тока, pH раствора электролита, времени электролиза, концентрации субстрата на кинетику и эффективность процесса. На исследуемых электродах были найдены оптимальные условия получения ДАК: плотность тока - 25 мА/см², концентрация субстрата - 3,3 г/л, pH 2-3 и температура 20-25°C

Литература:

- [1] Zia-ud-Din, Xiong H., Fei P., Critical reviews in food science and nutrition, V. 57, PP.2691-2705 (2017).
- [2] Zhang Y. R. et al. , Carbohydrate Polymers., V.78, PP.157-161 (2009).
- [3] Fiedorowicz M., Para A., Carbohydrate Polymers, V. 63, PP.360-366 (2006).
- [4] Бутрим С. М. и др., Известия высших учебных заведений. Химия и химическая технология, Т. 58, №. 1, С. 28-32 (2015).

Синтез и характеристика сверхконцентрированных золь наночастиц оксида меди (II)

Карпов Денис Вадимович

Институт Химии и Химической технологии ФИЦ КНЦ СО РАН

Наночастицы оксида меди (II) – перспективный материал для применения в катализе [1] и фотокатализе [2], биомедицине [3], фотовольтаике [4]. В то же время, описываемые в литературе золи наночастиц CuO характеризуются малой концентрацией (единицы – десятки г/л) [4].

Анизотропные наночастицы оксида меди были получены по модифицированной методике [5] путем щелочного осаждения горячего раствора сульфата меди (II) в присутствии уксусной кислоты гидроксидом натрия с одновременным разложением образующегося Cu(OH)₂ до оксида. Полученный осадок CuO стабилизировали путем внесения однозамещенного цитрата натрия, после чего упаривали при постоянном перемешивании до конечной концентрации наночастиц 1000 г/л. Столь концентрированные стабильные золи оксида меди получены нами впервые. Согласно РФА, полученные наночастицы представлены монофазой тенорита (C2/c) (рисунок 1А). Размер ОКР, вычисленный с учетом приборного уширения рефлексов, составляет 11 нм. По данным ПЭМ, образец представлен анизотропными наночастицами со средней длиной 29 нм и диаметром 8 нм. Распределения частиц по длине (L) и диаметру (W) представлены на вставке.

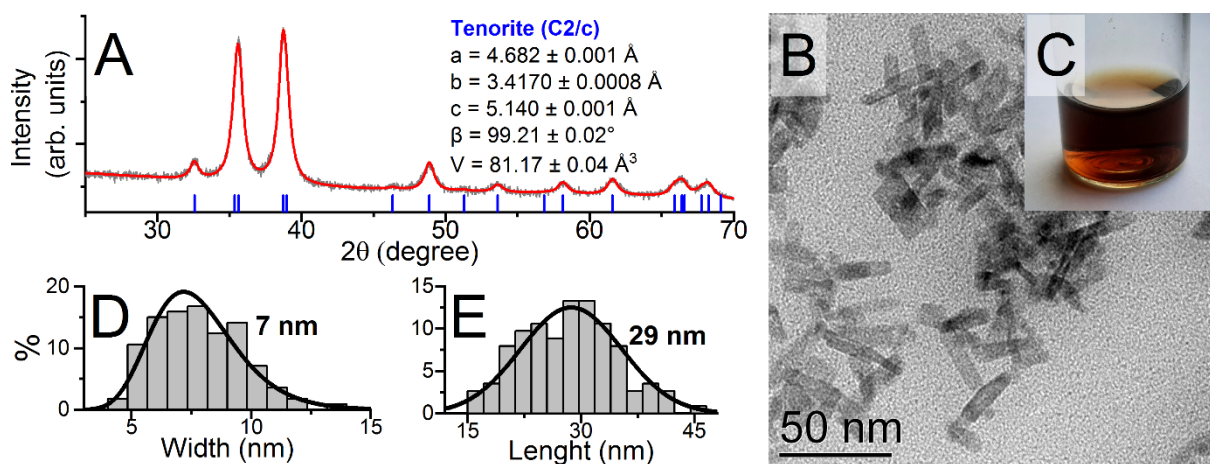


Рис. 2. А – Дифрактограмма образца; В – микрофотография наночастиц CuO; С – внешний вид разбавленного золя; D, E – гистограммы распределения частиц по диаметру и длине

Выражаю благодарность соавторам работы Воробьеву С.А., Антиповой Ю.В., Михлину Ю.Л., а также научному руководителю Сайковой С.В.

Литература.

- [1] Huang H., Huang W., Xu Y., Ye X., Wu M., Shao Q., Ou G., Zheran Peng Z., Shi J., Chen J., Feng Q., Zan Y., Huang H., Hu P., *Catalysis Today*, V. 258. PP. 627 – 633 (2015).
- [2] Sonia S., Poongodi S., Kumar P. S., Mangalaraj D., Ponpandian N., Viswanathan C. *Materials Science in Semiconductor Processing*. V.30. PP.585 – 591 (2015).
- [3] Grigore M., Biscu E., Holban A., Gestal M., Grumezescu A., *Pharmaceuticals*. V. 9, P.75 (2016).
- [4] Lim Y.-F., Choi J. J., Hanrath T., *Journal of Nanomaterials*.. P. 1–6 (2012).
- [5] Vaseem M., Hong A.-R., Kim R.-T., Hahn Y.-B., *Journal of Materials Chemistry C*, V.1, PP. 2112 – 2120 (2013).

Влияние условий термообработки на фазообразование в системе Er-Fe

Киришева Е.А.

Институт химии и химической технологии, ФИЦ КНЦ СО РАН

Ферриты-гранаты редкоземельных металлов – магнитомягкие высокочастотные ферритовые материалы, высокий интерес к которым обусловлен их выраженными магнитными и оптическими свойствами.

Наиболее распространенными методами синтеза феррит-гранатов РЗМ являются твердофазный синтез, золь-гель метод и метод химического соосаждения. В представленной работе $\text{Er}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ получали с помощью анионообменного синтеза, с последующей термической обработкой продуктов осаждения. Анионообменное осаждение позволяет получить чистый высокодисперсный прекурсор со стехиометрией соответствующей стехиометрии граната. Целью работы является изучение продуктов анионообменного осаждения, а также исследование влияния термической обработки на состав и размер частиц железо-эрбиевого граната.

Оптимальные условия анионообменного осаждения были определены в более ранней работе [1]. Продукт, полученный в ходе осаждения, был исследован с помощью термического анализа. На основе полученных данных выявлено, что полученный осадок представляет из себя смесь гидроксида железа и основного карбоната эрбия, и установлена оптимальная температура отжига продуктов анионообменного осаждения – 800°C .

Цикл термической обработки прекурсоров состоит из трех стадий: нагрев печи, отжиг, охлаждение полученных образцов до комнатной температуры. Известно, что при отжиге соосажденных гидроксидов железа и РЗМ сначала формируются фазы Fe_2O_3 и MFeO_3 (где М – редкоземельный элемент) [1]. Увеличение времени отжига приводит к увеличению массовой доли фазы граната, однако может привести к увеличению частиц конечного продукта. В связи с этим исследовалось влияние термической обработки прекурсора на состав конечного продукта и размер полученных частицу.

Основываясь на полученных данных выявлено, что начальная температура отжига не оказывает существенного влияния на фазовый состав и размер частиц конечного продукта. При этом уменьшение общего времени термической обработки приводит к снижению содержания фазы граната. Установлено, что обжиг продукта осаждения при температуре 800°C в течение 4 ч с последующим охлаждением в печи приводит к образованию железо-эрбиевого граната с незначительной примесью фаз перовскита и Fe_2O_3 . Размер частиц граната, вычисленный по данным РФА, составляет 28 ± 2 нм. В случае извлечения образца из печи через 4 ч отжига, и охлаждения его в эксикаторе образует смесь фаз $\text{Er}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$, ErFeO_3 , Fe_2O_3 , при этом содержание фазы граната составляет 50%, а рассчитанный из данных РФА размер частиц феррит граната эрбия составляет- 28 ± 2 . Размер частиц по результатам ПЭМ составляет 50 нм.

Литература:

[1] Сайкова С.В. Киришева Е.А. Фадеева Н.П. Пантелеева М.В. Пикурова Е.В. Самойло А.С., Журнал неорганической химии. Т.67. №2. С. 158-165 (2022)

Морфология композита на основе СВМПЭ с добавкой нановолокон оксида алюминия

Куулар А. А.

Институт химии и химической технологии, ФИЦ КНЦ СО РАН

Композиционные полимерные материалы обладают широким спектром практических применений [1]. Целью исследования было изучение особенностей введения нановолокон оксида алюминия в матрицу сверхвысокомолекулярного полиэтилена (СВМПЭ).

В работе [1] было показано улучшение механических свойств композита. Добавка нановолокон оксида алюминия концентрацией 0,01 мас. % способствует повышению модуля Юнга на ~5,2% и прочности на растяжение на ~15 % относительно референсного образца. Также наблюдается значительный рост механических свойств образцов полученных с помощью процесса механоактивации. Чтобы понять эффективность упрочнения были проведены сравнительные электронно-микроскопические исследования морфологии композита с механоактивацией и без.

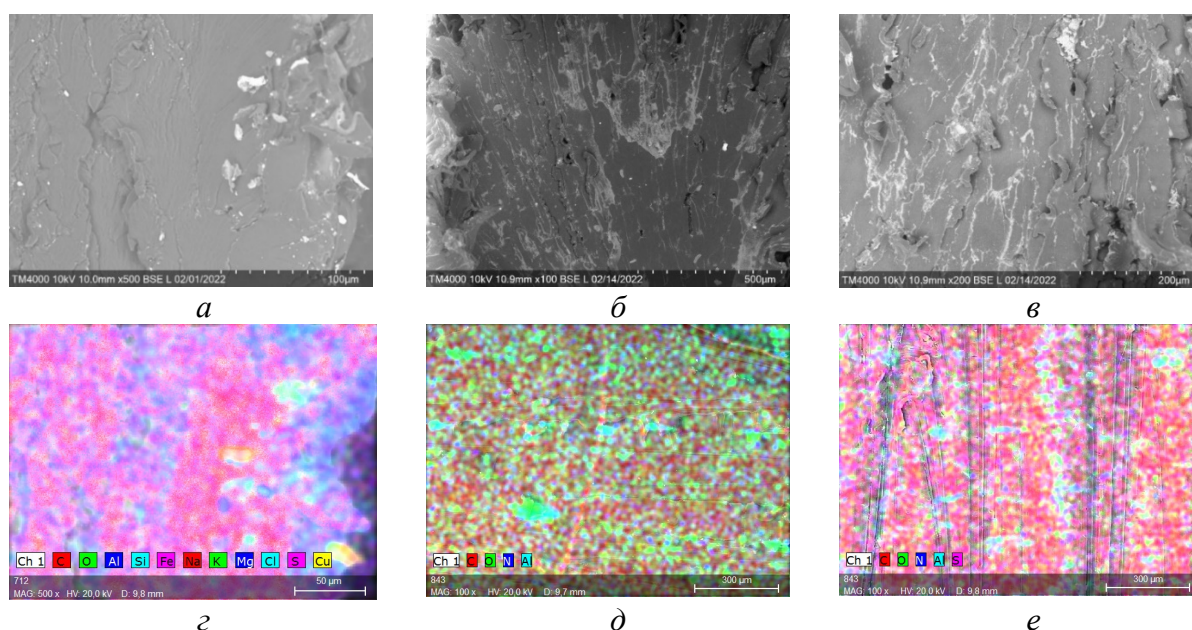


Рис. 1. СЭМ изображения образцов с механоактивацией (а, г) и без механоактивации концентрациями нановолокон 0,01 мас. % (б, д) и 1 мас. % (в, е)

На рис. 1 представлены СЭМ изображения композита с механоактивацией и без, в которых можно наблюдать частички нановолокон оксида алюминия в виде «светлых крапинок» на фоне матрицы СВМПЭ. В зависимости от метода получения образца наблюдается различие текстур на рис.1 а-в. Так в образцах (рис.1 б, в), полученных с помощью порошкового метода, добавка имеет ламеллярную морфологию и нановолокна свободно распределялись в пустотах под действием внешней нагрузки, что привело к характерным элементам в морфологии образца. Спектроскопия образцов без механоактивации (рис.1 д, е) показывает наименьшее количество примесей.

С помощью СЭМ исследования убедились, что упрочнение механических свойств механоактивационных образцов происходило за счет влияния нежелательных примесей помимо добавки. Исследование подтвердило, что все же добавка нановолокон оксида алюминия с помощью порошкового замешивания оказывает положительное влияние на механические свойства композита.

Литература:

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

Синтез и свойства нового перфторированного селен-содержащего лиганда для хелатирования редкоземельных металлов

Лутошкин М.А.

Институт химии и химической технологии, ФИЦ КНЦ СО РАН

Селективное разделения и концентрирование 17 редкоземельных металлов (Sc, Y, La, Ce, Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy, Tb, Ho, Er, Yb, Tm, Lu) является одной из сложнейших проблем химической технологии. Одними из эффективных хелатирующих агентов для редкоземельных металлов в водных растворах являются перфторированные 1,3-дикетоны. Благодаря наличию двух карбонильных групп они образуют устойчивые шестичленные циклы, близкие по своей электронной структуре к ароматическим системам.

Селективного разделения редкоземельных металлов можно добиться, используя дикетоны с различными функциональными группами. Синтезированный в начале 50-ых годов теноилтрифторацетон и его производные оказались очень эффективными для этой цели[1]. В последующие десятилетия комплексы редкоземельных металлов с дикетонами нашли применения как люминофоры, катализаторы и OLED материалы. Однако, практически не изученными остаются гомологи теноилтрифлюороацетона с другими халькогенами (кислородом, селеном, теллуром). В данной работе был синтезирован аналог содержащий селен вместо серы в тиофеновом кольце[2]. Изучаемый лиганд был синтезирован путем конденсации 2-селеноилацетона (который был получен ацилированием селенофена) с этиловым эфиром трифторуксусной кислоты. Строение продукта было подтверждено методами ЯМР, масс-спектрологии и элементным анализом.

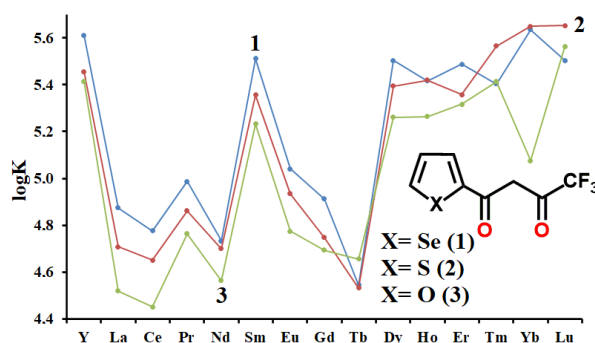


Рис. 1. Кривые зависимости между истинными константами устойчивости ($\log K$) и атомным номером металла

Основные физико-химические параметры в водном растворе были определены спектрофотометрически. Кислотно-основные характеристики были определены в ацетатном буфере ($pK_a=6.40\pm 0.05$ при $I=0.50$ M), и в концентрированном растворе HCl ($pK_H=1.85$). Взаимодействия с редкоземельными металлами наблюдалось при pH 4,5-5,4. Константы образования монокомплексов были определены методом молярных серий (постоянная концентрация лиганда и варьируемая концентрация металла) при значительном избытке ионов металла. Конкурирующие реакции (взаимодействие металлов с ацетатным буфером и гидролиз) учитывали исходя из литературных данных. Полученные истинные константы устойчивости визуализированы на Рисунке 1 (для сравнения приведены аналоги селенофентрифторацетона).

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 19-13-00272.

Литература:

- [1] Reid J.C., Calvin M., Journal of the American Chemical Society, 72(7), PP. 2948–2952 (1950).
- [2] Lutoshkin, M.A., Taydakov, I.V., Polyhedron, V.207, PP.115383-115393 (2021).

Исследование влияния скорости перемешивания и размера зерна катализатора Ni/C на процесс гидрирования костры льна.

Мирошникова Ангелина Викторовна

Институт химии и химической технологии СО РАН, ФИЦ КНЦ СО РАН

Травянистые растения являются привлекательным сырьем в процессах восстановительного каталитического фракционирования, поскольку они составляют значительную часть доступной биомассы.

С целью комплексной переработки всех компонентов лигноцеллюлозной биомассы применяют методы ее каталитического фракционирования, основанные на восстановлении водородом [1]. В данном процессе происходит деполимеризация лигнина с образованием жидких углеводородов при сохранении основной части целлюлозы. В настоящей работе проведено исследование влияния размера зерна катализатора никеля, нанесенного на окисленный графитоподобный углеродный носитель сибунит, а также скорости перемешивания на процесс фракционирования костры льна в среде этанола с водородом при 225 °С.

Никелевые катализаторы на основе окисленного углеродного носителя Сибунит-4 получали методом пропитки по влагоемкости водным раствором хлорида никеля (II) гексагидрата ($\text{NiCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$) с последующей сушкой при комнатной температуре в течение 3 ч и при 60 °С в течение 12 ч.

Выходы жидких продуктов в каталитическом процессе возрастают (с 14.62 до 24.63 мас.%) при увеличении скорости массопереноса. При этом изменение размера зерна катализатора не оказывает существенного влияния на выход жидких продуктов.

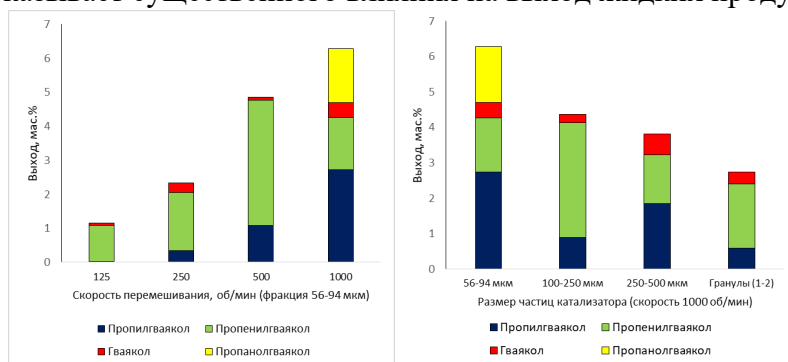


Рис. 1. Влияние скорости перемешивания и размера частиц катализатора на выход основных соединений.

Результаты ГХ-МС, представленные на рисунке 1 показали, что при низких скоростях перемешивания и больших размерах зерна катализатора с максимальным значением при (500 мин^{-1} и 100-250 мкм) преобладающим продуктом является 4-пропенилгваякол, а выходы 4-пропилгваякола и 4-пропанолгваякола возрастают при увеличении скорости перемешивания и уменьшении зерна катализатора с максимумом при (1000 мин^{-1} и 56-94 мкм).

Сопоставление влияния размера зерна катализатора и скорости перемешивания на процесс показывает, что оба этих фактора влияют на эффективность данного процесса и селективность мономерных соединений.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 20-63-47109)

Литература:

[1] Kazachenko, A. S., Tarabanko, V. E., Miroshnikova, A. V., Sychev, V. V., Skripnikov, A. M., Malyar, Y. N., Mikhlin, Y. L., Baryshnikov, S. V., Taran, O. P., Catalysts, V.11. P.42 (2021).

Новые карбонил(β-дикетонат)изоцианидные комплексы родия (I)

Патрушева А.А.

Институт химии и химической технологии СО РАН, ФИЦ КНЦ СО РАН

Изоцианидные комплексы переходных металлов находят широкое применение в химии. Они служат исходными реагентами для синтеза гетероциклических соединений [1], являются мономерами для получения полимеров с ценными техническими характеристиками [2, 3, 4]. Настоящая работа посвящена разработке методик синтеза новых изоцианидных комплексов карбонил(β-дикетонатов) родия (I), изучению их строения и химических свойств.

Установлено, что при взаимодействии (β-diketonato)Rh(CO)₂ с адамантилизоцианидом происходит селективное замещение одного СО-лиганда с образованием новых комплексов (β-diketonato)Rh(CO)(CNA*d*).

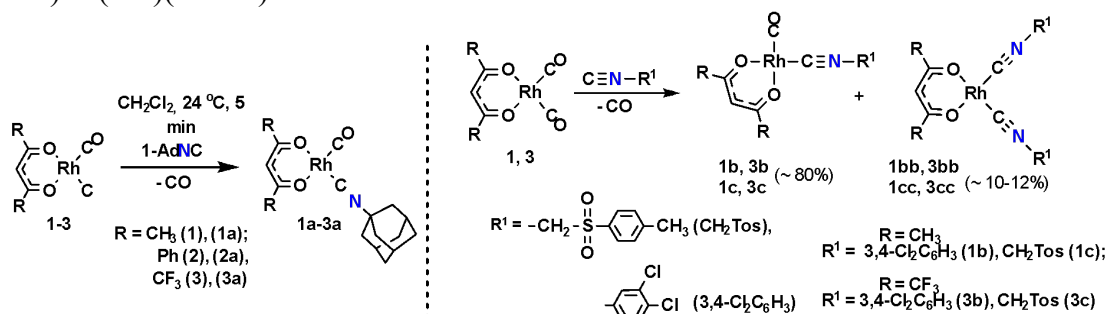


Рис. 1. Схемы реакции (β-diketonato)Rh(CO)₂ с CNA*d*, CNC₆H₃Cl₂ и CNCH₂Tos.

Подобное взаимодействие β-дикетонатов родия **1**, **3** с эквивалентными количествами 3,4-дихлорфенилизотиоцианида (CN-C₆H₃Cl₂) и 1-(изоциано-метилсульфонил)-4-метилбензола (TosMIC) приводит к образованию комплексов типа (β-diketonato)Rh(CO)(L) (рисунок 1). Строение полученных новых соединений предложено на основе данных ЯМР ¹H, ¹³C и ИК-спектроскопии.

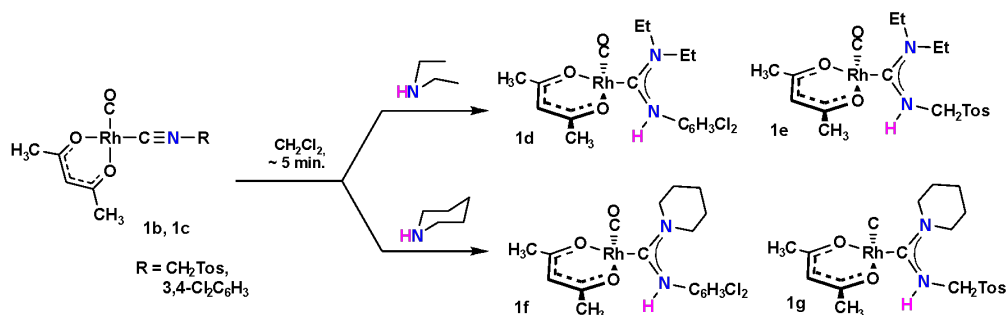


Рис. 2. Схема образования диаминокарбеновых комплексов.

При добавлении диэтиламина и пиперидина к комплексам **1b** или **1c** образуются новые ациклические диаминокарбеновые комплексы (рисунок 2). В результате получена серия новых карбонилдикетонатных комплексов родия (I), содержащих различные изоцианидные и диаминокарбеновые лиганды при атоме родия.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИХХТ СО РАН № 0287-2021-0012. 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 О. С. (ИХХТ СО РАН), г.н.с., д.х.н. Рубайло А. И. (СФУ).

Литература:

- [1] Tobisu M., Fujihara H., Koh K., Chatani N., Journal of Organic Chemistry, V.75. PP.4841–4847 (2010).
- [2] Yamada T., Sugimoto M., Macromolecules. V.43. PP.3999–4002 (2010).
- [3] Boyarskiy V.P., Bokach N.A., Luzyanin K.V., Chemical Review, V.115 (7), PP.2698–2779 (2015).
- [4] Lo L. T.-L., Ng C., Feng H., Ko C., Organometallics, V.28. PP.3597–3600 (2009).

Синтез производных 3,5-диметилпиразола и 2,1,3-бензотиадиазола для получения новых комплексов переходных металлов

Пономарёв Илья Сергеевич

Институт химии и химической технологии ФИЦ КНЦ СО РАН

Варьирование природы лиганда в координационных соединениях переходных металлов позволяет целенаправленно менять свойства этих соединений в широких пределах, добиваясь необходимого сочетания физико-химических параметров и реакционной способности. Это позволяет решать одну из главных задач современной химии – создание материалов с заданными практически полезными свойствами. Поэтому разработка методов синтеза новых лигандов является актуальной темой. Наибольший интерес представляют полидентатные лиганды в которых содержатся координационные центры различной природы, например, гетероциклы. Производные бензотиадиазола и пиразола являются одними из наиболее многообещающих соединений для синтеза подобных лигандов [1-4]. Однако, их координационная химия изучена недостаточно хорошо, отсутствуют сведения о соединениях, содержащих одновременно циклы пиразола и 2,1,3-бензотиадиазола. Целью работы является разработка эффективных методов синтеза бис(4-нитрозо-1Н-пиразол)алканов и сочлененных циклов 4-пиразол-2,1,3-бензотиадиазола, установление их строения и физико-химических свойств.

На основе анализа литературных данных были предложены наиболее перспективные и доступные подходы к синтезу исходных и целевых веществ. Для получения нитрозо-функционализированных биспиразолов был выбран метод алкилирования в суперосновной среде [5]. По данной методике было получено четыре бис(4-нитрозопиразол)алкана с метиленовым, этиленовым, пропановым и пентановым линкерами. Для синтеза пиразолов сочлененных с бензотиадиазольным фрагментом, было предложено два подхода: через медь-катализируемую реакцию C-N сочетания 4-бром-2,1,3-бензотиадиазола с 3,5-диметил-1Н-пиразолом [6] и циклизацию енаминона, содержащего бензотиадиазольный цикл с использованием хлорида меди (I) в качестве катализатора [7].

Таким образом, в ходе работы были отработаны методики синтеза новых хелатных лигандов, содержащих пиразолильные и бензотиадиазолильные заместители. Полученные соединения изучены методами ИК и ¹H ЯМР спектроскопии, масс-спектрометрии. Установлено их строение.

Благодарности соавторам: Кондрасенко А. А. (ИХХТ СО РАН), Роот Евгений Владимирович (СибГУ им. М.Ф.Решетнева). Научный руководитель: Верпекин В.В.

Литература:

- [1] Sukhikh T. S., Bashirov D. A., RSC Advances, V.6, PP.43901–43910 (2016)
- [2] Conte G., Bortoluzzi A.J., Gallardo H., Synthesis, V.23, PP.3945-3947 (2006)
- [3] Носова, Э.В., Вестник Уральского университета, С. 204 (2014).
- [4] Huang Q., Zheng Y., Synth. React. Inorg. Met.-Org. Nano-Met. Chem, V.40. PP.12-18 (2010).
- [5] Trofimenko, S., Journal of the American Chemical Society, V.92, PP.5118-5126 (1970)
- [6] Cheng-Qiang Qiu, Le-Qian Li., Polyhedron, V.199. P.A 115100 (2021).
- [7] Jang S.S., Chang J.E., Asian Journal of Organic Chemistry, V.8, PP.1668 –1673 (2019).

Восстановительное фракционирование костры льна в присутствии катализатора Ru/C на основе углеродного материала Сибунит®-4

Сычев Валентин Владимирович

ИХХТ СО РАН, ФИЦ КНЦ СО РАН

Наиболее распространенным, дешевым и как следствие перспективным с точки зрения переработки углеродсодержащим, углерод-нейтральным возобновляемым сырьем является лигноцеллюлозная (ЛЦ) биомасса, представленная отходами деревообрабатывающего и сельскохозяйственного производства (початки кукурузы, шелуха подсолнечника, рисовая шелуха и т.п.), а также высокопродуктивные травянистые растения (мискантус, просо, лен, конопля)) [1,2].

Костра льна является основным отходом (до 70 мас. %) при производстве льноволокна и представляет собой одревесневшие части стебля, преимущественно, в виде мелких соломинок. Глубокая переработка таких отходов представляет значительную проблему из-за неоднородности химической структуры одного из основных компонентов - лигнина.

В данной работе исследован процесс переработки костры льна методом восстановительного фракционирования в присутствии бифункциональных катализаторов содержащих нанодисперсный рутений, закрепленный на мезопористом графитоподобном углеродном материале (УМ) Сибунит®-4. Исследовано влияние характеристик катализатора (фракционный состав, содержание Ru, кислотность носителя), температуры, растворителя на процесс восстановительной деполимеризации лигнина, изучен состав газовой фракции, жидких продуктов.

Приготовлена серия 1 и 3% рутениевых катализаторов, на основе окисленного при различных температурах УМ Сибунит®-4. Катализаторы исследованы методами ПЭМ, РФЭС, адсорбции N₂, определены значения рН_{тнз} по методу Зёренсена – де Брюина.

Присутствие бифункционального катализатора Ru/C, в процессе восстановительного фракционирования костры льна повышает конверсию субстрата с 44 до 56 мас. % и выход монофенолов с 1,1 до 10,2 мас. % (в расчете на от массы лигнина в пробе). Использование лучшего катализатора в серии - 3RS400, содержащего 3% Ru на окисленном влажным воздухом при 400 °С углеродном носителе, позволяет получить высокую степень делигнификации (до 79,0%), выход целлюлозы (до 67,2 мас.%), и выход монофенолов (до 9,5 мас.%).

Использование Ru-содержащих катализаторов на основе УМ Сибунит®-4 для конверсии костры льна методом восстановительного фракционирования является перспективным решением проблемы утилизации отходов переработки льна. Наиболее перспективными продуктами являются индивидуальные соединения деполимеризации лигнина костры льна – монофенолы, среди которых гваяцилпропан представляет наибольший интерес.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 20-03-00636). Благодарность соавторам работы: Казаченко А. С., Мирошниковой А.В. (*ИХХТ СО РАН*)

Литература.

[1] Jakob M., Hilaire J., Nature, V. 517, PP.7533 (2015).

[2] Gallezot P., Handbook of Heterogeneous Catalysis, 2008.

Селективное гидрирования левулиновой кислоты до γ -валеролактона в водной среде в присутствии катализатора Ni-SiO₂

Троцкий Юрий Анатольевич

Институт химии и химической технологии ФИЦ КНЦ СО РАН

СибГУ им. ак. М.Ф. Решетнева

Гамма-валеролактон (ГВЛ) – это платформенная молекула, которую можно получать из лигноцеллюлозной биомассы с использованием каскада последовательных каталитических превращений. ГВЛ – бесцветная жидкость, обладающая выраженным травянистым запахом. ГВЛ является перспективным сырьем для производства жидкого биотоплива и эффективной топливной присадкой; смесь обычного бензина с ГВЛ (90:10 об.%, соответственно) оказалась более эффективной по сравнению со смесью бензин:этанол. Добавление ГВЛ не приводит к повышению октанового числа, но улучшает сгорание топлива благодаря более низкому давлению паров. Помимо этого, ГВЛ может применяться в пищевой, фармацевтической и парфюмерной промышленности.

ГВЛ можно получить путем каталитического гидрирования левулиновой кислоты (ЛК) и ее эфиров – алкиллевулинатов (АЛ) [1]. В качестве катализатора большое внимание уделяется неблагородным металлам, ввиду их доступности, по сравнению с металлами платиновой группы. Катализаторы на основе Ni демонстрируют высокую активность в процессах гидрирования ЛК до ГВЛ [2].

Цель данной работы – это разработка катализатора на основе Ni и проведение его каталитических испытаний в реакции гидрирования ЛК и АЛ до ГВЛ в диапазоне температур 120 - 200 °С.

