



КРАСНОЯРСКИЙ  
КРАЙ  
ПРАВИТЕЛЬСТВО



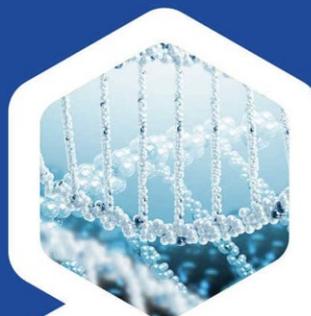
Красноярский краевой фонд  
поддержки научной и научно-технической  
деятельности



# Сборник материалов



II отчетная  
конференция  
«Фундаментальные  
исследования  
молодых ученых  
Енисейской Сибири»



12-13 декабря  
2019

Красноярск

УДК 50(063)  
001.8(571)  
ББК Б.я431  
Ч25(253)  
М34

Материалы II отчетной конференции «Фундаментальные исследования молодых ученых Енисейской Сибири»: [сб. тез. докл.] – Электрон. текстовые дан. – Красноярск: ИФ СО РАН, 2019 – 89 с. – Сборник материалов. II отчетная конференция «Фундаментальные исследования молодых ученых Енисейской Сибири». ISBN 978-5-6042995-4-8

Конференция проводится при поддержке регионального конкурса проектов «Организация российских и международных научных мероприятий», проводимых в июле-декабре 2019 года.

Номер проекта: 19-42-241001

### **Организаторы**

Российский фонд фундаментальных исследований  
Правительство Красноярского края  
Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр  
Сибирского отделения Российской академии наук»  
Красноярский краевой фонд науки  
Сибирский федеральный университет  
Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН

Материалы конференции размещены на сайте Института физики СО РАН  
<http://kirensky.ru>

по адресу: [http://kirensky.ru/zdoc/eniseiskaya-sibir/enisei\\_sib.pdf](http://kirensky.ru/zdoc/eniseiskaya-sibir/enisei_sib.pdf)

ISBN 978-5-6042995-4-8



9 785604 299548

© Российский фонд фундаментальных исследований  
© Правительство Красноярского края  
©Федеральный исследовательский центр  
«Красноярский научный центр Сибирского отделения  
Российской академии наук»  
©Красноярский краевой фонд науки  
©Сибирский федеральный университет  
©Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН  
©Отчетная конференция "Фундаментальные  
исследования молодых ученых Енисейской Сибири" (2 ;  
2019 ; дек. ; 12-13 ; Красноярск)

## Оглавление

С. В. Аксенов .....	6
ПРОЯВЛЕНИЕ КУЛОНОВСКИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ И ЭФФЕКТОВ ОГРАНИЧЕННОЙ ГЕОМЕТРИИ В СВОЙСТВАХ ТОПОЛОНИЧЕСКИХ КРАЕВЫХ СОСТОЯНИЙ НАНОСТРУКТУР СО СПИН-ОРБИТАЛЬНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ ..	6
Е. В. Богданов, Е. И. Погорельцев .....	8
ВЛИЯНИЕ ДЕЙТЕРИРОВАНИЯ НА ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ДИОКСОТЕТРАФТОРИДЕ И ОКСОПЕНТОФТОРИДЕ ВАНАДИЯ.....	8
И. Ю. Ботвич.....	10
ОЦЕНКА СОСТОЯНИЯ ЛЕСНОЙ РАСТИТЕЛЬНОСТИ ЗАПОВЕДНОЙ ТЕРРИТОРИИ КРАСНОЯРСКОГО КРАЯ ПО СПУТНИКОВЫМ ДАННЫМ.....	10
О. В. Буйко, С. И. Метелица, Р. В. Алоференко, Т. С. Кондратьева, А. И. Зыкова, Н. С. Кузьмин.....	12
ПОСЛОЙНО МОДИФИЦИРОВАННЫЕ СОРБЕНТЫ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ, ПОЛИАРОМАТИЧЕСКИХ УГЛЕВОДОРОДОВ И СИНТЕТИЧЕСКИХ КРАСИТЕЛЕЙ В ОБЪЕКТАХ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ И ПИЩЕВЫХ ПРОДУКТАХ ...	12
И. Г. Важенина, Д. С. Цикалов, Р. Н. Ярославцев, А. С. Клепикова, Я. А. Пахомов ...	14
СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ ГРАДИЕНТНЫХ МАТЕРИАЛОВ, ОТЛИЧАЮЩИХСЯ ЗАДАНЫМ ВИДОМ ИЗМЕНЕНИЯ МАГНИТНОГО ПАРАМЕТРА .....	14
А. В. Вяткин .....	15
ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ КВАЗИУСТОЙЧИВЫХ ФИГУР, ОБРАЗОВАННЫХ МНОГОКОМПОНЕНТОЙ ГАЗОВОЙ СМЕСЬЮ, ВЫТЕКАЮЩЕЙ ИЗ ПРОМЫШЛЕННОЙ ДЫМОВОЙ ТРУБЫ .....	15
В. С. Герасимов, А. Е. Ершов .....	17
МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭФФЕКТОВ ОПТИЧЕСКОЙ ПАМЯТИ В СРЕДАХ, СОДЕРЖАЩИХ НЕУПОРЯДОЧЕННЫЕ МНОГОЧАСТИЧНЫЕ АГРЕГАТЫ ПЛАЗМОННЫХ НАНОЧАСТИЦ.....	17
И. Г. Гетте, Н. Е. Коротаева, М. И. Иванова, И. А. Могильникова, Г. Б. Боровский ....	19
ОЦЕНКА СОДЕРЖАНИЯ СТРЕССОВЫХ БЕЛКОВ И ИНТЕНСИВНОСТИ ФОТОСИНТЕЗА ХВОИ СОСНЫ ОБЫКНОВЕННОЙ В ПОСТПИРОГЕННЫЙ ПЕРИОД В УСЛОВИЯХ КРАСНОЯРСКОЙ ЛЕСОСТЕПИ .....	19
А. Е. Говорун .....	21
СТАБИЛИЗАЦИЯ БИФЕРМЕНТНОЙ СИСТЕМЫ СВЕЯЩИХСЯ БАКТЕРИЙ NADH:FMN-ОКСИДОРЕДУКТАЗА + ЛЮЦИФЕРАЗА ПУТЕМ ПОМЕЩЕНИЯ В ГЕЛИ И ВЯЗКИЕ РАСТВОРЫ БИОПОЛИМЕРОВ .....	21
Д. В. Гузей, А. В. Минаков, М. И. Пряжников, А. А. Шебелева.....	23
РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ ИНТЕНСИФИКАЦИИ ТЕПЛООБМЕНА С ПОМОЩЬЮ НАНОСУСПЕНЗИЙ В РЕАЛЬНЫХ ТЕПЛООБМЕННЫХ АППАРАТАХ.....	23

Е. А. Евсеенко, К. И. Ильченко .....	25
СУБЪЕКТИВНОЕ ВОСПРИЯТИЕ КАЧЕСТВА ЖИЗНИ И РАЗВИТИЕ ЧЕЛОВЕЧЕСКОГО КАПИТАЛА НАРОДА КЕТО, ПРОЖИВАЮЩЕГО В ТУРУХАНСКОМ РАЙОНЕ КРАСНОЯРСКОГО КРАЯ .....	25
В. С. Жандун.....	27
ПЕРВОПРИНЦИПНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПОЛЯРИЗАЦИОННЫХ, МАГНИТНЫХ, ЭЛЕКТРОННЫХ И МАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СОЕДИНЕНИЙ СО СТРУКТУРОЙ ШПИНЕЛИ, СОДЕРЖАЩИХ 3D И 4F ИОНЫ .....	27
А. Н. Залого .....	29
КОЭВОЛЮЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АТОМНО-КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ НОВЫХ ВЕЩЕСТВ ПО ДИФРАКЦИОННЫМ ДАННЫМ НА БАЗЕ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ГЕНЕТИЧЕСКИХ АЛГОРИТМОВ И СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ .....	29
В. В. Зыков, Ф. А. Дарин, А. О. Бульхин, Г. Н. Болобанщикова, Л. В. Белокопытова, М. Н. Колпакова, Н. А. Киященко .....	31
ДОННЫЕ ОТЛОЖЕНИЯ ОЗЕРА УЧУМ (КРАСНОЯРСКИЙ КРАЙ) КАК ИСТОЧНИК ИНФОРМАЦИИ ДЛЯ РЕКОНСТРУКЦИИ ПАЛЕО-КЛИМАТА И ПРОГНОЗА ЛЕЧЕБНЫХ СВОЙСТВ ВОДОЕМА .....	31
Ю. В. Князев, А. С. Тарасов, М. С. Платунов, В. В. Юмашев.....	33
СТРУКТУРНЫЕ И ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА $\text{CaFe}_2\text{O}_4$ ПРИ СИНТЕЗЕ В ВОЗДУШНОЙ И ИНЕРТНОЙ АТМОСФЕРАХ.....	33
Е. А. Ковалева .....	35
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ИНТЕРФЕЙСОВ НА ОСНОВЕ НАНООРАЗМЕРНЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ ФРАГМЕНТОВ .....	35
М. М. Коровушкин.....	36
ПРОЯВЛЕНИЕ СПИН-НЕМАТИЧЕСКИХ КОРРЕЛЯЦИЙ В СПЕКТРАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИКАХ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ И ИХ ВЛИЯНИЕ НА ПРАКТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КУПРАТНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКОВ.....	36
А. А. Косинова, Т. С. Монгуш, М. Д. Гончаров, К. С. Семашенко, Г. Ю. Кочмарёва, А. В. Мошев, И. И. Гвоздев.....	38
АСПЕКТЫ РЕЗИСТЕНТНОСТИ К АНТИТРОМБОЦИТАРНОЙ ТЕРАПИИ ПАЦИЕНТОВ С ИШЕМИЧЕСКОЙ БОЛЕЗНЬЮ СЕРДЦА ПОСЛЕ КОРОНАРНОГО ШУНТИРОВАНИЯ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ПОЛИМОРФИЗМОВ ГЕНА Р-СЕЛЕКТИНА, ВЫРАЖЕННОСТИ МЕЖКЛЕТОЧНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ И ВОСПАЛЕНИЯ. ....	38
В. А. Кузнецов.....	40
ПРОГНОЗИРОВАНИЕ САМОВОЗГОРАНИЯ БУРЫХ УГЛЕЙ ПРИ ХРАНЕНИИ И ТРАНСПОРТИРОВКЕ НА ОСНОВЕ РАСЧЕТНО-ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ МЕТОДИКИ.....	40

Е. А. Кулишова, А. В. Дурнопьянов, Н. В. Михайлик .....	42
РАЗРАБОТКА РЕСУРСОСБЕРЕГАЮЩЕЙ ТЕХНОЛОГИИ СОВМЕЩЕННОГО ЛИТЬЯ, ПРОКАТКИ И ПРЕССОВАНИЯ ДЕФОРМИРОВАННЫХ ПОЛУФАБРИКАТОВ ИЗ НОВЫХ АЛЮМИНИЕВЫХ СПЛАВОВ ДЛЯ ПРОИЗВОДСТВА КАБЕЛЬНО- ПРОВОДНИКОВОЙ ПРОДУКЦИИ С ПОВЫШЕННОЙ ТЕРМОСТОЙКОСТЬЮ .....	42
А. С. Лобасов, А. В. Минаков.....	44
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ДОБАВКИ НАНОЧАСТИЦ НА СКОРОСТЬ ИСПАРЕНИЯ ЖИДКОСТЕЙ.....	44
О. А. Майков, Е. А. Кохонькова, В. В. Романов, А. Н. Фомин .....	46
ПРИМЕНЕНИЕ ГЛУБОКИХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ДЛЯ ОБНАРУЖЕНИЯ СИГНАЛОВ АВАРИЙНОГО ОПОВЕЩЕНИЯ В ШАХТАХ .....	46
Ю. Н. Маляр, А. С. Казаченко, А. В. Мирошникова, В. В. Сычев .....	48
МОДИФИКАЦИЯ ДРЕВЕСНЫХ ЛИГНИНОВ С ПОЛУЧЕНИЕМ ПЕРСПЕКТИВНЫХ ФАРМАКОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ И СВЕТОЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ ВОДОРАСТВОРИМЫХ ПОЛИМЕРОВ .....	48
А. А. Мацынин .....	50
НОВЫЕ МАГНИТНЫЕ ПЛЕНОЧНЫЕ НАНОКОМПОЗИТЫ НА ОСНОВЕ СЛОИСТЫХ СИСТЕМ GEO/MN: СИНТЕЗ, ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ И МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ.....	50
Е. М. Мошкина, Т. П. Гаврилова, Ю. В. Князев, М. С. Платунов, Р. Г. Чумаков, Н. А. Бельская, А. В. Чернышев.....	52
СИНТЕЗ КАТИОННО-УПОРЯДОЧЕННЫХ Mn-Mg ОКСИБОРАТОВ, ОБЛАДАЮЩИХ ДАЛЬНИМ МАГНИТНЫМ ПОРЯДКОМ .....	52
Ю. С. Орлов, В. А. Дудников, М. Волочаев, С. Н. Верещагин.....	54
НОВЫЕ ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ МНОГОМАСШТАБНЫХ ПРОСТРАНСТВЕННО-НЕОДНОРОДНЫХ ЗАМЕЩЕННЫХ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ОКСИДОВ КОБАЛЬТА И ФАЗ РАДДЛЕСДЕНА-ПОППЕРА .....	54
М. Э. Пак, Е. А. Рогожин, И. А. Петухова, А. С. Шуклина, Н. С. Помыткин, А. П. Пахомова, В. С. Садыкова, Н. А. Гаевский, И. Н. Третьякова .....	55
ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ПЕПТИДОВ РАСТИТЕЛЬНОГО И МИКРОБНОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ НА РОСТ И РАЗВИТИЕ ХВОЙНЫХ <i>IN VITRO</i> В РАННЕМ ОНТОГЕНЕЗЕ .....	55
А. В. Панов, А. В. Тимохина, В. И. Зырянов, С. В. Титов, И. А. Солнышкин, Н. В. Сиденко.....	57
ДЫХАНИЕ ЛЕСОВ СИБИРИ: РЕГИОНАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ СТОКОВ И ИСТОЧНИКОВ УГЛЕРОДА АТМОСФЕРЫ В ЭКОСИСТЕМАХ КЛЮЧЕВЫХ БИОКЛИМАТИЧЕСКИХ ЗОН БАССЕЙНА р. ЕНИСЕЙ .....	57

А. И. Петров.....	59
ПРИМЕНЕНИЕ ОРГАНИЧЕСКИХ ДИСУЛЬФИДОВ В ПРОЦЕССАХ ЭКСТРАКЦИИ И СОРБЦИИ ПАЛЛАДИЯ(II), ПЛАТИНЫ(II)/(IV) И ЗОЛОТА(III) .....	59
Е. В. Пикурова, Т. В. Трофимова, А. Ю. Павликов, Д. И. Сайкова, Д. И. Чистяков, Н. П. Евсевская, Д. В. Карпов, М. Н. Волочаев .....	61
СИНТЕЗ МАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ СО СТРУКТУРОЙ «ЯДРО-ЗОЛОТАЯ ОБОЛОЧКА» ДЛЯ БИМЕДИЦИНСКИХ И КАТАЛИТИЧЕСКИХ ПРИЛОЖЕНИЙ .....	61
С. В. Поленга, Е. А. Литинская, А. В. Станковский, Р. О. Рязанцев <sup>3</sup> , А. Д. Немшон ...	63
РАЗВИТИЕ МЕТОДОВ СКАНИРОВАНИЯ И РАЗРАБОТКА НА ИХ ОСНОВЕ НИЗКОПРОФИЛЬНОЙ СКАНИРУЮЩЕЙ АНТЕННОЙ СИСТЕМЫ ДЛЯ РАБОТЫ В СЕТЯХ СПУТНИКОВОЙ СВЯЗИ НА ТЕРРИТОРИИ КРАСНОЯРСКОГО КРАЯ .....	63
М. В. Пятнов .....	65
ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ И ГИБРИДНЫЕ МОДЫ ФОТОННОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ СТРУКТУРНО ХИРАЛЬНЫХ И РЕЗОНАНСНЫХ НАНОКОМПОЗИТНЫХ СРЕД .....	65
И. С. Рыжиков, К. Ю. Брестер .....	66
РАЗРАБОТКА ЭФФЕКТИВНЫХ ПОПУЛЯЦИОННЫХ МЕТОДОВ ГЛОБАЛЬНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ И МЕТАЭВРИСТИК ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОГО ПОИСКА ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И АНАЛИЗА ДАННЫХ .....	66
С. В. Семёнов, А. Л. Фрейдман, М. И. Колков, К. Ю. Терентьев, Н. С. Павловский, А. А. Красиков, А. А. Дубровский .....	68
ПОИСК, СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ НОВЫХ ОКСИДНЫХ МОНОКРИСТАЛЛОВ, ПРОЯВЛЯЮЩИХ ВЗАИМОСВЯЗЬ МАГНИТНЫХ, МАГНИТОУПРУГИХ И МАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ .....	68
А. А. Ситникова, К. В. Резникова .....	69
ТРАНСФОРМАЦИИ ГОРОДСКОЙ СРЕДЫ КРАСНОЯРСКА С 1991 ПО 2017 ГОДЫ	69
И. А. Тамбасов .....	71
ИССЛЕДОВАНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ В НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ТОНКИХ ПЛЕНКАХ С ПОМОЩЬЮ $3\omega$ МЕТОДА.....	71
А. С. Тарасов .....	73
ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПОВЕРХНОСТНЫХ И ИНТЕРФЕЙСНЫХ СОСТОЯНИЙ НА МАГНИТО- И СПИН-ЗАВИСИМЫЙ ЭЛЕКТРОННЫЙ ТРАНСПОРТ В ГИБРИДНЫХ СТРУКТУРАХ ФЕРРОМАГНЕТИК/ПОЛУПРОВОДНИК .....	73
И. А. Тарасов .....	75
ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ САМООРГАНИЗАЦИИ, МАГНИТНЫХ И МАГНИТООПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ АНСАМБЛЕЙ ГИБРИДНЫХ НАНОКРИСТАЛЛОВ НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА, КРЕМНИЯ И ЗОЛОТА.....	75

К. А. Фейзер, В. С. Сутормин, П. И. Махрова, Д. А. Костиков, А. С. Абдуллаев .....	77
ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРООПТИЧЕСКОГО МАТЕРИАЛА НА ОСНОВЕ НЕМАТИКА И ПОЛИМЕРА, ЗАДАЮЩЕГО КОНИЧЕСКИЕ ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ ДЛЯ ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА.....	77
А. В. Чумак, А. В. Дурнопьянов, А. Д. Кутрань .....	79
МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА СОВМЕЩЕННОГО ЛИТЬЯ И ПРОКАТКИ-ПРЕССОВАНИЯ ПРУТКОВ ИЗ СПЛАВА СИСТЕМЫ Al-Zr И ИССЛЕДОВАНИЕ ИХ СВОЙСТВ .....	79
А. А. Шибелева, А. В. Шибелев, А. С. Лобасов, В. М. Будько.....	81
РАСЧЕТНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЫШЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОСТИ МИКРОФЛЮИДНЫХ РЕАКТОРОВ .....	81
М. С. Шустин, М. М. Коровушкин, А. Д. Федосеев .....	83
КОНТАКТНЫЕ ЯВЛЕНИЯ И МАГНИТНЫЙ БЕСПОРЯДОК В ПРОБЛЕМЕ ФОРМИРОВАНИЯ И ДЕТЕКТИРОВАНИЯ ТОПОЛОГИЧЕСКИ ЗАЩИЩЕННЫХ КРАЕВЫХ СОСТОЯНИЙ .....	83
Р. Н. Ярославцев, Ю. В. Князев, А. А. Красиков, И. Г. Важенина, М. Н. Волочаев, А. А. Артемьева.....	85
СОНОХИМИЧЕСКАЯ ОБРАБОТКА МАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ КАК СПОСОБ МОДИФИКАЦИИ ИХ СВОЙСТВ .....	85
А. С. Ясинский .....	86
ПОВЕДЕНИЕ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ Cu-Al ПРИ ЭЛЕКТРОЛИЗЕ КОНЦЕНТРИРОВАННЫХ СУСПЕНЗИЙ ГЛИНОЗЕМА НА ОСНОВЕ РАСПЛАВОВ ГАЛОГЕНИДОВ .....	86

УДК 537.9

**С. В. Аксенов***Старший научный сотрудник, Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Россия, Красноярск*

## ПРОЯВЛЕНИЕ КУЛОНОВСКИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ И ЭФФЕКТОВ ОГРАНИЧЕННОЙ ГЕОМЕТРИИ В СВОЙСТВАХ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ КРАЕВЫХ СОСТОЯНИЙ НАНОСТРУКТУР СО СПИН-ОРБИТАЛЬНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

В современной физике твердого тела существует проблема интерпретации  $2G_0$ -резонансов кондактанса сверхпроводящей проволоки, которые связаны транспортом через майорановские состояния (МС), перспективные для создания квантового компьютера [1]. Такие резонансы также могут быть следствием транспорта через Андреевские состояния (АС). АС возникают между металлическим контактом и сверхпроводящей проволокой за счет действия электродов затвора, а также реализуются при значительном перекрытии волновых функций майорановских мод (ММ), например, в сильных магнитных полях. Большинство работ на эту тему посвящено анализу экспериментальной геометрии, где связь проволока соединяется с контактами последовательно [2].

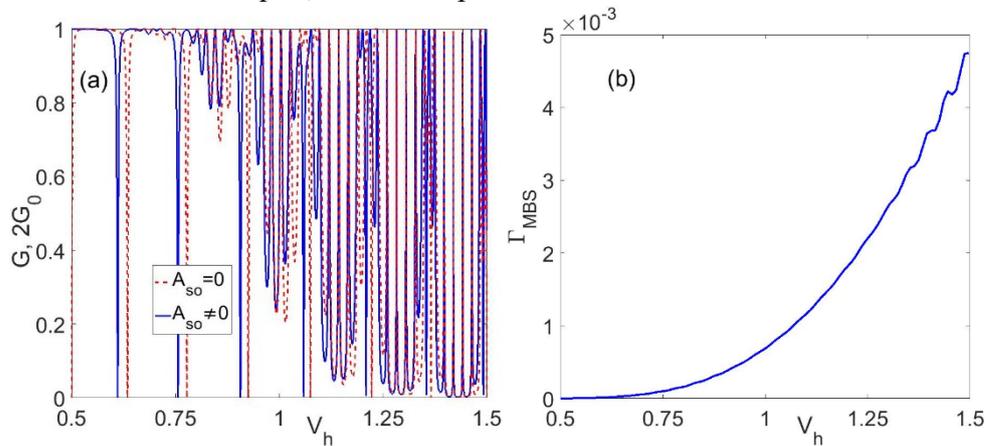


Рис. (а) – зависимость кондактанса кольца Ааронова-Бома со сверхпроводящим мостиком в топологически нетривиальной фазе от зеемановской энергии без учета (пунктирная кривая) и с учетом (сплошная кривая) спин-орбитальной связи в рукавах. (б) – зависимость степени локализации МСС от зеемановской энергии

Нами были исследованы различия при транспорте через АС и МС, возникающих в сверхпроводящей проволоке, соединяющей рукава кольца Ааронова-Бома, при учете кулоновского отталкивания в сверхпроводящей проволоке и спин-орбитальной связи в рукавах. На рисунке приведена характерная зависимость кондактанса кольца от зеемановской энергии в режиме, когда сверхпроводящая проволока находится в нетривиальной фазе. Как было показано ранее, в такой ситуации проводимость характеризуется наличием резонансов Брейта-Вигнера и Фано.

Данный эффект на качественном уровне объясняется присутствием состояний, сильно- и слабосвязанных с контактами. В свою очередь, их наличие вызвано взаимодействием низкоэнергетических транспортных каналов, отвечающих рукавам и мостику. На графике 1а пунктирная (сплошная) кривая построена в отсутствие (с учетом) спин-орбитального взаимодействия в рукавах,  $A_{so}$ . Обе кривые на рисунке 1а демонстрируют качественно схожее поведение. При этом оно существенно меняется с ростом зеемановской энергии: при  $V_h < 1$  доминирует режим высокого пропускания,  $G=1$  (в единицах  $2G_0=2e^2/h$ ), с периодически возникающими антирезонансами Фано, где  $G=0$ ;

при  $Vh > 1$  наблюдается режим слабого пропускания,  $G \ll 1$ , с периодически возникающими резонансами Брейта-Вигнера, где  $G=1$ . Отмеченная разница объясняется возрастающим перекрытием волновых функции ММ, локализованных на противоположных концах мостика,  $\Gamma_{MBS}$ , при увеличении магнитного поля. Соответствующая зависимость представлена на рисунке 1b. Видно, что перекрытие испытывает рост на несколько порядков, отражая тенденцию к переходу от МС к АС. Видно, что учет спин-орбитальной связи в подводящих проволоках приводит к смещению антирезонансов Фано, поскольку их положение совпадает с минимумами энергии возбуждения этой подсистемы.

Большинство работ, посвященных топологическим краевым состояниям, описывают их свойства в рамках полубесконечных моделей, позволяющих игнорировать размерные эффекты. В то же время для практического использования топологических изоляторов и сверхпроводников при создании нано-устройств требуется изучить влияние эффектов ограниченной геометрии на свойства краевых состояний. Этому посвящено ограниченное число работ (например, [3])

Нами была исследована модель Bernevig-Hughes-Zhang в условиях полностью ограниченной геометрии, приводящей к наличию точек неаналитичности фермионных траекторий на стыке двух непараллельных границ. Выявлено, что наличие таких точек приводит к монотонному изменению характера пространственного распределения амплитуды волновой функции краевого состояния при изменении энергии состояния от центра объемного спектра к ее границе. Так, электронная плотность состояния в углу падает от центра щели к ее границе, в то время как на середине щели она остается практически постоянной. Это позволяет управлять током через топологический изолятор в форме квадратной пластины с помощью поля затвора при подключении контактов к углам системы.

### Список литературы

1. Kitaev A. Yu. Fault-tolerant quantum computation by anyons // *Ann. Phys.* 2003. V. 303. P. 2-30.
2. Liu C.-X., Sau J. D., Das Sarma S. Distinguishing topological Majorana bound states from trivial Andreev bound states: Proposed tests through differential tunneling conductance spectroscopy // *Phys. Rev. B.* 2018. V. 97. P. 214502(1-7).
3. Chen R., Zhou B. Finite size effects on the helical states on the Lieb lattice // *Chinese Physics B.* 2016. V. 25. P. 067204.

УДК 537.9

**Е. В. Богданов<sup>1,2</sup>, Е. И. Погорельцев<sup>1,3</sup>**<sup>1</sup>Научный сотрудник, Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Россия, Красноярск<sup>2</sup>Доцент, Красноярский государственный аграрный университет, Россия, Красноярск<sup>3</sup>Доцент, Сибирский федеральный университет, Россия, Красноярск**ВЛИЯНИЕ ДЕЙТЕРИРОВАНИЯ НА ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ДИОКСОТЕТРАФТОРИДЕ И ОКСОПЕНТОФТОРИДЕ ВАНАДИЯ**

Оксифториды ванадия (VOF), благодаря способности атома ванадия менять валентные состояния, формируют различные искаженные фторкислородные октаэдры, которые могут привести к наличию полярных свойств. Однако в большинстве VOF фторкислородный анион разупорядочен. Полностью упорядоченное состояние наблюдалось только в кристалле  $K_2VO_2F_3$ , а в кристалле  $(NH_4,K)_3VO_2F_4$ , который относится к семейству эльпасолитов и при комнатной температуре (RT) имеет ромбическую симметрию (пр. гр. *Immm*), обнаружено сегнетоэлектрическое и протонпроводящее состояние [1].

Структурные исследования диоксотетрафторида и оксопентофторида ванадия показали, что кристаллы  $(NH_4)_3VOF_5$  и  $(NH_4)_3VO_2F_4$  при комнатной температуре характеризуются ромбической симметрией [пр. гр. *Immm* ( $Z = 6$ ) и *I222* ( $Z = 6$ )] и имеют два независимых фторкислородных аниона в структуре [2]. Выше RT соединения претерпевают фазовые переходы в высокосимметричные динамически разупорядоченные структуры (пр. гр. *Fm3m*,  $Z = 4$ ) с 6 и 12 пространственными ориентациями фторкислородного октаэдра, соответственно. Аммонийные тетраэдры разупорядочены и/или частично упорядочены в исходной кубической пр. гр. *Fm-3m* и первой искаженной *Immm/I222* фазах.

Теплофизические исследования  $(NH_4)_3VO_2F_4$ , показали наличие четырех последовательных фазовых переходов первого рода (*Fm-3m* ↔ *I222* ↔ *ромбическая* ↔ *P112/m* ↔ *P-1*) при температурах:  $T_1 = 438$  К,  $T_2 = 244$  К,  $T_3 = 210$  К и  $T_4 = 205$  К. Кристалл  $(NH_4)_3VOF_5$ , испытывает последовательность фазовых превращений первого рода (*Fm-3m* ↔ *Immm* ↔ *моноклинная* ↔ *P-1*) при температурах:  $T_1 = 349$  К,  $T_2 = 230$  К и  $T_3 = 221$  К. Появление при  $T < T_2$  двойников различной ориентации препятствует уточнению структуры второй ромбической, моноклинной и триклинной фаз.

В результате дейтерирования кристалла  $(ND_4)_3VO_2F_4$  обнаружено значительное увеличение объема элементарной ячейки по сравнению с протонированным  $(NH_4)_3VO_2F_4$  (~ 1.5 %) [3], что привело к изменению химического давления. Вторая ромбическая фаза в  $(ND_4)_3VO_2F_4$  выклинивается и вместо последовательных фазовых переходов *Immm* ↔ *ромбическая фаза* ↔ *P112/m* имеет место прямой переход *Immm* ↔ *P112/m*. При увеличении внешнего давления температурной области устойчивости ромбической фазы *Immm* расширяется. Характер изменения температур фазовых переходов в результате замещения D → H согласуется с уменьшением химического давления. При дейтерировании  $(NH_4)_3VOF_5$ , имеющего выделенное направление (одиночная связь V-F), обнаружено существенно меньшее увеличение объема элементарной ячейки (~ 0.2 %), близкая величина наблюдалась в результате дейтерирования аммонийной группы в кристаллах  $(NH_4)_2MeO_2F_4$  ( $Me = W, Mo$ ) [4]. При увеличении внешнего давления  $(NH_4)_3VOF_5$  происходит выклинивание искаженной *моноклинной фазы* и наблюдается прямой переход *Immm* ↔ *P-1*. Диэлектрические исследования показали, что в результате дейтерирования, природа фазовых переходов осталась несегнетоэлектрической.

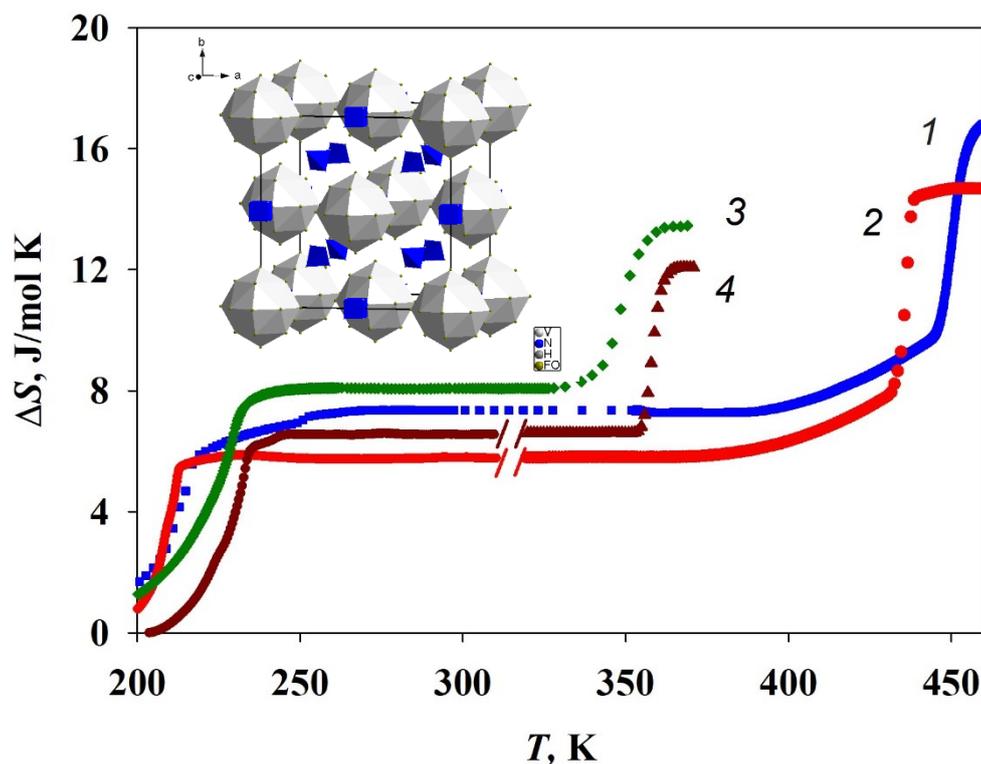


Рис. Температурные зависимости изменения энтропии при последовательности фазовых переходов в протонированных  $(\text{NH}_4)_3\text{VO}_2\text{F}_4$  (1) и  $(\text{NH}_4)_3\text{VOF}_5$  (3), и в дейтерированных кристаллах  $(\text{ND}_4)_3\text{VO}_2\text{F}_4$  (2) и  $(\text{ND}_4)_3\text{VOF}_5$  (4). На вставке структура кубической фазы кристалла  $(\text{NH}_4)_3\text{VOF}_5$  при  $T = 383$  К

Суммарные экспериментальные энтропии переходов  $(\text{ND}_4)_3\text{VO}_2\text{F}_4$  ( $\Sigma\Delta S_i \approx R \cdot \ln 6$ ) и в  $(\text{NH}_4)_3\text{VO}_2\text{F}_4$  ( $\Sigma\Delta S_i \approx R \cdot \ln 8$ ) и  $(\text{ND}_4)_3\text{VOF}_5$  ( $\Sigma\Delta S_i \approx R \cdot \ln 4$ ) и в  $(\text{NH}_4)_3\text{VOF}_5$  ( $\Sigma\Delta S_i \approx R \cdot \ln 6$ ) оказались значительно меньше энтропий, следующих из модели разупорядочения структурных элементов в фазе  $Fm-3m$  ( $\Sigma\Delta S_i \approx R \cdot \ln 60$  [2]), которые, скорее всего, можно рассматривать как предельно возможные для фторкислородных ванадатов. Уменьшение полной энтропии  $\Sigma\Delta S_i$  в результате дейтерирования с большой долей вероятности свидетельствует в пользу значительного ангармонизма колебаний аммонийных тетраэдров.

#### Список литературы

1. S. J. Patwe, A. S. Nagabhusan, K. G. Girija, C. G. Sivan Pillai, A. K. Tyagi, // J. Mater. Res., 25, 1251–1263 (2010).
2. A. A. Udovenko, E. I. Pogoreltsev, Y. V. Marchenko and N. M. Laptash. // Acta Cryst. B73, 1085 (2017).
3. Е. В. Богданов, Е. И. Погорельцев, М. В. Горев, М. С. Молокеев, И. Н. Флеров. // ФТТ, 61 (2), 10 (2019).
4. E. V. Bogdanov, E. I. Pogoreltsev, M. V. Gorev and I. N. Flerov. Inorg. Chem., // 56 (11), 6706 (2017).

УДК 528.8.04, 528.88

**И. Ю. Ботвич**

*м.н.с., Институт биофизики СО РАН, Россия, Красноярск*

## **ОЦЕНКА СОСТОЯНИЯ ЛЕСНОЙ РАСТИТЕЛЬНОСТИ ЗАПОВЕДНОЙ ТЕРРИТОРИИ КРАСНОЯРСКОГО КРАЯ ПО СПУТНИКОВЫМ ДАННЫМ**

Государственный природный заповедник «Столбы» занимает площадь около 47 тыс. га, располагается на правом берегу р. Енисей между его притоками Базаихой, Маной, Б. Слизневой; в северо-восточной части граничит с г. Красноярск. В условиях труднодоступности и обширности территории заповедника методы дистанционного зондирования позволяют получать неоченимую информацию о состоянии лесной растительности. С начала 2000-х гг. зафиксирована динамика массового усыхания пихтовых древостоев в горных лесах Восточного Саяна (заповедник «Столбы»). Беспрецедентное по масштабам усыхание пихты оказалось спровоцировано водным стрессом, обусловленным возрастанием температуры воздуха, в синергизме с воздействием уссурийского полиграфа (*Polygraphus proximus Blandford*), ксилофага, ранее не наблюдавшегося в ареале *Abies sibirica* [1]. Анализ отдельных тестовых участков, расположенных на территории заповедника, показал, что с 2003 по 2016 гг. хвойные и лиственные древостои имеют отрицательный уклон трендов усредненных Normalized Difference Vegetation Index (NDVI) за период май – сентябрь ( $NDVI_{year}$ ) и максимальных значений NDVI. При этом уклон трендов NDVI хвойных древостоев превышает уклон трендов NDVI лиственных древостоев. Это свидетельствует о более быстром уменьшении биомассы хвойной растительности, чем лиственной. [2]

Для анализа пространственно-временных изменений лесной растительности заповедника «Столбы» (за последние 20 лет) построена ГИС-модель заповедника «Столбы», включающая карту растительного покрова (расположение преобладающих древесных пород), карты пространственного распределения линейных трендов NDVI (по данным Modis спутников Terra и Aqua), карты пространственного распределения значений NDVI (по данным Sentinel-2), карту высот (DEM).