Ni-катализаторы, синтезированные золь-гель методом, с использованием стабилизирующей добавки - SiO₂ [3], были испытаны в гидрировании ЛК до ГВЛ в автоклавных условиях в водной среде при стартовом давлении водорода 4 МПа в диапазоне температур (120-200 °С).

В результате проделанной работы было установлено, что понижение температуры реакции с 200 °С до 160 °С не оказало значительного влияния на скорость конверсии ЛК; изменения в характере кинетических кривых оказались не значительны. Однако такое снижение температуры реакции произвело положительный эффект на селективности процесса по отношению к целевому продукту. При 160 °С катализатор Ni-SiO₂ обеспечил выход ГВЛ 100 мол.% уже на 105 минуте проведения реакции. Подобное повышение выхода по мере понижения температуры реакции можно объяснить отсутствием конверсии ГВЛ до 2-метилтетрагидрофурана и 1,4-пентандиола [4], которая может происходить в более жестких условиях. Полная конверсия субстрата также была достигнута при снижении температуры вплоть до 120 °С, а выход ГВЛ составил 100 мол.%.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 20-03-00636. Благодарность соавтору работы м.н.с. ИХХТ СО РАН Сычеву Валентину Владимировичу.

Литература:

- [1] Alonso D.M. Wettstein S.G. Dumesic J.A., Green Chemistry, V.15, PP.584 (2013).
- [2] Shao Y. Wang J. Sun K. Gao G. Li C. Zhang L. Zhang S. Xu L. Hu G. Hu X., Renewable Energy, V.170, PP.1114-1128 (2021).
- [3] Smirnov A.A. Khromova S.A. Emakov D.Yu. Bulavchenko O.A. Saraev A.A. Aleksandrov P.V. Kaichev V.V. Yakovlev V.A., Applied Catalysis A:General., P.514 (2016).
- [4] Kasar G.B. Date N.S. Bhosale P.N. Rode C.V., Energy & Fuels, V.32, P.6887 (2018).

Влияние природы лигандов на редокс-свойства моноядерных карбонильных комплексов родия(I)

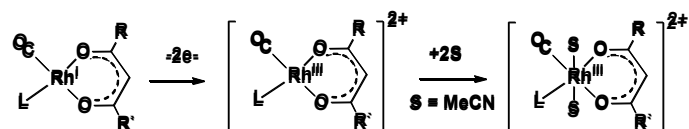
Неделина Т.С.

Институт химии и химической технологии ФИЦ КНЦ СО РАН

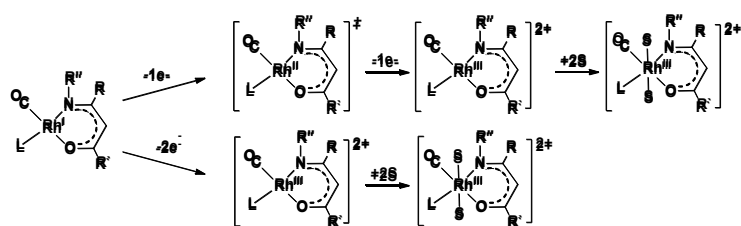
Комплексы родия являются одними из значимых соединений для органического синтеза благодаря их способности катализировать множество различных превращений. В зависимости от природы лигандного окружения атома металла они катализируют различные типы реакций, такие как полимеризация [1], активация/функционализация sp^2 и sp^3 C-H связей [2] и другие [3]. Во всех этих каталитических процессах происходит изменение степени окисления атома родия (I). Поэтому использование электрохимических методов исследования соединений родия является необходимым для понимания механизмов этих превращений.

Настоящая работа посвящена изучению редокс-свойств моноядерных дикарбонильных, карбонилфосфиновых и адамантилизоцианидных комплексов родия (I) с β -дикетонатными лигандами типа $(CO)(L)Rh(RC(O)CHC(O)R')$ [$L = CO, R = R' = Me$ (**1**) (acac); $R = Me, R' = Ph$ (**2**) (ba); $R = R' = Ph$ (**3**) (dbm); $L = PPh_3, R = R' = Me$ (**4**) (acac); $R = Me, R' = Ph$ (**5**) (ba); $R = R' = Ph$ (**6**) (dbm); $L = CNAd, R = R' = Me$ (**7**) (acac); $R = R' = Ph$ (**8**) (dbm); $R = Me, R' = Ph$ (**9**) (ba)] и новых комплексов с β -енаминными лигандами типа $(CO)(L)Rh(RC(N-R'')CHC(O)R')$ [$R = Me, R' = R'' = Ph$ (baanil); $R = R' = CH_3, R'' = C_{10}H_7$ (acacnaph); $R = CH_3, R' = Ph, R'' = C_{10}H_7$ (banaph); $L = CO$ (**10-12**); $L = PPh_3$ (**13-15**); $L = CNAd$ (**16-18**))] электрохимическими методами.

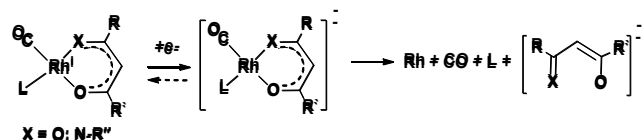
Установлено, что дикарбонильные и карбонилфосфиновые комплексы родия (I) с β -дикетонатными лигандами **1-6, 10-15** окисляются на Pt и Cu электродах в одну двухэлектронную стадию по следующей схеме:



Окисление дикарбонильных, карбонилфосфиновых и адамантилизоцианидных комплексов с β -енаминными лигандами **10-18** протекает в две одноэлектронные стадии или одну двухэлектронную стадию в зависимости от природы терминальных и хелатных лигандов и материала электрода по схеме:



Восстановление комплексов **1-18** протекает с присоединением одного электрона на первой стадии и образованием неустойчивого анион-радикала, распадающегося с образованием соответствующих анионов β -дикетона или β -енамина:



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).
- [3] Chen C. et al., *Org. Chem. Front.*, V. 3. PP. 1359-1370 (2016).

Секция «Био- и медицинские технологии»

Макрочастицы древесных углей в донных отложениях озера Шира (Хакасия) как индикатор динамики пожаров на окружающей территории в позднем голоцене

Бурдин Леонид Алексеевич

Институт биофизики ФИЦ КНЦ СО РАН

Прогноз пожарных обстановок при различных климатических сценариях представляет собой чрезвычайно актуальную задачу для Сибири, где пожары несут серьезную угрозу природным биоценозам и местному населению. Для адекватного прогноза необходима информация о частоте и интенсивности пожаров в прошлом. Кроме того, сравнительная оценка вклада антропогенных факторов в современную пожарную обстановку может быть сделана только на основе сравнения современной пожарной обстановки с реконструированной по природным архивам. Одним из наилучших архивов являются донные отложения озер [1].

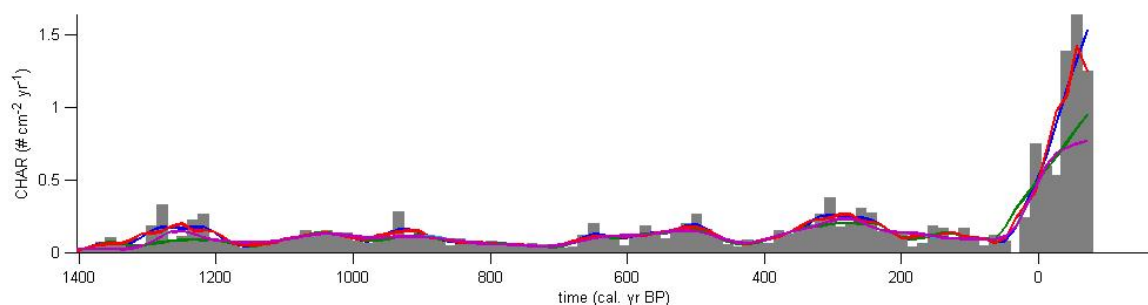


Рис. 1. Динамика потока угольных частиц размером свыше 100 мкм в донные отложения оз. Шира за прошедшие около 1400 лет (за начало отсчета принят 1950 год).

Частицы древесных углей размером свыше 100 мкм в донных отложениях являются индикаторами пожаров, происходивших на прилегающей к водоему территории в несколько километров [2]. На основе микроскопического анализа датированных слоев керн донных отложений озера Шира (юг Сибири, Хакасия) нами показано, что последние около 100 лет отличаются резким увеличением потока угольных частиц в озеро (Рис. 1). Данное увеличение согласуется с результатами по многим озерам мира и предположительно обусловлено современным усилением антропогенного воздействия, как в виде случайных и умышленных поджогов, так и в виде сжигания древесины и углей для отопления жилых домов и отдыха на прилегающей к озеру территории.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского Научного Фонда № 22-27-00398. Автор благодарен Рогозину Д.Ю. за научное руководство и помощь на всех этапах работы.

Литература:

[1] Marlon, J. R. Quaternary Research, V.96, PP.66-87 (2020).

[2] Unkelbach J., Dulamsuren C., Punsalpaamuu G. et al. Vegetation History and Archaeobotany, V.27, PP.665-677 (2018).

Получение и характеристика фракции экзосом мочи человека

Драндрова Кристина Аликовна

Сибирский федеральный университет

Экзосомы – это тип мембранных везикул (30–200 нм), секретируемых во внеклеточное пространство большинством типов клеток. Они содержат гетерогенные активные биомолекулы, такие как белки, липиды, микроРНК, рецепторы, иммунорегуляторные молекулы и нуклеиновые кислоты [1]. Анализ экзосом, циркулирующих в биологических жидкостях (кровь, моча, слюна), имеет очевидный диагностический и/или прогностический потенциал [2], в частности для определения уровня экспрессии микроРНК – перспективных маркеров диагностики онкологических заболеваний и мониторинга противоопухолевой терапии. Несмотря на это, использование экзосом в клинических условиях ограничено из-за отсутствия простых и эффективных методов их выделения. «Золотым стандартом» является метод дифференциального ультрацентрифугирования, позволяющий стабильно выделять чистые фракции экзосом, однако данный метод предполагает использование дорогостоящего оборудования. В настоящее время активно разрабатываются альтернативные методы выделения экзосом, такие как центрифугирование в градиенте плотности, осаждение полимерами или путем агглютинации с помощью лектинов [3].

Целью работы было разработать способ аффинного выделения высокоочищенной фракции экзосом из мочи человека. Способ основан на взаимодействии лектина (конканавалин А) с восстановленными концевыми остатками α -D-маннозы и α -D-глюкозы гликолипидов и гликопротеинов на поверхности экзосом. В нашей работе конканавалин А был ковалентно иммобилизован на магнитные наночастицы магнетита. Подготовленный образец мочи человека (после центрифугирования и фильтрации) инкубировали с полученными конканавалин А-активированными наночастицами, промывали и элюировали фракцию экзосом раствором мальтозы. Для визуализации и характеристики экзосом, выделенных разработанным нами способом, были использованы методы динамического светорассеяния (DLS), сканирующей атомно-силовой (AFM) и электронной (SEM) микроскопии. Экзосомальную природу выделенных везикул подтверждали по наличию маркерного рецептора тетраспорина CD63 с помощью биолюминесцентного твердофазного микроанализа. В качестве биоспецифичной молекулы использовали анти-CD63 аптамер, а в качестве репортерной молекулы – Ca^{2+} -регулируемый фотопротейн обелин, химически конъюгированный с конканавалином А. Дополнительно был проведен анализ характерной экзосомальной микроРНК21 методом ПЦР с обратной транскрипцией в реальном времени.

Показано, что разработанный способ позволяет выделять из мочи везикулы, которые имеют размер порядка 90–200 нм и экспрессируют характерный белковый маркер CD63. По сравнению с ультра-центрифугированием предложенный метод проще, экономичнее и не требует использования специального оборудования.

Авторы благодарны Тюменцевой А.В. (ФИЦ СО РАН) за синтез аминированных наночастиц магнетита; Лукьяненко А.В, Немцеву И.В и Воробьеву С.А. (ФИЦ КНЦ СО РАН) за помощь при характеристике экзосом методами микроскопии и динамического светорассеяния. Особая благодарность Красицкой В.В. и Франк Л.А (Институт биофизики СО РАН). Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда и Краевого государственного автономного учреждения «Красноярский краевой фонд поддержки научной и научно-технической деятельности», проект №22-14-20020.

Литература:

- [1] Yáñez-Mó M., et al. Journal of extracellular vesicles, V.1, P.27066 (2015).
- [2] Schou A. S., et al. Advances in Clinical Chemistry, V.99, PP.1-48 (2020).
- [3] Малек А.В., и др. Вопросы онкологии, Т.60, С.429-436 (2014).

Механизм мутации V617F в гене JAK2 через образование Хугстиновских пар оснований

Тропников Сергей Романович

Сибирский федеральный университет

Главная особенность Хугстиновских пар – водородные связи образуются по большой бороздке, пурины разворачиваются на 180°, образуя две или три водородные связи. Хугстиновские пары оснований в ДНК активно изучаются методами ЯМР и были обнаружены в канонической ДНК [1].

Идея распространения нелинейных колебаний в биополимерах была предложена А.С. Давыдовым для распространения энергии без диссипации вдоль цепей фибриллярных белков [2]. Далее идея перенеслась на ДНК [3]. Эти модели предполагают «накачку» энергии в систему, но не учитывают тепловой шум [4].

Волны в цепи ДНК могут вызывать перестройку конкретных участков цепи. Для последовательностей АТАТАТАТ и GCGCGCGC экспериментально показана аномальная подвижность и повышенная частота образования Хугстиновских пар [1]. Наиболее уязвимы участки с регулярным чередованием пуринов и пиримидинов. В этих участках колебания сильнейшие, нуклеотиды отклоняются значительно. Для теоретического описания мы предлагаем использовать модель обрушения волн. Такой процесс аккумуляции энергии тепловых колебаний может приводить к перестройке пар оснований в Хугстиновские.

Примером гена, обладающим участками с аномальной подвижностью, является JAK2, содержащий мотив GTATGTGT с чередованием пуринов и пиримидинов. Похожих участков в гене около сотни.

Мутация на участке GTATGTGT приводит к избыточной экспрессии гена JAK2 и является маркером миелопролиферативных заболеваний. Нами предложен механизм появления мутации в гене JAK2, состоящий из следующих стадий:

1. Участок GTATGTGT способствует частому рождению Хугстиновских пар.
2. Окислительное повреждение гуанина приводит к появлению 8-оксогуанина.
3. Обрушение волн провоцирует перестройку 8-оксогуанина в Хугстиновскую пару.
4. Хугстиновская пара 8-оксогуанин-цитозин стабилизируется тремя водородными связями и способствует замене G->T.

В результате объединения факта существования в ДНК короткоживущих Хугстиновских пар и идей нелинейной динамики ДНК на примере гена JAK2 был предложен механизм закрепления мутации G->T.

Литература:

[1] Evgenia N. Nikolova, Eunae Kim, et al., Nature, V.470, PP.498-502 (2011).

[2] Давыдов А.С. Биология и квантовая механика. Киев.: Изд-во Наук. думка (1979).

[3] Peyrard M., Bishop A. R. Physical review letters, V.62(23), P.2755 (1989).

[4] Frank-Kamenetskii, M. D., Prakash, S. Physics of life reviews, V.11(2), PP.153-170 (2014).

Влияние мутации K90E на условия фолдинга фотопротейина беровина

Рукоосуева Наталья Витальевна

Сибирский федеральный университет

Ca²⁺-регулируемый целентеразин-зависимый фотопротейин беровин отвечает за свечение ктенофор *Beroe abyssicola* и, на данный момент, является наиболее изученным фотопротейином гребневииков. Отличительными особенностями рекомбинантного белка являются отсутствие остатков цистеина, активация *in vitro* при pH 9.0 в присутствии 0.5 М NaCl [1] и светочувствительность [2]. Такие условия активации кардинально отличаются от внутриклеточных, что ограничивает использование фотопротейинов ктенофор в качестве репортерных молекул. Поиск мутантных вариантов беровина с измененными свойствами мог бы помочь в решении этой проблемы. В данной работе с помощью ненаправленного мутагенеза с последующим скринингом библиотеки клонов на колониях *E. coli* был получен мутант беровина с заменой лизина в 90 положении на глутамат. Исследование свойств этого белка показало, что наибольший выход активного фотопротейина наблюдается при pH 7.0 в присутствии 0.3 М NaCl (Рис. 1), что значительно ближе к физиологическим условиям, чем условия активации беровина.

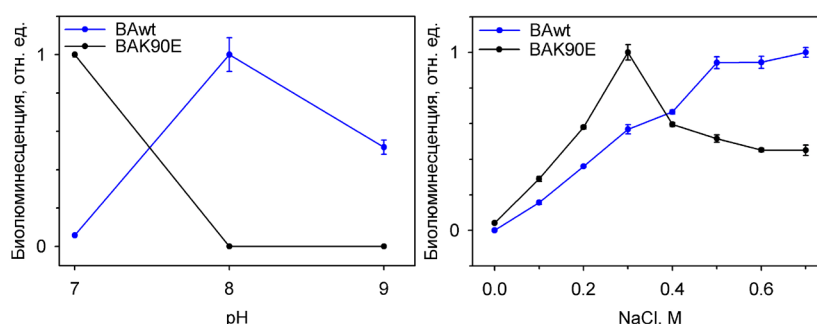


Рис. 1. Влияние pH и NaCl при pH 7.0 (K90E) или pH 9.0 (BAwt) на выход активного белка.

Выход активного белка K90E при активации в оптимальных для него условиях составляет около 10%, а удельная активность – около 1% от таковой беровина дикого типа. При этом стабильность фотопротейинового комплекса во времени, а также фото- и термостабильность мутанта выше, чем у дикого рекомбинантного белка. Согласно модели пространственной структуры беровина, аминокислотный остаток в положении 90 находится в активном центре белка и может влиять как на связывание субстрата, так и на его окисление. Поскольку максимумы спектров биоллюминесценции K90E и дикого беровина совпадают, эмиттер биоллюминесцентной реакции у них один и тот же и, по-видимому, не связан с изменением pH при активации.

Таким образом, замена аминокислотного остатка активного центра с положительным зарядом боковой цепи на другой с отрицательным зарядом может приводить к смене условий формирования фотопротейинового комплекса на близкие к внутриклеточным. Поиск мутантных вариантов, способных активироваться в физиологических условиях, будет продолжен.

Литература:

[1] Markova, S.V. et al. FEBS Journal, V.279, PP.856-870 (2012).

[2] Ward, W.W., Seliger, H.H. Photochemistry and Photobiology, V.23, PP.351-363 (1976).

Сайт-направленное конъюгирование люциферазы NanoLuc с биоспецифичными молекулами

Ефремов Максим Константинович

Сибирский федеральный университет

Искусственная целентеразин-зависимая люцифераза NanoLuc, полученная из малой субъединицы люциферазы креветок *Oplophorus gracilirostris*, является популярной репортерной молекулой благодаря уникально яркой и продолжительной биолюминесценции, небольшому размеру (19 кДа), термостабильности, устойчивости в широком диапазоне pH и стабильности при хранении и генетических модификациях [1]. NanoLuc широко используется для анализа белок-белковых (лиганд-рецепторных) взаимодействий, при исследовании фолдинга и конформационных изменений белка, для детекции антител и антигенов и т.д. [2]. Сенсоры на основе люцифераз представляют собой комплексные молекулы, включающие собственно люциферазу как сигнальный модуль и биоспецифичный модуль (полипептиды, олигонуклеотиды, гаптены и пр.), ответственный за «узнавание» мишени и связывание с ней. Биосенсоры на основе NanoLuc получают путем генетического слияния (фьюзинга) с различными полипептидами [3], поскольку при химическом конъюгировании NanoLuc теряет свою биолюминесцентную активность. Это ограничивает возможности ее использования как репортера для проведения молекулярного анализа *in vitro*.

Целью работы было исследовать возможность сайт-направленной химической модификации NanoLuc на примере гаптена (биотина) и олигонуклеотида. Для этого были получены варианты люциферазы, удлиненной с амино- либо карбоксильного конца гексапептидом LCTPSR (Pep), содержащим доступную для конъюгирования тиольную группу цистеина. Кроме этого, сайт-направленным мутагенезом был получен вариант удлиненной NanoLuc с заменой единственного нативного цистеина на серин (C164S). Химическую модификацию проводили по введенному цистеину малеимидными производными биотина или олиготимидилата (dT₃₀). В работе была исследована относительная биолюминесцентная активность гибридных производных NanoLuc (Pep-NanoLuc; NanoLuc-Pep; NanoLuc(C164S)-Pep), их стабильность при хранении и при химической модификации. В качестве субстрата во всех экспериментах использовали Ca²⁺-зависимый целентеразин-связывающий белок Renilla (CBP). Эффективность конъюгирования всех вариантов NanoLuc с биотином (NanoLuc-Bio) и олиготимидилатом (NanoLuc-dT₃₀) оценивали по выходу активных конъюгатов и модельным биолюминесцентным твердофазным анализам.

В результате исследования показано, что наиболее полно биолюминесцентная активность люциферазы сохраняется в гибриде NanoLuc(C164S)-Pep: она составляет 98% от биолюминесцентной активности исходной люциферазы NanoLuc. При химическом конъюгировании этого гибрида с олиготимидилатом потери активности не наблюдали, выход NanoLuc(C164S)-Pep-dT₃₀ составил 60%. Конъюгат обладает как биолюминесценцией NanoLuc, так и комплементарным средством к олигоаденилату, что показано твердофазным микроанализом.

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

Литература:

- [1] Hall M. P., Unch J., Binkowski B. F., et al., *Chem. Biol.*, V.7, PP.1848-1857 (2012).
- [2] England C. G., Ehlerding E. B., Cai W., *Bioconjugate Chem.*, V.27, PP.1175-1187 (2016).
- [3] Krasitskaya V. V., Bashmakova E. E., Frank L. A., *Int. J. Mol. Sci.*, V.21, P.7465 (2020).

Фекальные станолы в донных отложениях озера Шира (Хакасия) как индикатор антропогенной нагрузки в водосборном бассейне озера в позднем голоцене

Синнер Елизавета Константиновна

Институт биофизики СО РАН

Анализ биохимических маркеров фекальных поступлений является одним из новейших направлений в палео-лимнологии. К этим веществам относятся станолы (холестанол, стигмастанол, и др.), производимые кишечной микрофлорой из стеролов и являющиеся индикаторами фекальных поступлений в водоем [1]. В кишечнике человека синтезируется копростанол, по наличию которого в донных отложениях может быть реконструирована динамика населения берегов водоемов и оценена динамика фекальных загрязнений [2].

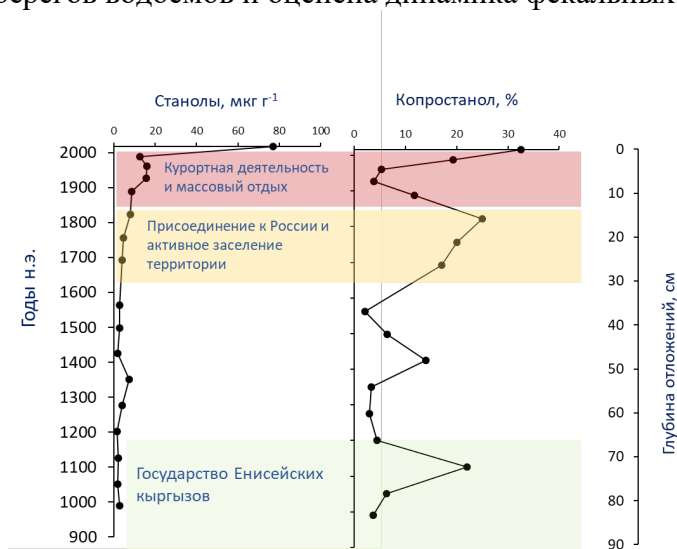


Рис. 1. Распределение фекальных станолов и доля копростанола в керне донных отложений озера Шира. Цветом выделены периоды истории Хакасии.

Методом газовой хроматографии нами впервые были оценены содержания холестерина и копростанола в датированных слоях керна донных отложений озера Шира (Хакасия). Увеличение доли копростанола свидетельствует об усилении фекальных поступлений антропогенного происхождения в озеро в современный период, а также в более ранние периоды истории Хакасии, в частности, в период существования государства Енисейских кыргызов (VIII – XIII вв н.э.).

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского Научного Фонда № 22-27-00398. Автор благодарен Рогозину Д.Ю. за научное руководство, а также Бояндину А.Н. и Бульхину А.О. за помощь в аналитической работе.

Литература:

[1] White, A.J., Stevens L.R., Lorenzi V. et al. Proc Natl Acad Sci USA, V.116, PP.5461-66 (2019).

[2] D'Anjou R.M., Bradley R.S., Balascio N.L. et al. Proc Natl Acad Sci USA, V.109, PP.20332-37 (2012).

Особенности сезонного формирования годовых колец на чешуе байкальского хариуса в условиях измененного температурного режима

Андрущенко Павел Юрьевич

Институт биофизики СО РАН

Сибирский федеральный университет

Строительство плотин ГЭС приводит к серьёзным изменениям температурного режима рек, что в свою очередь сильно влияет на разнообразие видов, численность популяций и структуру сообществ [1]. Создание Красноярской ГЭС вызвало изменение температурного режима реки Енисей в нижнем бьефе плотины, и привело к трансформации сообществ фитопланктона, зоопланктона, зообентоса, а также к увеличению численности и скорости роста аборигенного байкальского хариуса *Thymallus baicalensis* Dybowski, 1874 [2, 3].

Нами было предположено, одной из причин изменения скорости роста хариуса мог стать продолжительный период оптимальных для соматического роста температур в нижнем бьефе ГЭС, позволяющий виду расти в течение всего календарного года. Для проверки данной гипотезы была исследована особенность сезонного формирования краевых склеритов на чешуе хариуса, обитающего в нижнем бьефе плотины Красноярской ГЭС. Известно, что увеличение количества склеритов происходит в период положительного соматического роста; в период остановки роста склериты перестают откладываться по периферии чешуи и происходит формирование окончательного годового кольца.

Отлов рыб происходил в среднем течении реки Енисей на участке протяженностью около 360 км от плотины Красноярской ГЭС до устья р. Ангары. Всего было исследовано 569 рыб, имеющих от одного до четырёх законченных годовых колец на чешуе. Выявлено, что количество склеритов на чешуе увеличивалось только в период с июля по октябрь-ноябрь, а в других месяцах увеличения числа склеритов не наблюдалось. Таким образом было показано, что, несмотря на увеличения срока благоприятных для роста температур и отсутствия ледостава в среднем Енисее, хариус по-прежнему растёт в течение ограниченного промежутка времени.

При этом, за данный ограниченный период исследованные хариусы достигают больших размеров, по сравнению с рыбами, обитавшими в Енисее до строительства Красноярской ГЭС. Возможными причинами этого может быть как увеличение биомассы зообентоса Енисея после строительства плотины, так и возможность прекращения трат энергии на миграции в притоки.

Литература:

[1] Poff N. L., Zimmerman J. K. H. *Freshwater biology*, V.55, PP.194-205 (2010).

[2] Гадинов А. Н., Долгих П. М. *Вестник Красноярского государственного аграрного университета*, №.3, С.169-174 (2014).

[3] Зуев И. В. и др. *Биология внутренних вод*, Т.14, С.60-66 (2021).

Радиоизотопные методы расчета скоростей седиментации донных отложений реки Енисей

Вахрушев Вадим Игоревич

Институт биофизики СО РАН

Сибирский федеральный университет

Речные донные отложения (ДО) являются уникальным объектом, содержащим информацию о поступлении поллютантов в пресноводные экосистемы. С середины XX века р. Енисей подвержена радиационному загрязнению техногенными радионуклидами как в результате глобальных выпадений, так и деятельности Горно-химического комбината (ГХК). Накопленная в ДО р. Енисей за всё время работы ГХК значительная активность техногенных радионуклидов с разными периодами полураспада ставит задачу построения хронологии поступления радионуклидов в речную пойму [1]. В зависимости от условий исследования применяются методы датирования по природному ^{210}Pb , а также по отношениям техногенных и природных радионуклидов: $^{238}\text{Pu}/^{239+240}\text{Pu}$, $^{234}\text{U}/^{232}\text{Th}$ и других. Цель работы – оценка методов расчета скоростей седиментации на примере реки Енисей.

В данной работе на основе анализа вертикальных распределений техногенных радионуклидов ^{60}Co , ^{137}Cs , ^{152}Eu , ^{154}Eu и природного ^{210}Pb в ДО были рассчитаны скорости седиментации по отношениям активностей $^{137}\text{Cs}/^{60}\text{Co}$, $^{152}\text{Eu}/^{154}\text{Eu}$ и $^{137}\text{Cs}/^{152}\text{Eu}$, а также с помощью стандартной модели неравновесного ^{210}Pb и модели постоянного потока (CRS). Примеры расчёта приведены на рисунке 1.

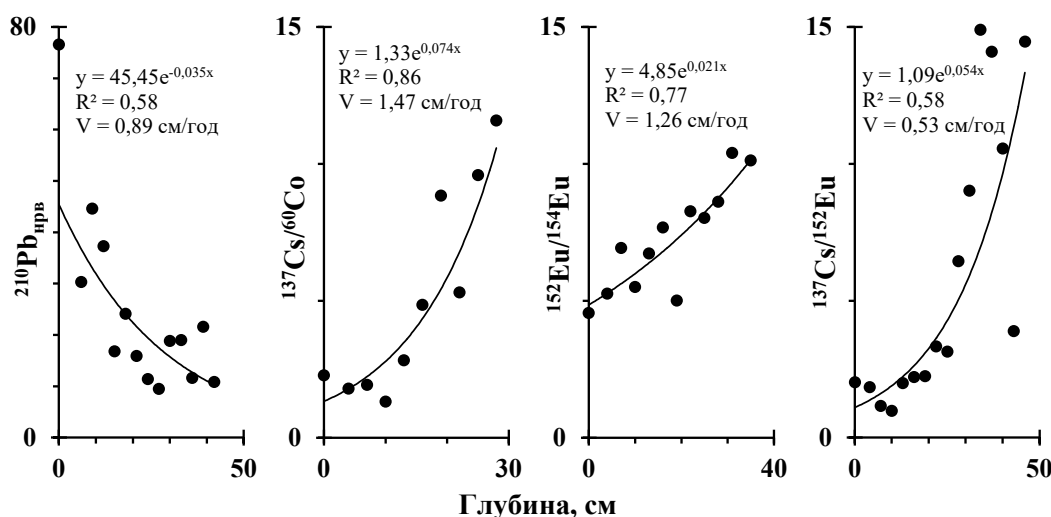


Рис. 1. Расчёт скорости седиментации по природным и техногенным радионуклидам

Рассчитанные разными методами скорости седиментации составили 0,5–1,5 см/год. Различия полученных скоростей обусловлены разной миграционной способностью радионуклидов и неоднородностью гидрологических условий на разных участках р. Енисей. В изученных нами кернах ДО поймы р. Енисей в зоне влияния ГХК обнаружены слои с относительно высоким содержанием техногенных радионуклидов и, используя расчёты скоростей седиментации, проведена датировка этих слоёв. Как правило, слои максимальной активности радионуклидов совпадают с годами экстремальных паводков на р. Енисей.

Работа выполнена за счет средств гранта Российского научного фонда №22-27-20001, Красноярского краевого научного фонда.

Литература:

[1] Болсуновский А.Я., Дементьев Д.В., Вахрушев В.И. Доклады Академии Наук, Т.498, С.189-194 (2021).

Низкоинтенсивное воздействие Th-232 на люминесцентные бактерии. Роль активных форм кислорода

Колесник Ольга Владиславовна

Институт биофизики СО РАН

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

В ходе жизнедеятельности бактерий продуцируются активные формы кислорода (АФК). Различные воздействия на бактериальную культуру, включая радиоактивное ионизирующее излучение, способны изменять производство АФК. Ранее было продемонстрировано, что АФК участвуют в активации физиологических функций люминесцентных бактерий под действием бета-излучающего радионуклида трития [1]. Особый интерес представляет вопрос: отвечают ли АФК за биоэффекты других радионуклидов с другими характеристиками радиоактивного распада?

Торий – один из самых распространённых радиоактивных элементов в природных экосистемах. Наряду с ураном, торий считается наиболее важным источником ядерной энергии, и в настоящее время ему уделяется внимание ввиду возможности его применения в качестве более чистого, безопасного и более распространённого ядерного топлива. Несмотря на распространённость данного элемента, в настоящее время влияние радиоактивного тория на живые организмы изучено недостаточно.

Целью работы было изучение низкоинтенсивного воздействия тория-232 на люминесценцию морских бактерий *Photobacterium phosphoreum* и выявление роли АФК в протекающих процессах.

В качестве объекта исследования были использованы интактные бактерии *Photobacterium phosphoreum*. Источником облучения служил азотнокислый Th-232 ($\text{Th}(\text{NO}_3)_4 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$); доза облучения бактериальной культуры не превышала 0,1 Гр, что не превышает условную границу низких доз. Измерения интенсивности биолюминесценции и хемилюминесценции проводили с помощью планшетного люминометра Luminoskan Ascent (Thermal Fisher Corp.).

Было обнаружено, что Th-232 умеренно активизирует клеточные процессы при низкодозовом воздействии (<0,1 Гр). Была выявлена умеренная отрицательная корреляция между интенсивностью биолюминесценции бактерий и содержанием АФК ($r = -0,60$, $p < 0,05$) в диапазоне низких концентраций тория (10^{-11} – 10^{-6} М). Можно сделать вывод, что активация бактериальной биолюминесценции связана с интенсификацией окислительно-восстановительных процессов в водных средах и потреблением бактериями АФК.

Полученные результаты способствуют пониманию молекулярного механизма «гормезисных» ответов клеток на низкоинтенсивные радиоактивные воздействия. В данном исследовании Th-232 использовался как представитель группы альфа-излучающих радионуклидов. Результаты выявляют особенности механизма воздействия низкоинтенсивного радиоактивного облучения на живые организмы и способствуют дальнейшей адаптации биолюминесцентных методов к целям радиоэкологического мониторинга.

Автор выражает благодарность за руководство и участие в работе Кудряшевой Н.С., Рожко Т.В., Сачковой А.С., Лапиной М.А. и Соловьёву В.С.

Литература:

[1] Rozhko T.V., Kolesnik, O.V., Badun, et al., Int. J. Mol. Sci., V.21, P.6783 (2020).

Закономерности влияния коммерческих препаратов пестицидов на тестовые системы *in vitro* и *in vivo*

Калябина Валерия Павловна

Сибирский федеральный университет

Пестициды в сельском хозяйстве представлены в большом разнообразии препаративных форм и охватывают широкий спектр механизмов действия. Их опасность для нецелевых видов организмов отмечается во множестве исследований. Одна из причин – пестицидные препараты и их остатки способны оказывать эффекты непосредственно на молекулярном уровне, изменяя скорости ферментативных реакций и вызывая каскад нежелательных последствий [1, 2]. Используя данное свойство, ферменты успешно применяют при разработке тестов для обнаружения пестицидного загрязнения [3].

Целью исследования являлась сравнительная оценка влияния пестицидных препаратов на тестовые системы *in vitro* и *in vivo*. В качестве тест-объектов были использованы: моноферментные реакции, такие как лактатдегидрогеназа (ЛДГ), алкогольдегидрогеназа (АДГ), NAD(P)H:FMN-оксидоредуктаза (Р), бутирилхолинэстераза (БуХЭ), щелочная фосфатаза (ЩФ), трипсин, биферментная система светящихся бактерий НАДН: ФМН-оксидоредуктаза и люцифераза (Р+Л) и триферментная система алкогольдегидрогеназа + NADH:FMN-оксидоредуктаза + люцифераза (АДГ+Р+Л), а также культура клеток биоллюминесцентных бактерий *P. phosphoreum 1889*.

В работе проанализировано влияние на активность ферментов 10-ти коммерческих препаратов пестицидов, принадлежащих к разным химическим классам (пиретроиды, неоникотиноиды и фосфорорганические соединения), а также различающихся целевым назначением (гербициды и инсектициды). Наблюдались значительные различия в степени воздействия препаратов пестицидов на тест-системы. Так, например, IC₅₀ для коммерческих препаратов «Дельцид» (д.в. дельтаметрин) и «Муравьед» (д.в. диазинон) составили: 16,7 и 0,2 мг/л – для моноферментной системы на основе АДГ; 39,5 и 0,009 мг/л – для биферментной системы Р+Л; 12,7 и 0,005 мг/л – для триферментной системы АДГ+Р+Л соответственно. Из полученных результатов видно, что при переходе от простых тест-систем (моноферментные реакции) к сопряженным реакциям прослеживается увеличение чувствительности к действующим веществам пестицидов.

Установлено, что эффект пестицидных препаратов на биоллюминесцентную тест-систему Р+Л является более выраженным по сравнению с действием на светящиеся бактерии. Так, ингибирование свечения бактерий на 50% наблюдалось при внесении в реакционную смесь 400 мг/л глифосата в составе коммерческого препарата «Торнадо» и 2000 мг/л имидаклоприда в составе препарата «Биотлин», при этом для тест-системы Р+Л параметры IC₅₀ для данных препаратов составили 1,8 и 0,003 мг/л соответственно. Таким образом, тест-системы *in vitro* (ферментативные реакции) существенно более чувствительны к исследованным препаратам пестицидов по сравнению с тестом *in vivo* (светящиеся бактерии). Способность ферментов изменять активность при воздействии пестицидов позволяет говорить о перспективности применения ферментативных тест-систем в экотоксикологическом мониторинге.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ, Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда науки в рамках проекта №. 20-44-242001. Благодарность соавторам работы Есимбековой Е.Н., Копыловой К.В., Лоншаковой-Мукиной В.И., Торгашиной И.Г., Анташкевич А.А.

Литература:

- [1] Kalyabina V. P., Esimbekova E. N. et al. Toxicol. Rep., V.8. PP.1179-1192 (2021).
- [2] Hernández A., F, Parrón T., Tsatsakis A. M. et al. Toxicology, V.307. PP.136-145 (2013).
- [3] Есимбекова Е. Н., Торгашина И. Г., Калябина В. П., Кратасюк В. А. Сиб. экол. журн., Т.3, С.364-382 (2021).

Потенциал применения лазерной резки для направленной модификации поверхности ПГА-плёнок

Дудаев Алексей Евгеньевич

Институт биофизики СО РАН

Превалирующая доля пластмасс, применяемых в различных сферах жизнедеятельности, производится из нефтепродуктов путём химического синтеза. Такие пластики сочетают в себе хорошие производственные характеристики и относительно низкую себестоимость, однако сильно уступают в части переработки, утилизации и экологической нагрузки. Альтернативой таким полимерам являются биопластики, которые способны к естественной деградации.

К таким перспективным «зелёным» биополимерам относится класс полигидроксиалканоатов – полиэфиров микробиологического происхождения. Наряду с их полной биодegradируемостью, они устойчивы к ультрафиолетовому излучению и гидролизу в жидких нейтральных средах. Это позволяет получать из них спектр приложений для различных применений от коммунального и сельского хозяйства до высокотехнологичной биомедицины.

ПГА растворимы в неполярных растворителях, благодаря чему методом кастинга растворов возможно получение тонких плёнок, которые находят широкое применение от биопокрытий и биоупаковок до сложных систем заживления ран. В зависимости от предназначения, выбор материала основывается на комплексе его базовых свойств, которые в совокупности придают изделию из него требуемую функциональность. Методом биологического синтеза возможно получение ПГА различного мономерного состава с вариативным включением отличных от 3-гидроксипутирата мономеров. Такие сополимеры повышают возможности применения ПГА, так как расширяют границы их базовых свойств – степени кристалличности, молекулярно-массового распределения, температур плавления и деградации, а также упруго-прочностных характеристик.

Важным параметром пленочных изделий является наноструктура поверхности, определяющая гидрофобно/гидрофильный баланс, энергетические параметры и силы адгезии/когезии. Возможность направленного влияния на эти структурно-функциональные особенности позволяет комбинировать преимущества базовых свойств с требуемой поверхностной реакцией для каждого конкретного применения. Перспективной технологией для этих целей в последние годы стала лазерная резка, позволяющая формировать на поверхности плёнок в зависимости от выбранного режима заданный нанопрофиль в виде желобков, канавок, ямок и других геометрических структур, обеспечивающий функциональность поверхности.

Полимерные пленки гомополимера 3ГБ и 3х сополимеров ПГА с вариативным включением мономеров 4ГБ, 3ГВ, 3ГГ облучали углекислотным лазером Explorer II LaserPro в режиме непрерывной и квази-импульсной резки. В результате модификации лазером на поверхности плёнок при непрерывном облучении формировались регулярные углубления в виде желобков, чередующиеся с необработанными участками, при квази-импульсной обработке – сеть кратеров, расположенных на одинаковом расстоянии, площадь модификаций составила 11,6-13% и 6,3-10,5%, соответственно, в зависимости от термических характеристик образцов. При постоянном облучении у большинства образцов повышалась гидрофобность и снижались значения шероховатости, квази-импульсный режим сопровождался гидрофилизацией и повышением шероховатости большинства образцов.

Работа выполнена при поддержке Государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № ФСРЗ-2020-0006.

Литература:

[1] Volova T. G., Kiselev E. G., Nemtsev I. V., et al., International Journal of Biological Macromolecules, V.182, PP.98-114 (2021)

Мутантные формы люциферазы из копепод *Metridia longa*. Получение и характеристика

Коротов Игорь Александрович

Институт биофизики СО РАН

Репортеры на основе различных биолюминесцентных систем активно применяются в различных биомедицинских исследованиях как обладающие высокой чувствительностью, сопоставимой с радиоизотопными метками, широким динамическим диапазоном, нетоксичностью для живых организмов. Копеподные люциферазы обладают рядом полезных для использования в качестве репортеров свойств, таких как высокая активность, термостабильность и малые размеры; катализируют простую ферментативную реакцию окисления субстрата с излучением света, не требующую кофакторов. Целентеразин-зависимая люцифераза из копепод *Metridia longa* является самой маленькой известной люциферазой на сегодняшний момент. Ее молекулярный вес составляет всего 16.5 кДа, что позволяет снизить метаболическую нагрузку при использовании данного фермента в качестве репортера *in vivo* и повышает эффективность в BRET-системах. Люцифераза *Metridia* также обладает высокой активностью и термостабильностью. Имеет голубой спектр эмиссии с пиком ~485 нм. Данная люцифераза активно применяется в качестве биолюминесцентного репортера, однако, ввиду низкого температурного оптимума биолюминесцентной реакции, затруднено их применение в клетках млекопитающих [1].

Настоящее исследование продолжает работу по улучшению репортерных свойств люциферазы *Metridia* методами молекулярной эволюции. Ранее в лаборатории фотобиологии Института биофизики ФИЦ КНЦ СО РАН был получен ряд мутаций, улучшающих биолюминесцентные свойства одной из изоформ люциферазы *Metridia*, MLuc7, повышающих активность фермента и сдвигающие его температурный оптимум в сторону более высоких температур. Лучшие варианты мутаций были собраны вместе в единой конструкции. В данной работе был проведен второй раунд случайного мутагенеза методом “ошибочной” ПЦР (error prone PCR) на гибридной матрице для дальнейшего улучшения репортерных свойств и синергетического эффекта введенных мутаций. Мутантные последовательности были экспрессированы в клетках *E. coli* для выделения мутантных белков и их характеристики. В настоящей работе представлены результаты исследования свойств 3-х наиболее перспективных мутантов, ML7m52, ML7m66 и ML7m100. Оценена их удельная активность, температурный оптимум, зависимость биолюминесцентной активности от концентрации NaCl и значения pH, а также определен максимум спектра излучения. Значения данных параметров сравнивались с исходной люциферазой MLuc7 и исходным для второго раунда мутагенеза вариантом ML7m73. Показано, что все исследуемые мутанты обладают большей удельной активностью по сравнению с исходными вариантами с сохранением остальных исследуемых характеристик. Один из вариантов ML7m52 обнаружил температурный оптимум биолюминесценции в диапазоне 37-42°C, что делает последнего крайне перспективным для использования в клетках млекопитающих *in vivo*. Максимум спектра биолюминесценции остается неизменным для всех исследуемых вариантов и составил ~485-490 нм. В рамках дальнейшей работы планируется характеристика мутантных люцифераз как репортеров в эукариотических клетках.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 20-44-242003.

Литература:

[1]. Markova S.V., Larionova M.D., Vysotski E.S., Photochem Photobiol, V.95(3), PP.705-721 (2019)

Критерии наличия рефлексии у простой нейронной сети в рефлексивной игре

Маркова Галия Муратовна

Сибирский федеральный университет

Институт биофизики СО РАН

Рефлексия в широком смысле – внутреннее отображение внешнего мира [1]. Для ряда задач наличие рефлексии обеспечивает эффективное решение, однако испытуемый может справляться с ними, не формируя внутренние отображения. В работе предложены критерии, по которым поведение простых искусственных нейронных сетей (ИНС) в ходе рефлексивной игры «Чет-нечет» может оцениваться на наличие рефлексии. Проверена применимость трех предложенных критериев наличия рефлексии: целевого (ИНС побеждает), поведенческого (ИНС использует более одного паттерна) и нейронального (траектория ИНС в пространстве нейронной активности не сходится к одной точке).

Использовались 10-нейронные рекуррентные ИНС. ИНС обучались игре в партиях с другими сетями в течение 1000 ходов, по алгоритму обратного распространения ошибки (глубина 5 ходов). Далее ИНС играли партию в 1000 ходов против двух «электронных гадалок», или машин Шеннона [2]: первой (МШ1), обученной в течение 2000 ходов играть против нейронной сети, и второй (МШ2), обученной играть против генератора случайных чисел. ИНС обучались и играли за нечет, структура ИНС и МШ после обучения фиксирована. Для оценки разнообразия реакций ИНС рассматривались короткие игровые паттерны: ход МШ (0/1), ход ИНС (0/1), следующий ход ИНС (0/1) и результат этого хода: победа(W)/поражение(L). Всего возможно 16 паттернов: 000W, 000L, 001W, 001L и т.д.

По числу побед против МШ1 лучше играли ИНС, которые использовали 1 паттерн из 16 в течение всей партии. Структура МШ1 подразумевала наличие универсальной победной стратегии, которой и пользовались ИНС-победители. Траектория нейронной активности таких ИНС сходится к точке (см. Рис.1А), что соответствует выбору одного и того же паттерна. Против МШ2 лучше играли ИНС, использовавшие 5-10 паттернов. Универсальная стратегия против МШ2 отсутствовала. Траектория нейронной активности ИНС-победителей имеет форму сложного цикла, что соответствует переходам между паттернами (см. Рис. 1Б). Оценка по критериям позволяет утверждать о наличии рефлексии, если выполняются все три. Поведенческий критерий при этом связан с нейрональным, поскольку изменения нейронной активности определяют тип поведенческой реакции ИНС. Целевой критерий выполняется, если ИНС выработала адекватную реакцию для текущей задачи.

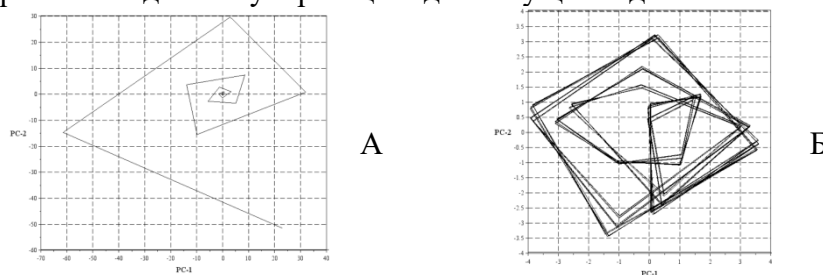


Рис. 1. Примеры траекторий в пространстве нейронной активности, обработанные методом главных компонент: А – ИНС, использовавшая 1 паттерн, Б – ИНС, использовавшая 5-10 паттернов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ, Правительства Красноярского края и Красноярского краевого фонда науки в рамках научного проекта № 20-41-240003.

Благодарности: соавтору и научному руководителю д.ф.-м.н. Барцеву С.И., разработчику программы для визуализации нейронной активности Батуриной П.М.

Литература:

[1] Лефевр В.А. Рефлексия. М.: Когито-центр. 496 С. (2003).

[2] Shannon C. E. A mind-reading machine, Bell Laboratories memorandum (1953).

Стабильные многокомпонентные иммобилизованные препараты на основе бутирилхолинэстеразы для применения в ингибиторном анализе

Лоншакова-Мукина Виктория Ивановна

Институт биофизики СО РАН

Бутирилхолинэстераза (ВChE) – гидролитический фермент, активно применяется в ингибиторном анализе и является основой аналитических систем для контроля остаточных количеств фосфорорганических пестицидов в воде, почве и продуктах питания [1]. Тем не менее остаётся нерешённой проблема недостаточной стабильности ВChE при её использовании и хранении. Одним из основных способов получения стабильных ферментных препаратов ВChE является её иммобилизация в различные носители. Крахмал и желатин, полимеры природного происхождения, образующие вязкие растворы и способные к формированию геля, используются как для создания вязкого микроокружения ферментов, так и для их иммобилизации. Целью работы является получение стабильных ферментных препаратов для ингибиторного анализа путем совместной иммобилизации компонентов аналитической системы на основе ВChE в гели природных полимеров.

Активность ВChE, выделенной из лошадиной сыворотки, определяли по методу Элмана [2]. Исследована температурная инактивация ВChE в температурном диапазоне 50-64°C. Установлено, что кинетика термоинактивации ВChE в 3% крахмальном и 1,4 % желатиновом гелях имеет одинаковый характер на всем диапазоне температур. Наблюдается кинетика термоинактивации второго порядка, включающая два различных механизма инактивации ВChE, последовательно сменяющих друг друга и протекающих с разными скоростями (быстрой и медленной стадий). Быстрая стадия соответствует процессу диссоциации тетрамерного фермента на мономеры, а медленная стадия – процессу денатурации образовавшихся мономеров.

Для определения влияния гелеобразной среды реакции на механизмы ингибирования ВChE было проведено исследование зависимости скорости ферментативной реакции от концентрации субстрата в присутствии обратимого ингибитора – неостигмина в буферном растворе, желатиновом и крахмальном гелях. Показано, что механизм ингибирования ВChE в присутствии полимерных гелей не изменяется. В исследуемых условиях наблюдается смешанный тип ингибирования – конкурентно-неконкурентное вне зависимости от среды реакционной смеси.

Были получены препараты иммобилизованной в гели ВChE, представляющие собой дозированный и высушенный диск, предназначенный на одно измерение. Для упрощения процедуры анализа ингибирующих веществ в состав препарата вносили 5,5'-дитио-бис(2-нитробензойную кислоту) (DTNB). Установлено, что иммобилизация ВChE совместно с DTNB в крахмальном или желатиновом геле обеспечивает выход активности фермента не менее 62% по сравнению с растворимой ВChE. Так же показано, что препарат, на основе ВChE, иммобилизованной совместно с DTNB в крахмальном геле, сохраняет активность более 300 суток и обладает высокой чувствительностью к действию веществ антихолинэстеразного действия (для малатиона значение IC_{50} составило 8 мкг/л).

Таким образом, разработан стабильный многокомпонентный препарат на основе ВChE, иммобилизованный совместно с DTNB в крахмальном геле, отличающийся длительным сроком хранения (более года), простотой в использовании и чувствительный к действию ингибирующих веществ.

Литература:

- [1] Yu-Ling Xu, Feng-Ye Li, Ferdinand Ndikuryayo, et al., *Sensors*, V.18, P.4281 (2018).
- [2] Ellman G.L., K. D. Courtney, V. Andres. *Biochem. Pharmacol.*, V.7, PP.88-95 (1961).

Обнаружение гиспидина в питательной среде при погруженном культивировании базидиомицета *Inonotus obliquus* (Чага)

Посохина Екатерина Дмитриевна
Институт биофизики СО РАН

Высшие грибы являются уникальными природными источниками широкого спектра веществ, востребованных в медицине, биологии, фармакологии, пищевой и химической промышленности. Биомассу базидиомицетов (мицелий и плодовые тела) используют для получения волокнистых полимерных материалов (полисахариды, хитин) [1], соединений с фармакологической активностью [2], ферментов и ферментных систем [3], и т.д. Одним из продуцируемых базидиомицетами биоактивных компонентов является гиспидин (ГИ), который обладает рядом ценных фармакологических эффектов – антиоксидантным, противовоспалительным и противоопухолевым [4-6]. Поскольку ГИ является метаболитом высших грибов, было сделано предположение о возможности его выделения в питательную среду при культивировании мицелия базидиомицетов.

Цель данной работы состояла в оценке наличия и динамики накопления ГИ в питательной среде при культивировании базидиомицета *Inonotus obliquus* (медицинский гриб Чага) в погруженных условиях.

В исследованиях использовали культуру гриба *I. obliquus* IBSO 2430 из Коллекции микроорганизмов (CCIBSO 836) ИБФ ФИЦ КНЦ СО РАН (Красноярск). Выращивание мицелия проводили в жидкой картофельно-декстрозной среде при 25°C и постоянном перемешивании. Наличие ГИ в питательной среде оценивали оригинальным способом [7] с использованием люминесцентной системы из мицелия гриба *Armillaria borealis* [8]. Для этого в ходе культивирования гриба ежедневно отбирали пробы питательной среды. Наличие ГИ в пробах среды оценивали после их добавления к люминесцентной системе, активированной НАДФН. ГИ является прекурсором субстрата люминесцентной реакции высших грибов, который сначала преобразуется НАД(Ф)Н-зависимой гидроксилазой в 3-гидроксигиспидин (люциферин) и затем окисляется люциферазой с излучением света [9]. Амплитуду и динамику светового сигнала регистрировали на люминометре Glomax® 20/20. Количество ГИ оценивали по максимальному уровню световой эмиссии.

В исследованиях установлено: культивирование гриба *I. obliquus* сопровождается ростом мицелия в виде шарообразных пеллет с большим количеством поверхностных выростов (гиф); в процессе выращивания мицелий продуцирует и выделяет ГИ в питательную среду; наличие ГИ в питательной среде обнаруживается на 7-е сутки культивирования; уровень ГИ в питательной среде возрастает и достигает максимальных значений на 11-13-е сутки выращивания гриба; перенос выращенных пеллет мицелия в свежий объем питательной среды и продолжение их культивирования сопровождается аналогичной динамикой накопления ГИ в среде. Полученные данные создают предпосылки использования базидиомицета *I. obliquus* для биотехнологического производства ГИ.

Автор выражает благодарность соавторам работы А.П. Пузырю и В.С. Бондарю.

Литература:

- [1] Haneef M., et al., *Sci. Rep.*, V.7, 41292, PP.1-11 (2017).
- [2] Lin W.C., et al., *RSC Adv.*, V.7, PP.7780-7788 (2017).
- [3] Martinez A.T., et al., *Biotechnol. Adv.*, V.35, PP.815-831 (2017).
- [4] Anouar H., et al., *Molecules*, V.19, PP.3489-3507 (2014).
- [5] Shao H.J., et al., *J. Sci. Food Agric.*, V.95, PP.2482-2486 (2015).
- [6] Lim J.H., et al., *Anticancer Res.*, V.34, PP.4087-4093 (2014).
- [7] Puzyr A.P., et al., *Dokl. Biochem. Biophys.*, V.480, PP.173-176 (2018).
- [8] Puzyr A.P., et al., *Cur. Res. Env. Appl. Mycol.*, V.7, PP.227-235 (2017).
- [9] Purtov K.V., et al., *Ang. Chem. Int. Ed.*, V.54, PP.8124-8128 (2015).

Механизмы влияния вязких сред на элементарные стадии биolumинесцентной реакции бактерий

Лисица Альберт Евгеньевич

Сибирский федеральный университет

Во внутриклеточных условиях биохимические процессы протекают в гетерогенном (как по составу, так и по пространственному распределению) микроокружении. Эта среда оказывает существенное влияние на скорость и равновесие ферментативных реакций. Чтобы выявить механизмы, лежащие в основе этих эффектов, биохимическую кинетику изучают в модельных средах, имитирующих оду или несколько характеристик внутриклеточной среды. Данный подход призван заполнить пробел между традиционными исследованиями *in vitro* в буферных растворах и попытками анализа реакций в интактных клетках. Целью работы было проанализировать влияние вязкости среды на отдельные стадии биolumинесцентной реакции бактерий, представляющей собой сложный ферментативный процесс. Была изучена нестационарная кинетика реакции, катализируемой бактериальной люциферазой, в буферных растворах с этиленгликолем, глицерином, сахарозой, сорбитолом, глюкозой и декстраном методом остановленного потока. Кинетические кривые были проанализированы с помощью математической модели, разработанной в соответствии с многостадийным механизмом реакции. Для выявления структурных аспектов воздействия соразтворителей на люциферазу применяли методы молекулярной динамики.

Для всех изученных соразтворителей было получено диффузионно-зависимое замедление связывания флавина, при этом отсутствовало влияние на скорость связывания кислорода. В случае глицерина и этиленгликоля замедление связывания флавина оказалось усугублено дополнительными факторами. Кроме того, обнаружено, что все соразтворители, кроме этиленгликоля снижают скорость автоокисления восстановленного флавиномононуклеотида и темнового распада пероксифлавинового интермедиата реакции. Также было обнаружено, что сахароза, сорбитол, глюкоза и декстран способны и увеличивать, а этиленгликоль – уменьшать скорость образования электронно-возбужденного интермедиата. Методами молекулярной динамики получено, что этиленгликоль оказывает специфическое воздействие на конформацию бактериальной люциферазы, что может быть причиной наблюдаемого снижения каталитической константы фермента. Также показано, что молекулы глицерина и этиленгликоля наиболее глубоко проникают в полость активного центра люциферазы, что может объяснять их влияние на связывания флавина. В то же время, в присутствии сахарозы обнаружены конформационные изменения функционально важного аминокислотного остатка люциферазы αGlu175 что может объяснять увеличение каталитической константы [1].

Таким образом, получено, что в присутствии всех изученных соразтворителей наблюдается замедление связывания субстратов реакции. Однако сорбитол, глюкоза и сахароза способствуют замедлению автоокисления восстановленного флавиномононуклеотида, темнового распада пероксифлавина и увеличению каталитической константы люциферазы, что в итоге приводит к сохранению количества испускаемых квантов света за один оборот фермента.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (проект No. FSRZ-2020-0006). Автор выражает благодарность Суковатому Л.А. за проведение молекулярно-динамических расчетов.

Литература:

[1] Lisitsa A. E. et al., International journal of molecular sciences, V.22, P.8827 (2021).

Исследование эффективности гербицидных препаратов пролонгированного действия на основе поли-3-гидроксибутирата

Колесникова Ольга Дмитриевна

Сибирский федеральный университет

Один из способов повышения эффективности использования пестицидов это их инкапсулирование в матрицы из природных полимеров. Применение биоматериалов в качестве систем доставки имеет множество преимуществ: биосовместимость, нетоксичность, эффективная инкапсуляция, пролонгированное высвобождение. Особое место среди биоразлагаемых полимеров занимают полигидроксиалканоаты (ПГА). Свойства ПГА, такие как медленная биоразлагаемость и возможность получения из них полимерных изделий в различных физических состояниях позволят использовать их для построения долгосрочных форм препаратов на их основе [1].

Целью работы является изучение эффективности свободных и депонированных в смесовую основу из поли-3-гидроксибутирата [П(ЗГБ)] и опилок гербицидных препаратов в посевах яровой пшеницы «Новосибирская 15». Установлена высокая гербицидная активность депонированных метрибузина и трибенурон-метила, сопоставимая с действием свободных форм гербицидов, а в ряде случаев – превосходящих их (рис. 1). Биологическая эффективность депонированных гербицидов превосходила показатели в положительном контроле и составила 82,6 % в группе растений с применением метрибузина и несколько ниже (63,4%) в случае применения депонированного трибенурон-метила.

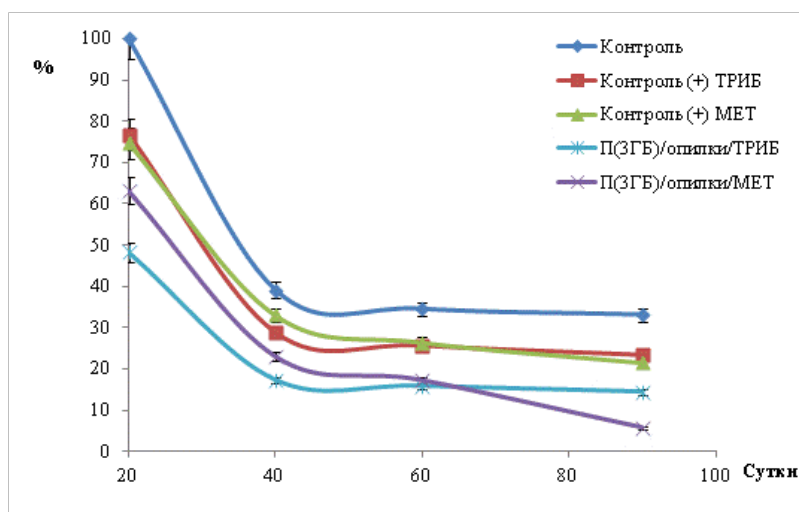


Рис. 1. Динамика гибели сорных растений в посевах яровой пшеницы «Новосибирская 15».

Работа выполнена при финансовой поддержке Проекта «Агропрепараты нового поколения: стратегии конструирования и реализации» (Соглашение № 074-02-2018-328) в соответствии с Постановлением Правительства Российской Федерации от 9 апреля 2010 г. № 220 «О мерах по привлечению ведущих ученых в вузы России».

Литература:

[1] Волова Т.Г., Жила, Н.О., Прудникова С.В., и др. *Фундаментальные основы конструирования и применения сельскохозяйственных препаратов нового поколения*, Красноярск: 214 С. (2016).

Состав и содержание жирных кислот и аминокислот в личинках мух *Lucilia sericata* (сем. Calliphoridae), выращенных на различных кормах

Стоянов Кирилл Николаевич

Сибирский федеральный университет

Институт биофизики СО РАН

Аквакультура – быстро развивающаяся отрасль сельского хозяйства, за последние 50 лет доля аквакультуры на мировом рынке морепродуктов выросла с 4% до 46% [1]. Однако сейчас она столкнулась с недостатком кормов, основу которых составляют уловы дикой рыбы. Для дальнейшего устойчивого развития аквакультуры необходимо разработать альтернативные корма, производимые не из дикой рыбы. Насекомые считаются подходящим источником белка для рыбы, но их состав и содержание жирных кислот (ЖК) часто не отвечает требованиям аквакультуры [2]. В рыбьем жире преобладают ПНЖК семейства омега-3, а в жире наземных насекомых – омега-6. Актуальными стали исследования по модификации липидного состава личинок насекомых с целью увеличения содержания ПНЖК омега-3 [3].