Карта пространственного распределения линейных трендов среднегодовых NDVI лесной растительности заповедника построена за период 2000 – 2019 гг. по спутниковым данным Modis (рис. 1). Анализ распределения количества пикселей по значениям среднегодового тренда  $NDVI_{year}$  выявил, что для класса хвойная растительность преобладают отрицательные значения линейного тренда (на 23%). Для класса лиственная растительность – количество пикселей с положительными значениями уклона линейного тренда на 13.3% больше, чем с отрицательными. Установлено, что для вида кедр сибирский “*Pinus sibirica*” и пихта сибирская “*Abies sibirica*” значительно доминирует количество пикселей с отрицательным уклоном тренда – 98.1% и 92.6%, соответственно. Преобладание количества пикселей с положительным уклоном линейного тренда  $NDVI_{year}$  характерно для видов сосна обыкновенная “*Pinus silvestris*”, осина “*Populus tremula*” и береза “*Betula pendula*”. (рис. 2).

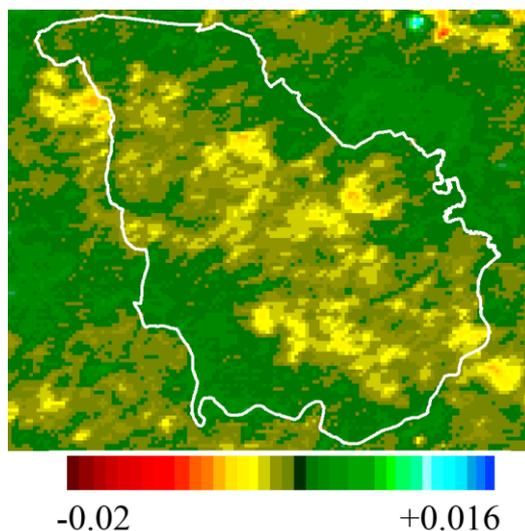


Рис. 1. Пространственное распределение трендов  $NDVI_{year}$  лесной растительности на территории заповедника “Столбы” за период 2000-2019 гг.

Полученные карты пространственного распределения линейных трендов среднегодовых NDVI подтвердили основные тенденции, выявленные при комплексном анализе данных инвентаризаций лесов заповедника [1].

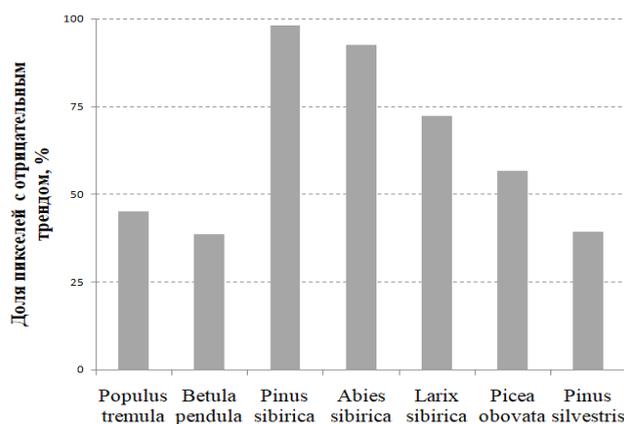


Рис. 2. Доля (%) числа пикселей с отрицательным трендом для каждого класса

В ходе реализации проекта проведено изучение фенологической изменчивости и определено состояние лесной растительности (хвойных и лиственных древостоев) на территории заповедника “Столбы” Красноярского края по данным дистанционного зондирования и наземной информации в течение 20-летнего периода времени с 2000 по 2019 гг. Построены карты пространственно-временных изменений спектральных характеристик растительности на территории заповедника “Столбы” по спутниковым данным Modis и Sentinel-2, позволяющие оценить состояние и изменчивость древесной растительности.

### Список литературы

1. Харук В.И., Шушпанов А. С., Петров И.А., Демидко Д. А., Им С. Т., Кнорре А. А. Усыхание ABIES SIBIRICA LEDEB. в горных лесах Восточного Саяна// Сибирский экологический журнал. 2019. Т. 26. № 4. С. 369-382
2. Письман Т. И., Ботвич И. Ю., Шевырногов А. П. Оценка состояния лесной растительности Красноярского края (заповедник "Столбы") по спутниковым данным// Современные проблемы дистанционного зондирования Земли из космоса. 2018. Т.15. № 5. С. 130-140.

УДК 543.054:546.47:546.72:664

**О. В. Буйко, С. И. Метелица, Р. В. Алоференко, Т. С. Кондратьева,  
А. И. Зыкова, Н. С. Кузьмин**

*Сибирский федеральный университет, Россия, Красноярск*

## **ПОСЛОЙНО МОДИФИЦИРОВАННЫЕ СОРБЕНТЫ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ, ПОЛИАРОМАТИЧЕСКИХ УГЛЕВОДОРОДОВ И СИНТЕТИЧЕСКИХ КРАСИТЕЛЕЙ В ОБЪЕКТАХ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ И ПИЩЕВЫХ ПРОДУКТАХ**

В связи с ухудшающейся экологической обстановкой некоторых регионов Российской Федерации и Красноярского края в частности, актуальна проблема экспрессного определения приоритетных загрязнителей в объектах окружающей среды и пищевых продуктах. Поэтому перспективным является разработка новых тест-систем и сорбционно-спектроскопических методик определения неорганических и органических загрязнителей окружающей среды. Такие тест-системы позволят внелабораторно, непосредственно в «полевых» условиях определять концентрации ионов тяжелых и цветных металлов, полиароматических углеводородов, а также синтетических красителей.

В качестве сорбентов использованы неорганические оксиды ( $\text{SiO}_2$ ,  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{ZrO}_2$ ), последовательно модифицированные полимерными полиаминами (полигексаметиленгуанидин (ПГМГ), поли-(4,9-диоксадодекан-1,12-гуанидина) (ПДДГ), гексадиметринбромид (ПБ)) и сульфопроизводными органических реагентов, селективными к выделяемому компоненту. Достаточно прочное закрепление реагентов на поверхности неорганических оксидов в диапазоне pH 2-9 происходит за счет образования большого количества межмолекулярных связей (водородных, электростатических и др.).

На основе полученных данных разработаны сорбционно-фотометрические, сорбционно-люминесцентные и тест-методики определения ряда ионов тяжелых и цветных металлов и синтетических пищевых красителей в объектах окружающей среды и пищевых продуктах.

С использованием кремнезема, модифицированного полигексаметиленгуанидином, ферроном и 2,2'-дипиридиллом разработаны методики сорбционно-фотометрического и тест определения Fe(II) и Fe(III) и сорбционно-люминесцентного определения Zn(II) и Cd(II).

Пределы обнаружения железа, цинка(II) и кадмия(II) сорбционно-фотометрическим и сорбционно-люминесцентным методами составляют 3 мкг/л (Fe(III)) и 0,5 мкг/л (Fe(II)), 4 мкг/л Zn(II) и 5 мкг/л Cd(II) соответственно. Полученные значения сопоставимы с пределами обнаружения, достигаемыми современным атомно-эмиссионным методом с индуктивно связанной плазмой. Визуально минимально определяемые концентрации Fe(III) в варианте цветовых шкал с использованием разработанных сорбентов составляют 50 мкг/л, а Fe(II) – 5 мкг/л и сопоставимы с пределом обнаружения, достигаемым атомно-абсорбционным методом с пламенным атомизатором. Разработанные методики позволяют определять отдельно различные формы элементов, такие как Fe(II) и Fe(III), что невозможно сделать с использованием современных спектроскопических методов анализа.

Сорбционно-фотометрическому определению Fe(II) и Fe(III) и сорбционно-люминесцентного определения Zn(II) и Cd(II) не мешают 1000-кратные избытки основных компонентов природных вод Na(I), K(I), Ca(II), Mg(II), Sr(II) и солевой фон до 2 г/л по NaCl.

Разработанные сорбционно-фотометрические и тест-методики определения Fe(III), сорбционно-люминесцентная методика Zn(II) использованы при их определении в речных водах Красноярского края - Базаиха, Кача, Чулым и минеральной воде «Загорье». Правильность полученных результатов подтверждена независимым атомно-эмиссионным с ИСП методом.

Полученные при исследовании способов закрепления сульфопроизводных органических реагентов результаты были использованы при разработке сорбционно-фотометрических и тест-методик определения синтетических пищевых красителей, также имеющих в своем составе сульфогруппы. Поэтому для сорбции синтетических пищевых красителей в качестве сорбентов использовали неорганические оксиды, модифицированные только полиаминами. Данные сорбенты не имеют собственной окраски, поэтому в процессе сорбции пищевых красителей из водных растворов сорбент окрашивается в соответствующий цвет красителя.

Показано, что синтетические пищевые красители количественно (95-99 %) извлекаются неорганическими оксидами, модифицированными полиаминами, из водных растворов в широком диапазоне pH 2-9 в течение 3-15 мин.

Сопоставление спектров поглощения красителей в растворе со спектрами диффузного отражения на поверхности свидетельствует о сохранении хромофорных свойств и указывает на нековалентный характер закрепления красителей на поверхности сорбентов.

Для экспрессного внелабораторного определения синтетических пищевых красителей в продуктах питания разработаны тест шкалы на основе сорбента SiO<sub>2</sub>-ПГМГ. Визуально минимально определяемые концентрации для синтетических пищевых красителей желтый «солнечный закат» FCF, понсо 4R, кармуазин, синий блестящий FCF составляет 0,3; 0,3; 0,2; 0,1 мг/л соответственно.

Показано, что сорбционно-фотометрическому и тест-определению синтетических пищевых красителей в преобладающих количествах (2-50 г/л) не мешают сахара, лимонная и бензойные кислоты, а также другие консерванты и стабилизаторы.

Разработанные сорбционно-фотометрические и тест-методики определения синтетических пищевых красителей в варианте цветовых шкал с использованием оксидов алюминия и кремнезема, модифицированных полигексаметиленгуанидином использованы при определении синтетических пищевых красителей желтый «солнечный закат» FCF, понсо 4R, кармуазин, синий блестящий FCF в газированных напитках «Миринда Refreshing», «Fanta Mango», желе «Снеговичок» и алкогольном напитке аперитив «KV 14».

Синтезированы и исследованы новые сорбционные материалы на основе SiO<sub>2</sub>, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, TiO<sub>2</sub>, ZrO<sub>2</sub>, послойно модифицированных полиаминами и сульфопроизводными органических реагентов. Исследованы свойства полученных сорбентов по отношению к Cd(II), Zn(II), Fe(II), Fe(III) и пищевым красителям желтый «солнечный закат», понсо 4R, кармуазин, синий блестящий, тартразин и кармуазин. На основе полученных зависимостей разработан ряд сорбционно-спектроскопических методик определения цветных и тяжелых металлов, синтетических пищевых красителей в природных водах Красноярского края и различных продуктах питания. Для экспрессного внелабораторного анализа разработан ряд тест-методик определения ионов цветных, тяжелых металлов и пищевых красителей.

УДК 538.955

**И. Г. Важенина<sup>1</sup>, Д. С. Цикалов<sup>1</sup>, Р. Н. Ярославцев<sup>1</sup>, А. С. Клепикова<sup>2</sup>,  
Я. А. Пахомов<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук - обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН, Красноярск, Россия

<sup>2</sup>Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, Екатеринбург, Россия  
e-mail: irina-vazhenina@mail.ru

## **СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ ГРАДИЕНТНЫХ МАТЕРИАЛОВ, ОТЛИЧАЮЩИХСЯ ЗАДАНЫМ ВИДОМ ИЗМЕНЕНИЯ МАГНИТНОГО ПАРАМЕТРА**

Основная цель проекта – выявление и исследование параметров, влияющих на распространение высокочастотных волн в комбинированных пленочных гетероструктурах с размерами индивидуальных слоев нанометрового масштаба.

Объектами исследования в течение второго года выполнения проекта являлись трехслойные структуры, в которых ферромагнитные слои были разделены немагнитной Си прослойкой. Образцы первой серии были синтезированы магнетронным напылением с использованием установки MPS-4000-C6, ферромагнитные слои представляли собой однослойную пленку  $\text{Co}_{90}\text{Fe}_{10}$  сплава с толщиной 3.5 nm. Образцы второй серии были приготовлены методом химического осаждения, каждый ферромагнитный слой был в виде мультислойной пленки с градиентным распределением намагниченности по толщине.

Для образцов первой серии были измерены гигантский магниторезистивный эффект (~11%), а также прохождение электромагнитных волн в интервале частот 26 – 38 GHz по методике, описанной в [1]. Получены значения микроволнового магниторезистивного эффекта до ~17%, что практически в 3 раза превышает известные величины.

Образцы второй серии были исследованы методами спин-волнового и ферромагнитного резонанса. СВЧ спектры пленок были получены на оборудовании КРЦКП ФИЦ КНЦ СО РАН (спектрометр ELEXSYS E580, Bruker, Германия). Измерение СВЧ спектров проводилось при комнатной температуре в X диапазоне (частота накачки резонатора  $f=9.2$  GHz). При возбуждении обменных спиновых волн однородным переменным магнитным полем в многослойной системе ФМР спектр характеризовался акустическими и оптическими колебаниями вектора намагниченности в ферромагнитных слоях [2]. Установлена величина

обменного взаимодействия между слоями  $|J^{cl}| \approx 2 \text{ Эрг} \cdot \text{см}^2$ .

### **Список литературы**

1. Ринкевич А.Б., Ромашев Л.Н., Устинов В.В. Высокочастотное магнитосопротивление сверхрешеток Fe/Cr// ЖЭТФ. 2000. Т. 117. Вып. 5. С. 960-968.
2. Zhang Z., Zhou L., Wigen P.E., Ounadjela K. Angular dependence of ferromagnetic resonance in exchange-coupled Co/Ru/Co trilayer structures// Phys Rev B. 1994. Vol.50. №9. P. 6094-6112.

УДК 519.63

**А. В. Вяткин***Старший научный сотрудник, Институт вычислительного моделирования СО РАН, Россия, Красноярск*

## ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ КВАЗИУСТОЙЧИВЫХ ФИГУР, ОБРАЗОВАННЫХ МНОГОКОМПОНЕНТОЙ ГАЗОВОЙ СМЕСЬЮ, ВЫТЕКАЮЩЕЙ ИЗ ПРОМЫШЛЕННОЙ ДЫМОВОЙ ТРУБЫ

Проект направлен на развитие математических методов для формирования технологии управляемого распространения выбросов вредных веществ из дымовых труб тепловых электростанций и промышленных предприятий путем поиска подходящего движения заслонок (твердых стенок) и параметров течения газа достаточных для формирования квазиустойчивых фигур, состоящих из газа с примесями, и физико-математического моделирования распространения таких фигур в атмосфере.

В настоящей работе рассматривается модель течения многокомпонентной газовой смеси в трубе с заслонкой. Математическая модель построена на основе решения полной системы уравнений Навье-Стокса для смеси не реагирующих газов в диффузионном приближении

$$\frac{d\rho_i}{dt} + \rho_i \nabla \mathbf{v} = -\nabla \mathbf{J}_i, \quad \rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \nabla \Pi_{ij}, \quad \rho \frac{de}{dt} = -P \nabla \mathbf{v} - \nabla \mathbf{q} + \Phi.$$

$$P = \rho RT \sum_{i=1}^N \frac{c_i}{m_i}, \quad \mathbf{J}_i = \rho c_i \mathbf{w}_i, \quad c_i = \frac{\rho_i}{\rho}, \quad \rho = \sum_{i=1}^N \rho_i.$$

Здесь  $\rho$  – плотность смеси,  $\rho_i$  – приведенная плотность  $i$ -й компоненты,  $\mathbf{v}$  – скорость центра масс смеси,  $c_i$  – массовая концентрация  $i$ -й компоненты,  $\mathbf{w}_i$  – скорость диффузии  $i$ -й компоненты,  $\mathbf{J}_i$  – диффузионный поток  $i$ -й компоненты,  $P$  – давление,  $\Pi_{ij}$  – тензор напряжений,  $e$  – внутренняя энергия,  $\mathbf{q}$  – тепловой поток,  $\Phi$  – диссипативная функция,  $T$  – температура,  $R$  – универсальная газовая постоянная,  $m_i$  – молярная масса  $i$ -й компоненты. Диффузионные потоки компонент газа и коэффициенты переноса (вязкости, теплопроводности, диффузии) вычисляются на основе методов кинетической теории газов [1, 2].

Для аппроксимации полной (субстанциональной или лагранжевой) производной по времени в каждом уравнении системы используется метод траекторий, который заключается в аппроксимации этой производной с помощью разностной производной назад по времени вдоль траектории движения частицы. Под названием метода характеристик, или полулагранжевого метода, он впервые был применен для численного расчета пространственных течений газ в работе [3]. Дискретизация по пространству остальных слагаемых уравнений Навье-Стокса на каждом временном слое проводится методом конечных элементов с кусочно-трилинейными базисными функциями и применением квадратурных формул. Для решения систем алгебраических уравнений используется метод Якоби с улучшенным начальным приближением внутри внешних итераций по нелинейности.

Разработана параллельная версия алгоритма, основанная на технологии передачи сообщений MPI. Декомпозиция расчетной области осуществлена по вычислительным узлам с использованием разбиения вычислительной области на полосы, количество которых определяется количеством используемых вычислительных узлов. В связи с зависимостью по данным с предыдущего временного слоя, в каждой полосе выделены теневые грани для обмена значениями между соседними вычислительными узлами. Обмен значениями в теневых гранях осуществляется после каждого шага по времени при помощи пересылки сообщений. Проведенные вычислительные эксперименты подтверждают первый порядок сходимости

численного решения к точному решению.

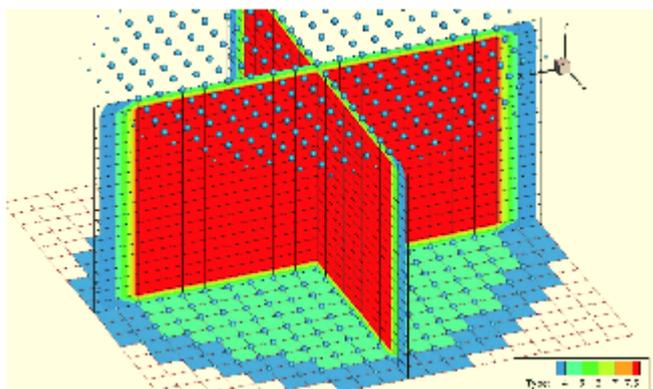


Рис. Значение модуля вектор-функции скорости

На основе построенной модели была проведена серия численных расчетов течения газовой смеси в трубе с заслонкой. Подвижная заслонка использовалась для формирования квазиустойчивых фигур образованных из газовой смеси. В ходе численных экспериментов подбирались параметры течения, размеры и скорость движения заслонки, обеспечивающие образование на выходе из трубы наиболее устойчивых со временем газовых образований.

В результате выполнения проекта опубликовано 3 статьи [4, 5, 6].

#### Список литературы

5. Лапин Ю. В., Стрелец М.Х. Внутренние течения газовых смесей. – М.: Наука. – 1989 – 368 с.
6. Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. – М.: ИЛ. – 1961. – 928 с.
7. Магомедов К.М. Метод характеристик для численного расчета пространственных течений газа // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 1966. – Т.6, № 2. – С.313-325.
8. A. V. Vyatkin, E.V. Kuchunova, M. V. Yakubovich and E.A. Efimov Combination of Semi-Lagrangian Approach and Finite Element Method for Navier-Stokes Equations // AIP Conference Proceedings. – 2019. (in Print)
9. Alexander Vyatkin and Elena Kuchunova Conservative Semi-Lagrangian Numerical Algorithm with Decomposition of Integration Domain into Tetrahedrons for Three-Dimensional Advection Problem // Lecture Notes in Computer Science. Numerical Analysis and Its Applications: 7th International Conference, NAA 2018, Lozenetz, Bulgaria, 2018, Revised Selected Papers. Springer. – 2019. – Vol. 11386 – P. 604-612.
10. Е. В. Кучунова, А. С. Керп, Е. С. Мальцева Полулагранжевый метод для уравнения неразрывности и уравнения адвекции-диффузии // ИТНОУ: Информационные технологии в науке, образовании и управлении. – 2018. – № 5 – С. 38-46.

УДК 535.015

**В. С. Герасимов<sup>1</sup>, А. Е. Ершов<sup>2</sup>**<sup>1</sup>с.н.с., ИВМ СО РАН, Россия, Красноярск; <sup>2</sup> н.с., ИВМ СО РАН, Россия, Красноярск**МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭФФЕКТОВ ОПТИЧЕСКОЙ ПАМЯТИ В СРЕДАХ, СОДЕРЖАЩИХ НЕУПОРЯДОЧЕННЫЕ МНОГОЧАСТИЧНЫЕ АГРЕГАТЫ ПЛАЗМОННЫХ НАНОЧАСТИЦ**

Агрегаты плазмонных наночастиц с локально анизотропной структурой проявляют эффект гигантского усиления локального электромагнитного поля вблизи частиц, входящих в резонансные внешнему оптическому полю домены (см рисунок (а)). Это свойство является причиной проявления в средах, содержащих такие агрегаты нелинейных процессов фотомодификации. Лазерная фотомодификация нанокompозитных плазмонно-резонансных материалов наблюдается при облучении их импульсным лазерным излучением пико- и наносекундной длительности.

Моделирование этого комплексного эффекта включает в себя несколько взаимообусловленных процессов. Ниже опишем основные особенности разработанной в рамках данной работы оптодинамической модели. До начала лазерного импульса соседние частицы в агрегате находятся в положении устойчивого равновесия ван-дер-ваальсовых и упругих сил. Поглощение частицами излучения приводит к нагреву их металлического ядра и передаче тепловой энергии полимерному адсорбционному слою (АС) и уменьшению его модуля упругости. Это сопровождается нарушением баланса сил и сближением частиц вплоть до полного контакта их металлических поверхностей.

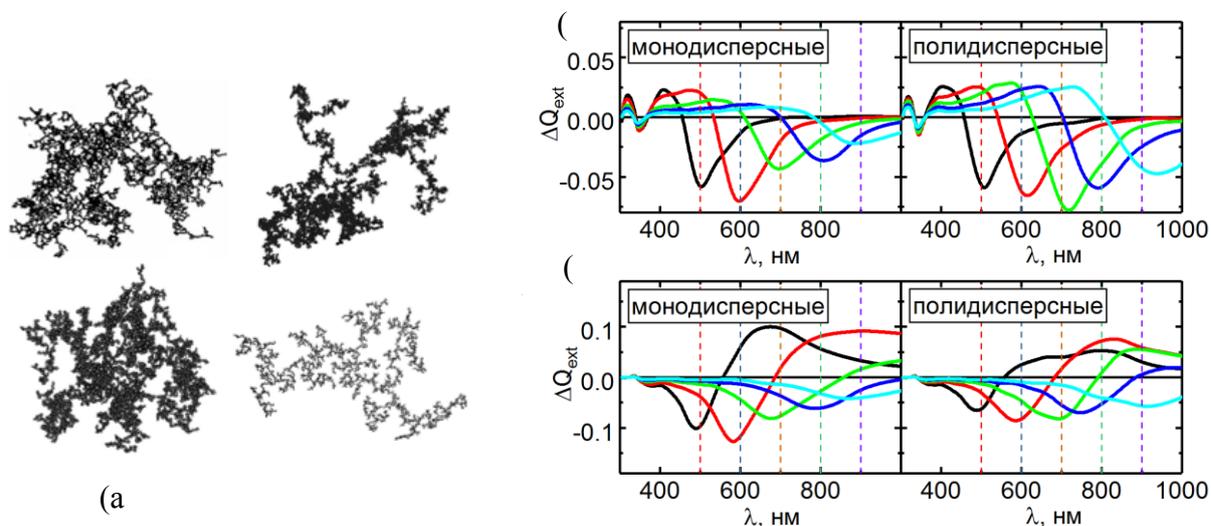


Рис. Примеры неупорядоченных агрегатов серебряных наночастиц - (а), разностные спектры (разность спектров до и после облучения) экстинкции, полученные на момент окончания импульса (динамическая модификация) – (б) и по прошествии 20 нс после окончания импульса (статическая фотомодификация) – (в), усредненные по набору из 2000 агрегатов. Длительность лазерного импульса 20 пс, интенсивность лазерного излучения  $2,4 \cdot 10^8$  Вт/см<sup>2</sup>

Изменение межчастичного зазора проявляется в сдвиге максимума полосы плазмонного поглощения относительно лазерной длины волны. Этим обусловлены статические изменения в спектре, сохраняющиеся после окончания импульса (эффект оптической памяти). В модели движение частиц описывается методом броуновской динамики [1].

Нагрев частиц в режиме динамической фотомодификации приводит к снижению добротности плазмонного резонанса [2], а, значит, также и к изменению взаимодействия лазерного излучения с агрегатом при ухудшении резонансных свойств системы. Это является причиной динамических спектральных изменений, проявляющихся лишь за время действия импульса, что особенно характерно в пикосекундном диапазоне длительностей. В разработанной оптодинамической модели взаимодействия агрегатов с импульсным лазерным излучением учитывается достаточно широкий ряд взаимосвязанных термодинамических, оптических, физико-химических, механических процессов. Реализация модели позволила воспроизвести наиболее реалистичную картину процесса фотомодификации.

На рисунках (б) и (в) представлены разностные спектры экстинкции при облучении пикосекундным лазерным импульсом в условиях как динамической модификации, так и статической фотомодификации. Агрегаты в данном исследовании получены с использованием модели, описанной в работе [3]. Из рисунков видно, что в случае динамической фотомодификации в длинноволновом крыле спектра отсутствует спектральный горб, в то время как в режиме статической фотомодификации этот горб присутствует, это объясняется различиями этих механизмов модификации. В то время как в динамическом режиме формирование провала в спектре обусловлено изменением оптических характеристик нагретых наночастиц, в режиме статической модификации оно обусловлено изменением структуры.

Разработанная модель может быть использована для исследования широкого круга процессов в наноматериалах, нанокompозитах, золях, проявляющихся под действием лазерного излучения высокой интенсивности, например, при оптимизации лазерных методов терапии с использованием плазмонных наночастиц, а модели упругой деформации АС частиц найдут свое применение в исследованиях стабильности нанокolloидов, при решении задач выделения коллоидных частиц драгоценных металлов из их растворов и т.д.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда науки в рамках научного проекта № 18-42-243023.

### **Список литературы**

1. Karpov, S. V., Isaev, I. L., Gavrilyuk, A. P., Gerasimov, V. S., Grachev, A. S. General principles of the crystallization of nanostructured disperse systems // *Colloid Journal*, 2009, 71(3).
2. Ershov, A. E., Gerasimov, V. S., Gavrilyuk, A. P., Karpov, S. V. Surface plasmon resonances in liquid metal nanoparticles // *Applied Physics B: Lasers and Optics*, 2017, 123(6).
3. SV Karpov, VS Gerasimov, IL Isaev, AV Obushchenko, Simulation of the growth of nanoparticle aggregates reproducing their natural structure in disperse systems // *Colloid Journal*, 2006, T. 68, №4, С 441-450.

УДК 574.24:582.475:630\*43

**И. Г. Гетте<sup>1</sup>, Н. Е. Коротаева<sup>2</sup>, М. И. Иванова<sup>2</sup>, И. А. Могильникова<sup>1</sup>,  
Г. Б. Боровский<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> Сибирский федеральный университет, Россия, Красноярск

<sup>2</sup> Сибирский институт физиологии и биохимии растений, Россия, Иркутск

## **ОЦЕНКА СОДЕРЖАНИЯ СТРЕССОВЫХ БЕЛКОВ И ИНТЕНСИВНОСТИ ФОТОСИНТЕЗА ХВОИ СОСНЫ ОБЫКНОВЕННОЙ В ПОСТПИРОГЕННЫЙ ПЕРИОД В УСЛОВИЯХ КРАСНОЯРСКОЙ ЛЕСОСТЕПИ**

Светлохвойные леса Центральной Сибири являются регионом, который испытывает частое воздействие природных пожаров. Прогнозирование послепожарного развития лесных экосистем становится важной задачей. Оценка устойчивости бореальных лесов и их отдельных компонентов к пирогенному воздействию является важной частью такого прогнозирования. Анализ послепожарных нарушений и изменений в лесных сообществах связан с изучением механизмов адаптации на примере ее отдельных компонентов, в частности, древостоя. Сосна обыкновенная (*Pinus sylvestris* L.) является одним из основных лесообразующих видов хвойных Сибири. В случае лесного пожара экстремальные температуры, представляют стрессовый фактор, определяющий продуктивность, выживаемость и способность к регенерации растений в лесных экосистемах. Одним из известных факторов, способствующих послестрессовому восстановлению на уровне клеток, являются белки теплового шока (Heat Shock Proteins, Hsp). Цель работы заключается в определении специфического набора Hsp, а так же фотосинтетической активности, у хвои сосны обыкновенной в постпирогенный период, как потенциально возможных индикаторов оценки физиологического состояния древостоя.

Работы проведены на пробных площадях, с сосновыми насаждениями II касса возраста. В вегетационный период 2017 г. на экспериментальном участке было проведено контролируемое выжигание, имитирующее низовой пожар слабой силы. Рядом с экспериментальным выделом заложен контрольный участок. Определение Hsp проводили во фракции общего белка хвои [1]. Относительный показатель замедленной флуоресценции (ОПЗФ) фиксировали с помощью флуориметра Фотон-10 [2].

По средневзвешенной категории состояние насаждения до проведения экспериментального выжигания в 2017 г. равнялось 0,83, что говорит о высокой биологической устойчивости насаждения. При этом отсутствовали усыхающие деревья. Через год после проведения эксперимента критерий средневзвешенной категории состояния насаждения снизился до 1,51. В насаждении усохло 17% от первоначального количества живых деревьев, 29 % перешло в категорию усыхающие. На рисунке представлены результаты, отражающие фотосинтетическую активность и содержание Hsp у хвои, испытавшей действие конвективного потока и сформировавшейся в условиях восстановления. Высокотемпературная обработка (45°C/1 час) привела к закономерному снижению фотосинтетической активности хвои с обеих площадей. Тем не менее, по данным, полученным в период активной вегетации, холодной акклимации или зимнего покоя, ОПЗФ у хвои с экспериментального участка подавляется в меньшей степени, относительно контрольного, что указывает на ее повышенную первичную теплоустойчивость. Повторная термическая обработка вызывала накопление Hsp 101, Hsp70, Hsp 60 и 17,6 в хвое контрольных деревьев. У хвои, взятой в период холодной акклимации и зимнего покоя, с деревьев после выжигания термическая обработка не вызвала значительного накопления Hsp. Но, учитывая, что в этих же пробах без искусственного стрессирования содержание Hsp оказалось выше, чем в

контрольных образцах, можно предположить, что произведенное ранее выжигание уже активировало экспрессию генов этих Hsp, при этом дополнительное воздействие не вызвало еще большей активации. В период активной вегетации накопление Hsp 101 и Hsp 60 в результате термической обработки оказывалось больше в хвое с деревьев после контролируемого выжигания. Таким образом, контролируемого выжигание проявило себя как фактор термического закаливания хвои, которое сохраняется на протяжении 2 лет после выжигания.

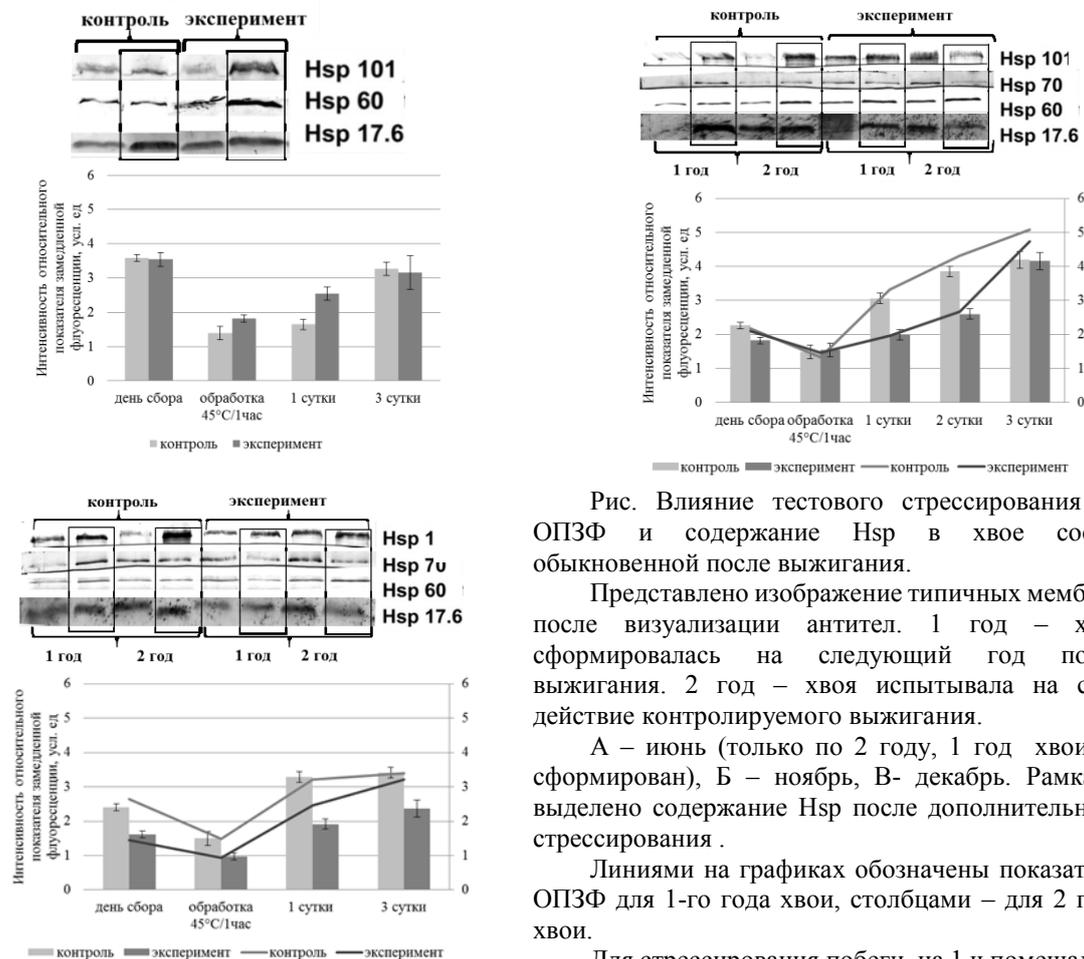


Рис. Влияние тестового стрессирования на ОПЗФ и содержание Hsp в хвое сосны обыкновенной после выжигания.

Представлено изображение типичных мембран после визуализации антител. 1 год – хвоя сформировалась на следующий год после выжигания. 2 год – хвоя испытывала на себе действие контролируемого выжигания.

А – июнь (только по 2 году, 1 год хвои не сформирован), Б – ноябрь, В- декабрь. Рамками выделено содержание Hsp после дополнительного стрессирования.

Линиями на графиках обозначены показатели ОПЗФ для 1-го года хвои, столбцами – для 2 года хвои.

Для стрессирования побеги на 1 ч помещали в термостат (MIR-154, Sanyo, Япония) при температуре 45°C, затем на 20 мин оставляли при комнатной температуре.

Результаты, полученные при регистрации флуоресцентных показателей, а так же динамики содержания Hsp для хвои, испытывавшей действие конвективного потока и сформировавшейся в условиях восстановления, показывают аналогичный отклик на искусственное стрессирование (45 °C/1 час). Таким образом, это может указывать на наличие системного ответа дерева на повышение температуры при прохождении низового пожара, а так же на изменившиеся условия среды.

### Список литературы

1. Korotaeva N.E., Oskorbina M.V., Kopytova L.D. et.al. Variations in the content of stress proteins in the needles of common pine (*Pinus sylvestris* L.) within an annual cycle //Journal of Forest Research. 2012. Vol. 17. No. 1. P. 89-97.
2. Grigoriev Y S, Furyaev E A, Andreev A A 1996 Method for determination of phytotoxic substances Patent № 2069851. Bul. Rec. 33

В работе использовалось оборудование ЦКП СИФИБР СО РАН «Биоаналитика».

УДК 577.151.03

**А. Е. Говорун**

*Сибирский федеральный университет, Россия, Красноярск*

## **СТАБИЛИЗАЦИЯ БИФЕРМЕНТНОЙ СИСТЕМЫ СВЕТЯЩИХСЯ БАКТЕРИЙ NADH:FMN-ОКСИДОРЕДУКТАЗА + ЛЮЦИФЕРАЗА ПУТЕМ ПОМЕЩЕНИЯ В ГЕЛИ И ВЯЗКИЕ РАСТВОРЫ БИОПОЛИМЕРОВ**

На сегодняшний день ключевой задачей является развитие методов экологического мониторинга. Метод биотестирования с использованием ферментов из светящихся бактерий NADH:FMN-оксидоредуктазы и люциферазы (Red + Luc) имеет неоспоримые преимущества: простота, быстрота анализа, невысокая стоимость. Однако разработанные к настоящему времени ферментативные реагенты требуют ряда усовершенствований, и в большей степени - повышения стабильности. Целью работы было создание усовершенствованного высокостабильного ферментативного реагента для билюминесцентного анализа уровня загрязненности окружающей среды.

Показано, что использование крахмала и желатина в качестве стабилизирующих добавок, повышающих вязкость среды, нецелесообразно. Подтверждено, что для создания стабильных ферментативных реагентов на основе Red + Luc перспективной технологией является иммобилизация путём включения в гели биополимеров [1].

Показано также, что наличие буферных солей оказывает значительное влияние на динамику высыхания капель в ходе процедуры иммобилизации Red + Luc в гели желатина / крахмала (рисунок). Обнаружено воздействие кристаллизации на ферменты, включаемые в гель. Из полученных результатов был сделан вывод о том, что для повышения активности и стабильности ферментативных реагентов следует ограничить содержание в их составе буферных солей.

Выяснить точное местоположение ферментов внутри иммобилизованных реагентов не удалось. Выявлено, что субстрат FMN распределен по всей площади высохших крахмальных капель и локализован в центральной части высохших желатиновых капель. Добавление субстрата тетрадеканала приводит к нарушению однородности крахмальных высушенных капель, а именно к возникновению зернистой структуры геля и круговых кристаллов буферных солей (сферолитов) в центральной части.

В результате проведенного исследования была модифицирована методика приготовления ферментативных реагентов для билюминесцентного анализа, и был получен более стабильный реагент путем иммобилизации Red + Luc в желатиновый гель. Данный ферментативный реагент может быть применен в области экологического мониторинга с целью предупреждения возможных загрязнений воды, почвы и воздуха.

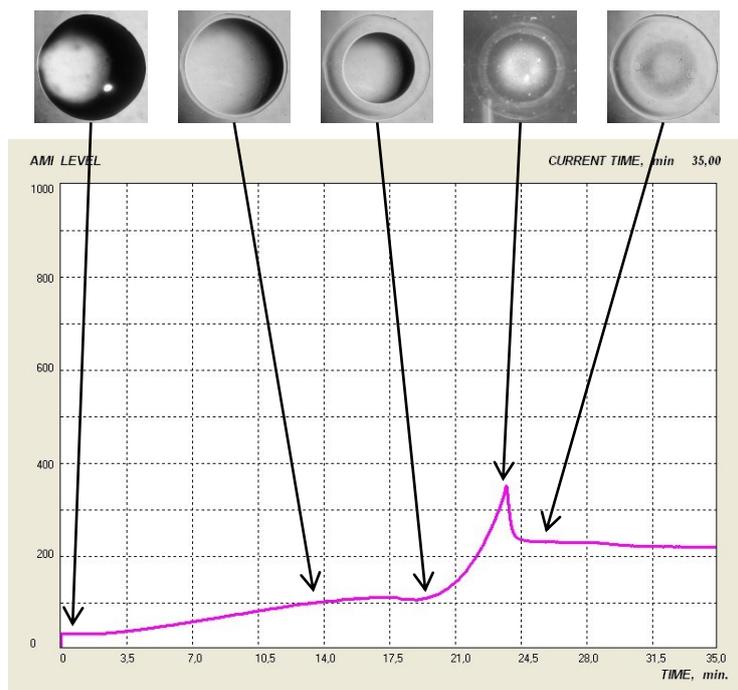


Рис. Этапы высыхания капли 1 %-го раствора желатина в калий-фосфатном буфере и соответствующие им участки кривой акустомеханического импеданса: *A – C* — уплощение купола капли и гелеобразование; *C – D* — кристаллизация солей в гелевой матрице; *D – E* — испарение остатков свободной воды.

### Список литературы

1. Говорун А. Е., Есимбекова Е. Н., Кратасюк В. А. Функционирование НАД(Ф)Н:ФМН-оксидоредуктазы в условиях макромолекулярного краудинга: моделирование *in vitro* // Доклады Академии наук. 2019. Т. 486. № 4. С. 500-503.

УДК 536.24

**Д. В. Гузей, А. В. Минаков, М. И. Пряжников, А. А. Шебелева**

*Сибирский федеральный университет, Россия, Красноярск*

## **РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ ИНТЕНСИФИКАЦИИ ТЕПЛООБМЕНА С ПОМОЩЬЮ НАНОСУСПЕНЗИЙ В РЕАЛЬНЫХ ТЕПЛООБМЕННЫХ АППАРАТАХ**

В связи с миниатюризацией устройств происходит рост плотности тепловых потоков вследствие чего обычные теплоносители оказываются мало эффективны. Использование наножидкостей без существенных затрат на модернизацию позволит на десятки процентов повысить эффективность работы уже существующего теплотехнического оборудования. Термин «наножидкость» был впервые предложен в работе [1] для обозначения двухфазной системы, состоящей из несущей жидкости и наночастиц высокотеплопроводного материала. Типичными несущими жидкостями являются вода, органические жидкости (этиленгликоль, масло), полимерные растворы. Материалом для наночастиц служат металлы, оксиды металлов, углеродные нанотрубки. Многочисленные исследования показали, что наножидкости обладают рядом особых свойств [2]. Теплопроводность наножидкостей значительно превышает теплопроводность несущей жидкости. В отличие от крупных дисперсных частиц, наночастицы слабо седиментируют и не подвергают эрозии каналы, по которым движутся. В связи с этим наножидкости пытаются использовать для охлаждения различных устройств, при создании новых систем транспортировки и производства тепловой энергии, в микроэлектромеханических системах (МЭМС), при создании смазочных материалов, в системах очистки воздуха и воды и др. [2, 3]. В ряде случаев это позволяет существенно повысить интенсивность теплоотдачи при охлаждении различных устройств.

Одним из интенсивно развивающихся направлений в области наножидкостей является исследование процессов теплообмена в условиях вынужденной конвекции (ламинарные и турбулентные течения наножидкостей через каналы различного диаметра, тепловые трубки, микротеплообменники и др.) [4]. Большинство работ показывает увеличение теплоотдачи при использовании наночастиц [1-6].

В данном проекте исследовалась интенсификация теплообмена в рекуперативных теплообменниках при помощи использования наносuspензий в качестве рабочих жидкостей. Исследования, проводимые нашим коллективом, в течение ряда лет, показали, что добавление в жидкости наночастиц позволяет значительно интенсифицировать вынужденную конвекцию в круглых каналах при ламинарном и турбулентном режимах течения. Эксперименты проведены для рекуперативных теплообменных аппаратов (пластинчатых и кожухотрубных теплообменников). Данные виды теплообменных аппаратов в настоящее время широко используются в различных отраслях промышленности.

Показано, что коэффициент теплоотдачи наножидкости в ламинарном режиме возрастает при увеличении концентрации частиц. Исследование зависимости коэффициента теплоотдачи от размера наночастиц показало, что в ламинарном режиме течения при фиксированном расходе коэффициент теплоотдачи всегда возрастает с увеличением размера частиц. В случае фиксированных значений числа Рейнольдса зависимость коэффициента теплоотдачи от размера наночастиц может иметь максимум.

Было показано влияние материала наночастиц на коэффициент теплоотдачи. Зависимость коэффициента теплоотдачи от материала наночастиц полностью обусловлена теплофизическими свойствами наножидкости. Прежде всего, вязкостью и теплопроводностью.

Интенсификация коэффициента теплоотдачи также зависит от свойств базовой жидкости, наножидкость на основе жидкости с более низкой теплопроводностью имеет более высокий прирост коэффициента теплоотдачи.

Было показано, что интенсификация коэффициента теплоотдачи за счет использования наножидкостей является нетривиальной проблемой. Величина интенсификации теплоотдачи зависит от соотношения вязкости и теплопроводности наножидкости, а, следовательно, от материала частиц и их размера.

Говоря об эффективности использования наножидкости для охлаждения, мы всегда должны учитывать мощность, потребляемую насосом для прокачивания жидкости. С этой целью в этой работе систематически измерялась величина перепада давления в рабочем участке. Однако коэффициент сопротивления пропорционален коэффициенту вязкости, а вязкость наножидкостей значительно превышает вязкость базовой жидкости. Следовательно, гидравлическое сопротивление наножидкостей значительно выше, чем у базовой жидкости. Однако положительным аргументом с точки зрения использования наножидкостей в качестве рабочей жидкости в различных тепловых устройствах является то, что теплопроводность наножидкости (и, следовательно, коэффициент теплоотдачи) возрастает с увеличением размера частиц, тогда как коэффициент вязкости, напротив, падает с увеличением размера частиц. Поэтому с точки зрения затрат энергии на прокачивание теплоносителя всегда можно найти определенный оптимум.

### **Список литературы**

1. Choi S.U.S. Enhancing thermal conductivity of fluids with nanoparticles // *Developments and applications of non-newtonian flows*, ASME FED, 1995. V. 66, p. 3408–3416.
2. Kumar Das S., Choi S.U.S., Wenhua Y., Pradeep T. *Nanofluids: science and technology*. John Wiley & Sons, 2008.
3. Рудяк В.Я., Белкин А.А. Моделирование коэффициентов переноса наножидкостей. *Наносистемы: физика, химия, математика*, 2010. Т. 1 (1), с. 156–177.
4. Терехов В.И., Калинина С.В., Леманов В.В. Механизм теплопереноса в наножидкостях: современное состояние проблемы. Часть 2. Конвективный теплообмен // *Теплофизика и аэромеханика*. 2010. № 2. с. 173–188.
5. Pak B., Cho Y.I. Hydrodynamic and heat transfer study of dispersed fluids with submicron metallic oxide particle // *Experimental heat transfer*, 1998. V. 11. p. 151–170.
6. D. Liu, L. Yu. Single-phase thermal transport of nanofluids in a minichannel // *Journal of heat transfer*. 2011. V. 133. 031009.

УДК 572.08

**Е. А. Евсеенко, К. И. Ильченко**

*Молодые ученые КГПУ им. В.П. Астафьева, Россия, Красноярск*

*Научный консультант – доктор физико-математических наук, профессор В. И. Кирко  
КГПУ им. В.П. Астафьева, Сибирский федеральный университет, Россия, Красноярск*

## **СУБЪЕКТИВНОЕ ВОСПРИЯТИЕ КАЧЕСТВА ЖИЗНИ И РАЗВИТИЕ ЧЕЛОВЕЧЕСКОГО КАПИТАЛА НАРОДА КЕТО, ПРОЖИВАЮЩЕГО В ТУРУХАНСКОМ РАЙОНЕ КРАСНОЯРСКОГО КРАЯ**

Красноярский государственный педагогический университет им. В. П. Астафьева (КГПУ им. В. П. Астафьева) совместно с Сибирским федеральным университетом (СФУ) и Красноярским государственным аграрным университетом (КГАУ) с 2010 г. планомерно проводит комплексные исследования северных и арктических поселков Красноярского края и Республики Саха (Якутия) – мест локального проживания коренных малочисленных народов Севера.

Муниципальное образование Борский сельский Совет – третье по численности населения (после Игарки и Туруханска) поселение внутри Туруханского района Красноярского края. В нем проживает 2668 чел., плотность населения 4,4 чел./км<sup>2</sup>. По данным переписи 2017 г., в Борском сельсовете проживало 2 574 человека, из них в Бору – 2496, в Подкаменной Тунгуске – 41, в Сумароково – 72 (Численность населения..., 2017). Демографическая ситуация имеет отрицательные тенденции. Население в основном русское, однако, есть и несколько семейно-родовых общин представителей коренных малочисленных народностей Севера – кетов.

Именно интерес к изучению данного коренного малочисленного народа и определил необходимость проведения междисциплинарных исследований, с целью выявления социально-экономической, антропологической, эколого-географической и медико-психологической этнодифференциации жителей поселков арктической зоны.

Ниже будут представлены краткие выводы исследований по вышеизложенным направлениям:

1. Социально-экономическое исследование выявило характеристики субъективной оценки качества жизни коренного населения п. Бор. Условия труда и занятости, отдыха и оздоровления, быта и инфраструктуры в совокупности имеют показатели на уровне среднего значения, что говорит о средней удовлетворенности населением жизнью в этом населенном пункте. Но, несмотря на это, большая часть взрослого коренного населения не желала бы сменить место жительства, объясняя это привычкой, любовью к малой Родине и нежеланием оставлять родных и друзей в отличие от детской возрастной группы, которая имеет обратный результат, в связи с личным желанием и стремлением получить качественное образование и карьеру в крупных городах за пределами своего района.

2. Медико-психологические исследования выявили характеристики сенсомоторных реакций школьников. Было выявлено, что для школьников, постоянно проживающих на территории Крайнего Севера, характерны наличия закономерных возрастных изменений в показателях сенсомоторных реакций различной сложности и модальности, превышающих значения детей других широт, встреченных в литературе; с возрастом так же идет становление силы и лабильности ЦНС, что выражено в повышении успешности выполнения заданий. Отмечено характерное замедление ответных реакций на раздражители.

3. Антропологическое исследование показало, что наиболее высокие результаты по сенсомоторным пробам отмечены у детей 13-15 лет, для которых характерно большее напряжение сердечно-сосудистой системы. Что является следствием влияния не только среды, но изменений, происходящих в организме в связи с возрастными перестройками. А значит, дети этой возрастной категории являются группой риска срыва адаптационных возможностей.

4. Исследование исторических аспектов развития территорий Турханского района выявило, что территория Борского сельсовета имеет большой туристический, экономический и исторический потенциал. За 73 года существования поселка было приложено очень много усилий для развития данного населенного пункта. Изначально созданный как поселок при промежуточном аэропорте на пути к Норильску, п. Бор стал одним из крупных и экономически стабильных поселков севера Енисейской Сибири. Объекты социальной инфраструктуры, развивающиеся с конца 1940-х гг., до сих пор продолжают существовать, меняя формы. Несмотря на свою удаленность, поселок Бор сохранил развитую инфраструктуру, имеет все шансы на дальнейшее развитие.

Результаты полученного междисциплинарного исследования актуальны в связи с интересом и необходимостью комплексного изучения территорий, прилегающих к новому экономическому макропроекту «Енисейская Сибирь». Реализация инвестиционного проекта такого уровня связана с необходимостью проведения масштабных исследований населения, ведущего традиционный образ жизни и экономически зависимого от состояния окружающей среды.

#### **Список литературы**

1. М. М. Федотова, В. И. Кирко, Е. А. Евсеенко Выдержки из архивных и административных документов поселка Носок Таймырского Долгано-Ненецкого МР Красноярского края-места локального проживания ненцев (коренного малочисленного народа севера). Северные архивы и экспедиции. №0 (0), с.

2. О. Э. Кондакова, Е. А. Евсеенко Возрастные особенности точных и временных характеристик сенсомоторных реакций школьников крайнего Севера с разными адаптационными возможностями. Журнал СФУ. Биология № 0(0), с.

3. И. Е. Бобрик, Е. А. Евсеенко. Борский сельсовет Туруханского района: страницы истории. Северные архивы и экспедиции. №0 (0), с.

4. К. И. Ильченко, Е. А. Евсеенко Субъективная оценка качества жизни жителями поселка Новорыбная Хатангского муниципального района Красноярского края (по материалам экспедиции 2018 года). Социодинамика. № 0 (0), с.

УДК 538.9

**В. С. Жандун***Старший научный сотрудник, Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН – обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН, Россия, Красноярск***ПЕРВОПРИНЦИПНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПОЛЯРИЗАЦИОННЫХ, МАГНИТНЫХ, ЭЛЕКТРОННЫХ И МАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ СОЕДИНЕНИЙ СО СТРУКТУРОЙ ШПИНЕЛИ, СОДЕРЖАЩИХ 3D И 4F ИОНЫ**

Теоретическое исследование физических свойств кристаллов с использованием первопринципных методов расчета в настоящее время является важнейшим этапом при разработке и создании новых функциональных материалов. С одной стороны они позволяют понять и объяснить фундаментальные причины, лежащие в основе физических свойств, а с другой стороны, предсказывать и моделировать новые материалы с заданными свойствами для целенаправленного улучшения функциональности материалов.

В рамках пакета VASP [1-2], основанного на теории функционала плотности, проведено теоретическое исследование структурных, магнитных, оптических и электронных свойств шпинелей  $\text{FeMn}_2\text{O}_4$  и  $\text{MnFe}_2\text{O}_4$  [3-4]. Рассмотрены два типа шпинелей: нормальные  $\text{AB}_2\text{O}_4$  и обратные  $\text{B}_2\text{AO}_4$  шпинели. Структура кубической нормальной и обратной шпинели показана на Рис.1а и 1б. В структуре нормальной шпинели (Рис. 1а) двухвалентные катионы  $\text{A}^{2+}$  окружены ионами кислорода, образующими тетраэдр, а трехвалентные ионы  $\text{B}^{3+}$  окружены ионами кислорода, расположенными в вершинах октаэдра. В структуре обратной шпинели  $\text{B}(\text{AB})\text{X}_4$  (Рисунок 1б) двухвалентные катионы  $\text{A}^{2+}$  наоборот занимают центры кислородных октаэдров, как и половина  $\text{B}^{3+}$  ионов. Вторая половина  $\text{B}^{3+}$  ионов занимает центры кислородных тетраэдров.

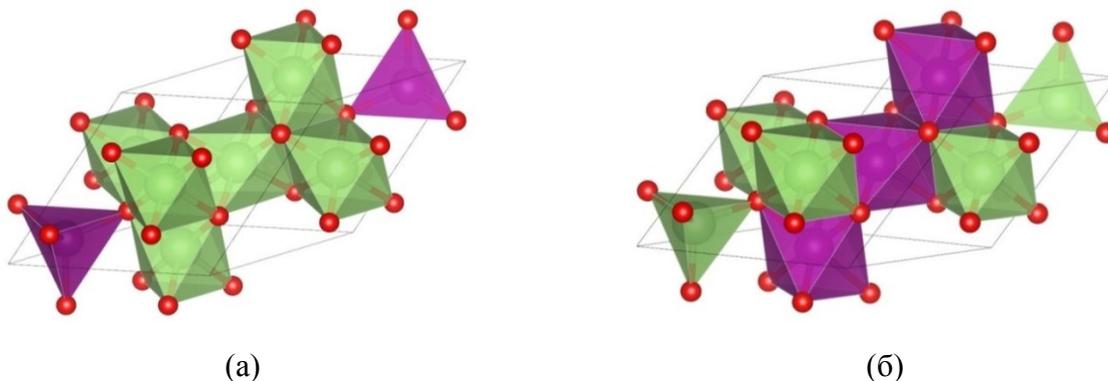


Рис. 1. Кристаллическая структура нормальной (а) и обратной (б) шпинели.

Показано, что нормальная шпинель  $\text{FeMn}_2\text{O}_4$  является полуметаллом, тогда как в электронной структуре обратной шпинели  $\text{Mn}_2\text{FeO}_4$  имеется энергетическая щель;  $\text{MnFe}_2\text{O}_4$  остается диэлектриком в обеих структурах (Рис. 2). Основное магнитное состояние обеих шпинелей – ферримагнитное с антипараллельным упорядочением магнитных моментов на А и В-катионах.

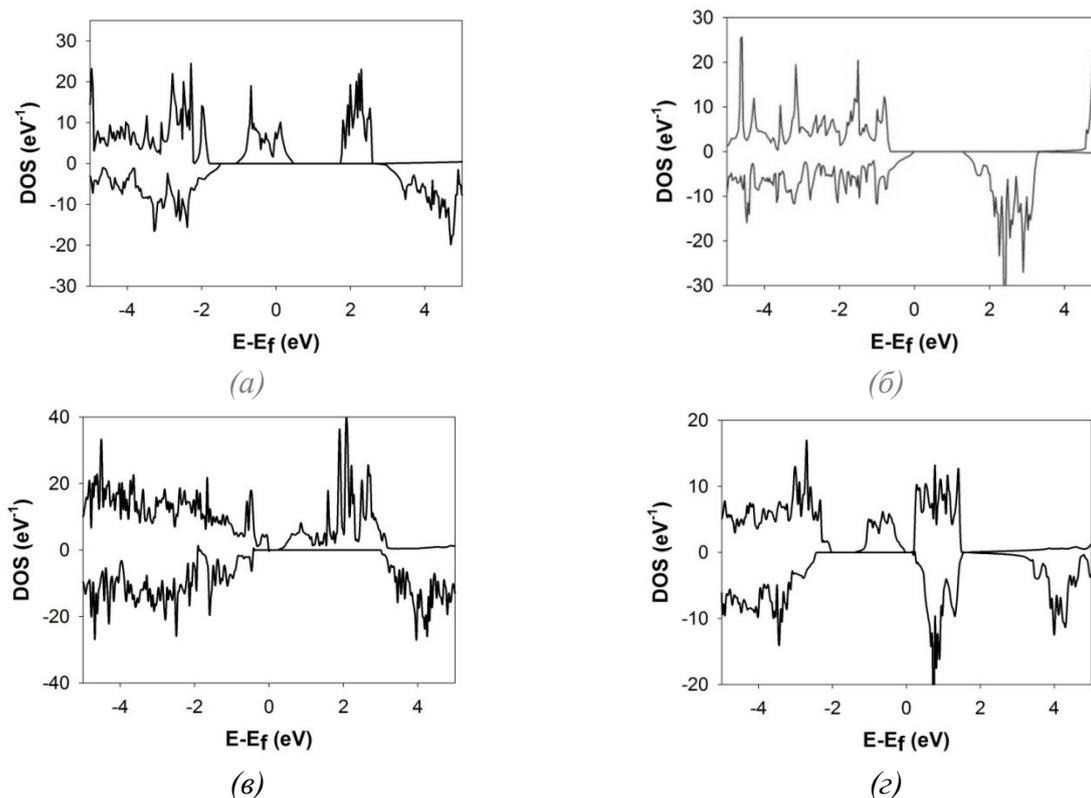


Рис. 2. Плотность электронных состояний (DOS) нормальных  $\text{FeMn}_2\text{O}_4$  (а) и  $\text{MnFe}_2\text{O}_4$  (б) и обратных  $\text{Mn}(\text{FeMn})\text{O}_4$  (в) и  $\text{Fe}(\text{MnFe})\text{O}_4$  (г) шпинелей. Ноль на шкале энергий соответствует энергии Ферми.

В шпинели косвенный обмен между тетраэдрическими и октаэдрическими ионами осуществляется с помощью промежуточных ионов кислорода. Для оценки косвенных обменных взаимодействий использовалась модель [5], основанная на теории косвенного обменного взаимодействия Андерсона [6] и Завадского [7]. Рассчитанные обменные интегралы  $J_{\text{Fe-Mn}} = -2,8 \text{ мЭВ}$  ( $\sim 31 \text{ K}$ ) и  $J_{\text{Mn-Fe}} = -2,3 \text{ мЭВ}$  ( $\sim 25 \text{ K}$ ) для нормальных шпинелей  $\text{FeMn}_2\text{O}_4$  и  $\text{MnFe}_2\text{O}_4$ , соответственно, являются антиферромагнитными в соответствии с результатами ab initio расчетов и экспериментальными данными [3,4]. Малая величина обменных интегралов обеспечивает низкую экспериментальную температуру Нееля.

### Список литературы

1. Kresse G. and Furthmuller J. Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set // Comput. Mat. Sci. 1996. Vol. 6. P. 15-27.
2. Kresse G. and Furthmuller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set // Phys. Rev. B. 1996. V. 54. P. 11169-1–11169-12.
3. J. Heeger and T. W. Houston. Nuclear Magnetic Resonance in Ferrimagnetic  $\text{MnFe}_2\text{O}_4$  // Phys. Rev. V.135. 1964. P. A661.
4. Boucher, R. Burl, and M. Perrin, Magnetic structure of iron manganite by neutron diffraction// Journal of applied physics. 1969. V. 40. P. 1126 – 1132.
5. Баюков О. А., Савицкий А. Ф. Прогноз магнитных свойств диэлектриков возможен// ФТТ. 1994. Т. 36 (7). С. 1923 - 1938.
6. Anderson P.W. New Approach to the Theory of Superexchange Interactions // Phys. Rev. 1959. V. 115. P. 2 - 13.
7. Sawatzky G., Geertsma W., Haas C. Magnetic interactions and covalency effects in mainly ionic compounds // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 1976. V. 3. P. 37 - 45.

УДК 539.26:519.65:519.688

**А. Н. Залого**

*Инженер-исследователь, Сибирский федеральный университет, Россия, Красноярск*

## **КОЭВОЛЮЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АТОМНО-КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ НОВЫХ ВЕЩЕСТВ ПО ДИФРАКЦИОННЫМ ДАННЫМ НА БАЗЕ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ГЕНЕТИЧЕСКИХ АЛГОРИТМОВ И СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ**

Задача определения неорганических кристаллических структур с большим числом атомов из данных порошковой дифракции является актуальной исследовательской задачей. В предшествующих работах [1,2] было показано, что эволюционный подход для определения кристаллических структур является перспективным по возможностям его модернизации. Однако постепенно становилось очевидным, что целевая функция на основе свертки критериев (критерия соответствия дифрактограмме и критерия физичности кристаллической структуры) является одним из главных ограничений для развития данного метода решения задачи: при повышении размерности критериев на основе свертки не позволяет эффективно организовать эволюционный отбор. При этом значительное влияние на результаты работы алгоритма оказывает настройка весовых коэффициентов критериев в свертке, эти коэффициенты могут значительно меняться при переходе от решения одной задачи к другой. Поэтому в данной работе предлагается использовать эволюционный алгоритм многокритериальной оптимизации для решения поставленной задачи. В частности – генетический алгоритм SPEA2 [3].

Главным понятием в алгоритмах многокритериальной оптимизации является «множество Парето». Этим термином называют группу таких индивидов в популяции, которые лучше других хотя бы по одному из критериев. Такие индивиды называются «недоминируемые». Название «доминируемый» индивид означает, что есть по крайней мере один индивид, который лучше данного по всем критериям. Все недоминируемые индивиды сохраняются в архивном множестве, которое участвует в операции скрещивания при формировании индивидов нового поколения.

Мы разработали мультипопуляционный вариант алгоритма SPEA2, в котором есть один управляющий процесс и несколько рабочих процессов, обмен между которыми реализован по схеме «звезда». В нём на рабочих процессах идёт эволюция по обычному алгоритму SPEA2, а на управляющем процессе хранится «главное архивное множество». Его размер равен числу рабочих процессов, умноженному на размер архивных множеств на них. Обмен индивидами между процессами происходит по следующей схеме.

1) Каждое поколение с рабочих процессов отправляются на управляющий процесс их архивные множества. Архивное множество управляющего процесса заполняется из смеси индивидов его архивного множества с предыдущего поколения и вновь пришедших индивидов.

2) Каждые 100 поколений управляющий процесс отправляет полностью своё архивное множество на все рабочие процессы.

Такая схема позволяет одновременно и производить обмен лидирующими решениями между популяциями, и обеспечить достаточную долю независимости для эволюции рабочих процессов между актами обмена.

В качестве тестовых образцов были использованы три образца, на которых проводилось тестирование предыдущих версий мультипопуляционных генетических алгоритмов (МПГА) для определения кристаллических структуры из данных порошковой дифракции. Это были два образца средней сложности и один образец высокой сложности. В таблице приведены результаты запусков и различающиеся настройки запусков. Каждый образец запускался сериями из нескольких пусков подряд с одинаковыми настройками. Также в таблице приведено сравнение с результатами, полученными в однокритериальных версиях МПГА для этих же образцов.

Таблица

Результаты запусков алгоритма и сравнение с результатами, полученными в однокритериальных версиях МПГА.

Образец	Степ. свободы	Способ запуска	Доля успешных запусков и среднее значение фитнеса найденных решений			
			МПГА с обменом типа «звезда»	МПГА с обменом по островной модели	МПГА с обменом по островной модели + функция сдвига структуры	Мульти-попул. SPEA2
K <sub>2</sub> PbO <sub>2</sub>	30	300 gen.,	<b>55%</b>	<b>60%</b>	<b>72%</b>	<b>84%</b>
		50 launches	39.96	27.73	19.34	12.91
Ca <sub>2</sub> Al <sub>3</sub> O <sub>6</sub> F	25	1000 gen.,	<b>22%</b>	<b>26%</b>	<b>40%</b>	<b>54%</b>
		50 launches	18.22	15.48	13.49	11.58
Er <sub>10</sub> W <sub>2</sub> O <sub>21</sub>	54	3000 gen.,	<b>0%</b>	<b>0%</b>	<b>10%</b>	<b>50%</b>
		10 launches	4.96	3.81	4.69	1.31

Таким образом, проведённые эксперименты показывают, что предложенный алгоритм более эффективен, чем ранее используемые алгоритмы однокритериальной оптимизации. В дальнейшем это позволит решить проблему определения более сложных кристаллических структур.

### Список литературы

1. A. Zaloga, I. Yakimov and P. Dubinin / Multi-population genetic algorithm for crystal structures solution from X-ray powder diffraction data // International Journal on Information Technologies and Security. 2018, 10(2), 119-128.
2. A. N. Zaloga, S. V. Burakov, I. S. Yakimov, K. A. Gusev and P. S. Dubinin / Island model with genetic algorithm for solution of crystal structure from X-ray powder diffraction data // IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. 2019, 537, 1-9.
3. E. Zitzler, M. Laumanns, and L. Thiele / SPEA2: Improving the strength pareto evolutionary algorithm, Technical report // Swiss Federal Institute of Technology. 2001, 1-21.

УДК 574.5, 504.06

**В. В. Зыков, Ф. А. Дарин<sup>2</sup>, А. О. Бульхин<sup>1</sup>, Г. Н. Болобанщикова<sup>1</sup>,  
Л. В. Белокопытова<sup>3</sup>, М. Н. Колпакова<sup>4</sup>, Н. А. Киященко<sup>5</sup>**

<sup>1</sup>Институт биофизики Сибирского отделения Российской академии наук – обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН

<sup>2</sup>Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера Сибирского отделения Российской академии наук

<sup>3</sup>Хакасский технический институт — филиал ФГАОУ ВПО «Сибирский федеральный университет» ФГАОУ ВО "Сибирский федеральный университет"

<sup>4</sup>Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт геологии и минералогии им. В. С. Соболева Сибирского отделения Российской академии наук

<sup>5</sup>ФГАОУ ВО "Сибирский федеральный университет"

## **ДОННЫЕ ОТЛОЖЕНИЯ ОЗЕРА УЧУМ (КРАСНОЯРСКИЙ КРАЙ) КАК ИСТОЧНИК ИНФОРМАЦИИ ДЛЯ РЕКОНСТРУКЦИИ ПАЛЕО-КЛИМАТА И ПРОГНОЗА ЛЕЧЕБНЫХ СВОЙСТВ ВОДОЕМА**

Озеро Учум (55.05.670 СШ, 89.43.390 ВД) расположено в Чебаково-Балахтинской (Северо-Минусинской) котловине, в 30 км к югу от г. Ужур (Красноярский край), на территории Ужурского района Красноярского края [1]. Вода озера известна своими лечебными свойствами, на берегу расположен популярный курорт «Озеро Учум». На данный момент озеро обладает меромиктическим режимом перемешивания, то есть оно в течение всего года разделено две части – верхний насыщенный кислородом и перемешанный эпилимнион и нижний, содержащий сероводород монимолимнион. Это свойство водоёма делает его особенно ценными, не только потому что оно обеспечивает его лечебные свойства но и создает условия для формирования своеобразного климатического архива в донных отложениях озера. В отличие от голомиктических озёр насыщенные сульфидом придонные воды предохраняют ил от взмучивания бентосом, таким образом ил на дне водоёма приобретает четкую слоистую структуру, состоящую из выраженных годовичных слоев – варв. Для расшифровки этих архивов нужно провести исследование с помощью нескольких методов. В данной работе были исследованы два керна донных отложений озера Учум, отобранные летом 2015 г, первый керн длиной 52 см (Учум-52) был использован для датировки и элементного анализа, а образцы из второго керна, длиной 82 см (Учум – 82), были проанализированы на пигментный состав, ископаемые створки диатомовых и алкеноны. Сопоставление кернов осуществлялось по характерным линиям, повторяющимся в обоих кренах.

Для начала был исследован ионный и солевой составы воды и донных отложений. С помощью программы PHREEQC 3.1.4 было проведено моделирование процессов осаждения по мере уменьшения объема воды. Таки образом, было показано что для озера Учум индикатором уровня озера в донных отложениях будут служить элементы кальция (Ca) и стронций (Sr). Так же была проведена датировка керна донных отложений Учум-52 по радиоактивному стронцию-137 (Sr-137), согласно пикам радиоактивности этого изотопа скорость накопления ила составляет от 1,55 (1986 г) до 2,02 мм(1963 г) в год.

Методом рентгено-флуоресцентного анализа получены сигналы различных элементов а именно – макро- К, Са, Тi, Fe, Mn и микроэлементов – V, Cr, Cu, Zn, As, Br, Rb, Sr, Y, Zr, Nb, Ga, Ni, U и Th. Динамика палеоиндикатора солености Sr/Ca ведет себя соответственно изменениям уровня озера, зафиксированным в течение последних 100 лет. Характерные пики этого показателя приходятся на участки крена, соответствующие периоду усыхания озера в 1920-30-ых годах [2].

Рассчитаны линейные регрессии между шириной годичных колец лиственниц, произрастающих в окрестностях озера и осадками, и уровнем озера зарегистрированными метеостанциями за последние сто лет. Полученные расчётные значения позволяют восстановиться пускай и небольшой точностью осадки и изменения уровня озера вплоть до 1740 гг.

Керн Учум-82 был исследован на пигментный состав, створки диатомовых и алкеноны. Были получены профили распределения пигментов по всей длине крена и идентифицированы по их источникам. Среди них обнаружены аллоксантин (криптофитовые), лютеин (высшие растения и зеленые водоросли), зеаксантин (цианобактерии), лороксантин (зеленые водоросли) и что особенно важно пигмент пурпурных серных бактерий (ПСБ) – окенон. Так как ПСБ анаэробы и для жизнедеятельности им необходимы свет и сероводород, окенон является палеомаркером наличия сероводородной зоны в толще озера и ее устойчивости. Содержание окенона неоднородного по всей длине крена, концентрация окенона варьирует от 15 до 450 мкг/г, на участках крена 200-270, 320-350, 460-520 содержание окенона принимает минимальные значения (ок. 1-3 мкг/г) и на участке 720-790 он исчезает полностью. Как правило, области пониженного содержания окенона соответствуют области пиков показателя Sr/Ca что говорит о том, что с понижением уровня озера Учум меромиксия в нем ослабевает.

Створки диатомовых керна Учум-82, представляли собой поврежденные остовы, малое количество которых делало затруднительным оценку динамики их численности. По всей видимости это вызвано неблагоприятными условиям для сохранения створок – высокая соленость и рН воды [3]. Из этого можно заключить что в озере не происходило значительного распреснения озера ни изменений кислотности его воды.

Алкеноны – длинноцепочечные углеводороды, производимые исключительно гаптофитовыми водорослями. Количество двойных связей в них изменяется в зависимости от внешних условий, в особенности температуры и солености [4]. Динамика, собственно, алкенонов донных отложений керна Учум-82 не демонстрирует корреляции с другими индикаторами за исключением лороксантина (коэф. корр. 0,53). Посчитаны индексы ненасыщенности Uk37, Uk38 и Uk3738. Они демонстрируют неравномерную динамику по всей длине крена. Индекс ненасыщенности Uk37 изменяются соответственно повышению температуры в последнем столетии. Индексы Uk3738 и UK38 демонстрируют изменения на участках с резким изменениями индекса Sr/Ca.