Целью настоящей работы было определение состава и содержания ЖК в личинках мух *Lucilia sericata*, выращенных на стандартном корме и корме с добавлением масла рыжика посевного *Camelina sativa*, богатого альфа-линоленовой кислотой (АЛК, 18:3n-3), а также анализ аминокислотного состава (АК) личинок этого вида мух.

Жирнокислотный анализ проводили на газовом хроматографе, оснащенный масс-спектрометрическим детектором. Анализ аминокислотного состава выполняли на жидкостном хроматографе. Состав АК исследуемых личинок мух, подобно другим насекомым (Diptera), был близок к составу АК рыбной муки. Состав и содержание ЖК в личинках мух, выращенных на стандартном корме, характеризовались низким соотношением омега-3/омега-6 ПНЖК и доминированием 18:1n-9 и 18:2n-6 ЖК, которые вместе составляли 40-60% от общего количества ЖК. Добавление рыжикового масла изменило соотношение омега-3/омега-6 ПНЖК с 0.11 до 0.46, в основном за счет увеличения содержания АЛК. Таким образом, содержание и состав ЖК личинок *L. sericata* может быть значительно изменен рационом питания.

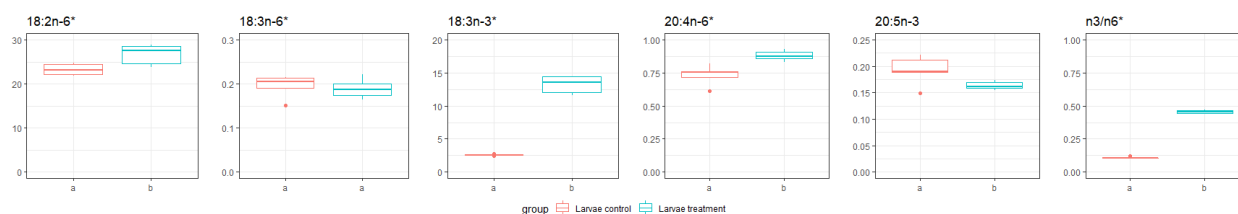


Рис. 1. Содержание некоторых ЖК в личинках мух контрольной (*Larvae control*) и опытной групп (*Larvae treatment*).

Работа поддержана Государственным заданием по программе фундаментальных исследований РФ, тема №51.1.1; Государственным заданием Минобрнауки РФ Сибирскому федеральному университету FSRZ-2020-0006; «Красноярским краевым фондом поддержки научной и научно-технической деятельности» в рамках проекта «Разработка импортозамещающих технологий для аквакультуры лососевых рыб в условиях Красноярского края». Благодарность соавторам работы О.Н. Махутовой, К.Г. Малышевскому, Е.В. Борисовой, Н.Н. Сущик, А.А. Колмаковой, В.Н. Моргуну, М.И. Гладышеву.

Литература:

- [1] FAO, 2020. The State of World Fisheries and Aquaculture. FAO, Rome. P.206 (2020).
- [2] Barroso, F.G., de Haro, C., Sánchez-Muros, M.-J., et al., Aquaculture, V.422-423, PP.193-201 (2014).
- [3] Oonincx, D.G.A.B., Laurent, S., Veenenbos, M.E., et al., Insect Science, V.27, PP.500-509 (2020).

Гидрологический экспорт углерода из мерзлотных ландшафтов среднесибирского плоскогорья

Гейс Татьяна Николаевна

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

Сибирский федеральный университет

В почвах криолитозоны сосредоточены значительные запасы органического вещества [1]. При потеплении климата и деградации многолетней мерзлоты ожидается усиление процессов его микробиологической минерализации и выделения парниковых газов в атмосферу, а также латеральной миграции в гидрографическую сеть. Анализ миграции растворенных форм углерода из мерзлотных ландшафтов в лотические системы и ее изменчивости в отдельные гидрологические периоды является ключевым шагом к пониманию процессов, определяющих их образование в наземных экосистемах и оценке трансформации и потерь органического углерода при его транспорте до конечного водоема стока – Северного Ледовитого океана [2].

Объектами исследований служили 105 водотоков разного порядка на территории Среднесибирского плоскогорья в период весеннего половодья и летней межени. Стационарные исследования на протяжении всего безморозного периода проводились на ручье 1-ого порядка без географического названия, бассейн которого не подвергался воздействию пожаров более 120 лет, с помощью автоматических логгеров-регистраторов. Концентрация растворенного органического (РОУ) и неорганического (РНУ) углерода измерялись анализатором TOC vario cube, спектральные свойства РОУ (SUVA₂₅₄ и SR) – спектрофотометром УФ-вид Cary 100. С использованием ИК-сенсора Vaisala GMT222 были определены эмиссионные потоки CO₂ с поверхности водного зеркала методом плавающей камеры и концентрация растворенного CO₂ (pCO₂) [3, 4].

В результате проведенных исследований выявлено, что характеристики РОУ и РНУ, поступающего в водотоки Среднесибирского плоскогорья варьируют в зависимости от гидрологического периода и количества осадков. Количественный и качественный состав РОУ изменяется в течение безморозного периода, следуя динамике глубины сезонно-талого слоя почвы. Концентрации растворенного CO₂ и его эмиссионные потоки имеют максимальные значения в период весеннего половодья, что обусловлено поступлением в водотоки лабильного органического вещества органогенных горизонтов почвы и его минерализацией. Значительные эмиссионные потоки CO₂ с водной поверхности водотоков низких порядков и снижение концентраций РОУ с порядком водотока свидетельствуют о существенных его потерях в результате минерализации и предполагают, что конечного водоема стока, Северного Ледовитого океана, может достигать менее 50% РОУ поступившего в гидрографическую сеть из почв Среднесибирского плоскогорья.

Благодарности. Автор работы выражает искреннюю благодарность к.б.н. Прокушкину А.С. за неоценимую помощь в исследовании.

Литература:

- [1] Tarnocai C. Canadell J.G., et al. *Global Biogeochemical Cycles.*, V.23, P.1-11 (2009).
- [2] Vonk J.E., Gustafsson O., *Nature Geoscience.* V.6, P.675–676 (2013).
- [3] Johnson M.S., Billett M.F., et al., *Ecohydrology*, V.3, P.68–78 (2010).
- [4] Kuhn M., Lundin E.J., et al., *Scientific Reports*, V.8, P.1-7 (2018).

Химические компоненты меж- и внутривидовой коммуникации жуков уссурийского полиграфа

Ефременко Антон Андреевич

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

Уссурийский полиграф *Polygraphus proximus* Blandf. (Coleoptera, Curculionidae, Scolytinae) – дальневосточный инвайдер, который дает вспышки массового размножения в насаждениях с преобладанием в составе пихты сибирской *Abies sibirica* Ledeb. К настоящему времени вторичный ареал вредителя охватывает 11 субъектов Российской Федерации, от Сибири до Московской области и продолжает увеличиваться. Нами была сделана экспериментальная попытка выявить состав и наиболее эффективные компоненты феромонной смеси инвайдера для последующего мониторинга его популяций.

Для определения состава компонентов феромонной смеси уссурийского полиграфа использовали метод твердофазной микроэкстракции. В лаборатории в Красноярске летучие вещества адсорбировали из микропробирок Эппендорфа, закрывавших втачивающихся самцов или самок полиграфа; контролем служили пробирки, закрывавшие участки коры с небольшим механическим повреждением. Шприцы с образцами помещали в емкость с инертным газом и доставляли в Швецию, где в Department of Chemical Engineering, Mid Sweden University они были проанализированы на газовом хроматографе. На полученной хроматограмме летучих соединений, выделяемых самцами полиграфа, имелся мощный пик, идентифицированный как (Z)-2-(3,3-dimethylcyclohexylidene)-ethanol (далее Z). В первую очередь была проведена работа по определению привлекательности данного соединения.

Ловушки с разными смесями химических компонентов, экспонировали в очаге массового размножения полиграфа уссурийского. Ловушки были расположены линией с расстоянием между ними в 30 м. Все варианты ловушек тестировали в 5-10-кратной повторности. Ловушки проверяли в среднем раз в неделю. В качестве вариантов контроля служили ловушки с растворителем феромонной смеси и просто пустые (без диспенсоров). После учета подсчитывали количество пойманных жуков каждой ловушкой. Сумма всех пойманных жуков за учет принималась за 100%, количество жуков, пойманных ловушками с конкретным веществом, выражалась долей от этих 100%.

После обработки уловов, выяснилось, что компонент Z нельзя применять для мониторинга *P. proximus*, поскольку он не видоспецифичен и привлекает все виды рода *Polygraphus*. На следующий год, мы протестировали другие компоненты с максимальной концентрацией, но не один из этих компонентов также не оказался специфичным. На третий год эксперимента стали тестировать компоненты с минимальной концентрацией. Выявлено, что именно они отвечают за специфичность, при этом добавление компонента Z сводит эту специфичность на нет. При этом, был найден видоспецифичный компонент с максимальной привлекательностью, который можно использовать в видоспецифичном мониторинге.

В результате, впервые был определен состав химических сигналов летучих компонентов, выделяемых жуками уссурийского полиграфа, экспериментально оценено их информационное значение и определен специфичный для уссурийского полиграфа компонент агрегационной феромонной смеси. Результаты позволят в дальнейшем определять присутствие агрессивного вредителя в древостое, отслеживать его численность и производить борьбу с использованием энтомопатогенных грибов.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 17-04-01765. Автор признателен Лине Виклунд (Lina Viklund, Mid Sweden University, Sweden) за идентификацию компонентов феромонной смеси уссурийского полиграфа.

Поиск иммуногенетических маркеров развития различных фенотипов астмы у детей г. Красноярск

Малинчик Марина Александровна

НИИ медицинских проблем Севера, ФИЦ КНЦ СО РАН

Бронхиальная астма (БА) является многофакторным заболеванием, и помимо воздействия окружающей среды на развитие ее фенотипов оказывает влияние генетически опосредованный уровень концентрации цитокинов, связанный с полиморфизмом кодирующих генов [1]. Следовательно, изучение комплексного анализа концентрации цитокинов и полиморфных генов цитокинов при БА является актуальным. В последние десятилетия особое внимание исследователей привлекают методы неинвазивной диагностики заболеваний дыхательных путей, в частности БА. Одним из таких методов является анализ конденсата выдыхаемого воздуха (КВВ), содержащий множество макромолекул, в том числе цитокинов [2].

Целью данной работы было выявить особенности распределения аллельных вариантов генов цитокинов у детей Центральной Сибири с различными фенотипами бронхиальной астмы и установить их связь с концентрацией цитокинов, оцененной в КВВ.

Материалы и методы. Обследовано 105 детей с БА различной степени тяжести (GINA) и уровня контроля заболевания (АСТTM). Контрольная группа включала 93 ребенка без аллергических патологий. Генотипирование полиморфизмов генов цитокинов проводили методом ПЦР в режиме реального времени. Уровни цитокинов в концентрированных образцах КВВ измеряли с использованием панели Milliplex Map Human High Sensitivity T Cell Panel (США, Merck). Распределение генотипов по полиморфным локусам проверяли на соответствие равновесию Харди–Вайнберга с помощью критерия χ^2 . Были рассчитаны медиана (Me) и процентиля (25%-75%).

Результаты. Анализ распределения у больных БА и контрольной группы показал, что частота генотипа СТ rs2243250 *IL4* статистически выше у больных астмой по сравнению с контролем ($p=0,05$), а частота аллеля Т rs1800925 *IL13* статистически выше в группе БА, чем в контроле ($p<0,05$). При анализе распределения частот аллелей и генотипов у пациентов с астмой различного фенотипа было определено, что генотип СТ rs1800925 *IL13* чаще встречается в группе с тяжелой формой БА, а генотип ТТ - в группе с контролируемым течением БА, чем в контроле ($p<0,05$). Кроме того, было выявлено, что частота генотипа ТС rs2069705 *IFN γ* ниже у пациентов с контролируемой астмой, чем у здоровых детей ($p<0,05$). В результате мультиплексного анализа были выявлены повышенные уровни IL-6, IL-12B, IL-13, IL-17A у больных астмой вне зависимости от фенотипа заболевания ($p<0,05$). Анализ ассоциации между концентрациями цитокинов и генотипами полиморфизмов кодирующих генов показал статистически значимые отличия для rs2069762 *IL2*, rs1800795 *IL6* и rs2275913 *IL17A* ($p<0,05$).

Заключение. В результате настоящего исследования были выявлены маркеры БА: генотип СТ rs2243250 *IL4* и аллель Т rs1800925 *IL13*, генотип СТ rs1800925 *IL13* для БА тяжелой степени, генотип ТТ rs1800925 *IL13* для БА контролируемого течения.

Концентрация IL-6, IL-12B, IL-13 и IL-17A в образцах КВВ детей с астмой независимо от ее фенотипа выше, чем в контрольных образцах. Также отмечена взаимосвязь наличия генотипа ТТ rs2069762 *IL2* с высокой концентрацией IL-2; генотипов CG/GG rs1800795 *IL6* с высокой концентрацией IL-6; генотипов GA/AA rs2275913 *IL17A* с высокой концентрацией IL-17A.

Автор выражает благодарность соавтору и научному руководителю Смольниковой М. В.

Литература:

- [1] Garn H., Renz H. Immunobiology, V. 212, № 6, P. 441-452 (2007).
- [2] Kharitonov S.A., Barnes P.J. Biomarkers, V. 7, № 1, PP. 1-32 (2002).

Характеристика физического развития и метаболических показателей лимфоцитов у детей с особыми возможностями здоровья в зависимости от типов вегетативной регуляции

Овчаренко Елизавета Сергеевна

НИИ медицинских проблем Севера ФИЦ КНЦ СО РАН

Вегетативная нервная система (ВНС) является уникальной системой, обеспечивающей поддержание постоянства внутренней среды и подключение адаптационно-приспособительных механизмов при стрессовых условиях [1,2]. Регуляторное влияние вегетативной нервной системы осуществляется посредством специфических молекул (в том числе ряда биогенных моноаминов), влияющих на метаболические параметры, и в первую очередь, на энергетический статус клеток. Функциональная активность и состояние регуляторных механизмов вегетативной нервной системы в определенной мере сказывается на формировании конституциональных характеристик [3].

Цель исследования – изучить особенности физического развития, регуляторно-метаболических показателей лимфоцитов у детей с особыми возможностями здоровья в зависимости от типов вегетативной нервной регуляции.

Материалы и методы. Обследовано 168 детей младшего школьного возраста (7 -11 лет), которые были разделены на 2 группы: основную группу и контрольную группу. В основную группу были включены 54 ребенка с особыми возможностями здоровья (ОВЗ), связанными с нарушением развития интеллекта - диагноз "умственная отсталость" (F70, F71). В контрольную группу были включены 114 интеллектуально здоровых детей. В работе использовались антропометрические методы, цитохимические, люминесцентно-гистохимические, метод кардиоинтервалографии, методы статистической обработки данных.

Результаты. При анализе параметров вегетативной регуляции у детей с особыми возможностями здоровья выявляется выраженное преобладание симпатической активности (симпатический (33%) и гиперсимпатический (24%) тип исходного вегетативного тонуса, высокие значения VLF (2304 мс²), LF (1834 мс²) относительно контрольной группы (1359 мс², 1597 мс² соответственно, $p < 0,05$), что характеризуют незрелость механизмов вегетативной регуляции и состояние напряжения адаптационно-приспособительных механизмов у детей данной группы. Также у детей с ОВЗ преимущественно выявляется дисгармоничное физическое развитие (31,5% дефицит массы тела, 31,5% избыток массы тела). При этом антропометрические параметры при разных типах исходного вегетативного тонуса изменяются пропорционально активности симпатического звена ВНС. Регуляторно-метаболические параметры лимфоцитов у детей с ОВЗ подтверждают состояние напряжения и снижение адаптационных возможностей: установлены более низкие показатели активности кислой фосфатазы (98 усл. ед.) и содержания серотонина (22,2 усл. ед.), а также статистически значимо высокое содержание катехоламинов (20,9 усл. ед.) в данной группе детей относительно контрольной группы (кислая фосфатаза - 118 усл. ед., серотонин- 36,4 усл. ед., катехоламины – 19,5 усл. ед., $p < 0,05$). Так же у детей с ОВЗ регуляторно-метаболические параметры лимфоцитов увеличиваются пропорционально усилению активности симпатического звена ВНС (от ваготонии к гиперсимпатикотонии).

Благодарность соавторам работы Смирновой О. В., Каспарову Э. В.

Литература:

- [1] Badke С.М., Marsillio L.E., Weese-Mayer et.al., *Frontiers in Pediatrics.*, V. 6, PP. 280-296 (2018).
- [2] Rudd K.L., Yates T.M., *Development Psychobiology*, V. 60 (8), PP. 1023-1036 (2018).
- [3] Qi Z., Ding S., *Journal of Pediatric Endocrinology and Metabolism*, V. 29 (2), PP. 113-125 (2016).

Секция «Математическое моделирование»

Проведение и подготовка трудов Открытой конференции молодых ученых ИВМ СО РАН по математическому моделированию и информационным технологиям в 2022 году поддержаны Красноярским математическим центром, финансируемым Минобрнауки РФ в рамках мероприятий по созданию и развитию региональных НОМЦ (Соглашение 075-02-2022-873)

Методы типа предиктор-корректор на основе симметричных линейных многошаговых методов

Адаев Илья Романович

Институт вычислительного моделирования СО РАН

Точность численного интегрирования движения спутника является важной составляющей в задачах, связанных с глобальными навигационными спутниковыми системами. Основными методами численного интегрирования орбиты спутника являются алгоритмы типа предиктор-корректор Адамса-Башфорта/Моултона, интегратор Эверхарта и методы коллокации [1].

Ранее нами были разработаны алгоритмы генерации семейства линейных k -шаговых явных и неявных симметричных методов [2-3] для численного интегрирования обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка $x'' = f(t, x)$, где $x(t)$ – положение точки в момент времени t , $f(t, x)$ – сила, не зависящая от скорости. В настоящей работе на основе пар явных и неявных методов с ненулевыми интервалами периодичности строятся схемы предиктор-корректор вида $P(ES)^kE$. Здесь P соответствует применению предиктора, S – корректора, E – вычислению правой части $f(t, x)$. Отметим, что схема $P(ES)^kE$ не может быть представлена, как линейный многошаговый метод, однако в случае, когда длины шаблонов предиктора и корректора совпадают (т. е. порядок предиктора на единицу меньше порядка корректора), метод имеет ненулевой интервал периодичности. Если порядки предиктора и корректора совпадают, то получаемые методы не имеют ненулевых интервалов периодичности, однако среди этих методов можно найти устойчивые.

При тестировании методов рассматривалась система трех тел, в начальный момент времени соответствующая системе Земля-Луна-спутник ГЛОНАСС. Ставилась задача определить шаг интегрирования, при котором за год максимальное отклонение численного решения тестовой задачи от точного не превышает 2 мм. Дополнительно было проведено сравнение вычислительной эффективности при достижении заданной точности построенных методов и интегратора Эверхарта (ИЭ). Результаты численных экспериментов (таб. 1) показывают, что для достижения заданной точности интегратору Эверхарта требуется в 2,7 раза больше вычислений правой части уравнения по сравнению с полученными нами схемами предиктор-корректор.

Таблица 1. Сравнение схем PESE и ИЭ 8-го порядка для задачи Кеплера

Метка метода	PC-1	PC-2	PC-3	PC-4	PC-5	ИЭ
H_0^2	1,83E+00	1,83E+00	1,54E-01	8,29E-02	5,19E-01	-
C_{10}^*	-0,00196	-0,00191	-0,00167	-0,00169	-0,00208	-
rhs**	241484	239926	232136	233694	244600	785232
N^{***}	155	154	149	150	157	48
h, c	262	263	272	270	258	845
* константа в главном члене локальной ошибки						
** количество вычислений правых частей уравнения						
*** количество шагов интегрирования на период $T = 2\pi/\lambda$						

Работа поддержана Красноярским математическим центром, финансируемым Минобрнауки РФ в рамках мероприятий по созданию и развитию региональных НОМЦ (Соглашение 075-02-2022-873). Выражается благодарность соавторам работы Кареповой Е. Д. и Шанько Ю. В.

Литература:

- [1] IGS ftp archives [Электронный ресурс]. URL: <ftp://ftp.igs.org/pub/center/analysis/> (дата обращения: 04.08.2020).
- [2] Karepova E., Adaev I, Shan'ko Yu., Journal of Siberian Federal University. Mathematics & Physics, V.13(6), PP.781-791 (2020).
- [3] Karepova E., Adaev I, Shan'ko Yu., Lobachevskii Journal of Mathematics, V.42(7), PP.1675-1685 (2021).

Задача автоматического распознавания зданий в водоохраных зонах на спутниковых снимках

Гилин Степан Валентинович

Институт Математики и Фундаментальной информатики СФУ

В работе рассматривается проблема обнаружения зданий и построек в водоохраных зонах на спутниковых снимках. Данная задача является важной и практически значимой.

На сегодняшний момент наиболее перспективным способом получения информации о расположении различных объектов на местности является автоматическое распознавание спутниковых снимков (или аэроснимков).

Целью исследования является разработка нового алгоритма распознавания зданий в водоохраных зонах на спутниковых снимках. Для автоматизации процесса необходимо научить алгоритм добавлять на карты контуры домов без участия людей, а также определять – находятся ли постройки на разрешенном расстоянии относительно водоемов.

Этапы решения задачи распознавания образов.

Задача распознавания объектов на спутниковых снимках является частным случаем таких задач, как распознавание образов, классификация и машинное обучение. Перечислим основные этапы решения задачи распознавания объектов – выявление объектов определенных заданных классов на снимках:

1. Выделение объектов на изображении путем сегментации с дальнейшим преобразованием выделенных сегментов для записи объектов в зависимости от метода дешифрирования.
2. Анализ объектов.
3. Классификация объектов.
4. Нахождение расстояния между распознаваемыми объектами.
5. Вывод результата решения задачи.

При определении распознаваемых объектов, для сокращения выбора построек, предлагается использовать наложение данных Росстата о проверенных зданиях.

В данной статье рассмотрена проблема распознавания зданий в водоохраных зонах на спутниковых снимках. Были описаны метод автоматического распознавания построек и алгоритм определения водоохраных зон с помощью фильтрации на основе маски Лапласа. Метод автоматического обнаружения построек в определенных областях изображений основан на векторной модели и включает в себя поиск замкнутых контуров на изображении с определением построек.

Литература:

- [1] Vorontsov K. V., Lectures on clustering and multidimensional scaling algorithms, Moscow: MSU, PP.1-18 (2007).
[2] Chernov A.V., Chupshev N.V., Computer optics, V.4(31), PP.101-103 (2007).

Повышение порядка точности метода Нюстрёма разностными выражениями правой части

Голубев Роман Андреевич

Институт вычислительного моделирования СО РАН

Сибирский федеральный университет

Пусть необходимо численно решить задачу Коши на равномерной разностной сетке $\omega_h = \{t_i = ih; i = 0, 1, \dots, N\}$ с шагом $h = T/N$ ($N \geq 2$ – целое):

$$\begin{aligned}x(0) &= x_0, \\x'(t) &= f(t, x(t)), \quad t \in [0, T].\end{aligned}\tag{1}$$

Введем обозначение $y(t_i) = y_i$ в узлах сетки ω_h для произвольной функции $y(t)$. Проинтегрируем уравнение (1) на отрезке $[t_{i-1}, t_{i+1}]$ и заменим функцию $f(t, x(t))$ интерполяционным многочленом, проходящим через точки $\{(t_j, f_j), j = i-k, \dots, i+k\}$. Тогда

$$x_{i+1} = x_{i-1} + \int_{t_{i-1}}^{t_{i+1}} f(t, x(t)) dt \approx x_{i-1} + 2h \sum_{j=1}^k \alpha_j (f(t_{i-j}, x_{i-j}) + f(t_{i+j}, x_{i+j})).\tag{2}$$

Используя в (2) разложение в ряд Тейлора в точке t_i и приравнивая слагаемые одного порядка малости по h , получим систему линейных алгебраических уравнений для нахождения коэффициентов α_j :

$$\sum_{j=1}^k \alpha_j = 0; \quad \sum_{j=1}^k j^2 \alpha_j = 1/6; \quad \sum_{j=1}^k j^4 \alpha_j = 1/10 \quad \dots \quad \sum_{j=1}^k \frac{j^{2k-2}}{(2k-2)!} \alpha_j = \frac{1}{2 \cdot (2k-1)!}.$$

Алгоритмическое использование сильно неявной разностной схемы (2) реализуется следующим образом. Сначала используется метод Нюстрёма [1] второго порядка точности:

$$x_0^{2,h} = x_0, \quad x_{-1}^{2,h} = x_0 - hf(t_0, x_0), \quad \frac{x_{i+1}^{2,h} - x_{i-1}^{2,h}}{2h} = f(t_i, x_i^{2,h}), \quad i = 0, 1, \dots, N-1.\tag{3}$$

А затем для нахождения решения чётного порядка $m = 2k, k > 1$, в правую часть (3) вносится поправка, выражающаяся через приближенное решение $x_i^{2k-2,h}$ порядка $O(h^{2k-2})$:

$$\begin{aligned}x_0^{2k,h} &= x_0, \\ \frac{x_{i+1}^{2k,h} - x_{i-1}^{2k,h}}{2h} &= f(t_i, x_i^{2k,h}) + \sum_{j=1}^k \alpha_j (f(t_{i+j}, x_{i+j}^{2k-2,h}) + f(t_{i-j}, x_{i-j}^{2k-2,h})), \quad i = 0, \dots, N-1.\end{aligned}$$

Результаты вычислительных экспериментов подтвердили теоретические построения.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ №20–61–46017.

Литература:

[1] Хайрер Э., Нёрсетт С., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи. М.: Мир, 1990.

Моделирование волновых процессов в геосреде, описываемой обобщённой моделью стандартного линейного вязкоупругого тела

Ефимов Евгений Александрович

Институт вычислительного моделирования СО РАН

Грунты и горные породы представляют собой пористые насыщенные влагой или газом среды. Достаточно крупные образцы материала при малых деформациях можно считать однородными и вязкоупругими [1]. Затухание в средах характеризуется добротностью – относительным уменьшением энергии в единице объёма за один период колебаний. В экспериментальных работах было обнаружено, что в некоторых породах добротность практически не изменяется в характерном для сейсмологии спектре частот (1-200Гц) [2]. Среда с постоянной добротностью может быть описана при помощи простой модели стандартного линейного тела или модели обобщённого стандартного линейного тела. Обобщённая модель более адекватна в данном случае, в связи с чем широко используется при численном моделировании распространения сейсмических волн.

В работе предполагается, что грунт имеет плоскостную структуру с однородными изотропными вязкоупругими слоями, что позволяет рассматривать не трёхмерную, а двухмерную осесимметричную задачу, способствуя тем самым сокращению вычислительных затрат. В основе численного алгоритма лежит метод двуциклического расщепления [3], на этапах которого решаются одномерные задачи теории упругости и уравнения, описывающие вязкие процессы.

При использовании комплексов программ, разработанных для многопроцессорных вычислительных систем, было смоделировано воздействие импульсного сейсмоисточника на геосреду. На рис. 1 показано распределение вектора Умова-Пойнтинга потока энергии в однородной среде, максимального на фронте продольной волны.

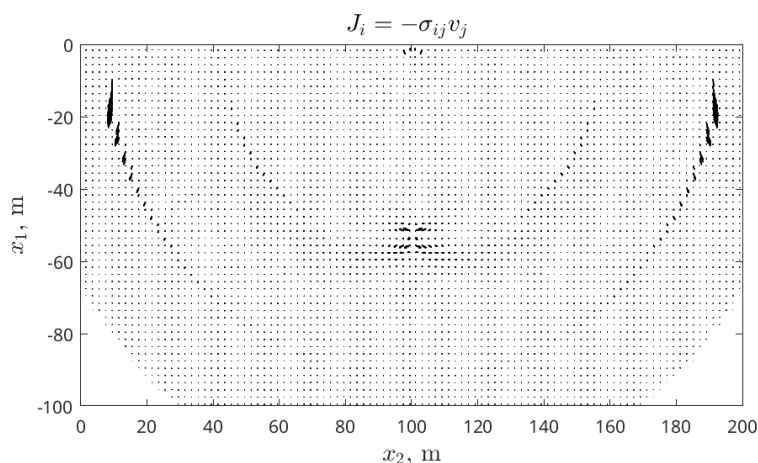


Рис. 1. Вектор Умова-Пойнтинга в однородной вязкоупругой среде.

Работа поддержана Красноярским математическим центром, финансируемым Минобрнауки РФ в рамках мероприятий по созданию и развитию региональных НОМЦ (Соглашение 075-02-2022-873).

Литература:

- [1] T. Bourbie, O. Coussy, B. Zinszner. Acoustics of Porous Media. Editions Technip, P. 333 (1987).
- [2] F. J. McDonal, F. A. Angona, R. L. Mills, R. L. Sengbush, R. G. van Nostrand, and J. E. White. Attenuation of shear and compressional waves in Pierre shale. Geophysics, 23: P. 421–439 (1958).
- [3] Г.И. Марчук. Методы расщепления, М.: Наука, С. 263 (1988).

Численное исследование транспорта шлама буровыми растворами с добавкой наночастиц

Жигарев Владимир Алексеевич

Институт нефти и газа СФУ

Недостаточная очистка ствола скважины от разрушенной при бурении горной породы является одной из основных причин возникновения осложнений и аварийных ситуаций, несущих многофакторные риски для процесса бурения скважин, а также снижает эффективность реализации проекта разработки месторождения в целом. Для предупреждения таких ситуаций необходимо подбирать требуемые параметры бурового раствора и насосного оборудования и исследовать различные режимы бурения [1]. Проведено численное исследование на геометрии реальной скважины. Расчётная модель учитывает движение твёрдой фазы (шлама) и бурового раствора [2]. Для расчёта циркуляции в скважине при закачке бурового раствора были выбраны типовые технологические параметры бурения скважин. Реология буровых растворов определялась по ранее полученным экспериментальным данным различных буровых растворов на углеводородной основе с добавками наночастиц. Базовый буровой раствор на углеводородной основе представляет собой обратную эмульсию, т.е. эмульсию, в которой вода диспергирована на мельчайшие капельки, а дисперсионной средой служит углеводородная жидкость «вода в масле». Для численного исследования использовались модель Гершеля – Балкли и реологическая степенная модель. В качестве частиц шлама считались сферические частицы. Моделирование проведено для горизонтального участка скважины. В расчётах исследовалось влияние концентрации и размера наночастиц на значение перепада давления в скважине и эффективность транспорта шлама.