### Список литературы

1. Кривошеев, А. С., Хасанов, А. П. Лечебные озера Красноярского края. Красноярск. 1990
2. Meromixis and Seasonal Dynamics of Vertical Structure of Lake Uchum (South Siberia) / D. Y. Rogozin, V. V. Zikov, E. A. Ivanova // Contemporary Problems of Ecology. 2018. № 11(2). С. 195–206.
3. Diatom preservation: differential preservation of sedimentary diatoms in two saline lakes / R. J FLOWER., D. B. RYVES //Acta Bot. Croat. 2009. № 68 (2). С. 381–399.
4. Alkenone distribution in Lake Van sediment over the last 270 ka: influence of temperature and haptophyte species composition / Randlett, M., Marco, J., Stockhecke, M. et al. //Quaternary Science Reviews, 2014. № 104. С. 53-62.

УДК 538.915

Ю. В. Князев, А. С. Тарасов, М. С. Платунов, В. В. Юмашев

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

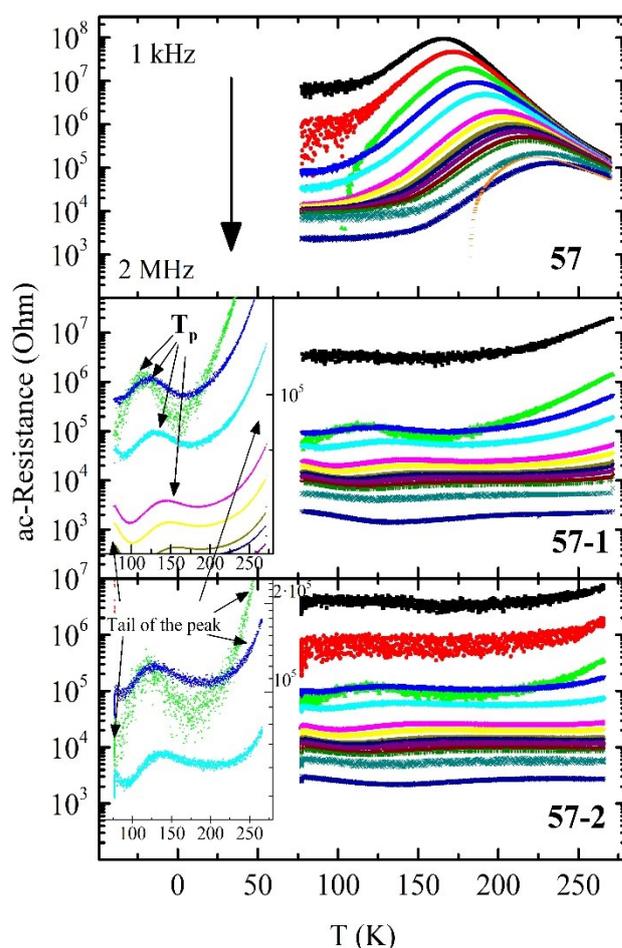
СТРУКТУРНЫЕ И ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА  $\text{CaFe}_2\text{O}_4$  ПРИ СИНТЕЗЕ В ВОЗДУШНОЙ И ИНЕРТНОЙ АТМОСФЕРАХ

Рис. 1. Температурная зависимость активного сопротивления на разных частотах переменного тока. На вставке показаны выбранные частоты переменного сопротивления. Стрелки указывают положения пиков и хвостов.

В данной работе образцы  $\text{CaFe}_2\text{O}_4$  впервые получены методом твердофазного синтеза при  $1000^\circ\text{C}$  в атмосфере воздуха и в атмосфере гелия (парциальное давление кислорода  $10^{-5}$  кПа). Мы исследовали изменение структурных и электронных свойств полученных образцов. Проведены измерения мёссбауэровских, *XAFS*-, *XPS*-спектров и проводимости на постоянном и переменном токах. Мёссбауэровская и *XAFS*-спектроскопия показали, что локальное окружение катионов Fe и Ca не изменяется в случае синтеза в инертной атмосфере. Тем не менее, резкое увеличение электрического сопротивления на шесть порядков наблюдается при комнатной температуре для образца, полученного в атмосфере гелия. Кроме того, по данным проводимости на постоянном токе, энергия активации возрастает с  $0,327$  эВ для образца синтезированного на воздухе до  $0,585$  эВ для образца, полученного в гелии. Такое поведение

Кислородная нестехиометрия и ионная проводимость мембран на основе  $\text{CaFe}_2\text{O}_4$  зависят от поверхностных процессов в отличие от гранатов [1]. Среди преимуществ газовых датчиков на основе материалов с *p*-типом проводимости называется низкая зависимость от влажности атмосферы, а также способность сорбировать более высокие концентрации кислорода [2].

В связи с этим актуальной становится задача изучения электронных свойств материала при различных парциальных давлениях кислорода атмосферы. Поскольку, основная масса исследований транспортных свойств была выполнена в высокотемпературном диапазоне, при котором уровень Ферми лежит вблизи середины запрещённой зоны, то определение возможного существования примесных уровней затруднительно. Измерения ас-проводимости при низких температурах примесных полупроводников позволяют определить энергию примесных уровней благодаря тому, что в этих условиях уровень Ферми приближается к примесному уровню [3].

указывает на существенную модификацию внутризонной энергетической структуры, которая коррелирует с термически активационным поведением носителей заряда. Измерения проводимости в диапазоне частот 1 кГц – 2 МГц для  $\text{CaFe}_2\text{O}_4$ , полученного в воздухе, показали наличие примесных уровней в структуре энергетической зоны (рис. 1). Снижение давления кислорода во время синтеза приводит к исчезновению этих уровней. Поэтому мы предполагаем ключевую роль атомов кислорода в транспортных свойствах материала, что косвенно подтверждается данными РФЭС. В перспективе  $\text{CaFe}_2\text{O}_4$  может быть использован в перспективных газоанализаторах.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда науки в рамках научного проекта: «Исследование влияния состава и особенностей дефектной структуры композиционных материалов «ядро-оболочка» на основе  $\text{CaFe}_2\text{O}_4$  на их электронные и каталитические свойства» и программы УМНИК.

### Список литературы

1. V.V. Kharton, A.L. Shaula, E.N. Naumovich, N.P. Vyshatko, I.P. Marozau, A.P. Viskup, F.M.B. Marques, Ionic Transport in  $\text{Gd}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ -and  $\text{Y}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ -Based Garnets //Journal of The Electrochemical Society. – 2003. – Т. 150. – №. 7. – С. J33-J42.
2. S.-W. Choi, A. Katoch, J.-H. Kim, S.S. Kim, Prominent reducing gas-sensing performances of n-SnO<sub>2</sub> nanowires by local creation of p–n heterojunctions by functionalization with p-Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanoparticles //ACS applied materials & interfaces. – 2014. – Т. 6. – №. 20. – С. 17723-17729.
3. S. Dueñas, I. Izpura, J. Arias, L. Enriquez and J. Barbolla, Characterization of the DX centers in AlGaAs: Si by admittance spectroscopy //Journal of applied physics. – 1991. – Т. 69. – №. 8. – С. 4300-4305.

УДК 538.9

**Е. А. Ковалева**

*Сибирский федеральный университет, Россия, Красноярск*

## **КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ИНТЕРФЕЙСОВ НА ОСНОВЕ НАНООРАЗМЕРНЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ ФРАГМЕНТОВ**

В последние годы продолжался быстрый прогресс в развитии квантовых технологий, основанных на манипулировании спинами, в частности, было показано, что спин электронов в органических носителях, в отличие от традиционных ферромагнетиков, может контролироваться на атомном уровне при помощи молекулярной инженерии, модификации интерфейсов, а также при помощи электрических и магнитных полей или света. Для дальнейшего развития этой области требуются новые нанокompозитные материалы и гетероструктуры с максимальными значениями спинового расщепления и максимальной длиной спиновой диффузии.

Несмотря на то, что в последние годы в результате интенсивных теоретических исследований структуры интерфейсов органической фазы на ферромагнитных металлах достигнуто понимание атомного строения интерфейсов ферромагнитных металлов различной природы с органической фазой, наиболее интригующие механизмы снятия спинового вырождения на интерфейсах Бычкова-Рашбы за счет комбинации эффектов гибридизации электронных подсистем, различного типа обменных взаимодействий, спин-орбитального расщепления, снятия структурной инверсионной симметрии (SIA) и корреляционных эффектов различной природы были изучены только для самых простейших случаев.

В последние годы появилось несколько перспективных способов усиления индуцированной спиновой поляризации в низкоразмерных гетероструктурах на основе органической фазы. Прежде всего, это интеркалирование интерфейсов Бычкова-Рашбы атомами тяжелых элементов, таких, как золото. Позже было показано, что комбинированное влияние атомного номера (и, соответственно, большой константы спин-орбитального взаимодействия в тяжелых металлах) и степени  $pi$ - $d$  гибридизации определяют аномальные эффекты снятия спинового вырождения в гетероструктурах. В качестве кандидатов для создания интерфейсов новых типов могут рассматриваться новые планарные структуры, такие, как дихалькогениды, иодиды, нитриды переходных металлов, а также полиацены или олигоацены, ароматические молекулы, состоящие из нескольких бензольных колец и графеновые чешуйки с краями типа зигзаг.

В рамках реализации проекта при помощи методов теории функционала плотности смоделирован ряд систем на основе соединений переходных металлов, а также органических молекул и графеновых нанолент. Расчеты проводились с использованием обменно-корреляционного функционала PBE с использованием поправки Хаббарда для соединений с наличием сильных электронных корреляций.

УДК 538.945

**М. М. Коровушкин***Доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, Институт физики им. Л. В. Киренского, ФИЦ КНЦ СО РАН, Красноярск, Россия*

## **ПРОЯВЛЕНИЕ СПИН-НЕМАТИЧЕСКИХ КОРРЕЛЯЦИЙ В СПЕКТРАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИКАХ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ И ИХ ВЛИЯНИЕ НА ПРАКТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КУПРАТНЫХ СВЕРХПРОВОДНИКОВ**

В настоящее время установлено, что формирование физических характеристик мотт-хаббардовских материалов происходит при сильном взаимном влиянии зарядовых и спиновых степеней свободы [1]. В частности, спин-зарядовые корреляции лежат в основе возникновения спин-поляронных квазичастиц, применение концепции которых позволяет добиться корректного описания целого ряда особенностей нормальной фазы купратных сверхпроводников. Важным фактором, подтверждающим справедливость спин-поляронной концепции электронного строения отмеченных соединений, является и тот факт, что спин-поляронный ансамбль демонстрирует куперовскую неустойчивость, тип симметрии и критические температуры которой соответствуют экспериментальным данным [2]. Однако несмотря на отмеченное согласие между теорией, основанной на спин-поляронной концепции, и экспериментом, прямое доказательство того, что в нормальной фазе купратных сверхпроводников в качестве хорошо определенных фермиевских квазичастиц выступают спиновые поляроны на сегодняшний день отсутствует. В значительной степени это связано с отсутствием такого теоретического описания экспериментальных данных, которое полностью основывалось бы на концепции спин-поляронных квазичастиц. Отсутствуют и теоретические предсказания относительно физических свойств, которые были бы непосредственно связаны с особенностями спин-поляронного ансамбля. Необходимость в такой теории соответствует запросам современного состояния проблемы кинетических, гальваномагнитных и термодинамических свойств купратных сверхпроводников. Одновременно с этим имеется запрос и на развитие такого теоретического описания, которое, с одной стороны, принимало бы во внимание спин-поляронную концепцию, а, с другой стороны, приводила бы к относительно простым уравнениям самосогласования для сверхпроводящей фазы. На решение отмеченных проблем направлен настоящий проект.

Актуальность проведенного исследования определяется тем, что понимание свойств сильно коррелированных материалов, связанных с формированием в них необычной спиновой структуры, например, спин-нематического состояния, может оказаться решающим фактором при объяснении ряда интригующих эффектов, возникающих в используемых на практике условиях. К такого рода эффектам относится, например, псевдощелевое состояние в купратных сверхпроводниках.

В проекте при учете реальной кристаллической структуры медь-кислородной плоскости в рамках спин-поляронной концепции при использовании диаграммной техники, вычислена энергетическая структура купратного сверхпроводника [2]. Показано, что концепция спинового поларона может быть успешно реализована в рамках модифицированной комбинированной спин-фермионной диаграммной техники. Для точного учета сильных одноузельных спин-зарядовых корреляций был введен новый класс диаграмм, названный пучковыми диаграммами. Суммирование бесконечной подпоследовательности пучковых диаграмм позволило, в частности, правильно воспроизвести важные особенности спектра фермиевских возбуждений, главной из которых является формирование локального минимума энергии в окрестности точки  $(\pi/2, \pi/2)$  зоны Бриллюэна. Продемонстрировано, что учет одноузельных процессов рассеяния обуславливает большие

величины энергии связи спин-поляронных квазичастиц. Учет двухузельных процессов рассеяния приводит к энергетическому спектру и спектральным свойствам, хорошо согласующимся с экспериментальными данными по оксидам меди.

В проекте в рамках спин-поляронной концепции разработан оригинальный метод расчета лондоновской глубины проникновения магнитного поля, который не предполагает заранее известный спектр квазичастиц, применим к многозонным системам, а также не ограничен малыми значениями векторного потенциала. В условиях экспериментально установленных значений для параметров спин-поляронной концепции, включая кулоновские взаимодействия  $U_p$  и  $V_2$ , рассчитана зависимость лондоновской глубины проникновения. Развитая теория впервые позволила объяснить наличие экспериментально наблюдаемой при малом уровне допирования точки перегиба в температурной зависимости лондоновской глубины. Показано, что точка перегиба возникает только для ансамбля спин-поляронных квазичастиц. Таким образом, наличие этой точки подтверждает утверждение о спин-поляронной природе квазичастиц в купратных сверхпроводниках.

В рамках проекта показано [3], что квантовые зарядовые и спиновые флуктуации в сильно коррелированной 2D-системе с треугольной решеткой, значительно ренормируя параметр магнитного упорядочения, не разрушают фазу сосуществования киральной  $d+id$ -сверхпроводимости и 120-градусного спинового упорядочения. При этом сохраняется и область реализации нетривиальной топологии, определяемой на основе топологического индекса  $\tilde{N}_3$ . Продемонстрировано, что для топологически нетривиальной фазы среди краевых состояний присутствует майорановская мода, для которой определена пространственная структура. Учет спиновых и зарядовых флуктуаций смещает значения критических концентраций электронов, при которых происходят квантовые топологические переходы. Показано, что увеличение межузельного кулоновского отталкивания вызывает уменьшение числа этих переходов.

### Список литературы

1. Keimer B., Kivelson S.A., Norman M. R., Uchida S., Zaanen J. From quantum matter to high-temperature superconductivity in copper oxides // *Nature*. 2015. V. 518. P. 179-186.
2. Val'kov V. V., Mitskan V. A., Korovushkin M. M., Dzebisashvili D. M., Barabanov A. F., Diagram approach to the problem of the normal phase properties of the spin-polaron ensemble in cuprate superconductors // *J. Low Temp. Phys.* 2019. V. 197. P. 34-43.
3. Вальков В. В., Злотников А. О. Устойчивость фазы сосуществования киральной сверхпроводимости и неколлинеарного спинового упорядочения с нетривиальной топологией при сильных электронных корреляциях // *Письма в ЖЭТФ*. 2019. Т. 106. №11. С. 769–777.

УДК 616.12-005.4-08:615.273:616.153.96:575.174.015.3

**А. А. Косинова<sup>1</sup>, Т. С. Монгуш<sup>1</sup>, М. Д. Гончаров<sup>1</sup>, К. С. Семашенко<sup>2</sup>,  
Г. Ю. Кочмарёва<sup>2</sup>, А. В. Мошев<sup>3</sup>, И. И. Гвоздев<sup>3</sup>.**

<sup>1</sup>ФГБОУ ВО КрасГМУ им. проф. В.Ф. Войно-Ясенецкого Минздрава России, г. Красноярск.

<sup>2</sup>Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Сибирский федеральный университет» (СФУ), г. Красноярск

<sup>3</sup>ФГБНУ Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук», обособленное подразделение «НИИ медицинских проблем Севера», Красноярск  
Руководитель проекта - А. А. Косинова

## **АСПЕКТЫ РЕЗИСТЕНТНОСТИ К АНТИТРОМБОЦИТАРНОЙ ТЕРАПИИ ПАЦИЕНТОВ С ИШЕМИЧЕСКОЙ БОЛЕЗНЬЮ СЕРДЦА ПОСЛЕ КРОНАРНОГО ШУНТИРОВАНИЯ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ПОЛИМОРФИЗМОВ ГЕНА Р-СЕЛЕКТИНА, ВЫРАЖЕННОСТИ МЕЖКЛЕТОЧНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ И ВОСПАЛЕНИЯ.**

Не вызывает сомнений необходимость приема антитромбоцитарных препаратов, в частности Ацетилсалициловой кислоты (АСК), с целью улучшения проходимости аутовенозных шунтов после коронарного шунтирования (КШ). [1] Существует документированная вариабельность ответа на АСК как среди больных, так и среди здоровых добровольцев при лабораторной оценке агрегации. Одной из причин неблагоприятных событий после КШ может служить недостаточный ответ на АСК. [2]

Цель. Изучить ассоциацию полиморфизмов генов Р-селектина: rs2046934, rs1126643, rs5918, rs6065, rs4244285; rs4986893 у пациентов с ишемической болезнью сердца (ИБС) после КШ и рассмотреть возможные механизмы снижения чувствительности тромбоцитов к АСК при их взаимодействии с нейтрофилами у больных с ИБС.

Материалы и методы. Включено 95 пациентов с ИБС (68 мужчин, 27 женщин, средний возраст 61,5±5,1), с II-IV функциональным классом стабильной стенокардии, согласно Канадской классификации, которым показано КШ.

Исследование агрегации проводилось на оптическом агрегометре с использованием индуктора арахидоновая кислота (АК) 1 мМ до КШ, на 1-3 сутки и на 8-10 сутки после оперативного лечения. Резистентность к АСК (АР) определялась при уровне агрегации тромбоцитов с АК более 20% хотя бы в одной точке наблюдения на дезагрегантной терапии после КШ или при инкубации обогащённой тромбоцитами плазмы пациента с АСК in vitro до начала лечения АСК и КШ. [3]

Образцы ДНК были исследованы на наличие полиморфизмов rs6136, rs2228315, rs6131, rs6133 в гене Р-селектина с помощью ПЦР при использовании аллельспецифичных праймеров.

Исследование Хемилюминесценции (ХЛ) клеток проводили на анализаторе БЛМ-3607 с индикаторами люминолом и люцигенином (в концентрации 50 мкг/мл). Оценивали спонтанную и АДФ-индуцированную ХЛ тромбоцитов, и спонтанную и зимозан-индуцированную ХЛ нейтрофилов. [4]

**Результаты.** Среди пациентов носителей гомозиготного варианта генотипа GG полиморфизма rs6133 13,2% были резистентными к АСК, по сравнению с 7,1% среди носителей генотипа GT (ОШ – 0,410, ДИ [0,232-16,741], p = 0,820). Среди носителей генотипа AA полиморфизма rs6136 9,9% пациентов были резистентными к АСК против 21,1% резистентных с генотипом AC (ОШ=0,410 [0,106-1,584], p=0,421). 13,9% резистентных к АСК пациентов встречалось среди носителей генотипа AA и 9,1% среди носителей генотипа AG полиморфизма rs2228315 (ОШ 1,618 ДИ [0,188 – 13,916], p=0,913). Пациенты имевшие генотип GG полиморфизма rs6131 в 15,6% случаев являлись резистентными к АСК по сравнению с 8,3% пациентов, имевших генотип GA полиморфизма rs6131 (ОШ – 0,394, [95% ДИ 0,051-2,911], p=0,643). Статистической значимости в данных отличиях не было.

В первые, 10 дней послеоперационного периода в исследуемой группе у 4 пациентов наблюдались тромботические события (4,4%): острый инфаркт миокарда, острое нарушение мозгового кровообращения. За период наблюдения в 16 месяцев [9;26] произошло 2 конечные точки (возобновление стенокардии и прогрессирование сердечной недостаточности). В группах носителей гомозиготного генотипа по распространенной аллели и носителей гетерозиготного генотипа полиморфизмов rs6136, rs2228315, rs6131, rs6133 статистически не было отличий по частоте неблагоприятных событий в ранний и отдаленный периоды после КШ. (ОШ 0,354, 95% ДИ 0,033-1,884,  $p=0,354$ ; ОШ 0,403, 95% ДИ 0,044-4,232,  $p=0,734$ ; ОШ 0,394, 95% ДИ 0,051-2,911,  $p=0,643$ ; ОШ 1,802, 95% ДИ 0,092-35,293,  $p=0,681$ , соответственно)

В каждой точке наблюдения в группе чувствительных к АСК пациентов практически все показатели спонтанной и индуцированной ХЛ тромбоцитов и нейтрофилов были выше, чем у здоровых доноров, а у резистентных к АСК только показатели спонтанной и индуцированной ХЛ нейтрофилов. У чувствительных к АСК пациентов после КШ наблюдались повышенная интенсивность и площадь зимозан-индуцированной ХЛ нейтрофилов с люминолом и площадь спонтанной ХЛ нейтрофилов с люцигенином по сравнению с группой резистентных пациентов. До операции у чувствительных к АСК пациентов по сравнению с резистентными наблюдались более высокие показатели интенсивности и площади индуцированной ХЛ с люцигенином, а также повышенное время спонтанной ХЛ с люцигенином, которое необходимо для развития максимального уровня синтеза АФК.

У резистентных к АСК пациентов наблюдалась положительная корреляция ( $r=0,83$ ,  $p=0,012$ ) интенсивностей индуцированной ХЛ с люминолом между тромбоцитами и нейтрофилами в 1 сутки после КШ.

**Заключение.** Полиморфизмы rs6133, rs6163, rs2228315, rs6131 в гене Р-селектина тромбоцитов не ассоциированы с резистентностью к АСК у пациентов с ИБС. Редкие аллели Т, С, G, А полиморфизмов rs6133, rs6163, rs2228315, rs6131 гена Р-селектина не приводят к увеличению рисков неблагоприятных событий в ранний и отдаленный периоды после КШ. До операции и терапии более высокие показатели ХЛ у АЧ больных по сравнению с АР могут быть связаны с нарушением образования лейкоцитарно-тромбоцитарных комплексов у АР и снижением из-за этого продукции АФК у них при превращении арахидоновой кислоты. Различия в показателях ХЛ в зависимости от чувствительности к терапии на этапе до приёма препарата помогут понять возможную причину резистентности тромбоцитов к АСК у больных с риском тромботических окклюзий коронарных шунтов и подобрать индивидуализированное лечение.

### Список литературы

1. Nabel E.G., Braunwald E. A tale of coronary artery disease and myocardial infarction. *N. Engl. J. Med.* 2012; 366: 54-63. DOI: 10.1056/nejmra1112570.
2. Wu H., Wang J., Sun H., Wang X., Hu X., Ma W. et al. Preoperative continuation of aspirin therapy may improve perioperative saphenous venous graft patency after off-pump coronary artery bypass grafting. *Ann. Thorac. Surg.* 2015; 99(2):576–80. DOI: 10.1016/j.athoracsur.2014.07.074.
3. Патент 2413953 РФ: МПК G01N 33/86. Гринштейн Ю. И., Филоненко И. В., Савченко А. А. и др. Способ диагностики резистентности к ацетилсалициловой кислоте. Патент 2009131242/15; 17.08.2009. Бюллетень №7
4. Савченко А. А. Иммунометаболические нарушения при распространенном гнойном перитоните / А. А.Савченко, Д. Э. Здзитовецкий, А. Г.Борисов. Новосибирск: Наука, 2013. – 143 с.

УДК 662.612: 662.642

**В. А. Кузнецов**

*Сибирский федеральный университет, Россия, Красноярск*

## **ПРОГНОЗИРОВАНИЕ САМОВОЗГОРАНИЯ БУРЫХ УГЛЕЙ ПРИ ХРАНЕНИИ И ТРАНСПОРТИРОВКЕ НА ОСНОВЕ РАСЧЕТНО-ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ МЕТОДИКИ**

Известно, что все виды угля подвержены самовозгоранию, однако наиболее пожароопасными являются угли, такие как торф, бурый уголь и лигнит [1-3]. Они характеризуются более высоким содержанием влаги, летучих веществ, высокой пористостью и низким содержанием твердого углерода. Рыхлая природа низкосортных углей не только увеличивает адсорбционную способность (имеет высокую площадь поверхности для окисления), а также обеспечивает превосходные изолирующие свойства, которые предотвращают рассеивание тепла во время окисления (нагрева). Эти факторы создают идеальную среду для самовозгорания. Поэтому пожарная опасность объектов теплоэнергетики обусловлена в первую очередь обращением бурого угля и угольной пыли. Иногда даже бурый уголь, независимо от его происхождения, доставляется на электростанцию с частично загоревшимся вагоном или баржей. Вопросам технологической и пожарной безопасности до сих пор не уделяется должного внимания.

В связи с этим возрастает актуальность разработки и тестирования расчетно-экспериментальной методики прогнозирования самовозгорания бурых углей при их переработке, хранении и транспортировке, основанной на экспериментальном изучении реакционных свойств угольного топлива и трехмерном моделировании процессов теплопереноса.

В работе были проведены экспериментальные исследования процесса самовозгорания угольного топлива. На основе экспериментальных данных определены эффективные кинетические константы. С использованием предложенной математической модели проведены тестовые расчеты и сопоставлены с данными экспериментов.

Одной из важных проблем при реализации бурого угля является возможность его самовозгорания при транспортировке. Прогнозирование возможности самовозгорания представляет собой важную задачу. Были проведены расчетные исследования полномасштабного объекта на основе расчетно-экспериментальной методики. В качестве транспорта для перевозки топлива был выбран железнодорожный полувагон размером 12.7 x 2.8 x 2.0 м. Температура окружающей среды и коэффициент теплоотдачи на поверхности полувагона, а также характеристики транспортируемого бурого угля представлены в таблице. Температура угля в начальный момент времени равна 20 °С.

Таблица

Граничные условия и свойства бурого угля

Вариант	$\alpha$ , Вт/м <sup>2</sup> /К	$T$ , °С	$C_p$ , Дж/кг/К	$\rho$ , кг/м <sup>3</sup>	$\lambda$ , Вт/м/К	$E$ , Дж/моль	$C$ , К/с
1	5	25	1000	480	0.15	99781.6	6.5e12
2	60	25					
3	60	30					

На рисунке представлены некоторые результаты расчетов в виде графика изменения температуры угля в центральной части полувагона при разных условиях окружающей среды. Видно, что увеличение коэффициента теплоотдачи с 5 до 60 (Вт/м/К) при температуре 25 °С приводит к росту периода индукции самовозгорания с 55 до 60 дней для данных расчетных условий. Повышению температуры окружающей среды на 5 °С, приводит к сокращению периода индукции самовозгорания и составляет примерно 22 дня.

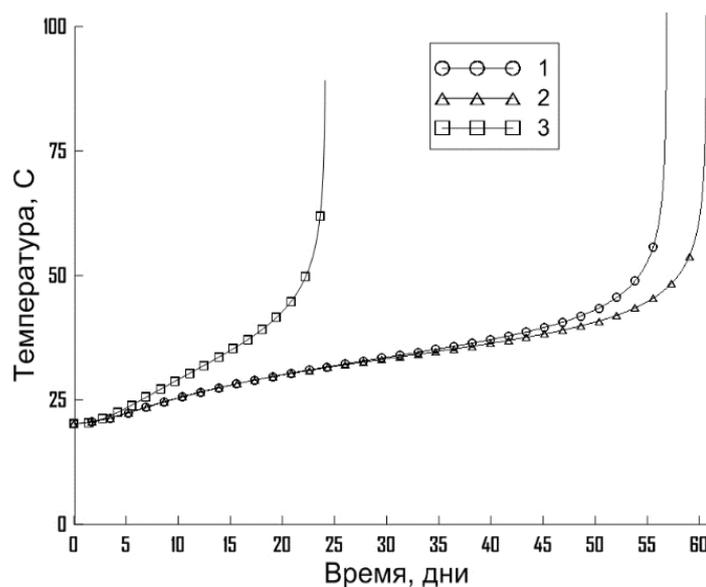


Рис. Температура в центре железнодорожного полувагона

Были проведены расчетные исследования процесса самовозгорания угольного топлива на основе расчетно-экспериментальной методики. Показано влияние некоторых условий окружающей среды и других параметров на период индукции самовозгорания топлива при хранении и транспортировке. Результаты исследований свидетельствуют о том, что с использованием предлагаемой методики можно исследовать факторы, влияющие на увеличение рисков самовозгорания бурого угля, при его перевозке, а также при хранении на складах, обосновать и разработать, например, конструкции специализированных контейнеров, удовлетворяющие требованиям по самовозгоранию угля.

### Список литературы

1. Kremcheev E. A., Gromyka D. S., Nagornov D. O. Techniques to determine spontaneous ignition of brown coal // *Journal of Physics: Conf. Series*. 2018. № 1118.
2. Xuezhong Gao, Chengbo Man, Shangjian Hu, Xueyuan Xu, Defu Che. Theoretical and Experimental Study on Spontaneous Ignition of Lignite during the Drying Process in a Packed Bed // *Energy Fuels*. 2012. № 26. С. 6876–6887.
3. Захаренко Д. М. Особенности развития теплофизических процессов самовозгорания и взрыва пыли бурых углей: дис. канд. техн. наук. Красноярск. 2001.

УДК 621.777

**Е. А. Кулишова, А. В. Дурнопьянов, Н. В. Михайлик***Студенты, Сибирский федеральный университет, Россия, Красноярск**Научный руководитель – кандидат технических наук, доцент В. М. Беспалов**Научный консультант – научный сотрудник ООО «РУСАЛИТЦ» В. А. Бернгардт*

## **РАЗРАБОТКА РЕСУРСОСБЕРЕГАЮЩЕЙ ТЕХНОЛОГИИ СОВМЕЩЕННОГО ЛИТЬЯ, ПРОКАТКИ И ПРЕССОВАНИЯ ДЕФОРМИРОВАННЫХ ПОЛУФАБРИКАТОВ ИЗ НОВЫХ АЛЮМИНИЕВЫХ СПЛАВОВ ДЛЯ ПРОИЗВОДСТВА КАБЕЛЬНО- ПРОВОДНИКОВОЙ ПРОДУКЦИИ С ПОВЫШЕННОЙ ТЕРМОСТОЙКОСТЬЮ**

Актуальной задачей для электротехники в настоящее время является повышение качества кабельно-проводниковой продукции, которая должна обладать сочетанием заданных свойств, а именно, иметь минимально возможный вес, максимальную электропроводность и сохранять прочность при длительных температурных нагревах. В связи с этим ученые уделяют большое внимание разработке и внедрению в производство новых составов алюминиевых сплавов, а также методов изготовления из них длинномерной проводниковой продукции круглого поперечного сечения.

Обеспечить существенное снижение затрат на производство проводниковой продукции позволяет применение технологии совмещенного литья и прокатки-прессования (СЛиПП) алюминиевых сплавов с содержанием церия, лантана, циркония и железа. Метод обеспечивает рост прочностных и пластических свойств полуфабрикатов за счет интенсивной знакопеременной деформации в процессе обработки.

В результате исследования определено содержание редкоземельных металлов в сплаве, температурно-скоростные параметры процесса СЛиПП, волочения и термической обработки для повышения стабильности структуры и свойств полуфабрикатов электротехнического назначения из новых экспериментальных сплавов при их нагреве до температуры 250°C.

В процессе экспериментов изготовлены прутки диаметром 5 мм из алюминиевых сплавов с различным содержанием церия, лантана, циркония и железа (табл. 1) на установке совмещенной обработки при температуре заливки и подогрева валков, 800 и 100°C, соответственно, частоте вращения валков 4 об/мин, степени деформации при прокатке 50%, коэффициенте вытяжки при прессовании 14,3. Из прутков изготовлена проволока без промежуточной термической обработки и с использованием двухступенчатого отжига в течении 72 часов на разных переходах волочения. Химический состав экспериментальных сплавов приведен в табл. 1, свойства прутков и проволоки сведены в табл. 2–4.

Таблица 1

Химический состав экспериментальных сплавов, %

№ сплава	Al	Σ Ce, La, Zr	Fe
1	основа	0,20	0,19
2	основа	0,21	0,53
3	основа	0,73	0,21
4	основа	0,88	0,68

Таблица 2

Свойства полуфабрикатов без термической обработки

Полуфабрикат	Пруток Ø5 мм после СЛиПП				Проволока Ø4,8 мм			
	1	2	3	4	1	2	3	4
Сплав	1	2	3	4	1	2	3	4
σ <sub>в</sub> , МПа	123	138	146	144	129	157	153	156

$\sigma_{0,2}$ , МПа	99	119	107	117	83	67	134	137
$\delta$ , %	31,7	29,2	28,8	31,2	15,0	11,0	11,3	12,4
$\rho$ , Ом·мм <sup>2</sup> /м	0,03 30	0,03 32	0,03 05	0,03 10	0,03 32	0,03 38	0,03 14	0,03 19
Полуфабрикат	Проволока Ø3,6 мм				Проволока Ø1 мм			
$\sigma_b$ , МПа	162	185	189	188	217	224	200	190
$\sigma_{0,2}$ , МПа	125	116	113	122	181	183	155	145
$\delta$ , %	4,3	7,8	3,0	5,3	2,3	2,7	2,5	2,3
$\rho$ , Ом·мм <sup>2</sup> /м	0,03 29	0,03 37	0,03 15	0,03 19	0,03 21	0,03 36	0,03 07	0,03 14

Таблица 3

Свойства полуфабрикатов с промежуточным двухступенчатым отжигом проволоки Ø4,8 мм

Полуфабрикат	Пруток Ø5 мм после СЛиПП				Отожженная проволока Ø4,8 мм			
	1	2	3	4	1	2	3	4
Сплав	1	2	3	4	1	2	3	4
$\sigma_b$ , МПа	123	138	146	144	81	117	88	90
$\sigma_{0,2}$ , МПа	99	119	107	117	41	60	33	33
$\delta$ , %	31,7	29,2	28,8	1,2	17,5	26,0	32,0	35,0
$\rho$ , Ом·мм <sup>2</sup> /м	0,03 30	0,03 32	0,03 05	0,03 10	0,03 05	0,03 01	0,03 04	0,03 03
Полуфабрикат	Проволока Ø3,6 мм				Проволока Ø1мм			
$\sigma_b$ , МПа	141	166	–	–	156	176	164	174
$\sigma_{0,2}$ , МПа	114	111	–	–	129	150	144	152
$\delta$ , %	4,3	7,8	–	–	2,0	2,0	1,7	2,7
$\rho$ , Ом·мм <sup>2</sup> /м	0,03 0	0,02 96	–	–	0,02 94	0,02 94	0,02 94	0,02 94

Таблица 4

Свойства полуфабрикатов с промежуточным двухступенчатым отжигом проволоки Ø3,6 мм

Полуфабрикат	Пруток Ø5 мм после СЛиПП				Проволока Ø3,6 мм			
	1	2	3	4	1	2	3	4
Сплав	1	2	3	4	1	2	3	4
$\sigma_b$ , МПа	123	138	146	144	162	185	189	188
$\sigma_{0,2}$ , МПа	99	119	107	117	125	116	113	122
$\delta$ , %	31,7	29,2	28,8	31,2	4,3	7,8	3,0	5,3
$\rho$ , Ом·мм <sup>2</sup> /м	0,03 30	0,03 32	0,03 05	0,03 10	0,03 29	0,03 37	0,03 15	0,03 19
Полуфабрикат	Отожженная проволока Ø3,6 мм				Проволока Ø1 мм			
$\sigma_b$ , МПа	77	91	90	93	161	172	168	179
$\sigma_{0,2}$ , МПа	36	49	34	33	155	166	162	174
$\delta$ , %	19,0	19,7	38,0	37,5	2,0	1,8	1,1	1,6
$\rho$ , Ом·мм <sup>2</sup> /м	0,03 00	0,03 02	0,03 02	0,03 06	0,03 01	0,03 02	0,03 00	0,03 00

На основе анализа результатов исследования сформулированы рекомендации по изготовлению проволоки из новых алюминиевых сплавов [1, 2].

### Список литературы

1. Исследование влияния параметров процесса совмещенного литья и прокатки-прессования на структуру и свойства деформированных полуфабрикатов из сплавов системы Al–Zr с различным содержанием легирующих элементов/ В.М. Беспалов, С.Б. Сидельников, Н.Н. Довженко [и др.] // Производство проката. 2019. № 3. С. 21–28.
2. Study of the influence of conditions of combined casting and rolling-extruding and two-stage annealing on the structure and properties of semi-finished electrical products from an Al–Zr system alloy / V. Bepalov, S. Sidelnikov, D. Voroshilov [et al.] // Key Engineering Materials 805 KEM. 2019. С. 19–24.

УДК 536.4; 536.6

**А. С. Лобасов, А. В. Минаков**

*к.ф.-м.н., Сибирский федеральный университет, Россия, Красноярск*

## **ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ДОБАВКИ НАНОЧАСТИЦ НА СКОРОСТЬ ИСПАРЕНИЯ ЖИДКОСТЕЙ**

В течение последних десятилетий исследователи пытались применить нанотехнологии к различным энергетическим системам, таким как электрические генераторы, топливные элементы, батареи и солнечные элементы, а также для повышения потенциала теплопередачи обычных жидкостей и эффективности тепловых систем. При этом проблема интенсификации теплообмена и связанные с ней задачи экспериментального и теоретического исследований приобретают в настоящее время значение самостоятельной, быстро развивающейся области учения о теплообмене. Одним из путей решения этой проблемы является использование в теплообменных устройствах в качестве теплоносителей жидкостей с примесью наночастиц различного состава, получивших название «наножидкости». Несмотря на некоторые ограничения, такие как относительно высокие затраты на подготовку и вопросы стабильности, наножидкости могут использоваться в качестве потенциальных охлаждающих жидкостей следующего поколения, использующиеся для улучшения переноса тепла через такую испаряющуюся тонкую пленку. Экспериментальные и численные результаты показали, что наножидкости имеют гораздо более высокую теплопроводность, более высокие коэффициенты теплоотдачи, более высокие критические тепловые потоки и лучшую смачиваемость, чем обычные чистые жидкости [1].

Наибольших значений количества отведённой теплоты можно добиться в процессе испарения какой-либо жидкости. При этом ключевым параметром, влияющим на эффективность различных технологических процессов, является скорость испарения. Добавка наночастиц в базовую жидкость позволяет регулировать этот параметр, и, соответственно, управлять данными процессами. В связи с этим наножидкости успешно используются для охлаждения различных устройств, при создании новых систем транспортировки и производства тепловой энергии, в микроэлектромеханических системах, при создании смазочных материалов, в системах очистки воздуха и воды и др. Это позволяет повысить интенсивность теплоотдачи при охлаждении различных устройств [2].

В работе исследовалось влияние на скорость испарения таких параметров, как объёмная концентрация наночастиц, их средние размеры и материал, а также различия в базовых жидкостях. Исследования скорости испарения были проведены для наножидкостей на основе дистиллированной воды или изопропилового спирта и наночастиц диоксидов кремния ( $\text{SiO}_2$ ) и циркония ( $\text{ZrO}_2$ ), оксида алюминия ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ), а также наночастиц алмаза. Средний размер наночастиц  $\text{SiO}_2$  равен 25 нм, для частиц  $\text{ZrO}_2$  – 105 нм, для частиц  $\text{Al}_2\text{O}_3$  – 43 нм и 100 нм, для алмаза – 5 нм. Наночастицы оксидов металлов были приобретены у компании «Плазмотерм», г. Москва. Порошок алмазов УДА-С (ТУ 84-1124-87) был приобретен у ФНПЦ «Алтай», г. Бийск. Объёмная концентрация наночастиц оксидов металлов варьировалась от 0.5 до 6%, объёмная концентрация наночастиц алмаза варьировалась от 0.0625 до 1%.

Скорость испарения наножидкости была измерена с помощью синхронного термоанализатора STA 449 C Jupiter (фирмы NETZSCH), сочетающего одновременное измерение изменений массы (термогравиметрия) и тепловых потоков (дифференциальная сканирующая калориметрия). В процессе синхронного термического анализа исследуется поведение образца в условиях заданной температурной программы. Измеряемыми величинами являются изменение массы, абсолютная температура образца и температурная зависимость разницы между тепловыми потоками образца и эталона.

Измерения проводятся синхронно на одном и том же образце в одних и тех же условиях. В данной работе образцы наножидкости подвергались нагреванию от температуры 25°C до 50°C по температурной программе со скоростью 1.0 К/мин в динамической атмосфере воздуха со скоростью потока 30 мл/мин с последующей изотермической выдержкой в течение 30 мин. Для всех образцов в процессе эксперимента температура совпадала с достаточно высокой степенью точности. Для каждого образца наножидкостей было проведено по три независимых измерения. Расхождения по скорости испарения между этими измерениями не превышали 4%.

Анализ результатов экспериментов показывает, что зависимость скорости испарения наножидкости с хорошей точностью описывается корреляцией вида  $w(\square) = 1 + a \square^b$ . Коэффициенты  $a$  и  $b$  были определены для всех исследуемых наножидкостей:  $a = 0.115$ ,  $b = 0.428$  – для частиц алмаза;  $a = 0.033$ ,  $b = 0.551$  – для частиц диоксида кремния;  $a = 0.053$ ,  $b = 0.294$  – для частиц диоксида циркония. Для частиц оксида алюминия:  $a = 0.034$ ,  $b = 0.419$  – вода, частицы 43 нм;  $a = 0.054$ ,  $b = 0.242$  – вода, частицы 100 нм;  $a = 0.05$ ,  $b = 0.313$  – изопропиловый спирт, частицы 100 нм.

В результате экспериментов было показано, что добавка наночастиц приводит к увеличению скорости испарения жидкости. С увеличением концентрации наночастиц скорость испарения жидкости монотонно возрастает, при этом абсолютное значение темпа испарения существенно зависит от выбора базовой жидкости, однако относительное значение темпа испарения для различных базовых жидкостей остаётся примерно одинаковым. Скорость испарения наножидкости на основе наноалмазов существенно выше, чем для наножидкостей на основе оксидов металлов, при этом наночастицы алмаза гораздо мельче, чем оксидные наночастицы, размеры которых примерно одинаковы. Таким образом, использование наночастиц позволяет интенсифицировать процесс испарения жидкостей, а также управлять параметрами этого процесса.

#### Список литературы

1. Минаков А. В., Рудяк В. Я., Гузей Д. В., Пряжников М. И., Лобасов А. С. Измерение коэффициента теплопроводности наножидкостей методом нагреваемой нити // ИФЖ. 2015. Т. 88. № 1. С. 148–160.
2. Gan Y., Qiao L. Optical Properties and Radiation-Enhanced Evaporation of Nanofluid Fuels Containing Carbon-Based Nanostructures // Energy Fuels. 2012. V. 26. P. 4224–4230.

УДК 621.396.945

**О. А. Майков<sup>1</sup>, Е. А. Кохонькова<sup>1</sup>, В. В. Романов<sup>2</sup>, А. Н. Фомин<sup>3</sup>**<sup>1</sup>Аспирант, Сибирский федеральный университет, Россия, Красноярск<sup>2</sup>Студент, Сибирский федеральный университет, Россия, Красноярск<sup>3</sup>Инженер, Сибирский федеральный университет, Россия, Красноярск

Научный руководитель – кандидат технических наук, доцент Д. С. Кудинов

Сибирский федеральный университет, Россия, Красноярск

**ПРИМЕНЕНИЕ ГЛУБОКИХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ДЛЯ ОБНАРУЖЕНИЯ СИГНАЛОВ АВАРИЙНОГО ОПОВЕЩЕНИЯ В ШАХТАХ**

В работе исследуется и предлагается вариант поиска оптимального нелинейного фильтра для задач передачи аварийных или телеметрических сигналов с низкочастотными скоростями через высокопроводящие среды. Также важной задачей для подтверждения эффективности выбранных методов является сравнение выбранного подхода с методами линейной фильтрации и классического построения приемного детектора [1–3]. Настоящая статья направлена на исследование оптимальных алгоритмов обработки сигналов для построения комплексного ТТЕ-канала (Through-the-Earth) низкоскоростного обмена информационными сообщениями в аварийных шахтах на основе ЭМ проникающих сигналов СНЧ-диапазона [4]. Распространение электромагнитного поля и потери энергии в реальной среде определяется показателем затухания, который рассчитывается согласно выражению [5]:

$$\alpha = \omega \sqrt{\frac{\mu' \varepsilon'}{2} (\sqrt{1 + \operatorname{tg}^2 \delta} - 1)}, \quad (1)$$

где  $\omega = 2\pi f$  – частота электромагнитных колебаний;  $\mu'$  – относительная магнитная проницаемость;  $\varepsilon'$  – относительная диэлектрическая проницаемость;  $\operatorname{tg} \delta$  – тангенс диэлектрических потерь.

Из (1), а также с учетом того, что диапазон параметра электропроводности пород  $\sigma$  находится в пределах от 0,001 См/м до 0,1 См/м, то используется ULF или VLF диапазоны частот. В этом случае требования к ТТЕ-системе ограничиваются дальностью связи – 1000 м, Bit Error Rate =  $10^{-3}$ , Bit Rate = 2 bit/s.

В основе базового подхода к решению задачи лежит идея работы моделей глубокого обучения. Процедура обучения представляет собой оптимизацию некоторой функции потерь, зависящую от задачи. Если в качестве функции потерь предложить вероятность побитовой ошибки при декодировании участка входного сигнала, то полученная глубокая нейронная сеть будет осуществлять нелинейную фильтрацию сигнала с последующей демодуляцией.

Для сравнения эффективности фильтрации на базе DNN и согласованной фильтрации реализована схема линейного обнаружителя FSK-сигналов (рис. 1а–1г). Входной сигнал (рис. 1а) после предварительного усиления фильтруется во входном полосовом фильтре ПФ0 с центральной частотой  $f_0 = 975$  Гц и добротностью  $Q = 10$  (рис. 1б). Далее фильтруется двумя параллельными узкополосными фильтрами ПФ1,  $f_1 = 984$  Гц (рис. 1с) и ПФ2,  $f_2 = 966$  Гц или 975 Гц (рис. 1д). После квадратичного выпрямления выходных сигналов ПФ1 и ПФ2 (рис. 1е) осуществляется несколько этапов интегрирования со сбросом разности выпрямленных сигналов интеграторами (рис. 1ф). Решение о принятом бинарном сигнале осуществляется в решающем устройстве РУ1, которое формирует двоичную информационную последовательность нулей и единиц (рис. 1г).

Результат работы DNN-приемника по демодуляции реальных FSK-сигналов приведены на рис. 2 на примере реальной записи битовой последовательности длительностью  $T = 30$  с. В данном случае, вся битовая последовательность была принята безошибочно. Результат обработки всех 37 последовательностей с помощью DNN-приемника на базе НФ позволил добиться усредненного по всем последовательностям результата  $BER = 5 \cdot 10^{-3}$ .

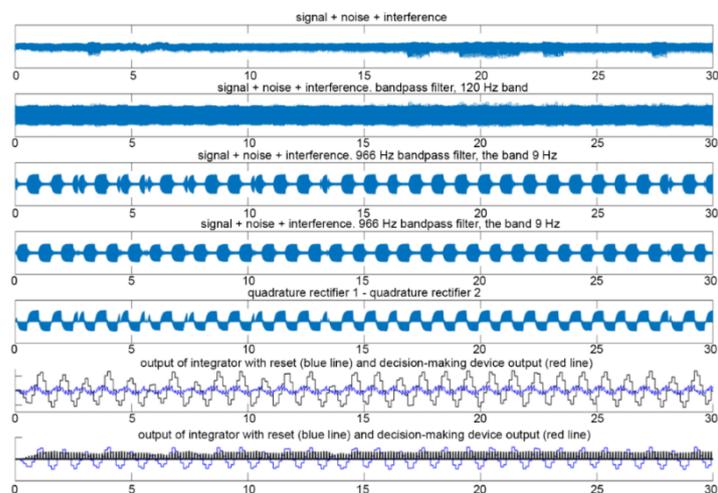


Рис. 1. Последовательный алгоритм работы линейного обнаружителя

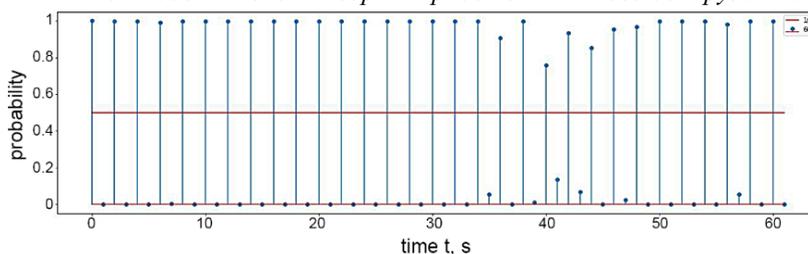


Рис. 2. Результат работы DNN-приемника

## Выводы

В статье теоретически и экспериментально было показано, что подход к построению НФ на основе методов машинного обучения, в частности, с применением ГНС, позволил достичь лучшего результата для задач передачи сообщений на низких битовых скоростях через среды с высокой проводимостью в сравнении с методами линейной фильтрации, в особенности, в условиях промышленных импульсных помех, присутствующих при промышленной добыче полезных ископаемых закрытым способом.

Приведены результаты моделирования и сделан сравнительный анализ эффективности работы индивидуального шахтерского приемника с применением методов линейного когерентного приема и DNN-фильтра. Обучение НС проводилось на модельных и экспериментальных данных, полученных на реальном подземном руднике.

## Список литературы

1. S. Hochreiter, J. Schmidhuber, “Long Short-Term Memory,” *Neural Comput.*, vol. 9, pp. 1735–1780, November 1997.
2. W. Chan, I. Lane, “Deep Recurrent Neural Networks for Acoustic Modelling“, *CoRR*, url: <https://arxiv.org/abs/1504.01482>, 2015
3. J.-P. Briot, G. Hadjeres, F. Pachet, “Deep Learning Techniques for Music Generation – A Survey,” *CoRR*, url: <http://arxiv.org/abs/1709.01620>, 2017.
4. Kudinov, D. S., Kokhonkova, E. A., Maykov, O. A. Evaluation of the possibility of wireless data transmission over rocks for automating an alarm system in mines using lowfrequency electromagnetic waves and radio tags. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 537(5),052013. –2019.
5. Shaydurov, G. Y., Kudinov, D. S., Kokhonkova, E.A., Shchitnikov, A. A. Through-the-earth communication in underground mines by electromagnetic waves. Conference paper «2016 International Siberian Conference on Control and Communications, SIBCON 2016», –2016.

УДК 547.992.3

**Ю. Н. Маляр, А. С. Казаченко, А. В. Мирошникова, В. В. Сычев***Институт химии и химической технологии СО РАН ФИЦ «Красноярский научный центр СО РАН»  
Россия, 660036, Красноярск, Академгородок, 50/24***МОДИФИКАЦИЯ ДРЕВЕСНЫХ ЛИГНИНОВ С ПОЛУЧЕНИЕМ ПЕРСПЕКТИВНЫХ ФАРМАКОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ И СВЕТОЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ ВОДОРАСТВОРИМЫХ ПОЛИМЕРОВ**

Лигнин является крупнотоннажным отходом целлюлозно-бумажной и гидролизной промышленности. Благодаря своей уникальной структуре, лигнин имеет значительный потенциал для химической переработки в ценные продукты, в том числе для производства химикатов фенольной и ароматической природы [1]. Одним из наиболее актуальных направлений в данной области исследований является целенаправленная химическая модификация лигнина в востребованные химические вещества, функциональные биополимеры [2-3].

Перспективным является синтез сульфатированных и азопроизводных лигнинов. Так, производные крафт-лигнина, содержащие диазобензол, имели зависящее от pH изменение цвета в растворе и светочувствительные свойства, возникающие в результате цис-транс-фотоизомеризации диазобензольной группы [5-6].

В данной работе впервые получен водорастворимый сульфатированный лигнин пихты путем обработки этаноллигнина древесины пихты хлорсульфоновой кислотой в 1,4-диоксане в присутствии основного катализатора мочевины. Наибольшее значение содержания серы в полученном продукте сульфатирования этаноллигнина (7,8-8,2 % мас.) достигается в процессе сульфатирования этаноллигнина в диоксане в течение 3,0 часов при температуре 90-100 °С, соотношении этаноллигнин:сульфатирующий комплекс 1:1,5±2,0 (моль:моль).

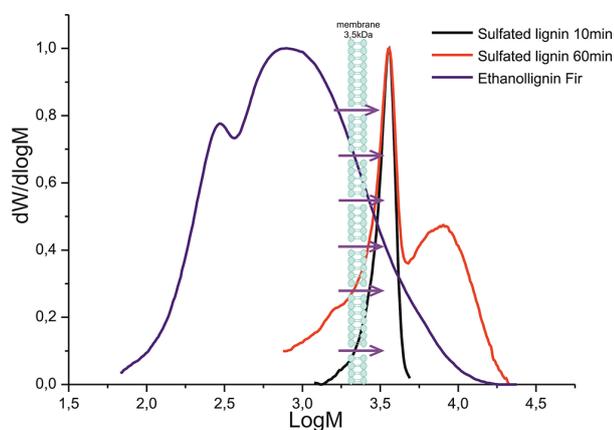


Рис. 1. Кривые ММР этаноллигнина пихты и сульфатированных производных

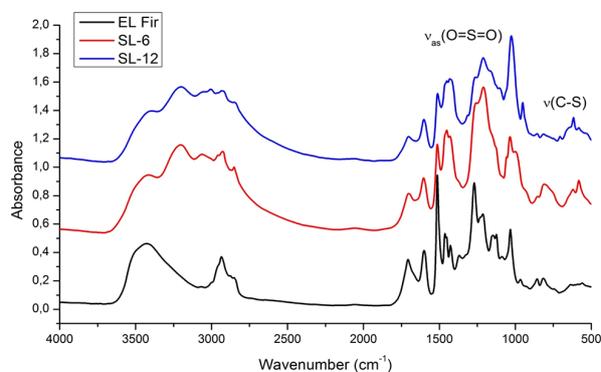


Рис. 2. ИК-спектры этаноллигнина и сульфатированных производных

На основе анализа данных гель-проникающей хроматографии установлены кинетические закономерности сульфатирования лигнинов (рис. 1). Так, повышение молекулярной массы продуктов сульфатирования лигнинов при температуре 80 – 100 °С наблюдается в интервале 0-3 часа. После 4 часов обработки происходит значительное увеличение количества высокомолекулярных продуктов, что отрицательно сказывается на качестве сульфатированного лигнина в целом, так как происходит повышение дисперсности. Состав и строение синтезированных сульфатированных производных этаноллигнина пихты подтверждено результатами элементного анализа и методами ИК- и двумерной ЯМР-спектроскопии, ГПХ (рис. 1, 2).

Из образцов этаноллигнина пихты и сульфатированного этаноллигнина пихты путем реакций азосочетания с помощью сульфаниловой кислоты и п-нитроанилина синтезированы новые азопроизводные органосольVENTных лигнинов пихты.

По данным ИК- и 2D ЯМР-спектроскопии установлено изменение строения в структуре исходных образцов в результате азотирования. В ароматической области HSQC-спектров азотированного этаноллигнина выделены пики, свидетельствующие о том, что N=N присоединение происходит в орто-положение гваяцильного фрагмента ( $\delta^1\text{H}/\delta^{13}\text{C}$  8,0-8,4/123-126). По данным ГПХ показано, что в сравнении с исходным этаноллигнином пихты, его азопроизводные имеют более высокую молекулярную массу, вследствие ввода новых функциональных групп в структуру лигнина.

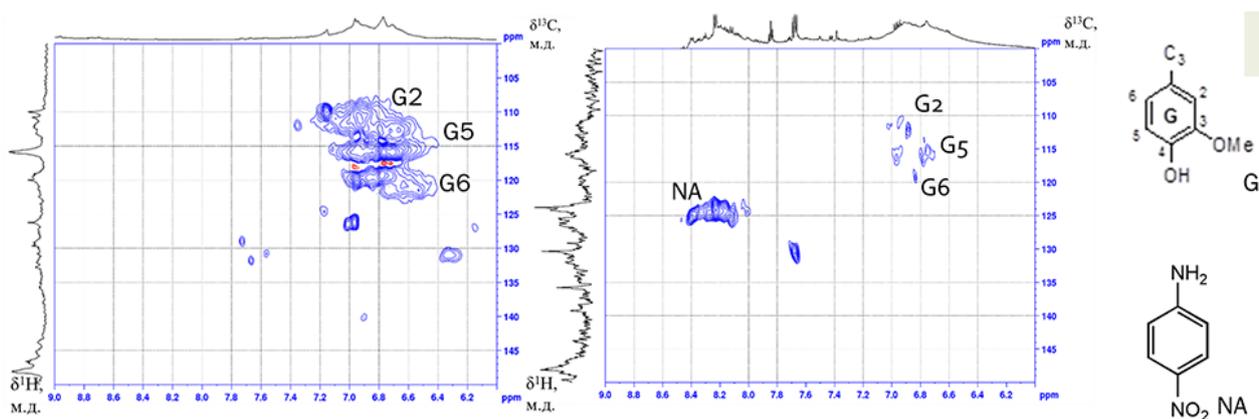


Рис. 3. Ароматическая область 2D ЯМР HSQC-спектров а) исходный этаноллигнин пихты; б) азотированный п-нитроанилином этаноллигнин пихты

Установлено, что для перевода соединений в транс-конфигурацию необходимо облучать растворы светом с длиной волны 470 нм в течении 1 мин, а для получения цис-изомера – 365 нм в течении 1 часа. Для обратной изомеризации необходимо облучать растворы в течении 2 мин при длине волны 470 нм.

### Список литературы

1. Azadi P., Inderwildi O. R., Farnood R., King D. A. Liquid fuels, hydrogen and chemicals from lignin: A critical review.// *Renew. Sust. Energ. Rev.* 2013. Vol. 21, P. 506–523.
2. Laurichesse, S., Avérous, L. Chemical modification of lignins: Towards biobased polymers // *Progress in Polymer Science.* 2014. Vol. 39. Issue 7. P. 1266-1290
3. Duval, A., Lange, H., Lawoko, M., Crestini, C. Modification of Kraft Lignin to Expose Diazobenzene Groups: Toward pH- and Light-Responsive Biobased Polymers// *Biomacromolecules.* 2015, Vol. 16. N. 9. P. 2979-2989.

УДК 537.621

**А. А. Мацынин***Научный сотрудник, ИФ СО РАН, Россия, Красноярск*

## НОВЫЕ МАГНИТНЫЕ ПЛЕНОЧНЫЕ НАНОКОМПЗИТЫ НА ОСНОВЕ СЛОИСТЫХ СИСТЕМ GEO/MN: СИНТЕЗ, ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ И МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ

Ферромагнитные тонкопленочные  $Mn_5Ge_3$  образцы являются перспективными материалами для применения в спинтронике из-за высокой спиновой поляризации и температуры Кюри (выше комнатной). Однако немагнитные элементы, такие как кислород, углерод и азот, могут непредсказуемо изменять структурные и магнитные свойства пленок  $Mn_5Ge_3$ .

### Экспериментальные результаты

Мы используем твердофазную реакцию между тонкими слоями Mn и GeO для синтеза  $Mn_5Ge_3$  ( $Mn_5Ge_3O_y$ )- $GeO_2$  ( $GeO_x$ ) нанокompозитных пленок и исследования их структурных и магнитных характеристик. Наши результаты показывают, что реакция между слоями Mn и GeO стартует при 180 °C.

При этом GeO распадается на элементный германий и кислород и атомы Ge мигрируют в слой Mn с образованием ферромагнитных нанокластеров  $Mn_5Ge_3$ . А атомы кислорода участвуют в синтезе оксидов  $GeO_x$  и  $GeO_2$ , а также мигрируют в решетку  $Mn_5Ge_3$  с образованием нанокластеров  $Mn_5Ge_3O_y$  (фаза Новотного).

Для характеристики магнитных свойств образцов Mn/GeO после отжига при 250 °C и 300 °C измерялись температурные зависимости намагниченности насыщения  $M_S$  (рис. 1a) и петли гистерезиса (рис. 1b). Обе зависимости указывают на формирование фазы  $Mn_5Ge_3$  с температурой Кюри  $T_{C1} \sim 300K$  [1 - 3] и второй ферромагнитной фазой с  $T_{C2} \sim 360 - 400K$ . Вторая фаза  $Mn_5Ge_3O_y$  обладает значительно более высокой намагниченностью насыщения  $M_S=600 \text{ emu/cm}^3$  по сравнению с фазой  $Mn_5Ge_3$   $M_S=200 \text{ emu/cm}^3$  [1-3].

На рисунке 2 показана намагниченность насыщения  $M_S(T_S)$  (a) и электрическое сопротивление  $R(T_S)$  (b) Mn/GeO в зависимости от температуры отжига  $T_S$ . До  $\sim 180^\circ C$  образцы Mn/GeO оставались немагнитными, что подразумевало отсутствие смешения и образование магнитных фаз на границе Mn/GeO (рис. 2a). При увеличении температуры отжига выше  $\sim 180^\circ C$  в пленках Mn GeO появляется намагниченность  $M_S$ , которая достигает максимального значения после отжига при 300°C (рис. 2a).

Это указывает на начало твердофазной реакции  $T_{in} \sim 180^\circ C$  между слоями Mn и GeO и синтез одной или нескольких ферромагнитных фаз. Объемная доля этих фаз в продуктах реакции увеличивается до температуры отжига 300°C.

После отжига более 300°C деградация ферромагнитных фаз уменьшила намагниченность, которая упала до нуля при 400°C (рис. 2a). На рисунке 2b показана температурная зависимость

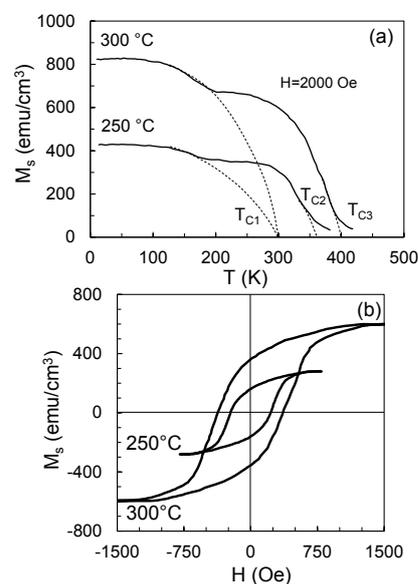


Рис. 1. (a) Температурные зависимости намагниченности насыщения  $M_S$ , (b), Петли гистерезиса полученных фаз.

электрического сопротивления  $R$  ( $T_S$ ) образца пленки Mn/GeO, где критические температуры полностью согласуются с температурами, определенными из рисунка 1(a).

### Теоретические результаты

Для исследования влияния допантов на магнитные и электронные свойства германата марганца  $Mn_5Ge_3$  были проведены первопринципные расчеты в рамках теории функционала плотности, реализованного в пакете VASP [4].  $Mn_5Ge_3$  обладает гексагональной ячейкой с 2 неэквивалентными атома марганца в структуре (Рис.3). Было рассмотрено три возможных атома допанта: кислород, углерод и бор. Атомы помещались в структуру в различные позиции и в разных количествах. Рассчитанные плотности электронных состояний приведены на Рис. 4а Видно, что исследуемое соединение является металлом. Внедрение допантов приводит к деформации электронных состояний и их сдвигу по энергетической шкале. Изменение намагниченности от типа атома допанта и их количества показано на Рис. 4б. Наименее всего намагниченность уменьшается при внедрении атома кислорода, максимальное падение наблюдается при внедрении атома бора.

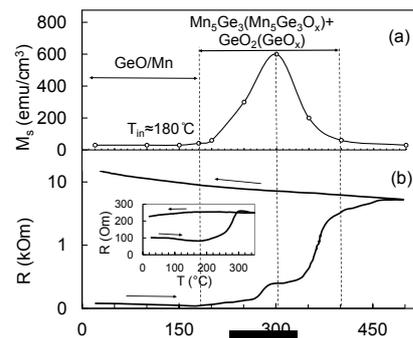


Рис. 2. (а)зависимость намагниченности насыщения от температуры. (б) Зависимость электрического сопротивления от температуры.

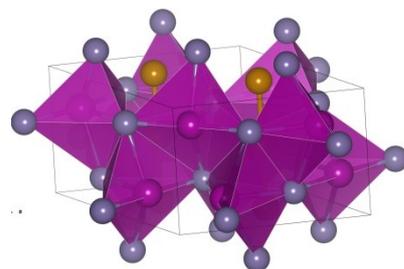


Рис. 3. Структура  $Mn_5Ge_3$

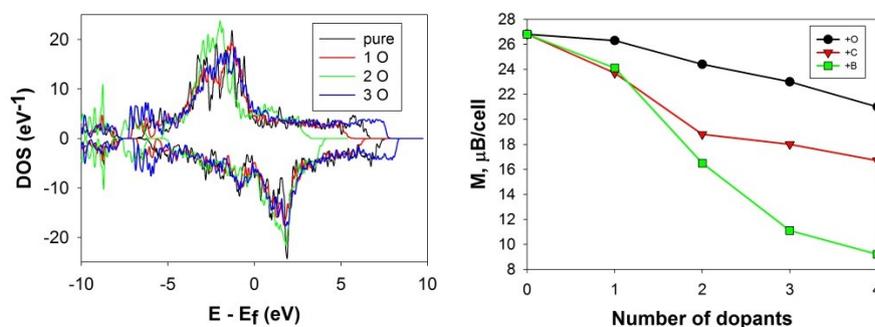


Рис.4. (а) Плотность электронных состояний для чистого и допированного  $Mn_5Ge_3$ ; (б) Зависимость намагниченности насыщения от числа и типа атомов допанта.

### Список литературы

1. V. G. Myagkov, V. S. Zhigalov, A. A. Matsynin, L. E. Bykova, Yu. L. Mikhlin, G. N. Bondarenko, G. S. Patrin, G. Yu. Yurkin, Thin Solid Films 552 (2014) 86-91.
2. V. G. Myagkov, V. S. Zhigalov, A. A. Matsynin, L. E. Bykova, G. V. Bondarenko, G. N. Bondarenko, G. S. Patrin, D. A. Velikanov, JETP Letters, 96 (2012) 40-43.
3. V. G. Myagkov, L. E. Bykova, A. A. Matsynin, M. N. Volochaev, V. S. Zhigalov, I. A. Tambasov, Yu. L. Mikhlin, D. A. Velikanov, G. N. Bondarenko, J. Solid State Chem. 246 (2017) 379-387.
4. G. Kresse and J. Furthmüller, Phys. Rev. B 54 (1996) 11169.

УДК 54.057

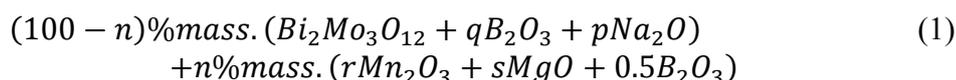
**Е. М. Мошкина, Т. П. Гаврилова, Ю. В. Князев, М. С. Платунов,  
Р. Г. Чумаков, Н. А. Бельская, А. В. Чернышев**

*Научный сотрудник, к.ф.-м.н., ИФ СО РАН, Россия, Красноярск*

## **СИНТЕЗ КАТИОННО-УПОРЯДОЧЕННЫХ МН-МГ ОКСИБОРАТОВ, ОБЛАДАЮЩИХ ДАЛЬНИМ МАГНИТНЫМ ПОРЯДКОМ**

Объектами исследования данной работы являются оксибораты системы Mn-Mg-B-O, обладающей, согласно литературным данным, богатой фазовой диаграммой [1]. Среди структурных фаз, которые могут кристаллизоваться, фазы со структурами людвигита, варвикита, такеучита, пинакиолита, ортопинакиолита, халсита. Общая формула для варвикита может быть записана как  $M1^{2+}M2^{3+}BO_4$ , а для остальных фаз «идеализированная» запись химической формулы  $(M1^{2+}, M2^{3+})_3BO_5$ . Данные соединения характеризуются родственными квазинизкомерными кристаллическими структурами. Изменение массового соотношения долей трех- и двухвалентных катионов (в нашем случае, марганца) в соединении приводит не только к изменению межатомных расстояний и малому изменению свойств, а к смене фаз. Причем, каждая из вышеупомянутых фаз существует в очень узком диапазоне  $M^{3+}/M^{2+}$  [1].

Одной из основных задач данной работы было исследование фазовой диаграммы системы Mn-Mg-B-O. Работы проводилась с использованием раствор-расплавного метода для выращивания монокристаллов. Общая раствор-расплавная система может быть представлена в виде:



Параметры, использованные в данной формуле, представлены в Таблице 1 для каждого полученного состава.

Таблица

Параметры раствор-расплавной системы (1) в соответствии с полученными фазами  
(W- варвикит, O- ортопинакиолит, H-халсит)

№	n, %	T <sub>sat</sub> , °C	q	p	r	s	струк. тип	формула
1	19,0	845	1,90	1,40	0,67	0,67	W	Mn <sub>1.33</sub> Mg <sub>0.67</sub> BO <sub>4</sub>
2	20,0	870	1,82	1,75	0,60	0,80	W	Mn <sub>1.2</sub> Mg <sub>0.8</sub> BO <sub>4</sub>
3	20,9	880	1,73	2,10	0,55	0,91	W	Mn <sub>1.09</sub> Mg <sub>0.91</sub> BO <sub>4</sub>
4	21,7	888	1,65	2,45	0,50	1,00	W	MnMgBO <sub>4</sub>
5	22,6	895	1,55	2,80	0,47	1,07	W	Mn <sub>0.93</sub> Mg <sub>1.07</sub> BO <sub>4</sub>
6	21,5	910	1,88	3,15	0,64	1,72	O	Mn <sub>1.28</sub> Mg <sub>1.72</sub> BO <sub>5</sub>
7	22,2	930	1,82	3,50	0,60	1,80	H	Mn <sub>1.2</sub> Mg <sub>1.8</sub> BO <sub>5</sub>

Как показано в Таблице, в процессе работы были синтезированы образцы трех структурных типов: варвикит, ортопинакиолит, халсит. Проведена структурная и магнитная характеристика полученных соединений, подтверждена фазовая однородность отдельных проб.

Проведены подробные исследования кристаллической структуры полученных образцов с помощью метода монокристаллической рентгеновской дифракции. Проведено изучение кристаллической структуры, катионного распределения и локальных октаэдрических искажений гетерометаллической системы Mn<sub>2-x</sub>Mg<sub>x</sub>BO<sub>4</sub> (x = 0.55, 0.63, 0.67, 0.84 – уточненная концентрация). Обнаружено немонотонное изменение параметров решетки. Найдено необычное для гетерометаллических систем регулярное распределение атомов замещения. Определено распределение зарядовых состояний. Определено, что введение магния вызывает значительное изменение локальных искажений координационных октаэдров, которое сопровождается резким возрастанием величины локальных искажений.

Изучены и проанализированы ориентационные зависимости намагниченности отдельных образцов. Небольшие изменения в соотношении Mn/Mg на границе стабильности фазы варвикита, приводят к смене структурного типа и переход к фазе ортопинакиолита, а затем к фазе халсита. Соединения, обладающие разными структурными типами демонстрируют абсолютно разное магнитное поведение.

Изучено температурное поведение теплоемкости некоторых из полученных образцов.

#### **Список литературы**

1. Cooper J. J., Tilley R. J. D. An electron microscope and X-ray diffraction study of some synthetic (Mg, Mn)<sub>3</sub>BO<sub>5</sub> oxyborates // Journal of Solid State Chemistry. 1992. V. 97. P. 452-465.