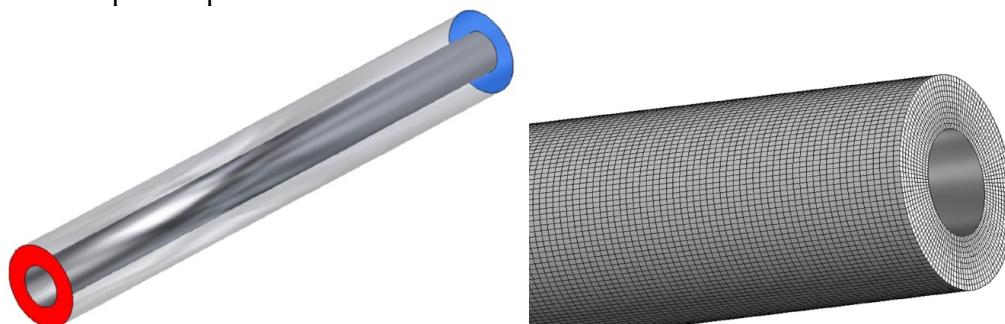


Рис. 1. Схематичное изображение модели горизонтального участка скважины(слева) и фрагмента расчётной сетки (справа)

В ходе исследования получены результаты распределения частиц шлама по каналу и в сечении скважин в зависимости от размера и концентрации наночастиц. Показано что буровые растворы с меньшим размером наночастиц показывают лучшие результаты по сравнению с более крупными частицами. Как видно из расчётов добавка наночастиц приводит к увеличению перепада давления по сравнению с использованием базового бурового раствора. С ростом концентрации перепад давления так же возрастает.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ № 17-79-20218-Р. Автор выражает благодарность соавторам работы Минакову А. В., Шебелеву А. В., Михиенковой Е. И.

Литература:

[1] Akhshik S., Behzada M., Rajabib M., Journal of Petroleum Science and Engineering, V.127, PP. 229–244 (2015).

[2] Minakov A.V., Zhigarev V.A., Mikhienkova E.I., et al., Journal of Petroleum Science and Engineering, V.171, PP. 1149–1158 (2018).

Влияние граничных условий, дискретизации расчетной области и геометрических препятствий на результаты моделирования развития пожара

Закарлюка Павел Владимирович

Институт вычислительного моделирования СО РАН

Были проведены численные эксперименты по моделированию распространения опасных факторов пожара (ОФП) в расчетной области и достижения ОФП предельных значений в контрольных точках при комбинациях параметров:

- шаг сетки расчетной области (0.2 м, 0.3 м, 0.4 м);
- контакт с внешней средой (Проем_3, Проем_10, Проем_6);
- препятствия в виде перегородок с проемами в каждом участке коридора.

Таблица 1. Описание комбинаций параметров, для которых проводились расчеты.

№ комб./параметр	1	2	3	4	5	6
Контакт с внешней средой	Проем 3	Проем 3	Проем 10	Проем 10	Проем 6	Проем 6
Наличие перегородок с проемами	-	+	-	+	-	+

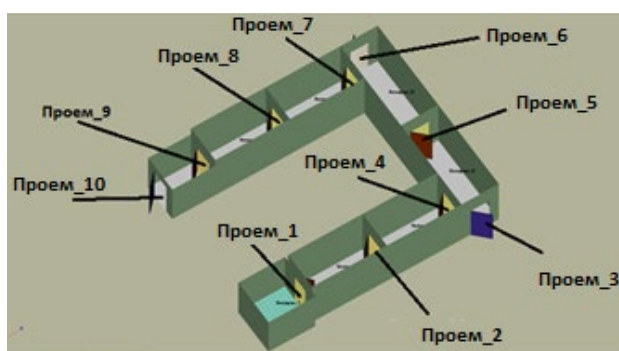


Рис. 1. Модель для проведения расчетов.

Таблица 2. Время достижения ОФП предельных значений в контрольных точках для комбинаций параметров 2, 3, 4 и 6.

проем/ комб.	0.2 м				0.3 м				0.4 м			
	2	3	4	6	2	3	4	6	2	3	4	6
2	53	80	53	53	57	83	56	56	57	80	57	57
3	68	77	68	69	74	79	74	73	75	81	74	74
5	90	83	88	88	95	88	92	92	93	88	91	90
7	110	86	103	105	124	87	110	114	141	93	109	113
8	119	84	108	116	134	89	116	128	141	91	116	131
9	147	79	122	139	182	81	135	164	201	82	139	181
10	168	94	130	157	223	97	150	196	214	93	147	192

Выводы, основанные на анализе проведенных экспериментов следующие:

1. Добавление перегородок с проемами оказывает влияние на скорость распространения ОФП для различных сеток, вне зависимости от расположения контакта с внешней средой (комбинации параметров 3 и 4).

2. Контакт с внешней средой оказывает существенное влияние на время блокирования удаленных от него точек – комбинации параметров 2, 4, 6, в которых прослеживается увеличение разницы по времени блокирования для разных сеток начиная со второго проема после области, где расположен контакт с внешней средой.

3. На срезах, показывающих векторные поля скорости прослеживаются различия в «огибании» потоком препятствий для различных сеток: меняется характер движения и скорость, что, возможно, и сказывается на появлении разницы во времени блокирования (комбинации 2, 4, 6). В экспериментах без перегородок с проемами таких различий не наблюдается, как и существенной разницы во времени блокирования.

Исследование применения наносуспензий для повышения нефтеотдачи пласта

Иванова София Васильевна

Сибирский федеральный университет

Повышение эффективности вытеснения нефти из пласта на сегодняшний день является актуальным направлением. Современные способы добычи нефти позволяют достичь значений коэффициента извлечения нефти (КИН) до 40%. Традиционным методом добычи нефти является заводнение керна, при котором нефть из пористой среды вытесняется водой, растворами с поверхностно-активными веществами (ПАВ) или добавками полимеров. В настоящее время широкое распространение в повышении нефтеотдачи получают наножидкости. Наножидкость – это суспензия на основе дистиллированной воды с добавлением наночастиц различного состава. Добавка наночастиц может влиять на вязкость, краевой угол смачиваемости и коэффициент межфазного натяжения. В связи с этим в последнее время было выполнено большое количество исследований, направленных на изучение возможности применения различных наножидкостей для увеличения нефтеотдачи в процессе заводнения.

Численное исследование вытеснения нефти проводилось из двумерной микромодели пористой среды. Численная методика основана на решении системы уравнений Навье-Стокса. Для описания течения двухфазного потока использовался метод VOF [1]. Данная модель позволяет описать несмешивающийся многокомпонентный поток жидкость-жидкость, в которой решаются уравнения переноса импульса с учетом объемной доли каждой фазы. Для моделирования процесса разбавления наножидкости при ее течении было введено уравнение переноса концентрации наночастиц (только в пределах водной фазы); коэффициент диффузии наночастиц определялся из уравнения Эйнштейна-Стокса. В качестве граничных условий на входе в расчетную область использовалось постоянное значение скорости. На выходе из расчетной области – условия Неймана. На стенках канала задавалось условие прилипания. Были использованы экспериментально измеренные значения вязкости, плотности, межфазного натяжения и краевого угла смачивания в зависимости от концентрации частиц SiO₂. Значения массовой концентрации наночастиц были равны 0,1; 0,25; 0,5 и 1%. В начальный момент времени все поровое пространство заполнено нефтью.

Было проведено исследование процессов вытеснения нефти из пористой среды с помощью наносуспензий, которое показало, что применение наносуспензий оказывает существенное влияние на движение фронта вытеснения в пористой среде и значение коэффициента вытеснения нефти. Коэффициент вытеснения с помощью наносуспензии на 40% превышает коэффициент вытеснения нефти с помощью воды. Но такой способ требует большого объема закачиваемой наносуспензии, поэтому было проведено численное моделирование процессов вытеснения нефти из пористой среды с помощью циклической закачки вода-наножидкость-вода. В расчетах после прокачки двух поровых объемов воды через пористую среду, коэффициент вытеснения нефти составил 0,376. После прокачивания одного порового объема наносуспензии коэффициент вытеснения нефти увеличился до 0,55 (увеличился на 46%). В дальнейшем, после этого вытеснение продолжалось с помощью воды. При этом коэффициент вытеснения нефти увеличился до 0,6 (прирост 13%). Использование циклической закачки способствует увеличению коэффициента нефти и позволяет уменьшить объем затрачиваемой наносуспензии.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта № 17-79-20218П. Автор выражает благодарность соавторам работы: Гузей Д. В., Пряжников М. И.

Литература:

[1] Hirt C.W., Nichols B. D., Journal of Computational Physics, V.39, PP. 201-226 (1981).

Сравнение 1D- и 2D-моделей наночистоты водных растворов солей в мембранах с электропроводящей поверхностью

Капитонов Алексей Антонович

Институт космических и информационных технологий СФУ

Нанопористые мембраны используются в таких электрохимических процессах, как прямой и обратный электролиз, ёмкостная деионизация и электрохимическое преобразование энергии. В мембранах с электропроводящей поверхностью транспорт ионов можно регулировать путём изменения поверхностного потенциала.

Для описания переноса ионов в таких мембранах используются уравнения Навье-Стокса, Нерста-Планка и Пуассона. В рамках двумерной модели распределение потенциала, концентрации ионов и давления внутри нанопоры зависит как от расстояния вдоль поры, так и от радиуса поры (2D-модель) [1]. Если длина Дебая больше радиуса поры, то радиальным изменением величин можно пренебречь (1D-модель) [2]. В условиях наночистоты основной движущей силой является разность давлений между резервуарами, разделяемыми мембраной. В этом случае мерой качества фильтрации является коэффициент задержания, определяемый как отношение концентрации соли в отфильтрованном растворе к концентрации соли в исходном растворе.

Целью данной работы является математическое моделирование наночистоты водных растворов солей на основе 1D- и 2D-моделей и сравнение результатов расчётов в зависимости от различных физических параметров.

На рис. 1 показана зависимость коэффициента задержания от радиуса поры для водного раствора NaCl с исходной концентрацией 10 мМ при потенциале поверхности 1 В. Видно, что для малых радиусов поры 1D- и 2D-модели хорошо согласуются. С увеличением радиуса поры различие между кривыми растёт в силу того, что 1D-модель не учитывает зависимость искомых величин от радиальной координаты. При этом для 2D-модели наблюдается уменьшение коэффициента задержания в силу того, что радиус поры становится больше длины Дебая.

В целом можно сказать, что результаты, полученные на основе 1D-модели, качественно и количественно согласуются с результатами для 2D-модели при малых радиусах пор, что позволяет рекомендовать более простую 1D-модель для практических расчётов.

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук Рыжков Илья Игоревич.

Литература:

[1] Krom A. I., Ryzhkov I. I., Advanced theory and simulations, 2100174 (2021).

[2] Рыжков И. И., Вяткин А. С., Михлина Е. В., Мембраны и мембранные технологии, т. 10, № 1. С. 13-23 (2020).

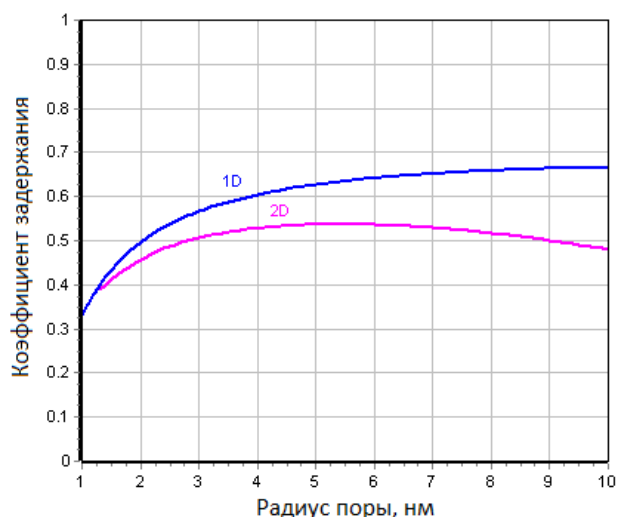


Рис. 1. Зависимость коэффициента задержания от радиуса поры для 1D- и 2D-моделей

Реализация платформы для обработки данных Интернета вещей

Кулясов Никита Владимирович

Институт вычислительного моделирования СО РАН

Актуальные передовые технологии промышленного Интернета вещей (Internet of Things, IoT) основаны на информационном взаимодействии распределённых устройств и приложений, что требует создания специализированных отказоустойчивых высокопроизводительных платформ для хранения и оперативной обработки больших объёмов информации в реальном времени [1].

В данной работе представлена архитектура платформы для обработки данных IoT (Рис 1), генерируемых устройствами и приложениями, использующими протокол MQTT. На десяти виртуальных машинах и одном выделенном сервере развёрнут кластер Kubernetes на основе системы контейнеризации containerd [2]. Для обеспечения отказоустойчивости платформы узлы кластера разделены на три зоны доступности. В качестве хранилища данных используется распределённая масштабируемая файловая система GlusterFS. Сбор данных осуществляется с четырёх измерительных устройств ICP DAS E201c, подключённых к нескольким серверам Eclipse Mosquito, развёрнутых внутри кластера. Для доступа к сервисам кластера используются два Ingress контроллера, обрабатывающих запросы к ресурсам кластера из внутренней и внешней сети.

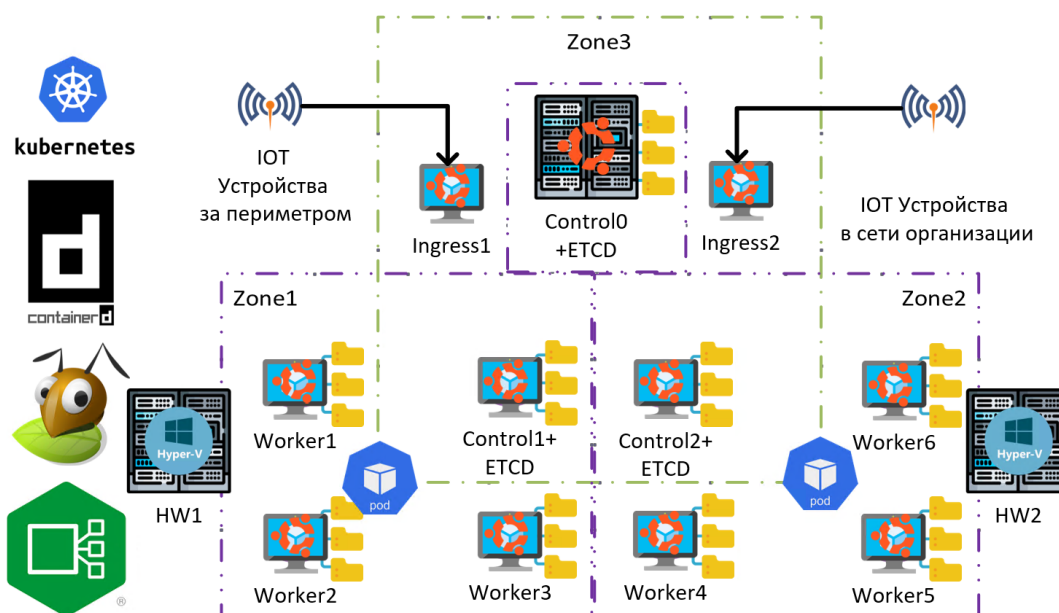


Рис. 1. Архитектура платформы обработки данных IoT.

Работа поддержана Красноярским математическим центром, финансируемым Минобрнауки РФ в рамках мероприятий по созданию и развитию региональных НОМЦ (Соглашение 075-02-2022-873).

Литература:

[1] Ровнягин М. М., Чугунков И. В., Савченко Н. А., Вопросы кибербезопасности, № 3(31). С. 39-44 (2019).

[2] Ermolenko D., Kilicheva S., Muthanna A., Khakimov A., 2021 IEEE Conference of Russian Young Researchers in Electrical and Electronic Engineering (ElConRus), Pp. 12-17 (2021).

Разработка автоматизированных подходов к сканированию зданий с целью построения цифровой 3D-модели с применением малых летательных аппаратов

Мазков Виталий Александрович

Институт вычислительного моделирования СО РАН

В настоящее время стоит вопрос создания цифровых двойников существующих зданий. Одной из основных компонент цифрового двойника здания является его компьютерная 3D-модель. Бумажные версии поэтажных планов у части зданий отсутствуют или требуют актуализации. Возникает потребность в разработке автоматических или хотя бы автоматизированных экономически выгодных методов сканирования зданий с целью последующего создания компьютерных 3D-моделей. Настоящая работа посвящена разработке технических и алгоритмических решений для реализации такого подхода.



Рис. 1. Лазерное и фото сканирование здания с разных точек и ракурса.

Целью исследования является создание автоматизированного подхода к 3D-сканированию зданий, помещений и последующего создания компьютерной 3D-модели.

Задачи исследования:

- разработка состава устройства для сканирования;
- разработка алгоритмов сканирования, сохранения, анализа полученной информации;
- конвертация (преобразование) в заданный формат хранения 3D-модели здания.

В результате работы ожидается получить новый способ для выполнения автоматизированного 3D-сканирования зданий и создания 3D цифровой модели здания.

В настоящий момент идет изучение текущей ситуации, связанной с уже используемыми подходами к сканированию зданий и помещений для получения информации о 3D-виде объекта сканирования (анализируются способы, используемые и существующие технические устройства, алгоритмы [1]). На текущий момент практика применения дронов для сканирования зданий снаружи уже имеется, Рис.1. Применение дронов для изучения внутреннего устройства здания имеет свои проблемные моменты, преодоление которых является одним из предметов настоящего исследования. Решается задача подбора комплектующих в целях применения дронов для выполнения сканирования. Разрабатываются алгоритмы проведения сканирования.

Научный руководитель: Кирик Е. С.

Литература:

[1] Журавлев А.А., Парфенов В.А., Редька Д. Н. Лазерное 3D-сканирование: методические указания к лабораторным работам, Изд-во СПбГЭТУ, 2016.

Веб-интерфейс для отображения и взаимодействия с данными температурного профилера

Малимонов Максим Игоревич
КНЦ СО РАН

Температурные инверсии, препятствующие вертикальным перемещениям воздуха, способствуют образованию облаков, туманов, смога и т.д. В городе Красноярске в зимний период наблюдаются множественные температурные инверсии, которые приводят к загрязнению воздуха в городе [1-2].

Для наблюдения за температурными инверсиями необходимо специальное оборудование и программное обеспечение, которое позволит собирать и анализировать информацию об атмосфере и температурной инверсии. Для этих целей был разработан сервис «Данные температурного профилера КНЦ СО РАН». Данный сервис позволяет просматривать температуру атмосферы, температурные инверсии, термограммы и давление.

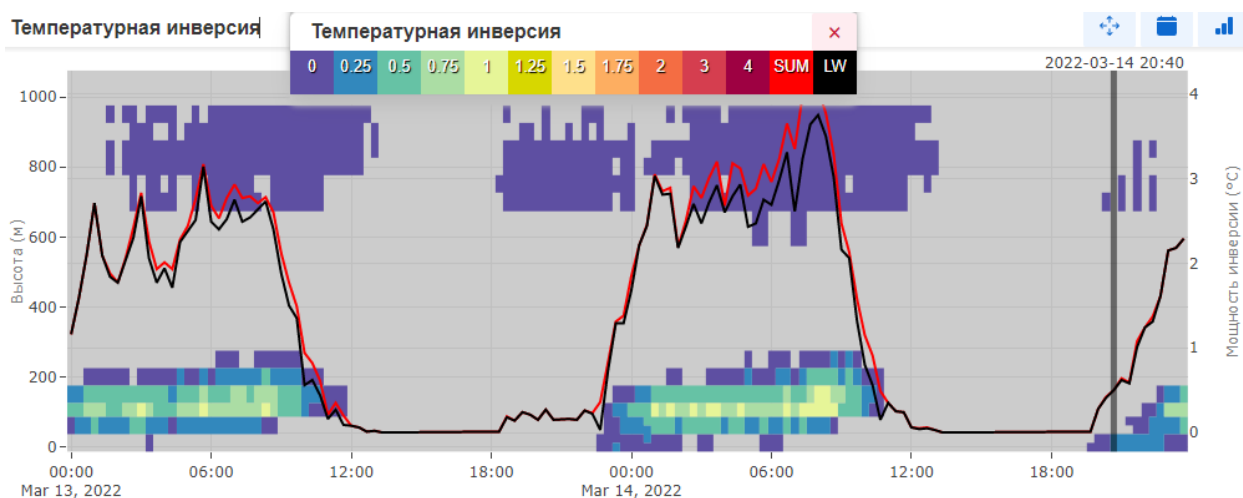


Рис. 1. График температурных инверсий. Тепловая карта показывает силу температурных инверсий в градусах Цельсия по высоте, линейные графики показывают сумму температурных инверсий в градусах Цельсия (Суммарная – сумма всех инверсий за одни сутки, Нижняя – первая инверсия за сутки).

Использование данных температурного профилера и различных представлений этих данных, позволяет спрогнозировать неблагоприятные метеоусловия в городе.

Сервис разработан с помощью фреймворка Vue.js, программной платформы Node.js и графической библиотеки Vuefy.

Литература:

[1] Дергунов А. В., Якубайлик О. Э., Региональные проблемы дистанционного зондирования земли 2021, С. 174-177 (2021).

[2] Токарев А. В., Шапарев Н. Я., Якубайлик О. Э., ENVIROMIS 2020, С 261-264 (2020).

Одномерная модель явления «сухого кипения» сыпучей среды

Мальшиева Жанна Олеговна

Институт вычислительного моделирования СО РАН

Интересным явлением в динамике сыпучих сред представляется «сухое кипение», когда за счет взаимодействия волн, вызванных импульсным нагружением, образуются разрывы сплошности, подобные пузырям в кипящей жидкости. Так происходит потому, что сыпучая среда имеет конечный модуль упругости при сжатии и не оказывает сопротивления растягивающим усилиям, а поэтому в ней невозможны растягивающие напряжения.

Рассматривается плоский слой сыпучей среды, на нижней границе которого действует динамическое возмущение из одного или нескольких П-образных импульсов давления, равномерно распределенного по границе слоя. Верхняя граница является свободной поверхностью. Волна нагружения, обусловленная действием импульса, распространяется вовнутрь слоя и, отражаясь от свободной поверхности, встречает на некоторой глубине волну разгрузки. В этом месте в сыпучей среде образуется разрыв сплошности – два слоя среды распадаются и движутся относительно друг друга с разными скоростями. Действие повторного импульса приводит к отражению волны нагружения уже от образовавшейся поверхности разрыва. При встрече отраженной волны с волной разгрузки образуется новый разрыв. И так далее, если действие импульсов повторяется многократно.

Вычислительный алгоритм основан на методе Годунова с разрывами параметров среды внутри расчетной области. В работе приведены результаты численного решения задачи по схеме Годунова [1] со специальной корректировкой скоростей и напряжений [2, 3] для учета разного сопротивления среды растяжению и сжатию, при подаче двух импульсов давления, следующих друг за другом через определенный промежуток времени.

На рисунках прослеживается картина взаимодействия отраженной волны с волной разгрузки, приводящего к образованию разрыва сплошности. Затем появляется второй разрыв, обусловленный действием импульса повторного нагружения с давлением $p_1 = 2p_0$. Далее второй отделившийся слой среды догоняет первый, так как обладает вдвое большим импульсом, и происходит схлопывание разрыва между слоями с образованием общего слоя.

Результаты получены при предельном по условию Куранта – Фридрихса – Леви значении шага сетки по времени. При меньшем шаге разностная схема сглаживает разрывы, однако качественное поведение решения остается таким же.

Работа поддержана Красноярским математическим центром, финансируемым Минобрнауки РФ в рамках мероприятий по созданию и развитию региональных НОМЦ (Соглашение 075-02-2022-873). Благодарность соавтору работы В. М. Садовскому.

Литература:

- [1] Godunov S. K., Zabrodin A. V., Ivanov M. Ya., Kraiko A. N., Prokopov G. P. Chislennoe Reshenie Mnogomernykh Zadach Gazovoi Dinamiki [Numerical Solving Many-Dimensional Problems of Gas Dynamics]. Moscow, Nauka, 400 p. (1976).
- [2] Sadovskaya O. V., Sadovskii V. M., Num. Meth. Prog. V.6, PP. 209–216 (2005).
- [3] Sadovskaya O., Sadovskii V. Mathematical Modeling in Mechanics of Granular Materials. V. 21 of Advanced Structured Materials. Heidelberg – New York – Dordrecht – London, Springer, 390 p. (2012).

Технология обработки спутниковых данных Landsat 8 для восстановления потерянной информации при вычислении температуры поверхности

Матузко Александра Константиновна

ФИЦ КНЦ СО РАН

Применения спутниковых данных для анализа исследуемой территории позволяет решать задачи по анализу городских территорий. Использование данных тепловой съемки решает задачи по поиску тепловых особенностей, нахождению территориальных изменений (например, незаконная рубка лесных территорий, образование стихийных мусорных свалок). Эффективность решения задач по анализу территории зависит от качества обработки спутниковых данных [1].

В начале 2021 года стали доступны новые алгоритмы для расчета температуры земной поверхности спутниковых данных Landsat 8, которые получили название 8 Collection 2 Level 2. В них включены новые алгоритмы атмосферной коррекции, что позволило увеличить точность полученной температуры. Исследование новых данных выявило значительную потерю на территорию города Красноярск, которая составляет около 25% по административной границе города. Такая потеря произошла из-за частичного отсутствия данных ASTER для расчета коэффициента эмиссии, которые были использованы представителями Landsat 8. Подробное изучение алгоритма, используемого при расчете температуры земной поверхности [2], позволило самостоятельно рассчитать потерянные данные при этом сохранить важные показатели атмосферной коррекции и точность полученных значений. Для вычисления коэффициента эмиссии были использованы красный и инфракрасный спектральные каналы Landsat 8. Новый алгоритм основывается на предоставленных значениях Landsat 8 Collection 2 Level 2 теплового излучения (ST_TRAD), восходящего излучения (ST_URAD), прозрачности атмосферы (ST_ATRAN), падающего излучения (ST_DRAD), как показано в формулах (1,2):

$$\text{SurfRad} = \frac{\text{ST_TRAD} - \text{ST_URAD}}{\text{ST_ATRAN}} \quad (1)$$

$$\text{Radiance} = \text{SurfRad} - (1.0 - \epsilon) * \text{ST_DRAD} \quad (2)$$

Полученные данные позволяют проводить расчеты для анализа температурных особенностей на территории города Красноярск. Принимая во внимание особенности территории, подобраны бесснежные и безоблачные сцены. Учитывая, что новый алгоритм вычислений, состоит из 7 шагов, было принято решение о необходимости написания программного продукта для их реализации. Автоматизация процесса позволяет ускорить получение карты температуры земной поверхности на любую территорию, а не только на территорию города Красноярск. Внедрение алгоритма снижает ошибки, которые могут быть выявлены при ручной обработке.

Литература:

[1] Гостева А. А., Матузко А. К., Якубайлик О. Э. Известия высших учебных заведений. Электроника, Т. 26, № 3-4, С. 314-323 (2021).

[2] Laraby, K. Landsat surface temperature product: Global Validation and Uncertainty Estimation. Rochester Institute of Technology: RIT Scholar Works (2017).

Крупномодульное распараллеливание метода Шайдурова средствами библиотеки TPL

Молявко Анна Андреевна

Институт вычислительного моделирования СО РАН

В настоящее время в области биоинформатики основным методом сравнения и поиска в генетических последовательностях является выравнивание (англ. *alignment*). В работе [1] был предложен новый метод сравнения, принципиально отличающийся от выравнивания. В его основе лежит преобразование символьных последовательностей в бинарные и вычисление свёртки последних. Метод был реализован в виде программы на языке программирования C#. Программа была написана с учетом наиболее эффективного использования оперативной памяти. При распараллеливании мы отказались от этого условия и модифицировали часть алгоритма. Пусть T_{seq}^* — время выполнения последовательной программы до модификации, T_{seq} — после модификации. Через T_{seq}^{par} обозначено время выполнения той части программного кода, которая может быть ускорена за счёт распараллеливания; через T_{seq}^{seq} — время выполнения части, которую нельзя ускорить. Очевидно, $T_{seq} = T_{seq}^{par} + T_{seq}^{seq}$, причем T_{seq}^{par} и T_{seq}^{seq} можно явно измерить.

Отметим, что в силу алгоритма крупномодульное распараллеливание для p потоков приводит к сокращению времени T_{seq}^{par} не в традиционные p раз, а в $\frac{1}{K} \left[\frac{K}{p} \right]$, где K — мощность алфавита сравниваемых последовательностей. Поэтому теоретическое время выполнения ускоренной программы, выполняемой p потоками, оценивается как $T_p^{th} = T_{seq}^{seq} + \frac{T_{seq}^{par}}{K} \left[\frac{K}{p} \right]$. Исходя из этого, мы можем вычислить теоретическое ускорение параллельной программы на p потоках по отношению к времени лучшей из последовательных программ: $S_p^{th} = \frac{T_{seq}^*}{T_p^{th}}$.

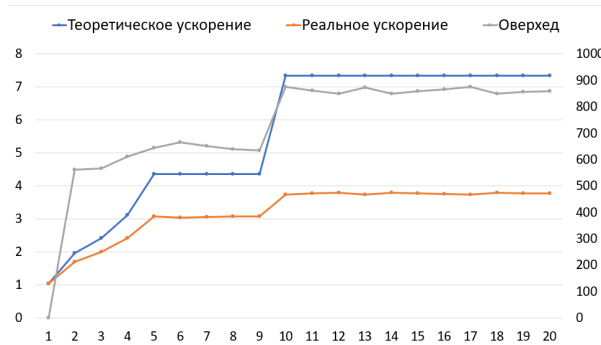


Рис. 1. Зависимость ускорения и времени оверхеда от количества потоков.

Реальное ускорение $S_p = \frac{T_{seq}^*}{T_p}$ оценивается прямым измерением времени выполнения последовательной T_p^{seq} и параллельной T_p^{par} частей программы для каждого $p = 1, \dots, 20$. Поскольку $T_p = T_p^{seq} + T_p^{par} = T_{seq}^{seq} + \frac{T_{seq}^{par}}{K} \left[\frac{K}{p} \right] + T_p^{over}$, мы можем оценить оверхед T_p^{over} (рис. 1).

Работа поддержана Красноярским математическим центром, финансируемым Минобрнауки РФ в рамках мероприятий по созданию и развитию региональных НОМЦ (Соглашение 075-02-2022-873). Автор благодарит Е. Д. Карепову, М. Г. Садовского и В. В. Шайдурова как соавторов работы.

Литература:

[1] Molyavko A., Shaidurov V., Karepova Eu., Sadovsky M., LNBI, vol.12108, pp. 472–481 (2020).

Расчет напряженно-деформированного состояния композитной пластинки с неизвестным положением нейтральной поверхности

Петраков Игорь Евгеньевич

Институт вычислительного моделирования СО РАН

Композитные материалы являются существенно разномодульными, т. е. их поведение при растяжении и сжатии характеризуют разные модули упругости. В работе [1] показано, что для некоторых композитов, армированных стекловолокном, отношение между модулем сжатия к модулю растяжения может достигать восьми.