УДК 538.9

**Ю. С. Орлов<sup>1,2</sup>, В. А. Дудников<sup>1</sup>, М. Волочаев<sup>1</sup>, С. Н. Верещагин<sup>3</sup>**<sup>1</sup>Институт Физики им. Л.В. Киренского, ФИЦ «КНЦ СО РАН», 660036, Красноярск, Россия<sup>2</sup>Сибирский федеральный университет, 660041, Красноярск, Россия<sup>3</sup>Институт Химии и Химической технологии, ФИЦ «КНЦ СО РАН», 660036, Красноярск, Россия

## **НОВЫЕ ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ МНОГОМАСШТАБНЫХ ПРОСТРАНСТВЕННО-НЕОДНОРОДНЫХ ЗАМЕЩЕННЫХ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ОКСИДОВ КОБАЛЬТА И ФАЗ РАДДЛЕСДЕНА-ПОППЕРА**

В последнее время возникает все больше экспериментальных подтверждений того, что наряду с варьированием природы катионов в твердых растворах редкоземельных оксидов кобальта  $R_{1-x}M_xCoO_{3-\delta}$  ( $R, M$  – редкоземельный и щелочноземельный металл соответственно,  $\delta$  – индекс кислородной нестехиометрии) со структурой перовскита и характера их распределения в решетке существенный выигрыш или даже появление принципиально новых свойств можно достичь путем создания в массиве перовскита доменов различной степени упорядоченности и/или нановключений фаз. Возникновение метастабильных структур локальной неоднородности в твердом теле можно ожидать в области фазовых переходов. В настоящей работе на примере  $Dy_{0.2}Sr_{0.8}CoO_{3-\delta}$ , в котором имеет место фазовый переход порядок – беспорядок с ростом температуры, продемонстрирована существенная зависимость кинетических свойств от морфологии внутренней пространственно неоднородной структуры, формирующийся в образце в зависимости от скорости его перехода из высокотемпературной разупорядоченной кубической фазы в основную тетрагональную упорядоченную фазу при охлаждении. Для этого была приготовлена серия образцов с разной скоростью охлаждения от высоких температур и стабилизированных по кислороду. Установлено, что в случае отпущенного образца (скорость охлаждения  $2^\circ/\text{мин}$ ) внутри керамических зерен размером от 5 до 40 мкм формируются упорядоченные области со слоистой тетрагональной кристаллической структурой и характерным размером от 40 до 100 нм. В случае же закаленного образца (скорость охлаждения  $3000^\circ/\text{мин}$ ), вместо ожидаемой полностью разупорядоченной кубической фазы, обнаружено формирование нано-масштабной слоистой структуры или так называемой псевдокубической структуры с характерным размером от 4 до 5 нм. Наконец, подбирая промежуточную скорость охлаждения (от 20 до  $30^\circ/\text{мин}$ ), нам удалось добиться сосуществования в нанометровой области пространства двух фаз – полностью разупорядоченной метастабильной кубической и упорядоченной тетрагональной. В температурном диапазоне от 2 до 400 К исследованы термоэлектрические свойства всех синтезированных образцов. В низкотемпературной области обнаружен достаточно резкий максимум коэффициента Зеебека у образцов с сосуществованием двух фаз в отличие от достаточно регулярированной зависимости термоЭДС закаленных и отпущенных образцов.

УДК 581.3,582.475.2,579.64

**М. Э. Пак<sup>1</sup>, Е. А. Рогожин<sup>2, 4, 5</sup>, И. А. Петухова<sup>3</sup>, А. С. Шуклина<sup>1</sup>,  
Н. С. Помыткин<sup>1</sup>, А. П. Пахомова<sup>1</sup>, В. С. Садыкова<sup>4</sup>, Н. А. Гаевский<sup>3</sup>,  
И. Н. Третьякова<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Институт леса им. В. Н. Сукачева Сибирского отделения Российской академии наук - обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН, Россия, Красноярск

<sup>2</sup>Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт биоорганической химии им. академиков М. М. Шемякина и Ю. А. Овчинникова Российской академии наук, Россия, Москва

<sup>3</sup>Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Сибирский федеральный университет», Россия, Красноярск

<sup>4</sup>Научно-исследовательский Институт по изысканию новых антибиотиков им. Г. Ф. Гаузе, Россия, Москва

<sup>5</sup>Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Тюменский государственный университет», Россия, Тюмень

Научный руководитель – доктор биологических наук, профессор **И. Н. Третьякова**

Институт леса им. В. Н. Сукачева Сибирского отделения Российской академии наук - обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН, Россия, Красноярск

## **ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ПЕПТИДОВ РАСТИТЕЛЬНОГО И МИКРОБНОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ НА РОСТ И РАЗВИТИЕ ХВОЙНЫХ *IN VITRO* В РАННЕМ ОНТОГЕНЕЗЕ**

Одним из ключевых аспектов выращивания качественного посадочного материала для лесоразведения является повышение индуцированного иммунитета и устойчивости растений к возбудителям заболеваний в период ювенильной стадии развития для предотвращения инфекционного послевсходового полегания. В многочисленных исследованиях выявлено, что продукты жизнедеятельности различных видов *Trichoderma* влияют на рост и развитие растений, в частности усиливают обмен веществ, стимулируют рост корневой системы и повышают иммунитет [1, 2]. Ранее было показано, что под влиянием пептидов триходермального происхождения наблюдалась значительная стимуляция роста пролиферирующих эмбрионных культур (ЭК, ЭСМ) *Larix sibirica* [3]. Другими источниками защитных пептидов являются дикорастущие растения, демонстрирующие гораздо больший уровень устойчивости к стрессовым факторам окружающей среды по сравнению с возделываемыми. Такие растения выделяют защитные молекулы, интегрированные в систему врожденного иммунитета. Спектр биологической активности таких молекул включает в себя собственно антимикробную (антифунгальную, антибактериальную, противовирусную), ферментативную, а также регуляторную (сигналинг).

Для разрешения проблемы воспроизводства качественных лесов в рамках проекта были проведены работы по интеграции инновационной биотехнологии массового тиражирования генетически однородного потомства через соматический эмбриогенез листовенницы сибирской, выбранной в качестве модельного объекта, и исследований по скринингу защитных пептидов растительного и микробного происхождения (рис.). Актуальность и научная новизна проводимых исследований обуславливается выяснением молекулярных и клеточных аспектов функционирования защитных полипептидов растений как регуляторов.

В рамках проекта были получены индивидуальные пептиды из активных суммарных фракций дикорастущих растений и концентратов экстремофильных штаммов микромицетов рода *Trichoderma*. Экстракты культуральной жидкости штамма ТУVI4/11 обладали высокой антибиотической активностью в отношении условно-патогенных и фитопатогенных мицеллиальных и дрожжевых грибов. Максимальная фунгицидная активность установлена в отношении *Aspergillus niger* INA00760 и *Fusarium oxysporum* VKMF-140. Были получены

фракции штамма 346 *Trichoderma viride*, обладающие антибиотической активностью в отношении *A. niger* INA00760, *Bacillus subtilis* ATCC6633. В результате исследования был установлен стимулирующий эффект биопептидов штамма 346 (*T. viride*, 2 мкг/диск) на корнеобразование регенерантов *L. sibirica*.



Рис. Схема соматического эмбриогенеза лиственницы сибирской: 1 – индукция ЭСМ, 2 – пролиферация ЭСМ, 3 – предсозревание соматических зародышей, 4 – созревание соматических зародышей, 5 – регенерация клонов на средах, обогащенных пептидными фракциями, 6 – адаптация клонов в условиях теплицы.

Исследование влияния обработки пептидами растений проводилось на стадии регенерации клонов КЛ4. Для эксперимента были выбраны тотальные белково-пептидные экстракты семян *Amaranthus retroflexus* L., колосьев *Elytrigia elongata* (Host) Nevski зрелых и в стадии молочной спелости (МС), у которых по результатам масс-спектрометрического анализа идентифицирован набор молекулярных масс в пептидном диапазоне (3,0–12,0 кДа). Данные экстракты были предварительно разделены на 3 группы методом псевдоафинной хроматографии на полианионном сорбенте среднего давления: «связывания нет» (0 мМ NaCl), «слабое взаимодействие» (100 мМ NaCl) и «сильное взаимодействие» (500 мМ NaCl). Фракции 0 мМ всех исследованных источников защитных пептидов не оказали достоверного положительного влияния на рост в длину регенерантов *L. sibirica*. Более того, в варианте *E. elongata* МС 0 мМ (25 мкг/мл) наблюдали ингибирование роста регенерантов. Фракция *E. elongata* МС 100 мМ также оказала ингибирующее действие: при концентрациях 25 и 50 мкг/мл средняя длина проростков была в 1,2 и 1,5 меньше контроля (базовая среда ½АИ без витаминов) соответственно. В то же время фракция *A. retroflexus* 100 мМ (3,125 мкг/мл) стимулировала рост регенерантов в длину по сравнению с контролем. Согласно полученным данным, преобладающая активность локализовалась во фракциях *A. retroflexus* 100 мМ и *E. elongata* МС 500 мМ. Кроме того, все исследованные соединения снижали эффект фотоингибирования фотосинтеза у соматических проростков *L. sibirica*. Таким образом, фундаментальное изучение влияния «стимулирующих» веществ на морфологические, физиологические, гистологические особенности соматических зародышей у хвойных видов способствует оптимизации биотехнологии, которая может быть использована для практических работ, направленных на выращивание лиственничных лесов в Сибири.

### Список литературы

1. Vinale F., Sivasithamparam K., Ghisalberti E. L., Marra R., Barbetti M. J., Li H., Woo S. L., Lorito M. A novel role for *Trichoderma* secondary metabolites in the interactions with plants // *Physiological and Molecular Plant Pathology*. 2008. V. 72. P. 80–86.
2. Садыкова В. С., Кураков А. В., Куварина А. Е., Тюрин А. П., Рогожин Е. А., Коршун В. А. Образование штаммом *Trichoderma citrinoviride* TYVI 4/11 антибиотиков-пептаиболов // *Проблемы медицинской микологии*. 2015. Т. 17. №. 1. С. 41–46.
3. Третьякова И. Н., Пак М. Э., Лисецкая И. А., Баранова А. А., Рогожин Е. А., Садыкова В. С. Использование антимикробных пептидов микромицетов рода *Trichoderma* для выхода эмбриогенной культуры *Larix sibirica* // *Онтогенез*. 2019. Т. 50. №. 1. С. 41–52.

УДК 574.45

**А. В. Панов, А. В. Тимохина, В. И. Зырянов, С. В. Титов,  
И. А. Солнышкин, Н. В. Сиденко**

*Институт леса им. В.Н. Сукачева СО РАН – обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН, Россия, Красноярск*

## **ДЫХАНИЕ ЛЕСОВ СИБИРИ: РЕГИОНАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ СТОКОВ И ИСТОЧНИКОВ УГЛЕРОДА АТМОСФЕРЫ В ЭКОСИСТЕМАХ КЛЮЧЕВЫХ БИОКЛИМАТИЧЕСКИХ ЗОН БАССЕЙНА Р. ЕНИСЕЙ**

Содержание диоксида углерода (CO<sub>2</sub>) в атмосфере в настоящее время в 1.5 раза превышает максимумы, наблюдаемые за последние 500 тысяч лет. Начиная с 1990 года мировой объем выбросов CO<sub>2</sub> увеличился на 50%, а именно диоксид углерода ответствен за большую часть (до 76%) глобального радиационного воздействия парниковых газов (ПГ) [1]. Выполнение обязательств Парижского соглашения по сокращению выбросов парниковых газов, ратифицированного РФ на Саммите ООН по мерам в области изменения климата в 2019 году, невозможно без корректного учета роли российских лесов в поглощении ПГ атмосферы. Однако, качество подобной статистики оставляет желать лучшего. Красноярский край обладает одними из крупнейших среди регионов России запасами лесных ресурсов. Территория лесного фонда края достигает 168 млн га, а общий запас насаждений насчитывает до 11,7 млрд кубометров, что составляет 34% запасов регионов Сибирского федерального округа и 14 % от общероссийского запаса леса. Формирование системы мониторинга ПГ в крупнейшем лесном регионе РФ отвечает национальным интересам в свете наблюдаемых и прогнозируемых изменений климата.

Основная доля (60%) районов с высокой лесистостью располагается в северной и восточной части Красноярского края, еще 20% – в центральной. Однако, именно экосистемы высоких широт обладают наибольшей уязвимостью к происходящим изменениям климата и окружающей среды. В рамках проведенных исследований оценены величины ежегодного секвестирования углерода атмосферы биогеоценозами высоких широт региона за период 2015 – 2019 гг. Исследования проведены посредством мониторинга газового состава атмосферы на обсерватории “ZOTTO” (п. Зотино; 60°48' С.Ш.; 89°21' В.Д.) и измерений обменных потоков (стоков/источников) углерода на базе мониторинговой сети “KrasFLUX” – сети микрометеорологических мачт, размещенных в ключевых биогеоценозах основных биоклиматических зон бассейна р. Енисей в высоких широтах (60° - 67° С.Ш.): лесо-болотные комплексы – сосняк лишайниковый и торфяное болото (высокий рям) (п. Зотино; 60°48' С.Ш.; 89°22' В.Д.); пихтарник осоково-разнотравный (п. Зотино; 60°01' С.Ш.; 89°49' В.Д.); лиственничник кустарничково-зеленомошный (п. Тура; 64°12' С.Ш.; 100°27' В.Д.); плоскобугристое болото (г. Игарка; 67°28' С.Ш.; 86°29' В.Д.). На рисунке представлены величины ежегодного секвестирования углерода атмосферы для зоны охвата измерений обсерватории “ZOTTO” – модельной территории средней Сибири, площадью 2.3 млн квадратных километров [2].

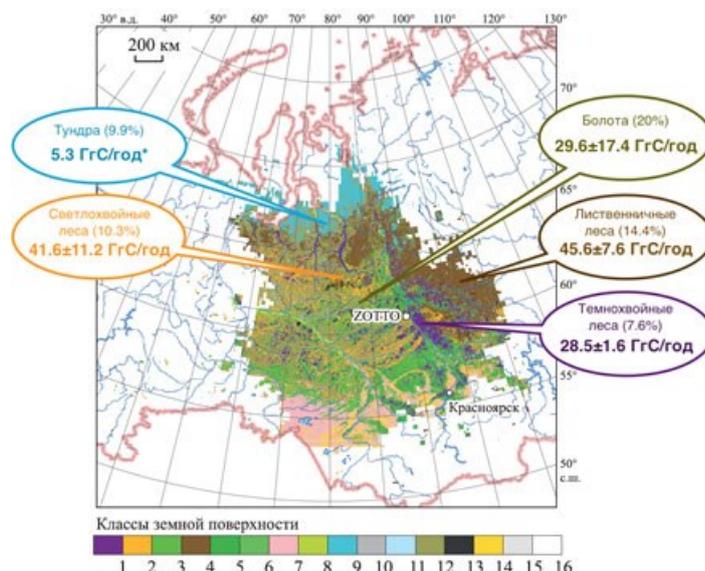


Рис. Величины ежегодного секвестрирования углерода атмосферы ключевыми экосистемами региона в высоких широтах (60° - 67° С.Ш.). Представлены данные для зоны охвата измерений обсерватории "ZOTTO". Классы земной поверхности рассчитаны согласно TerraNorte RLC [2].

Несмотря на существенную межгодовую вариацию поглощения/эмиссии углерода атмосферы экосистемами, установлено, что за пятилетний период наблюдений (2015 - 2019 гг.) биогеоценозы высоких широт в районе исследований выступали нетто-стоком CO<sub>2</sub> атмосферы, секвестрируя, в целом, до 150±37.28 ГтС/год. В структуре лесных насаждений Красноярского края по группам древесных пород преобладают хвойные насаждения, доля которых составляет порядка 76%, что делает их наиболее важным компонентом наземного углеродного баланса в регионе. На модельной территории такие насаждения занимают 32% площади и секвестрируют порядка 115 ГтС/год, из которых до 40% (45.6±7.6 ГтС/год) депонируется лиственными лесами, а оставшиеся 60% приходятся на долю светлохвойных вечнозеленых (36%; 41.6±11.2 ГтС/год) и темнохвойных вечнозеленых насаждений (24%; 28.5±1.6 ГтС/год). Болотные экосистемы модельной территории (20% площади) выступают сравнительно меньшим резервуаром углерода атмосферы, секвестрируя до 29.6±17.4 ГтС/год, но наиболее чувствительным к изменениям параметров климата и окружающей среды. Так, если торфяные болота среднетаежной подзоны региона представляют собой, в целом, стабильный нетто-сток углерода, то плоскобугристое болото в экотоне лесотундры выступает слабым стоком CO<sub>2</sub>, а при определенном сочетании гидротермических условий может балансировать на грани сток/источник.

### Список литературы

1. IPCC, 2014: Climate Change 2014: Synthesis Report. Contribution of Working Groups I, II and III to the Fifth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change. IPCC, Geneva, Switzerland, 151 pp.
2. Урбан А. В., Прокушкин А. С., Корец М. А., Панов А. В., Гербиг К., Хайманн М. Влияние подстилающей поверхности на концентрации парниковых газов в Центральной Сибири // География и природные ресурсы. 2019. № 3. С. 32–40.

УДК 661.89

**А. И. Петров**

*ФИЦ КНЦ СО РАН; ИХХТ СО РАН, Красноярск*

## **ПРИМЕНЕНИЕ ОРГАНИЧЕСКИХ ДИСУЛЬФИДОВ В ПРОЦЕССАХ ЭКСТРАКЦИИ И СОРБЦИИ ПАЛЛАДИЯ(II), ПЛАТИНЫ(II)/(IV) И ЗОЛОТА(III)**

Использование в аффинаже благородных металлов сорбционных и экстракционных процессов позволяет повысить эффективности разделения и чистоты металлов, сократить сроки аффинажа и объемы незавершенного производства. Поэтому разработка эффективных, недорогих и промышленно доступных экстрагентов и сорбентов является актуальной задачей.

Нами были исследованы коммерчески доступные дисульфиды: L-цистин, цистамин, DL-гомоцистин и 3,3'-дитиодипропионовая кислота на предмет возможности их использования в качестве экстрагентов и модификаторов поверхности для синтеза сорбентов.

Поверхность силикагеля модифицировали с помощью кремнийорганических производных соответствующих дисульфидов. Обнаружено, что из выбранных дисульфидов только 3,3'-дитиодипропионовая кислота может быть использована в качестве экстрагента и привита к поверхности силикагеля через 3-аминопропилтриэтоксисилан, производство которого хорошо отлаженный коммерческий процесс. Несомненно, большим плюсом является возможность получения 3,3'-дитиодипропионовой кислоты из уксусной кислоты в три стадии.

Для экстракции подходят спирты C<sub>5</sub>-C<sub>8</sub>, нами был выбран доступный изоамиловый спирт, т.к. он производится в РФ и экстрагирует Au(III) и Pt(IV) из хлоридных сред, что увеличивает скорость взаимодействия между растворенным дисульфидом и ионом металла.

Установлено, что экстракция и сорбция хлорокомплексов платины и палладия эффективно протекает при концентрации соляной кислоты  $\approx 0,5$  М, причем Pd(II) извлекается значительно лучше чем Pt(IV) и Pt(II). Pd(II) извлекается на 99%, а Pt(II) и Pt(IV) на 90%. Au(III) количественно окисляет дисульфид до растворимой в воде сульфокислоты и восстанавливается до элементарного золота. В одинаковых условиях скорость взаимодействия уменьшается в ряду: Pd(II) > Au(III) > Pt(II) > Pt(IV).

На основании предыдущих исследований, квантовохимических расчетов и данных по экстракции ключевую роль в направлении реакции играет растворитель. Так в водных солянокислых растворах взаимодействие 3,3'-дитиодипропионовой кислоты с Pd(II) приводит к диспропорционированию, а в спирте образующийся биядерный комплекс стабилен. Данный факт важен с точки зрения многократного использования системы, т.к. дисульфидная связь не разрушается. Неожиданно было обнаружено взаимодействие дисульфидов с Pt(IV) в солянокислых растворах. Оно протекает с образованием монокомплекса Pt(IV), но скорость его образования очень медленная.

При исследовании возможности десорбции и реэкстракции из органической фазы обнаружено, что лучшим реагентом является 5% раствор тиомочевины в 1М HCl (степень реэкстракции за 1 ступень составила 80% при 298 К).

Для дополнения работы проводились DFT расчеты (на рисунке приведен фрагмент сорбента). На основе их было установлено, что при взаимодействии с Au(III) не происходит образование связи Au-S и протекает окислительно-восстановительная реакция по внешнесферному механизму.

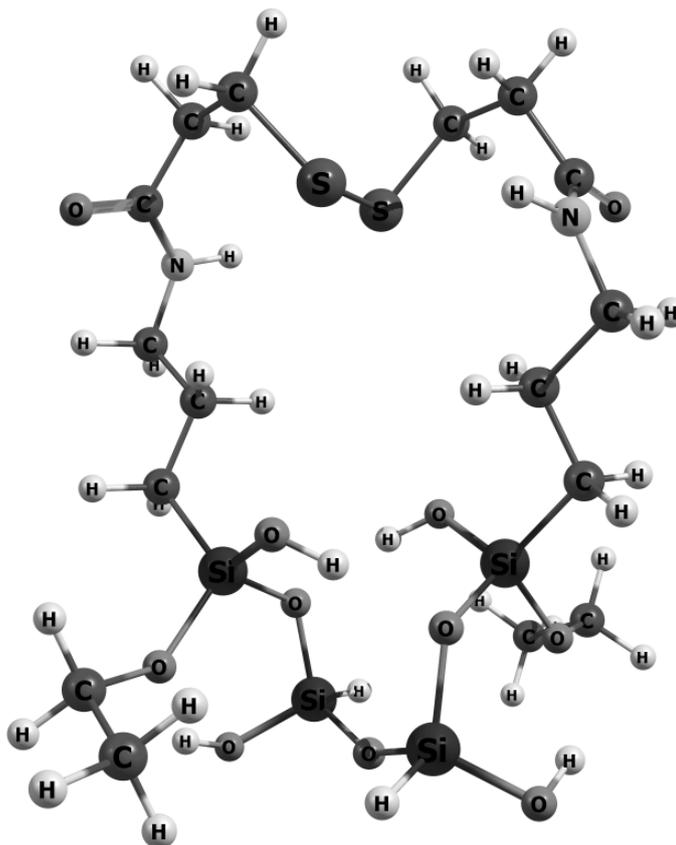


Рис. DFT рассчитанная модель фрагмента сорбента на основе 3,3'-дитиодипропионовой кислоты

Данное исследование открывает широкий пласт для дальнейших работ по исследованию экстракции и сорбции 3,3'-дитиодипропионовой кислотой. Предстоит изучить взаимодействия с родием, иридием, рутением, осмием, серебром, железом, медью, никелем и возможными конкурирующими процессами с селеном и теллуром. Но уже сейчас полученные результаты, например, можно применить для выделения золота и палладия из солянокислых растворов в одну стадию: после экстракции золото отфильтровывается, а Pd(II) рекстрагируется тиомочевинной.

УДК 621.762

**Е. В. Пикурова<sup>1,2</sup>, Т. В. Трофимова<sup>2</sup>, А. Ю. Павликов<sup>2</sup>, Д. И. Сайкова<sup>2</sup>,  
Д. И. Чистяков<sup>2</sup>, Н. П. Евсевская<sup>1</sup>, Д. В. Карпов<sup>2</sup>, М. Н. Волочаев<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>Институт химии и химической технологии Сибирского отделения Российской академии наук – обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН, Россия, Красноярск

<sup>2</sup>Сибирский федеральный университет, Россия, Красноярск

<sup>3</sup>Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук – обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН, Россия, Красноярск

Научный руководитель – доктор химических наук, профессор СФУ – **С. В. Сайкова**  
Сибирский федеральный университет, Россия, Красноярск

## **СИНТЕЗ МАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ СО СТРУКТУРОЙ «ЯДРО-ЗОЛОТАЯ ОБОЛОЧКА» ДЛЯ БИМЕДИЦИНСКИХ И КАТАЛИТИЧЕСКИХ ПРИЛОЖЕНИЙ**

Среди огромного ряда функциональных наноструктур особое внимание привлекают магнитные наночастицы, покрытые золотой оболочкой, которые, благодаря их биосовместимости, являются перспективными материалами для разработки селективных МРТ-контрастирующих агентов, для направленной доставки лекарств, магнитной гипертермии, биосенсоров и др.[1-3]. Также была показана [4] каталитическая активность таких наночастиц, в частности, в реакциях восстановления нитроароматических соединений до аминов, что позволяет применять их для разрушения опасных для окружающей среды соединений. Однако, проблема получения таких наночастиц с заданными размерами, формой и структурой в последнее десятилетие является одним из актуальных направлений неорганической химии. В качестве магнитных ядер предлагается использовать материалы на основе железа  $\text{CoFe}_2\text{O}_4$ ,  $\text{NiFe}_2\text{O}_4$  и  $\text{Dy}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ , обладающие высокой химической стойкостью и высокой удельной намагниченностью, а также наночастицы переходных металлов состава  $\text{Co@C}$  и  $\text{Ni@C}$ , стабилизированных гидрофобной углеродной оболочкой, с высокой поверхностной активностью.

Несмотря на представленное в литературе разнообразие методов синтеза гибридных наночастиц, до сих пор ни один из них не является универсальным и хорошо воспроизводимым из-за большой разницы в природе двух поверхностей. В данной работе предлагается решить эту проблему за счет подбора условий и оптимизации методик получения частиц.

В ходе выполнения работы разработаны методики получения магнитных ядер  $\text{CoFe}_2\text{O}_4$ ,  $\text{NiFe}_2\text{O}_4$ ,  $\text{Dy}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ ,  $\text{Co@C}$  и  $\text{Ni@C}$ , для синтеза которых впервые был применен метод анионообменного осаждения, заключающийся в использовании анионообменных смол в качестве реагентов-осадителей на стадии синтеза прекурсоров. По данным РФА, получены монофазные ферриты без примесей со средним размером частиц 20-50 нм (по данным ПЭМ), обладающие ферримагнитными свойствами. Также разработаны методики получения прекурсоров на основе  $\alpha\text{-Co}(\text{OH})_2$  и  $\alpha\text{-Ni}(\text{OH})_2$ , отличающиеся межслоевым расстоянием и природой внедренного аниона, в ходе сольвотермического разложения которых образуются суперпарамагнитные частицы  $\text{Co@C}$  и  $\text{Ni@C}$  размером 10-15 нм, капсулированные углеродом.

Синтез наночастиц золота, обладающих анизотропией оптических свойств, проводили двумя способами. По данным методов оптической спектроскопии и ПЭМ, гидрозоли, полученные двухступенчатым методом зародышевого роста, содержат наночастицы золота бипирамидальной формы ( $76 \times 24 \pm 5$  нм) с положением второго максимума ППП при 870 нм.

С помощью одноступенчатого беззародышевого метода получены наностержни золота, имеющие размеры  $23 \pm 1 \times 7 \pm 0,2$  нм,  $20 \pm 2,5 \times 5 \pm 0,5$  нм,  $29 \pm 1,5 \times 6 \pm 0,1$  нм (по данным ПЭМ) со смещением второго максимума ППР в длинноволновую область ( $730 \div 850$  нм).

Методом обращенных микроэмульсий получены гибридные частицы  $\text{CoFe}_2\text{O}_4@Au$ . Согласно данным ПЭМ, наблюдаются сферические нч золота диаметром 3-10 нм, расположенные на поверхности более крупных 30 нм частиц феррита кобальта.

Методом химического восстановления золотохлористоводородной кислоты на поверхности магнитных ядер получены гибридные частицы типа «ядро-оболочка»  $\text{NiFe}_2\text{O}_4@Au$  размером 120-150 нм.

*В работе использованы приборы Центров коллективного пользования ФИЦ КНЦ СО РАН и СФУ.*

*Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда науки в рамках научного проекта № 18-43-243014: «Синтез магнитных наночастиц со структурой «ядро-золотая оболочка» для биомедицинских и каталитических приложений».*

### **Список литературы**

1. Wang L. et al. Monodispersed Core-Shell  $\text{Fe}_3\text{O}_4@Au$  Nanoparticles // J. Phys. Chem. B, Vol. 109. No. 46, 2005. P. 21593-21601.
2. An P. et al. A Bio-Inspired Polydopamine Approach to Preparation of Gold-Coated  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  Core-Shell Nanoparticles: Synthesis, Characterization and Mechanism // Nano. 2013. 08. P. 1350061-1 – 1350061-13.
3. Wu A. et al. Biomedical Applications of Magnetic Nanoparticles // Nano. 2010. Vol. 05. P. 245–270.
4. Silvestri A. et al. Synthesis of Water Dispersible and Catalytically Active Gold-Decorated Cobalt Ferrite Nanoparticles // Langmuir. 2016. 32 (28). P. 7117–7126.

УДК 621.396.677

**С. В. Поленга<sup>1</sup>, Е. А. Литинская<sup>1</sup>, А. В. Станковский<sup>2</sup>, Р. О. Рязанцев<sup>3</sup>,  
А. Д. Немшон<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Аспирант, Сибирский федеральный университет, Россия, Красноярск

<sup>2</sup>Инженер кафедры радиотехники, Сибирский федеральный университет, Россия, Красноярск

<sup>3</sup>Старший преподаватель кафедры радиотехники, Сибирский федеральный университет, Россия, Красноярск

Научный руководитель – кандидат технических наук, профессор **Ю. П. Саломатов**  
Сибирский федеральный университет, Россия, Красноярск

## **РАЗВИТИЕ МЕТОДОВ СКАНИРОВАНИЯ И РАЗРАБОТКА НА ИХ ОСНОВЕ НИЗКОПРОФИЛЬНОЙ СКАНИРУЮЩЕЙ АНТЕННОЙ СИСТЕМЫ ДЛЯ РАБОТЫ В СЕТЯХ СПУТНИКОВОЙ СВЯЗИ НА ТЕРРИТОРИИ КРАСНОЯРСКОГО КРАЯ**

В настоящее время значительная часть территорий РФ – это отдаленные и малонаселенные регионы без сетей наземной связи, где единственным способом связи остается спутниковая связь. Также актуальной является задача организации непрерывной работы систем спутниковой связи на мобильных объектах (автомобиль, поезд, судно). Традиционно используемые сканирующие антенные системы для организации спутниковой связи, зеркальные антенны (ЗА) [1] и активные фазированные антенные решетки (АФАР) [2], имеют ряд существенных недостатков, таких как высокие массогабаритные показатели – у зеркальных антенн, и, ограниченный сектор углов сканирования и дороговизна у фазированных антенных решеток. На большей территории РФ существующие сканирующие антенн неэффективны по причине того, что геостационарные спутники связи видны под малыми углами места ( $70^\circ$ - $90^\circ$  относительно зенита), а представленные на рынке сканирующие АФАР имеют сектор сканирования по углу места, ограниченный величиной в  $40^\circ$ - $60^\circ$ , и принципиально не позволяют увеличить этот сектор без ущерба для характеристик системы связи.

Были предложены и исследованы комбинированные методы управления лучом, позволяющие существенно уменьшить количество управляемых элементов антенной решетки (АР) и различные конфигурации АР для уменьшения профиля антенны [3].

В качестве излучателей АР были исследованы и разработаны резонаторы Фабри-Перо на основе частотно-селективных поверхностей (ЧСП) [4,5]. Данный тип излучателя позволил разрабатываемой АС обладать не только расширенным сектором углов сканирования и малым профилем, но и высоким коэффициентом использования поверхности (КИП) и высоким коэффициентом усиления (КУ) антенны. Разработанные полупрозрачные ЧСП с положительным наклоном характеристики фазы отраженной волны позволили создать широкополосные резонаторы Фабри-Перо Ку-диапазоне частот. Диаграммообразующая схема (ДОС) АР реализована на основе пустотелых бинарных волноводных делителей, что позволило снизить потери в линиях передачи и увеличить эффективность всей антенной системы в целом.

На основе проведенных исследований была разработана электродинамическая модель АР, состоящей из двух идентичных подрешеток, с комбинированным типом сканирования. Каждая подрешетка состоит из низкопрофильной волноводной ДОС и 16 резонаторов Фабри-Перо на основе двуслойной полупрозрачной ЧСП.

Далее был изготовлен макет АР с комбинированным типом сканирования (рис. 1 а). Максимальные габариты макета составляют  $740 \times 490 \times 220$  мм. Сканирование в азимутальной плоскости осуществляется поворотом общей платформы, сканирование в угломестной плоскости – внесением линейной фазовой задержки по подрешеткам и поворотом каждой подрешетки вокруг своей оси.

На рисунке 1 б представлены зависимости коэффициента усиления антенной решётки при различных углах отклонения максимума ДН ( $\alpha$ ) от частоты.

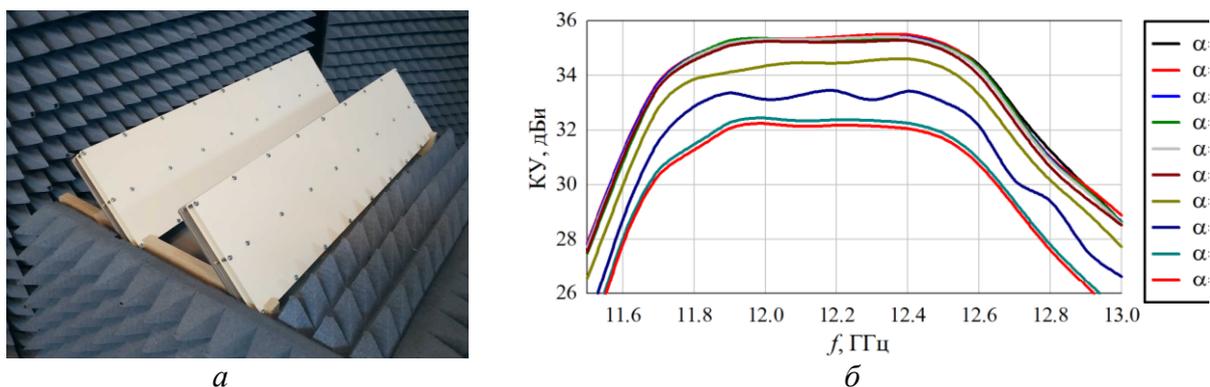


Рисунок 1 – а: Макет АР с комбинированным типом сканирования; б: зависимость КУ антенной решётки от частоты при различных углах сканирования

На основе разработанного макета может быть реализована высокоэффективная сканирующая антенная система с малыми массогабаритными показателями, с широким сектором углов сканирования и невысокой стоимостью, функционирующая на всей территории РФ (включая северные широты) в мобильных терминалах спутниковой связи.

### Список литературы

1. Compact Reflector Antenna System for Ku-Band Satcom on the Move (SOTM) / Manoj Kumar Dwivedi, Ajay Kumar Sharma // 2019 6th International Conference on Signal Processing and Integrated Networks (SPIN). 2019. pp. 254–257.
2. A Large Antenna Array for Ka-Band Satcom-on-the-Move Applications—Accurate Modeling and Experimental Characterization / Benoit Lesur, Amel Maati, Marc Thevenot and et al // IEEE Transactions on Antennas and Propagation. 2018. Vol. 66. Issue 9. pp. 4586-4595.
3. A Ku-Band Low-Profile Wide-Angle Scanning Antenna Array with Combined Beam Steering / Yelena A. Litinskaya, Stanislav V. Polenga, Andrey V. Stankovsky and et al // 2018 XIV International Scientific-Technical Conference on Actual Problems of Electronics Instrument Engineering (APEIE). 2018. pp. 238–242.
4. A dual-polarized fabry-perot cavity antenna with high gain / Meng-Yao Mi, Sheng-Qiang Zhang, Bao-Hua Sun // 2017 Sixth Asia-Pacific Conference on Antennas and Propagation. 2017. pp. 1–3.
5. A. M. Alexandrin S. V. Polenga, A. V. Stankovsky, A. D. Nemshon, Y. A. Litinskaya, Yu. P. Salomatov. "Ku-band antenna array element based on Fabry-Perot cavity," 2016 Asia-Pacific Microwave Conference (APMC), New Delhi, 2016, pp. 1-4.

УДК 535

**М. В. Пятнов**

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

## **ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ И ГИБРИДНЫЕ МОДЫ ФОТОННОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ СТРУКТУРНО ХИРАЛЬНЫХ И РЕЗОНАНСНЫХ НАНОКОМПОЗИТНЫХ СРЕД**

Продemonстрировано существование гибридных оптических мод, обусловленных связью между резонаторными модами брэгговского отражателя с нанокomпозитным дефектом, и таммовским плазмоном, возбуждаемым на границе фотонного кристалла и тонкой металлической плёнки. Показана возможность управления спектральными свойствами, при помощи варьирования толщины слоя, прилегающего к металлу, числа слоёв фотонного кристалла, что открывает возможность создания перестраиваемого фильтра на основе изученной структуры. Дополнительное управление спектральными свойствами возможно за счет вариации фактора заполнения нанокomпозита. Чувствительность положения расщепленных пиков в спектре пропускания к параметрам структуры может оказаться полезной для управления светом в устройствах на основе подобных структур.

УДК 303.372.4

**И. С. Рыжиков<sup>1</sup>, К. Ю. Брестер<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Аспирант, Сибирский государственный университет науки и технологий, Россия, Красноярск

<sup>2</sup>Доцент, Сибирский государственный университет науки и технологий, Россия, Красноярск

## **РАЗРАБОТКА ЭФФЕКТИВНЫХ ПОПУЛЯЦИОННЫХ МЕТОДОВ ГЛОБАЛЬНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ И МЕТАЭВРИСТИК ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОГО ПОИСКА ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И АНАЛИЗА ДАННЫХ**

В настоящее время, в эпоху четвертой цифровой революции, в индустриях различного рода возросла актуальность задач вычислительного моделирования, оптимизации и анализа данных. Большое количество задач моделирования производственных и экономических процессов сводится к задачам поиска глобального оптимума на пространстве параметров моделей. Существует большое множество алгоритмов поиска оптимума, но по известной No Free Lunch теореме [1], не существует такого алгоритма, который решает задачи поиска параметров эффективнее, чем другие алгоритмы для задач моделирования различных классов.