В работе рассматривается задача расчета напряженно-деформированного состояния многослойной композитной пластинки, по-разному сопротивляющейся растяжению и сжатию, в которой положение нейтральной поверхности заранее неизвестно. С помощью обобщенного реологического метода [2] получены определяющие уравнения и выражения для расчета напряжений через деформации. Численное решение задачи получено с помощью метода конечных элементов и метода начальных напряжений, на каждом шаге которого решается задача минимизации следующего интегрального функционала:

$$J(u) = \frac{1}{2} \iint_{\Omega} \int_{-h/2}^{h/2} \varepsilon : (a + b) : \varepsilon - b : \Pi(\varepsilon^{k-1}) : \varepsilon dx_3 - 2qu dx_1 dx_2 - \int_{\Gamma} \left(Qu + M \frac{\partial u}{\partial n} \right) ds,$$

где u – искомый вектор перемещений в сечении пластины срединной плоскостью Ω , Ω – двумерная область с границей Γ , $q(x_1, x_2)$ – распределенная поперечная нагрузка, $Q(x_1, x_2)$ и $M(x_1, x_2)$ – усилие и изгибающий момент на краях пластинки. Деформации ε вычисляются через перемещения согласно теории пластин Кирхгофа-Лява:

$$\varepsilon_{11} = \frac{\partial u}{\partial x_1} - x_3 \frac{\partial^2 w}{\partial x_1^2}, \quad \varepsilon_{12} = \frac{\partial v}{\partial x_2} - x_3 \frac{\partial^2 w}{\partial x_2^2}, \quad \varepsilon_{12} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial x_2} + \frac{\partial v}{\partial x_1} \right) - x_3 \frac{\partial^2 w}{\partial x_1 \partial x_2}.$$

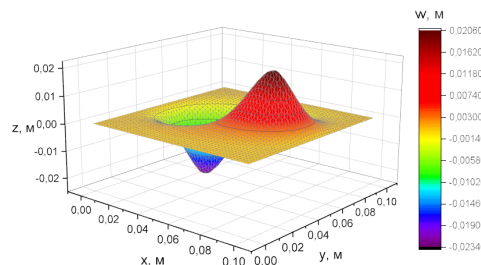


Рис. 1. Изгиб композитной пластинки под действием двух сил.

Проведены вычислительные эксперименты и показано влияние учета разномодульности на полученное решение. На рис. 1 представлены прогибы однослойной пластинки с учетом разномодульности под действием двух противоположно направленных сил.

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

Литература:

[1] Амбарцумян С. А. Разномодульная теория упругости. Москва: Наука, 1982.

[2] Садовская О. В., Садовский В. М. Математическое моделирование в задачах механики сыпучих сред. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008.

JavaScript-библиотека для визуализации пространственных GRID-данных

Пушкарёв Александр Александрович

КНЦ СО РАН

Визуализация GRID-данных является неотъемлемой частью современных интернет-ГИС, как правило в таком формате представлены данные расчетных моделей, используемые в разных сферах деятельности человека: экология, сельское хозяйство и др. Порталы Windy и Ventusky предоставляют своим пользователям данные моделей прогнозирования погоды (ICON, GFS, ECMWF), проекты PolarGlobe и Earth предоставляют 3D-визуализацию [1]. Однако эти проекты не имеют возможности поменять проекцию карты, а данные прошлых лет предоставляют только по подписке.

Метеорологические данные моделей распространяются бесплатно, однако открытые инструменты для визуализации таких данных в веб-браузере не обладают достаточным функционалом. В данной работе представлен программный продукт (JavaScript- библиотека), позволяющий визуализировать GRID-данные в браузере с использованием открытых картографических библиотек, таких как leaflet и openlayers.

Библиотека использует возможности proj4 для преобразования исходных данных к любой проекции «на лету». В основе лежит билинейная интерполяция, позволяющая сгладить исходные данные. Также в API предусмотрены возможности кастомизации раскраски, получения значения в любой точке и создание слоя с числовой визуализацией.

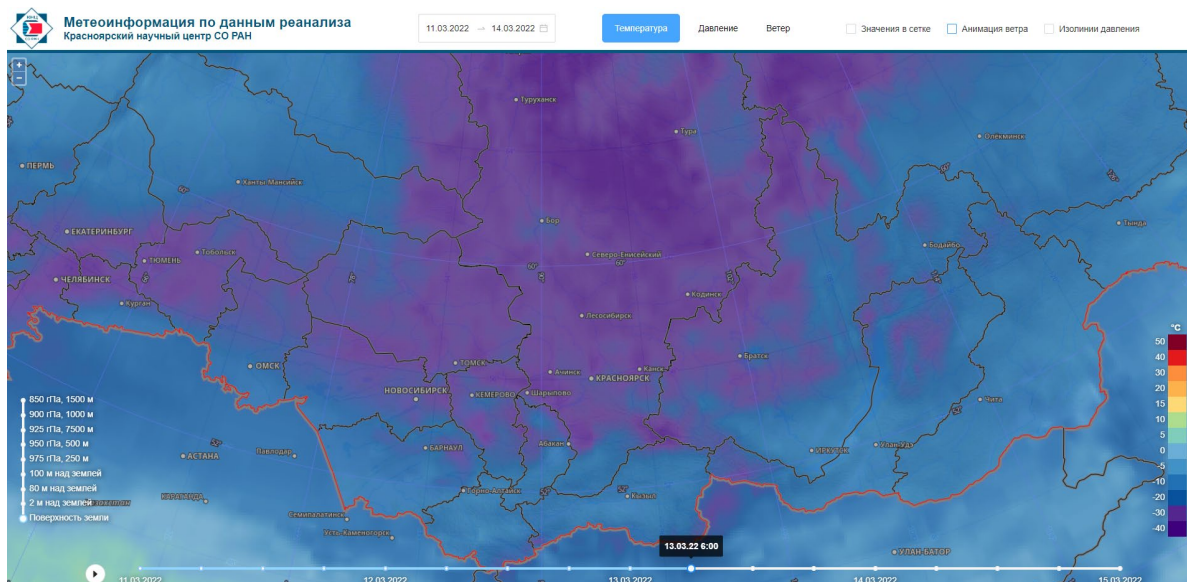


Рис. 1. Слой температуры поверхности земли, сгенерированный в проекции EPSG:3576.

Дальнейшим развитием библиотеки является переход от вычислений на CPU к вычислениям на GPU с применением технологии WebGL [2], что позволит увеличить производительность в несколько раз.

Литература:

- [1] Sizhe Wang, Wenwen Li, Computers, Environment and Urban Systems, V.77 (2019).
- [2] Dongwei Liu, Jie Peng, Yanyu Wang, Meijin Huang, Qianshan He, Yafei Yan, Bingxin Ma, Caijun Yue, Ying Xie, Environmental Modelling & Software, V.114, P.188-194 (2019).

Об отображении ударных процессов в плоскости поляр

Сизаско Всеволод

Институт математики и фундаментальной информатики СФУ

Ударные газодинамические процессы [1] нашли широкое применение в ракетно-космической технике при сверхзвуковых скоростях ($M > 1$). Данное направление получило толчок в 50-ых годах XX века, когда возникали новые научные направления, в частности, физическая газовая динамика, изучающая течение сжимаемого газа со скоростями, превышающими, и высокими температурами.

Особенностью *ударных волн* (УВ) является скачкообразное изменение макроскопических газодинамических параметров потока, таких как давление, плотность, температура и скорость. Принимая во внимание, что УВ имеет толщину порядка средней длины свободного пробега молекул (при атмосферном давлении и выше), она обладает практически нулевой протяженностью. Это позволяет рассматривать её как математический разрыв первого рода, связав конечные параметры такого газодинамического разрыва по его обе стороны локальным условием динамической совместности: условиями Ренкина-Гюгонио или на косом *скачке уплотнения* (СУ) [1-4].

В своей работе Буземан заложил основу графических методов решения задач об интерференции газодинамических разрывов с помощью *ударных поляр* (УП) [3]. Их еще называют сердцевидными кривыми или изомахами. Примерами применения метода УП являются: задача торможения потока до скорости, меньшей скорости звука, а также определение предельного угла, на который косо скачок способен отклонить поток без образования отошедших ударных волн.

Динамика ударно-волнового процесса в случае СУ может быть представлена на ударно-волновой плоскости (зависимость угла поворота потока на СУ от его интенсивности (отношение давления за СУ к давлению до него)). Математический аппарат УП строится на соотношениях Ренкина-Гюгонио и работает в большинстве случаев достоверно даже при моделировании течений вязкого теплопроводного газа при больших числах Рейнольдса, однако имеются исключения при действии нескольких факторов одновременно [5,6]. В случае непрерывного профиля числа Маха количество первичных и/или вторичных УП должно стремиться к бесконечности или, в крайнем случае, равняться удвоенному числу узлов расчетной сетки. Это может внести техническую сложность в процесс графического представления полученных решений. В связи с этим в данной работе осуществлен переход к отображению гладкой трехмерной поверхности (аналогу поляр) – *ударно-волнового поляроида* (термин В. Н. Ускова).

Литература:

- [1] Гриффитс У. Ударные волны. Современная гидродинамика. Успехи и проблемы. М. : Мир, 1984
- [2] Хейз У. Д. Основы теории газодинамических разрывов. Основы газовой динамики. М.: Изд-во иностр. лит., 1963
- [3] Буземан А. Годографический метод газовой динамики. ZAMM. № 17(2), С. 73-79 (1937).
- [4] Адрианов А. Л., Старых А. Л., Усков В. Н. Интерференция стационарных газодинамических разрывов. Новосибирск: ВО «Наука». Сибирская издательская фирма, 1995
- [5] Адрианов А. Л. Математическое моделирование ударных течений идеального и вязкого теплопроводного газа на основе дискретно-аналитического подхода: монография. Красноярск: Сиб. федер. ун-т, 2016
- [6] Адрианов А. Л., Сизаско В. О некорректном представлении ударного процесса на ударных полярах в вязком теплопроводном газе. Сибирский аэрокосмический журнал. Т. 22, № 4, С. 558-567 (2021).

Решение задачи о движении вязкой теплопроводной жидкости в вертикальной трубе в случае стационарного и нестационарного течений

Упорова Алёна Игоревна

Институт вычислительного моделирования СО РАН

В работе рассматриваются задачи, возникающие при моделировании стационарных и нестационарных однонаправленных конвективных течений в вертикальных теплообменниках. Для математического описания течений используется система уравнений конвективного движения в приближении Обербека-Буссинеска. Подстановка определенного вида инвариантных решений ранга три [1] в эту систему приводит к системе уравнений, включающей уравнения Навье-Стокса плоского движения чисто вязкой жидкости (для них известно большое количество точных решений [2], [3]) и систему параболических уравнений.

В стационарном случае рассматриваются краевые задачи, включающие вышеупомянутую систему параболических уравнений и граничные условия первого и второго рода. Эти краевые задачи суть спектральные задачи, и роль спектрального параметра здесь играет постоянный температурный градиент на вертикальных стенках теплообменника. Для прямоугольного и круглого поперечного сечения теплообменника решения получены в аналитическом виде. Найдены критические значения градиента температуры, при которых возникает конвективное течение.

В нестационарном случае исследуется первая начально-краевая задача для системы параболических уравнений. Получена априорная оценка в L_2 и доказана единственность её решения. Для прямоугольного и круглого сечения решение найдено в виде двойных рядов Фурье, а также даны достаточные условия стабилизации с ростом времени решения к покою.

Работа поддержана Красноярским математическим центром, финансируемым Минобрнауки РФ в рамках мероприятий по созданию и развитию региональных НОМЦ (Соглашение 075-02-2022-873).

Литература:

- [1] Andreev V.K., Gaponenko Y.A., Goncharova O.N., Pukhnachev V.V. *Mathematical Models of Convection*. Walter de Gruyter GmbH & Co, KG, Berlin/Boston (2012).
- [2] Пухначёв В.В., *Успехи механики*. №6, С.3-76 (2006).
- [3] Аристов С.Н., Князев Д.В., Полянин А.Д., *Теоретические основы химической технологии*. Т.43, С. 547-566 (2009).

Геоинформационное обеспечение инвентаризации сети теплоснабжения ФИЦ КНЦ СО РАН

Щербакова Анастасия Юрьевна
ФИЦ КНЦ СО РАН

Для обеспечения устойчивой эксплуатации системы теплоснабжения ФИЦ КНЦ СО РАН необходимо формирование единого геоинформационного обеспечения принятия управленческих решений. Одним из примеров является успешно внедренная автоматизированная информационная система учета инженерной инфраструктуры ИВМ СО РАН – «Геопространственная база данных ELSAN» [1]. ELSAN – это картографическая база данных с веб-интерфейсом, которая размещена на геопортале ИВМ СО РАН.

Цель данной работы - это разработка модели геоинформационного обеспечения управления объектами системы теплоснабжения ФИЦ КНЦ СО РАН. Такой программный комплекс позволит техническим специалистам, отвечающим за надежное и бесперебойное обеспечение коммунальными ресурсами микрорайона Академгородок, оперативно осуществлять мониторинг, анализировать, актуализировать состояние инженерных коммуникаций, оптимизировать затраты на проведение ремонтных работ.

Разработка модели геоинформационного обеспечения управления объектами системы теплоснабжения ФИЦ КНЦ СО РАН состоит из следующих основных этапов: создание геобазы данных инвентаризации сети теплоснабжения; создание Веб-интерфейса на геопортале ИВМ СО РАН [2], обеспечивающий доступ к разработанной базе данных.

Создание геоинформационного обеспечения инвентаризации системы теплоснабжения заключается в подготовке актуальных геоинформационных слоев, описывающих пространственное расположение объектов теплоснабжения в виде векторных данных. Источником данных являются существующие планшеты сети теплоснабжения, которые до сих пор хранятся на бумажных носителях, актуальное состояние сетей фиксируется так же на бумажных схемах. Для создания геобазы данных объектов теплоснабжения используется открытая ГИС QGIS [3]. ГИС позволяет послойно организовать пространственные данные, полученная база данных представляет набор отдельных геоинформационных слоев. Алгоритм создания таких слоев заключается в сканировании бумажных планшетов в растровый формат; геопривязке растровых планшетов к единой системе координат; оцифровке всех объектов сети теплоснабжения (участки тепловых сетей и тепловые камеры). Далее для каждого объекта сети теплоснабжения заполняется подробная информация (данные технических паспортов: год ввода в эксплуатацию, параметры инженерных сетей, год проведения последнего капитального ремонта, срок следующего осмотра и ремонта), с учетом обновления базы данных не реже двух раз в год после проведения плановых технических обследований.

В перспективе, по аналогии полученной модели геоинформационного обеспечения системы теплоснабжения планируется создать геобазы данных для инженерных коммуникаций ФИЦ КНЦ СО РАН, таких как сети электроснабжения, водоснабжения и водоотведения.

Литература:

- [1] Инженерная инфраструктура здания ИВМ [Электронный ресурс] / <http://gis.krasn.ru>
- [2] Кадочников А. А., Якубайлик О. Э., Вестник. НГУ. Серия: Информационные технологии. Т.12, С. 23–31 (2014).
- [3] Ерунова М. Г. Географические информационные системы и земельно-информационные системы, С. 356 (2010).

Секция «Школы РАН»

***Анализ качества мёда реализуемого на территории Красноярского края
Черных Д., Ткавашвили К., Радзюк Н., Рабинович Ю., Новожилов Е., Гайдашева И.И.
МАОУ Гимназия № 13,
Научно-исследовательский испытательный центр КрасГАУ,
ФИЦ КНЦ СО РАН***

Пчелиный мёд является продуктом переработки медоносными пчёлами нектара или пади, представляющий собой полезную и диетическую сиропобразную жидкость или закристаллизованную массу с приятным вкусом и ароматом. Мёд является сырьем для производства целого ряда пищевых продуктов. Он характеризуется высокими питательными, лечебно-профилактическими и бактерицидными свойствами. Сегодня, пчеловоды предлагают большое количество мёда, разнообразного по ботаническому происхождению. Нектар может быть собран со множества мест: с лиственных и хвойных деревьев, одуванчиков, шалфея, кустарников и др. Но мёд созревает достаточно долго, объемы меда очень зависят от погодных условий, от состояния пчелиного семейства и еще ряда важных факторов. Поэтому актуальной проблемой является то, что некоторые пасечники, в ущерб качеству мёдадобавляют в продукт муку, крахмал, сахарную и крахмальную патоку, воду, также кормят пчел сахарным сиропом, вместо нектара и пыльцы, собирают мёд раньше срока, не давая ему созреть. После этого мёд теряет свои полезные свойства и даже может быть опасным для здоровья. Такой продукт является фальсификатом и не может быть допущен к продаже. Жители нашего Края в большом количестве покупают мёд у пасечников с частных пасек и малых хозяйств, потому что считают, что мёд там натуральный и полезный, без добавок. Поэтому мы выдвинули *гипотезу*, что мёд с частной пасеки является более качественным, чем тот который продаётся в магазине. Таким образом, **целью работы** стало исследование качественных показателей мёда, реализуемого на рынке Красноярского края.

Объектами исследования являлись четыре образца мёда, купленные на частных пасеках и два образца, купленные в супермаркете: горный мёд с Алтайской пасеки, цветочный мёд с Алтайской пасеки, цветочный мёд "ООО ТД Воял", гречишный мёд с Красноярской пасеки, мёд разнотравье с пасеки Красноярского края, цветочный мёд "ООО МЕДОВЫЙ ДОМ".

Материалы и методы. Для анализа качества мёда каждый образец исследовали на влажность, кислотность, диастазное число, содержание инвертированного сахара, содержание искусственно инвертированного сахара, примеси крахмальной и свекловичной патоки и фальсификация мёда мукой и крахмалом. Влажность определяли рефрактометрическим методом с использованием рефрактометра. Кислотность и наличие инвертированных сахаров определяли методом титрования. Диастазное число, содержание искусственно инвертированного сахара, примесей крахмальной и свекловичной патоки, муки и крахмала определяли с использованием качественных химических реакций.

Результаты. В результате нашего исследования мы сравнили качественные показатели меда, реализуемого на рынке Красноярского края. Горный мед с Алтайской пасеки показал себя как натуральный продукт, без добавок, но у этого экземпляра наблюдается повышение рН, что может быть следствием его неправильного хранения у потребителя. Цветочный мёд с Алтайской пасеки показал себя как натуральный продукт, без добавок. Цветочный мёд «ООО ТД Воял» является фальсификатом, в нём присутствует добавление искусственного сахара и крахмальной патоки. Гречишный мёд с Красноярской пасеки оказался фальсификатом, с добавлением искусственного сахара, в самом образце наблюдалось расслоение на жидкую темную фазу и более плотную светлую -это говорит о том, что мед очень старый. Мёд разнотравье с Уярской пасеки оказался натуральным продуктом, без добавок. Цветочный мёд «ООО МЕДОВЫЙ ДОМ» является фальсификатом - продуктом с добавлением искусственного сахара и крахмальной патоки.

Заключение. Исходя из результатов проведённых исследований мы установили, что большинство экземпляров, взятые с частной пасеки, показали себя как натуральный продукт, а купленные в супермаркете как фальсификат. К сожалению, и крупные производители, и пасечники перегревают мёд с целью скрыть добавление старого мёда или его незрелость, чем сильно снижают его диетические и лечебные свойства.

Выражаем благодарность куратору, к.б.н, научному сотруднику НИИЦ КрасГАУ Гайдашевой И.И. и научному руководителю, к.б.н. НИИ МПС ФИЦ КНЦ СО РАН Смольниковой Марине Викторовне.

Витамины в питании современного школьника

Махмудова В., Васильева Д., Осинский Р., Берштейн К., Завьялов Б., Хачатрян Е., Колосова Е.М.

МАОУ Гимназия № 13

Сибирский федеральный университет

ФИЦ КНЦ СО РАН

В Российской Федерации преобладает традиционный тип питания, однако наблюдается тенденция к переходу к современному типу, отличающемуся частыми перекусами и использованием готовых блюд, что связано с усилением урбанизации. Из негативных изменений также отмечаются не соблюдение режима питания и недостаточное потребление мясных и рыбных продуктов, из-за чего наблюдается недостаток не только основных нутриентов, но и витаминов, что, в свою очередь, может негативно повлиять на здоровье организма, особенно школьного возраста. Поэтому **целью работы** являлась оценка качества питания современного школьника с точки зрения витаминного состава.

Материалы и методы исследования. Опросили 47 человек в возрасте от 7 лет и старше, связанный с пищевыми привычками и общими знаниями о витаминах. Заполняли дневники потребления пищи в течение недели, вычисляли содержание витаминов в пище согласно справочным данным и рассчитывали процент потребления от суточной нормы. Провели качественные химические реакции на содержание витаминов в продуктах питания (реакция на витамин С с метиленовой синью, реакция на витамины Е, Р и В₆ с FeCl₃).

Результаты. Большинство респондентов придерживаются традиционного типа питания, включающего каши, супы и салаты. При этом каждый день употребляют фрукты и/или овощи 42,6% школьников. Кроме того, респонденты продемонстрировали хорошие знания о витаминах и их значении для поддержания здоровья организма человека.

В результате расчета количества потребляемых витаминов с пищей показано, что нормы суточного потребления труднодостижимы. Обычно школьник получает менее 50% от суточной нормы витаминов. Так, у одного из испытуемых удалось достичь нормы потребления только витамина В₃ (среднесуточная концентрация составила 107,85% от нормы). Минимальная получаемая концентрация – 5% от суточной нормы – наблюдалась для витаминов D и К. Можно резюмировать, что средний по всем витаминам дефицит составил около 70%. Для коррекции пищевого поведения было составлено сбалансированное по содержанию витаминов меню. Так, в дневной рацион вошли пшеничная каша на молоке, йогурт, свиная корейка с овощами, салат из фруктов и ягод, компот из инжира, треска с запеченным картофелем, морковью и кукурузой.

В результате проведенных качественных химических реакций показано, что в белке куриного яйца содержится больше витамина Е, чем в подсолнечном и оливковом маслах. Рутин (витамин Р) присутствовал в зеленом чае, не зависимо от того, какой водой он был заварен (холодной или горячей). Кроме того, картофель из магазина содержал такое же количество витамина В₆, как и картофель, выращенный в личном подсобном хозяйстве.

Заключение. Результаты, полученные в данной работе, свидетельствуют о том, что для гармоничного развития и поддержания здоровья молодого организма необходимо уделить большее внимания потреблению продуктов, богатыми витаминами и/или вводить в употребление биологические активные добавки.

Выражаем благодарность нашему куратору м.н.с. лаборатории билюминесцентных биотехнологий СФУ Колосовой Елизавете Маратовне и научному руководителю, к.б.н. НИИ МПС Смольниковой Марине Викторовне

Питьевая вода в рационе ученика средней школы

Денин С.С., Зуевский Е.М., Калинина Е.А, Проскурдин Б. Д., Фомина С.К., Яндер Я.О., Копылова К.В.

Гимназия №13 «Академ»

ФИЦ КНЦ СО РАН

Ученики средней школы находятся в возрастном периоде от 11 до 16 лет. В данном возрасте необходимо достаточное поступление минеральных солей для обеспечения нормального развития скелета и обмена веществ. Помимо продуктов питания источником минеральных элементов в рационе является питьевая вода. Однако стремительно растущие потребности населения и возрастающее количество промышленных производств способствуют загрязнению окружающей среды. Перенос химических соединений в питьевую воду вызывает большую озабоченность в связи с потенциальными рисками для здоровья. Целью работы является оценка безопасности питьевой воды, употребляемой учениками средней школы Гимназии №13 "Академ". Для достижения этой цели были поставлены задачи: а) разработать, провести и проанализировать результаты опроса об употреблении питьевой воды среди учеников средней школы; б) оценить безопасность выявленных по результатам опроса источников питьевой воды с помощью биOLUMиНесцентного метода.

В качестве тест-объекта была использована биферментная система светящихся бактерий НАДН: ФМН-оксидоредуктаза и люцифераза (R + L) в иммобилизованном виде в составе реагента «Энзимолюм». Анализ изменений активности ферментов в присутствии и отсутствие анализируемых веществ проводили оптическим методом с помощью люминометра LumiShot.

Для выявления наиболее популярных источников питьевой воды среди учеников средней школы был проведен социологический опрос, в котором приняли участие 32 человека. Среди опрошенных 42% не берут с собой воду из дома для употребления в течении дня, а пользуются водой из питьевого источника в школе. В связи с этим был проведен анализ влияния на систему светящихся бактерий и образца школьной питьевой воды (рисунок).

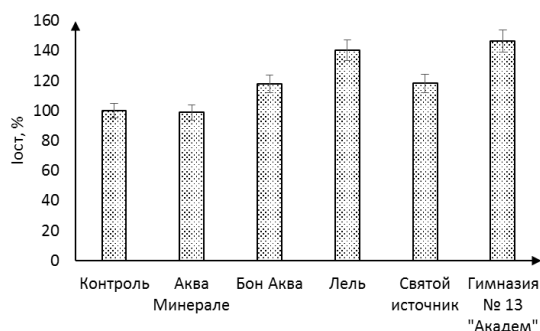


Рисунок – Остаточная интенсивность свечения биOLUMиНесцентной тест-системы в присутствии образцов питьевой воды.

Таким образом, из данных на рисунке видно, что образцы «Аква Минерале», «Бон Аква» и «Святой источник» являются условно безопасными. При этом образец воды из питьевого источника школы и «Лель» стимулируют свечение ферментной системы более чем на 20% процентов и не могут считаться условно безопасными для употребления.

Выражаем благодарность нашему куратору – инженеру лаборатории радиоэкологии ИБФ ФИЦ КНЦ СО РАН Копыловой Ксении Васильевне и научному руководителю – к.б.н. НИИ МПС ФИЦ КНЦ СО РАН Смольниковой Марине Викторовне.

Влияние сна на успеваемость учеников классов РАН г. Красноярск
Галинова С., Костылева Д., Букин Д., Шарыпов М., Панько Т., Ухова Д.,
Селиванов К., Меркулова Д., Римацкая Н.В.

МАОУ Гимназия № 13

Институт фундаментальной биологии и биотехнологии СФУ
ФИЦ КНЦ СО РАН.

Сну присущи такие функции как: естественная перезагрузка всего тела, увлажнение защиты от бактерий и вирусов, улучшение памяти, запуск метаболизма, нормализация гормонального фона и другие. Качественный сон крайне необходим нашему организму, и сильно влияет на состояние человека, в особенности школьника. Нарушения сна часто встречаются у подростков школьного возраста. Одной из причин этого является рассогласование между социальной и биологической активностью школьников. Известно, что у подростков с поздним типом суточного ритма (хронотипом) успеваемость ниже. **Целью работы:** оценка взаимосвязи качества и других особенностей сна и академической успеваемости школьников классов РАН г. Красноярск.

Материалы и методы. В исследование были включены 69 участников в возрасте от 12 до 17 лет (средний возраст $14,85 \pm 1,05$), учеников 8-10 классов проживающих в г. Красноярск. Для опроса использовали Google – формы для оценки основных параметров учащихся, их успеваемости и параметров сна: рост, вес, возраст (для определения хронотипа); средний бал успеваемости, физические и умственные нагрузки, время отхода ко сну и время пробуждения. Для эксперимента и наблюдения использовали «умные» часы – пульс, и другие параметры, видеочамера для исследования дневного сна. Для исследования дневного сна и его качества был проведен модельный эксперимент в мебельном салоне. Участие принимали 2 ученика 8 РАН класса: Костылева Дарья и Панько Тимофей, они в течение часа спали под наблюдением камер в мебельном салоне, видеосюжеты осматривали, и в результате оценивали фазы сна по движениям зрачка.

Результаты.

Анализ ночного сна, показал, что после 22.00 ложатся спать 92,0% мальчиков и 96,0% девочек; ночной сон продолжительностью менее 7 ч отмечают 7,7% мальчиков и 25% девочек, а субъективно недостаточную продолжительность сна отмечают 38% мальчиков и 51% девочек. При этом средний балл успеваемости у мальчиков $4,14 \pm 0,43$ при среднем количестве часов сна $7,73 \pm 0,43$, а у девочек $4,40 \pm 0,43$ при среднем количестве сна $7,73 \pm 0,97$.

В результате исследования дневного сна было показано, что в данной возрастной категории его наличие не влияет на успеваемость. Участники модельного эксперимента наглядно увидели, как меняется мимика лица при изменении фазы сна. По данным видео можно сделать вывод, что сон у Тимофея был спокойный, т.к. его зрачки двигались в среднем темпе, и у него сменилось 2 фазы быстро сна. У Дарьи сон был беспокойный и фаза быстро сна сменилась трижды.

Также были исследованы хронотипы, 80% участников исследования относятся к «голуби» — слабый ранний и нормальный подъем, это тип имеет наибольшее соответствие к современным социальным условиям. Многие из опрошенных вынужденно встают в ранний промежуток времени, поэтому соответствуют хронотипу «голубь». Для точного определения хронотипов, необходимо пронаблюдать подъем и отход ко сну во время каникулярного времени.

В результате исследования было показано, что успеваемость зависит от количества часов ночного сна, чем больше часов школьник спит, тем лучше оценки.

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

Генетическая предрасположенность человека к многофакторным заболеваниям

Дворянкина Д., Мордвинова Е., Симутина А., Сошина К., Малинчик М.А.
Гимназия № 13 «Академ», ФИЦ КНЦ СО РАН

Многофакторные заболевания (МФЗ) – заболевания, развитие которых опосредуется влиянием неблагоприятных факторов окружающей среды и генетическими особенностями индивида [1]. Эти заболевания представляют собой глобальную социально-экономическую проблему, поскольку значительно снижают жизнедеятельность человека, способствуют развитию ранней инвалидизации, а также ухудшают качество жизни людей [1, 2]. К многофакторным заболеваниям относятся различные заболевания органов дыхания, сердечно-сосудистой системы, желудочно-кишечного тракта и обмена веществ. Было установлено, что чаще всего за генетическую предрасположенность отвечают однонуклеотидные полиморфизмы [2]. Однако наличие мутации не всегда приводит к развитию заболевания, но в совокупности с неблагоприятными факторами окружающей среды вероятность заболеть возрастает.

Целью данного исследования было изучить полиморфные гены цитокинов-иммуномодуляторов, вовлеченных в патогенез многофакторных заболеваний.

Объектами исследования являлись взрослые и дети популяции г. Красноярск, которые по результатам анкетного опроса имеют гипертонию (n=16), аритмию (n=5), хронический гастрит (n=13), хронический холецистит (n=3), бронхиальную астму (n=4), хронический бронхит (n=3), заболевания обмена веществ (n=16), а также дети, составившие группу контроля (n=50). Материалом исследования послужила ДНК, выделенная сорбентным методом из буккального эпителия. Генотипирование rs2070874 *IL4*, rs1800896 *IL10*, rs7044343 *IL33*, rs1800630 *TNFα* проведено с применением метода ПЦР в режиме реального времени.

Результаты. Было установлено, что частоты аллелей исследуемых полиморфизмов генов цитокинов в контрольной группе соответствуют распределению таковым в европеоидных популяциях. Анализ распространенности аллелей *IL4* rs2070874 показал преобладание аллеля Т у больных гипертонией, хроническим гастритом и заболеваниями обмена веществ (69,2%, 62,5% и 66,7%, соответственно). Анализ распространенности аллелей *IL10* rs1800896 показал, что у гипертоников и пациентов с заболеваниями обмена веществ выше частота аллеля Т (71,4% и 55,6%), а у пациентов с хроническим гастритом – аллеля С (77,8%). Анализ распространенности аллелей *IL33* rs7044343 показал преобладание аллеля С в группе с заболеваниями обмена веществ (53,8%), аллеля Т в группе с хроническим гастритом (83,3%). Анализ распространенности аллелей *TNFα* rs1800630 показал, что пациенты с гипертонией и заболеваниями обмена веществ имеют повышенную частоту аллеля С (60,0% и 75,0%, соответственно).

В настоящем исследовании были представлены пилотные данные по распределению частоты генотипов полиморфизмов *IL4* rs2070874, *IL10* rs1800896, *IL33* rs7044343, *TNFα* rs1800630 у больных гипертонией, хроническим гастритом, заболеваниями обмена веществ на популяции г. Красноярск, не имеющие аналогов в нашем крае. Для получения статистически значимых результатов в распределении генов планируется увеличение выборки больных изучаемых патологий.