Для решения различных задач предлагаются не только новые алгоритмы, но и модификации существующих алгоритмов, которые повышают эффективность поиска решения для конкретной задачи. Целью данной работы является проектирование и анализ метаэвристик, которые были бы одновременно применимы для различных поисковых алгоритмов в решении задач вычислительного моделирования.

Ранее было показано [2], что кооперативные модификации оптимизационных алгоритмов превосходят по эффективности свои стандартные аналоги. Поэтому в [3] был представлен кооперативный параллельный алгоритм многокритериальной оптимизации, который позже был успешно применен для решения задач идентификации линейных динамических систем [3]. Однако наряду с объединением нескольких эвристик, эффективной модификацией стохастического популяционного алгоритма является разработка оператора перезапуска, который помогает бороться со стагнацией и попаданием алгоритма в локальные оптимумы [4].

В рамках данного проекта был разработан и протестирован оператор перезапуска для многокритериальных эволюционных алгоритмов. На примере алгоритмов Non-dominated Sorting Genetic Algorithm II (NSGA II) и Multi-objective Evolutionary Algorithm Based on Decomposition (МОЕА) было показано, что включение оператора перезапуска в схему алгоритма в большинстве случаев позволяет повысить качество получаемых решений. Результаты тестирования были получены для множества задач международного соревнования CEC2009 [5] и оценены с помощью метрики IGD, выражающей расстояние между истинным и найденным решением [6].

Далее, оператор перезапуска был внедрен в программную систему идентификации линейных динамических систем, основанную на применении эволюционных алгоритмов. На тестовых задачах было продемонстрировано, что алгоритмы с метаэвристикой перезапуска позволяют генерировать более точные модели линейных динамических систем, однако возникает необходимость настройки ряда дополнительных параметров [7].

Учитывая эффективность кооперативных алгоритмов и оператора перезапуска, был разработан подход, объединяющий данные метаэвристики, для решения задачи идентификации нелинейной динамической системы. В данном эксперименте осуществлялась идентификация каскадной системы с четырьмя переменными. В целом такие системы часто описывают процессы в биологии и физиологии. Важно, что благодаря объединению метаэвристик, удалось превзойти другие известные решения при идентификации параметров системы [8].

В настоящий момент также ведется разработка подхода, основанного на внедрении алгоритмов кластеризации для реализации интеллектуального управления поиском. Как показали предварительные результаты тестирования данного подхода на задачах идентификации динамических систем, применение операторов эволюционного поиска к отдельным кластерам позволяет избежать генерирования неустойчивых решений, и, как следствие, повысить точность проектируемых моделей.

### Список литературы

1. Wolpert D. H., Macready W. G. No Free Lunch Theorems for Optimization // IEEE Transactions on Evolutionary Computation. 1997. Vol. 1. No. 1. P. 67–82.
2. Brester Ch., Ryzhikov I., Semenkin E., Kolehmainen M. On Island Model Performance for Cooperative Real-Valued Multi-objective Genetic Algorithms // ICSI (1). 2018. P. 210–219.
3. Ryzhikov I., Brester Ch., Semenkin E., Kolehmainen M. Multi-objective Evolutionary Approach in the Linear Dynamical System Inverse Modeling // IJCCI 2018. P. 281–288.
4. Ryzhikov I., Semenkin E., Panfilov I. Evolutionary optimization algorithms for differential equation parameters, initial value and order identification // ICINCO. 2016. Vol. 1. P. 168–176.
5. Zhang Q., Zhou A., Zhao S., Suganthan P.N., Liu W., Tiwari S. Multi-objective optimization test instances for the CEC 2009 special session and competition // University of Essex and Nanyang Technological University. Tech. Rep. CES-487. 2008.
6. Brester Ch., Ryzhikov I., Semenkin E., Kolehmainen M. On a Restart Metaheuristic for Real-valued Multi-objective Evolutionary Algorithms // GECCO (Companion). 2019. P. 197–198.
7. Ryzhikov I., Brester Ch. Restart operator for optimization heuristics in solving linear dynamical system parameter identification problem // IJCCI. 2019. P. 252–258.
8. Brester Ch., Ryzhikov I., Semenkin E., Kolehmainen M. Nonlinear dynamic system identification with a cooperative population-based algorithm featuring a restart metaheuristic // IWMMA. 2019. На рецензировании.

УДК 538.955, 538.956

**С. В. Семёнов, А. Л. Фрейдман, М. И. Колков, К. Ю. Терентьев, Н. С. Павловский, А. А. Красиков, А. А. Дубровский**

*Институт физики им. Л.В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН, 660036, Красноярск, Россия*

## **ПОИСК, СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ НОВЫХ ОКСИДНЫХ МОНОКРИСТАЛЛОВ, ПРОЯВЛЯЮЩИХ ВЗАИМОСВЯЗЬ МАГНИТНЫХ, МАГНИТОУПРУГИХ И МАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ**

Представлены результаты, полученные за два года реализации проекта № 18-42-243024 в рамках регионального конкурса проектов научных исследований молодых ученых, проводимого совместно ФГБУ «Российский фонд фундаментальных исследований» и Правительством Красноярского края»

В рамках работы по проекту были впервые получены монокристаллы редкоземельных манганитов семейства  $Dy_{1-x}Ho_xMnO_3$  с  $x=0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4$  ромбической пространственной группы  $R\bar{3}m$  [1]. Синтез монокристаллов осуществлялся методом спонтанной кристаллизации из раствора в расплаве. Осуществлена пост-ростовая обработка полученных образцов, а также проведена их химическая и структурная характеристика.

Проведено подробное экспериментальное исследование магнитных свойств [1], прямого и обратного магнитоэлектрического эффекта, магнитодиэлектрического эффекта полученных монокристаллических образцов в широком интервале температур и магнитных полей. Полученные результаты указывают на сильную взаимосвязь магнитных и магнитоэлектрических свойств данных систем.

### **Список литературы**

1. Semenov, S. V., Kolkov, M. I., Terent'ev, K. Y. et al. Synthesis of the Orthorhombic  $Dy_{1-x}Ho_xMnO_3$  Single Crystals and Study of Their Magnetic Properties // Journal of Superconductivity and Novel Magnetism. – 2019. – <https://doi.org/10.1007/s10948-019-5090-8>.

УДК 711.4 (571.51)

## А. А. Ситникова, К. В. Резникова

*Доцент, канд. филос. наук, Сибирский федеральный университет, Россия, Красноярск*

*Доцент, канд. филос. наук, Сибирский федеральный университет, Россия, Красноярск*

*Руководитель – кандидат философских наук, доцент Е. А. Сертакова*

*Сибирский федеральный университет, Россия, Красноярск*

## ТРАНСФОРМАЦИИ ГОРОДСКОЙ СРЕДЫ КРАСНОЯРСКА С 1991 ПО 2017 ГОДЫ

Урбанистические исследования сегодня являются приоритетными в сфере современных социальных и гуманитарных наук. Настоящая научная работа ориентирована на развитие урбанистики в Красноярске с возможностью применения научных данных при организации городской жизни. Центральная цель исследования заключалась в изучении изменений городской среды Красноярска с 1991 по 2017 гг., восприятия этих изменений жителями города, а также в выявлении ряда закономерностей, определяющих трансформацию этой среды.

Использовалась комплексная методология исследования: аналитические обзоры современных урбанистических теорий и научных практик в России и мире, семиотический анализ знаковых объектов в городском пространстве, социологический опрос (N = 522) с обработкой результатов в программе SPSS, искусствоведческий анализ визуальных образов, связанных с Красноярском, исторический анализ развития Красноярска, глубинные интервью с экспертами и др. Исследование продемонстрировало, например, что наиболее тревожащими респондентов на протяжении всех трех рассматриваемых десятилетий (1991-2019 гг.) являются такие сферы городской жизни, как экология, состояние общественного транспорта, уборка и переработка городского мусора (см. рис.).

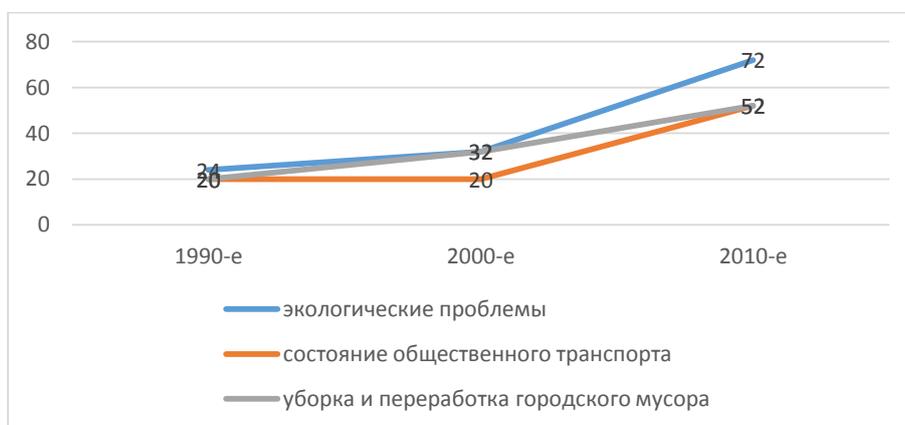


Рис. Изменение параметра «высокий уровень озабоченности проблемой» по отношению к лидирующим в этом показателе категориям, %

Во многом исследование сосредоточено на изучении символического капитала Красноярска, начиная с архитектуры города, инфраструктурных объектов, визуальных образов, заканчивая великими людьми, принесшими всероссийскую и международную известность городу. Всесторонний – исторический, искусствоведческий, социологический – анализ архитектурных сооружений позволил выявить наиболее оцененные и осмысленные жителями сооружения в Красноярске, появившиеся за последние три десятилетия, выделить динамично нарастающие проблемы с архитектурной средой в городе (эклектичный визуальный облик зданий, преобладание жилищного строительства над строительством социально значимых сооружений и зон отдыха и др.),

а также определить аксиологические трансформации городской среды – появление торговых и деловых центров в городской среде после 2000-х гг.

В качестве основных характеристик Красноярска можно выделить следующие: с точки зрения управления городская среда Красноярска представляет собой в большей степени административную модель, в которой только начинают развиваться процессы и площадки для взаимодействия с бизнес-структурами и гражданскими сообществами и установления баланса в распределении прав и обязанностей в области управления городом [1].

Архитектурный облик Красноярска претерпевает ряд изменений, связанных с новой ролью краевого центра в качестве экономического и экологического центра Сибири. Ключевыми особенностями городской архитектуры являются: роль природного ландшафта; соборность как общее качество общественных и культурных пространств города; сохранение памятников культурного наследия в среде современной городской застройки; интеграция в городское пространство крупных торгово-деловых и торгово-развлекательных центров.

Большое значение в городской среде Красноярска имеют скверы как наиболее распространенные виды зон отдыха. Главной особенностью пространства скверов является их тесная взаимосвязь с городской скульптурой, в которой доминируют темы героя и искусства (творчества). Благодаря архитектуре и скульптуре город предстает как территория, для которой характерны героические подвиги, обращение к историческому прошлому и вписанность в общероссийский и мировой контекст, а также как территория символической коммуникации, осуществляемой посредством различных видов искусства – музыки, театра, литературы, изобразительного искусства.

Важными особенностями городского транспорта являются преобладание автобусов как основного вида общественного транспорта; сосредоточенность основных маршрутов (трасбережных и межрайонных) в центре города; идентифицирующая роль троллейбусов (левый берег) и трамваев (правый берег); «историческая память» остановочных пунктов (сохранение названий ранее существовавших объектов или старых именований); возможность для изменения транспортной схемы в связи с открытием четвертого моста.

Ситуация с общественной безопасностью в Красноярске является неоднозначной: негативная с точки зрения экологии и транспортных проблем, позитивная с точки зрения попыток улучшить ситуацию с общественной безопасностью (система «Безопасный город», меры по контролю за безопасностью в местах скопления людей и др.).

У городской среды Красноярска существует богатый потенциал, а также некоторый позитивный опыт, несмотря на обозначенные выше проблемы. При всестороннем анализе наличной ситуации и грамотном планировании, исходя из сильных сторон сложившейся городской среды, возможны качественные изменения городского пространства Красноярска, обладающего уникальным геополитическим положением, ландшафтом, историей и характером [2].

#### **Список литературы:**

1. Замараева Ю. С., Кистова А. В., Колесник М. А., Копцева Н. П., Резникова К. В., Середкина Н. Н., Ситникова А. А. Городская среда Красноярска: основные характеристики// Журнал Сибирского федерального университета. Серия: Гуманитарные науки. – 2019. – №6(12). – С. 1106-1123.
2. Трансформация городской среды Красноярска в 1991-2017 годы: монография [Электронный ресурс] / Е. А. Сертакова (рук.), К. А. Дегтяренко, Ю. С. Замараева и др. – Красноярск: Сиб.федер.ун-т, 2019. – 76 с.

УДК 538.911

**И. А. Тамбасов***Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, ФИЦ КНЦ СО РАН, Россия, Красноярск*

## ИССЛЕДОВАНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ В НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ ТОНКИХ ПЛЕНКАХ С ПОМОЩЬЮ 3Ω МЕТОДА

Для эффективного преобразования тепловой энергии в электрическую необходимы материалы с высокими термоэлектрическими свойствами. Ключевыми свойствами являются наличие высокой дырочной или электронной проводимости  $\sigma$  ( $S \cdot m^{-1}$ ), наличие высокого коэффициента Зеебека  $S$  ( $V \cdot K^{-1}$ ), а также наименьшего коэффициента теплопроводности  $\kappa$  ( $W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$ ) в таких материалах [1]. Общей интегральной характеристикой термоэлектрических материалов является термоэлектрическая добротность  $ZT = (S^2 \sigma / \kappa) T$ , где  $T$  – средняя температура между горячей и холодной стороной термоэлектрического преобразователя. Современная научная тенденция сейчас активно направлена на исследование и создание именно наноструктурированных термоэлектрических материалов [2-5]. Это связано с тем, что за счет структурных особенностей можно изменять термоэлектрическую добротность и значительно ее повысить.

Нетривиальной задачей является исследование коэффициента теплопроводности в тонких пленках [6]. Трудности измерения существуют из-за того, что тонкие пленки располагаются на подложках с толщиной значительно большей чем толщина самой тонкой пленки. Таким образом исследования коэффициента теплопроводности в новых наноструктурированных тонких пленках является ключевой задачей.

В рамках настоящей работы была создана установка по измерению коэффициента теплопроводности в тонких пленках. Коэффициент теплопроводности был измерен в тонких  $Co - Al_2O_3$ , ОУНТ и ОУНТ/ $ZnO$  пленках. Зависимости коэффициента теплопроводности от размера наночастиц  $Co$ , толщины ОУНТ и температуры были обнаружены.

На рис. 1. представлена разработанная установка по измерению коэффициента теплопроводности с помощью 3 $\omega$  метода.

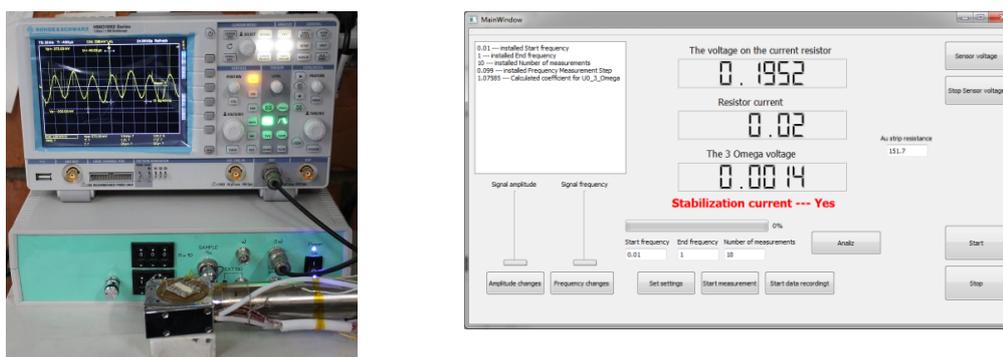


Рис. 1. Внешний вид (слева) и панель управления (справа) установки по измерению коэффициента теплопроводности в тонких пленках с помощью 3 $\omega$  метода.

На рис. 2 представлена зависимость коэффициента теплопроводности от температуры для тонких пленок.

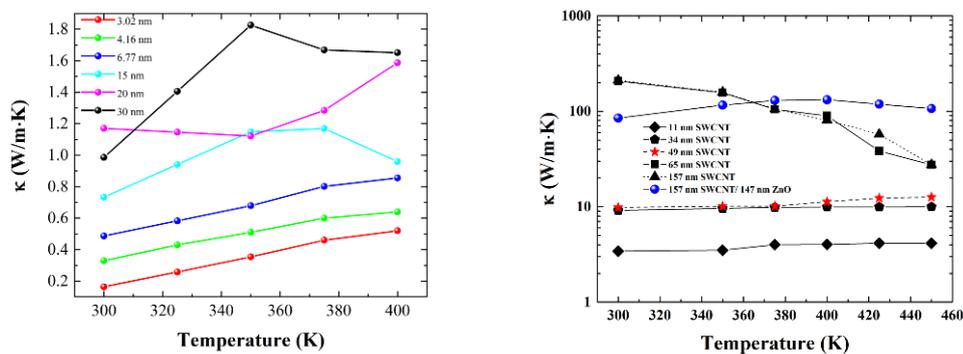


Рис. 2. Температурная зависимость коэффициента теплопроводности для тонких Co – Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> пленок (слева) и пленок на основе ОУНТ (справа).

В заключении, создана установка по измерению коэффициента теплопроводности в различных тонких пленках с помощью  $3\omega$  метода. Исследования коэффициента теплопроводности в наноструктурированных тонких пленках могут быть использованы для создания высокоэффективных термоэлектрических преобразователей.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда науки в рамках научного проекта: «Исследование коэффициента теплопроводности и структурных особенностей в тонких наноструктурированных оксидных пленках, перспективных для термоэлектрического применения» (проект №18-42-243010). Автор выражает благодарность исполнителям настоящего проекта и всем коллегам, которые участвовали в разработке установки и проведении измерений коэффициента теплопроводности.

### Список литературы

1. Snyder G. J., Toberer E. S. Complex thermoelectric materials // *Nature Materials*. 2008. V. 7, № 2. P. 105–114.
2. Li J. F., Liu W. S., Zhao L. D., Zhou M. High-performance nanostructured thermoelectric materials // *Npg Asia Materials*. 2010. V. 2, № 4. P. 152–158.
3. He J., Tritt T. M. Advances in thermoelectric materials research: Looking back and moving forward // *Science*. 2017. V. 357, № 6358. P. 1369.
4. Su X. L., Wei P., Li H., Liu W., Yan Y. G., Li P., Su C. Q., Xie C. J., Zhao W. Y., Zhai P. C., Zhang Q. J., Tang X. F., Uher C. Multi-Scale Microstructural Thermoelectric Materials: Transport Behavior, Non-Equilibrium Preparation, and Applications // *Advanced Materials*. 2017. V. 29, № 20. 1602013.
5. Ortega S., Ibanez M., Liu Y., Zhang Y., Kovalenko M. V., Cadavid D., Cabot A. Bottom-up engineering of thermoelectric nanomaterials and devices from solution-processed nanoparticle building blocks // *Chemical Society Reviews*. 2017. V. 46, № 12. P. 3510–3528.6.
6. Zhang Y. L., Hapenciuc C. L., Castillo E. E., Borca-Tasciuc T., Mehta R. J., Karthik C., Ramanath G. A microprobe technique for simultaneously measuring thermal conductivity and Seebeck coefficient of thin films // *Applied Physics Letters*. 2010. V. 96, № 6. 062107.

УДК 538.935

**А. С. Тарасов**

Научный сотрудник, Институт физики им.Л.В. Киренского, ФИЦ КНЦ СО РАН, Россия, Красноярск  
 Научный руководитель – доктор физико-математических наук, профессор **Н. В. Волков**  
 ФИЦ КНЦ СО РАН, Россия, Красноярск

## **ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПОВЕРХНОСТНЫХ И ИНТЕРФЕЙСНЫХ СОСТОЯНИЙ НА МАГНИТО- И СПИН-ЗАВИСИМЫЙ ЭЛЕКТРОННЫЙ ТРАНСПОРТ В ГИБРИДНЫХ СТРУКТУРАХ ФЕРРОМАГНЕТИК/ПОЛУПРОВОДНИК**

Исследования спин- и магнитозависимого транспорта в различных наноструктурах ведется уже многие десятилетия. Бурное развитие этой области началось с открытия ГМС эффекта [1], а предложенный *Datta u Das* вариант спинового транзистора [2] подтолкнул исследователей на поиск и создание различных спиновых приборов [3]. В отличие от традиционной электроники, эксплуатирующей заряд электрона, спинтроника старается оперировать спином и спиновым током [4]. Наиболее многообещающая кремниевая спинтроника изучает спиновые явления в структурах и устройствах изготовленных на основе кремния. В данной работе в устройстве на основе эпитаксиальной структуры  $\text{Fe}_3\text{Si}/\text{n-Si}$  продемонстрирован эффект спиновой аккумуляции и исследовано влияние на него электрического смещения. Пленка ФМ силицида железа  $\text{Fe}_3\text{Si}$  была выращена на допированной фосфором подложке  $\text{n-Si}$  с ориентацией (111) и удельным сопротивлением  $\rho = 2 \text{ } \Omega \cdot \text{cm}$  ( $n = 2 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ) при 200 С методом молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ). Картина дифракции отраженных быстрых электронов показана на рис. 1, а, на которой хорошо видны резкие рефлекссы, что подтверждает успешный эпитаксиальный рост пленки  $\text{Fe}_3\text{Si}$ . Для изготовления 4-терминального планарного устройства был использован технологический процесс, включающий стандартную фотолитографию и жидкостное химическое травление [5].

ВАХ для всех контактов линейны (вставка на рис. 2, а) во всем диапазоне температур (от 4.2 К до 295 К), отсюда можно заключить, что контакт  $\text{Fe}_3\text{Si}/\text{n-Si}$  омический. Также в пользу этого свидетельствует температурная зависимость сопротивления, записанная с контактов #2 и #3 ( $R_{23}$ ), показывающая типичное поведение кремния. Это означает отсутствие потенциального барьера между Si и  $\text{Fe}_3\text{Si}$ . Причиной омического контакта между металлом и низколегированным кремнием может быть формирование во время начального этапа роста пленки промежуточного слоя  $\text{Fe}_{3-x}\text{Si}_{1+x}$  обогащенного кремнием. Были измерены полевые зависимости локального и нелокального напряжения  $\Delta V$  при токе смещения  $I = 100 \text{ } \mu\text{A}$  используя 3-Т и 4-Т экспериментальную геометрию (рис. 2, б). В обоих случаях кривые хорошо аппроксимируются функцией Лоренца, что указывает на спиновую аккумуляцию в кремнии. Анализ экспериментальных данных дает время жизни спина  $\tau_s(3\text{T}) = 137 \text{ ps}$  и  $\tau_s(4\text{T}) = 134 \text{ ps}$ . Рассчитанные значения сравнимы с другими полученными результатами для структур на основе кремния. В том числе, в нашем предыдущем исследовании для структуры  $\text{Fe}_3\text{Si}/\text{p-Si}$  было получено  $\tau_s = 145 \text{ ps}$  [5]. Также наблюдается зависимость амплитуды спинового сигнала от электрического смещения. При этом все контакты устройства омические. Отсюда следует, что эффективность спиновой инжекции зависит от смещения. В недавних работах [6,7] сообщалось, что, как и в нашем случае, наблюдается тенденция снижения нормированного спинового сигнала и, соответственно, эффективности спиновой инжекции с увеличением электрического смещения.

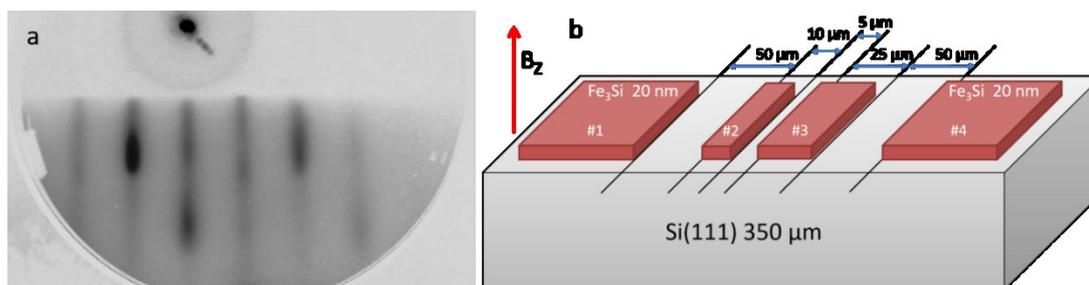


Рис. 1. *a* – *In situ* картина ДОБЭ для пленки  $\text{Fe}_3\text{Si}$  осажденной на поверхность  $\text{Si}(111)7 \times 7$  при  $T=200$  С. Дифракция получена в направлении  $\text{Si} \langle 101 \rangle$ . *b* – схематичная иллюстрация 4-Т устройства и экспериментальная геометрия.

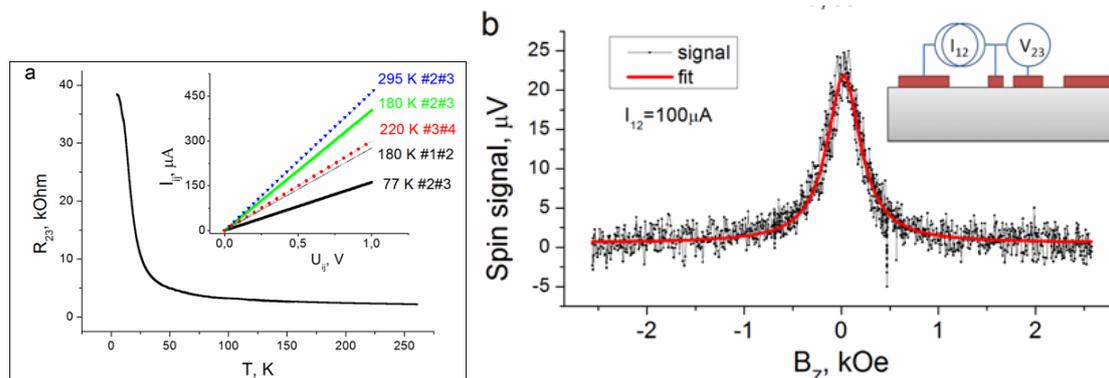


Рис. 2. Температурная зависимость сопротивления, измеренная между контактами #2 и #3. На вставке показаны ВАХ для различных контактов и температур. *b* – Спиновый сигнал  $\Delta V$  наблюдаемый в 3-терминальной геометрии при комнатной температуре.

Можно предположить, что данная закономерность справедлива в широком диапазоне концентрации примесей невырожденного кремния ( $10^{15}$ - $10^{18}$   $\text{cm}^{-3}$ ). Сравнивая наши результаты для *n*- и *p*-Si, а также учитывая литературные данные, можно заключить, что на время жизни спина, а также величину спинового сигнала в большей степени влияет концентрация носителей заряда, нежели их тип. Кроме того, условия синтеза пленок  $\text{Fe}_3\text{Si}$  на поверхности  $\text{Si}(111)$  кардинальным образом влияют на электрические свойства интерфейса.

### Список литературы

1. Fert A. // *Rev. Mod. Phys.* 2008. V. 80. P. 1517.
2. Datta S. & Das B. // *Appl. Phys. Lett.* 1990. V. 56. P. 665–667.
3. Nikonov D. E., Young I. A. // *Proc. IEEE.* 2013. V. 101(12). P. 2498-2533.
4. Jansen R. // *Nature Mater.* 2012. V. 11. P. 400.
5. Tarasov A.S., Lukyanenko A.V., Rautskii M.V., Bondarev I.A., Smolyakov D.A., Tarasov I.A., Yakovlev I.A., Varnakov S.N., Ovchinnikov S.G., Baron F.A., and Volkov N.V. // *Semicond. Sc. Technol.* 2019. V. 34. P. 035024.
6. Smolyakov D.A., Tarasov A.S., Yakovlev I.A., Masyugin A.N., Volochaev M.N., Bondarev I.A., Kosyrev N.N., Volkov N.V. // *Thin Solid Films.* 2019. V. 671. P. 18-21.
7. Lee S., Rortais F., Ohshima R., Ando Y., Miwa S., Suzuki Y., Koike H., and Shiraishi M. // *Phys. Rev. B* 2019. V. 99. P. 064408.
8. Spiesser A., Fujita Y., Saito H., Yamada S., Hamaya K., Mizubayashi W., Endo K., Yuasa S., and Jansen R. // *Phys. Rev. Applied.* 2019. V. 11. P. 044020.

УДК 620.3

**И. А. Тарасов***Научный сотрудник, к.ф.-м.н., ИФ СО РАН, Россия, Красноярск*

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ САМООРГАНИЗАЦИИ, МАГНИТНЫХ И МАГНИТООПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ АНСАМБЛЕЙ ГИБРИДНЫХ НАНОКРИСТАЛЛОВ НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА, КРЕМНИЯ И ЗОЛОТА

Магнитоплазмонные наноструктуры объединяют ферромагнитные и плазмонные материалы, чтобы использовать усиление электрического поля для создания активных оптических устройств, которые регулируются внешним магнитным полем [1,2]. Один из подходов к использованию этой, интересной с точки зрения ожидаемых эффектов, комбинации ферромагнитной и плазмонной наноструктуры заключается в изменении поляризационного состояния света с помощью магнитооптического (МО) эффекта Керра. Наличие плазмонного возбуждения, локализованных поверхностных плазмонов и распространяющихся поверхностных плазмонных поляритонов может значительно усилить полярный или экваториальный эффект Керра. В настоящее время исследуются гибридные наноструктуры благородный металл / ферромагнитный металл, представляющие собой двухслойные и трехслойные слои FM-Au (FM-Co, Fe, Ni, YIG) и структурированные тонкие пленки с точечной и антидотной структурами. Кроме того, исследования распространяются на другие плазмонные материалы, такие как Ag, Cu или Al.

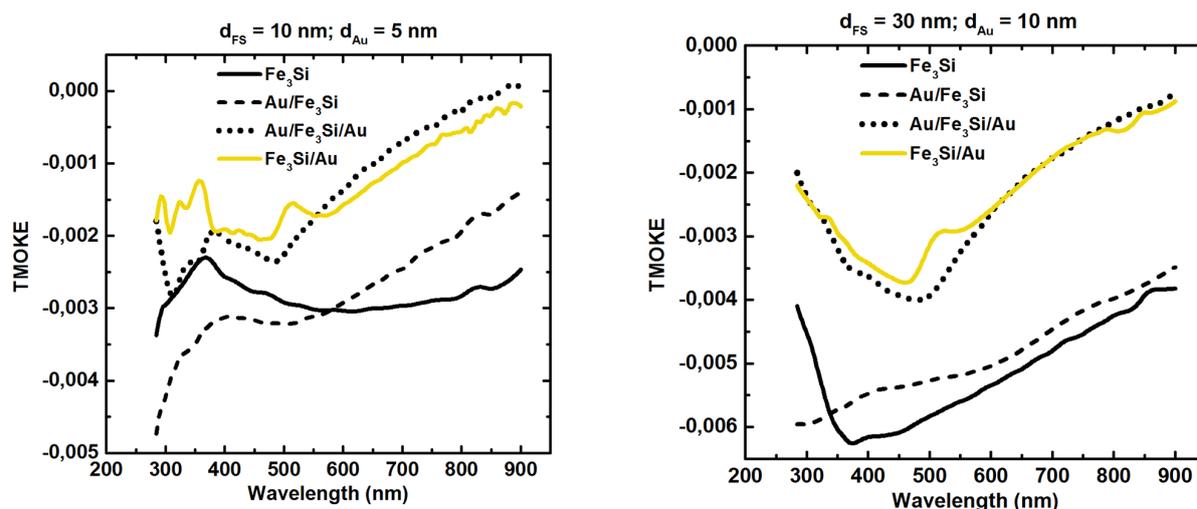


Рис. 1. Измеренная спектральная отражательная способность  $R(H+) - R(H-) / R(H+) + R(H-)$  для трех образцов  $Fe_3Si$  ( $d = 10$  нм) - Au ( $d = 5$  нм) (левая панель),  $Fe_3Si$  ( $d = 30$  нм) - Au ( $d = 10$  нм) (правая панель)

В данной работе мы стремимся исследовать магнитооптическую активность ферромагнитных тонких пленок силицида железа, связанных со слоями золота (рис.1). Кроме того, в работе исследуются оптические магнитооптические свойства многослойных наноструктур на основе силицида железа  $Fe_3Si$  и золота, покрытых монослоями полистирольных микросфер различного диаметра (рис. 2). Использование  $Fe_3Si$  вместо чистых ферромагнитных металлов позволяет нам изменять внутренние оптические и МО свойства ферромагнитного металла через химический состав и химический порядок [3].

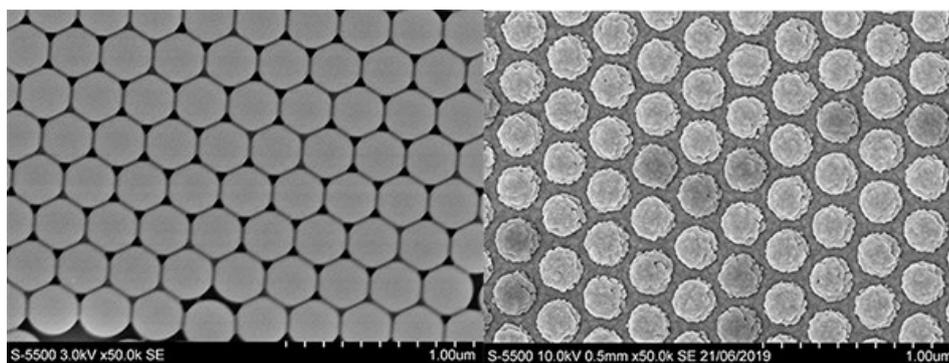


Рис. 2. Изображения сканирующей электронной микроскопии монослоя полистирольных наносфер рамера 272 нм (левая панель), нанесённых на наноструктуры на основе  $\text{Fe}_3\text{Si} - \text{Au}$ , и монослоя, подвергшегося реактивному ионному травлению и покрытого слоем золота (правая панель).

### Список литературы

1. D. Bossini, V.I. Belotelov, A.K. Zvezdin, A.N. Kalish, A. V. Kimel. Magnetoplasmonics and Femtosecond Optomagnetism at the Nanoscale, ACS Photonics. 3 (2016) 1385–1400.
2. G. Armelles, A. Cebollada, A. García-Martín, M.U. González, Magnetoplasmonics: Combining Magnetic and Plasmonic Functionalities, Adv. Opt. Mater. 1 (2013) 10–35.
3. I. Tarasov, Z. Popov, M. Visotin, I. Yakovlev, S. Varnakov, Effect of chemical ordering on optical properties of  $\text{Fe}_3\text{Si}$  epitaxial films, EPJ Web Conf. 185 (2018) 03014.

УДК 532.783

**К. А. Фейзер<sup>1</sup>, В. С. Сутормин<sup>1,2</sup>, П. И. Махрова<sup>1</sup>, Д. А. Костиков<sup>1</sup>,  
А. С. Абдуллаев<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Сибирский федеральный университет, Россия, Красноярск

<sup>2</sup>Институт физики им. Л.В. Киренского, Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр СО РАН», Россия, Красноярск.

Научный руководитель – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник **М. Н. Крахалев** Институт физики им. Л.В. Киренского, Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр СО РАН», Красноярск, Россия.

## **ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРООПТИЧЕСКОГО МАТЕРИАЛА НА ОСНОВЕ НЕМАТИКА И ПОЛИМЕРА, ЗАДАЮЩЕГО КОНИЧЕСКИЕ ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ ДЛЯ ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА**

Капсулированные полимером нематические жидкие кристаллы (КПНЖК) представляют собой микрокапсулы жидкого кристалла (ЖК) диспергированных в твердую полимерную матрицу [1]. Такие композиты сочетают в себе полезные свойства полимеров (устойчивость к внешним воздействиям, технологичность) и жидких кристаллов (возможность переключения структур электрическими полями), что позволяет использовать их в качестве электрооптических материалов, например, в умных пленках или электроуправляемых поляризаторах. На сегодняшний день на практике используются КПНЖК пленки, в которых полимер задает тангенциальные условия сцепления для нематика (директор на межфазной границе капле ориентирован параллельно поверхности). Однако основным недостатком данных композитных материалов является высокое управляющее напряжение (30-120 В).