Работа выполнена на базе НИИ медицинских проблем Севера. Выражаем искреннюю благодарность за помощь в осуществлении работы нашему куратору м.н.с Малинчик М.А. и научному руководителю к.б.н. Смольниковой М.В.

Литература:

- [1] Duarte C.W. [et al.], Elsevier, PP. 1–15 (2013);
- [2] Kere J. [et al.], Duodecim. V. 126, № 19, PP. 2305-2310 (2010).

Определение содержания кофеина в энергетических напитках методом высокоэффективной жидкостной хроматографии (ВЭЖХ)

Пахомова Ксения Андреевна, Петрухина Вера Сергеевна

МАОУ «Лицей №7 им. Героя Советского Союза Б.К. Чернышева»

Институт химии и химической технологии СО РАН

Кофеин является алкалоидом, имеющим вид кристаллического белого порошка без запаха, горьковатого на вкус. Несомненно, кофеин уже давно используется человечеством, так как было доказано, что он подавляет расслабление, повышает внимание и скорость реакции. Но в то же время кофеин является стимулятором, который может вызывать привыкание и при передозировке начинают проявляться пагубные для организма последствия: учащенное сердцебиение, повышенная тревожность и другие. Полезно знать, что кофеин содержится не только в кофе, но и встречается в таких продуктах, как черный и зеленый чай. Так же в настоящее время популярность набирают такие продукты, как энергетические напитки. В их состав входят витамины, аминокислоты, углеводы, а также кофеин. Поскольку все больше фирм-производителей появляется на рынке, что приводит к усилению конкуренции, производители энергетических напитков стремятся выделить свою продукцию, забывая о ее качестве.

На основании вышесказанного была сформулирована цель данной работы: определение содержания кофеина в энергетических напитках методом высокоэффективной жидкостной хроматографии.

Для выполнения данной работы случайно было выбрано семь образцов. Проведя необходимую пробоподготовку, был проведен хроматографический анализ, результаты которого представлены далее (рис. 1, табл. 1).

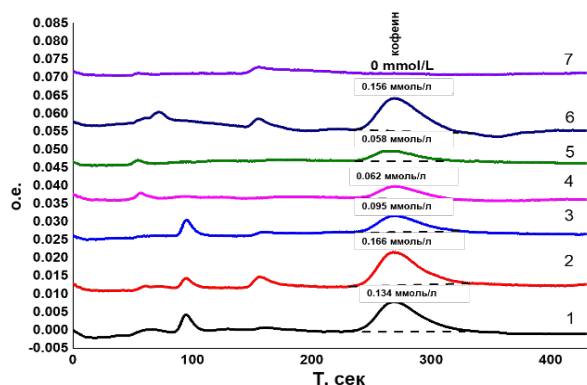


Рис. 1. Хроматограммы образцов энергетических напитков: (1) Gorilla energy; (2) Tornado energy; (3) Drive; (4) Pepsi Cola; (5) Coca Cola; (6) Adrenaline rush; (7) Schweppes.

Обработав полученные результаты хроматограмм, установлено, что образец под №7 (Schweppes) хоть и заявлен как тонизирующий, но кофеин не содержит. Важно отметить, что производитель и не указывает его наличие в составе напитка. Предполагается, что тонизирующие действие Schweppes осуществляет за счет других компонентов (сахар, витамины группы В и др.). Образец под №3 (Drive) показал пониженное значение кофеина (18,45 мг/100 мл) в сравнении с заявленным производителем (30 мг/100 мл). Полученные результаты приводят к выводу, что полученные данные могут быть использованы службами контроля продукции, чтобы минимизировать попадание фальсификатов на прилавки потребителей.

Работа выполнена с использованием оборудования и реактивов ИХХТ СО РАН и КР ЦКП ФИЦ КНЦ СО РАН. Благодарность научному руководителю: Боровковой Валентине Сергеевне.

Таблица 1. Результаты ВЭЖХ анализа.

Номер образца	Марка образца	ммоль/л	мг/100 мл	Заявленное производителем мг/100 мл
1	Gorilla energy	0.134	26.22	30
2	Tornado energy	0.166	32.24	30
3	Drive	0.095	18.45	30
4	Pepsi Cola	0.062	12.40	11
5	Coca-Cola	0.058	11.27	11
6	Adrenaline rush	0.156	30.29	30
7	Schweppes	0	0	0

Получение эфирного масла Помело и его антиоксидантная активность

Баева А., Котова К.

МАОУ «Лицей №7 им. Героя Советского Союза Б.К. Чернышева»

Институт химии и химической технологии СО РАН

В наше время существуют такие заболевания, как диабет, атеросклероз, инфаркт миокарда, лучевая болезнь, рак. Они появляются из-за нарушений в регуляции свободнорадикальных процессов, происходящих в организме. Количество свободных радикалов возрастает из-за снижения эффективности естественной антиоксидантной системы, вызванной воздействием радиации, курения, алкоголя, постоянных стрессов, некачественного питания, лекарственных препаратов. Система антиоксидантной защиты в организме работает до определенного времени. Чтобы способствовать её работе, необходимо употреблять в пищу природные пищевые добавки. Помело – богато витаминами. А эфирные масла славятся положительным воздействием, как на отдельные органы, так и на весь организм в целом [1].

Цель работы: Получить эфирное масло Помело и определить его антиоксидантную активность (АОА).

Выделение эфирного масла помело проводили методом гидродистилляции в течение 12 часов. Для экстракции использовали внутреннюю и внешнюю (цедра) кожуру помело (*Citrus maxima*). Компонентный анализ полученных эфирных масел проводили методом хромато-масс-спектрологии на приборе Agilent 7890А. В таблице 1 представлены основные компоненты эфирных масел помело.

Таблица 1. Основные компоненты эфирного масла помело.

Компонент	Кожура	Цедра	Внутр. часть
	Содержание компонентов, %		
β -Myrcene	1,51	9,14	1,16
D-Limonene	88,32	82,65	24,03
furanolinalool oxide, trans-	1,02	0,38	9,3
Caryophyllene	1,4	0,34	-
Nootkatone	3,92	4,71	36,45

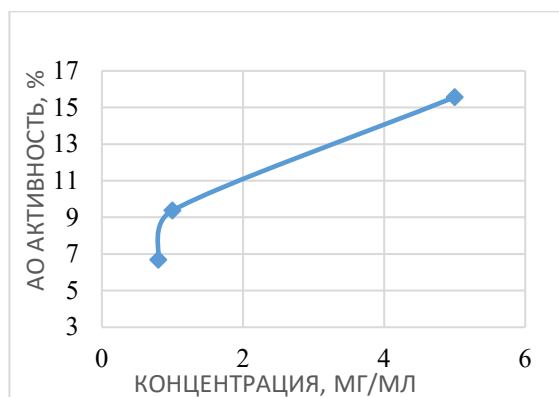


Рис. 2. Зависимость АОА эфирного масла Помело от концентрации.

Антиоксидантная активность эфирных масел исследована на модельном соединении ДФПГ. Установлена зависимость антиоксидантной активности от концентрации эфирных масел (рис. 2).

Таким образом, в результате работы выделены эфирные масла из различных частей кожуры помело, исследован их состав и определена антиоксидантная активность, составляющая до 17% при концентрации 5мг/мл эфирного масла.

Выражаем благодарность нашему наставнику к.х.н., с.н.с. Ю.Н. Маляру за помощь в реализации общего проекта.

Литература:

[1] Савельева Е.Е., Ефремов А.А. Вестник Красноярского государственного аграрного университета 2017, с. 141-147.

[2] Тринеева О.В. Разработка и регистрация лекарственных средств 2017, с. 180-197

Определение антибиотиков в мясе методом ВЭЖХ.

Безьязикова С., Алещенко Я.

МАОУ «Лицей №7 им. Героя Советского Союза Б.К. Чернышева»

Институт химии и химической технологии СО РАН

Антибиотики — это вещества, широко применяющиеся в качестве препаратов для лечения инфекций. Со временем ученые создали много различных антибиотиков, а бактерии приобрели устойчивость ко многим из них. Чрезмерное использование антибиотиков в животноводстве отчасти в этом виновато. Их присутствие в мясе может спровоцировать аллергические реакции или нарушение кишечной микрофлоры [1]. Постоянное употребление такого мяса может привести к распространению резистентности к антибиотикам. Таким образом, нашей целью являлось количественное и качественное определение некоторых антибиотиков в мясе говядины и курицы и оценка соответствия качества продукции согласно нормативам содержания антибиотиков в мясе.

Для исследования мы взяли 12 антибиотиков. Брали каждый, измельчали его, растворяли, а затем фильтровали. Полученные растворы антибиотиков анализировали на жидкостном хроматографе МилиХром А-02. Из 12 образцов антибиотиков нам удалось получить 4 четких хроматограммы. Одна из них представлена на рисунке 1.

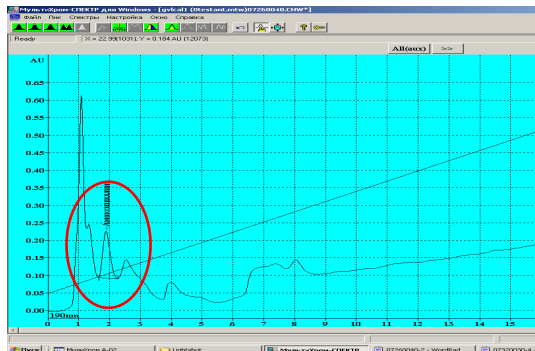
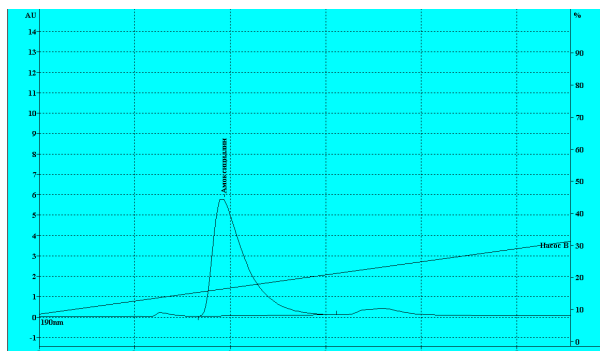


Рис.1. Хроматограмма амоксициллина

Рис.2. Хроматограмма экстракта говяжьей печени

Нашими образцами были говяжья грудинка, куриная грудка, куриная печень, говяжья печень. Анализируемую пробу измельчали, экстрагировали антибиотики, центрифугировали экстракты и снимали хроматограммы образцов мяса. Проанализировав полученные образцы методом ВЭЖХ, удалось обнаружить в одном из образцов амоксициллин. Хроматограмма образца говяжьей печени после пробоподготовки представлена на рисунке 2.

Сравнивая время выхода веществ, можно практически на 100% утверждать, что вещество в анализируемой пробе соответствует антибиотику амоксициллин. Исходя из площади пиков исходного образца амоксициллина (20 г/л), в образце говяжьей печени концентрация антибиотика составила 0,31 г/л. С учетом всех разбавлений на 1 кг говяжьей печени приходится около 0,8 г антибиотика амоксициллина. Согласно нормативам содержания лекарственных средств в мясе, содержание амоксициллина в печени не должно превышать 0,05 мг/кг.

Настолько огромное превышение антибиотика в мясе может быть связано с тем, что животному давали данный антибиотик вплоть до забоя. Скопившийся антибиотик в печени не успел выйти из организма. На практике за две недели до забоя прекращают давать животному антибиотики.

Выражаем благодарность руководителю группы к.х.н., с.н.с Д.В. Кузьмину.

Литература:

[1]. А. Н. Панин и др., Ветеринария и зоотехния: ветеринария №5,2017,С.18-24.

Анализ содержания витамина С в апельсинах при изменении условий хранения

Бери Д. А., Семиёшина А. П.

МАОУ «Лицей №7 им. Героя Советского Союза Б.К. Чернышева»

Институт химии и химической технологии СО РАН

Аскорбиновая кислота – органическое соединение, выполняющее и регулирующее массу функций организма. [1] Биохимически активен один из изомеров – витамин С, который в большом количестве содержится в цитрусовых. Лидером по содержанию данного изомера является апельсин.

Поскольку многие хранят их в разных условиях, не задумываясь какой из факторов влияния окружающей среды будет наименее разрушительным для витамина С. Целью работы было проанализировать и сравнить содержания витамина С в апельсиновом соке в зависимости от различия в условиях хранения.

Для анализа был выбран метод йодометрического титрования, поскольку аскорбиновая кислота легко окисляется йодом. Пробы свежевыжатого апельсинового сока были помещены в особые условия хранения: прохлада, темнота, теплое и солнечные места на двое суток, а одна была протитрована в качестве образца для сравнения.

По итогам повторного титрования проб спустя два дня (Рис. 1) было выявлено, что наиболее разрушительными являются такие условия хранения как тепло и солнечный свет.

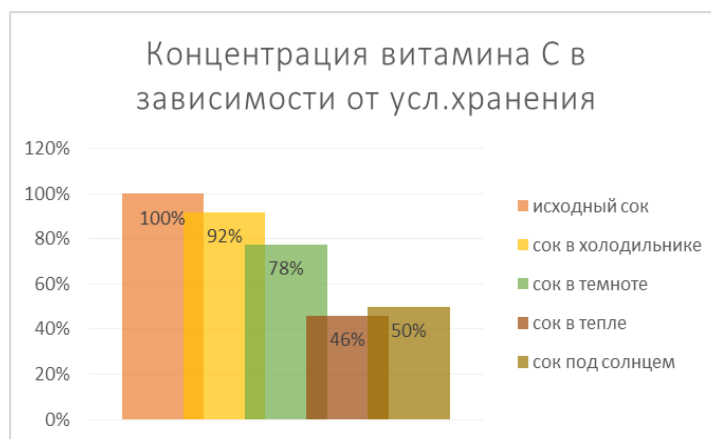


Рис. 1. Концентрация витамина С в зависимости от условий хранения по итогам повторного титрования спустя 2 дня (%)

Таким образом, было показано, что наилучшую сохранность витамина С обеспечивают прохлада и темнота. Рекомендовано употреблять свежевыжатый апельсиновый сок, т.к. он еще не подвержен влиянию внешних факторов.

Работа выполнена при ИХХТ СО РАН ФИЦ КНЦ СО РАН. Научный руководитель Мирошникова А.В.

Литература:

1. Шаповалова Е.М. Биологические науки, выпуск №4(58) 2017.

Определение качества молока

Бударина Татьяна

МАОУ «Лицей №7 им. Героя Советского Союза Б.К. Чернышева»

Институт химии и химической технологии СО РАН

Молоко – это полноценный и полезный продукт питания. Оно содержит все необходимые для жизни питательные вещества. Естественное назначение молока в природе заключается в обеспечении питанием молодого организма после рождения. Молоко – самый распространенный продукт питания в современном обществе.

В последнее время все большую актуальность на рынке производства приобретает проблема несоответствия качества установленным критериям.

Актуальность работы определяется возросшей необходимостью потребителей правильного выбора молочной продукции среди широкого ассортимента, представленном на потребительском рынке.

Целью данной работы является исследование качества молока различных производителей, реализуемого на потребительском рынке города Красноярск.

В данной работе было проанализировано 4 образца молока: ООО «Нарада» (г. Красноярск), АО «Солгон» «Провинция Солгон», ООО «АгроНик» «Никольское здоровье», АО «Искра» «Молоко отборное». В результате нашего исследования качество молока было проверено по 5 показателям. Результаты представлены в таблице 1.

Таблица 1. Результаты исследования молока.

Образец меда	ООО «Нарада»	АО «Солгон» «Провинция Солгон»	ООО «АгроНик» «Никольское здоровье»	АО «Искра» «Молоко отборное»
Показатель				
Наличие крахмала	-	-	-	-
Наличие соды	+	-	-	-
Разбавленность	Не разбавлено	Не разбавлено	Не разбавлено	Разбавлено на 20%
Титруемая кислотность, °Т	18 (первый сорт)	17 (высший сорт)	16 (высший сорт)	19 (первый сорт)
Заявленное содержание бека, %	2,8	2,8-3,1	2,8	2,8
Определенное содержание белка, %	2,83±0,14	2,69±0,14	2,75±0,14	2,89±0,14

В результате установлено, что крахмал не обнаружен во всех образцах молока. Наличие соды наблюдается только в образце молока ООО «Нарада». В результате опыта на степень разбавленности молока установлено, что образец АО «Искра» «Молоко отборное» разбавлен на 20%.

Определена титруемая кислотность молока. В результате установлено, что образцы АО «Солгон» «Провинция Солгон» и ООО «АгроНик» «Никольское здоровье» относятся к высшему сорту молока, а ООО «Нарада» и АО «Искра» «Молоко отборное» - к первому сорту. Спектрофотометрическим методом определено содержание белка в молоке, в результате установлено, что все образцы соответствуют заявленным характеристикам.

В результате проведенного исследования установлено, что два образца полностью соответствуют критериям проверки, это АО «Солгон» «Провинция Солгон» и АО «Искра» «Молоко отборное».

Спектрофотометрическое определение формальдегида в косметических средствах

Важничая В., Студеникина А.

МАОУ «Лицей №7 им. Героя Советского Союза Б.К. Чернышева»

Институт химии и химической технологии СО РАН

В наше время косметическая продукция получила широкое распространение. Состав её богат и разнообразен, но к сожалению не все присутствующие в ней вещества являются безопасными для здоровья. Одним из таких веществ является формальдегид.

У производителей косметических средств стоит задача подобрать оптимальные концентрации формальдегида или формальдегид-релизеров, для того чтобы обеспечить сохранность продукта на протяжении всего срока хранения. Иногда встречаются случаи, когда покупатели жалуются на аллергию или недомогание после применения того или иного косметического средства. Поэтому, актуальной задачей является постоянный контроль за содержанием компонентов, потенциально опасных для здоровья человека.

Таким образом, целью нашей работы было количественное и качественное определение формальдегида в выбранных образцах косметики и оценка соответствия качества исследуемой продукции нормам содержания формальдегида в косметике.

Объектами исследования были яичный шампунь Vilsen здоровье от природы, шампунь от перхоти КЕРА-НОВА и термозащитный спрей ЕСО.

Качественно наличие формальдегида определяли по реакции серебряного зеркала.

Для количественного определения формальдегида сначала приготовили основной раствор, из которого далее готовили рабочий и градуировочные растворы с последующим построением градуировочного графика (рис 1). Оптическую плотность измеряли при длине волны 420 нм. [1]

После пробоподготовки по градуировочному графику находили концентрацию формальдегида в исследуемых образцах. Данные представлены в таблице 1.

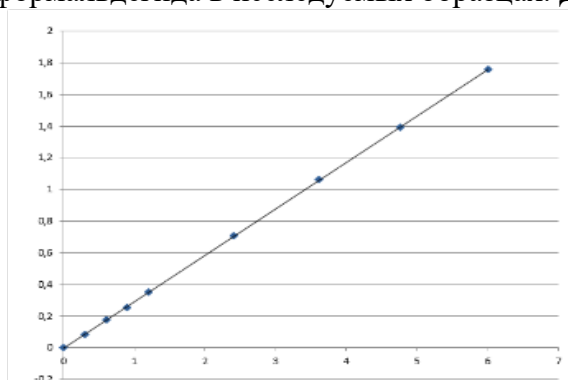


Таблица 1. Содержания формальдегида в объектах исследования

Объекты	А, оптическая плотность	Концентрация формальдегида	
		С, мг/л	С, %
Шампунь 1	0,35	1,20	0,0006
Шампунь 2	0,51	1,75	0,0009
Термозащита	0,03	0,11	0,0001
ПДК CH_2O в косметических средствах не более 0,2%			

Рис. 1. Градуировочный график.

Зависимость оптической плотности от концентрации формальдегида в растворе.

Во всех образцах содержится формальдегид, но его количество значительно меньше предельно допустимой концентрации формальдегида (0,2 %) в косметических средствах, а значит практически безопасно в использовании.

Выражаем благодарность руководителю группы к.х.н., с.н.с. Д.В. Кузьмину.

Литература:

[1]. В.Ф. Третьяков, Р.М., Вестник МИТХТ, т. 3, № 6 (2008).

Определение фальсификата мёда, предлагаемого в городе Красноярске
Вешкина Диана Викторовна, Капкан София Александровна, Муравьева
Анастасия Андреевна
 МАОУ «Лицей №7 им. Героя Советского Союза Б. К. Чернышева»
 Институт химии и химической технологии СО РАН

Мёд – это сладкий продукт, который производят пчёллы и другие похожие насекомые. Пчелиный мёд представляет собой частично переваренный нектар, либо сахаристые выделения некоторых растений или некоторых питающихся соками растений насекомых.

Существует огромное количество сортов этого продукта, которые отличаются по цвету, вкусу и химическому составу. В любом мёде содержатся углеводы (придающие сладость), азотистые вещества, органические и неорганические кислоты, минеральные вещества [1]. Антропогенные факторы, такие как загрязнение окружающей среды, урбанизация, обеднение флоры, массовая обработка гербицидами отрицательно влияют на продуктивность пчел и качество мёда, поскольку именно пчелы опыляют растения, тем самым сохраняя природное равновесие [2]. Помимо этого очень часто встречаются подделки мёда, либо не соблюдение условий хранения. Актуальной задачей является выявление фальсификата мёда

Цель работы: определить качество мёда по трем показателям: углеводный состав, общая кислотность мёда, наличие оксиметилфурфура.

Объектами исследования являлись образцы разнотравного мёда (Кемеровская область, Красноярский и Алтайский края) и гречишного мёда (Алтайский край). Методом ВЭЖХ проанализированы на углеводный состав (ГОСТ 3267-2013) и гидроксиметилфурфураля (ГОСТ 31768-2012). Методом титрования определена общая кислотность мёда (ГОСТ 19792-2001). Результаты измерений представлены в таблице 1.

Таблица 1. Углеводный состав, общая кислотность и содержание гидроксиметилфурфураля в образцах мёда.

Образец мёда Показатель	Разнотравный мёд (Кемеровская область)	Разнотравный мёд (Красноярский край)	Разнотравный мёд (Алтайский край)	Гречишный мёд (Алтайский край)
Массовая доля фруктозы и глюкозы суммарно, %	60,82	68,32	68,71	64,26
Норма ГОСТ Р 54644-2011	Не менее 60			
Массовая доля сахарозы, %	3,12	2,85	0,41	0,69
Норма ГОСТ Р 54644-2011, %	Не более 5			
Общая кислотность см ³	3,6	1,8	2,1	3,9
Норма ГОСТ Р19792-2001, см ³	Не более 4,0			
Содержание гидроксиметилфурфураля, мг/кг	8,4	Не обнаружено	14,1	Не обнаружено
Норма по СанПиН 2.3.2.1078-01 (п.1.5.6), мг/кг	Не более 25			

Исходя из полученных данных следует, что все образцы мёда соответствуют нормам и могут быть употреблены в пищу.

Литература:

- [1] Харчук Ю. Мёд и продукты пчеловодства. – Феникс: 2007. С. 22–23.
 [2] Кравченко, А., Захарова А., Исаева А. и др., Аналитика 5 (24), (2015).

Оптимизация методов выделения пектинов из коры пихты, поврежденной стволовыми патогенами

Захарченко Анна Васильевна

МАОУ «Лицей №7 им. Героя Советского Союза Б.К. Чернышева»

Институт химии и химической технологии СО РАН

В последнее время происходит акклиматизация короеда Полиграфа уссурийского, который пришел к нам с Дальнего Востока [1,2]. Основной его пищей является кора хвойных растений. Его жизнедеятельность губит здоровое растение. Это представляет еще и пожарную опасность, так как растение высыхает, и любая вспышка может спровоцировать лесной пожар. Поврежденную кору нужно утилизировать. Одним из наиболее выгодных способов утилизации является химическая переработка. Кора- это многокомпонентное сырье, содержащее в себе много полезных, химически ценных веществ. Одним из таких полезных компонентов коры является пектин. Пектин широко востребован в пищевой и фармакологической промышленности.

Целью данной работы было оптимизировать методы выделения пектина из коры, поврежденной короедом и исходной. А также исследование полученных пектинов физико-химическими методами.

Методика выделения – ступенчатая экстракция. Состояла из трех этапов: удаление смолистых веществ, выделение дубильных веществ и выделение пектинов. Проводилась экстракция гексаном, затем водным раствором этанола (70%). Для выделения пектинов использовалась экстракция соляной кислотой (табл. 1).

Таблица 1. Исследование зависимости выхода пектинов от времени обработки и рН.

№ образца	рН	Время, мин	Выход пектинов, %	
			Исходная кора	Кора, поврежденная короедом
1	1,8	45	6,86	6,49
2	1,8	30	5,28	8,44
3	1,8	60	7,06	6,58%
4	2,1	45	4,95	5,39%
5	2,1	30	3,71	3,89%
6	2,1	60	4,84	4,95%
7	1,5	45	6,91	5,09%
8	1,5	30	7,85	6,81%
9	1,5	60	8,13	7,05%

Образцы пектинов с наибольшим выходом были исследованы методом ИК-спектроскопии. Определены основные полосы поглощения: в области от 3000 до 3500 см⁻¹ гидроксильных групп, 1700 см⁻¹ полоса поглощения карбоксильных групп, 1600 см⁻¹ полоса поглощения замещенных карбоксильных групп. Было установлено, что пектины из коры пихты характеризуются высокой молекулярной массой и однородностью. Относительная молекулярная масса составила 60000 г/моль.

Выражаю благодарность нашему наставнику к.х.н., с.н.с. Ю.Н. Маляру за помощь в реализации проекта.

Литература:

[1] Кривец С.А. и др. Российский журнал биологических инвазий. 2015

[2] <https://kras-stolby.ru/news/vnov-o-massovom-usyhanii-pihty-na-stolbah/>

Определение нитрит иона в колбасных изделиях фотометрическим методом.

Измоденова П.; Гужевская В.

МАОУ «Лицей №7 им. Героя Советского Союза Б.К. Чернышева»

Институт химии и химической технологии СО РАН

Нитрит натрия (Е 250) – это соль азотистой кислоты. Он обладает антибактериальными и антиокислительными свойствами, поэтому широко применяется при производстве пищевой продукции как консервант и, побочно, как фиксатор окраски.

Нередки случаи, когда происходят массовые отравления колбасной продукцией у покупателей. Это не всегда связано с качеством самой продукции, зачастую это связано с правилами хранения в магазинах или на складах. Но, тем не менее, встречаются случаи, когда и сама колбасная продукция не соответствует заявленным ГОСТам или ТУ. Исходя из всего вышесказанного, актуальной задачей является постоянный контроль за качеством колбасной продукции.

Таким образом, целью нашего исследования являлось количественное и качественное определение нитрита натрия в колбасных изделиях и оценка соответствия качества продукции нормам содержания нитритов в различных видах колбасных изделий.

В качестве объектов исследования, выбрали 3 вида колбасных изделий, а именно:

«Салями Финская Дымов» производитель «Дымовское К.П.», "Молочная"(категория В) варёная, производитель «ТД- Холдинг ООО» и Варёная Докторская, КаТА ГОСТ ОАО "Великолукский мясокомбинат".

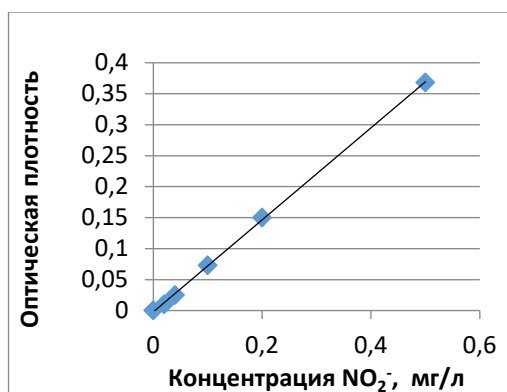


Рис.1. Градуировочный график. Зависимость оптической плотности от концентрации NO_2^- в растворе.

По навеске нитрита натрия готовили основной раствор, далее разбавлением готовили рабочий и градуировочные растворы с последующим построением градуировочного графика (рис.1). Оптическую плотность измеряли при длине волны 540 нм

После построения градуировочного графика, проводили пробоподготовку: измельчили навеску колбасы, провели экстракцию, раствор фильтровали, центрифугировали и подготовили пробы для анализа с реактивом Грисса [1].

Спектрофотометрически определили оптическую плотность растворов и по градуировочному графику определили содержание нитрит иона в колбасе. Данные представлены в таблице 1. Вывод: Все колбасы прошли проверку и являются безопасными в употреблении. Содержание нитрит иона не превышает ПДК (50-70 мг/кг).

Таблица 1. Содержание нитрит иона в колбасной продукции

Наименование	Оптическая плотность	Концентрация NO_2^- мг/л	Содержание мг/кг
«Салями Финская Дымов»	0.039	0.06	0.61
"Молочная"(категория В)	1.036	1.40	15.39
Варёная Докторская	0.049	0.07	0.76

Выражаем благодарность руководителю группы к.х.н., с.н.с Д. В. Кузьмину.

Литература:

[1]. Брагина И. В., Орехова Н. А. Подуновой Л. Г. Методы анализа чужеродных веществ в пищевых продуктах. (Сборник нормативных материалов). Москва, 1994 г.

Исследование моносахаридного состава легкогидролизуемых полисахаридов гречневой шелухи физико-химическими

методами анализа

Карамалла Н., Кушнир А., Сиделёва А.

МАОУ «Лицей №7 им. Героя Советского Союза Б.К. Чернышева»

Институт химии и химической технологии СО РАН

Возможности переработки растительного сырья в продукты химической технологии активно используются в наше время и ориентированы на замещение ископаемого сырья. Гречиха обыкновенная – это ценная широко культивируемая крупяная культура, возделывание которой имеет большое народно-хозяйственное значение. Россия входит в тройку лидеров по объемам производства гречневой крупы.

Гидролиз полисахаридов – один из перспективных методов химической переработки растительного сырья. С помощью продуктов гидролиза химическими и биотехнологическими процессами могут быть получены лекарственные препараты, пищевые и кормовые продукты, растворители и компоненты моторных топлив. Цель нашей работы заключалась в изучении компонентного состава легкогидролизуемых углеводов гречневой шелухи, физико-химическими методами анализа.

Состав основных компонентов сырья (Табл. 1) определяли по методикам [2]. Гидролиз сырья проводили 2%-ой соляной кислотой на водяной бане при 100°C в течении 1 часа, гидромодуль 1:10. Содержание мономеров определяли методом ГЖХ. Содержание фурфурола определяли методом ВЭЖХ.

Таблица 1. Компонентный состав шелухи гречихи.

компонент	масс. %
лигнин	28,1
целлюлоза	34,6
гемицеллюлозы	33,1
смолистые	2,5
зольность	1,8

Таблица 2. Состав мономеров, полученных путем гидролиза гемицеллюлоз гречневой шелухи.

компонент	С, г/л	м, г	от содержания гемицеллюлоз, %
арабиноза	1,37	0,07	4,13
ксилоза	11,10	0,55	33,32
манноза	0,02	0,001	0,06
галактоза	0,47	0,023	1,41
глюкоза	2,34	0,12	7,06
фурфурол	0,047	0,002	0,14

Хроматографическими методами изучен на качественном и количественном уровне состав легкогидролизуемых углеводов гречневой шелухи.