Ранее нами были получены КПНЖК пленки с коническими граничными условиями для ЖК (директор на межфазной границе капле ориентирован под углом  $40^\circ$  к нормали к поверхности). В этом случае в каплях формируется аксиал-биполярная конфигурация, характеризующаяся наличием двух точечных дефектов - буджумов (как у капли с биполярной ориентационной структурой) и кольцевым поверхностным дефектом (как у капли с аксиальной конфигурацией) [2, 3]. Такие капли показывают существенное различие в рассеянии поляризованного света. Так, свет, поляризованный вдоль биполярной оси капли испытывает существенное рассеяние, в то время как излучение, поляризованное перпендикулярно биполярной оси практически не рассеивается. В случае распространения света вдоль биполярной оси капли рассеяние практически не происходит для излучения любой поляризации. В исходном состоянии в таких композитных жидкокристаллических пленках биполярные оси капле произвольно ориентированы. Под действием электрического поля капли стремятся сориентироваться биполярной осью вдоль приложенного электрического поля, при этом для их переориентации требуются относительно малые управляющие поля [4].

В данной работе представлены результаты исследования электрооптического отклика КПНЖК пленок с аксиал-биполярной конфигурацией для случаев, когда электрическое поле прикладывается вдоль и перпендикулярно плоскости образца. Приложение электрического поля вдоль плоскости КПНЖК пленки делает светопропускание зависящим от поляризации падающего на образец излучения (рис. 1а). Так, свет, поляризованный вдоль направления поля, испытывает сильное рассеяние, в результате светопропускание  $T$  такого излучения уменьшается с увеличением напряжения. Одновременно, свет, поляризованный

перпендикулярно направлению поля, испытывает меньшее рассеяние, что приводит к увеличению светопропускания  $T_{\perp}$  такого излучения. Для исследуемых пленок характерны малые управляющие поля, высокий коэффициент пропускания  $T_{\perp}$  и большие значения отношения  $T_{\perp}/T_{\parallel}$  [5]. В случае, когда электрическое поле направлено перпендикулярно плоскости КПНЖК пленки (рис. 1б) происходит увеличение светопропускания с ростом напряжения. При этом наблюдается высокий коэффициент пропускания  $T$  для прямо проходящего света, который достигается при малых управляющих напряжениях (менее 10 В).

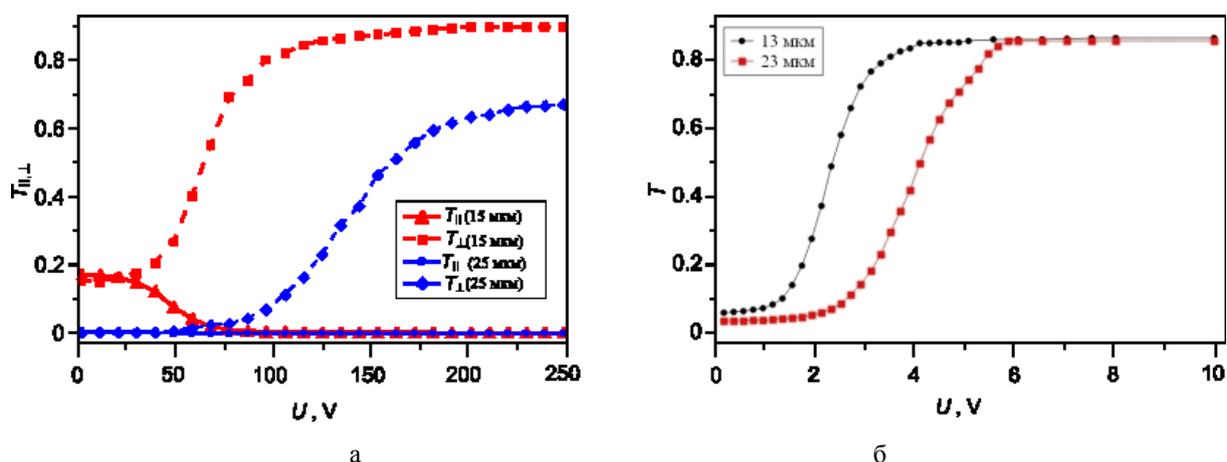


Рис. 1. Коэффициенты пропускания поляризованных компонент  $T_{\parallel, \perp}$  лазерного излучения в зависимости от приложенного напряжения  $U$  в случае, когда напряжение приложено вдоль плоскости пленки (а). Зависимость светопропускания  $T$  от приложенного напряжения  $U$  в случае, когда напряжение приложено перпендикулярно плоскости пленки (б)

Таким образом, нами исследован электрооптический отклик КПНЖК пленок с коническими граничными условиями для ЖК. Такие пленки имеют высокие коэффициенты пропускания  $T$  и низкие управляющие поля, что делает их перспективными для использования в качестве электрооптических материалов, например, в умных пленках с малыми управляющими напряжениями или электроуправляемых поляризаторах.

### Список литературы

1. Жаркова Г. М., Сонин А.С. Жидкокристаллические композиты // Наука. 1994. 214 с.
2. Ориентационные структуры в каплях нематика с коническими граничными условиями / В. Ю. Рудяк, М. Н. Крахалев, О. О. Прищепа [и др.] // Письма в ЖЭТФ. 2017. Т. 106. Вып. 6. С. 358–364.
3. Director configurations in nematic droplets with tilted surface anchoring / M.N. Krakhalev, O. O. Prishchepa, V. S. Sutormin [et al.] // Liquid Crystals. 2017. Vol. 44. №2. P. 355-363.
4. Electrically induced structure transition in nematic liquid crystal droplets with conical boundary conditions / V. Y. Rudyak, M. N. Krakhalev, O. O. Prishchepa. [et al.] // Physical Review E. 2017. Т. 96. №. 5. С. 052701.
5. Polymer dispersed nematic liquid crystal films with conical boundary conditions for electrically controllable polarizers / M. N. Krakhalev, O. O. Prishchepa, V. S. Sutormin [et al.] // Optical Materials. 2019. Vol. 89. P. 1-4.

УДК 621.777

**А. В. Чумак, А. В. Дурнопьянов, А. Д. Кутрань**

Студенты, Сибирский федеральный университет, Россия, Красноярск

Научный руководитель – кандидат технических наук, доцент **В. М. Беспалов**Научный консультант – научный сотрудник ООО «РУСАЛ ИТЦ» **В. А. Бернгардт****МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА СОВМЕЩЕННОГО ЛИТЬЯ И ПРОКАТКИ-ПРЕССОВАНИЯ ПРУТКОВ ИЗ СПЛАВА СИСТЕМЫ AL–ZR И ИССЛЕДОВАНИЕ ИХ СВОЙСТВ**

Метод совмещенного литья и прокатки-прессования (СЛиПП) алюминиевых сплавов с цирконием позволяет добиться существенного улучшения термостойкости, прочности и пластичности проводниковых полуфабрикатов круглого поперечного сечения за счет возникновения дополнительного вида знакопеременной сдвиговой деформации металла в процессе обработки [1, 2].

С целью определения технологических параметров получения прутков из сплава с содержанием 0,15% циркония методом СЛиПП проводили моделирование процесса в программе Deform 3D. Компьютерная модель процесса и химический состав экспериментального сплава представлены на рис. 1 и в табл. 1.

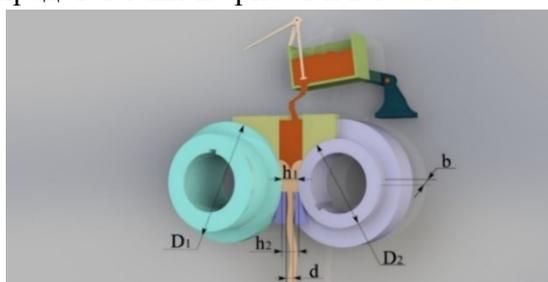


Рис.1. Компьютерная модель процесса СЛиПП:  $D_1$ ,  $D_2$  – диаметр валков по выступу и дну калибра;  $b$  – ширина калибра;  $h_1$  – минимальная высота калибра;  $h_2$  – высота зеркала матрицы;  $d$  – диаметр прутка

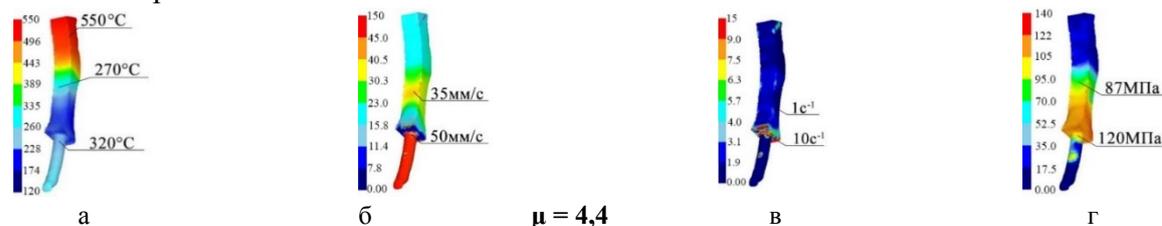
В качестве граничных условий моделирования приняты следующие характеристики: валки и матрица несжимаемые, показатель трения на валках 0,9 и на матрице 0,5, температура расплава 800°C, температура валков 100°C, частота вращения валков 4 об/мин; степень деформации при прокатке 50%, коэффициент вытяжки  $\mu = 4,4$ –14,3. Реологические характеристики сплава определены на установке горячего скручивания [3].

Таблица 1

Химический состав экспериментального сплава, %

Al	Zr	Fe	Mg	Si
основа	0,15	0,35	0,01	0,15

Результаты расчетов температурно-скоростных и деформационных параметров по модели представлены на рис. 2.



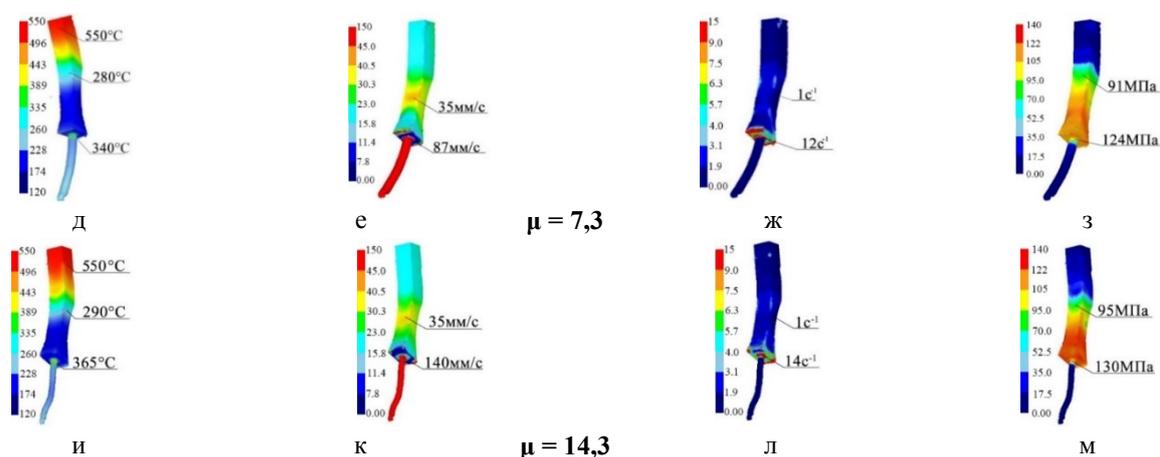


Рис. 2. Результаты моделирования процесса СЛиПП:  $\mu$  – коэффициент вытяжки при прессовании; а, д, и – распределение температуры, °С; б, е, к – скорость перемещения металла, мм/с; в, ж, л – скорость деформации,  $s^{-1}$ ; г, з, м – интенсивность напряжений, МПа

Проведено физическое моделирование процесса СЛиПП прутков диаметром  $d = 5, 7$  и  $9$  мм на установке совмещенной обработки при заданных параметрах. Сравнение расчетных, экспериментальных силовых параметров и свойства прутков, представлены в табл. 2, 3.

Таблица 2

Параметр	Силовая нагрузка на инструмент в процессе СЛиПП				
	d, мм	$\mu$	Данные с Deform 3D	Экспериментальные данные	Отклонение, %
Усилие на валках, кН	9	4,4	210	220	4,5
	7	7,3	260	280	7,0
	5	14,3	290	310	6,5
Усилие на матрице, кН	9	4,4	110	115	4,4
	7	7,3	120	125	4,0
	5	14,3	145	156	7,0

Таблица 3

Свойства прутков после СЛиПП						
d, мм	$\mu$	$\sigma_{0,2}$ , МПа	$\sigma_b$ , МПа	$\delta$ , %	$\rho$ , Ом·мм <sup>2</sup> /м	
9	4,4	84	121	25	0,0298	
7	7,3	91	123	20	0,0305	
5	14,3	98	135	18	0,0310	

Обработка исследуемого сплава методом СЛиПП с повышенным коэффициентом вытяжки позволяет улучшить прочность прутков и повысить производительность их изготовления.

### Список литературы

1. Исследование влияния параметров процесса совмещенного литья и прокатки-прессования на структуру и свойства деформированных полуфабрикатов из сплавов системы Al–Zr с различным содержанием легирующих элементов / В. М. Беспалов, С. Б. Сидельников, Н. Н. Довженко [и др.] // Производство проката. 2019. № 3. С. 21–28.
2. Study of the influence of conditions of combined casting and rolling-extruding and two-stage annealing on the structure and properties of semi-finished electrical products from an Al–Zr system alloy / V. Bepalov, S. Sidelnikov, D. Voroshilov [et al.] // Key Engineering Materials 805 KEM. 2019. С. 19–24.
3. 3D-моделирование и исследование процесса совмещенной обработки для получения прутков из сплавов системы Al–Zr / В. М. Беспалов, С. Б. Сидельников, Н. Н. Довженко [и др.] // Производство проката. 2019. № 1. С. 20–25.

УДК 532.5

А. А. Шибелева<sup>1</sup>, А. В. Шибелев, А. С. Лобасов, В. М. Будько<sup>1</sup>Ассистент, Сибирский федеральный университет, Россия, Красноярск

## РАСЧЕТНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЫШЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОСТИ МИКРОФЛЮИДНЫХ РЕАКТОРОВ

В настоящее время большое внимание уделяется вопросам энергоэффективности и энергосбережения. Применение микрореакторных устройств позволяет значительно интенсифицировать физико-химические процессы по сравнению с классическими крупногабаритными реакторами. Полученные результаты позволяют оптимизировать микромиксеры с наименьшим временем перемешивания, а также снизить затраты на их производство за счет интенсификации физико-химических процессов.

Проведено численное исследование смешения жидкостей в Т-образном микроканале со вставками различной формы. Размеры микромиксера: входные каналы 100x100 мкм; канал смешения 100x200x1500 мкм. Численная методика и подробное описание условий задачи описаны в работе [1].

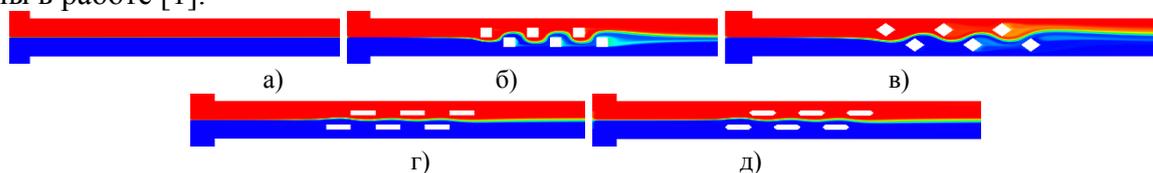


Рис. 1. Профиль концентрации при  $Re=100$ ; а) без вставок; вставки: б) квадратные; в) ромбовидные; г) прямоугольные; д) прямоугольные скошенные.

Получены зависимости эффективности смешения (рис.2) и перепада давления (рис.3). Как видно, ромбовидные препятствия обеспечивают наибольшее повышение эффективности смешения (до 16 раз при  $Re=100$ ) и увеличение перепада давления (до 4,5 раз при  $Re=100$  и вплоть до 6 раз при  $Re=300$ ).

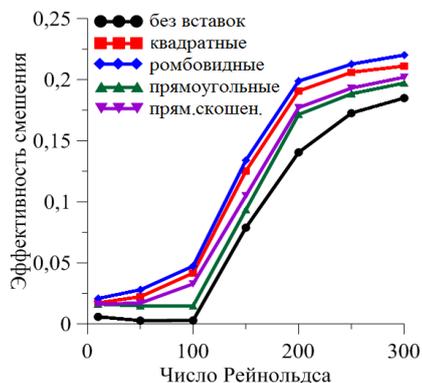


Рис.2. Зависимость эффективности смешения от числа Рейнольдса.

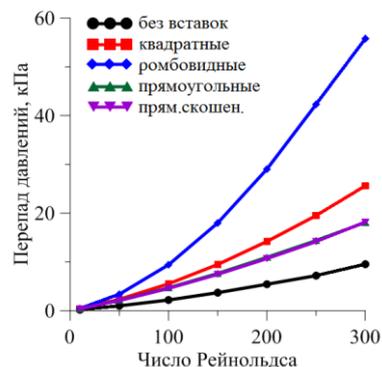


Рис.3. Зависимость перепада давления от числа Рейнольдса.

Проведено численное исследование эффективности перемешивания жидкостей в микромиксерах сложной геометрической формы с разным количеством сегментов (2, 4 6). Численная методика и условия задачи описаны в работе [2]. Как видно на рис.4, несмешанный поток поступает в первый цилиндр, где он вращается по спирали, а затем входит во второй цилиндр, где снова завихряется и смешивается. Образуются две основные вихревые структуры: вдоль оси цилиндров (рис. 4б), в правом верхнем углу первого цилиндра и нижнем правом углу второго цилиндра (рис. 4а).



Рис.4. Скорость обтекания: а) вид сбоку, б) вид сверху для 2 сегментов,  $Re=120$ .

Проведено вычислительное исследование влияния геометрии микромиксера на эффективность перемешивания в широком диапазоне чисел Рейнольдса  $1 \leq Re \leq 300$ . Было обнаружено, что с увеличением количества сегментов эффективность смешения увеличивается (рис. 5).

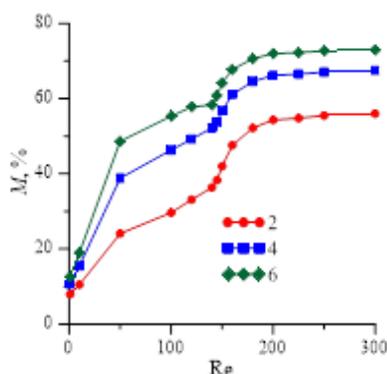


Рис.5. Зависимость эффективности смешения от числа Рейнольдса.

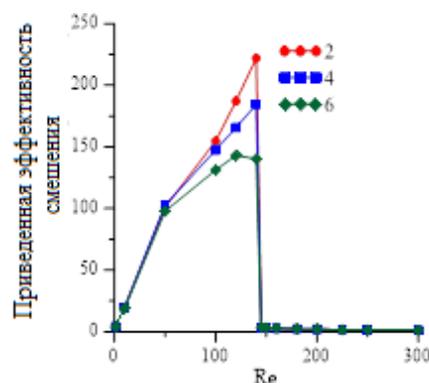


Рис.6. Зависимость приведенной эффективности смешения от числа Рейнольдса.

Получена зависимость относительной приведенной эффективности смешения от числа Рейнольдса (рис.6). Выявлено, что использование микромиксеров сложной геометрической формы позволяет интенсифицировать процессы смешивания, особенно при малых числах Рейнольдса, например при  $Re = 140$ , это значение около 230.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ, Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда науки в рамках научного проекта №18-48-243011: «Расчетное исследование способов повышения эффективности микрофлюидных реакторов».

### Список литературы

1. Lobasov A. S., Shebeleva A. A., Minakov A. V. Numerical Investigation of the Effect of Obstacles on the Thermal Exchange and Mixing Efficiency of Fluids in Microchannels // IEEE Xplore. 2019.
2. Lobasov A. S., Shebeleva A. A., Minakov A. V. Numerical Investigation of the Fluids Mixing Efficiency in the Micromixer with Cylindrical Section of Swirl Flow// IEEE Xplore. 2019.

УДК 007.3

**М. С. Шустин, М. М. Коровушкин, А. Д. Федосеев***Научный сотрудник, Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН, Россия, Красноярск***КОНТАКТНЫЕ ЯВЛЕНИЯ И МАГНИТНЫЙ БЕСПОРЯДОК В ПРОБЛЕМЕ ФОРМИРОВАНИЯ И ДЕТЕКТИРОВАНИЯ ТОПОЛОГИЧЕСКИ ЗАЩИЩЕННЫХ КРАЕВЫХ СОСТОЯНИЙ**

Непрерывная миниатюризация устройств традиционной полупроводниковой электроники, основанной на полевых транзисторах, к настоящему времени близка к насыщению. В связи с этим актуальной является разработка и исследование полупроводниковых и гибридных устройств нового поколения, способных в будущем заменить традиционные полевые транзисторы. Перспективными кандидатами на эту роль в настоящее время считаются материалы, в которых реализуются топологически защищенные краевые состояния, в частности, майорановские моды (ММ). Последние часто рассматриваются как возможная элементная база для создания устройств квантовых вычислений [1]. Кандидатами для экспериментального обнаружения топологических состояний и майорановских мод являются полупроводниковые нанопроволоки с наведенной сверхпроводимостью во внешнем магнитном поле – сверхпроводящие нанопроволоки (СН) [2]. Их популярность связана с развитой технологией молекулярно-лучевой эпитаксии. Обычно исследуются проволоки InAs или InSb с сильным спин-орбитальным взаимодействием и большими значениями  $g$ -факторов ( $g_{\text{InAs}} \sim 10-25$  и  $g_{\text{InSb}} \sim 20-70$ ), а также стандартные БКШ сверхпроводники, типа Al, тонкие слои которых (5-10 нм) напыляются на поверхность нанопроволоки.

Прогресс в создании таких гибридных структур позволил поставить эксперименты по баллистическому транспорту [2]. Был обнаружен пик дифференциальной проводимости при нулевом напряжении, высота которого в широком интервале магнитных полей равнялась двум квантам проводимости  $2G_0$ . Это трактовалось на основе реализации ТНФ с майорановскими модами. Однако, такой резонанс может возникать из-за неоднородностей электростатического потенциала и андреевского отражения (АО) на них [3]. Неоднозначность интерпретации результатов таких экспериментов делает актуальной разработку альтернативных методов экспериментальной идентификации ТНФ в СН.

Целью настоящей работы являлось изучение фундаментальных свойств и возможностей экспериментальной идентификации топологически защищенных краевых состояний в полупроводниковых нанопроволоках, находящихся в контакте с сверхпроводящими материалами. С этой целью необходимо было решить следующие задачи;

1. Определение экспериментальных характеристик, позволяющих идентифицировать топологические области параметров в полупроводниковых нанопроволоках, устойчивых по отношению к наличию в системе электронных корреляций и структурного беспорядка;
2. Фундаментальное исследование особенностей и возможностей реализации краевых (как топологических, так и тривиальных) состояний в нанопроволоках;
3. Развитие теории спектральных и кинетических свойств высокотемпературных сверхпроводников, с целью дальнейшего рассмотрения контактных явлений в таких материалах с полупроводниковыми нанопроволоками, в которых возможна реализация майорановских мод.

В рамках данных направлений были получены следующие результаты:

1. Обнаружена серия калорических аномалий в короткой сверхпроводящей нанопроволоке с сильным спин-орбитальным взаимодействием Рашбы. Указано, что данное поведение может служить указателем для идентификации условия реализации майорановских мод в более длинных нанопроволоках [4,5];

2. Показано, что в случае коротких цепочек, внутри областей параметров с нетривиальным топологическим индексом возникают области, где краевые возбуждения не реализуются. И напротив, в областях с тривиальным топологическим индексом могут возникать краевые возбуждения [6];

3. В рамках спин-фермионной модели на реальной кристаллической решетке медь-кислородной плоскости методом диаграммной техники при учете сильной спин-фермионной связи и двухузельных спин-флуктуационных процессов рассеяния рассчитана энергетическая структура купратных сверхпроводников. Вычисления показали, что спин-поляронная зона имеет локальный минимум в точке  $(\pi/2, \pi/2)$  зоны Бриллюэна, что хорошо согласуется с экспериментальными данными по купратным сверхпроводникам [7,8].

### Список литературы

1. Kitaev A.Yu. Unpaired Majorana fermions in quantum wires // *Phys. Usp.* 2001. V. 44, P. 131 (2001).
2. Lutchyn R.M., Bakkers E. P. A. M., Kouwenhoven L. P., Krogstrup P., Marcus C.M., Oreg Y. Majorana zero modes in superconductor–semiconductor heterostructures // *Nat. Rev. Mat.* 2018. V. 3. P. 52-68.
3. Moore C., Zeng C., Stanescu T.D., Tewari S. Quantized zero-bias conductance plateau in semiconductor-superconductor heterostructures without topological Majorana zero modes // *Phys. Rev. B.* 2018. V. 98, P. 155314.
4. Вальков В.В., Мицкан В.А., © Шустин М.С. Фермионная четность основного состояния и калорические свойства сверхпроводящей нанопроволоки // *ЖЭТФ.* 2019. Т.156. С.1-14.
5. Вальков В.В., Мицкан В.А., Злотников А.О., © Шустин М.С., Аксенов С.В. Реализация топологически нетривиальных фаз, каскад квантовых переходов и идентификация майорановских мод в киральных сверхпроводниках и нанопроволоках // *Письма в ЖЭТФ.* 2019. Т.110. С. 126-139.
6. Федосеев А.Д. Влияние размеров на условия возникновения краевых состояний в одномерных система // *ЖЭТФ.* 2019. Т.155. С.138-146.
7. Val'kov V.V., Korovushkin M.M., Barabanov A.F. Influence of the Coulomb Repulsions on the Formation of the Superconducting Gap of the Spin-Polaron Quasiparticles in Cuprates // *J. Low Temp. Phys.* 2019. V.196 (1-2), pp. 242-252.
8. Val'kov V.V., Mitskan V.A., Korovushkin M.M., Dzebisashvili D.M., Barabanov A.F. Diagram Approach to the Problem of the Normal Phase Properties of the Spin-Polaron Ensemble in Cuprate Superconductors // *J. Low Temp. Phys.* 2019. V. 197 (1-2). pp. 34-43 (2019).

УДК 544.57

**Р. Н. Ярославцев<sup>1,2</sup>, Ю. В. Князев<sup>2</sup>, А. А. Красиков<sup>2</sup>, И. Г. Важенина<sup>2</sup>,  
М. Н. Волочаев<sup>2</sup>, А. А. Артемьева<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Сибирский федеральный университет, Россия, Красноярск*

<sup>2</sup>*Институт физики им. Киренского СО РАН, Россия, Красноярск*

## **СОНОХИМИЧЕСКАЯ ОБРАБОТКА МАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ КАК СПОСОБ МОДИФИКАЦИИ ИХ СВОЙСТВ**

Кавитационная ультразвуковая обработка водных суспензий магнитных наночастиц является весьма перспективным способом модификаций их свойств. Использование магнитных наночастиц – активно развивающееся направление, что обусловлено их применением в таких областях биомедицины как создание высокоспецифичных и высокочувствительных биосенсоров, сорбентов для детекции или выделения биомолекул из биологических жидкостей, а также при создании систем адресной доставки лекарственных препаратов, обладающих направленным действием. Ультразвуковое облучение, по сравнению с традиционными источниками энергии, обеспечивает необычные условия для прохождения химических реакций (короткую продолжительность экстремально высоких температур и давлений в жидкостях), которые не могут быть реализованы с помощью других методов. Ультразвук используется в различных областях, таких как медицина, микробиология, химическое и биологическое выщелачивание, синтез новых соединений и т.д. [1]. Сонохимический синтез является перспективным методом получения наноматериалов с уникальными свойствами, обусловленными экстремальными условиями, достигаемыми в процессе ультразвуковой кавитации [2,3].

В данной работе мы исследовали влияние ультразвуковой обработки в кавитационном режиме на магнитные наночастицы оксидов и оксигидроксидов железа. Использовались наночастицы ферригидрита, синтезированные микроорганизмами *Klebsiella oxytoca*, наночастицы ферригидрита, синтезированные химическим методом, и наночастицы гематита.

Изучение влияния ультразвуковой кавитации на биогенные наночастицы ферригидрита показало, что в результате обработки происходит образование металлической фазы  $\alpha$ -Fe. Восстановление ионов железа также происходило путем обработки ультразвуком наночастиц синтетического ферригидрита и гематита с добавлением в раствор альбумина. Таким образом, установлено, что этот процесс происходит только в присутствии органического компонента (белка или полисахарида).

### **Список литературы**

1. Vyas S., Ting Y.-P. A Review of the Application of Ultrasound in Bioleaching and Insights from Sonication in (Bio)Chemical Processes // Resources. 2017. Vol. 7, № 1. P. 3.
2. Bang J.H., Suslick K.S. Applications of Ultrasound to the Synthesis of Nanostructured Materials // Adv. Mater. 2010. Vol. 22, № 10. P. 1039–1059.
3. He C., Liu L., Fang Z., Li J., Guo J., Wei J. Formation and characterization of silver nanoparticles in aqueous solution via ultrasonic irradiation // Ultrason. Sonochem. 2014. Vol. 21, P. 542–548.

УДК 669.713.723

**А. С. Ясинский**

Доцент каф. Metallургии цветных металлов, Институт цветных металлов и материаловедения, Сибирский федеральный университет, Россия, Красноярск

## ПОВЕДЕНИЕ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ CU-AL ПРИ ЭЛЕКТРОЛИЗЕ КОНЦЕНТРИРОВАННЫХ СУСПЕНЗИЙ ГЛИНОЗЕМА НА ОСНОВЕ РАСПЛАВОВ ГАЛОГЕНИДОВ

В технологии Эру-Холла для восстановления алюминия из криолитоглиноземного расплава используются угольные аноды, что ведет к выделению парниковых газов, в частности, диоксида и монооксида углерода, а также перфторуглеродов. Более ста лет продолжается поиск возможности заменить угольные аноды безуглеродными и создать технологию получения алюминия с выделением кислорода в качестве продукта анодной реакции [1 – 2].

Отсутствие депольаризатора в виде углерода ведет к значительному увеличению напряжения разложения. Стандартное напряжение разложения оксида алюминия составляет 2.195 В при  $T=1273$  К. Снижение температуры электролита на 150 – 200 К существенно повышает коррозионную стойкость многих материалов [3, 4], упрощая задачу поиска безуглеродного анода, но ведет к увеличению напряжения разложения еще на 0.10 – 0.15 В.

Даже в условиях относительно низких температур (973-1123 К) выбор материалов для создания безуглеродного анода весьма ограничен, и ограничения эти связаны главным образом с их стоимостью и коррозионной стойкостью [4]. В качестве перспективных кандидатов выделяются сплавы на основе системы Fe-Ni-Cu, и материалы на основе продуктов их взаимодействия с кислородом [5]. При поляризации металлов (за исключением Pt и других благородных) в расплаве, содержащем ионы кислорода, их поверхностный слой окисляется, поэтому задача сводится главным образом к поиску условий, в которых формировался бы плотный оксидный слой, малорастворимый или имеющий малую скорость растворения в расплаве, и обладающий малым электрическим сопротивлением. В настоящей работе ставится задача исследовать анодный процесс на нескольких сплавах на основе Cu-Al в расплавах и суспензиях методами гальваностатической стационарной поляризации и циклической вольтамперометрии.

Полученные результаты при поляризации анодов состава 90Cu-10Al в расплавах системы KF-AlF<sub>3</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> приведены на рисунках 1 и 2 ( $i$  – плотность тока,  $E$  – потенциал, CR – криолитовое отношение (мол.%KF/мол.%AlF<sub>3</sub>),  $\eta$  – перенапряжение).

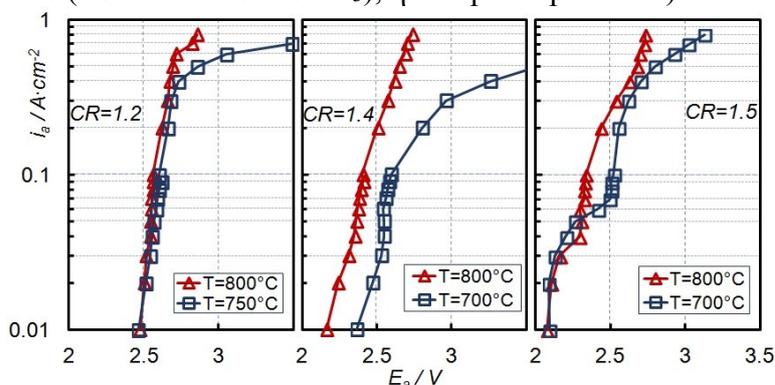


Рис. 1. Поляризационные кривые для анодного процесса в расплавах с CR=1.2-1.5 при 700 – 800 °С

На поляризационных кривых можно выделить области образования оксида и выделения кислорода. Во втором процессе обнаружена смешанная кинетика (Рис. 2).

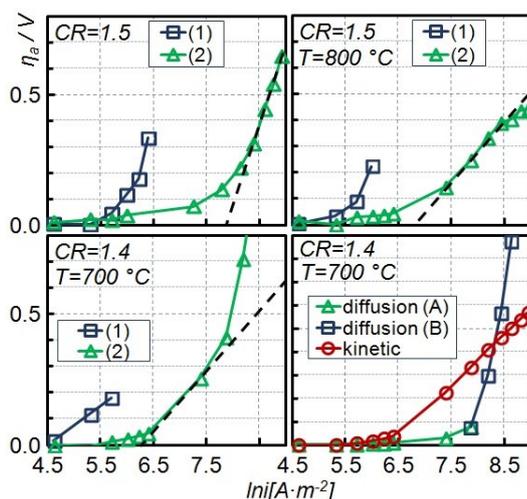


Рис. 2. Вольтамперная характеристика анодного процесса в расплавах с CR=1.2-1.5 при 700 - 800 °C: (1) - для образования оксидного слоя; (2) - для выделения кислорода; (A) и (B) – разные методы расчета

По вольтамперным характеристикам определены предельные диффузионные токи  $i_l$  выделения кислорода. По уравнению  $k_s = i_l / (zFC)$  (где  $z$  – число электронов, участвующих в разряде,  $F$  – постоянная Фарадея,  $C$  – концентрация электроактивных частиц) рассчитаны значения константы скорости массопереноса оксифторидных ионов к аноду. Результаты представлены в таблице.

Таблица. Константы скорости массопереноса ( $k_s$ ) оксифторидных ионов к аноду в расплавах и суспензиях

T/°C	CR	$\phi$	$i_l/A \cdot \text{cm}^{-2}$	C/ мол·см <sup>-3</sup>	$k_s \cdot 10^4 / \text{cm} \cdot \text{c}^{-1}$
750	1.3	0	0.90	0.00901	5.175
750	1.3	0.12	0.60	0.00901	3.450
750	1.3	0.15	0.15	0.00901	0.862
800	1.4	0.12	0.20	0.00738	1.404
800	1.4	0.15	0.02	0.00738	0.140

### Выводы:

- с увеличением объемной доли оксида алюминия ( $\phi$ ) в суспензии предельные плотности тока окисления металла и выделения кислорода снижаются;
- пассивация анода наблюдалась при 700 °C при всех значениях CR (1,2-1,5);
- анод имеет высокие предельные токи выделения кислорода при 800 °C;
- для дальнейшего развития процесса предлагаются  $\phi=0,09$ , CR=1.3–1.4 и T=800°C.

### Список литературы

1. Galasiu I., Galasiu R., Thonstad J., Inert Anodes for Aluminium Electrolysis. Aluminium-Verlag. Düsseldorf. 2007. 212 p.
2. Jucken S., Schaal E., Tougas B., Davis B., Guay D., Roué L. Impact of a post-casting homogenization treatment on the high-temperature oxidation resistance of a Cu-Ni-Fe alloy // Corrosion Science. 2019. (in press, <https://doi.org/10.1016/j.corsci.2018.11.037>).
3. Cao D., Shi Z., Shi D., Xu J., Hu X., Wang Z. Electrochemical oxidation of Fe-Ni alloys in cryolite-alumina molten salts at high temperature // Journal of Electrochemical Society. 2019. 166 (4). pp. E87-E96.
4. Hryn, J., Tkacheva, O., Spangenberg, J. Initial 1000A Aluminium Electrolysis Testing in Potassium Cryolite-Based Electrolyte // In: Sadler B.A. (eds) Light Metals. The Minerals, Metals & Materials Series. Springer, Cham. 2016. pp. 1289-1294.
5. Guan, P.P., Liu, A.M., Shi, Z.N., Hu, X.W., Wang, Z.W. Corrosion Behaviour of Fe-Ni-Al Alloy Inert Anode in Cryolite Melts // Metals. 2019. 9 (4). p 399.