При гидролизе шелухи гречихи разбавленной соляной кислотой, в исследуемом гидролизате преобладает ксилоза (33 мас. % в расчете на содержание гемицеллюлоз). Дегидратация ксилозы приводит к образованию ценного продукта химической технологии – фурфурола. Следовательно, данный вид сырья может быть перспективным для его получения.

Проведенное исследование показывает, что гречневая шелуха является перспективным сырьем для получения фурфурола, кормовых дрожжей, продуктов пищевой и фармацевтической промышленности, продуктов химической технологии, имеющих широкое применение.

Литература:

[1] Клинецвич В. Н., Флюрик Е. А., Труды БГТУ, 2020, серия 2, №1, с. 68-81.

[2] Оболенская А. В., Ельницкая З. П., Леонович А. А. – М.: Экология, 1991 г. с. 71-165.

Изучение состава легкогидролизуемых углеводов костры льна физико-химическими методами анализа

Колыбзева В., Рыжова А.

МАОУ «Лицей №7 им. Героя Советского Союза Б.К. Чернышева»

Институт химии и химической технологии СО РАН

Производство льна в России достигает 600 тыс. тонн в год, причем до 70 мас. % составляет отход производства - костра [1]. Столь крупный отход производства, имеющий низкую востребованность, может служить ценным сырьем для получения продуктов химической промышленности с высокой добавленной стоимостью. Однако, сведения о химии льна весьма ограничены. По этой причине актуальной задачей является исследование его компонентного химического состава. Цель настоящей работы заключалась в изучении ассортимента легкогидролизуемых углеводных мономеров костры льна, физико-химическими методами анализа.

Компонентный состав сырья (Табл. 1) определяли по методикам [2]. Гидролиз сырья проводили 2%-ой соляной кислотой на водяной бане при 100°C в течении 1 часа, гидромодуль 1:10. Содержание мономеров определяли методом ГЖХ. Содержание фурфурола определяли методом ВЭЖХ.

Таблица 1. Компонентный состав костры льна.

компонент	масс. %
лигнин	29,5
целлюлоза	41,4
гемицеллюлозы	24,1
смолистые	3,1
зольность	1,9

Таблица 2. Состав мономеров, полученных путем гидролиза гемицеллюлоз костры льна.

компонент	С, г/л	т, г	от содержания гемицеллюлоз, %
арабиноза	0,75	0,04	3,11
ксилоза	5,53	0,28	22,95
манноза	0,15	0,01	0,62
галактоза	0,59	0,03	2,45
глюкоза	0,43	0,02	1,78
фурфурол	0,13	0,01	0,54

Гидролиз 2% HCl приводит к практически полной конверсии легкогидролизуемых углеводов, потеря массы в результате гидролиза составила 21,75 мас.%. Методами газовой хроматографии и высокоэффективной жидкостной хроматографии изучен на качественном и количественном уровне состав легкогидролизуемых углеводов костры льна.

При гидролизе льняной костры разбавленной соляной кислотой, в исследуемом гидролизате преобладает ксилоза (23 мас. % в расчете на содержания гемицеллюлоз). Содержание пентоз в разы превосходит содержание гексозных мономеров.

Проведенное исследование показывает, что костра льна является перспективным сырьем для получения кормовых дрожжей, продуктов пищевой и фармацевтической промышленности, продуктов химической технологии, имеющих широкое применение.

В продолжение нашей работы, актуальным является исследование динамики выхода углеводов в процессе гидролиза с целью выбора оптимальных условий переработки льняной костры для получения различных видов целевых продуктов и оценки доброкачественности получаемых гидролизатов.

Литература:

[1] Линь А.А., Михайлов В.М. Поляков А.В., Аграрная Россия, 12, С. 32-35 (2016).

[2] Оболенская А. В., Ельницкая З. П., Леонович А. А., М.: Экология, 1991 г. с. 71-165.

Определение качества молока

Курылев А.В., Рунков Д.А., Николаев В.П.

МАОУ «Лицей №7 им. Героя Советского Союза Б.К. Чернышева»

Институт химии и химической технологии СО РАН

Молоко очень востребованный продукт в повседневной жизни, поэтому проверка его качества является актуальной темой. Как и многие продукты питания, молоко может содержать целый спектр вредных веществ, среди которых токсичные микроэлементы, пестициды, биологические токсины, нитраты [1]. Также в молоке могут содержаться антибиотики, используемые повсеместно для лечения инфекций. Употребление в пищу таких продуктов негативно сказывается на организме человека, в связи с этим их содержания нормируются [2]. Из-за того, что молоко является сложной многокомпонентной системой, определение вредных примесей в нем затруднено и требует дополнительной пробоподготовки.

Нашей целью являлись разработка методики по определению антибиотиков методом ВЭЖХ и проведению анализа на нитрат-ионы [2] в молоке.

Для анализа использовали молоко из розничных сетей города Красноярск торговых марок: «Семёнишна», «Станция Молочная», «Простоквашино», «Алтайская бурёнка», «Наш Лидер», «Камарчагское». Определение нитрат-ионов проводили методом потенциометрического титрования. Как результат, мы определили, что во всех образцах молока было несущественное количество нитрат-ионов ($<10^{-5}$ моль). Для определения антибиотиков проводилась пробоподготовка: в первом случае для осаждения белков использовался ацетонитрил (ACN) с последующей обработкой сорбентом; во втором случае – образцы обрабатывались трихлоруксусной кислотой (10%) с последующей экстракцией жиров н-гексаном. Хроматограммы экстрактов, полученных на хроматографе Милихром А-02, представлены на рис. 1.

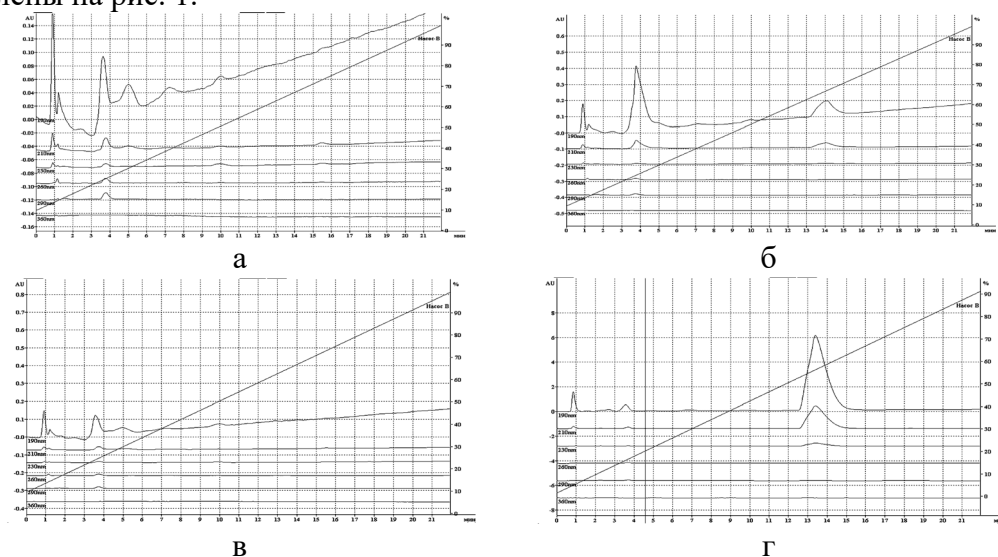


Рис. 1. Хроматограммы: а) ACN; б) ACN и полисорб; в) ACN и силикагель; г) н-гексан и трихлоруксусная кислота

В результате проведенного анализа установлено отсутствие антибиотиков во всех образцах молока. Оптимальной по трудоемкости методикой является обработка н-гексаном и трихлоруксусной кислотой.

Выражаем благодарность нашему наставнику к.х.н., с.н.с. Ю.Н. Маляру за помощь в реализации проекта.

Литература:

[1] ГОСТ 31450-2013 МОЛОКО ПИТЬЕВОЕ Технические условия

[2] Коротков А. И. и др., Изв. Саратов. ун-та. Сер. Химия. Биология. Экология. Т. 15, вып. 2 (2015)

Исследование устойчивости наночастиц, полученных из этаноллигнина коры кедра при различных условиях.

Лебедева С. Д.

МАОУ «Лицей №7 им. Героя Советского Союза Б.К. Чернышева»

Институт химии и химической технологии СО РАН

Направление по переработки отходов растительного сырья в ценные химические компоненты становится более популярным, в частности отходов целлюлозно-бумажной промышленности. Одним из компонентов растительного сырья является лигнин. Лигнин — это биополимер, ароматическая макромолекула, строение которой зависит от типа растения. Одним из способов утилизации лигнина является получение из него наночастиц, которые из-за ряда уникальных свойств можно использовать в различных областях промышленности [1].

Целью данной работы являлось исследование влияния условий извлечения этаноллигнина из коры кедра на агрегативную устойчивость наночастиц. А также влияние на их устойчивость продолжительности хранения и кислотности среды.

Этаноллигнин был извлечен из коры кедра путем экстракции в водозатанольной смеси при условиях: 250 °С, 80% EtOH (1 образец), 220 °С, 60% EtOH (2 образец). Наночастицы были получены методом диализа. Полученные наночастички были проанализированы методом динамического светорассеивания.

По результатам этого метода было показано, условия извлечения этаноллигнина, влияют на размер и ζ -потенциал получаемых из этого лигнина наночастиц. Частицы, полученные из этаноллигнина извлеченного при более жестких условиях, имели более узкое распределение по размеру, с минимальным размером 187 нм. Наибольшей стабильностью обладают частички, полученные при использовании этаноллигнина извлеченного при следующих условиях: 220 °С, 60% EtOH 40% H₂O.

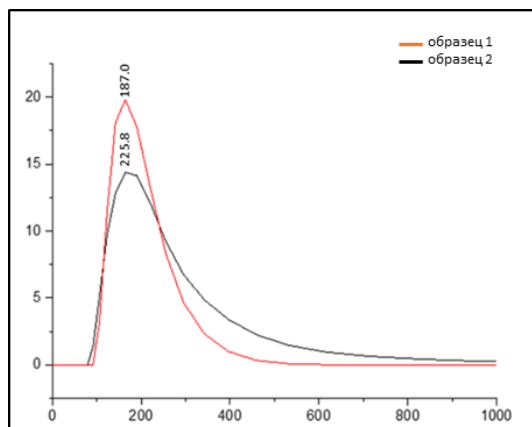


Рис. 1. Влияние условия извлечения этаноллигнина на размер частиц.

Таким образом. Было показано, что условия хранения наночастиц и кислотность среды оказывает значительное влияние на их стабильность и размер. С уменьшением значения pH размер частиц увеличивается до 595 нм, а значение ζ -потенциала меняет знак заряда.

Выражаю благодарность научному руководителю: Мирошниковой А.В., а также сотрудникам ИХХТ СО РАН за помощь в проведении работы

Литература:

[1] Green Chemistry, Simple process for lignin nanoparticle preparation, Miikka Lievonen, Juan José Valle-Delgado, Maija-Liisa Mattinen, Eva-Lena Hult, Kalle Lintinen, Mauri A. Kostiainen, Arja Paananen, Géza R. Szilvay, Harri Setäläb and Monika Österberg

Определение нитрат-ионов в овощах и фруктах потенциометрическим методом анализа

Лучковская Виктория Николаевна, Катцына Варвара Андреевна, Воронцова Полина Владимировна

МАОУ «Лицей №7 им. Героя Советского Союза Б.К. Чернышева»

Институт химии и химической технологии СО РАН

Нитраты являются солями азотной кислоты. Они входят в состав растительных и живых организмов. В малых количествах нитраты постоянно присутствуют в организме человека и не вызывают негативных влияний. Но, например, при длительном поступлении нитратов в организм человека уменьшается количество йода, что приводит к увеличению щитовидной железы.

Овощи и фрукты – важный поставщик витаминов и минеральных веществ, необходимых для организма человека. Как известно, нитраты попадают в овощи и фрукты из удобрений. Без дополнительной подкормки выращивать полноценные растения практически невозможно.

Существует множество лабораторных методов анализа нитрат-ионов, каждый из которых имеет свои достоинства и недостатки. Одним из наиболее доступных и менее ресурсозатратных методов является потенциометрический анализ с использованием ионселективного электрода.

В связи с этим целью нашей работы является определение нитрат-ионов в различных овощах и фруктах методом потенциометрического анализа.

Для проведения эксперимента было случайно отобрано 6 образцов и проведен потенциометрический анализ по стандартной методике с небольшими корректировками [1]. Результаты анализа представлены ниже (табл.1, рис.1).

Таблица 1. Результаты потенциометрического анализа.

Образец	Еср, мВ	$pC(NO_3^-) = -\lg C(NO_3^-)$	C, моль/л	X, мг/кг	ПДК, мг/кг
Перец красный	425.0	3.55	0.00028	69.4	200
Помидор	418.4	3.5	0.00032	79.4	150
Лимон	419.8	3.52	0.00030	74.4	60
Яблоко	465.5	3.85	0.00014	34.7	60
Груша	410.2	3.45	0.00035	86.8	60
Картофель	473.3	3.92	0.00012	29.8	250

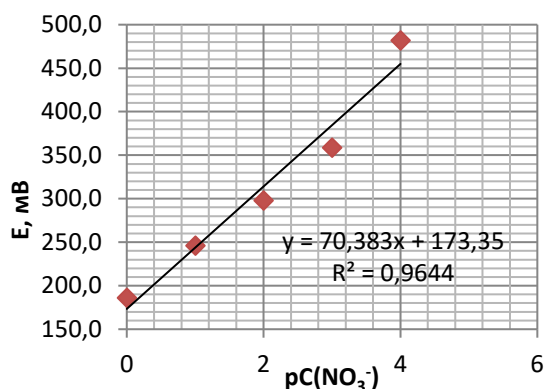


Рис. 1. Градуировочный график.

Методом потенциометрического метода анализа было установлено превышение ПДК (мг/кг) присутствует в двух образцах (лимон, груша) почти в 1,5 раза каждый. Из этого следует, что контроль питания по настоящее время является актуальной задачей и требует постоянного наблюдения.

Работа выполнена с использованием оборудования и реактивов ИХХТ СО РАН и КР ЦКП ФИЦ КНЦ СО РАН. Благодарность научному руководителю: Боровковой Валентине Сергеевне.

Литература:

[1] Сагалаков С.А., Казаченко А.С., Кононова О.Н., Новикова Г.В. Неорганическая и аналитическая химия: учебно-методическое пособие [Электронный ресурс], Сиб. федер. ун-т. - Красноярск., 2014. С. 115-123.

Определение содержания диоксида титана в составе зубных паст

Портнова Д.В., Малеванная Н.А.

МАОУ «Лицей №7 им. Героя Советского Союза Б.К. Чернышева»

Институт химии и химической технологии СО РАН

На настоящий момент зубная паста является одним из самых важных средств гигиены: она очищает полость рта и защищает зубы от кариеса. К свойствам зубных паст можно отнести абразивность, состав и консистенцию. Согласно литературным данным, зубные пасты делятся на антикариесные, антиплаковые, препятствующие образованию зубного налёта, для чувствительных зубов и отбеливающие [1]. В состав отбеливающих зубных паст чаще всего входят абразивы (диоксид кремния, карбонат кальция, диоксид титана), наполнители (делают пасту густой), красители, пенообразователи, фториды, вкусовые добавки, увлажнители, консерванты (предотвращают размножение бактерий и грибков), подсластители [2]. Диоксид титана – химическое вещество TiO_2 , амфотерный оксид. В промышленной сфере известен как E171 - пищевой белый краситель.

В работе использовали три образца отбеливающих зубных паст различных производителей. По 5 грамм каждого из образцов, высушивали в муфельной печи при постепенном нагревании до $600^{\circ}C$.

Анализ проб проводили с помощью аппарата РЭМ (аппарат растровой электронной микроскопии). По данным РЭМ установили, что в образце 1 титан не обнаружен, зато присутствует алюминий, являющийся более грубым абразивом наравне с другими очищающими компонентами. Его содержание – 5,6%. В образце же зубной пасты 2 титан обнаружился, с содержанием 5,7%, но он изначально указывался производителем в составе на коробке. И здесь также присутствует алюминий. А вот в зубной пасте 3 содержание титана составляет 7,4%, хотя не указывался в составе на коробке.

Табл.1 Полученные данные о содержании основных компонентов в зубных пастах.

Компонент/название	Образец 1 (%)	Образец 2 (%)	Образец 3 (%)
Алюминий	5,6	1	3,5
Натрий	1,8	0,7	1,7
Кремний	89,9	91,2	60,8
Сера	2,7	-	-
Фосфор	-	2,1	6,5
Хлор	-	2	-
Кальций	-	3	10,5
Калий	-	-	8,2
Титан	-	-	8,8

Таким образом был проведен анализ содержания диоксида титана в зубных пастах, на основе которого мы пришли к тому, что зубные пасты 2 и 3 соответствуют своему составу по диоксиду титана, указанному производителями.

Работа выполнена при ИХХТ СО РАН ФИЦ КНЦ СО РАН. Научный руководитель Мирошникова А. В.

Литература:

[1] <http://mugp-nv.ru/m/poleznaya-informacziya/sostav-i-svojstva-zubnyix-past.html>

[2] <https://elgreloo.com/beauty/zubnaya-pasta>

Определение щелочности поверхностных и водопроводных вод.

Панова Анастасия Леонидовна, Дениско Варвара Владиславовна

МАОУ Лицей №7, г. Красноярск

Институт химии и химической технологии СО РАН ФИЦ КНЦ СО РАН

Вода – химическое соединение, которое имеет уникальные свойства, включая возможность растворять многие полезные и вредные химические вещества. Одними из показателей качества воды как раз является её кислотность и щелочность. Нестабильные кислотность и щелочность воды пагубно влияют на здоровье человека. Также, избыточная кислотность или щелочность плохо влияет на водопроводные трубы и котлы отопления. Щелочность воды обусловлена содержанием карбонатов, гидрокарбонатов и гидроксил ионов.

Цель: титриметрическим методом выявить общее содержание карбонатов, гидрокарбонатов и гидроксил ионов в поверхностных и водопроводных водах Красноярского края.

Методики проведения титриметрического анализа описаны в работах [1, 2]. В качестве титранта использовали 0,1 М раствор HCl, индикатора – метиловый оранжевый. Объем аликвоты каждого образца водопроводной и поверхностных вод брали 100 мл. Для точности исследования, каждую пробу оттитровывали по 3 раза, после чего вычисляли средний объем и щелочность (таблица 1).

Таблица 1. Результаты титриметрического анализа по определению общей щелочности

Номер	Название	V ср, мл	C, моль/л
проба №1	Со дна Енисея возле коммунального моста	1,77	0,018±0,002
проба №2	По течению возле коммунального моста	1,3	0,013±0,002
проба №3	Аэропорт 2 (пгт Емельяново)	5,73	0,057±0,004
проба №4	Аэропорт 4 (пгт Емельяново)	5,65	0,057±0,002
проба №5	Железнодорожный район	1,12	0,011±0,001
проба №6	Октябрьский район	1,25	0,012±0,001

Таким образом, титриметрическим методом мы определили щелочность поверхностных и водопроводных вод и установили, что в пробах № 3 и 4 вода содержит наибольшее количество ионов OH^- , HCO_3^- , CO_3^{2-} .

Хотим выразить благодарность нашему наставнику к.х.н., н.с. Д.В. Зимонину за оказанную помощь в подготовке проекта.

Литература:

- [1] Отто. М. Современные методы аналитической химии. М: Техносфера, 2008.-544 с.
- [2] Волкова Г.В. и др. Физико-химические и химические методы анализа биологических объектов / СФУ, Красноярск: 2010, 37 с.

Изучение жирнокислотного состава сливочного масла высшего сорта методом газовой хроматографии

Петрова София Михайловна

МАОУ «Лицей №7 им. Героя Советского Союза Б.К. Чернышева»

Институт химии и химической технологии СО РАН

Актуальность выбранной темы объясняется широким ассортиментом сливочного масла и появлением на потребительском рынке некачественных фальсифицируемых продуктов питания, содержащих транс-жиры (канцерогены), как самых вредных для здоровья человека составляющих ЗМЖ. Основной целью исследовательской работы является изучение жирнокислотного состава сливочного масла высшего сорта методом газовой хроматографии.

Для проведения эксперимента было случайно выбрано 7 образцов сливочного масла (1 - «Крестьянское», 2 - «Простоквашино», 3 - «Три коровы», 4 - масло крестьянское сладко-сливочное «Белебеевское», 5 - «Молочные продукты из Березовки», 6 – «Сладко-сливочное несоленое крестьянское 365 дней», 7 - «Брест Литовск») жирностью 72,5 %, которое заявлено производителем как сливочное масло высшего сорта с указанием на упаковке «без заменителя молочного жира (БЗМЖ)».

Перед проведением анализа была проведена пробоподготовка. Следующий шаг подразумевал работу с агрессивными реактивами.

Газохроматографический анализ показал, что 6 образцов из 7 имеют идентичные хроматографические профили, за исключением образца №5 (рис. 1).

Таблица 1. Результаты газохроматографического анализа.

Группа №	T, мин	Имя группы	Площадь, %	Содержание, %
9	19,018	Миристиновая	2,251	8,0 – 13,0
13	23,312	Пальмитиновая	37,457	22,0 – 33,0
17	27,162	Стеариновая	5,382	8,0 – 13,0
18, 19	28,010 28,442	Олеиновая	37,920	22,0 – 32,0
20, 21, 22, 23	28,869 29,729 29,895 30,158	Линолевая	13,327	2,4 – 5,5
32	34,623	Бегеновая	0,115	не более 0,1

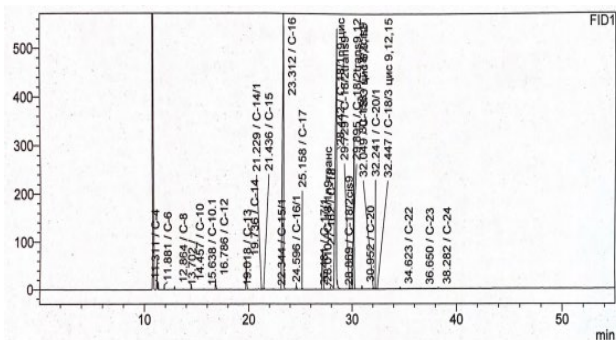


Рис. 1. Хроматограмма жирнокислотного состава масла сливочного крестьянского «Молочные продукты из Берёзовки».

В данном образце наблюдается превышение содержания [1] по следующим позициям: миристиновая, пальмитиновая, стеариновая, олеиновая, линолевая, бегеновая кислоты (рис. 2). Таким образом, данный образец нельзя отнести к сливочному маслу высшего сорта [2], т.е. данная продукция является фальсификатом, а поставляемая торговая продукция требует постоянного контроля.

Работа выполнена с использованием оборудования и реактивов ИХХТ СО РАН и КР ЦКП ФИЦ КНЦ СО РАН. Благодарность научному руководителю: Боровковой Валентине Сергеевне.

Литература:

[1] ГОСТ 30623-98 "Масла растительные и маргариновая продукция. Метод обнаружения фальсификации».

[2] ГОСТ 32261-2013 «Масло сливочное. Технические условия.

Разработка метода извлечения фенола из художественных красок и его количественный анализ ВЭЖХ

Продайвода М. В., Суворова П. И.

МАОУ «Лицей №7 им. Героя Советского Союза Б.К. Чернышева»

Институт химии и химической технологии СО РАН

Художественные краски активно используются в творчестве, в том числе и детском. Хорошо известный, но уже подзабытый специфический запах им придавал фенол. Фенольные соединения обладают токсическим и даже канцерогенным свойствами, поэтому содержание этого компонента свыше нормы может пагубно повлиять на здоровье потребителей. На данный момент, содержание фенола в художественных красках ограничено до 0,05 мг/дм³. [1]

Для извлечения фенолов из красок 3 г образца растворяли в 50 мл дистиллированной воды, после чего раствор отгоняли на ротационном испарителе. Анализ, получаемых растворов проводили с использованием высокоэффективной жидкостной хроматографии (ВЭЖХ). Также были проверены некоторые коммерческие образцы красок на наличие фенола в них. Анализ ВЭЖХ показал, что в полученных растворах для трёх разных образцов фенола не найдено (рис.1).

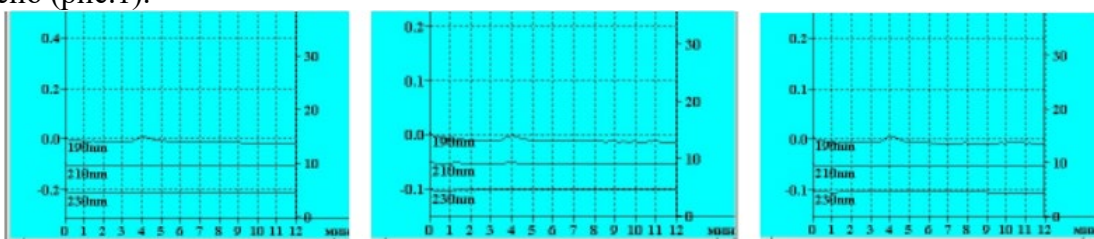


Рис. 1. Результаты анализа ВЭЖХ трёх коммерческих образцов художественных красок.

Для определения степени извлечения фенола готовили два раствора.

Раствор 1 представлял собой стандартный раствор фенола с концентрацией 0,1 ммоль/л. Второй раствор готовили добавлением головного раствора фенола (1 мл, 5 ммоль/л) в образец растворенной краски (~25 мл) и доводили до метки в колбе 50мл. Далее образец отгоняли на ротационном испарителе и вновь в мерной колбе доводили до 50 мл.

Методом ВЭЖХ установлены незначительные различия концентраций фенола (~3%) в полученных растворах. Степень извлечения фенола из художественных красок составила 97% (рис.2).

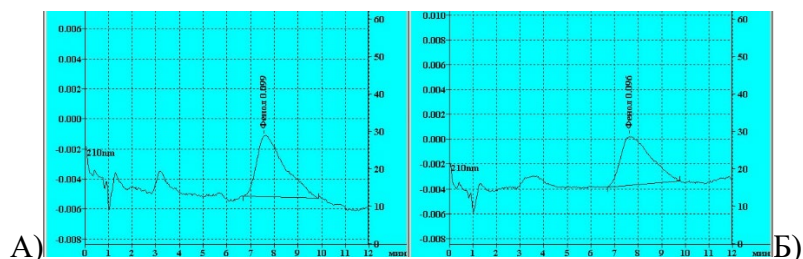


Рис. 2. Результаты анализа ВЭЖХ отогнанного раствора фенола и раствора фенола с добавлением красок. А) Раствор 1, Б) раствор 2

В результате проделанной работы был разработан метод извлечения фенола из художественных красок без использования дополнительных реагентов

Работа выполнена ИХХТ СО РАН. Научный руководитель: Мирошникова А.В.

Литература:

[1]ТР ТС 007/2011 Технический регламент Таможенного союза "О безопасности продукции, предназначенной для детей и подростков" от 23 сентября 2011, ст. 8

Определение содержания железа в природных и питьевых водах различными физико-химическими методами.

Ширяева Варвара Васильевна

МАОУ «Лицей №7 им. Героя Советского Союза Б.К. Чернышева»

Институт химии и химической технологии СО РАН

В поверхностных водах Красноярского края по литературным данным наблюдается превышение общего содержания железа от 1 до 10 ПДК [1]. В данной работе содержание железа определяли методом спектрофотометрии. Для оценки достоверности результатов дополнительно сотрудниками ИХХТ СО РАН проведены исследования проб методом инверсионной вольтамперометрии.

Цель работы: определить содержание железа в природных и питьевых водах г. Красноярска и его пригородах спектрофотометрическим и вольтамперометрическим методами.

Методика обнаружения ионов железа основана на реакции с сульфосалициловой кислотой в кислой среде, приводящей к образованию устойчивого окрашенного соединения красного цвета с максимумом поглощения в области 490-520 нм. Модельные растворы железа использовали для построения градуировочного графика. Пробы природных и питьевых вод отобрали в местах, отмеченных на карте (рис. 1). Погрешность спектрофотометрических измерений составила 3-7 процентов. Найдено, что содержание железа в исследуемых водах не превышает ПДК (0.3 мг/л), но в одном находится в пределах нормы (образец 4) (рис. 2). Однако, по данным вольтамперометрического анализа содержание железа в образце 4 находится ниже ПДК. Близость полученных данных вольтамперометрическим и спектрофотометрическим методом подтверждает достоверность полученных результатов.

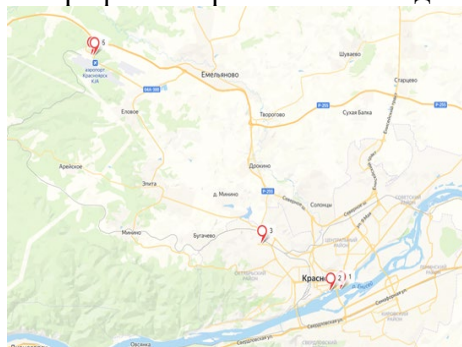


Рис. 1. Карта с местами пробоотбора

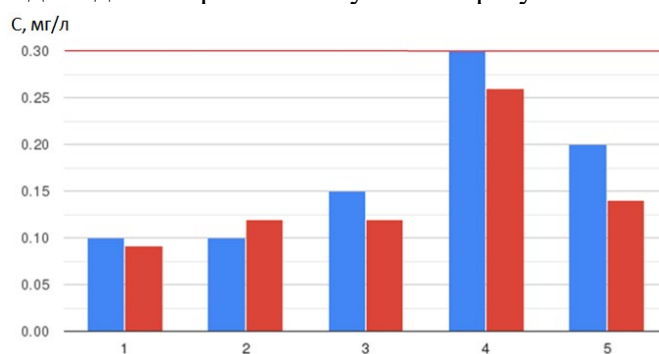


Рис. 2. Диаграммы с содержанием железа в исследуемых образцах. Синие – спектрофотометрический анализ, красные – вольтамперометрический

Таким образом, определено содержание железа в природных и питьевых водах г. Красноярска и его пригородах различными физико-химическими методами. Показано, что его содержание ниже ПДК.

Хочу выразить благодарность нашему наставнику к.х.н., н.с. Д.В. Зимонину за помощь в осуществлении проекта.

Литература:

1. Т.П. Спицына, А.И. Хохлова, Р.А. Степень, Вестник КрасГУ, №. 5, С.120-126 (2006).
2. Стожко Н.Ю., Инжеватова О.В., Колядина Л.И., ЖАХ, Т.60(7), С. 747-752 (2005).

Тезисы докладов
Междисциплинарной конференции молодых
учёных ФИЦ КНЦ СО РАН (КМУ-XXV)
г. Красноярск, 14 апреля 2022 г.

ISBN 978-5-6045249-8-5



Материалы конференции
публикуются в авторской редакции

Подписано в печать 14.04.2022 г.
Бумага офсетная. Печать цифровая. Гарнитура «Times New Roman».

Формат 60x84 1/16. Усл. печ. л. 6,95. Уч.-изд. л. 6,82. Заказ № 4. Тираж 100 экз.
Отпечатано на Участке оперативной печати ИФ СО РАН. 660036, г. Красноярск,
Академгородок, 50/38.

Оформление — Д. С. Цикалов, Ю. В. Князев,
Дизайн обложки — А. В. Шайхутдинова

ФИЦ КНЦ СО РАН
660036, г. Красноярск, ул.Академгородок, 50
тел. +7 (391) 290-79-88
e-mail: fic@ksc.krasn.ru